

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI
FAKULTA MECHATRONIKY A MEZIOBOROVÝCH INŽENÝRSKÝCH STUDIÍ



HABILITAČNÍ PRÁCE

VÝVOJ SYSTÉMŮ PRO MODELOVÁNÍ
PŘÍRODNÍCH A TECHNICKÝCH PROCESŮ

Otto Severýn

LIBEREC,

DUBEN 2008

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

FAKULTA MECHATRONIKY A MEZIOBOROVÝCH INŽENÝRSKÝCH STUDIÍ

HABILITAČNÍ PRÁCE

OBOR: PŘÍRODOVĚDNÉ INŽENÝRSTVÍ

NÁZEV:

VÝVOJ SYSTÉMŮ PRO MODELOVÁNÍ
PŘÍRODNÍCH A TECHNICKÝCH PROCESŮ

Ing. Otto Severýn, Ph.D.

ROZSAH PRÁCE A PŘÍLOH

POČET STRAN TEXTU:	125
POČET STRAN PŘÍLOH:	31
POČET OBRÁZKŮ:	47

MÍSTOPŘÍSEŽNÉ PROHLÁŠENÍ:

Místopřísežně prohlašuji, že jsem habilitační práci vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury.

V LIBERCI DNE 18. DUBNA 2008

.....
Ing. Otto Severýn, Ph.D.

Obsah

Seznam obrázků	ix
Seznam používaných symbolů a zkratk	x
1 Úvod	1
1.1 Projekt Expertního systému PZP	3
1.2 Model podzemních procesů založený na multidimenzionálním přístupu	4
I Projekt Expertního systému PZP — vybraná té- mata	5
2 Idea Expertního systému PZP	6
2.1 Spotřeba zemního plynu v ČR	6
2.2 Skladování zemního plynu v ČR	8
2.3 Provozování a řízení PZP	9
2.3.1 Dosavadní způsob řízení provozu PZP	9
2.4 Návrh Expertního systému PZP	11
2.4.1 Numerická simulace ložisek uhlovodíků	11
2.4.2 Zapojení numerických simulátorů do procesu řízení	13
3 Implementace ES	18
3.1 Přepracované schéma ES	18
3.1.1 Lokální a centrální ES	19
3.1.2 Nepřímý přístup k provozním datům	19
3.1.3 Vyloučení RTEM	19
3.1.4 R2SL namísto Avocet	20

3.1.5	Program RegSim	20
3.1.6	Systém Portec	20
3.2	Automatizace běhu numerických modelů	21
3.2.1	Definice úloh pro automatizovaný běh	21
3.2.2	Implementace automatizovaného spouštění modelů	22
3.3	Aplikace GSD	23
4	Simulace nadzemních technologií	30
4.1	Pipesim	30
4.1.1	Modelování tekutiny	32
4.1.2	Režim analýzy potrubní větve	32
4.1.3	Režim analýzy sítě	35
4.2	Metodika tvorby modelů technologií PZP	35
4.3	Metodika ladění modelů technologií	40
4.3.1	Výběr vhodné korelace pro výpočet	40
4.3.2	Ladění tlakových ztrát na přípojkách sond pro PZP s vějířovitou strukturou	40
4.3.3	Ladění tlakových ztrát na přípojkách sond pro PZP se stromovou strukturou	46
4.3.4	Ladění tlakových ztrát na technologických celcích PZP	50
4.4	Metodika tvorby modelů režimu vtlačení	52
4.5	Sdružená simulace ložiska a technologie	53
4.5.1	Program R2SL	53
4.5.2	Sdružování simulací pro ES	56
4.5.3	Problémy sdružených simulací	57
4.6	Program RegSim	58
4.6.1	Tlakové ztráty v nadzemních technologiích	59
4.6.2	PZP s vějířovitou strukturou přípojek	62
4.6.3	PZP se stromovou strukturou přípojek	64
4.6.4	Implementace a ladění programu RegSim	65
4.7	Závěrečná doporučení pro simulaci nadzemních technologií	66
5	Projekt ES PZP — závěr	70
5.1	Celkové shrnutí výsledků projektu	70
5.2	Možnosti dalšího rozvoje ES	71
5.3	Osobní přínos autora práce	72

II	Vývoj multidimenzionálního modelu podzemních procesů	73
6	Motivace pro vývoj systému flow123d	74
6.1	Přehled modelů	75
6.1.1	Systém GWS	76
6.1.2	Systém FFLOW	78
6.2	Základní rysy systému flow123d	81
6.2.1	Prvky různých dimenzí	82
6.2.2	Libovolná poloha prvků různé dimenze	82
6.2.3	Použití existujících pre- a post- procesorů	84
6.2.4	Použití specializovaných řešičů	84
6.2.5	Rozšiřitelnost systému	85
6.2.6	Oddělení platformy systému od modelů procesů	85
7	Multidimenzionální MKP/MKO	86
8	Implementace systému flow123d	95
8.1	Platforma systému a modely procesů	95
8.2	Režimy práce programu flow123d	98
8.2.1	Generování souboru sousednosti	98
8.2.2	Konverze vstupních souborů	99
8.2.3	Režim výpočtu	99
8.3	Vnější datové struktury	100
8.3.1	Řídicí soubor	100
8.3.2	Soubor sítě	101
8.3.3	Soubor materiálových vlastností	102
8.3.4	Soubor okrajových podmínek proudění	103
8.3.5	Soubor zdrojů kapaliny	103
8.3.6	Soubor sousednosti elementů sítě	104
8.3.7	Soubor okrajových podmínek transportu	104
8.3.8	Soubor počátečních podmínek	104
8.3.9	Soubor počátečního rozložení koncentrací	105
8.3.10	Výstupní soubory modelů	105
8.4	Vnitřní datové struktury	105
8.4.1	Problem	106
8.4.2	Mesh	107
8.4.3	Node	107

8.4.4	Element	108
8.4.5	Side	108
8.4.6	Edge	108
8.4.7	Material	109
8.4.8	Boundary	109
8.4.9	Initial	109
8.4.10	Transport_bcd	109
8.4.11	Concentration	109
8.4.12	Source	109
8.4.13	Neighbour	110
8.4.14	Matrix	110
8.4.15	Error	110
8.5	Vazby mezi vnitřními datovými strukturami	110
8.5.1	Sousednost elementů	111
8.5.2	Vytvoření a naplnění vnitřních datových struktur	114
9	Vývoj systému flow123d — závěr	116
9.1	Použití systému pro řešení praktických úloh	116
9.1.1	Model VTZ na vrtech MEL-3 a MEL-4	117
9.1.2	Regionální model lokality Cajamarca, Peru	117
9.2	Shrnutí dosažených výsledků	118
9.3	Problémy a nedostatky systému flow123d	119
9.4	Další vývoj a rozvoj systému flow123d	121
9.5	Osobní přínos autora práce k vývoji systému flow123d	122
	Literatura	122
A	Rešerše softwaru	126
A.1	Ložiskové simulátory	127
A.2	Systémy pro simulaci nadzemní technologie PZP	128
A.3	Rozhodovací jádro ES	129
A.4	Databázové systémy	130
A.5	Vyhodnocení rešeršních prací	131
A.6	Stav z počátku roku 2008	132
A.6.1	Ložiskové simulátory	132
A.6.2	Simulátory nadzemních technologií	133
A.6.3	Systémy pro jádro ES	133
A.6.4	Databázové systémy	133

B	Projekt Expertního systému	134
B.1	Funkce ES a jejich uživatelé	134
B.2	Struktura ES	136
B.2.1	Funkce lokálního ES	136
B.2.2	Struktura lokálního ES	138
B.2.3	Funkce centrálního ES a jeho struktura	141
B.3	Celkový plán postupu prací	142
B.3.1	Plán postupu prací pro pilotní fázi	142
C	Proudění na rozpukáných oblastech	144

Seznam obrázků

2.1	Průběh spotřeby zemního plynu v ČR v roce 2004	7
2.2	Závislost spotřeby a denní teploty v pracovních dnech v zimní sezóně 2004/2005.	8
2.3	Procesy ovlivňující provoz PZP.	10
2.4	Dosavadní způsob řízení PZP.	14
2.5	Typická odtěžovací křivka PZP.	15
2.6	Ukázka rozložení syčení plynem v modelu ložiskové části PZP v simulátoru Eclipse.	15
2.7	Ideové schéma Expertního systému PZP.	16
2.8	Expertní systém jako řídicí systém PZP.	16
2.9	Návrh vnitřní struktury ES PZP.	17
3.1	Upravená struktura Expertního systému	26
3.2	Schéma činnosti aplikace GSD	27
3.3	Program GSD — aktuální odtěžovací křivka pro zadaný výkon PZP1	28
3.4	Program GSD — specifikace technologických limitů	29
4.1	Uživatelské rozhraní programu Pipesim.	33
4.2	Režim analýzy potrubní větve.	34
4.3	Režim analýzy potrubní sítě.	35
4.4	Vějířovitá síť plynovodů PZP.	41
4.5	Data pro ladění parametrů přípojky sondy.	43
4.6	Závislost výstupního tlaku potrubí na drsnosti.	44
4.7	Výsledky ladění parametrů přípojky sondy.	45
4.8	Stromová síť plynovodů PZP.	47
4.9	Model technologie s paralelními větvemi.	51
4.10	Model větve se sériově zapojenými technologickými celky . . .	51
4.11	Model vtlačení	53

4.12	Model vtláčení po úpravě pro Pipesim v. 2007.1.	54
4.13	Teoretická a skutečná (instalovaná) rovnoprocentní průtoková charakteristika regulačního ventilu.	61
4.14	Algoritmus stanovení otevření regulačních ventilů na plynovodní síti s vějířovitou strukturou.	68
4.15	Algoritmus stanovení otevření regulačních ventilů na plynovodní síti se stromovou strukturou.	69
6.1	Ukázka vizualizace výsledků modelu v systému GWS.	77
6.2	Puklinová síť pro simulaci VTZ na lokalitě Potůčky	80
6.3	Proudové pole na puklinách při VTZ na lokalitě Potůčky	81
6.4	Konformní propojení prvků	82
6.5	Jednoduchá puklinová síť.	83
6.6	Nekonformní propojení prvků	83
8.1	Schéma funkce programu flow123d při generování sousednosti . .	98
8.2	Schéma funkce programu flow123d při konverzi vstupů	99
8.3	Schéma funkce programu flow123d při výpočtu ustáleného proudění	100
8.4	Schéma funkce programu flow123d při výpočtu neustáleného proudění	101
8.5	Schéma funkce programu flow123d při výpočtu transportu . . .	101
8.6	Uložení datových struktur programu flow123d	111
8.7	Vzájemné vazby mezi objekty sítě	112
9.1	Síť pro modelování VTZ na lokalitě Melechov.	118
9.2	Výsledky modelování VTZ na lokalitě Melechov.	119
9.3	Síť pro regionální model lokality Cajamarca.	120
9.4	Výsledky simulace proudění na lokalitě Cajamarca.	120
B.1	Struktura Expertního systému	137
B.2	Struktura lokálního ES	138

Seznam používaných symbolů a zkratek

Fyzikální veličiny a jednotky

c	koeficient tření v potrubí [1]
c_v	průtoková charakteristika ventilu [1]
D	průměr potrubí [L]
G	relativní hustota plynu [1]
L	délka potrubí [L]
o	procento otevření ventilu [1]
p	tlak plynu [$ML^{-1}T^{-2}$]
Q	objemový průtok [L^3T^{-1}]
sm^3	standardní kubický metr dle definice SPE (15° C, 100 kPa)
T	teplota [Θ]
Z	kompresibilita plynu [1]
Δp	tlaková ztráta [$ML^{-1}T^{-2}$]
ϱ	hustota [ML^{-3}]

Zkratky

DPD	Databáze Provozních Dat
ES	Expertní Systém
GSD	Gas Supply Demand
MKO	Metoda Konečných Objemů

MKP	M etoda K onečných P prvků
MPI	M essage P assing I nterface
ODBC	O pen D ata B ase C onnectivity
PDR	P arciální D iferenciální R ovnice
PZP	P odzemní Z ásobník P lynu
R2SL	R eservoir T o(2) S urface L ink
SCADA	S upervisory C ontrol A nd D ata A cquisition
SIS	S chlumberger I nformation S olutions
SPE	S ociety of P etroleum E ngineers
SQL	S tructured Q uery L anguage
TEG	T ri E thylén G lykol

Kapitola 1

Úvod

Numerické modelování podzemních hydraulických, transportních, chemických a mechanických procesů hraje významnou roli v mnoha hospodářsky a společensky důležitých odvětvích lidské činnosti. Z nejdůležitějších jmenujme:

- Hornictví a těžbu uhlovodíků,
- správu a ochranu vodních zdrojů,
- likvidaci starých ekologických zátěží,
- sanaci půdního a horninového prostředí po úniku nebezpečných látek,
- skladování zemního plynu,
- stavbu tunelů a podzemních hal,
- vodní stavitelství,
- využívání geotermální energie,
- projektování trvalých úložišť vysoce nebezpečných odpadů.

Ve všech těchto oborech potřebujeme analyzovat a predikovat chování tekutin v reakci na umělé či přirozené vnější zásahy, předpovídat šíření látek horninovým prostředím, stanovovat míru vzájemné interakce složek plynné, kapalně a pevné fáze, určovat mechanické napětí a deformace prostředí atp.

Odpovědi na otázky při uvedených činnostech vznikající můžeme s větší či menší mírou úspěšnosti získat různými metodami:

- Přímým či nepřímým pozorováním a měřením v terénu,
- laboratorními měřeními a experimenty,
- fyzikálním modelováním,
- výpočty pomocí analytických a empirických vztahů a
- *numerickým modelováním.*

Každá z těchto metod má své přednosti, nedostatky a omezení a žádná z nich není schopna sama o sobě poskytnout úplný a věrohodný obraz v podzemí skryté a složité skutečnosti. Přesto bylo numerické modelování ve výčtu zdůrazněno, neboť jeho role v poznávání geologické reality je nezastupitelná a její význam stále roste.

Numerické modelování dokáže podat prostorový obraz situace v lokalitě a jejího časového vývoje a to i v dlouhodobém měřítku, umožňuje simulovat různé varianty vývoje a tyto varianty posuzovat a navzájem porovnávat, optimalizovat umělé zásahy, analyzovat vliv nejistot atp. Také množství zjednodušujících a omezujících předpokladů je při použití numerického modelování nižší než při použití jiných metod. S neustále rostoucím výkonem počítačů můžeme řešit stále rozsáhlejší úlohy, používat jemnější diskretizace, pokročilejší numerické metody, simulovat komplexnější procesy. Pokrok vizualizačních technik umožňuje snadnější přípravu modelů lokalit a názornější zobrazení výsledků.

Ovšem základním předpokladem pro numerické modelování je existence kvalitních vstupních dat a plné využití informace v nich obsažené. Jakkoliv pokročilý model nemůže poskytnout věrohodné výsledky, jestliže je simulace založena na nevěrohodných datech. V tomto aspektu je nezastupitelná role dalších výše uvedených technik poznávání geologického prostředí, jejichž výsledky a výstupy poskytují požadovaná vstupní data pro modely. Obecně můžeme říci, že data pro numerické modely podzemních procesů jsou buď velmi neúplná, nebo naopak velmi rozsáhlá.

Typickým příkladem neúplných dat je modelování puklinového prostředí, kde můžeme vycházet pouze ze statistických údajů o puklinách, jejich četnostech, orientacích a dalších vlastnostech a na základě těchto dat sestavujeme model, který představuje reprezentaci reality pouze ve statistickém smyslu. Opačná situace nastává při simulaci ropných či plynových ložisek, kde je k dispozici velké množství dat z jednotlivých produkčních sond, ovšem na

tato data je nutno nasadit techniky data miningu abychom z nich dostali vhodné vstupy pro modely.

Vztahy mezi numerickými modely podzemní hydrauliky a jejich provázáním s dalšími systémy a modely, jejich zpřístupnění uživatelům, zajištěním vstupních dat, datovými strukturami a datovými proudy se zabývá předkládaná habilitační práce, která ukazuje tyto vztahy na dvou konkrétních projektech, na jejichž řešení se autor práce podílel.

1.1 Projekt Expertního systému PZP

V prvním případě jde o průmyslové nasazení numerických modelů podzemní hydrauliky, konkrétně pro účely podzemního skladování zemního plynu. Popisován je návrh, vývoj a implementace tzv. *Expertní systém podzemních zásobníků plynu* (ES PZP), který začleňuje pokročilé numerické modely vícefázového proudění porézním prostředím do procesu řízení plynárenské sítě a automatizuje jejich běh. Tento projekt byl v letech 2003–2007 realizován jako společné dílo Transgas a.s. a jeho nástupnických organizací, Schlumberger Information Solutions (SIS), ESK a TU Liberec.

Tato práce svým rozsahem nemůže a ani nechce podat celkový obraz o řešení uvedeného projektu. Po úvodní kapitole 2, ve které jsou představeny základní myšlenky a cíle projektu následuje popis těch prací na řešení projektu, na kterých má autor osobní podíl.

Upozornění

Na tomto místě je nutno zmínit několik skutečností, které nesouvisí s odbornou stránkou projektu ES, avšak čtenář práce by si jich měl být vědom.

Pro řešení projektu byla smluvně stanovena povinnost TU Liberec respektovat obchodní tajemství RWE Transgas a.s. a RWE Transgas Net s.r.o., což se do textu předkládané habilitační práce promítlo v následujících bodech:

- Nejsou uváděna jména konkrétních PZP a sond. Namísto nich jsou používána označení PZP1 až PZP6 pro zásobníky a označení typu PZPx_Sy pro sondy.
- Veškeré číselné hodnoty, které nebyly převzaty z veřejných zdrojů jsou upraveny náhodnými koeficienty. Většinou se jedná o provozní data PZP.

- Z těchto důvodů byla provedena retuš některých obrázků.
- Autorovy zprávy týkající se řešení projektu jsou neveřejné a jsou majetkem RWE Transgas net s.r.o. Přístup k těmto zprávám je možný pouze po dohodě s jejich majitelem.

1.2 Model podzemních procesů založený na multidimenzionálním přístupu

Druhá část práce se zabývá návrhem a vývojem systému `flow123d`, zejména pak autorovým přínosem k tomuto vývoji.

V současnosti existuje celá řada produktů pro simulaci podzemních hydraulických, transportních, mechanických a chemických procesů v horninovém prostředí. Některé z nich jsou přístupné a použitelné volně, ve většině případů se však jedná o komerční produkty. V průběhu času si mezi těmito produkty některé vydobily postavení průmyslového standardu a etalonu, se kterým jsou ostatní modely srovnávány. Takovýmto produktem je např. program Modflow.

I přes tuto skutečnost však stále existuje poměrně značný prostor pro vývoj nových modelů a to zejména v akademickém prostředí. Důvodem je jednak rozvoj numerických metod, které jsou zpravidla nejdříve implementovány v nekomerčních akademických produktech a teprve později pronikají do komerčních a průmyslových produktů, jednak potřeba řešení speciálních úloh, které standardní produkty nejsou schopny uspokojivě vyřešit.

Systém `flow123d`, vyvíjený v období 2003–2008 na KMO FM TU Liberec, splňuje obě tato kritéria: implementuje moderní numerické metody a byl vyvinut primárně pro řešení úloh spojených s problematikou sanace ekologických zátěží a projektováním výstavby trvalých úložišť nebezpečných a radioaktivních odpadů.

Autor práce se na vývoji systému podílel především návrhem jeho softwarové architektury a implementací základních modelů proudění a transportu. Na tyto aspekty vývoje systému `flow123d` se zaměřuje druhá část této habilitační práce.

Část I

Projekt Externího systému PZP — vybraná témata

Kapitola 2

Idea Expertního systému PZP

Cílem této kapitoly je objasnit myšlenky, ze kterých se zrodil projekt Expertního systému PZP a poté tento projekt představit.

2.1 Spotřeba zemního plynu v ČR

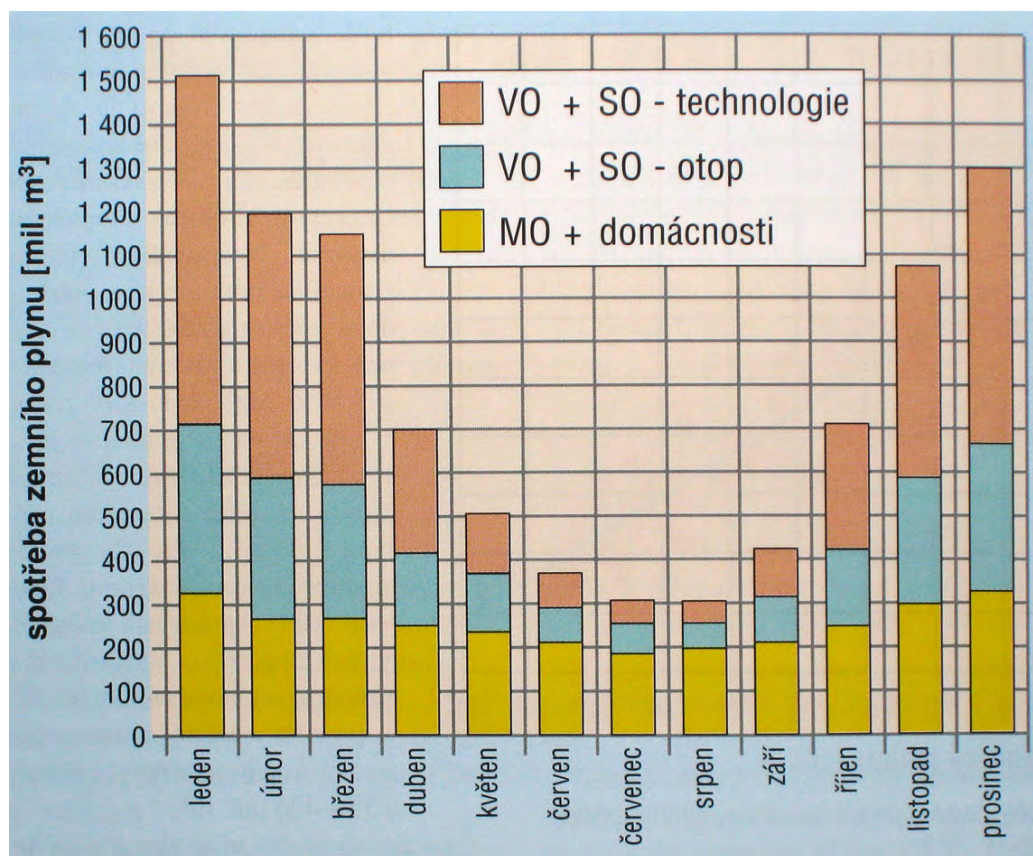
Zemní plyn je palivem, jehož spotřeba vykazuje značné výkyvy. Na odběrové křivce je možno vysledovat periodicitu denní, týdenní a sezónní. Tyto výkyvy jsou způsobeny zapínáním a vypínáním technologií, různým objemem průmyslové výroby v různých obdobích roku a klimatickými podmínkami. V dalším textu se, vzhledem na tematiku práce, nebudeme zabývat problematikou krytí krátkodobých výkyvů, které musí být řešeny především na úrovni přepravní soustavy použitím potrubí jako pružného zdroje.

Příklad ročního průběhu spotřeby zemního plynu v ČR je ukázán na obrázku 2.1 (pramen [29]).

Z grafu je patrné, že i měsíční průměry vykazují pětinasobný rozdíl mezi minimální spotřebou v letních měsících a maximální spotřebou v lednu. Pokud jde o minimální a maximální denní spotřebu, jejich rozdíl může dosáhnout až desetinásobku. Hlavní faktor pro hodnotu denní spotřeby v zimních měsících je průměrná denní teplota, jak je ukázáno na obrázku 2.2 (pramen [29]).

Možnost vyrovnávání těchto výkyvů je v případě ČR jediná, podzemní uskladnění plynu. Jiné možnosti nepřicházejí v úvahu, neboť:

- Domácí zdroje zemního plynu jsou zanedbatelné vůči potřebám odběratelů.



Obrázek 2.1: Průběh spotřeby zemního plynu v ČR v roce 2004 (VO = velkoodběratelé, SO = střední odběratelé, MO = maloodběratelé)

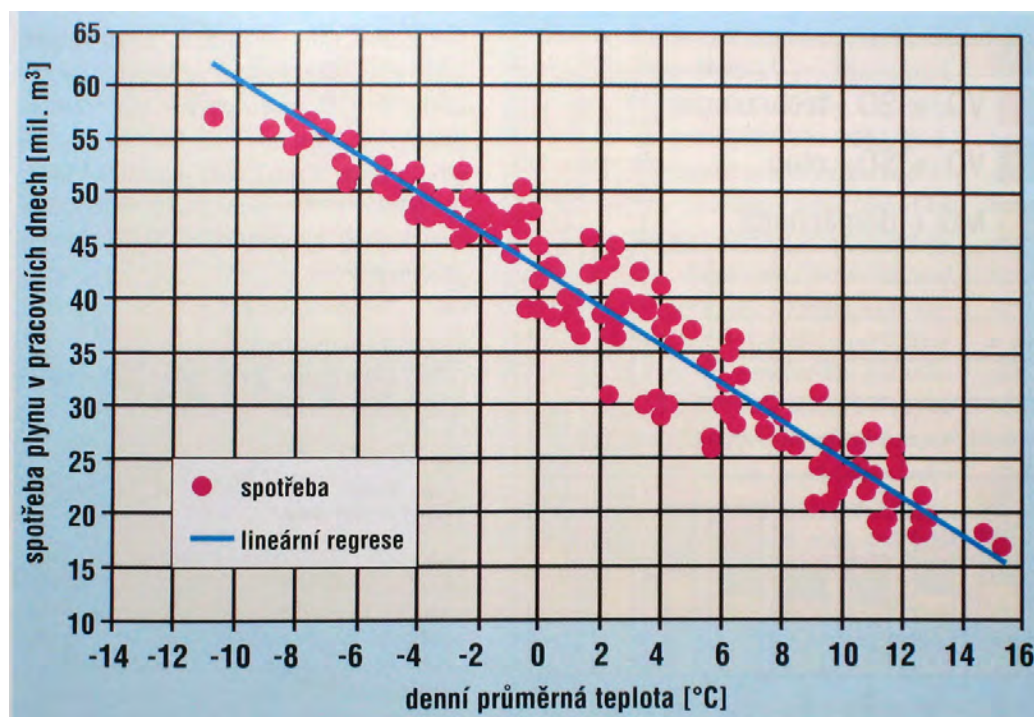
- Změna dodávek tranzitními plynovody není možná z důvodů:

Obchodních: Dodávky jsou smluvně dány jako konstantní, porušení je penalizováno.

Kapacitních: Zvýšená spotřeba díky chladnějšímu počasí se zpravidla projeví současně ve více zemích a tranzitní plynovody na takovéto dodávky nejsou dimenzovány.

Technických: Doprava plynu plynovody z ruských nalezišť do Evropy trvá zhruba týden, předpovědi počasí na takovýto čas jsou stále velmi nespolehlivé.

Z výše uvedených údajů je patrné, že podzemní skladování zemního plynu je



Obrázek 2.2: Závislost spotřeby a denní teploty v pracovních dnech v zimní sezóně 2004/2005.

důležitým prvkem v energetice ČR a případný výpadek skladovací soustavy či jenom její části by měl značné hospodářské i sociální následky.

2.2 Skladování zemního plynu v ČR

Není cílem ani účelem této práce podat byť i jen stručný úvod do problematiky podzemního skladování plynu, která je velmi široká a prolínají se v ní poznatky mnoha oborů (geologie, geofyziky, fyzikální chemie, technologie vrtní, technologie plynu, aj.). Případné zájemce o studium této problematiky můžeme odkázat na existující literaturu, např. [2], [4], [16].

V současnosti je v České republice v provozu osm podzemních zásobníků plynu (PZP) o celkové instalované kapacitě 2.891 miliardy sm^3 (údaje převzaty z [17]). ČR se tím co do skladovací kapacity řadí na 13. místo ve světě, mezi Velkou Británií a Rakousko.

Z těchto osmi zásobníků je šest vlastněno a provozováno společností RWE Transgas, zbylé dva potom MND Hodonín.

Pokud jde o rozdělení zásobníků dle typu, z těchto osmi je jeden kavernový (skalní kaverna), jeden akviferový a zbylých šest jsou vytěžená plynová či ropoplynová ložiska situovaná v oblasti Vněkarpatské předhlubně.

Kapacita kavernového zásobníku tvoří méně než tři procenta celkové skladovací kapacity všech českých PZP a jeho určení je pro rychlé krytí tzv. superspičkových odběrů v Praze a jejím okolí, z hlediska sezónního skladování mají význam pouze zásobníky situované v porézním horninovém prostředí. Dále se tedy budeme zabývat pouze tímto druhem zásobníků a pouze těmi, které jsou v majetku RWE Transgas, neboť na nich byl řešen v práci popisovaný projekt.

2.3 Provozování a řízení PZP

Jestliže porovnáme podzemní zásobník plynu s jiným srovnatelně komplikovaným energetickým provozem, např. středně velkou teplárnou, z hlediska vnějších faktorů, které ovlivňují jejich provoz, dojdeme k následujícímu zjištění. Kromě obvyklých procesů společenských, technických a ekonomických, v případě PZP vstupují do hry a významnou roli v ní hrají procesy přírodní, jak je ukázáno na obrázku 2.3.

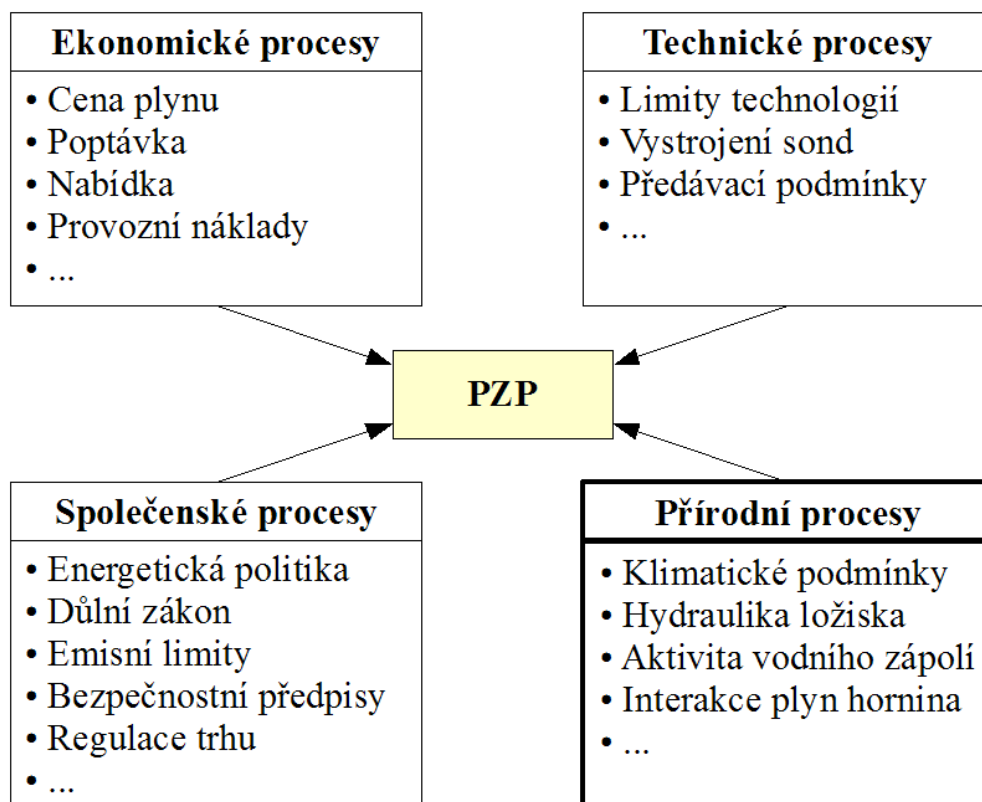
Kromě vlivů počasí jsou ostatní přírodní procesy svázány s horninovým prostředím a podzemní hydraulikou vícefázového proudění. Z tohoto důvodu jsou PZP po legislativní stránce chápána jako důlní díla a je stanovena funkce ložiskového geologa PZP, který je zodpovědný za způsob provozování ložiska.

2.3.1 Dosavadní způsob řízení provozu PZP

Existující způsob řízení provozu PZP je ukázán na obrázku 2.4.

Z obrázku plyne, že zatímco nižší úrovně procesu řízení jsou plně automatizovány, nejvyšší dvě jsou představují lidská rozhodnutí. Konkrétně se jedná o:

- Rozhodnutí dispečera jaký výkon předepíše jednotlivým PZP pro následující den.
- Rozhodnutí geologa příslušného PZP jak požadovaný výkon rozdělí mezi jednotlivé ložiskové objekty a sondy.



Obrázek 2.3: Procesy ovlivňující provoz PZP.

Lze očekávat, že tato dvě rozhodnutí zůstanou i nadále v kompetenci příslušných lidí, nebylo cílem dále představeného projektu na tomto něco měnit. Ovšem nástroje, které jsou pro tato rozhodnutí používány mohou být zásadním způsobem modernizovány, což v konečném důsledku přispěje k lepší kvalitě rozhodování a následně ke zlepšení chodu skladovací soustavy zemního plynu. Dosavadní rozhodovací proces probíhá takto:

Rozhodování dispečera

Nástrojem dispečera pro rozhodování o rozdělení výkonu na jednotlivé zásobníky je tzv. *odtěžovací křivka*. Jde o závislost mezi množstvím plynu ze zásobníku již odtěženým a maximálním možným výkonem zásobníku. Ukázka typického průběhu odtěžovací křivky je na obrázku 2.5.

Problémem současného stavu není použití odtěžovací křivky jako nástroje dispečerova rozhodnutí, ale otázka vzniku a aktualizace této křivky. Doposud byl postup takový, že tuto křivku stanoví ložiskový geolog každého PZP po ukončení etapy vtlačení na základě svých zkušeností a jednoduchých analytických modelů. Aktualizace odtěžovací křivky probíhá zpravidla jednou během těžební sezóny, zhruba v její polovině.

Otázkou je samozřejmě věrohodnost takto vzniklé křivky, ovšem důležitějším problémem je skutečnost, že odtěžovací křivka platí pouze pro pomalé odtěžování ložiska. Pokud je PZP provozován po dobu několika dnů na výkon blízký maximu, dojde k poklesu maximálního výkonu většímu, než by odpovídalo odtěžovací křivce. Dalším problémem je např. nutnost odstavení jedné či několika výkonných sond, což odtěžovací křivku může výrazně změnit.

Rozhodování ložiskového geologa

Ložiskový geolog se při svém rozhodování o rozdělení dispečerem požadovaného výkonu na jednotlivé sondy opírá především o vlastní zkušenost, doplněnou znalostí aktuálního stavu a za použití jednoduchých analytických modelů.

Nelze zpochybňovat zkušenosti a znalosti ložiskových geologů, ovšem zkušenosti z těžby ropy a zemního plynu ukazují, že v natolik složitém přírodním systému, jakým ložiska uhlovodíků jsou, je pro člověka těžké postihnout veškeré vlivy a navrhnout optimální scénář těžby.

2.4 Návrh Expertního systému PZP

Autoři projektu, v čele s RNDr. Vladimírem Onderkou, CSc., dospěli k názoru, že výše popsáný stav, kdy klíčová rozhodnutí o provozu tak důležitých objektů, jakými PZP bezesporu jsou, se zakládají zejména na zkušenosti a empirických znalostech je možno zlepšit zapojením numerických simulátorů ložisek do procesu provozního řízení.

2.4.1 Numerická simulace ložisek uhlovodíků

Možnost zapojení výpočetní techniky do procesu těžby uhlovodíků a jeho řízení je v centru zájmu ložiskových inženýrů již od šedesátých let minulého

století. Stále rostoucí výkon a dostupnost počítačů spolu s pokrokem numerických metod a technik vizualizace umožňuje řešit stále rozsáhlejší úlohy, na kterých je možno sledované děje simulovat s použitím dokonalejších popisů jednotlivých procesů.

Ve vývoji numerických simulací ložisek lze vysledovat tři hlavní etapy, kterými jsou:

1. Simulace ložiska jako jednoho objektu, založená na materiálové bilanci.
2. Simulace jednotlivých produkčních sond popsanych pomocí jednoduchých modelů např. funkce vlivu, analytických modelů, typových křivek či jednorozměrných simulátorů.
3. Plná 3D simulace ložiskové struktury.

Plná 3D simulace je z principu nejdokonalejším popisem reality. V současnosti je možné provést simulaci dvoufázového proudění systému voda-plyn na objektu velikosti českých PZP na období v řádu týdnů až měsíců na výkonném PC v časech minut až desítek minut. Při takovýchto výkonech je nasnadě snaha zapojit numerickou simulaci ložisek i do procesu řízení provozu PZP, nejen do etapy jejich projekce.

Primárním výsledkem numerické simulace je rozložení tlakového pole, pole syčení vodou a plynem a rychlostí proudění v simulované oblasti. Tato pole jsou vypočtena na základě aproximace parciálních diferenciálních rovnic příslušných fyzikálních dějů některou numerickou metodou (konečných diferencí, konečných prvků atp.).

Moderní simulátory dokáží kromě vlastní předpovědi i provádět optimalizace a hledat těžební scénáře. Obvyklým kritériem pro optimalitu těžebního scénáře je minimalizace tlakových gradientů v ložisku a tedy maximální využití ložiskové energie. Tento požadavek je ještě silnější u PZP, kdy energie byla do ložiska z vnějšku, ve formě kompresní práce.

V a.s. Transgas byly postupně vytvářeny modely jednotlivých PZP v systému Eclipse. Původním účelem těchto modelů byly projekční práce, ovšem jejich použití pro řízení je nanejvýš žádoucí.

Ukázka modelu PZP v systému Eclipse je na obrázku [2.6](#).

2.4.2 Zapojení numerických simulátorů do procesu řízení

Jestliže je v možnostech současné výpočetní techniky poskytnout optimalizovaný těžební scénář pro PZP v relativně dostupném čase, je nanejvýš žádoucí zapojit takovýto systém do procesu řízení.

Idea takovéhoho systému vznikala postupně v a.s. Transgas na útvaru technických činností a rozvoje PZP. Systém byl nazván „*Expertní systém podzemních zásobníků plynu*“ (dále ES PZP či jenom ES). Je diskutabilní, nakolik dále popsáný systém vyhovuje standardně přijímané definici expertního systému, tak jak je uvedena např. v [18]. Nicméně tento název se postupem času vžil jak mezi řešiteli, tak mezi vedením a proto ho v této práci budeme používat i přes výše uvedenou terminologickou připomínku.

Základní myšlenka celého systému je následující: Provést propojení řídicího SCADA systému s numerickými modely ložiskových objektů a tím zajistit jejich automatickou aktualizaci. Takto aktualizované numerické modely budou schopny provádět návrhy rozložení požadovaného výkonu na jednotlivé sondy a poskytovat aktuální odtěžovací křivky jednotlivých PZP. Toto je schématicky znázorněno na obrázku 2.7.

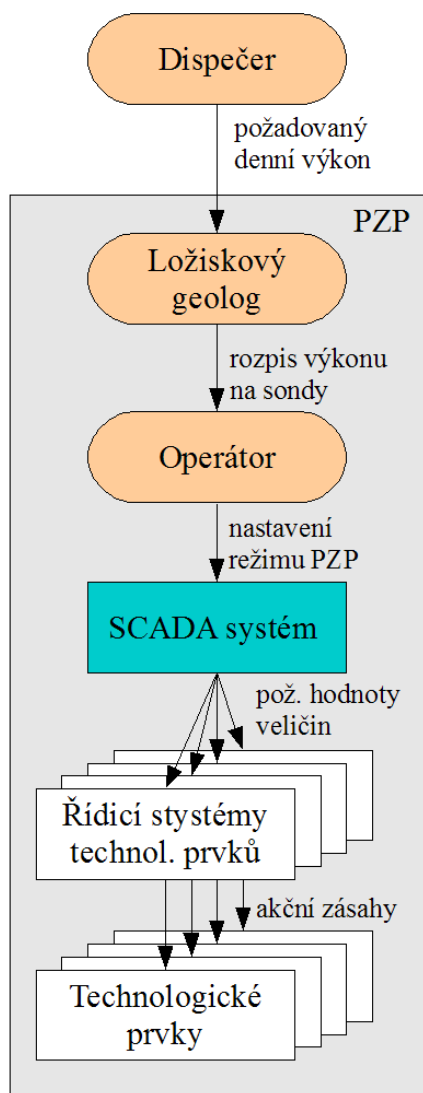
Navržený systém můžeme také chápat jako jistý vyšší stupeň řídicího systému, kdy řízeným objektem je celý zásobník. Tato idea je znázorněna na obrázku 2.8.

Pokud jde o vnitřní strukturu navrhovaného systému, první úvahy vedly k identifikaci čtyř hlavních součástí, kterými jsou:

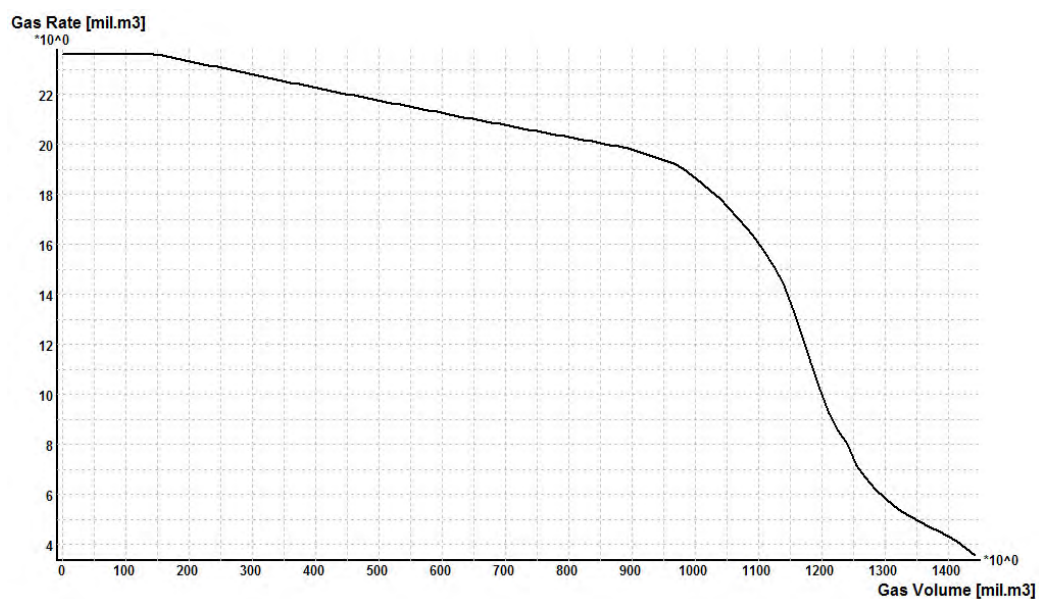
1. Řídicí a rozhodovací jádro systému.
2. Databáze provozních a geologických dat.
3. Simulátor ložiska.
4. Simulátor nadzemních technologií PZP.

Vzájemná vazba těchto komponent je znázorněna na obrázku 2.9.

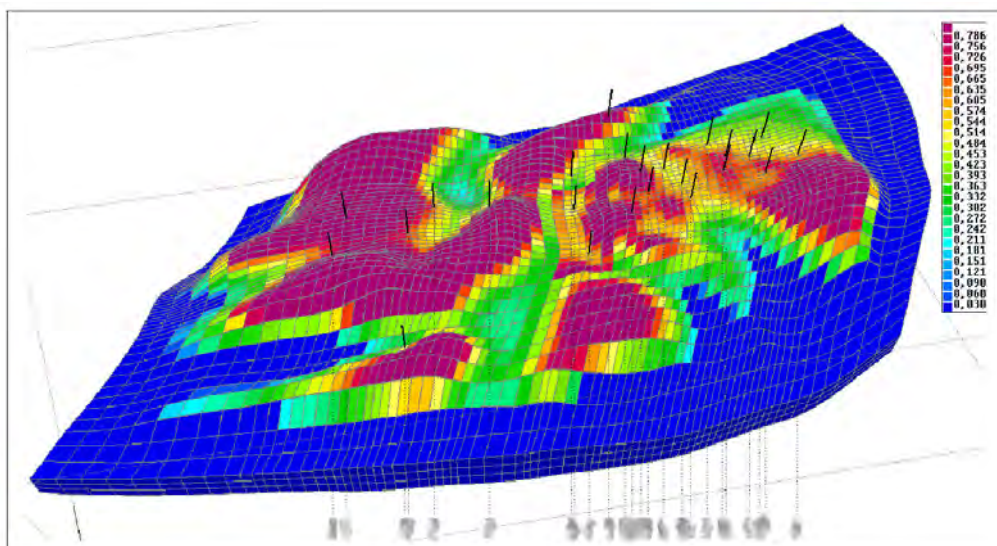
Tímto byly v hlavních rysech stanoveny hlavní funkce, využití a schéma ES PZP. Následující kapitoly práce popisují postup návrhu a implementace tohoto systému v praxi.



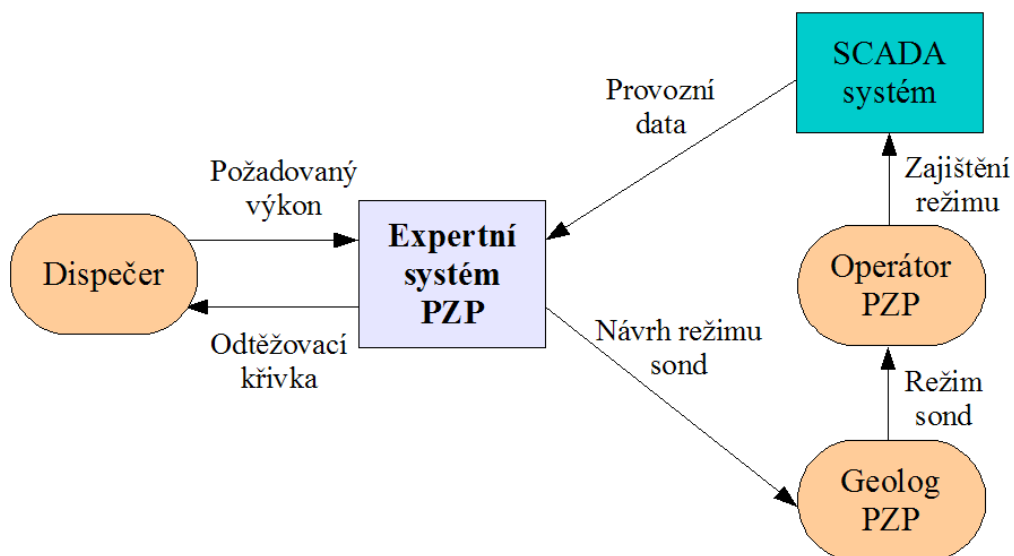
Obrázek 2.4: Dosavadní způsob řízení PZP.



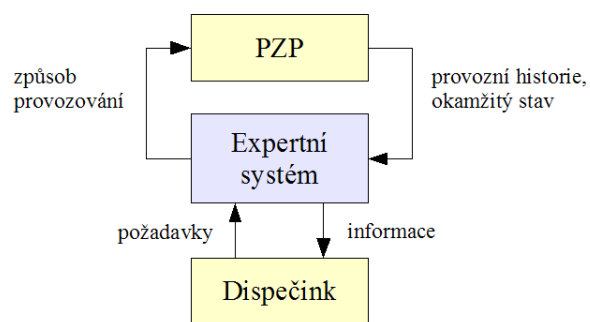
Obrázek 2.5: Typická odtěžovací křivka PZP.



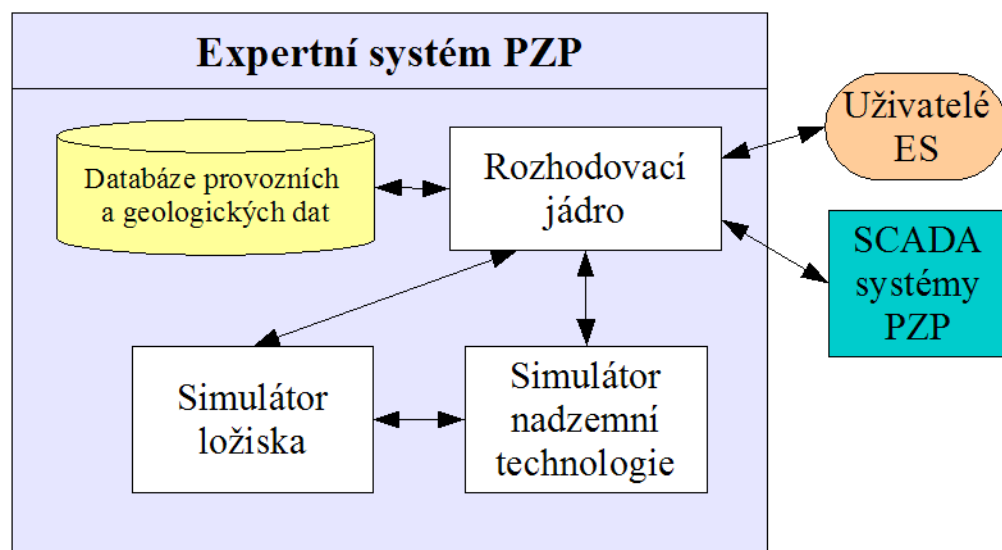
Obrázek 2.6: Ukázka rozložení sycení plynem v modelu ložiskové části PZP v simulátoru Eclipse.



Obrázek 2.7: Ideové schéma Expertního systému PZP.



Obrázek 2.8: Expertní systém jako řídicí systém PZP.



Obrázek 2.9: Návrh vnitřní struktury ES PZP.

Kapitola 3

Implementace projektu Expertního systému — vybraná témata

Vlastní realizace projektu ES započala zhruba v polovině roku 2005 pilotní fází na PZP1 a pokračovala do konce roku 2007. V současnosti je ES implementován na všech původně plánovaných zásobnících.

Autor práce se na implementaci ES aktivně a intenzivně podílel v rámci řešení dílčích zakázek zadaných RWE Transgas na TU Liberec, jejichž výsledky jsou popsány ve zprávách [22], [23] a [24].

Není záměrem autora popsat zde celý proces implementace ES, kapitola se soustředí na několik vybraných témat, na jejichž řešení se osobně podílel.

3.1 Přepřacované schéma ES

Původně navržená struktura ES, která je popsána v příloze B.2, musela být vzhledem k dále popsaným skutečnostem upravena. Těmto změnám struktury je věnován tento oddíl.

Celkově lze říci, že navržené funkce ES zůstaly zachovány, ovšem schéma systému bylo přepřacováno zcela zásadním způsobem. Toto schéma je znázorněno na obrázku 3.1.

Schéma je natolik odlišné od původního návrhu představeného v oddíle B.2 na obrázcích B.1 a B.2, že vyžaduje obšírnější popis.

3.1.1 Lokální a centrální ES

Asi největší změnou oproti schématu B.1 je opuštění struktury lokálních a centrálního ES, kdy lokální ES byl nahrazen možností vzdáleného přístupu k programu Decide! Desktop.

Připomeňme, že plánovanými funkcemi centrálního ES bylo zprostředkování informací o stavu zásob, dostupných skladovacích kapacitách, dostupných výkonech a aktuálních odtěžovacích křivkách pro management skladovací soustavy, obchodníky s plynem a dispečery. Tyto funkce v aktualizovaném schématu převzala aplikace GSD, která byla pro tyto účely vyvinuta řešitelským týmem.

Důvodem pro toto rozhodnutí je, možná poněkud překvapivě, široká paleta funkcí programu Decide! Desktop. Tento systém je velmi komplexní a pro nezaškoleného uživatele může být jeho použití značně obtížné. Uživatelé původně zamýšleného centrálního ES, tedy manažeři, obchodníci a dispečeri, pro svoji práci nepotřebují celou škálu funkcí nabízených Decide! Desktopem, naopak tito uživatelé očekávají od ES jednoduché informace typu: „Maximální možný okamžitý výkon PZP3“ či „Momentálně volná kapacita skladovací soustavy“.

Pro tyto účely byla vytvořena aplikace GSD, která je popsána v oddíle 3.3.

3.1.2 Nepřímý přístup k provozním datům

Druhou nejvýznamnější změnou ve schématu ES je zprostředkovaný přístup ES k provozním datům jednotlivých PZP přes *Databázi provozních dat (DPD)*. To, že systém Decide! Data Hub získává data z DPD a ne přímo ze SCADA systémů jednotlivých PZP souvisí se začleněním projektu ES do rozsáhlejšího projektu investiční výstavby realizovaného v RWE Transgas a.s.

3.1.3 Vyloučení RTEM

V období 2000–2005 firma SIS převzala do svého vlastnictví několik firem zabývajících se vývojem softwaru pro řešení úloh spojených s těžbou uhlovodíků. Důsledkem této obchodní politiky je skutečnost, že SIS nyní nabízí produkty, které byly původně konkurenční. To je v případě původního projektu ES názorně dokumentováno na příkladě systémů Decide! a RTEM. V době přípravy projektu ES nebyla v rámci SIS vyjasněna vzájemná pozice těchto

produktů, a proto byly do projektu ES zařazeny oba. Další analýza však ukázala, že funkce původně plánované pro RTEM dokáže zajistit Decide! Data Hub a proto není nutno tento program použít.

3.1.4 R2SL namísto Avocet

Sdružování simulací ložiska a nadzemní technologie a zařazení takovýchto sdružených modelů do dalších systémů je bezesporu trendem současnosti, platforma Avocet je toho důkazem. Avšak v době řešení projektu ES byla tato platforma ve stádiu vývoje, nebyla nabízena koncovým zákazníkům, proto byl pro spojení modelů podzemní a nadzemní části PZP použit produkt R2SL, který je do značné míry vývojovým mezistupněm mezi nadstavbou „Network“ programu Eclipse a platformou Avocet. Z tohoto pohledu je R2SL pouze dočasným řešením, které bude dříve nebo později nahrazeno platformou Avocet. Nicméně pro implementaci ES byl použit program R2SL, jehož vlastnostmi se zabývá oddíl [4.5.1](#) této práce.

3.1.5 Program RegSim

Při tvorbě a ladění modelů nadzemních technologií PZP byla zjištěna závažná omezení programů Pipesim a R2SL plynoucí z chybějící reprezentace aktivních tlakových ztrát na regulačních armaturách technologií PZP. Z tohoto důvodu byl vytvořen program „RegSim“, popsáný v oddíle [4.6](#), který nahrazuje chybějící funkce programu Pipesim v oblasti regulačních ventilů. Tento program je míněn jako dočasné řešení, dokud nebude požadovaná funkcionality nabízena i programem Pipesim.

3.1.6 Systém Portec

Na základě doporučení vedení projektu byl do struktury ES zařazen též program Portec společnosti ESK, který pracuje na bázi popisu ložiskového objektu pomocí funkce vlivu definované na každé sondě. Jeho funkce v ES je především pro rychlé předpovědi chování ložiska.

3.2 Automatizace běhu numerických modelů

Možnost automatizovaného spouštění matematických modelů respektujících aktuální stav podzemní i nadzemní části PZP a načtení výsledků těchto modelů a jejich vložení do databáze systému Decide! je klíčovou vlastností celého ES.

Ačkoliv v systému Decide! byla implementována již od jeho raných verzí možnost spouštění externích programů a načítání dat ze souborů, funkčnost požadovaná pro účely ES přišla teprve s verzí Decide! 2006.2 a byla vyvinuta víceméně na přání RWE Transgas, na základě požadavků projektu ES. Decide! 2006.2. obsahuje přímou podporu spouštění ložiskového simulátoru Eclipse, příp. spojeného se simulátorem nadzemních technologií Pipesim prostřednictvím rozhraní R2SL.

Systém Decide! nyní je schopen přímo vytvářet soubor se sekci SCHEDULE pro model v systému Eclipse, tak že takto vytvořený soubor obsahuje aktuální data o těžbě či vtláčení.

3.2.1 Definice úloh pro automatizovaný běh

Prvním krokem při implementaci automatizovaného spouštění numerických modelů v rámci ES bylo definování úloh, které mají být simulovány. Limitujícím faktorem je přitom časová náročnost simulačních výpočtů.

Po analýze situace byl stanoven následující scénář spouštění modelů:

Aktualizace modelu. Je prováděna ve stanovených intervalech, pro každý ložiskový objekt zvlášť. Aktualizace probíhá při minimálním vytížení systému. Na základě výkonů jednotlivých sond za dané období je sestaven příslušný SCHEDULE soubor. Poté je spuštěn model Eclipse v režimu „history match“. Výsledkem tohoto běhu je aktuální stav ložiska uložený ve formě RESTART souboru. Tím je dán základ pro další simulace.

Automatizované předpovědi. Jsou prováděny ve stanoveném harmonogramu a opět při malém vytížení systému. Vychází z aktualizovaného modelu a ze známého požadavku na těžbu či vtláčení pro následující období. Nejprve je spuštěn výpočet sdruženého modelu podzemí a nadzemí, který simuluje následující krátké období. Důvodem je značná časová náročnost sdružené simulace, není možno spouštět tuto simulaci pro delší období. Ovšem i tato simulace stačí k prověření navrženého režimu sond a ověření, že navržený

režim vyhoví podmínce předávacího tlaku. Jako druhý krok je spuštěna simulace ložiska pro situaci, pokud by výkon požadovaný na následující období byl konstantně udržován po dobu jednoho týdne. Tato simulace dokáže odhalit možné problémy provozu PZP (např. zavodnění sondy) s dostatečným předstihem.

Předpovědi na vyžádání. Tyto simulace se dějí na základě vnějšího podnětu uživatele. Protože systém Decide! není a nemá být uživatelským rozhraním ES pro dispečery a management, byla vyvinuta aplikace GSD, která slouží jako toto rozhraní. Tato aplikace je podrobněji popsána v oddíle 3.3. GSD po zadání požadavků a limitů vyšle požadavek do systému Decide!, který spustí numerické modely a jejich výsledky zašle zpět. Na základě těchto požadavků provádí systém Decide! následující simulace:

1. Krátkodobá předpověď sdruženého modelu podzemí a nadzemí, při respektování současného stavu omezení na sondách a v nadzemní technologii.
2. Střednědobá předpověď vývoje podzemní části PZP s respektováním současných limitů na sondách.
3. Dlouhodobá předpověď vývoje chování ložiska pro období 20 týdnů.

3.2.2 Implementace automatizovaného spouštění modelů

Pro implementaci automatizovaného spouštění matematických modelů ze systému Decide! bylo nutno provést následující kroky:

1. Zprovoznit mechanismus, kterým je spouštění modelů vyvoláváno a který oznámí ukončení běhu modelu. Tímto mechanismem je systémová služba MS Windows FileListenerService, která průběžně monitoruje datum poslední změny sledovaných souborů a dojde-li ke změně provede vyvolání události. Takto je řešeno zadání požadavků aplikace GSD do systému Decide!.
2. Zavést do systému Decide! další datový zdroj, soubory s výsledky simulačních výpočtů, pravidla pro zpracování tohoto datového zdroje a příslušné vnitřní proměnné.

3. Vytvořit a odladit skripty v jazyce Visual Basic pro spouštění modelů, jejich řízení a předávání výsledků.

3.3 Aplikace GSD

Aplikace GSD, nazývaná též „Dispečerská aplikace“ je program, který byl řešitelským kolektivem vyvinut jako rozhraní ES pro plynárenský dispečink, pro managery a obchodníky s plynem a také pro provozovatele PZP.

Původním záměrem, který se podařilo naplnit, byla maximální jednoduchost a snadnost použití aplikace. Díky tomu se podařilo zpřístupnit sofistikované ložiskové simulátory většímu počtu uživatelů, kteří mohou z jejich použití profitovat, avšak doposud je nepoužívali pro jejich složitost a komplikovanost. Uživatel GSD provádí simulace v systému Eclipse a v podstatě ani nemusí vědět o jeho existenci, tím méně pak o jeho používání.

Program GSD umožňuje:

1. Specifikovat požadovaný výkon zásobníku.
2. Spustit numerický model a vygenerovat odtěžovací křivky v závislosti na celkových zásobách nebo na čase (hodinová, denní a týdenní předpověď).
3. Zobrazit vygenerované odtěžovací křivky buď jednotlivě pro každý zásobník nebo pro libovolnou skupinu zásobníků jako tzv. virtuální odtěžovací křivku zobrazující závislost mezi sumárním výkonem zvolených zásobníků a sumárními zásobami.
4. Nastavovat technologické limity pro části povrchových technologií, konkrétně pro maximální průtok plynu jednotlivými sondami a maximální průtok středisky, pokud existují.
5. Vypínat a zapínat jednotlivé sondy nebo celá střediska.
6. Specifikovat předávací tlak do lokálního plynovodu nebo do tranzitního plynovodu.

První tři body jsou určeny pro dispečerské pracoviště a management, poslední tři body jsou určeny pro provozovatele zásobníku. Nastavením vhodných přístupových práv je zajištěno, že například dispečer může prohlížet

technologická omezení, ale nemůže je nastavovat – to patří do kompetence provozovatele zásobníku.

Tok dat a signálů v síťovém propojení mezi centrálním dispečinkem, programem GSD, jádrem expertního systému Decide! a PZP je znázorněn na schématu 3.2.

Systém má dva typy uživatelů, nazývaných „Dispečer“ a „Provozovatel“. Jejich oprávnění jsou tato:

- Uživatel typu „Dispečer“ může:
 - Nastavovat požadovaný výkon kteréhokoliv zásobníku.
 - Spouštět model kteréhokoliv zásobníku.
 - Prohlížet odtěžovací křivky všech zásobníků.
 - Prohlížet technologická omezení nastavená provozovatelem kteréhokoliv zásobníku.
- Uživatel typu „Provozovatel“ může:
 - Modifikovat technologická omezení svého zásobníku.
 - Prohlížet odtěžovací křivky všech zásobníků.

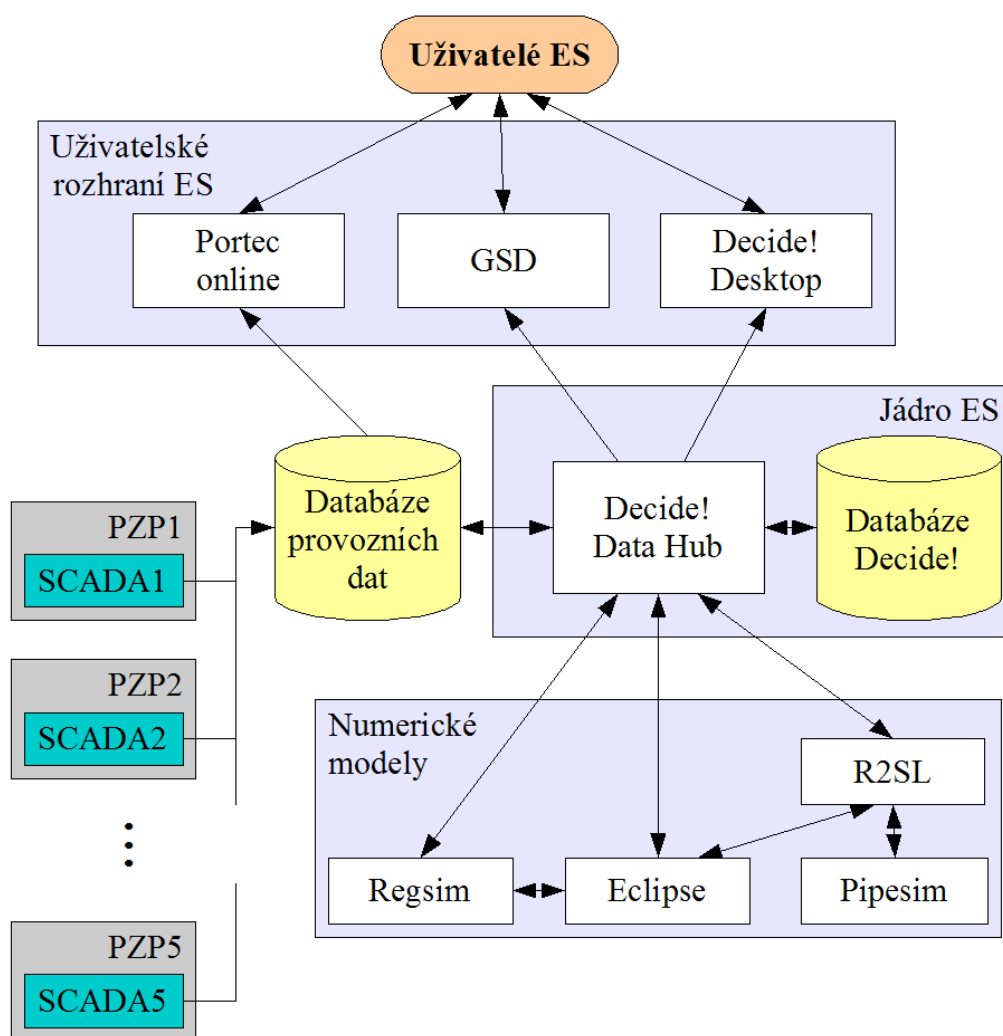
Typické využití celého systému spočívá v těchto krocích:

1. Předpokládá se, že technologická omezení jsou správně nastavena podle situace aktuálně platné pro stav podzemní i povrchové technologie.
2. Dispečer zadá v aplikaci GSD požadovaný výkon zásobníku či zásobníků a spustí výpočet.
3. GSD vyšle signál k zahájení výpočtu. Služba instalovaná na serveru ES spustí numerický model.
4. Po skončení výpočtu načte GSD výsledky modelu.
5. Vytvoří pomocný soubor obsahující informace pro vygenerování odtěžovací křivky. Odtěžovací křivka se prostřednictvím programu GSD zobrazí na monitoru dispečera v centrálním dispečinku i na dispečinku PZP.
6. Provozovatel zásobníku má k dispozici návrh režimu sond.

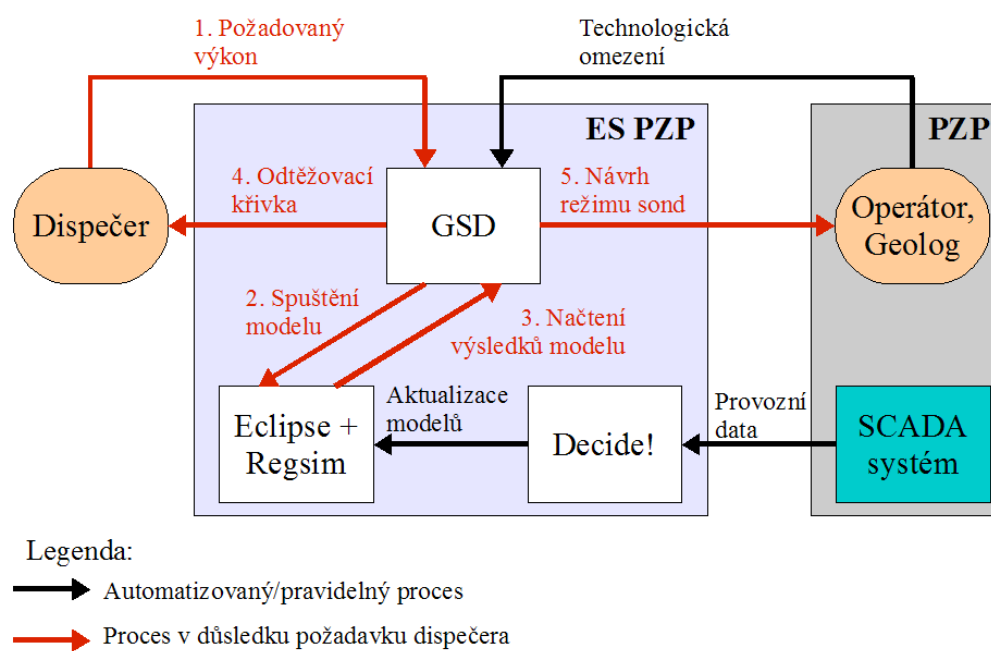
V případě, že provozovatel PZP změní nastavení technologických omezení, zobrazí se na hlavním panelu aplikace GSD vedle sloupce Limits červený vykřičník. To bude pro centrální dispečink znamenat, že odtěžovací křivka nemusí být aktuální, protože došlo v technologii ke změně podmínek.

Hlavní panel aplikace GSD je zobrazen na obrázcích [3.3](#) a [3.4](#).¹

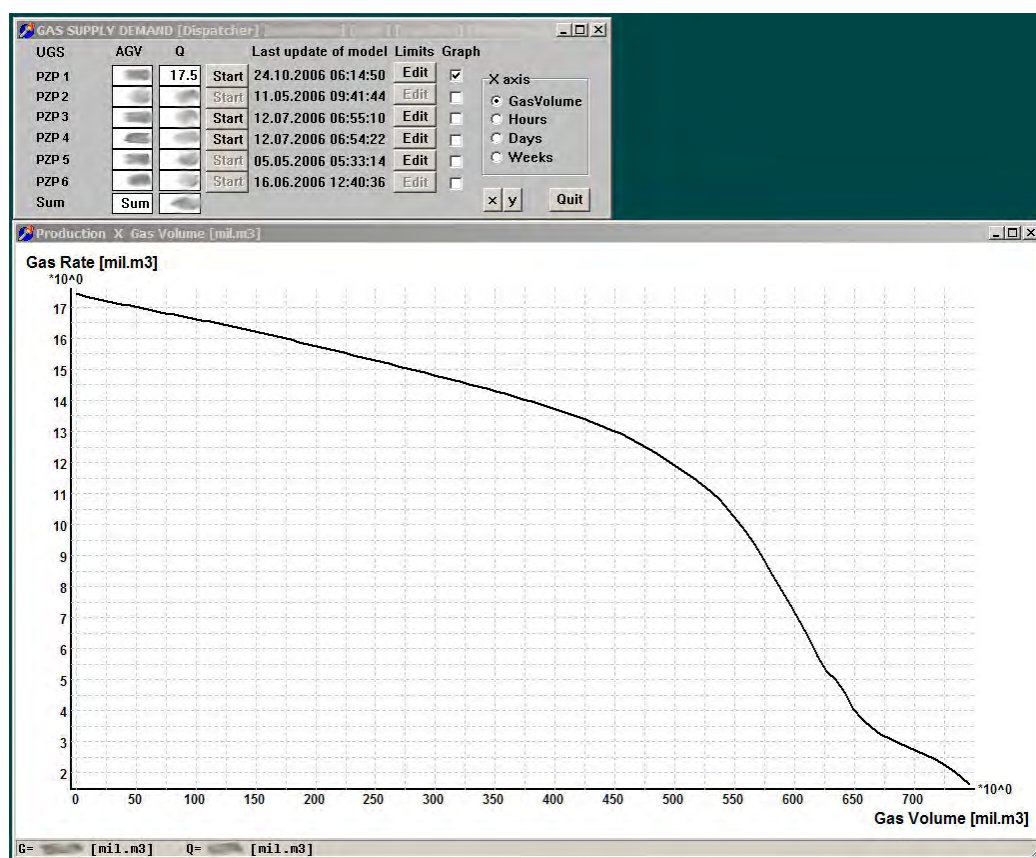
¹Z obrázků je patrné, že aplikace GSD umožňuje pracovat i se zásobníkem PZP6, který do ES prozatím nebyl implementován.



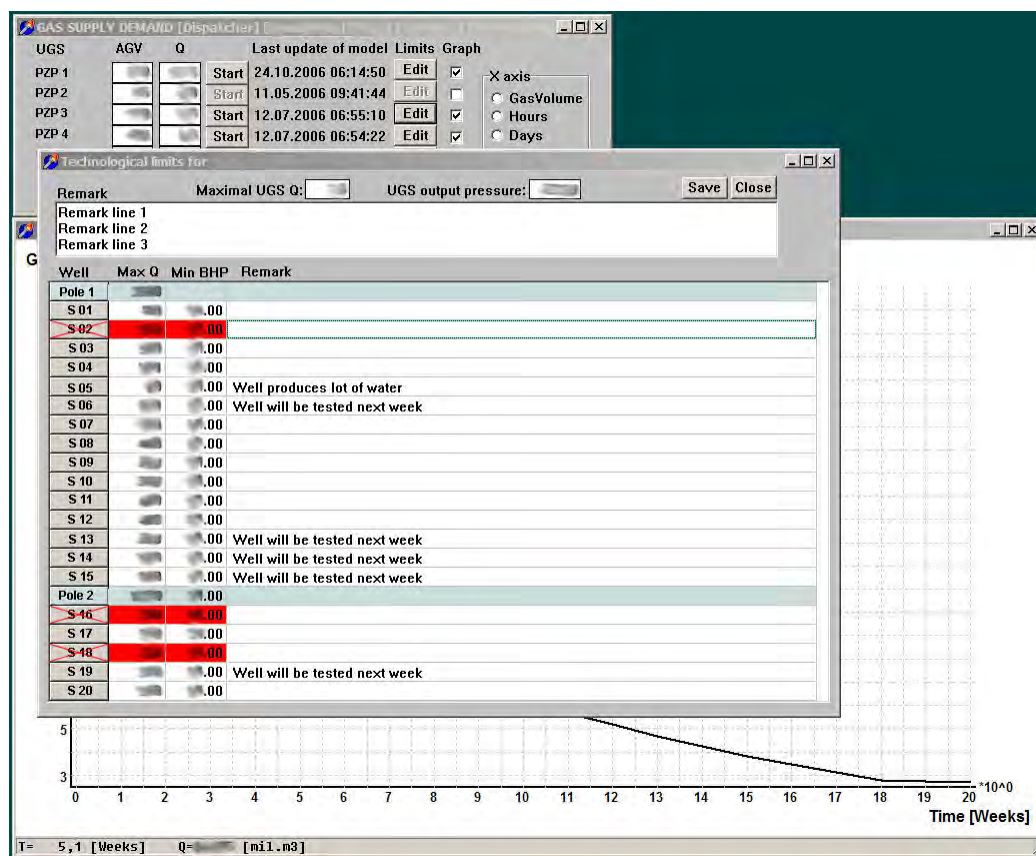
Obrázek 3.1: Upravená struktura Expertního systému



Obrázek 3.2: Schéma činnosti aplikace GSD



Obrázek 3.3: Program GSD — aktuální odtěžovací křivka pro zadaný výkon PZP1



Obrázek 3.4: Program GSD — specifikace technologických limitů

Kapitola 4

Simulace nadzemních technologií PZP pro ES

V této kapitole popíšeme metodické postupy, které byly autorem práce vyvinuty při začleňování simulátoru nadzemních technologií do ES. Tato kapitola je těžštěm první části habilitační práce, což odráží tu skutečnost, že se autor při realizaci projektu ES zabýval především zde popsanou problematikou.

Hlavním úkolem simulace nadzemních technologií v ES PZP je výpočet minimálního tlaku na ústích sond při zadaném požadovaném výkonu daného PZP a daném předávacím tlaku a aktuálním stavu technologií. Tato úloha však není v ES řešena samostatně, ale je součástí sdružené simulace podzemí a nadzemí.

V prvním oddíle stručně představíme vlastnosti programu Pipesim, v následujících potom metodiku tvorby a ladění modelů technologií PZP v prostředí tohoto programu pro režimy těžby a vtláčení. Následně je popsán postup propojení modelů ložiska a technologie pomocí programu R2SL a metodika řízení sdružené simulace. Poslední oddíl kapitoly je věnován návrhu programu RegSim, který byl do ES začleněn pro simulaci regulačního procesu na přípojkách sond a sběrných středisek.

4.1 Pipesim

Program Pipesim je specializovaný profesní nástroj pro simulaci ustáleného proudění směsí uhlovodíků potrubními systémy a s tím spojené výpočty stavových a fázových změn ke kterým během tohoto proudění dochází. Je nutno

poznamenat, že se jedná primárně o *síťový simulátor*, nikoliv o *procesní simulátor*, tedy hlavní oblastí použití programu jsou potrubí a potrubní sítě. Pro detailní simulaci procesů v technologických uzlech jakým je například sušicí linka PZP je vhodné použít některý z procesních simulátorů, např. HYSYS společnosti AspenTech.

První verze byla uvedena v roce 1998 jako produkt firmy Baker, Jardine&Associates, jež byla v roce 2001 koupena divizí GeoQuest firmy SIS, která program v současnosti dále vyvíjí, distribuuje a postupně jej propojuje s dalšími svými produkty. Během téměř deseti let své existence si Pipesim postupně vydobyl postavení průmyslového standardu a je používán ve většině předních světových ropných a plynárenských společností.

Vlastní simulace proudění v potrubí probíhá pomocí řešení standardizovaných průmyslově používaných korelací, nejde tedy o numerické řešení PDR proudění tekutiny pomocí MKP či jiné numerické metody, jaké provádí např. program Fluent. Výhodou tohoto přístupu oproti MKP je značná rychlost výpočtu a poměrně jednoduchá příprava modelu. V současnosti řeší Pipesim pouze ustálené proudění, což odpovídá výchozímu zaměření programu na návrh potrubí a sítí, nikoliv na analýzu dynamických stavů.

Mezi typické úlohy řešené Pipesimem patří:

- Návrh dimenzí a provedení potrubí.
- Návrh základních parametrů kompresorů, pump, separátorů a další technologických zařízení.
- Analýza vystrojení sond, otvírek, návrh stupaček.
- Citlivostní analýza vlivu jednotlivých parametrů na proudění v potrubí.
- Návrh topologického uspořádání potrubní sítě.
- Optimalizace provozu potrubní sítě, hledání „úzkých míst“ v síti.
- Návrh a optimalizace provozu gasliftů a ponorných pump.
- Návrh vtláčecích sond.
- Výpočet tlakových a teplotních profilů média proudícího potrubím.
- Výpočet limitních erozních rychlostí proudění pro potrubí.

- Návrh tepelné izolace potrubí, včetně podzemních a podmořských potrubí.

Pipesim, podobně jako Eclipse, se standardně dodává ve dvou variantách, „Blackoil“ a „Compositional“. Varianta Blackoil používá zjednodušený model směsi uhlovodíků, zatímco verze Compositional přináší plně kompoziční modelování. Pro ES byla zakoupena varianta Blackoil, jejíž funkčnost se pro daný účel zdála být dostačující. Výhody, které nabízí kompoziční varianta, jmenovitě predikci tvorby hydrátů v potrubích a sledování hodnoty rosného bodu plynu v předávacím místě, se v průběhu řešení ukázaly být jako velmi podstatné pro provozní optimalizaci a proto by mělo co možná nejdříve dojít k upgradu na Pipesim Compositional.

Uživatelské rozhraní programu je plně grafické, jak je ukázáno na obrázku 4.1, avšak vlastní výpočetní jádro je na tomto uživatelském rozhraní nezávislé a může být spouštěno samostatně, což je z hlediska nasazení programu v ES a automatizovaného spouštění modelů velmi vhodná a žádoucí vlastnost. K programu je možno dokoupit rozšiřující moduly pro řešení specializovaných úloh, jako příklad můžeme uvést HoSim pro návrh a optimalizaci horizontálních sond, či modul FPT (Field Planning Tool) pro celkovou optimalizaci sítě produktovodů těžebního pole.

V Pipesimu rozlišujeme tři hlavní režimy činnosti, kterými jsou:

- Modelování tekutiny (řešení fázového chování).
- Analýza větve — tzv. „single branch“.
- Analýza sítě.

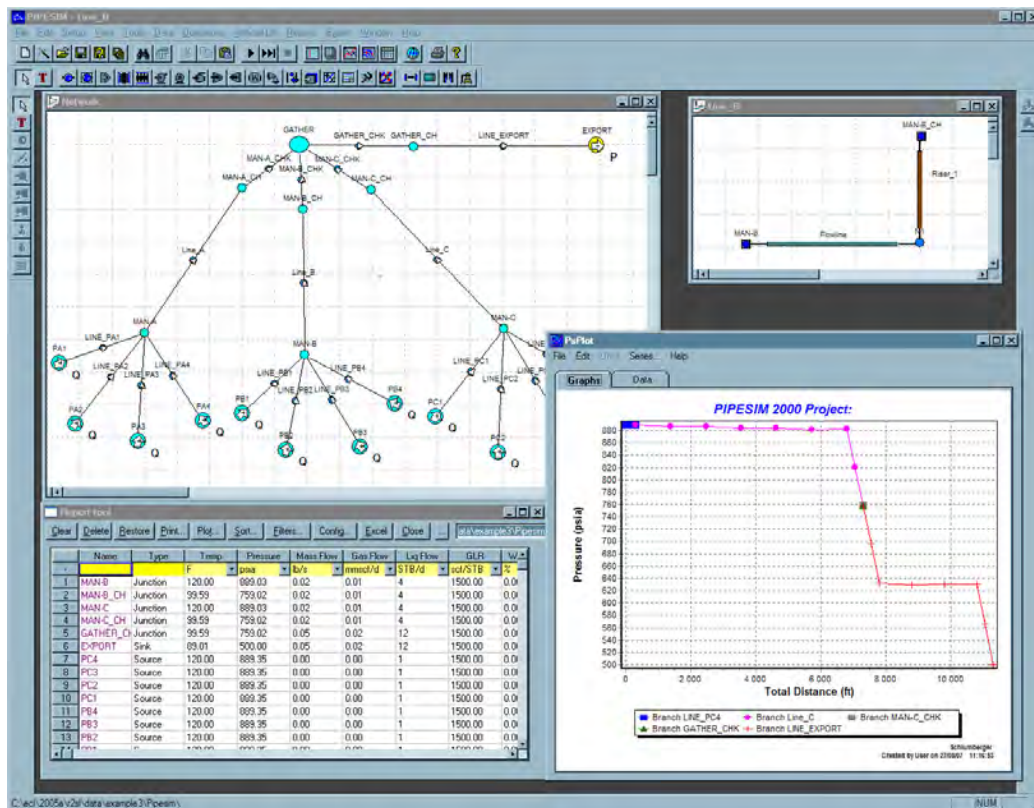
4.1.1 Modelování tekutiny

Modelování tekutiny a jejího fázového chování je základem pro další dva režimy činnosti programu Pipesim. Jeho hlavní uplatnění je však při těžbě a zpracování ropy a při použití kompozičního modelování.

Pro aplikaci v rámci ES PZP postačuje v tomto modulu definovat základní parametry zemního plynu a podíl vody.

4.1.2 Režim analýzy potrubní větve

Potrubní větví se v terminologii programu myslí sériové uspořádání potrubí a technologických zařízení, které má právě jeden vstup a jeden výstup. Větev

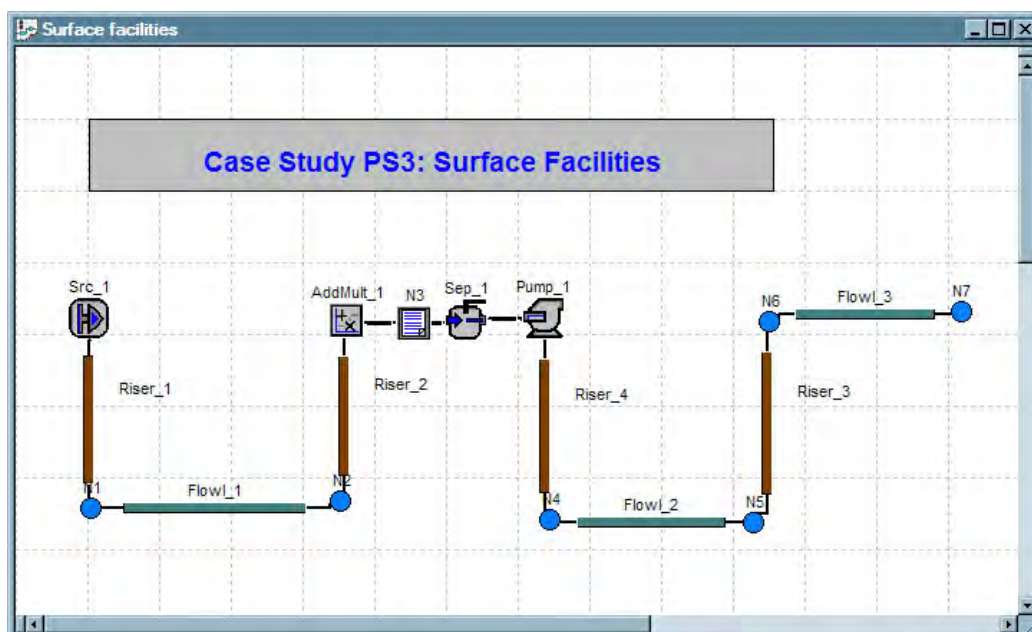


Obrázek 4.1: Uživatelské rozhraní programu Pipesim.

přitom může být tvořena těmito prvky:

- Potrubí a stupačky.
- Otvírky sond.
- Clony.
- Kompresory, expandery a pumpy.
- Separátory.
- Výměníky tepla.
- Obecná zařízení definovaná tlakovou a teplotní změnou média.

Na každém z prvků jsou předepsány jeho parametry, k dispozici jsou různé stupně podrobnosti zadání — např. kompresor je možno definovat buď některým ze základních parametrů (výkon, výstupní tlak, ...) nebo výběrem charakteristiky pro daný typ daného výrobce z dodávané databáze programu nebo zadáním naměřených křivek přímo pro konkrétní stroj instalovaný v simulované technologii. Ukázka potrubní větve je na obrázku 4.2.



Obrázek 4.2: Režim analýzy potrubní větve.

Základní analýza v „Single branch“ režimu vychází ze zadání dvou ze tří hlavních veličin, kterými jsou vstupní tlak, výstupní tlak a průtok, program počítá tu veličinu, která nebyla zadána. Pokročilejší možnosti zahrnují např. citlivostní analýzu pro jednotlivé parametry či nodální analýzu.

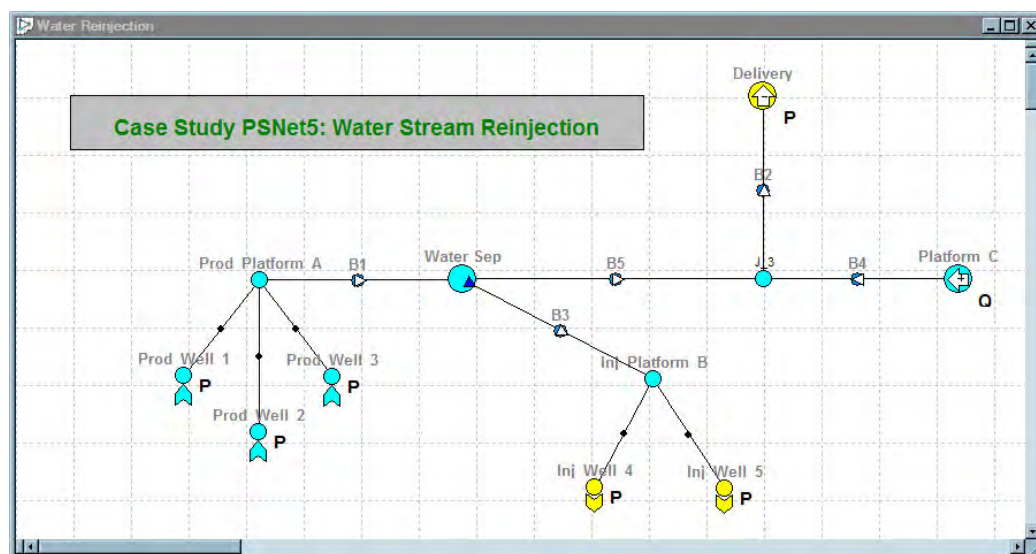
Hlavní aplikace tohoto režimu jsou:

- Analýza proudění v otvírkách sond a ve stupačkách.
- Analýza tlakových a teplotních změn na potrubích.
- Návrh parametrů technologických uzlů.

Mimo tyto aplikace jsou modely potrubních větví základem pro modelování sítě.

4.1.3 Režim analýzy sítě

V tomto módu činnosti programu je spojením jednotlivých potrubních větví pomocí uzlů vytvořena síť, která je dále doplněna zdroji a výstupy. Na topologické uspořádání této sítě nejsou stanoveny žádné požadavky, je tedy možné analyzovat i sítě se smyčkami. Ukázka potrubní sítě je na obrázku 4.3.



Obrázek 4.3: Režim analýzy potrubní sítě.

V režimu analýzy sítě jsou definovány okrajové podmínky (tlaky, teploty, průtoky) na zdrojích a výstupech, simulovány jsou tlaky a teploty ve vnitřních uzlech sítě a průtoky jednotlivými větvemi a případné fázové změny.

4.2 Metodika tvorby modelů technologií PZP

V tomto oddíle popíšeme metodický postup, který byl v etapě implementace ES postupně vytvořen, otestován a používán pro tvorbu modelů PZP.

Podotkněme, že aplikace programu Pipesim pro online provozní simulaci a optimalizaci PZP je značně nestandardní, Pipesim je zpravidla využíván pro návrhové výpočty. Proto ani dodavatel programu nebyl schopen poskytnout konkrétní metodiku tvorby a ladění modelů technologií PZP pro daný účel. Dále popisované metodické postupy jsou tedy originální.

Pro každý zásobník byly vytvořeny dva modely nadzemní technologie, jeden pro simulaci režimu těžby, druhý pro simulaci režimu vtlačení, který byl z modelu těžby odvozen po jeho naladění. Celkový postup tvorby modelů nadzemí pro jeden PZP byl tento:

1. Vytvoření modelu režimu těžby.
2. Odladění modelu těžby.
3. Vytvoření modelu režimu vtlačení odvozením z modelu těžby.

První krok podrobněji popíšeme dále, druhý krok potom v oddíle 4.3 a třetí v 4.4.

Vlastní vytvoření modelu nadzemní technologie PZP pro režim těžby pomocí programu Pipesim není příliš obtížné a ani časově náročné. Postup obsahuje dva hlavní kroky, kterými jsou:

1. Sběr dat.
2. Vlastní tvorba modelu.

Při sběru dat je nutno zjistit následující údaje:

Celkové technologické schéma PZP, které obsahuje údaje o:

- Celkové topologické struktury plynovodů PZP.
- Umístění hlavních technologických uzlů.
- Paralelních větvích technologií a jejich ochozů.
- Umístění měřicích, regulačních a uzavíracích orgánů.

Údaje o plynovodech, což znamená jejich:

- Vnitřní průměry potrubí.
- Délky potrubí.
- Převýšení příp. výškové profily v těch případech, kdy jsou tato významná z hlediska tlakových ztrát, což u PZP jsou převýšení v řádu desítek metrů.
- Tloušťky stěn potrubí.
- Materiál a provedení potrubí.

- Údaje o tepelné izolaci.
- Teplota prostředí obklopujícího potrubí.

Údaje o technologiích. Na zásobnících provozovaných společností RWE Transgas jsou instalovány tyto technologie:

- Měření výkonu na sondách.
- Předehřev plynu a separace kapaliny.
- Regulace na sondách.
- Sušení plynu.
- Filtrace.
- Dotěžovací kompresory (pouze na některých PZP).
- Regulace na střediscích a v centrálním areálu.
- Obchodní měření.

Pro veškerá tato zařízení je nutno zjistit jejich základní technické parametry.

Údaje o řízení PZP. Zde se jedná zejména o pravidla pro zapínání paralelních větví technologií a o algoritmy regulace.

Jakmile jsou tato data k dispozici, je možno přistoupit k vlastní tvorbě modelu. Ta zahrnuje tři kroky, které odpovídají třem módům činnosti programu Pipesim:

Tvorbu modelu tekutiny. Tento krok není v případě PZP příliš náročný, v blackoil verzi Pipesimu stačí zadat fyzikální vlastnosti zemního plynu, nulový poměr ropa/plyn a poměr voda/plyn dle situace daného PZP.

Tvorbu modelu sítě. Výchozím bodem je přitom technologické schéma, na jehož základě je v síťovém modulu Pipesimu vytvořena reprezentace sond, přípojek, případných sběrných středisek a technologických uzlů.

Tvorbu modelů jednotlivých větví. Je nejpracnější fází tvorby modelu, kdy je nutno zadat veškerá výše uvedená data. Postup pro jednotlivé prvky technologie PZP rozebereme podrobněji dále.

Potrubí

Do modelu je přímo zadána délka a průměr, případně délky a průměry, pokud je úsek složen z více potrubí. Je vhodné zvážit, zdali je nutno zadávat detailní výškový profil potrubí, nebo zdali postačí popis výšek pomocí převýšení a průměrné míry zvlnění. Dále je přímo zadána tloušťka stěn a okolní teplota. Z údajů o tepelné izolaci potrubí je zvolena některá z předdefinovaných variant, stejně tak jako na základě údajů o materiálu a provedení je vybrána doporučená hodnota drsnosti stěn. V případech, kdy potrubí obsahuje výrazné ohyby, je vhodné upravit jeho délku dle počtu a úhlu těchto ohybů pomocí metodiky uvedené v nápovědě programu.

Zkušenosti nabyté při implementaci prokázaly, že potrubím nacházejícím se ve sběrných střediscích a v centrálních areálech PZP není nutno věnovat takovou pozornost, jako přípojkám sond a středisek. Potrubí v technologiích bývají dostatečně dimenzována a zpravidla na nich nedochází k významným tlakovým či teplotním změnám.

Měření výkonu na sondách

Zavedení tohoto technologického prvku do modelu závisí na jeho konkrétní realizaci na daném PZP. Na zásobnících, jejichž model byl vytvářen se používají buď měření ultrazvuková nebo měřicí clony. V prvním případě není nutno toto měřidlo do modelu zavádět, neboť nezpůsobuje tlakové ani teplotní změny proudícího plynu. V případě clonových měření je použit předdefinovaný prvek „Clona“, kterému se zadá odpovídající průměr.

Přehřev plynu a separace kapaliny

Používána je sériově zapojená dvojice předdefinovaných prvků „Obecné zařízení“ a „Separátor“. Na prvním je zavedena výstupní teplota a tlaková ztráta, která je zpravidla předmětem dalšího ladění a na druhém prvku potom separovaná fáze (v případě PZP vždy voda) a účinnost separace.

Regulace na sondách

Současná verze programu Pipesim bohužel postrádá prvek typu „Regulační ventil“, což je pro činnost ES dosti podstatná komplikace. Řešení tohoto

problému se zabývá oddíl 4.6, kde je problematika regulace na sondách a jejího řešení popsána detailněji.

Prozatím je regulační ventil do modelů nadzemních technologií zaveden jako clona, jejíž plocha odpovídá průtočnému průřezu daného ventilu při jeho 100% otevření.

Sušení plynu

Rozlišovací úroveň programu Pipesim není schopna postihnout proces sušení plynu, kdy je proudící plyn sprchován zahřátým trietylénglykolem, jinak než definováním teplotní a tlakové změny, ke které během tohoto děje dojde. Ukázalo se jako dostatečné použít prvek „Obecné zařízení“ a jeho parametry stanovit laděním. V některých případech bylo tento prvek nutno doplnit ještě o clonu, pokud tlaková ztráta vykazuje silnou závislost na průtoku.

Filtrace

Platí totéž co bylo uvedeno výše o modelování sušení, pouze s tím rozdílem, že na filtrech nedochází k významné teplotní změně plynu.

Dotěžovací kompresory

Používán je předdefinovaný prvek „Kompresor“, který je definován svým výkonem. Bylo by vhodné provést měření charakteristik příslušných kompresorů a zavést je do modelů.

Regulace ve sběrných střediscích a v centrálním areálu

Platí ta samá pravidla a ty samé připomínky, které byly uvedeny výše v oddíle o regulaci na sondách.

Obchodní měření

Používány jsou tři technologie měření: Clony, turbínová měřidla a průtokoměrné počítače „FloBoss“. První případ je do modelu zaveden jako clona odpovídajícího průměru, ve zbylých dvou případech je nutno použít obecné zařízení a ladit jeho parametry, případně ho ještě doplnit clonou, jako je tomu u sušení a filtrace.

4.3 Metodika ladění modelů technologií

Model režimu těžby, tak, jak byl vytvořen postupem popsáním v předchozím oddíle není možno do ES ihned začlenit, neboť výsledky jím poskytované by byly značně nepřesné. Důvodem je především nejistota v parametru „Drsnost stěny“ u potrubních úseků a neznámé tlakové ztráty na technologiích. Z tohoto důvodu je nutno provést naladění modelu dle dostupných provozních dat. Nyní popíšeme nejprve metodiku ladění parametrů potrubí a to ve dvou variantách, dle typu sběrného systému a poté metodiku ladění parametrů technologických uzlů.

4.3.1 Výběr vhodné korelace pro výpočet

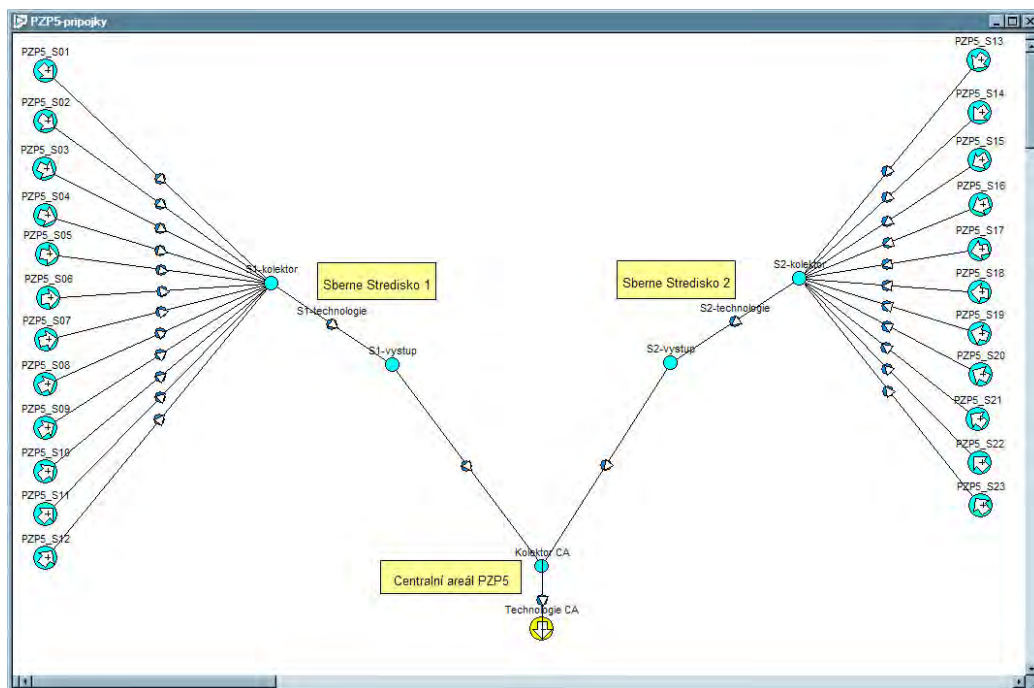
Program Pipesim implementuje řadu způsobů výpočtu proudění potrubními systémy. K dispozici je šest korelací pro jednofázové proudění, 22 korelací pro vícefázové vertikální a 19 korelací pro vícefázové horizontální proudění, přičemž většina z těchto korelací má minimálně jeden, často však i několik volitelných parametrů. Proto výrobce programu poskytuje doporučení pro výběr a použití korelací.

Při tvorbě prvních modelů PZP byly postupně testovány doporučené jednofázové korelace, s různými druhy parametrů. Ovšem PZP na kterých byl ES implementován jsou provozovány v takových tlakových a teplotních poměrech, že většina korelací poskytla velmi obdobné výsledky, proto bylo pro další PZP rozhodnuto používat implicitně nastavenou jednofázovou korelaci „Moody“.

4.3.2 Ladění tlakových ztrát na přípojkách sond pro PZP s vějířovitou strukturou

Vějířovitou strukturou plynovodní sítě rozumíme takové uspořádání, kdy každá produkční sonda je připojena samostatným potrubím k centrálnímu areálu nebo ke sběrnému středisku a obdobně sběrná střediska mají každé samostatný plynovod do centrálního areálu. Ukázka modelu PZP s vějířovitou strukturou plynovodní sítě je na obrázku 4.4. Z hlediska ladění tlakových ztrát plynovodů se jedná o jednodušší případ.

Postup ladění závisí na konkrétním uspořádání měřicích a regulačních orgánů na přípojkách. Pro všechny PZP s vějířovitou strukturou, na kterých byl implementován ES platí následující:



Obrázek 4.4: Vějířovitá síť plynovodů PZP.

- Jsou měřeny tlak a teplota plynu na ústích sond.
- Je měřen výkon sond/středisek (= množství plynu za čas).
- Jsou měřeny tlak a teplota na společném kolektoru sond/středisek.
- Regulační ventily jsou umístěny před společným kolektorem.
- Jsou k dispozici hodnoty otevření regulačních ventilů v průběhu těžby.

Rozdíly mezi jednotlivými PZP jsou tyto:

- Na některých PZP je měřen tlak plynu na vstupu sběrného střediska či centrálního areálu, na jiných nikoliv.
- Na některých PZP jsou na každé přípojce sondy instalovány další technologické prvky, zpravidla přehřev a separátor.

Začněme se situací, kdy je k dispozici měření tlaku na vstupu střediska či areálu, poté popíšeme postup v ostatních situacích.

Sběr dat

Pro každou přípojku je nutno zajistit následující data z těžební sezóny:

- Tlak na ústí sondy,
- teplota na ústí sondy,
- výkon sondy,
- tlak na vstupu do střediska/areálu.

Praxe ukázala, že není nutno pro dané účely používat vysokofrekvenční data, čtvrt hodinové až hodinové průměry jsou zcela vyhovující. Předpokládáme také, že před dále popsáním zpracováním bylo provedeno manuální či automatizované čištění dat.

Přepočet výkonu

Jelikož měření výkonu na sondě je řádově méně přesné než obchodní měření, bývá do modelů podzemní i nadzemní části zaváděn výkon sond upravený dle vztahu:

$$q_i = \frac{q_{iM}}{\sum_{j=1}^N q_{jM}} Q_{obch},$$

kde N je počet sond daného PZP, Q_{obch} je okamžitý výkon PZP měřený obchodním měřidlem, q_{iM} je okamžitý výkon dané sondy měřený měřidlem na přípojce a q_i je upravený výkon sondy i používaný dále v numerických modelech.

Určení odchylky manometrů

Průzkumem dat bylo zjištěno, že manometry na ústí sondy a na konci přípojky vykazují při nulovém průtoku odchylky v řádu až desetin baru. Proto je do dat nutno zavést opravu na tento rozdíl, který stanovíme jako průměr rozdílů obou měření tlaku za nulového průtoku sondou opravený o rozdíl atmosferického tlaku v místech obou měření.

V tomto případě není podstatné, které měření tlaku upravíme, vzhledem k tomu, že oprava má hodnotu v řádu maximálně desetin, většinou však setin, baru, zatímco měřené tlaky se pohybují v řádu desítek až stovek barů. Pro tvorbu modelů pro ES byla přijata konvence, že opravováno je měření na konci přípojky.

Zde je nutno poznamenat, že při ladění modelů pro ES se v některých případech vhodnou opravu nepodařilo nalézt, neboť směrodatná odchylka rozdílů hodnot měřených tlaků byla srovnatelná s průměrnou hodnotou tohoto rozdílu. V takovýchto případech nelze tlakové ztráty na přípojce naladit s vyhovující přesností dokud nebude provedena kalibrace obou manometrů a nebude k dispozici dostatek provozních dat s kalibrovanými manometry.

Výběr dat pro ladění

Dalším krokem je pro každou přípojku vybrat taková provozní data, která lze považovat za reprezentativní. Praxe při implementaci modelů jednotlivých PZP ukázala, že je z provozní historie jedné těžební sezóny vybrat pro danou přípojku cca. pět až sedm časových úseků o délce zhruba dvanácti hodin, ve kterých tato sonda těžila pokud možno konstantním výkonem. V tomto časovém intervalu je potom vhodné data průměrovat a dále pracovat s těmito průměry. Je vhodné volit tyto intervaly pro různé tlakové poměry a pro různé hodnoty těžby, tak, aby byla pokryta co největší šíře provozních režimů sondy. Výsledkem je tabulka používaná pro ladění přípojek, jejíž ukázka je na obrázku 4.5.

Sonda: PZP4 S31

Veličina	THP	THT	q	P areál	Delta P
Jednotky	[Bar]	[°C]	[1000sm ³ /den]	[Bar]	[Bar]
Datum					
XX.X.200X	171.038	29.88	154.10	169.784	1.253
XX.X.200X	160.688	36.15	243.19	158.265	2.423
XX.X.200X	148.486	36.07	182.68	146.820	1.666
XX.X.200X	138.676	35.88	182.06	136.588	2.089
XX.X.200X	134.911	36.85	198.94	132.541	2.369

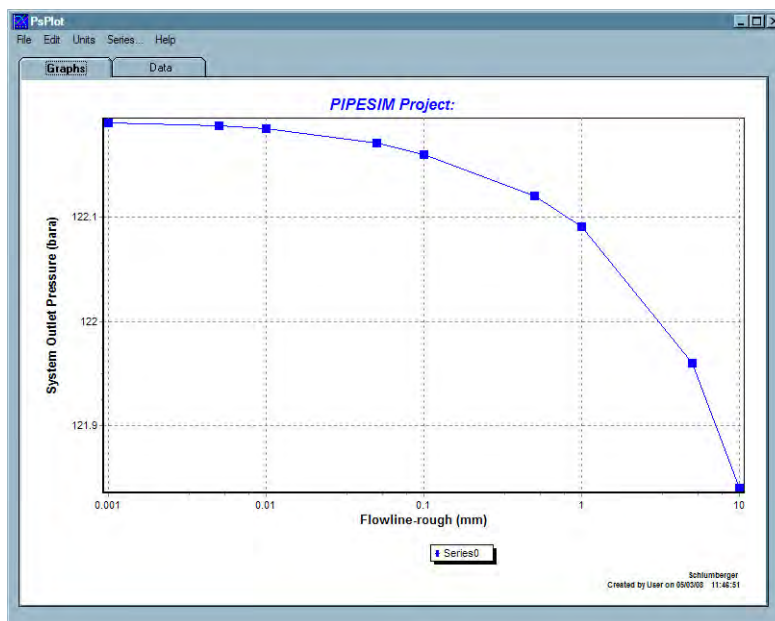
Obrázek 4.5: Data pro ladění parametrů přípojky sondy.

Vlastní ladění modelu přípojky

Používán je modul „System analysis“ v Single branch režimu programu Pipesim. Zadanými známými hodnotami jsou tlak a teplota na ústí sondy a průtok, počítanou veličinou je výstupní tlak. Rozdíl výstupního tlaku mezi modelem a měřením je brán jako kritérium shody modelu se skutečností.

Pro dosažení shody výstupních tlaků jsou měněny hodnoty drsnosti stěn potrubí, neboť ta je parametrem, který je znám s nejmenší přesností a jehož

hodnota je do modelu zavedena pouze odhadem. Závislost výstupního tlaku na hodnotě drsnosti je ukázána na obrázku 4.6.



Obrázek 4.6: Závislost výstupního tlaku potrubí na drsnosti.

V těch případech, kdy se pomocí fyzikálně přijatelných hodnot drsnosti (rozmezí zhruba 0.005–5 mm) nepodaří naladění provést, je vhodné mírně upravit hodnotu převýšení potrubí, případně přejít od zjednodušeného výskového popisu k detailnímu.

Výsledky modelu pro vybrané okamžiky jsou opět zaváděny do tabulky, jak ukazuje obrázek 4.7, kritériem pro naladění přípojky je minimalizace čtverců rozdílů tlakových ztrát přípojky měřených a simulovaných.

Vyhodnocení ladění

Pro většinu sond se podařilo provést naladění tak, aby rozdíly mezi modelem a skutečností byly na úrovni přesnosti použitých manometrů, tj. v řádu setin baru.

Na některých přípojkách se nepodařilo dosáhnout naladění tlakové ztráty s vyhovující přesností. Důvodem pro menší neshody jsou většinou výše popsané nesoulady mezi měřeními tlaků na začátku a konci přípojky. Větší

Sonda: PZP4_S31

P areál měření	P areál model	Rozdíl
[Bar]	[Bar]	[Bar]
169.784	169.790	-0.006
158.265	158.182	0.083
146.820	146.813	0.007
136.588	136.736	-0.148
132.541	132.477	0.064

Obrázek 4.7: Výsledky ladění parametrů přípojky sondy.

rozdíly mezi modelem a skutečností lze přičíst na vrub také malé přesnosti měřidel průtoku na sondách. Největší neshody mezi výsledky modelu a provozními daty, někdy až v řádu jednotek baru, indikují zpravidla chybu dokumentace, kdy je nesprávně uvedena délka nebo průměr potrubí.

U některých málo používaných a zpravidla také málo výkonných sond je problematické získat dostatečně široký rozsah tlaků a výkonů, neboť v období za které jsou k dispozici provozní data v centrální databázi, byly tyto sondy používány řádově dny. Pokud by v budoucnu mělo dojít k opravám či intenzifikacím na těchto sondách, bude nutno provést naladění parametrů jejich přípojek znovu, na základě širšího rozsahu režimů sondy.

Chybějící měření tlaku na konci přípojky

Na některých PZP, jejichž modely byly vytvářeny a laděny, není instalováno měření tlaku na vstupu přípojek sond resp. sběrných středisek do střediska resp. areálu, k dispozici jsou pouze měření hodnot tlaku na společných kolektorech.

Tuto skutečnost je nutno považovat za poměrně závažný nedostatek instalovaných technologií, který by měl být při jejich nejbližší rekonstrukci odstraněn.

V těchto případech je naladění ztrát na přípojkách obtížnější, neboť tlaková ztráta mezi ústím sondy a společným kolektorem je součtem ztráty na přípojce a ztráty na regulačním ventilu.

Tlakovou ztrátu na regulačním ventilu je obtížné v programu Pipesim postihnout, neboť jak již bylo zmíněno výše, programu doposud chybí vhodný předdefinovaný prvek.

Pokud se v provozní historii sondy najde dostatek situací, kdy byl regulační ventil otevřen na 100%, můžeme ztráty na přípojce ladit výše uvede-

ným postupem. Jedinou změnou je zavedení buď clony nebo zúžení potrubí takového, aby odpovídalo průtočnému průřezu plně otevřeného regulačního ventilu.

Plné otevření sond se však používá většinou až na konci těžební sezóny, takže zpravidla není možno z provozní historie těžby získat údaje o tlakových ztrátách při vyšších tlacích. Pomoci může etapa vtlačení, kdy jsou plná otevření ventilů používána často, potom je ovšem nutno změnit v modelu směr proudění v dané přípojce a namísto teploty na ústí používat teplotu na kolektoru.

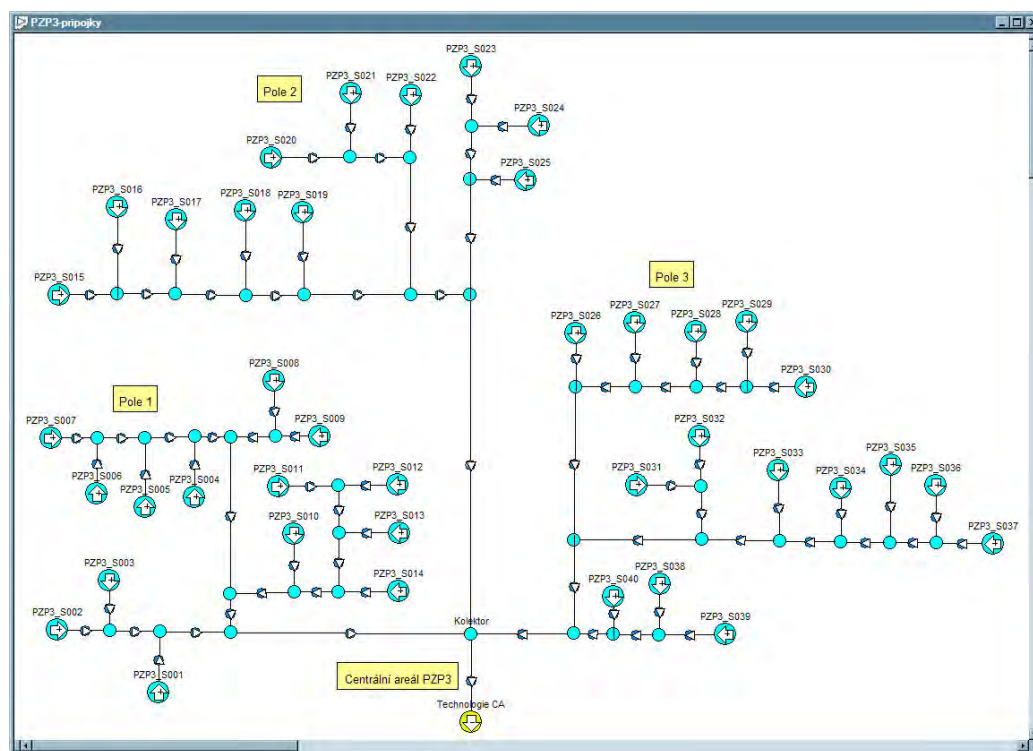
Jestliže ani z vtlačecí sezóny není k dispozici dostatek dat pro naladění ztráty na přípojce, musíme provést odhad ztráty na regulačním ventilu. Dokumentace výrobce ventilu zpravidla obsahuje hodnoty průtokových koeficientů, ze kterých může být tlaková ztráta na ventilu vypočtena vztahem 4.2 uvedeným v oddíle 4.6.1. Toto je ovšem teoretická hodnota tlakové ztráty na ventilu, nainstalovaný ventil může mít charakteristiku značně odlišnou. Skutečné charakteristiky regulačních ventilů nebyly na PZP RWE Transgas měřeny, proto při ladění modelu musíme vycházet z charakteristik teoretických.

Technologické prvky instalované na přípojce

Situace se podobá výše popsanému případu. Na přípojce je instalován technologický uzel (zpravidla předehřev plynu a separátor), tlak je měřen až za tímto uzlem, tlaková ztráta přípojky jako celku je dána součtem ztrát potrubí a technologického uzlu. Počáteční nastavení tlakové ztráty vychází z technických parametrů uzlu (výkon, výstupní teplota, nejmenší průtočný průřez, atp.), toto však musí být dále laděno. S výhodou lze využít toho, že technologické uzly na většině přípojek daného PZP bývají totožné.

4.3.3 Ladění tlakových ztrát na přípojkách sond pro PZP se stromovou strukturou

Stromovou strukturou plynovodní sítě rozumíme takové uspořádání, kdy se přípojky sond postupně spojují a do sběrného střediska či centrálního areálu vstupuje buď pouze jeden plynovod nebo společný plynovod pro každé těžební pole. Ukázka modelu PZP se stromovou strukturou plynovodní sítě je na obrázku 4.8.



Obrázek 4.8: Stromová síť plynovodů PZP.

Výhodou tohoto uspořádání jsou nižší investiční náklady na výstavbu PZP, nevýhodou potom obtížnější regulace a údržba. Z hlediska ladění modelů nadzemních technologií v programu Pipesim se jedná o komplikovaný problém, který doposud nebyl úspěšně vyřešen a je pravděpodobné, že řešením bude až nasazení některé z budoucích verzí programu, ve které bude k dispozici prvek reprezentující regulační ventil.

Z hlediska ladění modelů platí pro všechny PZP se stromovou strukturou, na kterých byl implementován ES platí následující:

- Jsou měřeny tlak a teplota plynu na ústích sond.
- Je měřen výkon sond.
- Jsou měřeny tlak a teplota na společném kolektoru.
- Nejsou měřeny tlaky v žádných dalších místech sítě sběrných plynovodů.

- Regulační ventily jsou umístěny na sondách, těsně za měřeními tlaku, teploty a výkonu.
- Jsou k dispozici hodnoty otevření regulačních ventilů v průběhu těžby.

První tři kroky procesu ladění, tedy sběr dat, přepočet výkonu a oprava měření tlaků jsou shodné jako u výše popsaných PZP s vějířovitou strukturou.

Výběr dat pro ladění

Vlastní ladění je nutno provádět nikoliv po sondách, jako v předchozím případě, ale po jednotlivých větvích vycházejících ze společného kolektoru. Tomu je přizpůsoben i výběr dat pro ladění. Vzhledem k obtížnému modelování tlakové ztráty na regulačních ventilech je vhodné začít ladění na takové situaci, kdy jsou všechny sondy dané větve v jednom ze dvou extrémních stavů, tj. buď plně otevření regulačního ventilu nebo je sonda uzavřena.

Nejvhodnější data pro ladění tohoto typu PZP by mohla být získána z období, ve kterém je prováděno testování sond, neboť při testu na sondě jsou všechny sondy mimo testované uzavřeny. Tím se situace do značné míry podobá ladění přípojek PZP s vějířovitou strukturou. Bohužel, při testech sond byl doposud vždy vypnut SCADA systém PZP, proto tato data nejsou k dispozici.

Vlastní ladění modelu

Existují-li výše popsané stavy větve s plně otevřenými a nebo zavřenými sondami, můžeme provést základní naladění parametrů plynovodů modelu dané větve dle následujícího postupu:

1. Pro každý z vybraných stavů z provozní historie provedeme následující.
2. Na všech otevřených sondách (tj. vstupních uzlech modelu) nastavíme okrajovou podmínku typu „tok“ s hodnotou výkonu v daném okamžiku, na výstupu modelu potom podmínku „tlak“. Uzavřené sondy v modelu vypneme. Spustíme výpočet, prověříme že proběhne a nedojde ke zpětnému toku v některých přípojkách sond.
3. Postupujeme strukturou dané větve směrem od společného kolektoru k topologicky nejvzdálenější sondě. Pro každou sondu provedeme tyto kroky:

- (a) Změníme typ okrajové podmínky dané sondy na typ „tlak“ a předepíšeme změřenou hodnotu tlaku na ústí dané sondy.
 - (b) Opakovaně spouštíme model a změnou parametru drsnosti potrubí se snažíme dosáhnout shody mezi simulovaným a změřeným výkonem sondy. Přednostně přitom upravujeme parametry potrubí v blízkosti dané sondy a těch úseků, které jsou významnější z hlediska tlakových ztrát. Na tomto místě poznamenejme, že díky více potrubním úsekům nacházejících se mezi kolektorem a sondou není naladění dosažené v tomto bodě jednoznačné a může být měněno.
 - (c) Pokud nelze dosáhnout shody výkonů pomocí parametru drsnosti, můžeme mírně upravit míru zvlnění potrubí, případně přejít od zjednodušeného k detailnímu popisu výškového profilu potrubí.
 - (d) Pokud zavedení tlakové okrajové podmínky na jedné sondě významně ovlivní průtok některou již naladěnou sondou, je nutno provést úpravy parametrů potrubí společného pro obě sondy.
 - (e) Pokud dojde k významné změně parametrů některého již naladěného potrubního úseku, je nutno provést ladění příslušných sond znovu s touto novou hodnotou daného úseku.
4. Vykonáním bodu 3. pro všechny sondy je nakonec dosaženo stavu, kdy je na všech aktivních vstupních uzlech modelu (tj. na všech momentálně otevřených sondách dané větve) okrajová podmínka typu „tlak“ a přitom souhlasí simulované a měřené výkony.

Tímto procesem, který může být časově náročný, postupně odladíme parametry těch plynovodů, které byly v daných časových okamžicích aktivní. Poznamenejme, že není vhodné se snažit dosáhnout přesné shody v jednom okamžiku, neboť takto naladěný model pro jiný vybraný okamžik zpravidla poskytne velmi neuspokojivé výsledky. Raději je vhodné přijmout horší shodu výsledků ale platnou ve více okamžicích.

Bohužel, v provozní historii PZP se zpravidla nenajde dostatek stavů požadovaných pro tento způsob ladění, parametry některých potrubí zůstanou nenaladěny. Potom je nutno použít alespoň teoretickou charakteristiku regulačních ventilů, odhadnout příslušné tlakové ztráty a pokusit se na dalších stavech z historie provozu PZP odladit tato potrubí.

Vyhodnocení ladění modelu

Naladění modelu přípojek sond PZP výše uvedeným postupem je asi nejlepší možné, které lze s dostupnými prostředky a daty docílit, ovšem zdaleka to není naladění optimální. Při testování takto naladěných modelů na jiné situace z provozní historie než ty, na kterých bylo prováděno ladění, byly zjištěny vážné nesoulady mezi výsledky simulace a realitou. V některých případech dokonce došlo v modelu k tzv. „přetlačení sond“, tedy situaci, kdy některé sondy těží, jiné vtlačí.

Pro lepší naladění modelů nadzemních technologií PZP se stromovitou strukturou by bylo vhodné provést následující:

- Při příštím provádění testů sond nevypínat SCADA systém, naopak věnovat jeho správné funkci zvýšenou pozornost. Případně dočasně instalovat snímače tlaku, za regulační ventily na sondách.
- Provést měření skutečných průtokových charakteristik regulačních ventilů.

4.3.4 Ladění tlakových ztrát na technologických celcích PZP

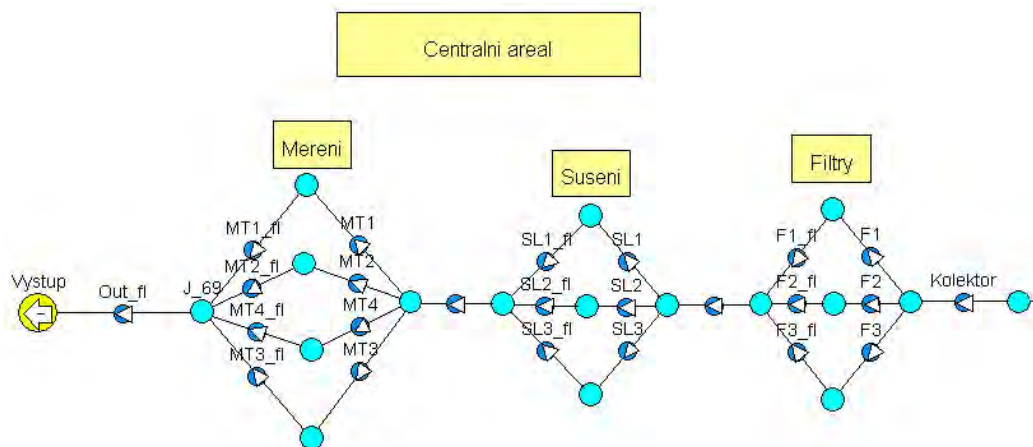
V centrálních areálech a sběrných střediscích PZP jsou hlavní změny tlaků a teplot plynu způsobeny technologickými celky. Tlaková ztráta v potrubích je zde zanedbatelná vůči ztrátám v technologických prvcích, neboť potrubí jsou krátká a dostatečně dimenzovaná.

Pro technologie, kde je změna stavu plynu dána parametry daného zařízení (kompresory, přehřevy plynu, separátory) zadáme tyto parametry přímo do příslušných modelů zařízení nabízených jako předdefinované prvky programu Pipesim.

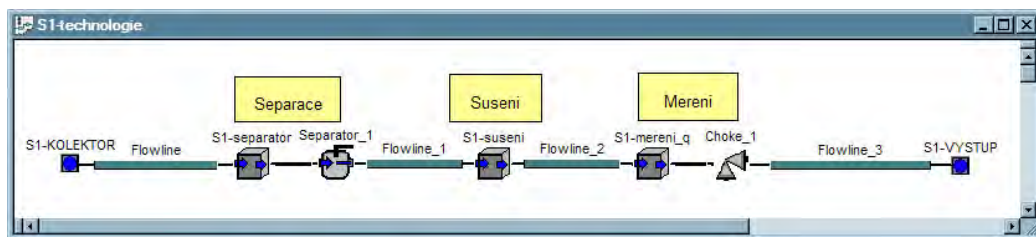
Na většině zařízení však dochází ke tlakovým ztrátám, které nejsou takto jednoduše popsatelné a potom je třeba provést ladění parametrů.

Existuje-li více paralelních větví technologie, jak je ukázáno na obrázku 4.9, ladíme každou větev zvlášť. Větve, které obsahují sériově zapojené technologické prvky, např. tak, jak je ukázáno na obrázku 4.10, dělíme na jednotlivé prvky, které potom odlaďujeme. Kritériem pro toto dělení jsou nainstalovaná měření tlaku, teploty a průtoků.

K tomu, abychom mohli provést ladění je nutno měřit průtok plynu daným prvkem, tlaky na vstupu a na výstupu prvku a teplotu plynu na vstupu.



Obrázek 4.9: Model technologie s paralelními větvemi.



Obrázek 4.10: Model větve se sériově zapojenými technologickými celky

Jsou-li tato měření k dispozici, postup ladění je obdobný postupu ladění ztrát na přípojkách sond PZP s vějířovitou strukturou sítě plynovodů.

Provedeme tedy sběr dat, jejich vyčištění, případnou kalibraci manometrů a výběr vhodných okamžiků pro ladění. Opět je vhodné vybrat pro ladění co nejširší rozpětí tlaků a průtoků. Vlastní ladění probíhá změnou vybraného parametru (např. tlaková změna na obecném zařízení, průměr clony, atp.) se snahou o dosažení shody měřeného a simulovaného tlaku na výstupu.

Celkově můžeme říci, že na všech PZP nepředstavovalo ladění tlakových ztrát na technologických celcích vážnější problém, vhodné hodnoty parametrů se téměř vždy podařilo najít a docílit akceptovatelné shody mezi výsledky simulací a měřeními.

4.4 Metodika tvorby modelů režimu vtlačení

Modely technologií vtlačení byly v průběhu implementace ES odvozovány z modelů těžby, vytvořených postupem popsáným v oddíle 4.2 a odladěných postupem popsáným v oddíle 4.3.

Nutnost oddělení modelů pro režim těžby a režim vtlačení je dána různými technologiemi, kterými plyn v těchto režimech prochází. Při vtlačení nejsou zařazeny technologie sušení a separace, v režimu těžby není na některých PZP používána filtrace atp. Principiálně by bylo možné vytvořit jediný model obsahující paralelní větve pro oba režimy, avšak obsluha takového modelu by byla náročnější (vypínání/zapínání) větví než obsluha dvou oddělených modelů.

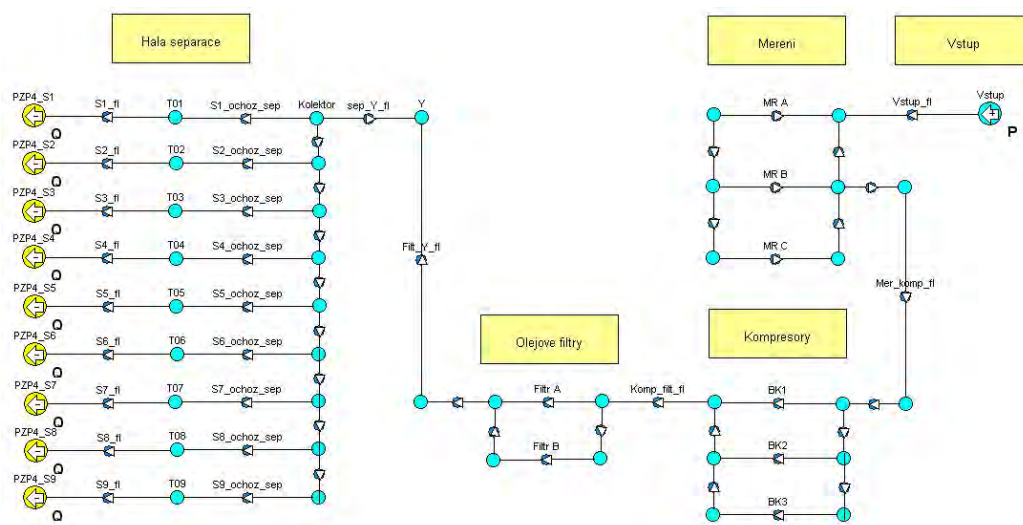
Odvození modelu vtlačení probíhalo v následujících krocích:

- Záměna zdrojů plynu za koncové body modelu a naopak.
- Nahrazení potrubních větví se separátory potrubími s průměrem příslušných ochozů.
- Vyřazení sušících linek z modelů.
- Přidání kompresorů a olejových filtrů.
- Nastavení parametrů vtlačecích kompresorů, jsou-li na daném PZP instalovány.

Kompresory byly definovány výstupním tlakem, který je volen operátorem PZP na základě aktuálního stavu ložiska. Příklad modelu vtlačení je na obrázku 4.11.

Samotné vytvoření modelu vtlačení nepředstavovalo vážnější problém. Naproti tomu jeho naladění bylo obtížné a problematické. Důvodem je již výše zmíněná nemožnost zohlednit a postihnout ve stávající verzisystému Pipesim regulační ventily.

Další problém vyvstal při upgradu programu Pipesim na verzi 2007.1. Výpočetní jádro této verze bylo zásadním způsobem přepracováno oproti předchozím verzím. Praktickým důsledkem je nemožnost nadále charakterizovat kompresor jeho výstupním tlakem v síťovém modelu. Jelikož podrobný model vtlačecích kompresorů a způsobu jejich provozu na PZP (regulace jednotlivých válců každého kompresoru) je mimo současné možnosti programu



Obrázek 4.11: Model vtláčení

Pipesim, bylo nutno provést zjednodušení modelu tak, jak je ukázáno na obrázku 4.12.

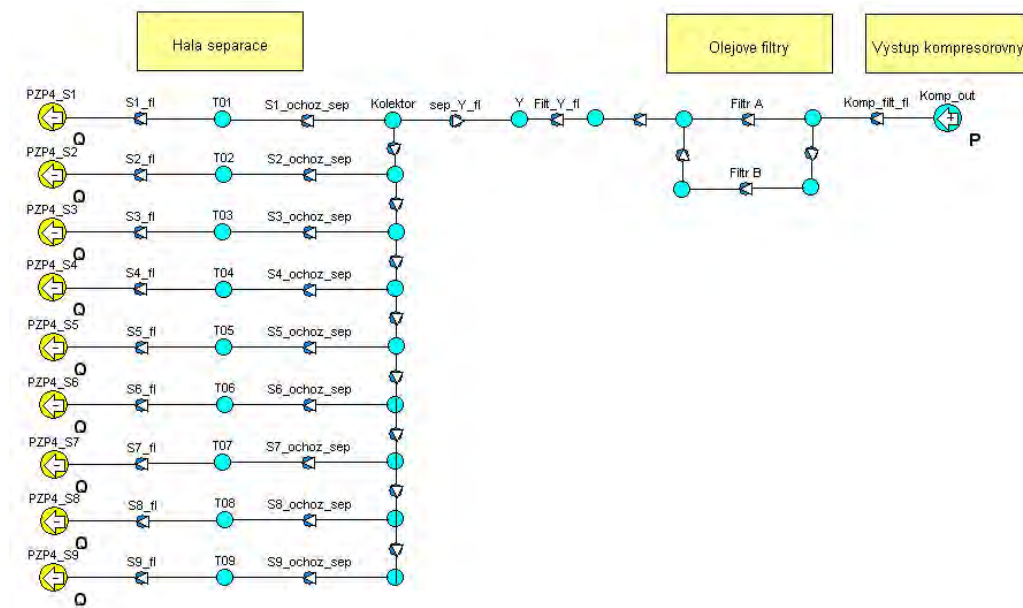
Z modelů byly vyloučeny měřicí tratě a kompresory, vstupním bodem je výstup kompresorovny, kde je předepsána okrajová podmínka výstupní tlak.

4.5 Sdružená simulace ložiska a technologie

V předchozím textu kapitoly jsme popsali proces tvorby a ladění modelů nadzemních technologií PZP pro nasazení v budovaném ES. Tyto modely však v ES nejsou používány samostatně, ale pro sdruženou simulaci ložiska a technologie. V tomto oddíle popíšeme nejprve vlastnosti programu R2SL, který byl pro propojení modelů použit a poté postup při tvorbě sdruženého modelu a v závěru oddílu shrneme získané zkušenosti a vyvodíme z nich závěry.

4.5.1 Program R2SL

R2SL (Reservoir To Surface Link) je samostatný program vyvíjený firmou SIS pro propojení simulátorů ložiska a simulátorů nadzemních technologií. Následně je řešena sdružená simulace, která umožňuje optimalizaci těžby



Obrázek 4.12: Model vtláčení po úpravě pro Pipesim v. 2007.1.

z pohledu ložiskového inženýrství avšak při respektování omezení plynoucích z technologie instalované v nadzemní části ložiska či, v našem případě, PZP.

Z dnešního pohledu můžeme říci, že se jedná o jakýsi vývojový mezystupeň mezi dnes již nepodporovanými nadstavbami „Network“ a „Reservoir coupling“ programu Eclipse a soudobým produktem Avocet Integrated Asset Modeler. Z tohoto důvodu již program R2SL není intenzivně vyvíjen, nová vydání většinou pouze opravují známé chyby. V roce 2004 však neexistovalo lepší řešení pro sdružení simulací a z tohoto důvodu byl program do ES zakoupen.

R2SL umožňuje propojit obecně libovolný počet ložiskových a povrchových simulací. Model ložiska může být buď numerická simulace v programu Eclipse nebo materiálová bilance nebo PVT tabulka. Jako simulátor nadzemí může být použit buď Pipesim nebo GAP. Jelikož pro nasazení v ES byly použity programy Pipesim a Eclipse, zaměříme se v dalším popisu na tyto programy.

Ovládání programu vychází z logiky programu Eclipse, tedy řízení klíčovými slovy v datovém souboru. Bohužel klíčová slova R2SL a ECLIPSE jsou často totožná, v některých případech je chování daného klíčového slova

v obou programech shodné, v jiných mírně odlišné, což činí ladění a automatizovaný běh sdruženého modelu dosti obtížným.

V řídicím souboru programu R2SL jsou obsaženy tyto hlavní informace:

1. Definice modelů.
2. Definice způsobu propojení modelů a mapování sond modelů podzemí a nadzemí.
3. Definice těžebního scénáře.

První z uvedených bodů není nutno obsáhle komentovat. Pomocí klíčového slova **TASKSPEC** definujeme počet sdružených simulací, jejich typ umístění příslušných souborů v souborovém systému a parametry běhu těchto modelů.

Propojení modelů může být provedeno buď na ústí vrtů, kdy model ložiska obsahuje tzv. VFP (Vertical Flow Performance) tabulky a nebo na dně vrtů, pokud model nadzemních technologií obsahuje příslušné stupačky. Mapování sond mezi modely může být buď automatické, pokud sonda má shodné jméno v obou modelech nebo ruční, kdy do datového souboru zadáme informace o příslušném propojení.

Definice těžebního scénáře je obvykle nejkomplikovanější a také nejdelší částí řídicího souboru souboru. Možnosti jsou zde značně široké, mezi nejdůležitější patří:

- Definice časových kroků pomocí klíčových slov **DATE** a **TSTEP**. Pro korektní běh sdružené simulace je nutné, aby časové kroky simulace byly v řídicích souborech pro R2SL a Eclipse definovány shodně. Pro nasazení v ES je nevýhodou, že zatímco Eclipse umožňuje pomocí klíčového slova **TSTEP** zadávat libovolné délky časového kroku, program R2SL připouští pouze celočíselné hodnoty, což znamená, že nejkratším možným obdobím pro sdruženou simulaci je jeden den.
- Definice těžených či vtláčených množství. K dispozici je stejná sada klíčových slov jakou má program Eclipse, tj. definice výkonů či limitů vztažená na sondu, skupinu sond či celé pole.
- Definice aktivních větví povrchové technologie, jejich zapínání a vypínání, změna parametrů technologických uzlů, definice limitů povrchové technologie, okrajových podmínek.

- Definice podmínek a podmíněných akcí. Jedná se o potenciálně velice silný nástroj, avšak jeho funkčnost nebyla prozatím plně odladěna, použití je značně komplikované a výsledky často nepředvídatelné.

Při běhu provádí program R2SL v každém časovém kroku iteraci, pomocí které hledá optimální rozložení výkonu mezi sondy tak, jak to umožňují omezení plynoucí z parametrů povrchové technologie.

4.5.2 Sdružování simulací pro ES

Pokud existují modely ložiska a modely technologie, je jejich sdružení poměrně snadnou úlohou. Je nutno rozhodnout, zdali budou modely spojeny na ústí či na dně vrtů a jestli bude použito automatické či ruční mapování sond. Pro účely ES bylo použito automatické mapování a spojení modelů na ústích sond, neboť vytvořené modely ložiskových objektů mají definovány VFP tabulky, které se pravidelně aktualizují na základě výsledků provedených testů na sondách.

Pro některé PZP bylo potřeba provést následující úpravu modelu nadzemní technologie: Mezi každý prvek typu „Zdroj“, který reprezentuje sondu a z něho vycházející potrubí přidat prvek „Separátor“ a nastavit jeho účinnost dle poměru skutečně vynesené vody ku modelem ložiska vypočtenému výnosu. Některé používané modely ložiskových objektů nejsou naladěny z hlediska výnosu vody a dosáhnout tohoto naladění je obtížné. Výsledkem je řádově vyšší výnos vody počítaný modelem než skutečně pozorovaný výnos. Příslušné VFP tabulky jsou patřičně upraveny, ovšem pokud bychom nepřidali tyto separátory, model nadzemní technologie by počítal se špatně definovaným modelem tekutiny.

Definice těžebního scénáře se liší dle účelu simulace. Běh sdružené úlohy je časově velmi náročný — výpočet jednoho dne na použité pracovní stanici trvá zhruba pět až patnáct minut v závislosti na tom, o jaký PZP se jedná a v jakém se tento zásobník nachází stavu a v některých případech není řešení nalezeno. Proto bylo rozhodnuto používat sdružený model jako „kontrolní“. Těžební scénář pro množství plynu požadované na následující plynárenský den je nejprve navržen pouze ložiskovým simulátorem. Poté proběhne výpočet sdruženého modelu dle daného návrhu a je prověřeno, zdali je tento návrh možný i z hlediska nadzemní technologie.

Problematická situace při tvorbě sdružených modelů nastala u těch PZP, které se skládají z více než jednoho ložiskového objektu a pro které tudíž

existuje více modelů podzemní části. Program R2SL sice umožňuje sdružit (teoreticky) libovolný počet simulací, ovšem při běhu takto sdruženého modelu jsou všechny tyto simulace spuštěny současně. To je jednak náročné na výpočetní výkon a paměť počítače, ovšem také musí být k dispozici tolik licencí příslušných programů, kolik je sdružených modelů. Toto kritérium nebylo splněno a proto muselo být hledáno náhradní řešení. Uvažovány byly následující možnosti:

- Použít modul „Reservoir Coupling“ programu Eclipse, čímž by bylo možno poměrně snadno a elegantně sdružit všechny Eclipsovské simulace PZP do jediné. Toto řešení však není možné, neboť uvedený modul již není společností SIS nabízen.
- Nahradit méně významné ložiskové objekty modelem materiálové bilance či pouze PVT tabulkou. Tím by však byla degradována funkčnost takového modelu především z hlediska ložiskové optimalizace.
- Vytvořit tolik sdružených simulací, kolik je ložiskových objektů a tyto spouštět postupně v pořadí od nejvýznamnějšího objektu k objektu nejméně významnému a používat výsledky předchozích simulací jako okrajové podmínky simulací spouštěných později. Toto řešení je lepší než předchozí, ovšem jen částečně, stále chybí možnost plné optimalizace, neboť je nutno apriorně stanovit rozdělení požadovaného výkonu PZP mezi jednotlivé objekty a toto apriorní rozdělení nemusí být nejlepší možné. Toto řešení je komplikované také z hlediska předávání dat a řízení postupných simulací.
- Spojit ložiskové simulace do jediné spojením jejich sítí.

Nakonec bylo pro PZP složené z více objektů použito poslední řešení, které je ovšem velmi pracné z hlediska přípravy modelu. Je nutno provést prostorové spojení sítí, sjednocení časových kroků, sjednocení akviferů a přepočítat provozní historii v nových časových krocích. Také z hlediska údržby a aktualizace je takovýto rozsáhlý model méně výhodný než několik menších modelů. Také nároky na čas a paměť počítače prudce vzrůstají.

4.5.3 Problémy sdružených simulací

Při vytváření sdružených modelů bylo samozřejmě prováděno jejich testování na historických datech. Ve většině případů dopadly tyto testy neúspěšně,

scénáře nalezené programem R2SL se významně lišily od reálných situací.

Příčina tohoto stavu již byla v této kapitole několikrát zmíněna, a sice absence vhodné reprezentace regulačního ventilu v programu Pipesim. Z hlediska ladění modelů nadzemních technologií se jedná o pouhou komplikaci, která činí naladění tlakových ztrát na přípojkách obtížnější a pracnější, z hlediska sdružené simulace jde o problém zcela zásadní.

Byla hledány a testovány dvě možnosti řešení, které ve stručnosti představíme.

- Náhrada regulačních ventilů clonami. Toto řešení by pro automatizovaný běh vyžadovalo vytvoření externího programu, který na základě teoretických průtokových charakteristik najde odpovídající průměry clon a pomocí klíčového slova *NETCHOK*e zavede tyto průměry do modelu nadzemní technologie. Řešení bez externího programu, pouze za pomoci možnosti podmíněných akcí programu R2SL se ukázalo jako ne realizovatelné kvůli omezeným možnostem programovatelnosti R2SL.
- Náhrada regulačních ventilů expanderu. Představuje vhodné a funkční řešení pro ruční spouštění modelů PZP s vějířovitou strukturou sběrných plynovodů. Na konec přípojek sond přidáme prvek „Expander“, kterému jako parametr zadáme apriorně stanovený požadovaný tlak na společném kolektoru. Právě toto apriorní stanovení tlaku je překážkou pro automatizaci tohoto způsobu náhrady regulačních ventilů. Tuto překážku by bylo možno překonat, avšak příchod Pipesimu verze 2007.1 znemožnil dále v síťovém modelu definovat expander výstupním tlakem.

Jelikož ani jedno řešení nebylo pro sdruženou simulaci vhodné, byl celý problém konzultován s vývojářským týmem programů R2SL a Pipesim. Výsledkem těchto konzultací byl příslib zavést prvek „Regulační ventil“ do některé z budoucích verzí Pipesimu a možnost jeho řízení i z programu R2SL, ovšem se současnými verzemi obou programů není řešení takovéto úlohy možné.

4.6 Program RegSim

V předchozím textu byla opakovaně zmíněna nemožnost reprezentace prvku typu „Regulační ventil“ a hlavně tlakové změny na něm pomocí prostředků

programu Pipesim. Tato vlastnost brání plnému nasazení vytvořených a odladěných modelů nadzemních technologií a sdružených modelů podzemí a nadzemí do ES. Protože nebylo možno čekat na doplnění požadované funkčnosti do programu Pipesim, bylo rozhodnuto o vývoji vlastní aplikace, nazvané „RegSim“, která prozatím převeze roli programů R2SL a Pipesim v ES. Návrh a implementace této aplikace a jejích algoritmů je společným dílem autora předkládané habilitační práce a Mgr. Miroslava Dresslera, PhD.

4.6.1 Tlakové ztráty v nadzemních technologiích

Tlakové ztráty v nadzemních technologiích PZP můžeme rozdělit do tří skupin:

1. Pasivní ztráty v potrubích.
2. Pasivní ztráty na technologických celcích.
3. Aktivní ztráty na regulačních ventilech.

Analyzujeme nyní tyto ztráty podrobněji.

Ztráty v potrubích

V [1] je uveden následující vztah, ze kterého lze určit tlakovou ztrátu plynu na potrubním úseku:

$$p_1^2 - p_2^2 = 46.472cGLD^{-4.82}Q^{1.82} + \Delta p_h^2, \quad (4.1)$$

kde:

- p_1 je tlak na počátku potrubí [bar],
- p_2 je tlak na konci potrubí [bar],
- c je koeficient vyjadřující vliv tření v potrubí [1],
- G je relativní hustota plynu [1],
- L je délka potrubí [m],
- D je vnitřní průměr potrubí [mm],

- Q je objemová rychlost proudění [m^3/hod] a
- Δp_h je tlaková ztráta v důsledku převýšení potrubí [bar].

Relativní hustota plynu se definuje vztahem:

$$G = \frac{\varrho_g}{\varrho_A},$$

kde ϱ_g je hustota daného plynu [kg/m^3] za standardních podmínek ($p = 101325 \text{ Pa}$, $T = 288 \text{ K}$) a ϱ_A je hustota vzduchu za standardních podmínek, která má hodnotu $1.226 \text{ kg}/\text{m}^3$.

Vztah 4.1 není natolik přesný jako korelace používané programem Pipesim, neboť nezahrnuje vliv změn teploty a výměny tepla mezi potrubím a jeho okolím a detailní popis výškového profilu je obtížný, vyžaduje rozdělení potrubního úseku na stoupající a klesající segmenty. Také rozsah tlaků a rychlostí proudění, pro které tento vztah platí je užší. Ovšem testy na provozních datech a srovnáním s programem Pipesim bylo ověřeno, že pro podmínky PZP na nichž byl ES implementován, je přesnost tohoto vztahu vyhovující.

Ztráty na technologických celcích

Obecně můžeme říci že tlakové ztráty na technologiích sušení, měření, separace a filtrace závisí na vstupním tlaku a teplotě daného technologického prvku a na protékajícím množství plynu. Tato závislost je obecně nelineární a je obtížné ji postihnout jednoduchým vztahem obdobným rovnici 4.1. Nicméně vzhledem k dostatečnému množství provozních dat v databázi ES je možno pomocí vhodné interpolace najít pro okamžité hodnoty p , Q a T dostatečně přesnou aproximaci hodnoty tlakové ztráty na daném technologickém uzlu.

Ztráty na regulačních ventilech

Zatímco dva výše popsané typy tlakových ztrát můžeme označit jako *pasivní*, tlaková ztráta na regulačním ventilu je naopak *aktivní*. Zatímco ztráty tlaku v potrubích a v technologiích jsou svým charakterem nežádoucí a snažíme se je minimalizovat, tlaková ztráta na regulačním ventilu je měněna z vnějšku, účelově, proto aby bylo dosaženo žádaného tlaku na výstupu či průtoku.

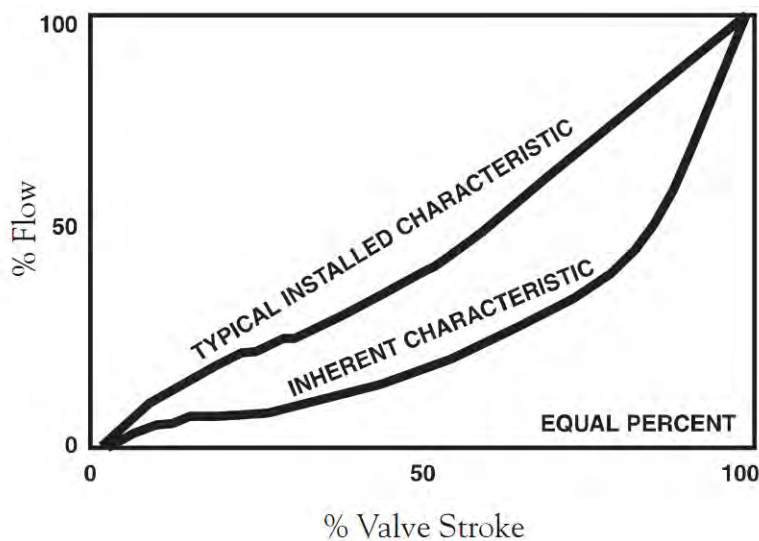
Tlakovou změnu na regulačním ventilu popisujeme vztahem převzatým z [19]:

$$\Delta p_v(o) = \frac{T G Z}{p} \left(\frac{Q}{c_v(o)} \right)^2, \quad (4.2)$$

kde:

- T je absolutní teplota plynu na vstupu [K],
- G je relativní hustota plynu [1],
- Z je faktor kompresibility [1],
- p je vstupní tlak [bar],
- Q je objemová rychlost proudění [sm³/hod],
- c_v je průtoková charakteristika ventilu [1] a
- o je otevření ventilu (0-100%) [%].

Ukázka typického tvaru a průběhu závislosti c_v na o je na obrázku 4.13.



Obrázek 4.13: Teoretická a skutečná (instalovaná) rovnoprocentní průtoková charakteristika regulačního ventilu.

Poznamenejme, že takováto průtoková charakteristika dodávaná výrobcem je sestavena na základě výsledků laboratorních měření. Skutečná charakteristika instalovaného ventilu může být od této značně odlišná, neboť technologická zařízení, kolena, příruby atp. instalovaná v okolí konkrétního ventilu mají na jeho chování a funkci významný vliv.

Se znalostí výše popsanych závislostí bylo možno přistoupit k návrhu programu RegSim, jehož základní algoritmy nyní představíme. Ve skutečnosti bylo vytvořeno pět verzí tohoto programu, pro každý PZP jedna, přizpůsobená struktuře daného zásobníku a obsahující jeho charakteristiky. Použité algoritmy se liší dle topologické struktury PZP.

4.6.2 PZP s vějířovitou strukturou přípojek

Vějířovitou strukturu jsme definovali a ukázali v oddíle 4.3.2. Také v případě programu RegSim je tento případ jednodušší z obou možných.

Program RegSim do značné míry kopíruje funkci řídicího systému PZP v oblasti otevírání regulačních ventilů, ovšem s tím rozdílem, že zatímco řídicí systém pracuje s měřenými hodnotami, na které reaguje, program RegSim celý proces regulace simuluje. Základním principem je, že pro daný výkon PZP či sběrného střediska je hledána taková kombinace otevření regulačních ventilů, kdy alespoň jeden z ventilů je otevřen na 100%.

Algoritmus řešení je následující:

Vstupní data: Aktuální stav ložiska, aktuální stav technologií (vyřazené sondy/potrubí), požadovaný výkon PZP pro následující plynárenský den Q_C a předávací tlak plynu na výstupu PZP p_P .

Výstupní data: Návrh výkonu každé sondy Q_i , návrh procenta otevření všech regulačních ventilů tj. ventilů sond o_i , středisek o_j a centrální regulace PZP o_P .

Algoritmus:

1. Pomocí ložiskového simulátoru Eclipse vypočteme návrh rozložení požadovaného výkonu mezi produkční sondy. Tím dostaneme pro každou sondu i dynamický tlak plynu na ústí p_{U_i} a výkon Q_i .

2. Při znalosti parametrů potrubí a případně též znalosti tlakové ztráty technologických prvků instalovaných na přípojce vypočteme pomocí vztahu 4.1 a interpolací provozních dat hodnotu tlaku na konci každé přípojky p_{Ei} .
3. Hodnotu p_{Ei} snížíme o velikost tlakové ztráty na plně otevřeném regulačním ventilu dané přípojky vypočtené dle vztahu 4.2 a příslušné průtokové charakteristiky. Tím dostaneme pro každou sondu maximální hodnotu tlaku společného kolektoru sondě příslušného sběrného střediska p_{Ci} , pro kterou je tato sonda schopna těžit požadované množství.
4. Pro každé sběrné středisko j najdeme minimum hodnot p_{Ci} , které označíme p_{maxj} což je nejvyšší hodnota kolektorového tlaku střediska j , pro kterou lze navržený režim provozovat.
5. Na základě p_{maxj} , p_{Ei} , a Q_i vypočteme pomocí vztahu 4.2 a průtokových charakteristik požadovaná otevření regulačních ventilů sond o_i .
6. Opakujeme body 2–4 pro přípojky sběrných středisek do centrálního areálu. Výsledkem je maximální tlak společného kolektoru středisek p_{maxC} a otevření regulačních ventilů přípojek sběrných středisek o_j .
7. Vypočteme tlakovou ztrátu potrubí a technologických celků mezi společným kolektorem centrálního areálu a předávacím místem PZP pro případ plného otevření centrální regulace. Tím dostaneme maximální předávací tlak p_{maxP} , pro který je PZP schopen těžit v navrženém režimu sond.
8. Porovnáme hodnoty p_{maxP} a p_P . Je-li $p_{maxP} > p_P$, určíme procento otevření centrální regulace o_P a hodnoty q_i , o_i , o_j a o_P jsou výstupem algoritmu, program ukončí činnost.
9. Pokud $p_{maxP} < p_P$ vyřadíme sondy s nejvyšší tlakovou ztrátou a opakujeme výpočet od bodu 1. Pokud po vyřazení sond není PZP schopen dosáhnout požadovaného Q_C , program se ukončí a sdělí tuto skutečnost.

Názorná ukázka postupu výpočtu na příkladě s konkrétními hodnotami je na obrázku 4.14.

4.6.3 PZP se stromovou strukturou přípojek

Stromovou strukturu přípojek sond jsme definovali a ukázali v oddíle 4.3.3. Algoritmus programu RegSim pro tento případ je následující:

Vstupní data: Aktuální stav ložiska, aktuální stav technologií (vyřazené sondy/potrubí), požadovaný výkon PZP pro následující plynárenský den Q_C a předávací tlak plynu na výstupu PZP p_P .

Výstupní data: Návrh výkonu každé sondy Q_i , návrh procenta otevření všech ventilů sond o_i a centrální regulace PZP o_P .

Algoritmus:

1. Pomocí ložiskového simulátoru Eclipse vypočteme návrh rozložení požadovaného výkonu mezi produkční sondy. Tím dostaneme pro každou sondu i dynamický tlak plynu na ústí p_{Ui} a výkon Q_i .
2. Postupujeme stromovou strukturou plynovodní sítě směrem od sond ke společnému kolektoru a počítáme tlakové ztráty potrubí a případných technologických prvků.
 - (a) Pokud potrubní úsek začíná sondou, použijeme pro výpočet navržený tlak na ústí a navržený výkon.
 - (b) Pokud potrubní úsek začíná spojením dvou potrubí, musí být již tlakové ztráty na obou těchto potrubích vypočteny. Potom pro tento úsek vezmeme nižší z obou tlaků spojujících se potrubí a průtok jako součet obou průtoků.
 - (c) Pokud ve spojení potrubí dosud nejsou známy oba potřebné tlaky a průtoky, přejdeme k takovému potrubí výše ve stromové struktuře, pro které můžeme tlakové ztráty vypočítat.

Výsledkem je první návrh maximálního kolektorového tlaku p_{max1} .

3. Postupujeme stromovou strukturou sítě zpět od kolektoru k sondám, tlakové ztráty nyní přičítáme. Na jedné sondě dojde k rovnosti původně navrženého tlaku a tlaku vypočteného tímto zpětným chodem. Tato sonda bude otevřena na 100%. Na dané sondě vypočítáme tlakovou ztrátu jejího plně otevřeného regulačního ventilu, kterou odečteme

od p_{C1} , čímž dostaneme maximální kolektorový tlak p_{max} pro daný požadovaný výkon.

4. Pro hodnotu p_{max} zopakujeme zpětný chod výpočtu tlakových změn od kolektoru k sondám. Výsledkem jsou požadované hodnoty tlaku za regulačními ventily sond p_{Ri} .
5. Z hodnot p_{Ui} , Q_i a p_{Ri} a průtokových charakteristik ventilů vypočteme pomocí vztahu 4.2 požadovaná otevření ventilů o_i .
6. Vypočteme tlakovou ztrátu potrubí a technologických celků mezi společným kolektorem a předávacím místem PZP pro případ plného otevření centrální regulace. Tím dostaneme hodnotu maximálního předávacího tlaku p_{maxP} , pro který je PZP schopen těžit v navrženém režimu sond.
7. Porovnáme hodnoty p_{maxP} a p_P . Je-li $p_{maxP} > p_P$, určíme procento otevření centrální regulace o_P a hodnoty q_i , o_i , a o_P jsou výstupem algoritmu, program ukončí činnost.
8. Pokud $p_{maxP} < p_P$ vyřadíme sondy s nejvyšší tlakovou ztrátou a opakujeme výpočet od bodu 1. Pokud po vyřazení sond není PZP schopen dosáhnout požadovaného Q_C , program se ukončí a sdělí tuto skutečnost.

Názorná ukázka postupu výpočtu na příkladě s konkrétními hodnotami je na obrázku 4.15.

4.6.4 Implementace a ladění programu RegSim

Výše uvedené algoritmy byly implementovány do formy programového kódu a následně otestovány. Rozhraní programů bylo navrženo tak, aby byl možný jeho automatizovaný běh a spolupráce s dalšími součástmi ES, zejména programy Decide! a GSD.

Pro nastavení hodnoty třecích ztrát v potrubích byla využita stejná data, která byla použita pro ladění modelů v programu Pipesim. Tabulky pro určení tlakových ztrát technologických celků byly vytvořeny z dat provozní historie příslušných PZP. Pro regulační ventily byly použity buď průtokové charakteristiky určené na základě dat z provozní historie. Pokud toto nebylo možné provést byly použity charakteristiky dodané výrobcí ventilů. Určení

tlakových ztrát vlivem převýšení potrubí je počítáno dle metodiky používané v RWE Transgas pro přepočet tlaků z ústí sondy na dno sondy. Problematickými body však nadále zůstávají:

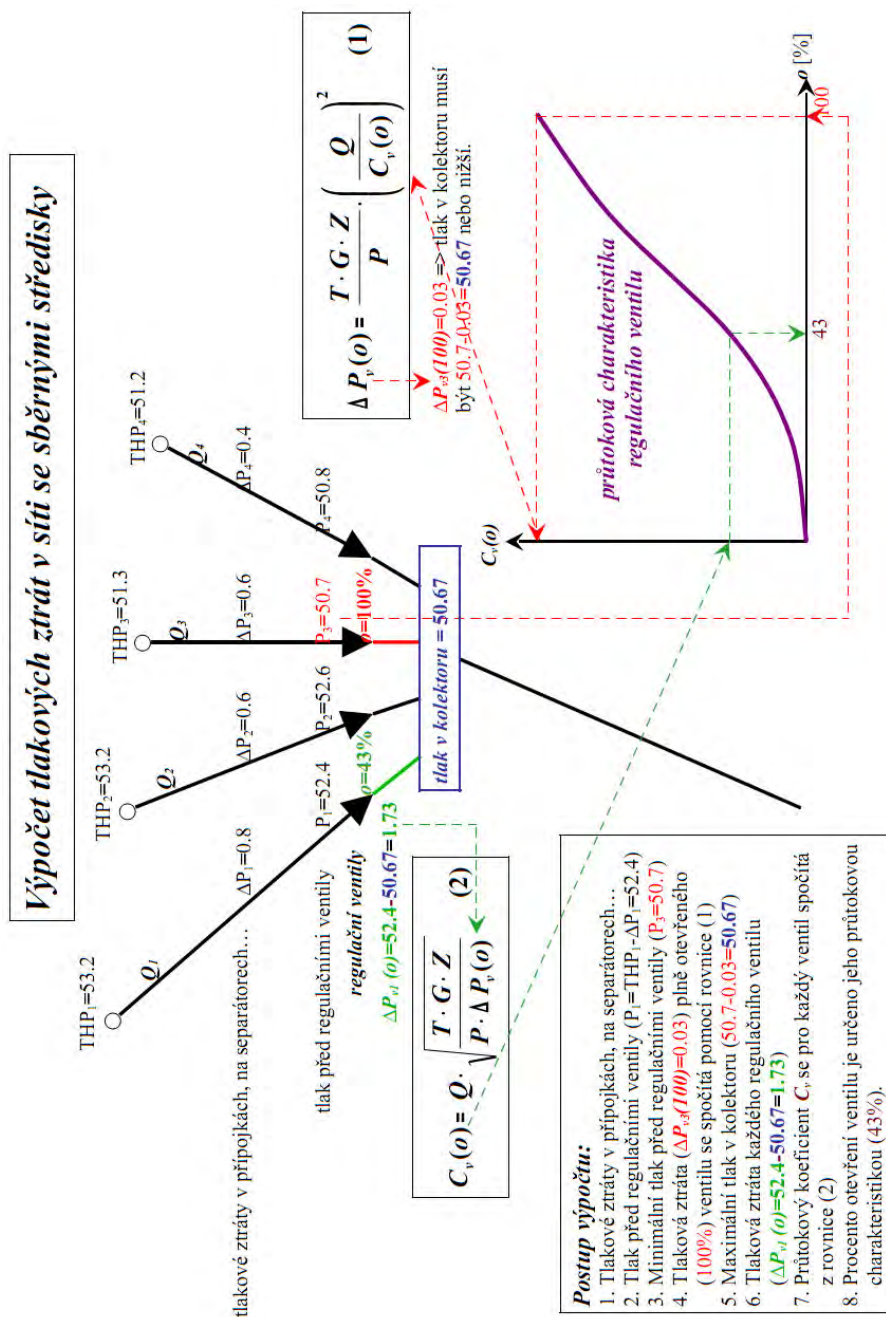
- Přesné naladění ztrát na některých přípojkách sond. To platí zejména pro málo používané sondy, kde není k dispozici dostatek provozních dat a pro potrubí zásobníků se stromovou strukturou.
- Na některých PZP není instalováno měření tlaku před a za regulačními ventily a proto není možné určit skutečnou průtokovou charakteristiku těchto ventilů.
- I tam, kde jsou obě měření tlaku instalována je určení průtokové charakteristiky obtížné a to zejména v období konce těžby, kdy jsou používána větší otevření ventilů a rozdíly mezi tlaky před a za ventilem jsou v řádu přesnosti použitých manometrů.

4.7 Závěrečná doporučení pro simulaci nadzemních technologií

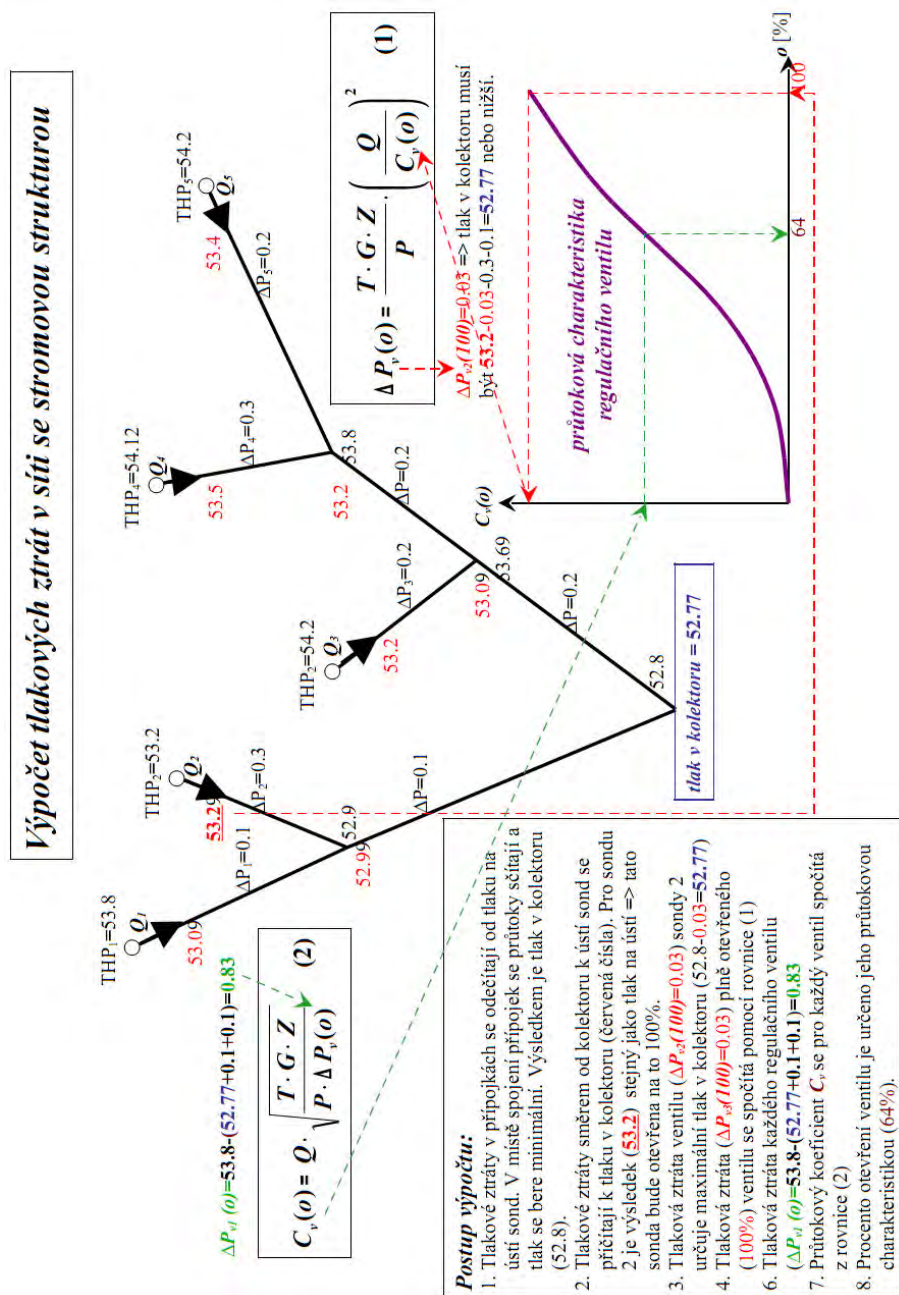
V této kapitole jsme představili autorem vyvinuté metodiky tvorby a ladění modelů nadzemních technologií a sdružených modelů podzemí a nadzemí. Poznatky a závěry plynoucí ze zkušeností získaných během implementace ES pro danou oblast jsou následující:

- Současné verze programů Pipesim a R2SL nemohou zajistit funkčnost požadovanou ES.
- Nově vydané verze těchto programů by již měly být tyto funkce zajistit, proto investice do tvorby a ladění modelů nadzemních technologií nebyla zbytečná.
- Do doby, než budou nové verze k dispozici a než budou modely přizpůsobeny těmto verzím, bude jejich funkce v ES plnit vyvinutý program RegSim.
- Na zásobnících se stromovou strukturou plynovodní sítě by v budoucnu bylo vhodné zaznamenat provozní data z technologie i pro období provádění testů sond.

- Na všech PZP by měla být pravidelně prováděna kalibrace měřidel tlaku.
- Bylo by vhodné provést měření skutečných charakteristik regulačních ventilů.
- Náhrada „blackoil“ verze programu Pipesim verzí „compositional“ by mohla významně přispět k provozní optimalizaci, zejména možnostmi predikce rosného bodu a tvorby hydrátů.
- Na zásobnících kde dosud není, by mělo při nejbližší příležitosti dojít k instalaci manometrů za regulačními ventily.



Obrázek 4.14: Algoritmus stanovení otevření regulačních ventilů na plynovodní síti s vějířovitou strukturou.



Obrázek 4.15: Algoritmus stanovení otevření regulačních ventilů na plynovodní síti se stromovou strukturou.

Kapitola 5

Projekt ES PZP — závěr

V předchozích kapitolách jsme nejprve představili *Expertní systém podzemních zásobníků plynu*, tak jak byl navržen a realizován řešitelským kolektivem RWE Transgas net, SIS, ESK a TU Liberec.

V dalších částech práce byly popsány vybrané partie z procesu implementace projektu, na kterých měl autor osobní podíl.

5.1 Celkové shrnutí výsledků projektu

Předtím, než shrneme hlavní přínosy v těchto jednotlivých bodech, zhodnotíme projekt jako celek. Především je nutno zdůraznit, že takovýto systém, který propojuje numerické modely, nástroje ložiskového inženýrství, nástroje umělé inteligence, techniky data-miningu s reálnými provozními daty nebyl doposud ve světě implementován, přestože bylo učiněno několik pokusů v různých společnostech. Jde tedy o unikátní technické řešení, ovšem je však zdůraznit, že jedinečnost tohoto řešení není v použití nových softwarových produktů, ani v jejich vývoji. Zavedení a implementace ES znamenala v první řadě vzájemné propojení již existujících systémů a nasazení některých dalších softwarových produktů, které jsou považovány za průmyslové standardy ve své kategorii. Jedinečnost a inovativnost řešení je především ve vhodném a cíleném propojení jednotlivých komponent systému pro dosažení požadované funkčnosti.

Přípravné práce na projektu započaly v roce 2003, řešení bylo oficiálně zahájeno na konci roku 2004, avšak vlastní implementační práce spočívající v instalaci, zprovoznění, propojování a ladění jednotlivých systémů a mo-

delů započaly v polovině roku 2005 pilotní fází na PZP2. V letech 2006 a 2007 potom proběhla implementace ES na zbývajících čtyřech PZP.

V současnosti (březen 2008) se nacházíme ve stavu, který bychom mohli označit jako mezistav mezi třetí a čtvrtou fází implementace, tak, jak byly definovány v oddíle B.3 na straně 142. ES je na všech PZP implementován, stupeň jeho naladění se pro různé PZP liší. Negativní vliv na naladění systému měla poslední dvě teplá zimní období, kdy zásoby PZP nebyly vytěženy a nebylo možno systém otestovat v podmínkách dotěžování, kdy je potřeba optimálního řízení režimu sond nejvyšší. Nicméně lze konstatovat, že ES je funkční a může zastávat plánovanou roli „počítač-rádce“ pro dispečery, management a ložiskové geology PZP.

Uzavření zpětných vazeb a propojení výstupů ES zpět do SCADA systému si vyžádá minimálně ještě rok zkušebního provozu v současném režimu, než bude prokázána jeho spolehlivost.

Projekt Expertního systému byl představen na několika odborných mezinárodních konferencích, jeho prezentace vždy vzbudila zájem přítomných a vyvolala diskuzi. Předpokládáme, že popis implementace ES bude v tomto roce připraven pro časopiseckou publikaci (pravděpodobně SPE).

Je nutno též poznamenat, že tento projekt tematicky zcela přesně zapadá do kategorie „Smart UGS“, tedy Inteligentní PZP, která je jednou z priorit pracovní komise 2 Mezinárodní plynárenské Unie (IGU).

5.2 Možnosti dalšího rozvoje ES

Ukončením etapy implementace vývoj ES neskončil, naopak můžeme říci že začal a teprve následující roky přinesou plné využití jeho potenciálu. Možnosti dalšího rozvoje jsou dle autorova názoru v těchto bodech:

- Plné využití potenciálu nástrojů umělé inteligence systému Decide!. Tyto nástroje nehrají v ES prozatím takovou úlohu, která jim byla původně předpokládána. Je nutno provést nastavení těchto nástrojů a jejich trénink. Potom se stanou silným prvkem ES.
- Zlepšení simulací nadzemních technologií a sdružených simulací. Pokrok je očekáván po uvedení nové verze programu Pipesim, která bude moci reprezentovat aktivní tlakové ztráty na regulačních armaturách.
- Optimalizace režimu vtlačení. Doposud byl ES soustředěn primárně na období těžby, které je bezesporu kritičtější částí provozního cyklu PZP.

Ovšem období vtlačení skýtá velký prostor pro ložiskové a technologické optimalizace a tím pádem významné úspory kompresní práce.

- Zlepšení kvality dat vstupujících do systému. Tento problém je spíše managerský než technický, avšak vymezení pracovníků zodpovědných za datové toky a jejich povinností a pravomocí v konečném důsledku lepší kvalitu numerického modelování.
- Implementace ES na kavernový PZP6, kde bude vyžadováno nasazení speciálního termodynamického simulátoru.
- Uzavření zpětných vazeb a zajištění toku dat z ES do SCADA systémů.
- Provázání ES se systémy řízení a simulace liniové části plynárenské soustavy.

5.3 Osobní přínos autora práce

Osobní přínos autora habilitační práce k řešení projektu je v těchto bodech:

- Rešerše softwarových prostředků pro ES a jejich vyhodnocení.
- Spolupráce na návrhu projektu ES a jeho finalizace.
- Spolupráce na návrhu metodiky automatizovaného spouštění a aktualizace numerických modelů.
- Spolupráce na návrhu funkcí a algoritmů programu GSD.
- Návrh a otestování metodiky tvorby a ladění modelů nadzemních technologií PZP pro ES v programu Pipesim a jejich propojení s modely ložiskových objektů v programu Eclipse pomocí rozhraní R2SL.
- Spoluautorství programu RegSim.

Část II

Vývoj multidimenzionálního modelu podzemních procesů

Kapitola 6

Motivace pro vývoj systému flow123d

Vývoj a implementace numerických modelů procesů podzemní hydrauliky a transportu má na TU Liberec již více než patnáctiletou tradici. Během této doby vznikla řada modelů, počínaje úzce specializovanými, určenými pro řešení konkrétní úlohy na konkrétní lokalitě a obecnými systémy pro modelování daného přírodního procesu konče. V této části habilitační práce představíme zatím poslední produkt tohoto vývoje, systém **flow123d**.

Osobní podíl autora práce na vývoji systému **flow123d** tkví v těchto bodech:

- Návrh celkové koncepce systému.
- Návrh softwarové architektury systému a jeho vnitřních a vnějších datových struktur.
- Implementace jádra systému, algoritmů manipulace s daty a topologických algoritmů.
- Návrh a implementace způsobu spojování elementů různých prostorových dimenzí.
- Implementace základních modelů ustáleného filtračního proudění a advektivního transportu látek.

V následujícím textu nejprve zmíníme okolnosti vzniku systému **flow123d** a jeho základní vlastnosti. Dále text této druhé části pokračuje článkem [\[14\]](#),

jehož je autor práce hlavním autorem. Tento článek popisuje celkovou koncepci modelu, princip propojení elementů různých dimenzí, ukazuje výsledky modelů proudění a transportu na benchmarkových úlohách a porovnává multidimenzionální přístup s přístupy klasickými.

Předposlední kapitola této části práce popisuje vlastní implementaci systému, jeho rozdělení, vnitřní a vnější datové struktury, způsob jejich použití při dalším rozšiřování modelu a hlavní algoritmy systému.

Závěr potom shrnuje dosažené výsledky, popisuje praktické úlohu, které byly pomocí systému `flow123d` vyřešeny, zabývá se možnostmi jeho dalšího vývoje a také poukazuje na některé nedostatky tohoto systému.

Jako příloha C byl do práce zařazen článek, publikovaný v časopise „*Kybernetika*“ [28] který se soustředí především na formulační aspekty použitého modelu proudění, který je založen na smíšené-hybridní formulaci MKP a jehož je autor habilitační práce dílčím spoluautorem.

6.1 Stručný přehled modelů podzemních procesů vyvinutých na TU Liberec a jejich vlastností

Vývoj vlastních specializovaných modelů podzemního proudění a transportu látek na půdě TU Liberec se datuje od roku 1993. V prvním období, cca. do roku 1998 probíhal vývoj těchto modelů založených na přístupu porézního média v úzké spolupráci se státním podnikem Diamo Stráž pod Ralskem a vyvíjené modely byly primárně určeny pro řešení úloh projektování a řízení sanace Strážského bloku po chemické těžbě uranu. Výsledkem těchto vývojových prací je systém GWS, jehož vlastnosti představíme dále.

Vedle vývoje systému GWS vznikl v roce 1998 na pracovišti autora druhý proud vývoje modelů, který byl motivován především potřebou simulovat hydrogeologické problémy v prostředí krystalinika v souvislosti s plánovanou přípravou výstavby trvalého úložiště radioaktivních odpadů v ČR. Vývoj těchto modelů, založených na principu diskretních puklinových sítí, probíhal do roku 2003 a jeho výsledkem je systém FFLOW, který popíšeme v oddíle 6.1.2.

Systém `flow123d` spojuje oba tyto proudy vývoje a kombinuje oba jmenované přístupy, tedy porézní médium a diskretní puklinové síť. Proto se v kolektivu autora ustálil pojem *kombinovaný model*, kterým je systém `flow123d`

někdy označován, ačkoliv terminologicky správnější a výstižnější by bylo hovořit o *multidimenzionálním modelu*. V dalším textu budeme používat obě tato pojmenování.

6.1.1 Systém GWS

Systém GWS je softwarový prostředek pro 3D simulaci dějů v porézním horninovém prostředí. V současnosti má tyto hlavní komponenty:

Preprocesory. Trojice grafických aplikací, které slouží pro tvorbu sítě, zadání okrajových podmínek a zadání počátečních podmínek.

Postprocesor. Slouží pro grafické zobrazení výsledků výpočtů, umožňuje přitom různé metody zobrazování, pohledy, řezy.

Modely proudění. Pro systém GWS bylo vyvinuto několik modelů proudění založených na MKP. Použity byly primární, smíšená a smíšená hybridní formulace. Modely popisují proudění ustálené i neustálené, s volnou i s napjatou hladinou, se zohledněním vlivu hustoty roztoku i bez něho. Ne všechny možné kombinace uvedených procesů a formulací však byly implementovány. Dále existuje celá řada odvozených specializovaných modelů, určených pro konkrétní úlohy na konkrétních lokalitách.

Modely transportu. Vyvinuty byly dva základní modely transportu, jeden pro proudová pole generovaná modely proudění založenými na primární formulaci, druhý potom pro pole vystupující z modelů založených na smíšené hybridní formulaci. Oba tyto transportní modely používají pro aproximaci úlohy MKO. Stejně jako v případě modelů proudění i zde existují specializované jednoúčelové modely.

Model geochemických reakcí. Nejedná se o samostatně spustitelný program, ale o knihovnu, která může být přilinkována k modelům transportu. Použitelnost geochemického modelu je limitovaná na úlohy menšího rozsahu, neboť zapnutí modulu chemie zásadním způsobem zpomaluje běh transportního modelu. Dalším problémem tohoto modelu je úzká specializace na geochemii Strážského bloku a problematiku chemické těžby uranu.

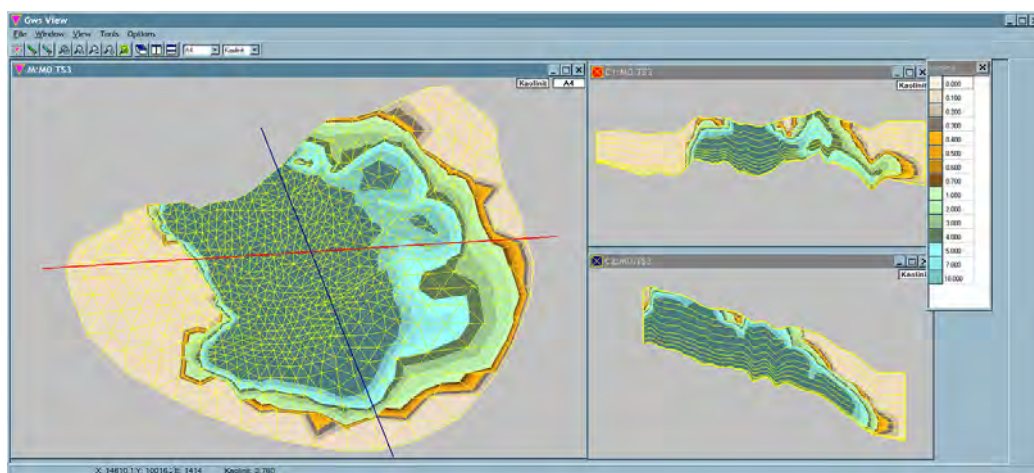
Řešiče soustav lineárních rovnic. Pro řešení rozsáhlých řídkých soustav lineárních rovnic vznikajících při diskretizaci úlohy pomocí MKP jsou

v systému GWS používány specializované řešiče, vyvinuté ve spolupráci s Ústavem Informatiky AV ČR.

Nadstavby modelů. Jde o jednoúčelové aplikace, které řeší např. ekonomické náklady či optimalizaci těžebních scénářů a přitom využívají ostatní součásti systému.

Charakteristickým rysem systému GWS je použití trojbokých prizmatických elementů s obecně skloněnými nerovnoběžnými podstavami a svislými bočními stěnami jako základních prvků sítě diskretizující prostorovou oblast. Tento poněkud nestandardní typ elementů je velmi výhodný pro modely dějů v horninovém prostředí, neboť umožňuje dobře postihnout strukturu geologických vrstev. Požadavek na svislost bočních stěn vede na pojmy *multiuzlů* a *multielementů*, které označují množiny uzlů a elementů se shodnými souřadnicemi v horizontální rovině a lišících se pouze hodnotou vertikální souřadnice.

V období od roku 1995 až do současnosti byl systém GWS použit pro řešení mnoha reálných úloh, z nejvýznamnějších jmenujme modelování zatopení dolu Hamr I, model mezikolektorového přetoku ve Strážském bloku, modelování variant sanace cenomanské a turonské zvodně, modelování odkališť GEAM Dolní Rožínka aj. Pro více podrobností odkazujeme na [5], [6], [7] a odkazy v těchto pramenech uvedené. Ukázka systému GWS je na obrázku 6.1



Obrázek 6.1: Ukázka vizualizace výsledků modelu v systému GWS.

I přes nesporné úspěchy při modelování výše uvedených úloh má systém GWS své limity a omezení, které byly příčinou pro vývoj systému flow123d. Hlavním omezením je zmíněný požadavek svislosti bočních stěn prvků prostorové diskretizace, který je pro některé situace velmi limitující a současně je do systému zasazen natolik pevně, že nemůže být zrušen bez nutnosti přeprogramování téměř všech součástí systému.

Z tohoto důvodu nebylo možno provést přímé propojení systému GWS se systémem FFLOW popsaným dále, ale bylo nutno vytvořit nový systém.

6.1.2 Systém FFLOW

Tento systém je určen pro simulaci hydraulických a transportních procesů v puklinových systémech kompaktních horninových těles, která mají nulovou či zanedbatelnou hydraulickou vodivost horninové matrice.

V ČR je soustavnější hydrogeologický výzkum takovýchto těles prováděn od roku 2000 na lokalitách Potůčky-Podlesí a Melechov, v souvislosti s přípravou stavby trvalého úložiště radioaktivních odpadů. Součástí prací bylo také numerické modelování obou lokalit a z tohoto důvodu byl vyvinut systém FFLOW, neboť systém GWS není ze své podstaty schopen věrohodně postihnout silnou heterogenitu puklinového prostředí.

Systém FFLOW pracuje na principu diskrétních puklinových sítí, kdy každá puklina je reprezentována jako polygon umístěný ve třírozměrném prostoru a systém těchto polygonů tvoří doménu na které probíhá simulace — tzv. *puklinovou síť*. Jelikož prakticky není možné zjistit polohy a rozměry puklin v daném horninovém tělese vyjma nejvýznamnějších, je nutno většinu puklin generovat náhodně a přijmout pouze statistickou shodu mezi skutečnou a modelovou puklinovou sítí. Hovoříme potom o *stochastických diskrétních puklinových sítích*.

Struktura systému se do značné míry podobá struktuře systému GWS:

Preprocesor. Byl vyvinut specializovaný program, který ze statisticky vyhodnocených výsledků měření četností, orientací, velikostí a rozevření puklin vytvoří stochastickou puklinovou síť a provede její diskretizaci na trojúhelníkové podoblasti, čímž vytvoří výpočetní síť pro modely. Specializované preprocesory na tvorbu okrajových a počátečních podmínek nebyly vyvinuty.

Postprocesory. Pro systém FFLOW nebyl vyvinut specializovaný grafický postprocesor, pro vizualizaci výsledků na jednotlivých puklinách byl

používán program GWSView systému GWS a pro vizualizaci celkové situace program POV-Ray.

Model proudění. Vytvořen byl pouze jediný model ustáleného a neustáleného Darcyovského proudění s napjatou hladinou, založený na smíšené hybridní formulaci MKP. Pro více informací o tomto modelu viz [15] či [27].

Model transportu. Transportní model systému FFLOW je založený na kombinaci MKP a MKO, používá primární i duální síť a simuluje procesy konvekce, difúze a disperze a reakcí. Tento model je po numerické stránce velmi pokročilý, detaily o použitých aproximačních metodách jsou popsány v [3].

Model geochemických reakcí. Specializovaný model chemických reakcí nebyl pro systém FFLOW vyvinut, základní reakce je možno zohlednit v reakčním členu modelu transportu. Plánované propojení s chemickým modulem systému GWS nebylo realizováno.

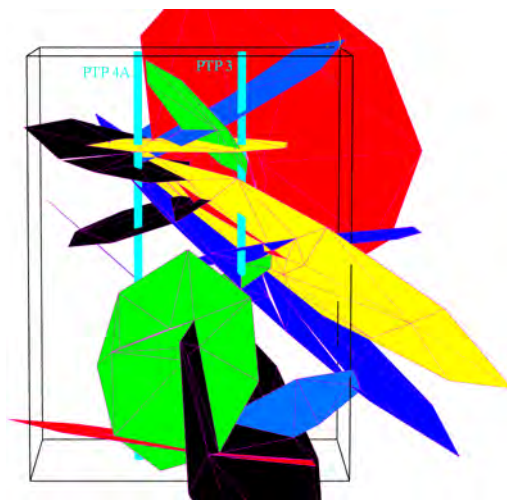
Řešiče soustav lineárních rovnic. Byly použity tytéž specializované řešiče jako v systému GWS, nebylo nutno provádět jejich dodatečné úpravy.

Systémem FFLOW se podařilo vyřešit některé reálné úlohy, konkrétně simulace vodních tlakových zkoušek na vrtech PTP3, 4A a 5 na lokalitě Potůčky, jak je ukázáno na obrázcích 6.2 a 6.3, podrobněji viz [11] a [12].

Při řešení těchto úloh se však negativně projevíly některé vlastnosti metodiky stochastických diskretních puklinových sítí, které při řešení praktických úloh představují poměrně závažné problémy. Konkrétně se jedná o:

Velký počet puklin v oblasti. Skutečnost, že většina puklin v horninovém masivu je malých rozměrů (v řádu desítek centimetrů až jednotek metrů) vede i u poměrně malých oblastí o půdorysných rozměrech řádu v desítek až stovek metrů na puklinové síti o statisících až milionech puklin. Výpočty na takovýchto sítích jsou mimo možností současné běžně dostupné výpočetní techniky.

Složitá geometrie puklinové sítě. Pokud nechceme stanovit dodatečná omezení na polohy, orientace a velikosti puklin v modelu, např. typu diskretní množiny hodnot, které může daná veličina nabývat, je výsledná množina polygonů představujících pukliny geometricky velmi komplikovaná. Důsledkem je obtížná proveditelnost ručních úprav sítě.

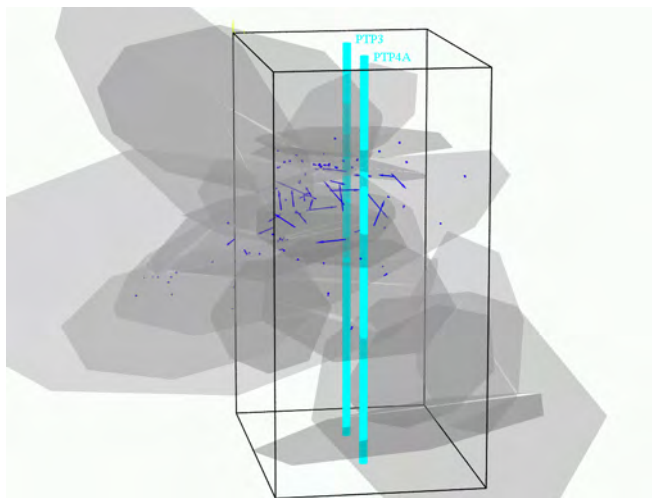


Obrázek 6.2: Puklinová síť pro simulaci VTZ na lokalitě Potůčky

Nízká regularita výpočetní sítě. Souvisí se složitou geometrií puklinové sítě. Soudobé diskretizační algoritmy nejsou schopny provést rozdělení puklinové sítě na trojúhelníkové elementy při respektování všech průsečnic puklin a zároveň při zaručené hodnotě regularity sítě. Důsledkem je obtížná řešitelnost výsledné soustavy lineárních rovnic, což v praxi znamená další omezení rozměrů oblastí, na kterých lze provádět výpočet. Dalším důsledkem je nutnost pracných a zdlouhavých ručních úprav sítě před tím, než je možno provést výpočet.

Statistická povaha výsledků simulací. Jelikož je většina puklin v síti generována náhodně, pouze na základě požadavků shody statistických charakteristik, je nutno také výsledky simulací chápat v tomto smyslu. Proto, aby bylo modelování reálné situace věrohodné a mělo dostatečnou vypovídací hodnotu je nutno provést řádově nejméně desítky výpočtů na různých sítích a výsledky těchto výpočtů vyhodnotit opět statisticky.

Protože uvedené problémy jsou jen obtížně řešitelné při důsledném dodržení metodiky diskrétních puklinových sítí, bylo rozhodnuto vyvinout novou generaci modelů, která tyto nedostatky bude schopna řešit. Touto novou generací je právě systém `flow123d`.



Obrázek 6.3: Proudové pole na puklinách při VTZ na lokalitě Potůčky

6.2 Základní rysy systému flow123d

Systém `flow123d` je navržen jako jisté spojení a sjednocení obou výše představených větví modelů podzemních procesů vyvíjených na KMO FM TU Liberec. Vyjmenujme nyní hlavní ideje, na kterých byl systém `flow123d` postaven:

- Výpočetní síť složená z prvků různých dimenzí, reprezentace puklin pomocí 2D prvků, propustné bloky materiálu reprezentované 3D prvky.
- Žádná omezení polohy prvků různých dimenzí.
- Použití existujících freeware pre- a postprocesorů.
- Použití specializovaných řešičů UI AV ČR.
- Snadná rozšiřitelnost systému, možnost rychlého vývoje modelu pro konkrétní úlohu.
- Oddělení platformy systému od modelů.

Nyní podrobněji k jednotlivým bodům.

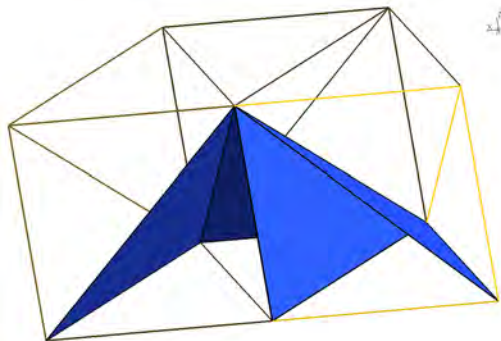
6.2.1 Prvky různých dimenzí

Tato vlastnost je nejcharakterističtějším rysem systému `flow123d`, ze kterého se odvíjí i jeho pojmenování. Možnost spojit průlinové (porézní) proudění a puklinové je určena primárně pro modelování lokalit krystalinika. Výchozí myšlenka se opírá o možnost homogenizace malých puklin v rámci REV a jejich nahrazení bloky porézními o ekvivalentních hydraulických vlastnostech a modelování pouze hydraulicky významných puklin pomocí diskretní puklinové sítě. Druhým využitím je možnost doplnění modelů lokalit s primárně průlinovým charakterem proudění o hydraulicky významné zlomy a pukliny, tedy heterogenity, které je možno pomocí „klasických“ systémů typu GWS jen obtížně modelovat.

Do návrhu byly vedle 3D a 2D prvků začleněny též 1D liniové prvky a to ze dvou důvodů. Jednak aby bylo možno systém používat pro zjednodušené 2D modely, kde 2D prvky představují bloky porézní horninové matrice a 1D prvky pukliny. Druhým důvodem byla pozorovaná skutečnost, že průsečnice hydraulicky významných puklin mohou v horninovém masivu hrát roli jakýchsi „potrubí“, kde je rychlost toku řádově vyšší než v okolních puklinách.

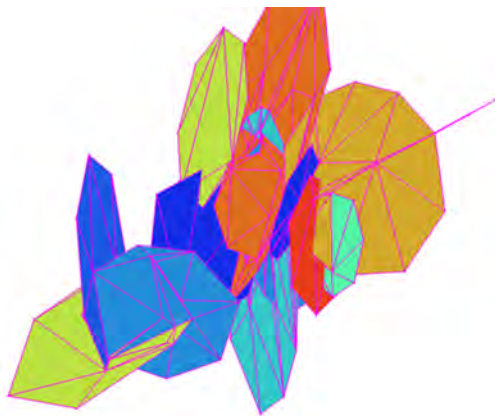
6.2.2 Libovolná poloha prvků různé dimenze

V prvních etapách návrhu systému se zdálo být jako nezbytné stanovit požadavek na konformitu propojení prvků různé dimenze, to znamená že poloha prvků nižší dimenze musí být taková, aby tvořily stěny či hrany prvků vyšší dimenze. Ukázka konformního propojení prvků je na obrázku 6.4.



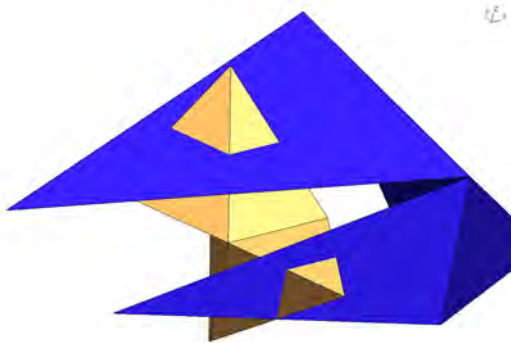
Obrázek 6.4: Konformní propojení 2D a 3D prvků (3D prvky zakresleny obrysem).

Tím ovšem vyvstal zásadní problém, neboť i v případě puklinové sítě zahrnující pouze omezený počet hydraulicky významných puklin je její geometrie značně složitá, jak je ukázáno na obrázku 6.5.



Obrázek 6.5: Jednoduchá puklinová síť — ukázka obtížného splnění podmínky konformity sítě.

Doplnit takovouto síť prostorovými prvky tak, aby byla zachována podmínka konformity je sice teoreticky možné, avšak ani soudobé pokročilé síťovací algoritmy nejsou tuto úlohu schopny vyřešit při zaručení kvality výsledné sítě, čímž by došlo k opakování problémů ryze puklinových modelů. Proto bylo rozhodnuto podmínku konformity sítě vyloučit a umožnit tak použití nekonformních sítí, ve kterých se prvky různých dimenzí mohou libovolně protínat, jak je ukázáno na obrázku 6.6.



Obrázek 6.6: Ukázka nekonformního propojení 2D a 3D prvků.

Možnost použití jak konformních, tak nekonformních (někdy též nazývaných kompatibilních a nekompatibilních) sítí se stala druhým základním rysem systému `flow123d`. Teoretické práce [28] a [10] prokázaly, že i v nekonformním případě je možná korektní formulace úlohy.

6.2.3 Použití existujících pre- a post- procesorů

Jednou ze slabin systému FFLOW je špatná vazba na dostupný vizualizační software, což činí proces modelování a kalibrace modelů značně obtížným. Jelikož bylo zřejmé, že vývojový tým systému `flow123d` nebude disponovat dostatečnou kapacitou pro vývoj vlastních programů takovéhoho určení, bylo rozhodnuto použít existující software.

Jako vhodná volba se ukázal být systém GMSH (viz [8]) pro jeho následující vlastnosti:

- Volně dostupný pod licencí GNU GPL pro komerční i nekomerční použití. Z použité licence vyplývá plná dostupnost zdrojových kódů programu a podrobná dokumentace datových souborů.
- Generuje sítě složené z 1D, 2D a 3D prvků ve 3D prostoru.
- Zobrazuje skalární, vektorové a tenzorové veličiny a jejich časový vývoj na takovýchto sítích.
- Možnost doprogramování dalších funkcí dle aktuálních potřeb.

6.2.4 Použití specializovaných řešičů

Koncepce použití speciálních řešičů soustav lineárních rovnice se osvědčila jak v systému GWS, tak v systému FFLOW a proto byla zařazena do návrhu systému `flow123d`. Ovšem podstatnou změnou byl návrh zařazení těchto řešičů jako interních, linkovaných s modely ve formě dynamické knihovny. To umožňuje rychlejší komunikaci mezi řešičem a modelem, která se děje prostřednictvím operační paměti počítače, což je výhodné zejména při iteračním řešení. Stávající modely používaly řešiče jako externí aplikace a komunikovaly s nimi přes souborový systém, což je výrazně pomalejší.

6.2.5 Rozšiřitelnost systému

Zkušenosti s předchozími systémy ukázaly, že ani velmi pečlivá a podrobná úvodní analýza nemůže postihnout veškeré možné aplikace modelu a úlohy, které modelem budou řešeny. Proto je výhodnější navrhnout celý systém jako otevřený a rozšiřitelný, tak aby při požadavku na řešení nestandardní úlohy bylo z existujícího systému možno rychle vyvinout model pro tuto konkrétní speciální úlohu. Cenou za takto pojatý systém je menší efektivita výsledného kódu, avšak tento úbytek rychlosti není při běžných úlohách kritický a výhoda rozšiřitelnosti systému jej více než vyvažuje. Způsob, jakým byl požadavek rozšiřitelnosti a snadného dalšího vývoje zaveden do systému `flow123d` představíme v oddíle 8.

6.2.6 Oddělení platformy systému od modelů procesů

Tato vlastnost nového systému úzce souvisí s výše uvedeným požadavkem na rozšiřitelnost. *Platformou* systému míníme datové struktury systému a ty procedury, které přímo nesouvisí s implementací numerické metody. Typicky se jedná o souborové operace, kontroly sítě, manipulace s pamětí, řešení topologie sítě atp. *Numerickým modelem* míníme ty části programového kódu, které přímo implementují aproximaci daného fyzikálního procesu pomocí některé z numerických metod.

Z vývoje systémů GWS i FFLOW vyplynulo, že je výhodné, pokud různé numerické modely téhož systému sdílí tutéž platformu, neboť se tím podstatně zjednodušuje a zrychluje vývoj, je možno opakované použití kódu pro různé modely. Platformu systému `flow123d` představíme v oddíle 8.

Kapitola 7

Modelování procesů v rozpukaných horninách pomocí MKP/MKO na multidimenzionálních oblastech

Tato kapitola je přetiskem článku [\[14\]](#), ve kterém je popsána koncepce systému `flow123d` a způsob propojení prvků různých dimenzí v modelu.



Modelling of processes in fractured rock using FEM/FVM on multidimensional domains[☆]

Jiří Maryška, Otto Severýn*, Miloslav Tauchman, David Tondr

TU Liberec, Department of Modelling of Processes, Hálkova 6, 461 17 Liberec 1, Czech Republic

Received 9 August 2005

Abstract

The paper deals with a new approach to the numerical modelling of groundwater flow in compact rock massifs.

Empirical knowledge of hydrogeologists is summarized first. There are three types of objects important for the groundwater flow in such massifs—small fractures, which can be replaced by blocks of porous media, large deterministic fractures and lines of intersection of the large fractures. We solve problem of the linear Darcy's flow on each of these three separated domains and then we join them by coupling the equations. We do not require geometrical correspondence between 1D, 2D and 3D meshes, which simplifies the process of the spatial discretization. The mixed-hybrid FEM with the lowest-order Raviart–Thomas elements is used for approximation of the solution. The advective mass transfer is solved by the FVM on the same discretization as the flow problem.

Results of numerical experiments with the model are shown in the end of the paper.

© 2007 Elsevier B.V. All rights reserved.

Keywords: Fractured rock; Groundwater flow; Finite element method; Mixed-hybrid FEM; Finite volume method; Multidimensional domain

1. Introduction and motivation

Our research is motivated by the need of finding the most suitable locality for a permanent deep repository of radioactive waste in the Czech Republic. The process of selection and some preliminary projects already began. The models presented here are outcomes of one of these projects. Described numerical models are intended to be used for simulations of the flow and transport processes in the large neighborhood of the repository (so-called far-field), which was a task exceeding the possibilities of existing models.

2. Principal ideas of fluid flow model in fractured rock environment

The radioactive waste repository will be situated in a compact crystalline rock massif. The hydrogeological research has brought following empirical knowledge about the rock environment and groundwater flow in them:

- The rock matrix can be considered hydraulically impermeable.
- Even the most compact massifs are disrupted by numerous fractures.

[☆] This work was supported by the Grant Agency of the Czech Republic under the project code no. GACR 102/04/P019

* Corresponding author.

E-mail addresses: otto.severyn@tul.cz, otto.severyn@vslib.cz (O. Severýn).

- Most of these fractures are relatively small ones, with the characteristic length less than one meter.
- The groundwater flow in the small fractures is extremely slow.
- Small fractures have significant total volume and play an important role in the transport processes.
- Most of the liquid is conducted by a relatively small number of large fractures. Their characteristics are usually known.
- The fastest flux of groundwater is observed on intersections of large fractures. These lines behave like a “pipelines” in the massif.

These facts lead us to the conclusion that there are three different types of objects involved in the conduction of groundwater through the compact rock: small fractures, large fractures and intersections of the large fractures.

The previous works in the field of numerical modelling of processes in fractured rock proved, that small fractures could be replaced by equivalent porous media by using the techniques of homogenization, described for example in [2,3]. The large fractures and their intersections could not be homogenized, the discrete fracture network approach must be used—see [1,2]. This approach is unsuitable for the small fractures due to its computational costs.

As a result of the previous paragraphs, we can say that the model of groundwater flow and contaminant transport in the compact rock massifs should incorporate 3D porous blocks, 2D fractures and 1D lines. We have three different domains in the area of interest, which are hydraulically connected. This problem is similar to the double-porosity approach used in the models of transport in porous media [4]. However, the double-porosity models use domains of the same dimension, with no potential flow in one of the domains and with the mass-exchange between the domains driven by diffusive processes. These three facts constitute a difference between our problem and the problem of transport in the double-porosity environment.

3. Approximation of the flow problem in each domain

We will show an approximation of the flow problem in each of the three domains without communication with the other ones.

We have three domains Ω_i , i is an index denoting the dimension $i \in \{1, 2, 3\}$. Ω_1 is a set of line segments placed in 3D space, Ω_2 is a set of polygons placed in 3D space and Ω_3 is a set of simply connected three-dimensional domains. We can define a potential driven flow on Ω_1 , Ω_2 and Ω_3 . The governing equations are the linear Darcy's law and the continuity equation:

$$\mathbf{u}_i = -\mathbf{K}_i \cdot \nabla p_i \quad \text{on } \Omega_i, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_i = q_i \quad \text{on } \Omega_i, \quad (2)$$

where $\mathbf{u}_i$ is the velocity of the flow ($\mathbf{u}_2$ has to lie in the particular polygon, $\mathbf{u}_1$ has to have the direction of the particular line), p_i is the pressure (piezometric) head, $\mathbf{K}_i$ is the second-order tensor of hydraulic conductivity ($i \times i$ symmetric, positive definite matrix) and q_i is the function expressing the density of sources/sinks of the fluid. We prescribe three types of boundary conditions on $\partial\Omega_i$ —the Dirichlet, the Neumann and the Newton:

$$p_i = p_{iD} \quad \text{on } \partial\Omega_{iD}, \quad (3)$$

$$\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}_i = u_{iN} \quad \text{on } \partial\Omega_{iN}, \quad (4)$$

$$\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}_i - \sigma(p_i - p_{iD}) = u_{iN} \quad \text{on } \partial\Omega_{iW}, \quad (5)$$

where p_{iD} , u_{iN} and σ are given functions.

For the approximation of these three problems we use the mixed-hybrid FEM with the lowest-order Raviart–Thomas elements on tetrahedras in Ω_3 , triangles in Ω_2 and line segments in Ω_1 . More rigorous formulation of the continuous problem and the derivation of the discretized problem can be found in [6,5] for the problem in Ω_3 , in [7] for the problem in Ω_2 and in [8] for the problem in Ω_1 .

The discretization leads to the system of linear equations:

$$\mathbb{S}_i \mathbf{x}_i = \mathbf{r}_i, \quad (6)$$

where $\mathbf{x}_i = [\mathbf{u}_i, \mathbf{p}_i, \lambda_i]^T$, $\mathbf{r}_i = [\mathbf{r}_{i1}, \mathbf{r}_{i2}, \mathbf{r}_{i3}]^T$ and

$$\mathbb{S}_i = \begin{pmatrix} \mathbb{A}_i & \mathbb{B}_i & \mathbb{C}_i \\ \mathbb{B}_i^T & & \\ \mathbb{C}_i^T & & \mathbb{F}_i \end{pmatrix}.$$

The λ_i are traces of the pressure head on the sides of the mesh.

4. Connection of the independent problems

Now we will show how to connect the three independent problems presented in previous section and how to express the mass exchange between the domains Ω_1 , Ω_2 and Ω_3 . We can do that on the level of the discretized problem due to properties of the mixed-hybrid formulation.

First, we join the three systems (6) into one large system

$$\mathbb{S}\mathbf{x} = \mathbf{r}, \quad (7)$$

where $\mathbf{x} = [\mathbf{x}_3, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1]^T$, $\mathbf{r} = [\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1]^T$ and

$$\mathbb{S} = \begin{pmatrix} \mathbb{S}_3 & & \\ & \mathbb{S}_2 & \\ & & \mathbb{S}_1 \end{pmatrix}.$$

4.1. Conforming and non-conforming connection of the elements

We allow two different kinds of connections of the elements with different dimensions, called *conforming* and *non-conforming*. This fact makes our model unique from the most of other numerical models using the elements of different dimensions. These models (such as FEFLOW) allow only conforming connections.

The difference between these connections is shown in Fig. 1.

The conforming connection requires the element of lower dimension placed exactly on a side or an edge of the element of higher dimension. This connection seems to be a natural way of connecting the elements in the FEM models, but it leads to very complicated algorithms for the mesh generation, when the solved problem has complex geometry of the domain (such as fractured rock massifs).

This is the reason for allowing the other kind of the elements' connections—so-called non-conforming. In this case, there is no requirement on the spatial position of the communicating elements, the only requirement is on their sizes. We should use approximately the same discretization parameter h_i in places where the meshes intersect.

4.2. Mass exchange in the conforming connection between two elements

We will start the derivation of the equations for the mass exchange for the simple case—conforming connection between two elements. The derivation will be shown on the case of 1D and 2D elements, the case of the connection of 2D and 3D elements is completely analogous.¹

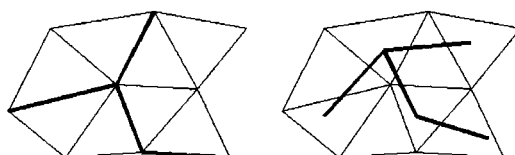


Fig. 1. Example of the conforming and non-conforming connection of the elements.

¹ We do not allow direct conforming connection of 1D and 3D elements, because there is no direct way how to express flux through an edge of a 3D element in our 3D model.

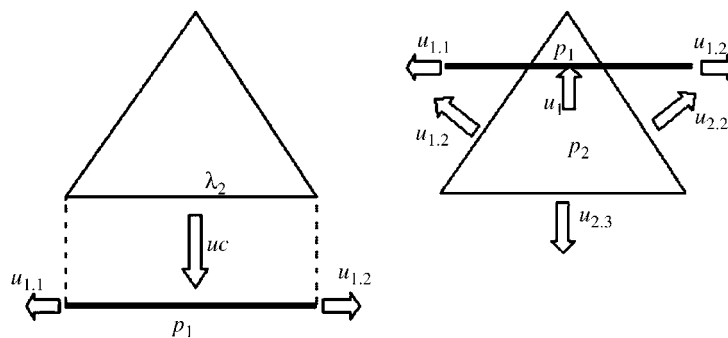


Fig. 2. Fluxes and pressure heads for the conforming (left) and non-conforming (right) connections of 1D and 2D elements. (The elements in the left picture are drawn separated and shifted in the direction of the dotted line.)

The situation is drawn in Fig. 2.

First let us examine the original state. The marked side of the triangular element is considered as an external side of the 2D mesh. We assume the homogenous Neumann boundary condition on this side:

$$u_C = 0. \quad (8)$$

This equation can be found as one line of the block $\mathbb{C}_2^T$ of the matrix $\mathbb{S}_2$ and right-hand side $\mathbf{r}_{23}$. For the 1D element, there is a mass balance equation written in the form:

$$-u_{1,1} - u_{1,2} = 0, \quad (9)$$

which can be found in block $\mathbb{B}_1^T$ of the matrix $\mathbb{S}_1$ and the vector $\mathbf{r}_{12}$.

Now we express the exchange of the mass between the elements. We consider that the flux u_C between 2D and 1D elements is proportional to the pressure heads gradient between the elements

$$u_C = \sigma_C(\lambda_2 - p_1), \quad (10)$$

λ_2 is the pressure head on the side of the 2D element, p_1 is the pressure head in the center of the 1D element and σ_C is the coefficient of proportionality. The mass balance equation for the 1D element can be written as

$$u_C - u_{1,1} - u_{1,2} = 0. \quad (11)$$

We can rewrite Eqs. (10) and (11) as

$$u_C - \sigma_C \lambda_2 + \sigma_C p_1 = 0, \quad (12)$$

$$\sigma_C \lambda_2 - u_{1,1} - u_{1,2} - \sigma_C p_1 = 0. \quad (13)$$

If we compare (8) with (12) and (9) with (13), we notice, that it is sufficient to add or subtract coefficient σ_C to four elements of the matrix and we make the desired connection between the system $\mathbb{S}_1 \mathbf{x}_1 = \mathbf{r}_1$ and $\mathbb{S}_2 \mathbf{x}_2 = \mathbf{r}_2$. The changes in the matrix $\mathbb{S}$ are shown in Fig. 3.

This procedure has to be repeated for each pair of elements connected by the conforming connection.

4.3. Mass exchange in the case of non-conforming connection of the elements

As in the previous section, we will show the derivation on the example of 1D and 2D elements, the procedure is the same for the other two cases (1D with 3D and 2D with 3D). The situation is shown in Fig. 2. The flux u_I between elements is proportional to the pressure head gradient. We can express it like

$$u_I = \sigma_I(p_2 - p_1), \quad (14)$$

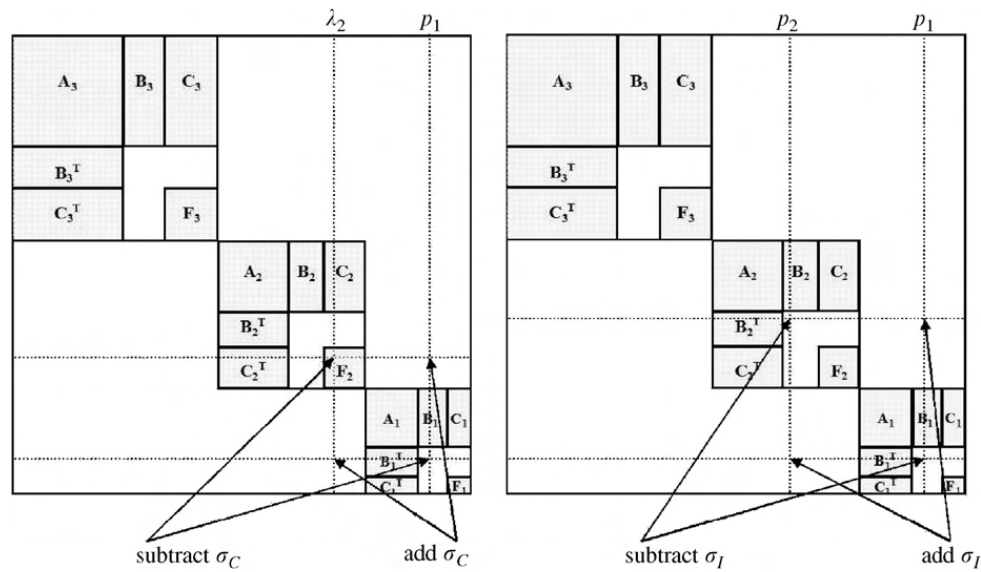


Fig. 3. Setting up a conforming (left) and non-conforming (right) connection between 1D and 2D elements in the matrix $\mathbb{S}$.

where p_2 is the pressure head in the center of the triangular element and p_1 is the pressure head in the center of the linear element. The coefficient σ_I has to reflect the size of the intersection of the elements and the distance of their centers. We write the mass balance equation for the triangular element:

$$-u_{2,1} - u_{2,2} - u_{2,3} - u_I = 0, \quad (15)$$

where $u_{2,1}, u_{2,2}, u_{2,3}$ are fluxes through the sides of the triangle. For the linear element, the mass balance equation is

$$-u_{1,1} - u_{1,2} + u_I = 0, \quad (16)$$

where $u_{1,1}, u_{1,2}$ are fluxes through the ends of the linear element. If we substitute (14) to (15) and (16) we obtain:

$$-u_{2,1} - u_{2,2} - u_{2,3} - \sigma_I p_2 + \sigma_I p_1 = 0, \quad (17)$$

$$-u_{1,1} - u_{1,2} + \sigma_I p_2 - \sigma_I p_1 = 0. \quad (18)$$

It can be seen that the non-conforming connection can be realized by adding, resp. subtracting the value σ_I to elements of the matrix $\mathbb{S}_C$ shown in Fig. 3.

This procedure has to be repeated for each pair of the elements connected by the non-conforming connection.

5. Modelling of the transport phenomena

Our model simulates a basic convective transport process described by an equation of the form:

$$\partial_t C + \nabla \cdot (C \mathbf{u}) = q_m \quad \text{on } \Omega, \quad (19)$$

where C is an unknown concentration of the solution and q_m is a source term. We use the finite volume method for approximation of this equation. We can perform this calculation on the same mesh as we have used for the calculation of the flow field, due to the direct calculation of the inter-element fluxes in the mixed-hybrid FEM. An existence of elements with various spatial dimension causes no need for any modification of the standard FVM scheme. Therefore, we can use standard tools for solving the above stated equation.

However, Eq. (19) is only the most simple description of the transport processes in underground. A numerical model based on this equation could be used for problems, where there is a relatively fast flux of groundwater, only one dissolved contaminant and the interaction between contaminant and the solid phase can be neglected. Unfortunately, the simulation of the radioactive waste repository does not meet any of these assumptions. For such simulation we

have to have generally n contaminants in our model. The contaminants interact mutually in the solution and with the surrounding rock environment. The radioactive decay of the contaminants is also significant in this case. Finally, the velocity of the flow is very low therefore the diffusion–dispersion processes are significant. The equation describing the transport processes for this kind of problem is

$$\partial_t \beta(C_i) - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla C_i) + \nabla \cdot (C_i \mathbf{u}) + R_i(C_1, \dots, C_n) = q_{mi} \quad \text{on } \Omega. \quad (20)$$

Here C_i is the concentration of the i th contaminant, $\beta(\cdot)$ represents time evolution and equilibrium adsorption reaction, $\mathbf{D}$ is diffusion–dispersion tensor, $R_i(\cdot)$ represents changes of concentration of the i th contaminant due to chemical and radioactive reactions and q_{mi} is a source term for the i th contaminant.

A numerical model of this equation on the multidimensional domain will use the operator splitting technique and will be introduced in a forthcoming paper.

6. Implementation and example of results

We have implemented this approach for solving the flow problem and the transport phenomena in the programming language C. Results of benchmark problems show that the hydraulic communication and the mass exchange between

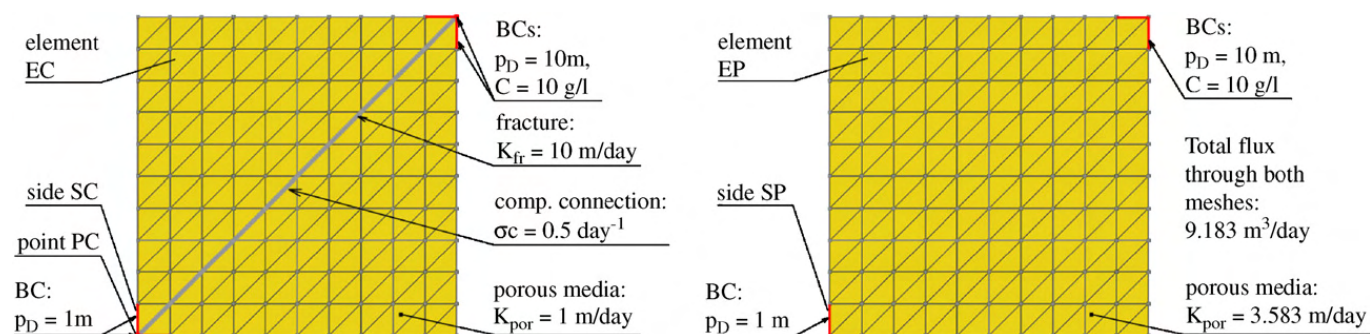


Fig. 4. Domains, meshes, parameters and observation points for the transport problems.

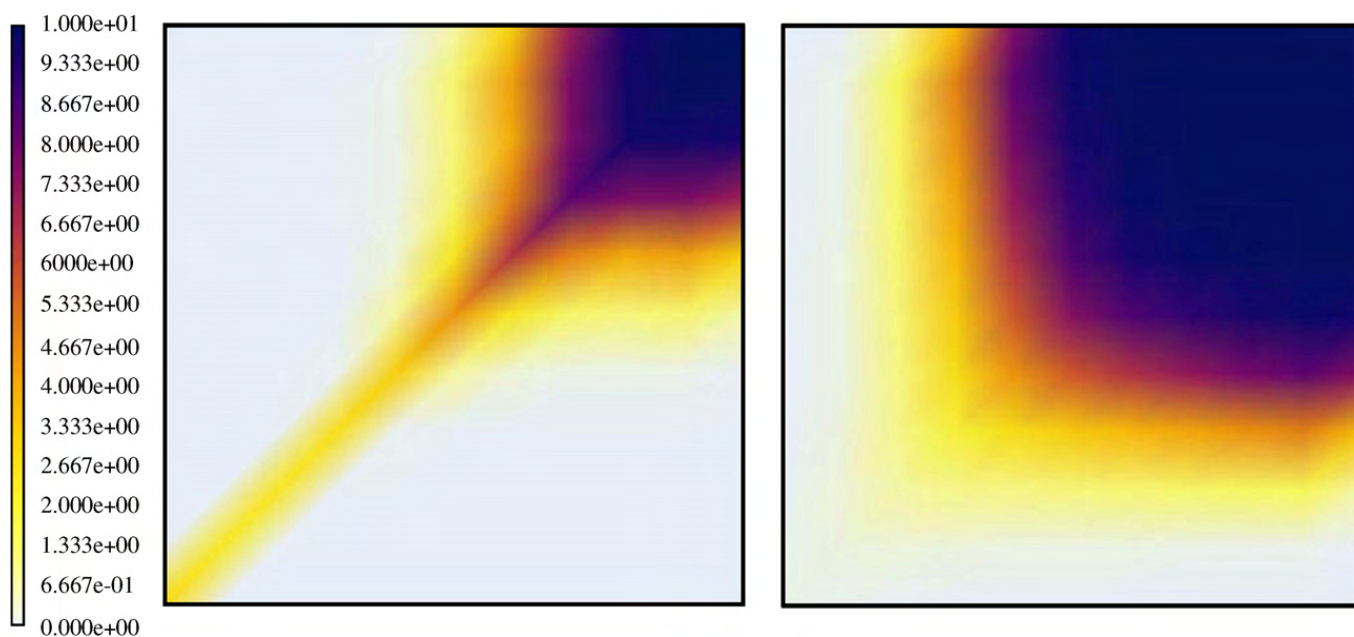


Fig. 5. Concentration field at time 4 days for the domain with fracture (left) and equivalent porous media domain (right).

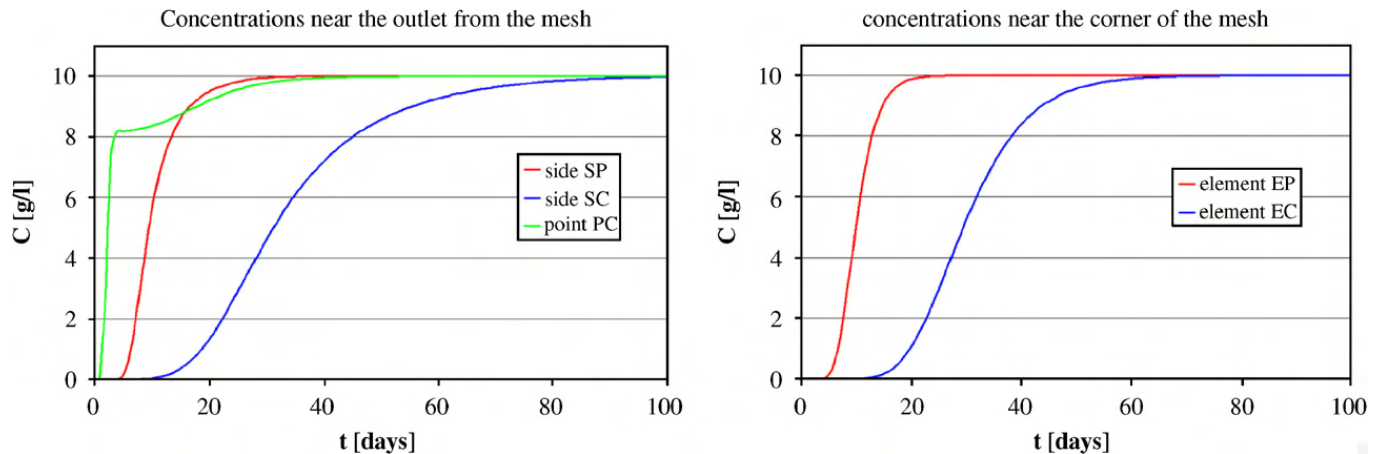


Fig. 6. Evolution of the concentrations in the selected points of the mesh.

elements of various dimensions works well and the behavior of the groundwater calculated by our program has properties of behavior of the groundwater in real fractured rock massifs.

In order to demonstrate the difference between the equivalent porous media approach and our new approach, let us consider the following benchmark problem, whose settings are shown in the left part of Fig. 4.

We took a square shaped domain, with a diagonal fracture inside. On such domain we calculated the flow problem, with predictable result, most of the fluid went through the fracture.

Next, we have tried the equivalent porous media approach for the same problem. We used the same domain, with the same boundary conditions, but without the fracture. We used an approach for the setting up a global permeability of the REV (reference elementary volume) of a fractured rock. We calibrated the value of the permeability K_{por} —constant in whole domain—of the porous media to obtain the same flux through the domain as in the previous case, as shown in right part of Fig. 4. The results of the following calculation clearly proved, that the shape of the flow field in this problem is totally different from the previous problem.

Even more significant difference can be observed in the results of the advective transport model, which are shown in Figs. 5 and 6. We have to emphasize again the fact that the transport model we used for this calculation is very simple. Therefore its results must be considered as a visualization of the flow field, not as a realistic simulation of the mass transfer process.

7. Conclusion

We have introduced a way how to set up a numerical model of groundwater flow and transport in fractured rock environment. Our approach uses the mixed-hybrid FEM on three hydraulically connected domains and FVM for the transport.

There are some open problems and unanswered questions concerning this approach:

- Although the results of the tests seem to be quite positive, we still know nothing about behavior of our model in large, real-world hydrogeological problems.
- We have to define an algorithm for prescribing the values of the coefficients σ_C and σ_I . This algorithm will be based on our experiences gained by calculation of the real-world problems. These two coefficients will be good parameters for the calibration of the models.
- Still there is no rigorous theoretical background for the new model. We have proved the existence and uniqueness of the solution and estimated the error for all three models we used for the construction of the new one. Proofs for the new model are goals for the theoretical works in a forthcoming paper.

References

- [1] P.M. Adler, J.-F. Thovert, *Fractures and Fracture Networks*, Kluwer Academic Press, Dordrecht, 1999.
- [2] J. Bear, C.-F. Tsang, G. De Marsily, *Modelling Flow and Contaminant Transport in Fractured Rocks*, Academic Press Inc., USA, 1993.
- [3] I.I. Bogdanov, V.V. Mourzenko, J.-F. Thovert, Effective permeability of fractured porous media in steady state flow, *Water Resour. Res.* 39/1 (2003) 1023–1039.
- [4] Z.X. Chen, Transient flow of slightly compressible fluids through double-porosity double-permeability systems, A state of the art review, *Transp. Porous Media* 4 (1989) 147–184.
- [5] E.F. Kaasschieter, A.J.M. Huijben, Mixed-hybrid finite elements and streamline computation for the potential flow problem, *Numer. Methods Partial Differential Equations* 8 (1992) 221–266.
- [6] J. Maryška, M. Rozložník, M. Tůma, Schur complement systems in the mixed-hybrid finite element approximation of the potential fluid flow problem, *SIAM J. Sci. Comput.* 22 (2000) 704–723.
- [7] J. Maryška, O. Severýn, M. Vohralík, Numeric simulation of the fracture flow with a mixed-hybrid FEM stochastic discrete fracture network model, *Comput. Geosci.* 8/3 (2005) 217–234.
- [8] M. Tauchman, Model of fluid flow in the environment with the porous and fracture permeabilities in 2D, Diploma Thesis, Technical University of Liberec, 2004 (in Czech).

Kapitola 8

Implementace systému flow123d

V předchozích třech kapitolách jsme popsali motivaci, která vedle k zahájení vývoje systému `flow123d`, jeho základní charakteristiky, způsob propojení prvků různých dimenzí, teoretickou formulaci modelu proudění a ukázali jsme výsledky řešení některých testovacích benchmarkových úloh.

V této kapitole se budeme věnovat implementaci systému `flow123d`, jeho architektuře, představíme jeho vnitřní a vnější datové struktury a základní algoritmy.

Nejprve definujeme rozdělení systému na platformu a modely. Poté představíme jednotlivé módy činnosti systému, čímž se dostaneme k popisu vstupních a výstupních dat (vnějších datových struktur). Od popisu vnějších struktur přejdeme ke strukturám vnitřním a jejich vzájemnému propojení.

Tento text si neklade za cíl být ani uživatelským, ani programátorským manuálem systému `flow123d`, jde o celkový popis systému a jeho skladby, tak jak byla navržena a implementována autorem této práce. Z tohoto důvodu je text spíše přehledový, pro detailní informace viz zprávu [25].

8.1 Platforma systému a modely procesů

Tato koncepce, která byla zmíněna v oddíle 6.2.6, se v jisté míře uplatnila již u předchozích systémů GWS a FFLOW. Systém `flow123d` je však první, kde byla používána zcela plánovitě a co možná nejdůsledněji.

Programový kód každého programu, který implementuje numerický mo-

del přírodního či technického procesu, můžeme rozdělit na dvě části: Kód výpočetní, který přímo realizuje numerickou metodu a kód podpůrný, který řeší manipulace s daty, komunikaci s uživatelem, komunikaci se systémem, ošetření chybových stavů atp. Můžeme říci, že podíl objemu podpůrného kódu vůči kódu výpočetnímu roste s univerzalitou daného programu a také s předpokládaným množstvím uživatelů a jejich znalostmi. Úzce specializovaný program, který je určen pro jednu jedinou zcela konkrétní úlohu a bude použit pouze svým autorem může mít ve svých zdrojových kódech pouze naprosté minimum podpůrného kódu. Na druhé straně systém určený pro širokou třídu úloh daného oboru, který bude používán mnoha uživateli orientovanými v tomto oboru a nikoliv v numerické matematice musí mít mnoho podpůrného kódu.

U programů systémů GWS i FFLOW byl tento poměr zhruba 75% kódu podpůrného a pouze 25% kódu výpočetního (bez započítání řešiče lineárních rovnic, který je v obou systémech volán jako externí aplikace).

Ačkoliv jsme tedy tento druh kódu označili jako podpůrný, jeho význam je značný, zvláště pokud je zamýšleno užívání vyvíjeného modelu uživateli, kteří přímo nejsou jeho vývojáři a nebo vůbec nemají přístup ke zdrojovému kódu. V takových případech jsou otázky správného ošetření chybových stavů, komunikace s uživatelem, dokumentace datových struktur atp. důležitými faktory, které rozhodují o úspěšnosti daného modelu.

Také pro vývojáře modelů má funkční a dobře propracovaný podpůrný kód mnoho výhod. Nesporně největší z nich je možnost opakovaného použití tohoto kódu v různých modelech bez nutnosti pracného a zdlouhavého vývoje podpůrných rutin o stejné funkčnosti pro každý model zvlášť. Další výhodou je možnost oddělení vývoje výpočetního a podpůrného kódu, kdy podpůrný kód mohou vyvíjet specialisté-informatici, zatímco výpočetní kód specialisté na numerické metody. Dále uveďme zkrácení etapy ladění programů, kdy dobře navržený podpůrný kód může pomoci zjistit chyby nově vyvíjených procedur.

V dalším textu kapitoly budeme používat označení *platforma systému* pro podpůrné části kódu a některé s nimi spojené dokumenty. Pojmem *numerický model* nebo jen *model* pro výpočetní část kódu.

Můžeme poměrně přesně definovat body, ve kterých dochází k předání řízení běhu programu mezi platformou a modelem. V první etapě řídí běh programu platforma, která posléze předá řízení modelu a po ukončení výpočtu se řízení opět vrací platformě.

K prvnímu předání řízení dojde v okamžiku, kdy:

- Veškerá vstupní data jsou načtena z vnějších zdrojů (souborů, databází, výstupů jiných programů) do paměti, tj. do příslušných datových struktur.
- Je provedena základní kontrola konzistence a korektnosti vstupních dat.
- Součásti sítě, které jsou v relaci jsou propojeny pomocí ukazatelů, tzn. je vyřešena topologie sítě.
- Jsou provedeny přípravné výpočty např. typu výpočtu ploch či objemů prvků.

Ke druhému předání řízení dojde po skončení výpočtu, kdy platforma zajistí uvolnění paměti, případně dalších systémových zdrojů a ukončí běh programu.

Funkce nabízené platformou jsou ovšem využívány i ve fázi, kdy je běh programu řízen modelem. Zde se jedná zejména o výstup výsledků výpočtů do datových souborů, komunikaci se systémem atp..

Platforma systému `flow123d` se skládá z následujících částí:

1. Definice formátů vstupních a výstupních souborů modelů (tzv. vnějších datových struktur).
2. Definice vnitřních datových struktur modelů.
3. Procedury pro vyhledávání topologických vazeb mezi jednotlivými součástmi sítě a pro jejich vyhledávání.
4. Procedury pro načtení vstupních souborů a vytvoření souborů výstupních.
5. Procedury pro komunikaci s operačním systémem a pro ošetření chybových stavů.
6. Uživatelská a programátorská dokumentace, metodika tvorby nových modelů.

V dalším textu kapitoly se zaměříme na popis prvních tří bodů, další uvedené body jsou ve své podstatě standardní řešení.

8.2 Režimy práce programu flow123d

V první etapě vývoje byl celý systém `flow123d` koncipován jako jedna aplikace, která v sobě zahrnuje programový kód platformy a kód modelů proudění a transportu. Tato aplikace může být používána ve třech módech činnosti, jejichž volba se provádí parametry příkazového řádku. Jedná se o:

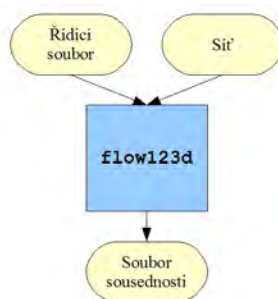
1. Režim generování souboru sousedností.
2. Režim konverze vstupních souborů.
3. Režim výpočtu.

Ve všech třech režimech je programu předáno jméno řídicího souboru (tzv. INI-soubor) jako druhý parametr příkazové řádky. Tento soubor obsahuje údaje o dalších vstupních souborech, o jménech výstupních souborů, způsobu výpočtu, parametry řešiče atp.

8.2.1 Generování souboru sousednosti

Soubor sousednosti (tzv. NGH-soubor) nese informace o topologii sítě a je nezbytný pro simulace procesů. Podrobněji se tomuto tématu budeme věnovat v oddíle 8.5.1. Na tomto místě jen poznamenejme, že generování souboru sousednosti je zpravidla jeden z posledních kroků přípravy modelu dané lokality, krokem, který bezprostředně předchází samotnou simulaci.

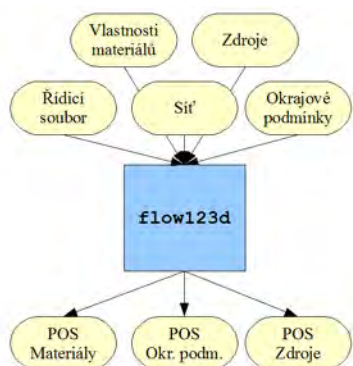
V tomto režimu činnosti program načte INI soubor a soubor sítě (tzv. MSH-soubor) a výsledky své činnosti uloží do NGH souboru. Schematické znázornění tohoto režimu je na obrázku 8.1.



Obrázek 8.1: Schéma funkce programu `flow123d` při generování sousednosti

8.2.2 Konverze vstupních souborů

Tento mód činnosti je spíše pomocný, používaný při tvorbě modelů lokalit. Schéma činnosti je znázorněno na obrázku 8.2. Program načte — mimo řídicího souboru — soubor sítě a další soubory používané jako vstupní při výpočetním režimu (materiálové vlastnosti, zdroje, okrajové podmínky, atp.) a konvertuje je do formátu POS, ve kterém je možno vizualizovat informaci v nich obsaženou pomocí programu GMSH.



Obrázek 8.2: Schéma funkce programu `flow123d` při konverzi vstupů

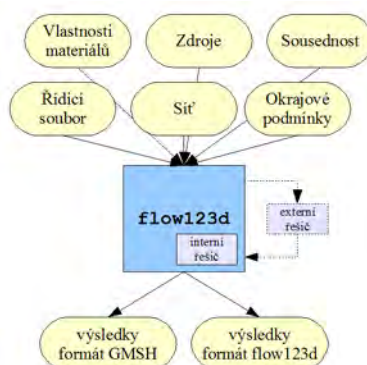
8.2.3 Režim výpočtu

V tomto režimu probíhá vlastní simulace přírodních procesů. V popisované verzi systému `flow123d` byly k dispozici modely těchto procesů:

- Ustálené Darcyovské proudění s napjatou hladinou.
- Neustálené Darcyovské proudění s napjatou hladinou.
- Advektivní vícesložkový transport látek.

Schématické znázornění jednotlivých druhů výpočtů z hlediska vstupních a výstupních informací je na obrázcích 8.3 až 8.5.

V tomto okamžiku, kdy jsme pro jednotlivé režimy činnosti programu `flow123d` definovali vstupující a vystupující informace, můžeme přejít k výkladu formátů souborů tyto informace nesoucích.



Obrázek 8.3: Schéma funkce programu `flow123d` při výpočtu ustáleného proudění

8.3 Vnější datové struktury

Systém `flow123d` v popisované verzi načítá svá vstupní data ze souborů a výstupy ukládá do souborů na disku počítače. Jiné formy vstupů/výstupů, např. databáze či programové kanály nebyly implementovány.

Všechny dále popsané formáty souborů jsou textové, důvodem byl požadavek jejich snadné manuální editace. S výjimkou řídicího INI souboru je formát ostatních vstupních souborů do značné míry podobný, vycházející z formátu souboru sítě, tak jak byl definován autory programu GMSH.

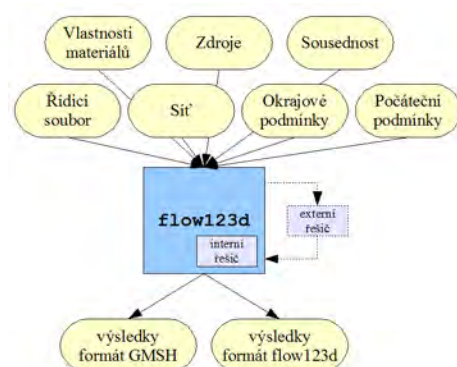
8.3.1 Řídicí soubor

Pro řídicí soubor byl použit formát konfiguračních INI souborů systému MS Windows, viz <http://www.cloanto.com/specs/ini.html>¹. Z tohoto důvodu se také v systému `flow123d` standardně používá přípona `.INI` pro tento typ souborů.

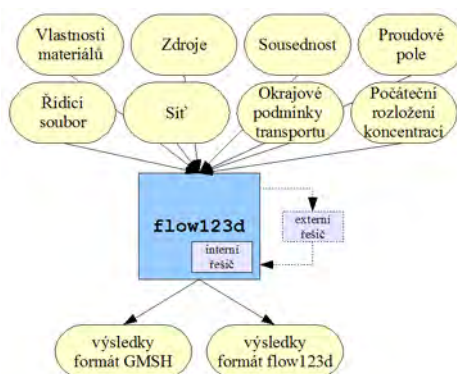
Soubor obsahuje řádky typu klíč = hodnota, uspořádané do sekcí. Popis názvů sekcí, názvů klíčů, jejich význam a povolené množiny hodnot, které může daný klíč nabývat tvoří uživatelskou dokumentaci systému `flow123d`, viz [25].

Velkou předností tohoto formátu je možnost snadného přidávání nových klíčů či sekcí při rozšiřování funkcí modelu a také standardní funkce pro

¹Odkaz funkční 18.4.2008



Obrázek 8.4: Schéma funkce programu `flow123d` při výpočtu neustáleného proudění



Obrázek 8.5: Schéma funkce programu `flow123d` při výpočtu transportu

manipulaci s tímto typem souborů.

8.3.2 Soubor síť

Tento soubor nese informace o prostorové diskretizaci oblasti. Byl použit formát systému GMSH, který je natolik obecný, že i pro multidimenzionální model s nekonformní sítí jej bylo možno bez dalších úprav či rozšiřování začlenit přímo do systému, naopak, systém `flow123d` využívá pouze některých možností tohoto formátu. Podrobnou specifikaci tohoto formátu je možno najít v dokumentaci systému GMSH, [8]. Pro výpočetní síť v tomto formátu uložené je standardně používána přípona `.MSH`. Jelikož návrh formátu dal-

ších datových souborů souborů systému `flow123d` vychází ze souboru sítě, zastavíme se u jeho popisu podrobněji, neboť skutečnosti zde uvedené platí obecně i pro další soubory.

Soubor je textový, rozčleněný na sekce. První sekce standardně nese informace o typu souboru a jeho verzi. Následují nesoucí vlastní data. Pro zápis celých a desetinných čísel a textových řetězců platí pravidla jazyka C, viz [26]. Informace v datových sekcích je organizována po řádcích, každý řádek definuje jeden objekt (objektem myslíme např. uzel, prvek, okrajovou podmínku, atp.). Objekt je v rámci svého typu jednoznačně určen svým unikátním identifikačním číslem, kterým se něj odkazují další objekty. Identifikační číslo musí být celé nezáporné číslo, další podmínky typu uspořádání objektů v souboru dle id. čísla či očíslování objektů souvislým intervalem bez mezer nejsou stanoveny. Ačkoliv absence těchto podmínek mírně zvyšuje nároky na programátora platformy, z hlediska uživatele programu jde o vlastnost velmi žádoucí, usnadňující tvorbu a ladění modelů lokalit.

U některých objektů je použita koncepce tzv. *tagů*, což je množina celých nezáporných čísel přiřazených danému objektu. Jejich počet a význam je volný, definovaný uživatelem. Počet tagů se může lišit i v rámci objektů jednoho typu. Systém `flow123d` definuje některé tagy jako povinné a přiřazuje jim předem danou funkci, ostatní jsou volitelné.

Nyní již konkrétně k formátu souboru sítě. Ten obsahuje dvě datové sekce, první definuje uzly, druhá elementy. Každý uzel nese informace o své poloze v prostoru, vyjádřené kartézskými souřadnicemi. Element nese informace o svém typu, o uzlech tento element tvořících a své tagy. V popisované verzi systému `flow123d` jsou povoleny elementy typů „úsečka“, „trojúhelník“ a „čtyřstěn“. Definován je význam prvního tagu, který určuje tzv. *typ materiálu*, což je odkaz do souboru materiálů, který popíšeme v následujícím oddíle.

8.3.3 Soubor materiálových vlastností

Tento soubor — označovaný jako soubor materiálů či MTR-soubor — nese hodnoty fyzikálních charakteristik oblasti, na které simulace probíhá. Použitá koncepce „materiálů“, tj. podoblastí, které mají shodné hodnoty svých fyzikálních vlastností je pro modely podzemních procesů velmi výhodná, zejména ve srovnání se druhým používaným způsobem, kterým je předepisování hodnot přímo jednotlivým elementům a to z následujících důvodů:

- V praktických úlohách se většinou vyskytuje pouze relativně malý počet hornin, proto MTR-soubor nebývá zpravidla příliš rozsáhlý.
- Některé parametry prostředí známe pouze přibližně, jejich zpřesnění je možné pouze kalibrací modelu. Skutečnost, že hodnota daného parametru je pro danou podoblast definována pouze na jednom místě zjednodušuje a zrychluje proces kalibrace.
- V případě potřeby lze zavést stejný počet materiálů jako elementů a tím předepsat vlastnosti každého elementu zvlášť.
- Soubor materiálových vlastností lze sdílet mezi modely různých lokalit.

MTR-soubor se skládá ze sekcí, které každá popisují jednu fyzikální veličinu, určenou názvem sekce. V sekci jsou potom definovány jednotlivé materiály a hodnoty příslušné veličiny pro daný materiál. Možné jsou různé způsoby zadání téže veličiny.

8.3.4 Soubor okrajových podmínek proudění

Popisovaný model proudění umožňuje na hranici oblasti definovat okrajové podmínky Dirichletova, Neumannova a Newtonova typu. Podobně jako v dalších systémech i zde platí tzv. implicitní okrajová podmínka, což je homogenní podmínka Neumannova typu, která je automaticky předpokládána na těch částech hranice oblasti, které nejsou uvedeny v souboru okrajových podmínek (BCD-souboru).

Každá okrajová podmínka v tomto souboru má určen svůj typ, ze kterého se odvíjí počet a význam dále uvedených hodnot. Dále je určeno, na jakém objektu je podmínka zavedena (uzel či stěna elementu) a tento objekt identifikován. Poslední částí definice okrajové podmínky jsou tagy, z nichž první má význam skupiny. Model proudění počítá objem kapaliny prošlé přes hranici oblasti v rámci takto zavedených skupin okrajových podmínek.

8.3.5 Soubor zdrojů kapaliny

Tento soubor, označovaný jako SRC-soubor, definuje intenzitu čerpání či vtlačení uvnitř oblasti. Tento soubor je volitelný, pokud v INI-souboru není určeno jeho jméno, výpočet proběhne bez uvažování vlivu vnitřních zdrojů.

Zdroje jsou vázány na elementy sítě, každý zdroj se odkazuje na element a předepisuje intenzitu vtlačení či čerpání z daného elementu v objemu za čas. Platí konvence, že kladná hodnota znamená vtlačení, záporná čerpání.

8.3.6 Soubor sousednosti elementů sítě

Otázkám sousednosti a topologie sítě je věnován oddíl 8.5.1, kde je tato problematika popsána obšírněji. Na tomto místě proto pouze zmíníme, že soubor, který definuje spojení mezi elementy — nazývaný NGH-soubor — má jednu datovou sekci, každý řádek definuje množinu propojených stěn a/nebo elementů.

8.3.7 Soubor okrajových podmínek transportu

Okrajové podmínky pro transportní model stanovují hodnoty koncentrací látek na těch částech hranice oblasti, kterými kapalina do oblasti vtéká.

Soubor okrajových podmínek transportu (TRB-soubor) zavádí tyto hodnoty koncentrací. Podmínky v tomto souboru uvedené se odkazují na okrajové podmínky proudění. I zde platí implicitní okrajová podmínka, která stanovuje, že není-li na dané části hranice oblasti předepsána okrajová podmínka transportu a zároveň přes tuto část hranice vtéká do oblasti kapalina, uvažujeme nulové koncentrace všech látek v této kapalině. Předepíšeme-li transportní okrajovou podmínku na části hranice, kudy kapalina vytéká, je tato podmínka ignorována.

8.3.8 Soubor počátečních podmínek

Tento soubor, nazývaný ICD-soubor, je vyžadován při řešení úloh neustálého proudění a transportu. Soubor zpravidla vzniká jako výsledek výpočtu, pouze výjimečně je vytvářen ručně. Obsahem souboru jsou hodnoty tlaků a přetoků látky mezi elementy. Soubor má proměnný počet sekcí, každá ze sekcí zachycuje stav v jednom časovém okamžiku. Informace v rámci sekce je uložena ve vazbě na elementy sítě, pro každý element jsou předepsány hodnoty tlaků v těžišti elementu a v těžištích stěn a hodnoty objemových toků přes stěny elementu.

8.3.9 Soubor počátečního rozložení koncentrací

Pro výpočet transportu látek je nutno znát počáteční rozložení koncentrací těchto látek v dané oblasti. To je v systému `flow123d` popsáno v tzv. CON-souboru. Jeho struktura je poměrně jednoduchá, informace v něm je vázána na elementy sítě, přitom pro každý element jsou dány hodnoty koncentrací látek v tomto elementu na počátku simulace.

8.3.10 Výstupní soubory modelů

Systém `flow123d` produkuje tři typy výstupních souborů. Prvním z nich jsou tzv. POS-soubory, které jsou určeny pro vizualizaci v programu GMSH. Bohužel, struktura POS-souborů není vhodná pro jejich další použití jako vstupů navazujících modelů (např. výsledky modelu proudění použité jako vstup modelu transportu). Důvodem je ztráta vazby na síť, POS-soubor ve své současné verzi vyžaduje explicitní zadání bodů ve kterých jsou výsledky výpočtů uloženy ve formě souřadnic. Bylo by sice v principu možné tuto vazbu zpětně obnovit při znalosti sítě, avšak toto řešení by bylo komplikované po stránce programátorské a náročné na čas, neboť by vyžadovalo geometrické vyhledávání.

Jednodušším a elegantnějším řešením bylo zavedení dalších dvou typů výstupů, které sice nejde přímo vizualizovat, avšak obsahují vazbu na síť a proto je jejich použití jako vstupů snadné. Z těchto dvou typů výstupních souborů první popisuje proudové pole a je formálně totožný se souborem počátečních podmínek popsaným výše v oddíle 8.3.8. Druhý typ popisuje pole koncentrací a má formát CON-souboru popsaného v 8.3.9.

8.4 Vnitřní datové struktury

Nyní přejdeme od popisu vnějších struktur, tedy datových souborů ke strukturám vnitřním. Opět ani zde nebudeme provádět podrobný popis všech členů těchto struktur a jejich významů, zaměříme se na ideje návrhu. Systém `flow123d` v popisované verzi pracuje s těmito vnitřními datovými strukturami:

- Úloha (Problem)
- Síť (Mesh)

- Uzel (**Node**)
- Element (**Element**)
- Stěna (**Side**)
- Hrana (**Edge**)
- Materiál (**Material**)
- Okrajová podmínka (**Boundary**)
- Počáteční podmínka (**Initial**)
- Okrajová podmínka transportu (**Transport_bcd**)
- Počáteční rozložení koncentrací (**Concentration**)
- Zdroj (**Source**)
- Soused (**Neighbour**)
- Matice (**Matrix**)
- Chyba (**Error**)

Většina těchto vnitřních datových struktur má přímou vazbu na vnější datové struktury (tj. soubory popsané v předchozí kapitole) a v počáteční fázi běhu programu dochází ke kopírování obsahu těchto souborů do příslušných členů vnitřních datových struktur. Korespondence mezi vnitřními a vnějšími datovými strukturami je uvedena v tabulce 8.1.

Nyní stručně představíme jednotlivé struktury a jejich význam.

8.4.1 Problem

Je ústřední datovou strukturou celého systému `flow123d`. Existuje její jediná instance, která je globální proměnnou systému. Do této struktury se ukládají veškeré informace z INI-souboru a na základě jejího obsahu je řízen celý běh programu.

Vnitřní datová struktura	Vstupní soubor
Problem	*.INI
Mesh	—
Node	*.MSH
Element	*.MSH
Side	—
Edge	—
Material	*.MTR
Boundary	*.BCD
Initial	*.ICD
Transport_bcd	*.TRB
Concentration	*.CON
Source	*.SRC
Neighbour	*.NGH
Matrix	—
Error	—

Tabulka 8.1: Korespondence mezi vnitřními a vnějšími datovými strukturami

8.4.2 Mesh

Struktura sítě je jakýmsi kontejnerem, který sdružuje odkazy na seznamy všech ostatních objektů v diskretizační síti se vyskytujících. Také od této struktury existuje za běhu pouze jediná instance, která je však vytvářena dynamicky, na základě volání struktury **Problem**. Druhou funkcí struktury **Mesh** je sdružení vyhledávacích indexů pro ostatní objekty.

8.4.3 Node

Uzel sítě nese především informace o své poloze. Při výpočtu úloh proudění modelem založeným na smíšené hybridní formulaci MKP a transportu nemá uzel kromě geometrické informace jiný význam. Ovšem při použití primární formulace MKP je uzel velmi důležitou strukturou, se kterou se během výpočtu často manipuluje. Z tohoto důvodu byla tato struktura navržena a implementována obecněji, než by vyžadovalo použití modelů existujících v popisované verzi systému.

8.4.4 Element

Je nejvýznamnější — a proto také nejrozsáhlejší — datovou strukturou z hlediska vlastního výpočtu úloh proudění a transportu. Element nese četné odkazy na další související objekty, materiálové koeficienty, prvky lokální matice, příslušející prvky globální matice, hodnoty koeficientů báзовých funkcí, výsledky výpočtů v předchozích časových krocích, aj.

8.4.5 Side

Druhá velmi významná struktura pro výpočet proudění pomocí smíšené hybridní MKP. Podobně jako element nese četné odkazy na další objekty sítě, z nichž nejdůležitější je odkaz na sousedící stěnu. Dále nese stěna informace geometrické a některé výsledky výpočtů a prvky globální stavové matice.

Struktura stěny není spojena s žádným datovým souborem, seznam stěn vzniká na základě znalosti elementů a uzlů sítě.

Důležitý je vztah mezi stěnami a hranami. Tato terminologie není možná zvolena zcela vhodně, nicméně se její použití na pracovišti autora ustálilo a proto ho v této práci budeme používat. *Stěna* je součást hranice elementu, každá stěna přísluší právě jednomu elementu. Geometrický tvar stěny závisí na příslušném elementu, v systému `flow123d` jsou stěnami body v případě liniových elementů, úsečky v případě trojúhelníkových elementů a trojúhelníky v případě čtyřstěnů. *Hrana* je množina stěn téhož typu, které zaujímají totožnou polohu v prostoru. Zavedení stěn a hran se může na první pohled jevit jako zbytečná komplikace, ale při použití smíšené hybridní MKP je tento způsob velmi výhodný.

8.4.6 Edge

Definice pojmu hrana v terminologii systému `flow123d` byla uvedena v předchozím oddíle. Význam této struktury je především pro uchování informace o klasické sousednosti prvků (viz [8.5.1](#)) prostřednictvím seznamu sousedících stěn, které tvoří danou hranu.

Podobně jako v předchozím případě stěny, také datová struktura hrany není přímo propojena s žádným datovým souborem, seznam hran vzniká až po seznamu stěn.

8.4.7 Material

Tato struktura má význam v počátečních stádiích výpočtu, kdy je do seznamu struktur tohoto typu překopírován obsah MTR-souboru. Jakmile je provedeno řešení topologie jsou hodnoty fyzikálních koeficientů překopírovány dále do struktur elementů.

8.4.8 Boundary

Tato datová struktura představuje okrajovou podmínku pro proudění. Každá struktura nese informace z jednoho řádku BCD-souboru, odkaz na příslušnou stěnu kde je definována a odkaz na případnou transportní okrajovou podmínku. Uchovávají se v ní také příslušné prvky globální matice.

8.4.9 Initial

Seznam těchto struktur je vnitřní reprezentací ICD-souboru. Jakmile je vyřešena topologie sítě, jsou počáteční hodnoty překopírovány ze seznamu počátečních podmínek do příslušných členů struktur elementů.

8.4.10 Transport_bcd

Seznam těchto struktur je reprezentací TRB-souboru v paměti počítače. Informace v těchto strukturách uložená je využívána po celou dobu výpočtu, neboť v každém časovém kroku je nutno počítat množství jednotlivých látek přitekklých přes hranice oblasti.

8.4.11 Concentration

Význam této struktury je velmi podobný výše uvedené struktuře počáteční podmínky transportu. Seznam struktur **Concentration** je vnitřní reprezentací CON-souboru, po vyřešení topologie jsou hodnoty z tohoto seznamu načteny do struktur elementů.

8.4.12 Source

Poslední ze struktur, které reprezentují datové soubory, v tomto případě SRC-soubor. Struktura je poměrně jednoduchá, nese informaci o intenzitě čerpání/vtláčení a odkaz na příslušný element.

8.4.13 Neighbour

Seznam struktur **Neighbour** je klíčový pro řešení topologie sítě a propojení sousedících stěn a elementů. Do seznamu je načten obsah NGH-souboru a poté jsou vytvořeny příslušné odkazy. Podrobnosti jsou uvedeny ve speciálním oddíle [8.5.1](#).

8.4.14 Matrix

Je reprezentací globální stavové matice systému, její pravé strany a vektoru řešení. Existuje jediná instance této struktury, která je předávána řešiči soustav lineárních rovnic. Stavová matice je v této struktuře uložena v komprimované formě.

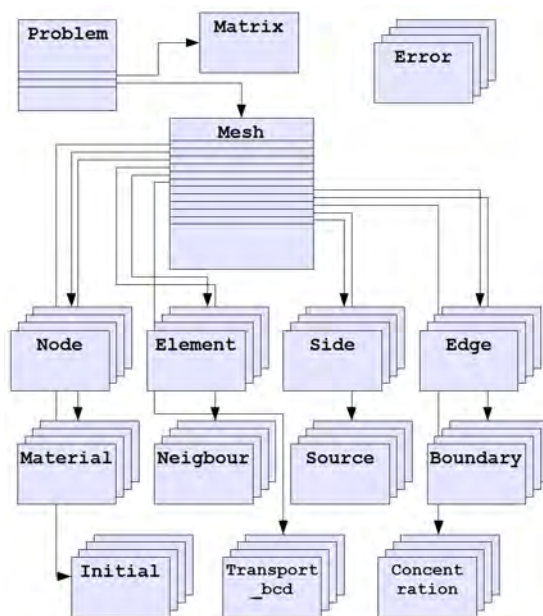
8.4.15 Error

Pomocná datová struktura pro ošetření chybových stavů. Seznam těchto struktur je druhou globální proměnnou systému **flow123d**. Každá struktura tohoto typu nese informace o typu chyby, její číslo a popis.

8.5 Vazby mezi vnitřními datovými strukturami

Většina výše popsanych datových struktur — s výjimkami Úlohy, Sítě a Matice — existuje v mnoha instancích. Pro uložení těchto instancí byly ve všech případech použity obousměrně propojené lineární spojové seznamy. Toto řešení je mírně náročnější než použití polí, avšak podstatně pružnější, například zavedení adaptivního zjemňování sítě, které je ve výhledu prací na systému **flow123d**, by bylo pomocí polí velmi obtížně implementovatelné.

Základní znázornění datových struktur objektů sítě a jejich seznamů a jejich vazba na globální proměnné je na obrázku [8.6](#). Tento obrázek však nezachycuje vazby mezi jednotlivými objekty, pouze vazbu seznamů na strukturu sítě. Vzájemná provázanost objektů tvořících síť a jejich relace jsou na obrázku [8.7](#).



Obrázek 8.6: Uložení datových struktur programu flow123d

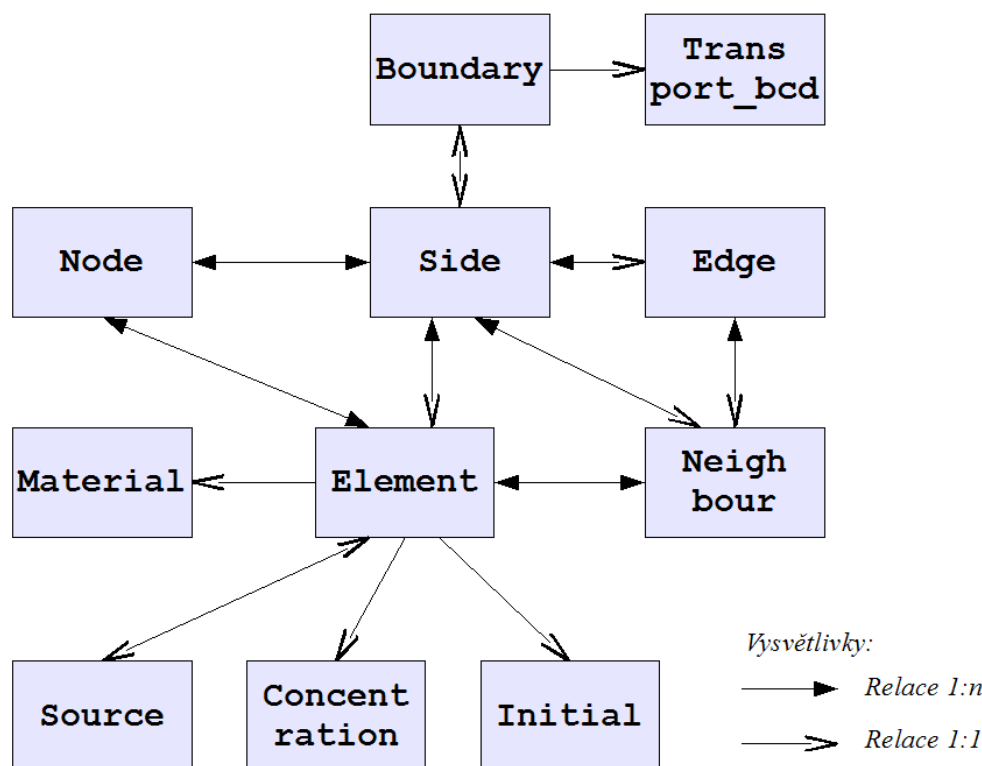
8.5.1 Sousednost elementů

Téma sousednosti elementů je jedním z centrálních bodů celé platformy systému flow123d. V popisu vnějších i vnitřních datových struktur jsme téma sousednosti pomíjeli, neboť pro svoji důležitost vyžaduje obsírnější popis.

Soubor sousednosti elementů se do jisté míry vymyká ostatním vstupním souborům flow123d a to v několika aspektech.

Především je tento soubor ve většině případů generován ve speciálním režimu běhu programu flow123d, ruční editace souboru sousednosti je možná, avšak předpokládá se pouze v omezené míře (např. definování vynucených sousedností, oddělení částí sítě nebo úpravy přestupových koeficientů — viz dále).

Druhým aspektem je, že tento soubor ve své podstatě není pro běh programu flow123d nutný, neboť veškerá informace v něm obsažená je zcela obsažena v souboru sítě. Ovšem zpracování souboru sítě pro zjištění sousedností je časově náročná úloha (kvadratické náročnost na čas) a při typickém postupu ladění hydrogeologického modelu opakovaně spouštíme výpočet na stejné síti, pouze s různými hodnotami materiálových vlastností a/nebo okrajových podmínek, přičemž pro uživatele je výhodná co největší rychlost běhu



Obrázek 8.7: Vzájemné vazby mezi objekty sítě

programu. Za předpokladu, že se síť nemění je vhodné provést zjištění sousedností pouze jednou a při dalších bězích využívat dříve vygenerovaný soubor sousedností.

V programu `flow123d` rozlišujeme celkem čtyři typy sousednosti elementů: klasickou, konformní, nekonformní a vynucenou.

Klasická sousednost elementů

Klasická sousednost, v terminologii programu označovaná jako sousednost stěna–stěna je taková, kdy elementy stejné dimenze sousedí svojí společnou stěnou, což znamená sdílení uzlů této stěny příslušných. Poznamenejme, že tímto způsobem nemusí sousedit pouze dva elementy, možná je sousednost více elementů, což je typické pro puklinové sítě.

Řádek souboru sousednosti definující sousednost stěna–stěna obsahuje

údaj o počtu sousedících elementů a jejich ID čísla.

Můžeme říci, že jeden řádek sousednosti typu stěna–stěna odpovídá jedné hraně sítě a popisuje množinu sousedících stěn. Nejde tedy o definici sousedů daného elementu a každý element se může vyskytnout nanejvýš v tolika definicích klasické sousednosti, kolik je počet jeho stěn.

Dále poznamenejme, že program `flow123d` při načítání a přípravě sítě pro výpočet plně spoléhá na informace obsažené v souboru sousednosti, což má několik praktických důsledků pro uživatele. Předně musí uživatel udržovat konzistenci mezi soubory MSH a NGH a po každé úpravě MSH souboru znovu vygenerovat příslušný NGH soubor. Program `flow123d` provádí kontrolu konzistence těchto souborů pouze na základě dat jejich poslední změny, v budoucích verzích by měla být implementována kontrola pomocí hashovacích funkcí.

Dále při vymazání řádky z NGH-souboru zmizí informace o tom, že příslušné stěny spolu komunikují a budou se chovat jako vnější stěny modelu. Toho může být využito např. pro reprezentaci hydraulicky zcela nevodivé pukliny bez nutnosti použití 2D elementů.

Konformní sousednost elementů

Konformní sousedností elementů rozumíme situaci, kdy element nižší dimenze tvoří stěnu elementu vyšší dimenze. Tento typ označujeme jako sousednost objem–stěna. Element a stěna tímto způsobem sousedící mohou, ale nemusí mít společné uzly. Proto také v řádce definující tuto sousednost je nutno uvést lokální číslo stěny elementu vyšší dimenze. Posledním údajem je hodnota přestupového koeficientu, která určuje úměrnost mezi tlakovým spádem a tokem mezi elementy.

Konformní spojení je vždy spojení jedné stěny a jednoho elementu, proto v případech kdy puklinový element leží mezi dvěma objemovými je nutno popsat pomocí dvou řádků NGH-souboru a stejně tak situace liniového elementu na průsečnici puklin vyžaduje tolik řádků, kolik stěn se na dané průsečnici dotýká.

Nekonformní sousednost elementů

Nekonformní, neboli sousednost typu objem–objem, kdy dochází k průniku objemů elementů a sousednost je dána pouze vzájemnou polohou elementů. Tento typ sousednosti by v principu bylo možno uplatnit jak pro elementy

různých dimenzí, tak i pro elementy shodné dimenze. Nekonformní spojení elementů různé dimenze není prozatím používáno, neboť nebyly implementovány algoritmy hledání příslušných průniků.

Řádek příslušící tomuto spojení obsahuje čísla sousedících elementů a stejně jako v případě konformního spojení hodnotu přestupového koeficientu. Metodika určování tohoto koeficientu pro nekonformní spojení zatím nebyla stanovena, předpokládá se, že jeho hodnota závisí na objemu průniku a jeho poloze vůči těžištím elementů.

Stejně jako u konformního spojení, i zde jeden řádek NGH-souboru přísluší jedné dvojici elementů.

Vynucená sousednost elementů

Vynucenou sousednost je sousednost typu stěna–stěna, ovšem bez podmínky společných uzlů. Tento druh umožňuje definovat hydraulickou komunikaci mezi několika stěnami, bez ohledu na jejich vzájemnou prostorovou polohu a dokonce i bez ohledu na jejich dimenze. Tímto způsobem je možné a výhodné propojovat stěny, které mají stejnou polohu, avšak jsou tvořeny různými uzly a tím pádem nelze použít sousednost klasickou. Uživatele je však třeba důrazně varovat, vynucení sousednosti v jiných případech než stěny s různými uzly je vhodné pouze pro speciální účely a je nutné jeho použití v modelu reálné úlohy pečlivě zvážit a odůvodnit, neboť vede k nespojitostem v proudovém a poli a tedy nefyzikálnímu chování modelu, čímž může být zpochybněna jeho věrohodnost. Jako příklad situace, ve které by mělo vynucené spojení vzdálených elementů smysl můžeme uvést zapážený vrt otevřený ve dvou různých polohách.

Příslušný řádek NGH-souboru obsahuje počet sousedících stěn, čísla jejich elementů a příslušná lokální čísla.

8.5.2 Vytvoření a naplnění vnitřních datových struktur

V tomto oddíle popíšeme algoritmus, který proběhne v programu `flow123d` v režimu výpočtu mezi okamžikem spuštění programu a okamžikem, kdy platforma předá řízení modelu.

1. V okamžiku startu programu automaticky existuje struktura `Problem` a seznam struktur `Error`.

2. Na základě parametru příkazové řádky je otevřen příslušný INI-soubor a hodnoty z něho jsou načteny do struktury **Problem**. Poté je vytvořena struktura sítě a stavové matice.
3. Následuje čtení jednotlivých vstupních souborů a vytváření příslušných seznamů. Které seznamy budou vytvořeny závisí na typu řešené úlohy.
4. Po čtení vstupních souborů jsou vytvořeny seznamy stěn a hran. Počty stěn a hran je v tomto okamžiku snadné zjistit, neboť počet stěn vyplývá z počtu elementů a jejich typu a počet hran je dán počtem stěn zmenšeným o příslušné počty stěn klasických a vynucených sousedností.
5. Dalším krokem je vytvoření indexových polí, která slouží pro rychlé vyhledávání příslušných objektů sítě. To je vynuceno rozvolněním požadavků na identifikační čísla objektů, jak bylo popsáno v oddíle [8.3.2](#). Indexové pole na své n -té pozici má odkaz na objekt daného typu s identifikačním číslem n .
6. Ve chvíli, kdy jsou kdy jsou naplněny indexová pole je možno začít propojovat objekty sítě pomocí ukazatelů, tj. převádět odkazy doposud uložené ve formě identifikačních čísel objektů na ukazatele na objekty příslušných čísel. Až v tomto okamžiku se projeví případné chyby v datových souborech, jako např. odkazy na neexistující uzly atp.
7. Po vytvoření vazeb mezi objekty sítě pomocí ukazatelů jsou provedeny pomocné výpočty, např. objemy elementů, normály stěn, atd. Po jejich skončení je možno předat řízení běhu programu numerickému modelu příslušného procesu.

Kapitola 9

Vývoj systému flow123d — závěr

V předchozím textu druhé části práce jsme představili systém `flow123d`, se zaměřením na ty partie jeho návrhu, vývoje a implementace, na kterých má autor práce významný osobní podíl.

V této závěrečné kapitole shrneme a zhodnotíme poznatky a zkušenosti získané při tvorbě a praktickém nasazení tohoto systému a nastíníme možnosti jeho dalšího vývoje.

Vývoj systému autorem práce započal v roce 2003 etapou specifikace a návrhu, pokračoval v letech 2004 a 2005 implementací platformy a základních modelů proudění a transportu a jejich testováním. Od roku 2006 se autorova osobní účast na vývoji systému snižuje v důsledku intenzivní práce na projektu ES PZP, popsané v první části práce.

9.1 Použití systému pro řešení praktických úloh

Praktické nasazení každého takového nově vyvinutého systému znamená vždy pro tento systém „zkoušku ohněm“, při které se nejvíce projeví jeho chyby a nedostatky, problematická místa návrhu, situace na které autoři systému nepamatovali a jiné problémy. Nejinak tomu bylo i v případě systému `flow123d`. Během používání byly objeveny četné chyby programu, zejména při vytváření souboru sousedností, které se postupně podařilo opravit. Vyplynulo také několik problematických míst návrhu systému jako celku, které bu-

dou popsány v oddíle 9.3. Tyto problémy však nejsou rázu natolik zásadního, aby bránily využití systému `flow123d` pro řešení reálných hydrogeologických problémů.

Systém `flow123d` se po své implementaci stal jedním z hlavních nástrojů pro řešení úloh podzemního proudění a transportu na KMO (později NTI) TU Liberec. Pomocí tohoto systému byly řešeny reálné hydrogeologické problémy na lokalitách Potůčky, Melechov a Cajamarca, v současnosti je používán pro simulace chování fluid v okolí plánovaného úložiště radioaktivních odpadů. Dále uvedené příklady z lokalit Melechov a Cajamarca mají spíše informativní charakter, jde o ukázkou nasazení systému `flow123d`, nejedná se v žádném případě o detailní popis řešených úloh.

9.1.1 Model VTZ na vrtech MEL-3 a MEL-4

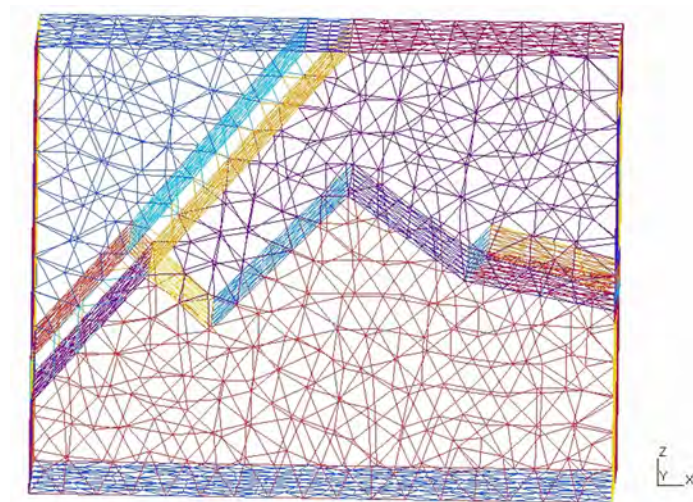
Melechovský masiv slouží jako testovací lokalita pro plánované trvalé úložiště radioaktivních odpadů. V rámci přípravných a výzkumných prací na bylo v prostoru Melechovského masivu navrtáno šest průzkumných vrtů v různých geologických podmínkách. Na těchto vrtech byly provedeny vodní tlakové zkoušky (VTZ) pro zjištění hydraulických vlastností horninového prostředí. Vrtů MEL-3 a MEL-4 jsou vzdáleny cca. 130 m a při VTZ se v hloubkách okolo 100m podařilo prokázat hydraulickou komunikaci mezi těmito vrtů. Na základě těchto výsledků a výsledků geofyzikálních a karotážních měření byl sestaven geologický model okolí vrtů na jehož základě byl vytvořen model numerický. Síť tohoto modelu je na obrázku 9.1, vidíme systém význačných puklin doplněný o objemové elementy.

Na této síti byla řešena úloha proudění, proběhla kalibrace modelu ve třech fázích. Výsledný kalibrovaný model vykazuje shodu mezi výsledky simulací a terénním měřením v parametru spotřeby vody v řádu procent. Ukázka výsledků modelování je na obrázku 9.2. Pro lepší názornost je proudové pole vykresleno ve třech různých měřítkách, neboť hodnoty rychlosti proudění se liší v rozmezí pěti řádů.

Pro více informací o modelování této lokality a VTZ viz zprávu [13], ze které byly převzaty zde uvedené obrázky.

9.1.2 Regionální model lokality Cajamarca, Peru

V rámci projektu pomoci rozvojovým zemím Ministerstva Zahraničí ČR byla multidisciplinárním týmem českých odborníků připravena studie možností



Obrázek 9.1: Síť pro modelování VTZ na lokalitě Melechov.

rozvoje lázeňství v regionech Cajamarca a Churin v Peru. Součástí týmu byli také pracovníci TU Liberec, jejichž úkolem bylo vytvořit model proudění podzemních vod v regionu Cajamarca a pomocí něho vyhodnotit následky případného zvýšeného čerpání termálních vod v důsledku rozšíření lázeňských provozů.

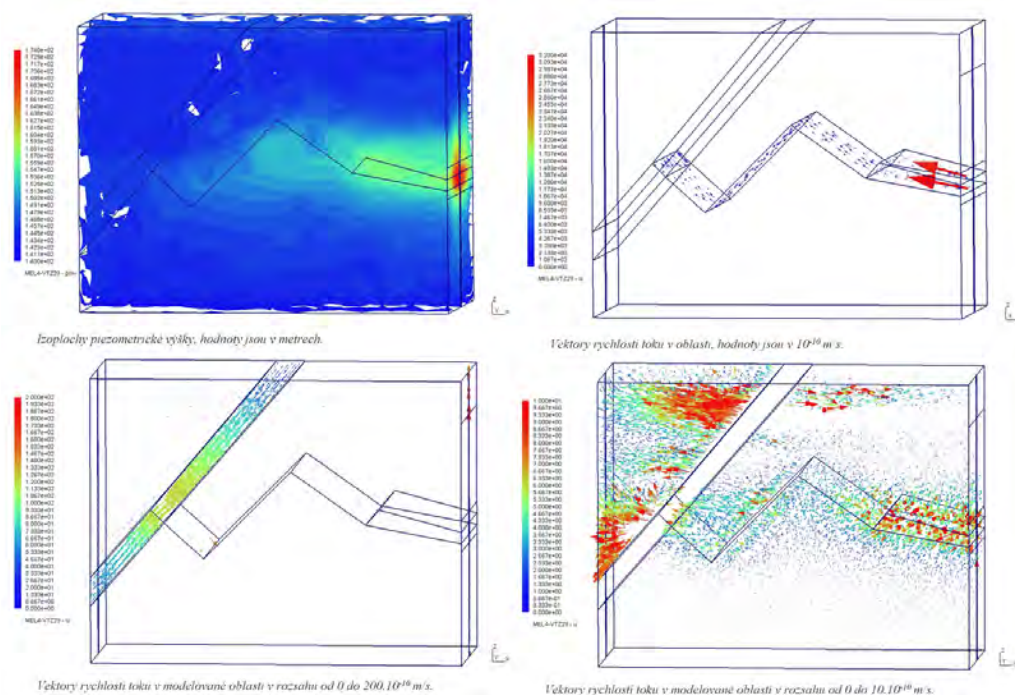
Pro tyto účely byl vytvořen model nejvíce propustného souvrství v oblasti o rozměrech 11x14.5 km s jedním zlomem. Síť tohoto modelu je na obrázku 9.3.

V tomto případě nebylo možno provést tak podrobnou kalibraci jako v předchozím případě, řada parametrů musela být pouze odhadnuta. Ukázka výsledků simulací je na obrázku 9.4.

Výsledky simulací predikují významné poklesy hladin a snížení teploty vod při zvýšeném čerpání. Pro více informací o modelování této lokality viz zprávu [9], ze které byly také převzaty zde uvedené obrázky.

9.2 Shrnutí dosažených výsledků

Nejdůležitějším výsledkem celého projektu vývoje a implementace systému *flow123d*, který byl zčásti řešen v rámci autorova postdoktorandského grantu GAČR 102/04/P019: *Puklinově-porézní model proudění podzemních vod a transportu látek.*, je skutečnost, že tento systém existuje a je používán pro



Obrázek 9.2: Výsledky modelování VTZ na lokalitě Melechov.

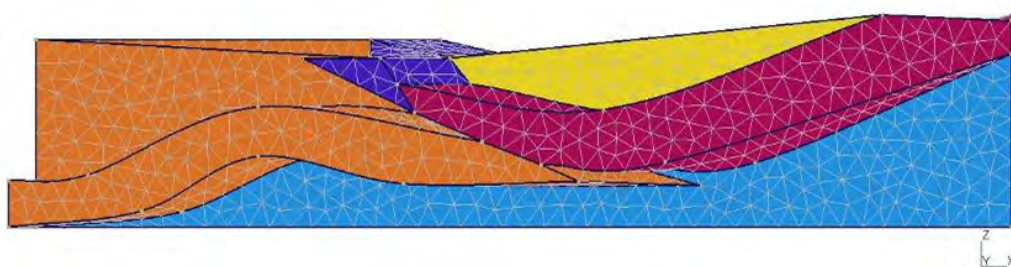
řešení praktických hydrogeologických úloh na pracovištích FM TU Liberec. Systém navíc splňuje původně stanovené požadavky na propojení porézního a puklinového přístupu.

Dalším nesporným úspěchem je to, že systém je nadále rozvíjen a doplňován o nové funkce a jsou přidávány modely dalších procesů (proudění s vlivem hustoty roztoku, transport se dvojitou porozitou, geochemické reakce aj.).

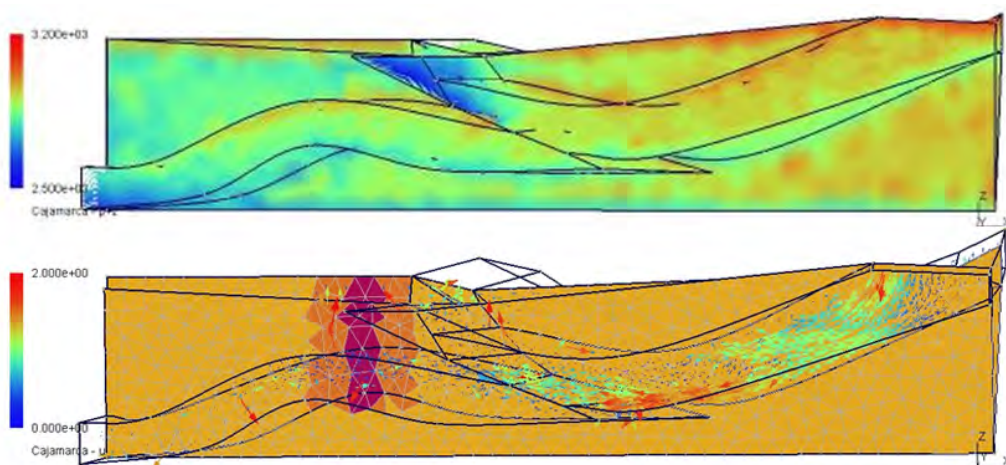
Nejdůležitějšími rysy systému jsou multidimenzionalita sítě a možnost jejich nekonformnosti. Spojení těchto dvou vlastností z něj činí unikátní nástroj a zároveň usnadňuje jeho použití pro reálné úlohy, zvláště v prostředí rozpuštěných horninových masivů.

9.3 Problémy a nedostatky systému flow123d

Na tomto místě je třeba též zmínit nedostatky nově vyvinutého systému.



Obrázek 9.3: Síť pro regionální model lokality Cajamarca.



Obrázek 9.4: Výsledky simulace proudění na lokalitě Cajamarca.

- Z programátorského hlediska je pravděpodobně největším problémem použití jazyka C, pro systém tohoto typu by byl výhodnější objektově orientovaný jazyk C++, neboť existence elementů a stěn různých typů, pro které jsou definovány funkce totožné svým účinkem si přímo říká o použití objektově orientovaného návrhu. Původní volba jazyka C počítala s možností použití částí kódu předchozího systému FFLOW, ze kterého však bylo nakonec převzatou pouze minimum funkcí.
- Z hlediska uživatele a také programátora nových modelů je dosti podstatným zdrojem nepohodlí navržený formát souboru materiálových vlastností. Přidávání nových materiálových vlastností pro nově vyví-

jené modely se děje přidáváním nových sekcí do MTR-souboru, který je potom obtížné udržet v konzistentním stavu. Formát podobný INI-souboru by byl pro uživatele i vývojáře pohodlnější.

- Propojení s interním řešičem soustav lineárních rovnic je realizováno formou dynamické knihovny. Jelikož dochází k předávání parametrů mezi funkcemi v jazyce C a v jazyce FORTRAN, je toto řešení silně závislé na použitém překladači.
- Doposud nebyla stanovena metodika určování koeficientu přestupu pro nekonformní propojení elementů.
- Chybí přímá možnost vizualizace vstupních dat modelů a možnost jejich snadné přípravy v grafickém režimu.
- Pro nestacionární úlohy prozatím není možno zadat časový průběh hodnot okrajových podmínek a zdrojů. Takovéto případy je nutno dělit na dílčí simulace.

Jmenované nedostatky systému však nejsou příliš zásadního rázu a bude možno je odstranit.

9.4 Další vývoj a rozvoj systému flow123d

Vývoj systému flow123d nebyl ukončen, vzhledem k tomu, že systém je na pracovišti autora stále používán vznikají potřeby nových funkcí a nových modelů. Jako perspektivní směry vývoje můžeme označit následující:

- Převod systému z jazyka C do jazyka C++ a postupný přechod k objektově orientovanému programování.
- Adaptivní zjemňování sítě.
- Model proudění založený na primární formulaci.
- Použití algoritmů a metod programu FTRANS v systému flow123d.
- Zlepšení některých datových struktur (např. již zmíněný MTR-soubor) tak, aby více odpovídaly potřebám praktických úloh.
- Propojení se systémem GWS.

- Rozšíření programu GMSH tak, aby podporoval systém `flow123d`.
- Vytvoření interaktivního grafického preprocesoru.
- Zavedení možnosti definice scénářů, tj. časového vývoje okrajových podmínek a zdrojů látky.
- Vývoj metodiky určování koeficientů přestupu při nekonformním spojení elementů.
- Robustnější propojení s interním řešičem.

Z uvedeného výčtu, který není zdaleka úplný, je patrné, že možnosti dalšího rozvoje systému `flow123d` jsou velmi široké a rozsáhlé, limitujícím faktorem jsou v tomto případě lidské zdroje.

9.5 Osobní přínos autora práce k vývoji systému `flow123d`

Celý text druhé části habilitační práce byl koncipován s důrazem na ty partie vývoje systému, na kterých má autor práce významný osobní podíl. Nyní tento autorův příspěvek shrneme do formy bodů:

- Návrh architektury systému jako multidimenzionálního numerického modelu s nekonformními sítěmi.
- Návrh způsobu realizace propojení prvků různých dimenzí v konformním i nekonformním případě.
- Návrh a realizace vnitřních a vnějších datových struktur systému.
- Návrh, implementace a realizace platformy systému.
- Implementace základních modelů proudění a transportu.

Literatura

- [1] L. BIAO OUYANG, K. AZIZ, *Steady-state gas flow in pipes*, Journal of Petroleum Science and Engineering, 14 (1996), pp. 137–158.
- [2] P. BUJOK, B. GOTTVOLD, J. HOLÁŇ, K. KUMANOV, *Projektování výstavby a provozu podzemních zásobníků plynu (vybrané kapitoly)*, VŠB, Ostrava, 1985.
- [3] R. EYMARD, M. VOHRALÍK, D. HILHORST, *Combined finite volumenonconforming/mixed-hybrid finite element scheme for degenerate parabolic problems*, Numerical Mathematics, 105 (2006), pp. 73–131.
- [4] O. FLANIGAN, *Underground Gas Storage Facilities — Design and Implementation*, Gulf Publishing Company, Huston, Texas, 1. ed., 1995.
- [5] D. FRYDRYCH, J. MARYŠKA, J. MUŽÁK, O. SEVERÝN, *Mathematical modelling of a uranium mine flooding*, in Proceedings of Algoritmy 2000, K. Mikula and et al., eds., Bratislava, 2000, Slovak University of Technology, pp. 110–119.
- [6] D. FRYDRYCH, J. NOVÁK, J. MUŽÁK, E. PISKOVÁ, R. SMETANA, *Numerical simulation of control of remediation of uranium deposit stráž*, in Proceedings of Algoritmy 2000, K. Mikula and et al., eds., Bratislava, 2000, Slovak University of Technology, pp. 130–135.
- [7] D. FRYDRYCH, O. SEVERÝN, *Solution of unsaturated porous media flow fluid on the dam of the waste pond*, in Electronics, Control, Measurement and Signals, Proceedings of ECMS 1999, TU Liberec, 1999, pp. 217–220.
- [8] C. GEUZAINÉ, J.-F. REMACLE, *Gmsh Reference Manual*, 2008.

- [9] J. KRÁLOVCOVÁ, J. MARYŠKA, K. CÍSAŘOVÁ, Z. CAPEKOVÁ, *Modelování hydrogeologických situací v oblasti cajamarca*, technická zpráva, TU Liberec, Liberec, 2007.
- [10] J. KRÁLOVCOVÁ, J. MARYŠKA, O. SEVERÝN, J. ŠEMBERA, *Formulation of mixed-hybrid fe model of flow in fractured porous medium*, in Numerical Mathematics and Advanced Application, Proceedings of ENUMATH 2005, Springer-Verlag, 2006, pp. 1184–1191.
- [11] J. MARYŠKA ET AL., *Matematické modelování*, závěrečná zpráva programu státní podpory výzkumu a vývoje MŽP VAV/630/3/00 za roky 2000–2, FM TU Liberec, 2003.
- [12] J. MARYŠKA ET AL., *Matematické modelování*, závěrečná zpráva programu státní podpory výzkumu a vývoje MŽP vav/660/2/03 za roky 2003–5, FM TU Liberec, 2006.
- [13] J. MARYŠKA, J. KRÁLOVCOVÁ, ET AL., *Výsledky matematického modelování pohybu fluid v puklinovém prostředí testovací lokality*, závěrečná zpráva projektu provedení geologických a dalších prací na testovací lokalitě melechovský masiv – 2. etapa, FM TU Liberec, 2006.
- [14] J. MARYŠKA, O. SEVERÝN, M. TAUCHMAN, D. TONDR, *Modelling of processes in fractured rock using fem/fvm on multidimensional domains*, Journal of Computational and Applied Mathematics, 215 (2008), pp. 495–502.
- [15] J. MARYŠKA, O. SEVERÝN, M. VOHRALÍK, *Numeric simulation of the fracture flow with a mixed-hybrid fem stochastic discrete fracture network model*, Computational Geosciences, 8 (2005), pp. 217–234.
- [16] M.R. TEK, ed., *Underground Storage of Natural Gas — Theory and Practice*, NATO Advanced Science Institutes Series, Ankara, Turkey, May 1988, Middle East Technical University, Ankara, Kluwer Academic Publishers.
- [17] V. ONDERKA, *WOC2 — uskladňování plynu*, Plyn, odborný časopis pro plynárenství, LXXXVI (2006), pp. 196–198.
- [18] M. POPPER, J. KELEMEN, *Expertné systémy*, Alfa, Bratislava, 1. ed., 1989.

- [19] J. ROČEK, *Průmyslové armatury*, Informatorium, Praha, 1. ed., 2002.
- [20] O. SEVERÝN, *Softwarové produkty pro vývoj expertního systému pro optimální řízení provozu PZP*, závěrečná výzkumná zpráva o řešení zakázky, FM TU Liberec, 2003.
- [21] O. SEVERÝN, *Ideový projekt expertního systému pro řízení provozu PZP*, závěrečná výzkumná zpráva o řešení zakázky, FM TU Liberec, 2004.
- [22] O. SEVERÝN, *Přenos dat mezi SCADA systémy a numerickými modely.*, závěrečná výzkumná zpráva o řešení zakázky, FM TU Liberec, 2005.
- [23] O. SEVERÝN, *Ladění nástrojů programu Decide! pro účely použití v rámci Expertního systému*, závěrečná výzkumná zpráva o řešení zakázky, FM TU Liberec, 2006.
- [24] O. SEVERÝN, *Testování a ladění modelů a nástrojů umělé inteligence Expertního systému PZP*, závěrečná výzkumná zpráva o řešení zakázky, FM TU Liberec, 2007.
- [25] O. SEVERÝN, *Datové struktury systému flow123d*, technická zpráva, TU Liberec, Liberec, 2008.
- [26] M. VIRIUS, *Programovací jazyky C / C++*, GComp, Praha, 1. ed., 1992.
- [27] M. VOHRALÍK, J. MARYŠKA, O. SEVERÝN, *Mixed and nonconforming finite element methods on a system of polygons*, Applied Numerical Mathematics, 57 (2007), pp. 176–193.
- [28] J. ŠEMBERA, J. MARYŠKA, J. KRÁLOVCOVÁ, O. SEVERÝN, *A novel approach to modelling of flow in fractured porous medium.*, Kybernetika, 43 (2007), pp. 577–588.
- [29] M. ŠMÍD, *Modely a prognóza spotřeby zemního plynu*, Plyn, odborný časopis pro plynárenství, LXXXV (2005), pp. 74–76.

Příloha A

Rešerše softwaru pro Expertní systém PZP

Tato příloha shrnuje výsledky rešeršních prací popsaných v autorové zprávě [20].

Prvním krokem při realizaci projektu ES na základě stanovených idejí byla rešerše existujících softwarových produktů, které by mohly být použity pro jeho vybudování.

Na tomto místě je nutno upozornit, že dále podaný přehled mapuje situaci jaká byla v době přípravy projektu ES a zpracování zmíněné zprávy, tj. v roce 2003. Proto některé dále prezentované informace jsou již nutně zastaralé. V závěrečné podkapitole [A.6](#) jsou uvedeny aktuální informace a změny týkající se zkoumaných produktů.

Cílem prací bylo zmapovat nabídku na příslušných segmentech softwarového trhu, prozkoumat a popsat vlastnosti jednotlivých produktů a to se zřetelem na možnost jejich zařazení do budovaného ES.

Prozkoumávány byly čtyři kategorie produktů:

1. Systémy pro modelování a simulaci chování podzemní části PZP (ložiskové simulátory).
2. Simulátory nadzemní technologie PZP.
3. Produkty pro rozhodovací jádro ES.
4. Databázové systémy.

V každé kategorii bylo vybráno několik produktů, jejichž funkční vlastnosti byly posuzovány a vyhodnocovány z hlediska možného nasazení do ES. Nutno zdůraznit, že se jednalo pouze o funkční vlastnosti, při úvahách o vhodnosti či nevhodnosti daného produktu nebyla brána v potaz jeho cena. Důvodem je skutečnost, že u systémů tohoto typu nebývá výrobci cena zveřejňována, může se výrazně lišit dle konfigurace produktu, počtu zakoupených licencí a bývá předmětem obchodních jednání mezi výrobcem a zákazníkem.

A.1 Ložiskové simulátory

Úvodem je nutno konstatovat, že neexistuje program určený speciálně pro simulace PZP. Jedná se o systémy určené pro řešení problematiky ropných či ropoplynových ložisek a PZP představují pouze jednu z možností nasazení těchto systémů.

S ohledem na tento účel nabízí většina výrobců komplexní řešení a kromě vlastních ložiskových simulátorů jsou v jejich nabídce též pre- a post- procesory, případně další specializované nástroje, např. pro vyhodnocování seismických měření, karotáží, testů produkčních sond atp.

Zkoumány byly vlastnosti následujících produktů:

- STARS (výrobce Computer Modelling Group ltd.)
- WinProp (Computer Modelling Group ltd.)
- SURESim (Seismic Micro Technology)
- POWERS (Saudi Aramco)
- UG (Universität Heidelberg)
- Eclipse (SIS, původně GeoQuest)

Vlastnosti těchto produktů jsou do značné míry obdobné. Jedinou výjimkou je systém UG, který není specializovaným ložiskovým simulátorem, nýbrž obecným simulátorem podzemních hydraulických procesů.

Doporučení plynoucí z rešerše produktů této kategorie je poměrně jednoznačné: Pro plánovaný ES nelze doporučit jiný ložiskový simulátor než Eclipse. Jedná se o široce používaný a všeobecně uznávaný průmyslový standard, výsledky jeho simulací byly mnohokrát ověřeny praxí. Druhým faktem

pro volbu Eclipse je skutečnost, že tento produkt je již v a.s. Transgas používán a jsou v něm vytvořeny a s vyhovující přesností odladěny modely všech dotyčných PZP. Přechod na jiný simulátor, tedy tvorba a odladění modelů ložiskových objektů, by vyžadoval minimálně pět člověkoroků práce, což je investice natolik vysoká, že ani případné lepší vlastnosti nově zavedeného simulátoru ji nevyváží. Navíc lze očekávat postupný vývoj všech produktů a snahu jednotlivých firem nabídnout s novou verzí stejnou funkčnost jako konkurenční produkty.

A.2 Systémy pro simulaci nadzemní technologie PZP

Simulace tlakových, teplotních a fázových změn směsi uhlovodíků proudící potrubím či technologickými prvky představuje poměrně složitou úlohu, neboť fyzikálně-chemické procesy ke kterým přitom dochází jsou komplikované a některé z nich doposud popisované pouze empirickými vztahy. Na druhé straně je ovšem nutno vidět fakt, že vztahy pro návrh a popis potrubí a technologických prvků pro těžbu ropy a zemního plynu jsou předmětem dlouholetého výzkumu v oboru procesního inženýrství a většina z nich je pro běžně řešené úlohy a systémy naprosto vyhovující.

Tomu odpovídá i všeobecné pojetí simulátorů tohoto typu, které jsou zpravidla koncipovány jako grafické aplikace, ve kterých uživatel vytváří model technologie výběrem a spojováním předdefinovaných prvků a nastavováním jejich vlastností a parametrů. Zdůrazněny jsou i možnosti vizualizace výsledků a jejich následné analýzy a provozní optimalizace.

Zkoumány byly vlastnosti následujících produktů:

- Pipephase (SimSci-Esscor)
- Netopt (SimSci-Esscor)
- Tacite (SimSci-Esscor)
- Pipeflo 7 (Neotec)
- Wellflo 7 (Neotec)
- Forgas (Neotec)

- FlowTran (William J. Turner Pty Ltd.)
- Simone (Simone Research Group s.r.o)
- Pipesim (SIS, původně Baker-Jardine)

Funkční vlastnosti produktů této kategorie se liší více než v případě ložiskových simulátorů. Některé systémy jsou zaměřeny spíše na simulace fázového chování směsí uhlovodíků, jiné na simulace potrubí, další na simulace potrubních sítí. I zde mají produkty charakter komplexního řešení a možná je variabilita konfigurací dle potřeb zákazníka.

Doporučení plynoucí z rešerše produktů této kategorie není jednoznačné. Do připravovaného ES by bylo možno použít program Simone, pro který by hovořila skutečnost, že se jedná o produkt specializovaný na plynárenství a také to, že již je v a.s.Transgas používán pro simulaci plynovodní sítě. Druhou možností by bylo použití programu Pipesim, který je sice obecnější než Simone, není zaměřen pouze na plynárenství, avšak v jeho prospěch hovoří lepší možnosti propojení s ložiskovým simulátorem.

A.3 Rozhodovací jádro ES

Nyní se dostáváme k centrální části projektovaného ES, rozhodovacímu jádru. Zde se nabízejí dvě možné cesty: Buď nasazení obecného expertního systému a jeho příslušné naprogramování nebo nasazení specializovaného produktu pro zpracování real-time dat z těžby uhlovodíků a jeho provázání s dalšími součástmi ES.

V oblasti obecných expertních systémů byly zkoumány vlastnosti těchto produktů:

- CLIPS (Gary Riley)
- EZ-Xpert 2.2 (AI Developers)
- Amzi! Prolog + Logic Server (Amzi!)
- Amzi! Knowledge Wright (Amzi!)
- Corvid (Exsys)
- FLINT, FLEX, PROLOG++ (Logic Programming Associates)

- PolyAnalyst (Megaputer)

Ve všech případech se jedná o obecné nástroje pro tvorbu expertních systémů, jejichž funkčnost se navzájem zhruba shoduje. V podkategorii systémů pro zpracování real-time dat byly zkoumány vlastnosti programů:

- OFM (SIS, původně GeoQuest)
- ProdMan (SIS, původně Baker-Jardine)
- Decide! (Decision Team)

Doporučení plynoucí z rešeršních prací této kategorie programů je následující:

Nasazení některého z obecných expertních systémů jako rozhodovacího jádra ES by bylo nanejvýš obtížné, neboť objem programátorských prací by přesáhl dané časové a finanční možnosti projektu. Oproti tomu použití specializovaných produktů pro zpracování real-time dat jako jádra ES je vhodné. Vlastnosti programu Decide! se z dostupných materiálů jevily být nanejvýš zajímavé, avšak v době provádění rešerše byly informace na www stránkách výrobce kusé a neúplné. Pro použití některého ze systémů SIS hovoří možnost lepšího propojení s dalšími produkty SIS (zejména Eclipse). Ze dvou nabízených produktů se jeví jako funkčně bohatší systém OFM.

A.4 Databázové systémy

Vývoj databázových aplikací představuje vysoce specializované odvětví softwarového inženýrství. Zvláště v kritických aplikacích (jakou ES pro řízení provozu PZP bezesporu bude) je nutno věnovat značnou pozornost otázkám bezpečnosti, spolehlivosti, konzistence dat, odpovídajícího výkonu a podobným.

Naprostá většina databázových aplikací dnes pracuje na modelu klient-server. Komunikačním jazykem je standardně SQL (Structured Query Language). Klienty v našem případě budou další součásti ES (rozhodovací část ES, modely, SCADA systémy). Zkoumány byly vlastnosti následujících produktů, které by mohly sloužit jako centrální databázový server ES:

- Informix (IBM)
- Oracle 9i Database Release 2 (Oracle)

- Microsoft SQL Server (Microsoft Corporation)
- MySQL Database Server (MySQL AB)

Z rešerše této kategorie produktů neplyne žádné konkrétní doporučení. Každý z uvedených systémů by bylo možno do ES začlenit, při volbě odpovídající konfigurace. Volba databázového serveru se bude odvíjet od volby produktů pro ostatní části ES, zejména potom rozhodovacího jádra na základě doporučení výrobců těchto produktů. Dále by bylo vhodné zadat realizaci databázové části ES jako zakázku specializované firmě či pracovišti.

A.5 Vyhodnocení rešeršních prací

Hlavní výsledky je možno shrnout do následujících bodů:

- Spektrum programových systémů pro plánovaný ES PZP je velmi široké, začíná vysoce specializovanými systémy pro simulace zásobníků a končí programovacími jazyky pro tvorbu obecných expertních systémů.
- Nabídka produktů ve všech sledovaných oblastech je bohatá a např. v oblasti databázových serverů nebylo možno ji rešeršními prací stanoveného rozsahu zmapovat kompletně.
- Produkty firmy Schlumberger Information Solutions zasahují do téměř všech oblastí produktů pro ES.
- Šíře nabídky umožňuje tři možné strategie sestavení ES:
 1. Maximální funkčnost.
 2. Minimální cenu.
 3. Maximální součinnost.

Z těchto tří strategií je pro dané účely nejvhodnější třetí jmenovaná. První strategie by znamenala výběr produktů s nejlepšími funkčními vlastnostmi, ale takovéto řešení by bylo jednak velmi nákladné, jednak by bylo obtížné zajistit dobrou a spolehlivou součinnost produktů různých výrobců, minimálně by to znamenalo velký objem programátorských prací a nutnost podrobného testování.

Při volbě minimální ceny by byly v co největší míře využity Open Source, freeware a public domain produkty, řešení by nebylo nákladné z hlediska ceny softwaru, avšak znamenalo by opět velký objem programátorských a testovacích prací a navíc nutnost řešit údržbu jednotlivých součástí vlastními prostředky. Nezanedbatelnou nevýhodou je také nulová záruka funkčnosti a většinou neexistující smluvní podpora svobodného softwaru.

Strategie maximální součinnosti znamená použít co nejvíce produktů jednoho výrobce, v daném případě firmy SIS, která jako jediná nabízí produkty ve všech kategoriích. Toto řešení umožňuje dobrou záruku údržby systému, garantuje odpovědnost dodavatele a také umožňuje výhodnější pozici při jednání o podmínkách dodávky a ceny celého řešení.

Výsledné doporučení plynoucí z poznatků zjištěných rešeršními prací tedy můžeme formulovat takto: Jako ložiskový simulátor pro ES je maximálně vhodné použít systém ECLIPSE, jako simulátor nadzemí program PIPESIM, jako rozhodovací jádro program OFM a volbu databázového systému ponechat na rozhodnutí firmy SIS, která vybere produkt nejvhodnější z hlediska propojení s OFM.

A.6 Stav z počátku roku 2008

Období pěti let znamená pro kancelářský, grafický, vývojářský či komunikační software velmi dlouhý čas, během kterého zpravidla dojde nejméně ke dvěma velkým upgradům a funkčnost téhož produktu současného je mnohem bohatší oproti jeho pět let staré verzi.

V kategoriích produktů zde popsaných, které představují průmyslová řešení, není vývoj natolik překotný, sice zpravidla dochází každý rok k upgradu, avšak tyto verze většinou přináší pouze malá vylepšení a opravují známé chyby. Proto kdyby byla obdobná rešerše zpracovávána dnes, nebyly by její výsledky příliš odlišné od výsledků zde prezentovaných. Shrňme nejpodstatnější změny:

A.6.1 Ložiskové simulátory

Do přehledu ložiskových simulátorů by musely být zařazeny produkty firem Taurus Reservoir Solutions l.t.d. a Haliburton. Tyto produkty v roce 2003 existovaly, avšak v prvním případě byly opomenuty, ve druhém chyběla jejich

veřejná prezentace na www. Nicméně doporučení použít simulátor Eclipse firmy SIS by zůstalo nezměněno.

A.6.2 Simulátory nadzemních technologií

Přehled by musel být nutně doplněn o produkt Hysys firmy Aspentech, který také existoval již v roce 2003, avšak při rešerši unikl autorově pozornosti. Program Hysys by nyní byl velmi vážným kandidátem na simulátor nadzemí v ES, neboť SIS nabízí možnost propojení Eclipse s Hysys a možnosti systému Hysys jsou značně širší než možnosti programu Pipesim. Také by bylo nutno popsat Avocet, produkt SIS, který integruje simulaci ložiska a technologie.

A.6.3 Systémy pro jádro ES

Nejpodstatnější změnou v této oblasti je bezesporu akvizice firmy Decision Team firmou SIS. SIS se tím stal vlastníkem tří konkurenčních produktů, Decide!, OFM a ProdMan. Zatím vše nasvědčuje tomu, že vlajkovou lodí SIS v této oblasti se stane Decide! a vývoj OFM a ProdMan bude postupně zastaven.

A.6.4 Databázové systémy

V této oblasti — alespoň pokud je autorovi známo — nedošlo od roku 2003 k podstatným změnám, žádný z velkých hráčů na trhu nevypadl, ale ani nepřibyl.

Příloha B

Projekt Expertního systému

Tato příloha shrnuje hlavní myšlenky uvedené v autorově zprávě [21]. I na tomto místě je nutno podotknout, že poznatky zde uvedené pochází z roku 2004, v průběhu implementace ES bylo nutno projekt v některých bodech pozměnit či upravit, v některých případech i dosti významně.

B.1 Funkce ES a jejich uživatelé

Během přípravné etapy projektu byly široce diskutovány možné funkce ES a jejich přínos pro různá pracoviště a.s. Transgas. Z těchto diskuzí vyplynul následující výčet činností, které by měl ES automatizovaně vykonávat:

1. Poskytování informací o aktuálním stavu zásobníků, jejich výkonových a kapacitních možnostech pro režimy těžby a vtláčení.
2. Detekce potenciálních možností vzniku problémů na základě výsledků předpovědí numerických modelů a dalších nástrojů ES.
3. Generování a aktualizace odtěžovacích křivek jednotlivých PZP na základě skutečného stavu jednotlivých PZP.
4. Vyhledání optimálního pracovního režimu zásobníku, včetně zapojení jednotlivých sond na základě numerického modelování podle požadavků na odběr či vtláčení plynu a to při respektování omezujících faktorů, kterými jsou:
 - Parametry zásobníků,

- vlastnosti vstrojení sond,
- hydrodynamika ložiska,
- interference mezi sondami,
- stav zásob,
- distribuce ložiskových tlaků,
- úroveň kontaktu voda-plyn,
- maximální rychlost filtrace plynu v kolektoru a v otvírce sondy,
- tlakové ztráty v nadzemní technologii,
- požadované parametry plynu pro technologické uzly,
- předávací tlak,
- maximální možná těžbu, resp. vtláčení,
- ekonomika provozu a
- cena plynu.

5. Řízení a kontrolu stanovených režimů těžby/vtláčení a to včetně:

- Vnitřní analýzy a aktualizace systému,
- automatického řízení a vyhodnocení zjednodušených krátkodobých produkčních testů sond a
- automatické aktualizace numerických modelů.

6. Správa a aktualizace centrální databáze a zprostředkování informací pro komunikující systémy.

7. Automatická aktualizace numerických modelů ložisek na základě provozní historie jednotlivých skladovacích objektů.

Tyto funkce budou sloužit následujícím pracovištím a.s. Transgas:

Management skladovací soustavy: Znalost aktuálního stavu skladovací soustavy zlepší možnost strategického plánování alokace skladovacích kapacit.

Obchodníci s plynem: ES poskytne obchodníkům s plynem přehled o aktuálně dostupných skladovacích kapacitách pro případný nákup plynu a o volných zásobách pro případný prodej.

Dispečink plynárenské sítě: Automatické předpovědi zvýšit kvalitu operativního řízení sítě.

Útvar plánování rozvoje PZP: Bude mít k dispozici veškeré informace o stavu a chování PZP. Aktualizované modely usnadní a zkrátí projekční práce a simulace nestandardních stavů PZP. Tento útvar bude pověřen implementací, správou a rozvojem ES.

Ložiskoví geologové PZP: Budou informováni o rozložení tlakových a saturačních polí v jednotlivých skladovacích objektech a zároveň budou mít k dispozici návrh těžebního scénáře stanovený numerickým modelem.

Operátoři PZP: Budou informováni o možných problémech.

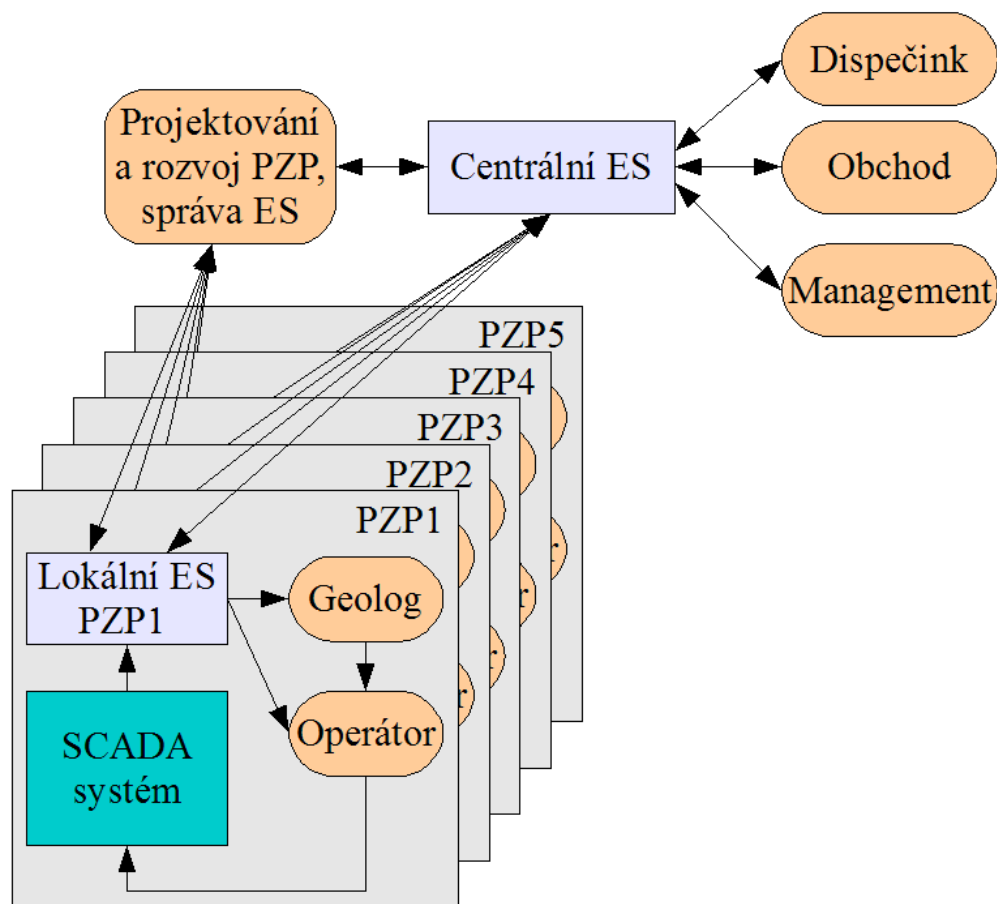
B.2 Struktura ES

Předpokládaná struktura ES bude mít dvě úrovně. Nižší stupeň budou tvořit tzv. *lokální expertní systémy*, kterým bude nadřazen *centrální expertní systém*. Schéma tohoto uspořádání s vyznačením interakce mezi jednotlivými součástmi ES a jejich uživateli je na obrázku [B.1](#).

B.2.1 Funkce lokálního ES

Tento systém tvoří nižší stupeň hierarchie. Lokální expertní systém je určen pro řešení problémů spojených s jedním PZP. Celkově bude tedy existovat pět instalací lokálního ES. Přestože lze předpokládat, že mezi těmito instalacemi budou drobné vnitřní rozdíly, způsobené především použitím různých typů SCADA systémů na jednotlivých PZP, navenek — tedy z hlediska komunikace s uživatelem, příp. nadřazeným systémem — bude interface těchto instalací jednotný.

Lokální expertní systémy budou přijímat požadavky na řízení a na informace z centrálního ES. Požadované informace se budou v definovaném formátu předávat zpět. Předpokládá se, že lokální ES bude spolupracovat s existujícím místním systémem pro automatizovaný sběr provozních dat a řízení zásobníku, ze kterého bude získávat aktuální data. Součástí lokálního expertního systému bude analytický modul, který bude kontrolovat činnost



Obrázek B.1: Struktura Expertního systému

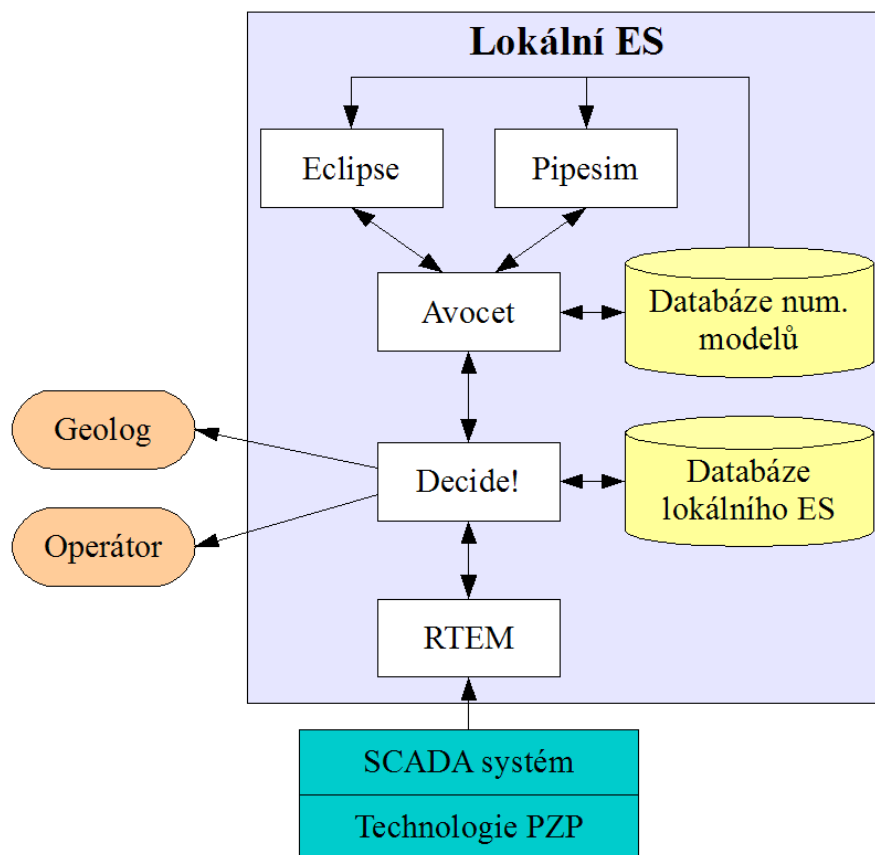
zásobníku z mnoha specifikovaných hledisek, zejména potom odchylky modelových variant od skutečné činnosti zásobníku. Podle požadavků na vyhledání optimálního/maximálního pracovního režimu zásobníku bude analyzovat a formulovat úlohu pro matematický model.

Výsledky modelování a návrh nejvhodnějšího režimu poskytne centrálnímu ES, ložiskovému geologovi a velínu zásobníku. Součástí každého lokálního ES bude vícefázový trojrozměrný matematický model PZP, propojený s modelem nadzemní technologie. Matematické modely budou nastaveny na základě aktuálních geologicko-ložiskových a hydrodynamických vlastností zásobníku. Rovněž budou obsahovat konkrétní parametry sond, stupáčků a

nadzemní technologie.

B.2.2 Struktura lokálního ES

Návrh struktury lokálního ES je znázorněn na obrázku B.2



Obrázek B.2: Struktura lokálního ES

Nyní představíme jednotlivé komponenty lokálního ES.

RTEM

RTEM (Real Time Event Monitor) je určen pro zajištění komunikace mezi SCADA systémy a rozhodovacím jádrem expertního systému. Jeho funkcí

bude průběžné monitorování vybraných dat ze SCADA systémů a jejich ukládání. Program RTEM bude též kontrolovat shodu mezi reálnými daty ze zásobníku s předpovědí vypočtenou ES. V případě výrazných rozdílů RTEM zajistí spuštění rozhodovacího jádra ES a vynutí výpočet upraveného scénáře. Další významnou funkcí tohoto programu bude kontrola hodnot z hlediska bezpečnosti provozu PZP.

Decide!

Program Decide! bude tvořit vlastní rozhodovací jádro ES. Program DECIDE! bude komunikovat se všemi dalšími součástmi ES a také s centrální databází, bude rozhodovat o spouštění matematických modelů případně o přijetí scénáře založeného na historických datech. Systém Decide! představuje unikátní spojení nástrojů z různých oborů. Můžeme zde rozlišit celkem čtyři typy funkcí:

1. Funkce pro sběr, analýzu a zpracování provozních dat v reálném čase.
2. Nástroje statistické pro vyhodnocení provozních dat.
3. Nástroje ložiskového inženýrství, zejména potom model materiálové bilance s možnou interferencí více ložiskových objektů.
4. Nástroje umělé inteligence, jmenovitě: neuronové sítě, samoorganizující se mapy a genetické algoritmy.

Vhodná součinnost těchto nástrojů může zajistit požadavky na ES. Program Decide! bude provozován ve dvou režimech:

Rutinní režim Cílem rutinního režimu je průběžná kontrola činnosti zásobníku a zajištění plynulého chodu. V tomto režimu bude jádro v pravidelných časových intervalech snímat provozní data z rozhraní SCADA → expertní systém a bude kontrolovat jejich hodnoty oproti plánovaným hodnotám. Na základě výsledků z analytického modulu bude prostřednictvím systému SCADA upravovat režim zásobníku. V době minimální vytíženosti systému bude jádro komunikovat s numerickými modely. To znamená, že podle aktuálního těžebního/vtlačného režimu jádro sestaví aktuální vstupní soubory pro modely a spustí je. Modely budou spuštěny pro všechny stanovené scénáře a jádro na základě výsledků modelování připraví výstupní zprávy (týkající se maximálního výkonu zásobníku, optimálního výkonu, ...). Výsledky

modelování a aktuální stav budou porovnány s dlouhodobými strategickými záměry a přitom budou vyhodnoceny odchylky. V případě, že budou odchylky větší než specifikované hodnoty, navrhne expertní systém nápravu a předá návrh změny režimu zásobníku řídicímu pracovišti.

Interaktivní režim Interaktivní režim bude aktivován systémem signálů odesílaných z řídicího pracoviště. V tomto režimu bude jádro kompletovat požadované informace a bude je odesílat řídicímu pracovišti. V případě požadavku na modelování speciálního scénáře sestaví aktuální vstupní soubory pro matematický model a spustí jej. Po skončení výpočtů vygeneruje soubory obsahující požadované informace (výstupní zprávy, grafické soubory) a odešle je zpět řídicímu pracovišti.

Avocet

Tento program je zastřešující aplikací nad modelem podzemí Eclipse, modelem nadzemní technologie Pipesim a modelem materiálové bilance. Tato aplikace bude zajišťovat vzájemné propojení těchto modelů a výměnu dat mezi nimi.

Eclipse

Program Eclipse je dlouhodobě používán pro simulace ložiskových objektů provozovaných firmou Transgas. V systémy Eclipse byly vytvořeny modely všech ložiskových objektů a tyto modely jsou naladěny tak, že je možno předpovědi jimi vypočítané brát jako důvěryhodný a realistický obraz skutečného chování. Z tohoto důvodu budou tyto modely začleněny do expertního systému. Vzhledem k tomu, že program Eclipse je simulátorem založeným na numerickém řešení parciálních diferenciálních rovnic, časová a paměťová náročnost jeho běhu pro objekt typu PZP je značná. Proto se v rámci ES počítá se spouštěním systému Eclipse nanejvýše jedenkrát denně pro každý skladovací objekt. Předpovědi chování ložiskových objektů doposud byly jsou prováděny „ručně“, kdy data reprezentující výchozí stav ložiskového objektu jsou dodávána dávkově, na základě žádosti útvaru technických činností a projektování PZP. Zprovozněním ES by se měl tento režim změnit na automatizovaný, kdy v každém okamžiku bude možno systém Eclipse spustit (manuálně nebo na prostřednictvím jiného programu) s aktuálními daty.

Pipesim

Hlavní funkcí programu Pipesim v rámci ES je výpočet tlakových ztrát v nadzemních technologiích provozů PZP. Pro účely ES bude téměř vždy používán ve spojení se systémem Eclipse prostřednictvím programu Avocet. Propojení mezi oběma zmíněnými systémy bude provedeno na ústí vrtů, to znamená, že vertikální tok plynu v sondě bude simulován systémem Eclipse pomocí tabulek vertikálního proudění, které již byly vytvořeny pro modely jednotlivých skladovacích objektů.

Simulace bude vycházet z parametrů požadovaných odběratelem v místě výstupu plynu, tj. požadované množství plynu, předávací tlak, příp. též požadovaný rosný bod a chemické složení plynu. Na základě těchto požadavků a aktuálního stavu nadzemních technologií program vypočte požadované parametry plynu na ústí sond, což bude dále sloužit jako vstupní požadavek pro program Eclipse při návrhu těžebního scénáře.

Na rozdíl od programu Eclipse, Pipesim řeší pouze systém obyčejných diferenciálních rovnic, parametry proudícího plynu uvažuje proměnné pouze v jednom rozměru, po délce potrubí. Z toho vyplývá menší časová i paměťová náročnost simulací.

B.2.3 Funkce centrálního ES a jeho struktura

Tvoří vyšší stupeň hierarchie. Bude existovat pouze jedna instalace, která bude řídit optimální provoz skladovací soustavy jako celku. Pro tento úkol bude centrální ES využívat jednotlivé lokální ES.

Centrální ES bude interpretovat požadavky plynárenského dispečinku, případně od spolupracujících systémů a bude je transformovat na úlohy pro jednotlivé lokální systémy na zásobnících. Dále bude spravovat centrální databázi a bude poskytovat informace získané od lokálních systémů zpět plynárenskému dispečinku, managementu, obchodníkům, útvaru rozvoje PZP a spolupracujícím systémům.

Centrální databáze ES bude obsahovat veškeré informace týkající se geologie zásobníků, jejich technického vybavení a skladování plynu, sumární provozní údaje nutné pro operativní i strategické rozhodování a veškerá data týkající se průběžných měření vlastností sond a povrchových technologií.

Oproti lokálním ES bude struktura centrálního ES poměrně jednoduchá. Bude tvořena programem Decide! a jeho databází. Stejně jako v případě lokálních ES bude také v tomto případě program Decide! provozován v rutinním

a interaktivním režimu.

B.3 Celkový plán postupu prací

Navrhujeme řešit projekt ve čtyřech fázích:

- 1. Pilotní fáze:** Cílem pilotní fáze projektu je implementace a zprovoznění lokálního ES na PZP1. Druhotným, avšak přinejmenším stejně důležitým — ne-li důležitějším — cílem této etapy je získat praktické zkušenosti s implementací ES. Očekáváme, že během této fáze budou finalizovány představy o funkcích ES, dořešena sporná a nejasná místa návrhu ES, řešitelský tým se detailně seznámí s programy se kterými prozatím neměl praktickou zkušenost, bude vyjasněna metodika práce s provozními daty atd.
- 2. Implementace lokálních ES:** Postupně bude provedena implementace dalších lokálních ES. Předpokládáme, že při využití zkušeností z pilotní fáze zabere tato etapa asi dvojnásobek času, který si vyžádá pilotní fáze projektu.
- 3. Implementace centrálního ES:** Bude implementován centrální ES a provedeno jeho propojení s lokálními ES.
- 4. Uzavření zpětné vazby:** Ve čtvrté fázi bude provedeno uzavření zpětných vazeb. ES implementované v předchozích fázích projektu budou zpočátku fungovat pouze v roli „počítač-rádce“, budou sice navrhovat postupy pro řízení provozu PZP, avšak rozhodnutí o přijetí/nepřijetí navrhovaného řešení a vlastní provedení akčního zásahu bude řízeno obsluhou příslušného PZP. Ve chvíli, kdy bude činnost lokálních ES vyladěna do té míry, že bude dosaženo dostatečné míry shody mezi návrhy ES a návrhy obsluhy, bude možno přistoupit k uzavírání zpětných vazeb. Akční zásahy bude provádět ES, obsluha bude mít roli kontrolní.

B.3.1 Plán postupu prací pro pilotní fázi

Pro pilotní fázi projektu doporučujeme následující postup prací:

1. Zmapování a zdokumentování stavu SCADA systémů na daném PZP. Zjištění které veličiny jsou snímány, ve kterých místech technologie,

v jakých časových intervalech, jakými měřidly, v jakém formátu jsou data ukládána, jak je řešena jejich archivace a jaká je možnost přístupu k nim.

2. Stanovení, která z dat SCADA systémů budou vstupovat do ES a v jakých časových intervalech.
3. Zavedení systému RTEM. Propojení se SCADA systémy, nastavení přepínačů a výstrah, naprogramování komunikace mezi systémem RTEM a databází.
4. Instalace a zprovoznění programu Decide! Stanovení optimalizačních kritérií a rozhodovacích podmínek. Implementace těchto kritérií do Decide!.
5. Propojení Decide! s centrální databází. Specifikace databázových dotazů.
6. Vytvoření uživatelského rozhraní pro Decide!, tak aby bylo možno zadávat dotazy expertnímu systému.
7. Trénink nástrojů umělé inteligence historických datech.
8. Stanovení kritérií pro řešení scénáře na základě historických dat nebo na základě výsledků modelů.
9. Úprava stávajících modelů PZP v systému Eclipse pro jejich začlenění do ES.
10. Vytvoření modelu nadzemních technologií daného PZP v systému Pipesim.
11. Odladění a kalibrace modelu nadzemních technologií.
12. Propojení systémů Eclipse a Pipesim pomocí programu Avocet.
13. Propojení programů Avocet a Decide!.
14. Testování systému na historických datech, při vypnutém propojení na zásobník.
15. Testování systému na datech produkováných SCADA systémy v reálném čase.

Příloha C

Nový přístup k modelování proudění na rozpukaných oblastech

Tato příloha je přetiskem článku [\[28\]](#), ve kterém je popsána formulace úlohy proudění, jak ji řeší systém `flow123d` a její aproximace pomocí smíšené hybridní MKP.

A NOVEL APPROACH TO MODELLING OF FLOW IN FRACTURED POROUS MEDIUM

JAN ŠEMBERA, JIŘÍ MARYŠKA, JIŘINA KRÁLOVCOVÁ AND OTTO SEVERÝN

There are many problems of groundwater flow in a disrupted rock massifs that should be modelled using numerical models. It can be done via “standard approaches” such as increase of the permeability of the porous medium to account the fracture system (or double-porosity models), or discrete stochastic fracture network models. Both of these approaches appear to have their constraints and limitations, which make them unsuitable for the large-scale long-time hydrogeological calculations. In the article, a new approach to the modelling of groundwater flow in fractured porous medium, which combines the above-mentioned models, is described. This article presents the mathematical formulation and demonstration of numerical results obtained by this new approach. The approach considers three substantial types of objects within a structure of modelled massif important for the groundwater flow – small stochastic fractures, large deterministic fractures, and lines of intersection of the large fractures. The systems of stochastic fractures are represented by blocks of porous medium with suitably set hydraulic conductivity. The large fractures are represented as polygons placed in 3D space and their intersections are represented by lines. Thus flow in 3D porous medium, flow in 2D and 1D fracture systems, and communication among these three systems are modelled together.

Keywords: finite element method, Darcy’s flow, fractured porous medium

AMS Subject Classification: 86A05, 76M10

1. ROCK MASSIF ENVIRONMENT

Numerical modelling of the hydraulic, geochemical and transport processes in fractured rock attracts the attention of many scientists more than forty years. The first numerical models of such processes were created in late 1960’s. According to [2], there existed more than thirty software packages claimed to solve problems of fluid flow in fractured rock in 1994.

Despite that fact, there is a lot of open and unresolved problems in this field of research. The reason for that lies in the nature of the problem – lack of input data, their uncertainty and often low accuracy, high computational cost are the main difficulties we encounter when we try to simulate processes in a fractured rock. It is possible to avoid these difficulties usually only at a price of simplification of the problem.

The hydrogeological research brought following empirical knowledge about the rock environment and groundwater flow in them:

- The rock matrix can be considered hydraulically impermeable.
- Even the most compact massifs are disrupted by numerous fractures.
- Most of the fractures are relatively small, with the characteristic length less than one meter.
- The groundwater flow in the small fractures has significant store capacity and play important role mainly in the transport processes.
- It is barely possible to obtain exact parameters of all the fractures, they should be treated in statistical way.
- The most of the liquid is conducted by relatively small number of large fractures. The spatial position of these fractures is usually detectable.
- The fastest groundwater flux is observed on intersections of the large fractures.

These intersections behave like “pipelines” in the compact rock massifs.

These facts lead us to the conclusion that there are in general three different objects involved in conduction of the groundwater through a compact rock: small fractures, large fractures and intersections of large fractures.

There are two possible approaches to the modelling of flow in environment of *small fractures*: employment of the *stochastic discrete fracture networks* or the *homogenization and replacement with porous medium*. The first one is more suitable for small problems, see [7]. On the other hand the second approach is much better applicable for large problems. Fractured rock disrupted only by small fractures can be relatively well homogenized and replaced by hydraulically equivalent porous medium environment. The methods of homogenization and setting the hydraulic parameters of the porous medium can be found for example in [1].

The large fractures are relatively well known. The *discrete fracture network* approach works well in this case. Then, the fractures are represented as 2D objects (polygons) placed in 3D space.

The intersections of large fractures are relatively rare in the rock massifs, but significant for the flow. The velocity of the flow on the intersections of fractures can be higher in order of magnitude than velocity on the fractures. They can be represented by 1D objects placed in 3D space. Similar way can be represented also a possible borehole in the model.

On the base of our experience in groundwater flow modelling we decided to build up a model that could treat all the above-mentioned objects. The model incorporates 3D blocks, considered as porous medium, 2D fractures, standing for real rock fractures, and 1D lines, representing significant pipelines in the underground.

2. LINEAR STEADY DARCY FLOW

In general, the linear steady Darcy flow, which we expect in a considered underground domain, is described by the equations

$$\mathbf{u} = -\mathbf{K} \nabla p, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = q, \quad (2)$$

where $\mathbf{u}$ is the vector of Darcy velocity of the flow, p is the hydraulic pressure, $\mathbf{K}$ is the second order tensor of hydraulic conductivity (symmetric, positive definite), and q is a function expressing the density of sources or sinks of the fluid.

The equation (1) is the Darcy's law – the relation between pressure and water velocity in porous medium. The equation (2) is the equation of continuity. Sources q usually represent injection or pumping out the water from the porous medium.

The steady Darcy flow problem is governed by these two equations and it is solved in a bounded region (1D, 2D, or 3D) with boundary conditions generally of three sorts. For setting the problem correctly, it is necessary to prescribe a Dirichlet boundary condition

$$p = p_D,$$

which determines water pressure on one part of the boundary. On the resting part of boundary, the Neumann boundary condition prescribing water flow through the boundary

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

(where $\mathbf{n}$ is outer boundary normal vector) or more general Newton boundary condition

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - \sigma_N(p - p_N) = 0$$

can be prescribed.

3. MATHEMATICAL FORMULATION OF THE PROBLEM

Let us consider three domains Ω_3 , Ω_2 and Ω_1 , $\Omega_3 \subset R^3$, $\Omega_2 \subset R^3$, $\Omega_1 \subset R^3$. Besides let Ω_3 be a simply connected three dimensional polyhedral domain, Ω_2 be a finite set of mutually connected polygons placed in 3D space and Ω_1 be a finite set of mutually connected line segments placed in 3D space.

Let the boundary of each domain be divided into two parts – Dirichlet part and Neumann part: Boundary of domain Ω_3 : $\partial\Omega_3 = \Gamma_{3,D} \cup \Gamma_{3,N}$, $\Gamma_{3,D} \neq \emptyset$, $\Gamma_{3,D} \cap \Gamma_{3,N} = \emptyset$. Boundary of domain Ω_2 : $\partial\Omega_2 = \Gamma_{2,D} \cup \Gamma_{2,N}$, $\Gamma_{2,D} \neq \emptyset$, $\Gamma_{2,D} \cap \Gamma_{2,N} = \emptyset$ and Boundary of domain Ω_1 : $\partial\Omega_1 = \Gamma_{1,D} \cup \Gamma_{1,N}$, $\Gamma_{1,D} \neq \emptyset$, $\Gamma_{1,D} \cap \Gamma_{1,N} = \emptyset$. ($\partial\Omega_1$ is a set of discrete points).

The potential driven flow in the domain Ω_i ($i = 1, 2, 3$) can be described by the following system of equations:

$$\mathbf{u}_i = -\mathbf{K}_i \nabla p_i \quad \text{in } \Omega_i, \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_i = q_i + \tilde{q}_{\langle i+1 \rangle, i} + \tilde{q}_{\langle i+2 \rangle, i} \quad \text{in } \Omega_i, \quad (4)$$

$$p_i = p_{i,D} \quad \text{on } \Gamma_{i,D}, \quad (5)$$

$$\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n} = u_{i,N} \quad \text{on } \Gamma_{i,N}, \quad (6)$$

where $\langle i+1 \rangle$, $\langle i+2 \rangle$ stand for $(i \bmod 3) + 1$, $(i+1 \bmod 3) + 1$ respectively.

The flow between two different domains is considered as a positive or negative source of fluid $\tilde{q}_{i,j}$. Its properties follow:

$$\begin{aligned} \tilde{q}_{i,j} &= (p_i - p_j)\sigma_{ij}, \quad i \neq j, \\ \sigma_{ij} &= 0 \quad \text{in } (\Omega_i \cup \Omega_j) \setminus (\Omega_i \cap \Omega_j), \end{aligned}$$

The quantity σ_{ij} stands for the permeability between domains Ω_i and Ω_j . $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ so $\tilde{q}_{ij} = -\tilde{q}_{ji}$.

The unknowns of the problem are the values of physical quantities p_i , $\mathbf{u}_i$ ($i = 1, 2, 3$) over the considered domains. The problem parameters are the domains Ω_i , their boundaries $\Gamma_{i,D}$ and $\Gamma_{i,N}$, values of boundary conditions $p_{i,D}$, $u_{i,N}$ ($i = 1, 2, 3$), and values of material parameters $\mathbf{K}_i$, σ_{ij} ($i, j = 1, 2, 3$, $i \neq j$).

4. MIXED-HYBRID FORMULATION

Let us consider three domains with their boundaries as it was mentioned above. Let us define the discretization of each domain into a set of subdomains, denote $\tau_{i,h}$ the partition of the domain Ω_i ($i = 1, 2, 3$), i. e.

$$\begin{aligned}\tau_{3,h} &= \{e; e \in \Omega_3, \cup_{e \in \tau_{3,h}} \bar{e} = \Omega_3, e_i \cap e_j = \emptyset \text{ for } i \neq j\}, \\ \tau_{2,h} &= \{e; e \in \Omega_2, \cup_{e \in \tau_{2,h}} \bar{e} = \Omega_2, e_i \cap e_j = \emptyset \text{ for } i \neq j\}, \\ \tau_{1,h} &= \{e; e \in \Omega_1, \cup_{e \in \tau_{1,h}} \bar{e} = \Omega_1, e_i \cap e_j = \emptyset \text{ for } i \neq j\}.\end{aligned}$$

Let us denote $\Gamma_{i,h}$ the sets of points on all nondirichlet faces in each domain:

$$\begin{aligned}\Gamma_{3,h} &= \cup_{e \in \tau_{3,h}} \partial e \setminus \Gamma_{3,D}, \\ \Gamma_{2,h} &= \cup_{e \in \tau_{2,h}} \partial e \setminus \Gamma_{2,D}, \\ \Gamma_{1,h} &= \cup_{e \in \tau_{1,h}} \partial e \setminus \Gamma_{1,D}.\end{aligned}$$

Let us emphasize the fact that no special demands for the mutual position of subdomains of different dimensions are prescribed.

For each $\Omega \in \{\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3\}$, $\Gamma_h \in \{\Gamma_{1,h}, \Gamma_{2,h}, \Gamma_{3,h}\}$, $\tau_h \in \{\tau_{1,h}, \tau_{2,h}, \tau_{3,h}\}$ we use the following function spaces: The standard space of square-integrable functions $L^2(\Omega)$, the standard Sobolev space of scalar functions with square-integrable weak derivatives $H^1(\Omega)$, the space $H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_h)$ of functions being trace of a function of corresponding $H^1(\Omega)$. For each subdomain $e \in \tau_h$, let us denote by $\mathbf{H}(\text{div}, e)$ the space of vector functions with square-integrable weak divergences and define $\mathbf{H}(\text{div}, \tau_h)$ as the space of functions from $\mathbf{L}^2(\Omega)$ whose restriction to each subdomain $e \in \tau_h$ lies in $\mathbf{H}(\text{div}, e)$.

In the following expressions β denotes the inverse of $\mathbf{K}$, i. e. hydraulic resistance, f^e denotes the restriction of function f on subdomain e , $(f, g)_e$ denotes the $L^2(e)$ scalar product of f and g , i. e. $\int_e fg \, dx$, and $\langle f, g \rangle_{\partial e}$ denotes the integral form $\int_{\partial e} fg \, dx$.

Let $\mathbf{u}_3 \in \mathbf{C}^1(\Omega_3)$ (a vector function with continuous derivatives of the first order) and $p_3 \in C(\Omega_3)$ (a continuous scalar function) fulfill the equations (3)–(6). Considering a particular subdomain $e \in \tau_{3,h}$, the following equations obviously hold:

$$\begin{aligned}\beta_3^e \mathbf{u}_3^e + \nabla p_3^e &= 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{u}_3^e - \tilde{q}_{23}^e - \tilde{q}_{13}^e &= q_3^e.\end{aligned}$$

Multiplying the first equation by any test function $\mathbf{v}_3 \in \mathbf{H}(\text{div}, \tau_{3,h})$ and the second one by another test function $\phi_3 \in L^2(\Omega_3)$ and integrating over e we obtain

$$\begin{aligned}(\beta_3^e \mathbf{u}_3^e, \mathbf{v}_3^e)_e + (\nabla p_3^e, \mathbf{v}_3^e)_e &= 0, \\ (\nabla \cdot \mathbf{u}_3^e, \phi_3^e)_e - ((p_2^e - p_3^e)\sigma_{23}^e, \phi_3^e)_e - ((p_1^e - p_3^e)\sigma_{13}^e, \phi_3^e)_e &= (q_3^e, \phi_3^e)_e.\end{aligned}$$

Let us denote ψ_3^e the restriction of continuous function p_3^e to ∂e . Applying the Green's formula the equalities can be read as

$$\begin{aligned} (\beta_3^e \mathbf{u}_3^e, \mathbf{v}_3^e)_e - (p_3^e, \nabla \cdot \mathbf{v}_3^e)_e + \langle \psi_3^e, \mathbf{v}_3^e \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e} &= 0, \\ (\nabla \cdot \mathbf{u}_3^e, \phi_3^e)_e - ((p_2^e - p_3^e) \sigma_{23}^e, \phi_3^e)_e - ((p_1^e - p_3^e) \sigma_{13}^e, \phi_3^e)_e &= (q_3^e, \phi_3^e)_e, \end{aligned}$$

where $\mathbf{n}^e$ stands for outer normal of ∂e .

Summing the above equalities over all subdomains of $\tau_{3,h}$ we get

$$\begin{aligned} \sum_{e \in \tau_{3,h}} \{(\beta_3^e \mathbf{u}_3^e, \mathbf{v}_3^e)_e - (p_3^e, \nabla \cdot \mathbf{v}_3^e)_e + \langle \psi_3^e, \mathbf{v}_3^e \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e}\} &= 0 \\ \sum_{e \in \tau_{3,h}} \{(\nabla \cdot \mathbf{u}_3^e, \phi_3^e)_e - ((p_2^e - p_3^e) \sigma_{23}^e, \phi_3^e)_e - ((p_1^e - p_3^e) \sigma_{13}^e, \phi_3^e)_e\} &= \sum_{e \in \tau_{3,h}} (q_3^e, \phi_3^e)_e. \end{aligned}$$

Extra equations expressing the continuity of $\mathbf{u}_3$ on internal faces between neighbouring subdomains of $\tau_{3,h}$ have to hold, too. The continuity on the face interconnecting subdomains e_k and e_l can be written down as

$$\mathbf{u}_3^{e_k} \cdot \mathbf{n}^{e_k} + \mathbf{u}_3^{e_l} \cdot \mathbf{n}^{e_l} = 0.$$

Let us test the equation by any function $\mu_3 \in H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_{3,h})$ and sum over all internal faces of partition $\tau_{3,h}$:

$$\sum_{e \in \tau_{3,h}} \langle \mathbf{u}_3^e \cdot \mathbf{n}^e, \mu_3^e \rangle_{\partial e \cap (\Gamma_{3,h} \setminus \Gamma_{3,N})} = 0.$$

Changing the sign of the balance equation and introducing the boundary conditions, the following system of integral equations on partition $\tau_{3,h}$ can be derived:

$$\begin{aligned} \sum_{e \in \tau_{3,h}} \{(\beta_3^e \mathbf{u}_3^e, \mathbf{v}_3^e)_e - (p_3^e, \nabla \cdot \mathbf{v}_3^e)_e + \langle \psi_3^e, \mathbf{v}_3^e \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{3,h}}\} \\ = - \sum_{e \in \tau_{3,h}} \langle p_{3,D}, \mathbf{v}_3^e \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{3,D}}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \sum_{e \in \tau_{3,h}} \{-(\nabla \cdot \mathbf{u}_3^e, \phi_3^e)_e + ((p_{23}^e - p_3^e) \sigma_{23}^e, \phi_3^e)_e + ((p_{13}^e - p_3^e) \sigma_{13}^e, \phi_3^e)_e\} \\ = - \sum_{e \in \tau_{3,h}} (q_3^e, \phi_3^e)_e, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\sum_{e \in \tau_{3,h}} \langle \mathbf{u}_3^e \cdot \mathbf{n}^e, \mu_3^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{3,h}} = \sum_{e \in \tau_{3,h}} \langle u_{3,N}^e, \mu_3^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{3,N}}. \quad (9)$$

The same way can be derived the system of integral equations on partitions $\tau_{2,h}$ and $\tau_{1,h}$:

$$\sum_{e \in \tau_{2,h}} \{(\beta_2^e \mathbf{u}_2^e, \mathbf{v}_2^e)_e - (p_2^e, \nabla \cdot \mathbf{v}_2^e)_e + \langle \psi_2^e, \mathbf{v}_2^e \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{2,h}}\}$$

$$= - \sum_{e \in \tau_{2,h}} \langle p_{2,D}, \mathbf{v}_2^e \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{2,D}}, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{e \in \tau_{2,h}} \{ -(\nabla \cdot \mathbf{u}_2^e, \phi_2^e)_e + ((p_{32}^e - p_2^e) \sigma_{32}^e, \phi_2^e)_e + ((p_{12}^e - p_2^e) \sigma_{12}^e, \phi_2^e)_e \} \\ &= - \sum_{e \in \tau_{2,h}} (q_2^e, \phi_2^e)_e, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\sum_{e \in \tau_{2,h}} \langle \mathbf{u}_2^e \cdot \mathbf{n}^e, \mu_2^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{2,h}} = \sum_{e \in \tau_{2,h}} \langle u_{2,N}^e, \mu_2^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{2,N}}, \quad (12)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{e \in \tau_{1,h}} \{ (\beta_1^e u_1^e, v_1^e)_e - (p_1^e, v_1^{e'})_e + \langle \psi_1^e, v_1^e \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{1,h}} \} \\ &= - \sum_{e \in \tau_{1,h}} \langle p_{1,D}, v_1^e \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{1,D}}, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{e \in \tau_{1,h}} \{ -(u_1^{e'}, \phi_1^e)_e + ((p_{31}^e - p_1^e) \sigma_{31}^e, \phi_1^e)_e + ((p_{21}^e - p_1^e) \sigma_{21}^e, \phi_1^e)_e \} \\ &= - \sum_{e \in \tau_{1,h}} (q_1^e, \phi_1^e)_e, \end{aligned} \quad (14)$$

$$\sum_{e \in \tau_{1,h}} \langle u_1^e \cdot \mathbf{n}^e, \mu_1^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{1,h}} = \sum_{e \in \tau_{1,h}} \langle u_{1,N}^e, \mu_1^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{1,N}}, \quad (15)$$

where $'$ means the first derivative and $\mathbf{n}^e$ is outer normal in 1D, i. e. either $+1$ or -1 .

In the equations (8), (11), (14) the functions $p_{ij}^{e_j}$ for $e_j \in \tau_{j,h}$, $i \neq j$, $i, j \in \{1, 2, 3\}$ stand for

$$\sum_{e_i \in \tau_{i,h}} p_{ij}^{e_i, e_j}, \quad (16)$$

where $p_{ij}^{e_i, e_j}$ are any functions fulfilling the following conditions:

$$\text{for } i < j: \quad p_{ij}^{e_i, e_j} \in L^2(e_j): \quad \int_{e_j} p_{ij}^{e_i, e_j} dx = \int_{e_i \cap e_j} p_i dx, \quad (17)$$

$$\text{for } i > j: \quad p_{ij}^{e_i, e_j} \in L^2(e_i \cap e_j): \quad \int_{e_i \cap e_j} p_{ij}^{e_i, e_j} dx = \frac{|e_i \cap e_j|_j}{|e_i|_i} \int_{e_i} p_i dx, \quad (18)$$

where $|e|_i$ means the i -dimensional measure of e .

Next introduce the function space (Z) :

$$\begin{aligned} \mathbf{Z} &= \mathbf{H}(\text{div}, \tau_{3,h}) \times \mathbf{H}(\text{div}, \tau_{2,h}) \times \mathbf{H}(\text{div}, \tau_{1,h}) \\ &\quad \times L^2(\tau_{3,h}) \times L^2(\tau_{2,h}) \times L^2(\tau_{1,h}) \times H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_{3,h}) \times H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_{2,h}) \times H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_{2,h}). \end{aligned}$$

Definition 1. We call the function

$$\bar{\mathbf{z}} = (\mathbf{u}_3, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_1, p_3, p_2, p_1, \psi_3, \psi_2, \psi_1) \in \mathbf{Z}$$

the weak solution of mixed hybrid formulation of the problem of flow in fracture porous medium, if for all functions

$$\mathbf{z} = (\mathbf{v}_3, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_1, \varphi_3, \varphi_2, \varphi_1, \mu_3, \mu_2, \mu_1) \in \mathbf{Z}$$

$\bar{\mathbf{z}}$ satisfies the equations (7)–(15).

5. FINITE ELEMENT APPROXIMATION

We are using the same approximation as [5]. Let $\tau_{3,h}$ be a partition of Ω_3 into simplex elements, $\tau_{2,h}$ be a partition of Ω_2 into triangle elements and $\tau_{1,h}$ be a partition of Ω_1 into line elements.

For the approximation of function spaces $\mathbf{H}(\text{div}, \tau_{i,h})$ we use the Raviart–Thomas spaces of piecewise linear functions $\mathbf{RT}_{-1}^0(\tau_{i,h}) = \{\mathbf{f} \in \mathbf{L}^2(\Omega_i) | (\forall e \in \tau_{i,h})(\mathbf{f}^e \in \mathbf{RT}^0(e))\}$ ($i = 1, 2, 3$). The local Raviart–Thomas spaces $\mathbf{RT}^0(e)$ are defined in each dimension a different way:

- in 3D (for $e \in \tau_{3,h}$): $\mathbf{RT}^0(e) = \text{span}\{\mathbf{v}_{3,i}^e | i \in \{1, 2, 3, 4\}\}$, where

$$\mathbf{v}_{3,i}^e(\mathbf{x}) = k \begin{pmatrix} x - \alpha \\ y - \beta \\ z - \gamma \end{pmatrix},$$

parameters k , α , β , and γ are chosen so that

$$\int_{f_{3j}^e} \mathbf{v}_{3i} \cdot \mathbf{n}_{3j} = \delta_{ij}, \quad i, j \in \{1, 2, 3, 4\},$$

where f_{3j}^e ($j = 1, 2, 3, 4$) are individual faces of the tetrahedron e , $\mathbf{n}_{3j}$ is the outward normal vector of the face f_{3j}^e and δ_{ij} is the Kronecker symbol.

- in 2D (for $e \in \tau_{2,h}$): $\mathbf{RT}^0(e) = \text{span}\{\mathbf{v}_{2,i}^e | i \in \{1, 2, 3\}\}$, where

$$\mathbf{v}_{2,i}^e(\mathbf{x}) = k \begin{pmatrix} x - \alpha \\ y - \beta \end{pmatrix},$$

parameters k , α , and β are chosen so that

$$\int_{f_{2j}^e} \mathbf{v}_{2i} \cdot \mathbf{n}_{2j} = \delta_{ij}, \quad i, j \in \{1, 2, 3\},$$

where f_{2j}^e ($j = 1, 2, 3$) are individual edges of the triangle e and $\mathbf{n}_{2j}$ is the outward normal vector of the edge f_{2j}^e .

- in 1D (for $e \in \tau_{1,h}$): $\mathbf{RT}^0(e) = P_1(e)$ (the space of all linear function on e).

For the approximation of function spaces $L^2(\tau_{i,h})$ we use the multiplier spaces of piecewise constant functions $M_{-1}^0(\tau_{i,h}) = \text{span}\{\phi^e | e \in \tau_{i,h}\}$ ($i = 1, 2, 3$), where $\phi^e(\mathbf{x}) = 1$ for $x \in e$ and $\phi^e(\mathbf{x}) = 0$ otherwise.

For the approximation of function spaces $H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_{i,h})$ we use the multiplier spaces of piecewise constant functions $M_{-1}^0(\Gamma_{i,h}) = \text{span}\{\Psi^f | f \in \Gamma_{i,h}\}$ ($i = 1, 2, 3$), where $\Psi^f(\mathbf{x}) = 1$ for $x \in f$ and $\Psi^f(\mathbf{x}) = 0$ otherwise.

For more details about the approximation function spaces, see e.g. [3].

Let us define the approximation space

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{Z}} &= \mathbf{RT}_{-1}^0(\tau_{3,h}) \times \mathbf{RT}_{-1}^0(\tau_{2,h}) \times \mathbf{RT}_{-1}^0(\tau_{1,h}) \\ &\quad \times M_{-1}^0(\tau_{3,h}) \times M_{-1}^0(\tau_{2,h}) \times M_{-1}^0(\tau_{1,h}) \times M_{-1}^0(\Gamma_{3,h}) \times M_{-1}^0(\Gamma_{2,h}) \times M_{-1}^0(\Gamma_{1,h}) \end{aligned}$$

and approximate the function $\tilde{\mathbf{z}} = (\mathbf{u}_3, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_1, p_3, p_2, p_1, \psi_3, \psi_2, \psi_1) \in \mathbf{Z}$ and test function $\mathbf{z} = (\mathbf{v}_3, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_1, \phi_3, \phi_2, \phi_1, \mu_3, \mu_2, \mu_1) \in \mathbf{Z}$ by the functions $\tilde{\tilde{\mathbf{z}}} = (\tilde{\mathbf{u}}_3, \tilde{\mathbf{u}}_2, \tilde{\mathbf{u}}_1, \tilde{p}_3, \tilde{p}_2, \tilde{p}_1, \tilde{\psi}_3, \tilde{\psi}_2, \tilde{\psi}_1) \in \tilde{\mathbf{Z}}$ and $\tilde{\mathbf{z}} = (\tilde{\mathbf{v}}_3, \tilde{\mathbf{v}}_2, \tilde{\mathbf{v}}_1, \tilde{\phi}_3, \tilde{\phi}_2, \tilde{\phi}_1, \tilde{\mu}_3, \tilde{\mu}_2, \tilde{\mu}_1) \in \tilde{\mathbf{Z}}$ respectively.

Formal evaluating the equations (7)–(15) for the proposed function and test function approximations leads to the following system:

$$\begin{aligned} &\sum_{e \in \tau_{i,h}} \left\{ (\beta_i^e \tilde{\mathbf{u}}_i^e, \tilde{\mathbf{v}}_i^e)_e - (\tilde{p}_i^e, \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}_i^e)_e + \langle \tilde{\psi}_i^e, \tilde{\mathbf{v}}_i^e \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{i,h}} \right\} \\ &= - \sum_{e \in \tau_{i,h}} \langle p_{i,D}, \tilde{\mathbf{v}}_i^e \cdot \mathbf{n}^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{i,D}}, \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} &\sum_{e \in \tau_{i,h}} \left\{ -(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}_i^e, \tilde{\phi}_i^e)_e + ((\tilde{p}_{\langle i+1 \rangle, i}^e - \tilde{p}_i^e) \sigma_{\langle i+1 \rangle, i}^e, \tilde{\phi}_i^e)_e \right. \\ &\quad \left. + ((\tilde{p}_{\langle i+2 \rangle, i}^e - \tilde{p}_i^e) \sigma_{\langle i+2 \rangle, i}^e, \tilde{\phi}_i^e)_e \right\} = - \sum_{e \in \tau_{i,h}} (q_i^e, \tilde{\phi}_i^e)_e, \end{aligned} \quad (20)$$

$$\sum_{e \in \tau_{i,h}} \langle \tilde{\mathbf{u}}_i^e \cdot \mathbf{n}^e, \tilde{\mu}_i^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{i,h}} = \sum_{e \in \tau_{i,h}} \langle u_{i,N}^e, \tilde{\mu}_i^e \rangle_{\partial e \cap \Gamma_{i,N}}. \quad (21)$$

Here the meaning of $\tilde{p}_{i+1,i}^e$ and $\tilde{p}_{i+2,i}^e$ is analogical to (16)–(18) considering shortened notation of $(i \bmod 3) + 1$ as $\langle i + 1 \rangle$ and $(i + 1 \bmod 3) + 1$ as $\langle i + 2 \rangle$.

Definition 2. We call the function $\tilde{\tilde{\mathbf{z}}} = (\tilde{\mathbf{u}}_3, \tilde{\mathbf{u}}_2, \tilde{\mathbf{u}}_1, \tilde{p}_3, \tilde{p}_2, \tilde{p}_1, \tilde{\psi}_3, \tilde{\psi}_2, \tilde{\psi}_1) \in \tilde{\mathbf{Z}}$ the mixed-hybrid finite element approximation of the weak solution of the problem of flow in fracture porous medium, if for all functions $\tilde{\mathbf{z}} = (\tilde{\mathbf{v}}_3, \tilde{\mathbf{v}}_2, \tilde{\mathbf{v}}_1, \tilde{\phi}_3, \tilde{\phi}_2, \tilde{\phi}_1, \tilde{\mu}_3, \tilde{\mu}_2, \tilde{\mu}_1) \in \tilde{\mathbf{Z}}$ the equations (19)–(21) hold for $i \in \{1, 2, 3\}$.

Let us use the following notation for the partial functions of $\tilde{\tilde{\mathbf{z}}}$ ($i = 1, 2, 3$):

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{u}}_i &= \sum_{e \in \tau_{i,h}} \sum_{j \in I_i} V_{ij}^e \mathbf{v}_{3j}^e, & I_1 &= \{1, 2\}, \quad I_2 = \{1, 2, 3\}, \quad I_3 = \{1, 2, 3, 4\}, \\ \tilde{p}_i &= \sum_{e \in \tau_{i,h}} P_i^e \phi^e, & \tilde{\psi}_i &= \sum_{f \in \Gamma_{i,h}} \mu_i^f \Psi^f \end{aligned}$$

Obviously, it is sufficient to evaluate the equations (19)–(21) only for all test functions chosen from the basis of $\tilde{\mathbf{Z}}$, i.e. for the following sets ($i = 1, 2, 3$):

$$\tilde{\mathbf{v}}_i \in \{\mathbf{v}_{ij}^e | e \in \tau_{i,h}, j \in I_i\}, \quad \tilde{\phi}_i \in \{\phi^e | e \in \tau_{i,h}\}, \quad \tilde{\mu}_i \in \{\Psi^f | f \in \Gamma_{i,h}\}$$

Let us order the elements of $\tau_{i,h}$ and faces of $\Gamma_{i,h}$ and align the unknown coefficients into vectors the following way ($i = 1, 2, 3$):

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_i &= (V_{i1}^{e_1}, V_{i2}^{e_1}, V_{i3}^{e_1}, V_{i4}^{e_1}, V_{i1}^{e_2}, \dots)^T, \\ \mathbf{P}_i &= (P_i^{e_1}, P_i^{e_2}, P_i^{e_3}, \dots)^T, \\ \mathbf{\Psi}_i &= (\mu_i^{f_1}, \mu_i^{f_2}, \mu_i^{f_3}, \dots)^T. \end{aligned}$$

The system (19)–(21) then converts to the following system of linear algebraic equations:

$$\begin{aligned} \mathring{A}_3 \mathbf{V}_3 &+ \mathbf{B}_3 \mathbf{P}_3 &+ \mathbf{C}_3 \mathbf{\Psi}_3 &= \mathbf{q}_{3D} \\ \mathring{A}_2 \mathbf{V}_2 &+ \mathbf{B}_2 \mathbf{P}_2 &+ \mathbf{C}_2 \mathbf{\Psi}_2 &= \mathbf{q}_{2D} \\ \mathring{A}_1 \mathbf{V}_1 &+ \mathbf{B}_1 \mathbf{P}_1 &+ \mathbf{C}_1 \mathbf{\Psi}_1 &= \mathbf{q}_{1D} \\ \mathbf{B}_3^T \mathbf{V}_3 &+ \mathbf{D}_3 \mathbf{P}_3 + \mathbf{D}_{32} \mathbf{P}_2 + \mathbf{D}_{31} \mathbf{P}_1 &= \mathbf{q}_{3E} \\ \mathbf{B}_2^T \mathbf{V}_2 &+ \mathbf{D}_{32}^T \mathbf{P}_3 + \mathbf{D}_2 \mathbf{P}_2 + \mathbf{D}_{21} \mathbf{P}_1 &= \mathbf{q}_{2E} , \\ \mathbf{B}_3^T \mathbf{V}_1 + \mathbf{D}_{31}^T \mathbf{P}_3 + \mathbf{D}_{21}^T \mathbf{P}_2 + \mathbf{D}_1 \mathbf{P}_1 &= \mathbf{q}_{1E} \\ \mathbf{C}_3^T \mathbf{V}_3 &= \mathbf{q}_{3N} \\ \mathbf{C}_2^T \mathbf{V}_2 &= \mathbf{q}_{2N} \\ \mathbf{C}_1^T \mathbf{V}_1 &= \mathbf{q}_{1N} \end{aligned}$$

The resulting system matrix is symmetric, sparse of characteristic internal structure, indefinite. The blocks $\mathring{A}_i$ are positive definite. The properties enable to use specialized solvers of linear equation systems (see [6]) to make the process of solving more effective.

The well-posedness and convergence of the method to the weak solution was studied for partial problems in [4] (only 3D problem) and [8] (only 2D fractures in 3D). The complete 1D-2D-3D problem as set here was not theoretically studied, yet.

6. NUMERICAL EXAMPLE

The proposed approach to modelling of flow in fractured medium was implemented and a simple test problem was set up to see the effect of inclusion of fractures into porous medium model. Two hydraulically equivalent models of one small area were built. The first one is a model of the polygonal area with two intersecting fractures. The shape of the area and position of the fractures can be seen at Figure 1. The dimensions in plan-view are about 10×10 km, the depth is 900 m. The area is slightly slanted in y -axes direction – the vertical distance is 50 m. The area is composed of five geological layers. The upper one is 100 m deep, the depth of each of the other ones is 200 m. The permeability of each layer is homogeneous and isotropic. The values of layers' permeability are from top to bottom respectively 100, 10, 50, 0.001, and 0.5 m/day. The permeability of fractures is homogeneous and isotropic, its value is $3 \cdot 10^5$ m/day. The inter-dimensional permeability σ_{23} was set equal to 1 in whole fracture system.

The boundary conditions on upper and lower parts of the boundary of both the 3D area and the 2D fracture system, such as at the left and right parts (in view of

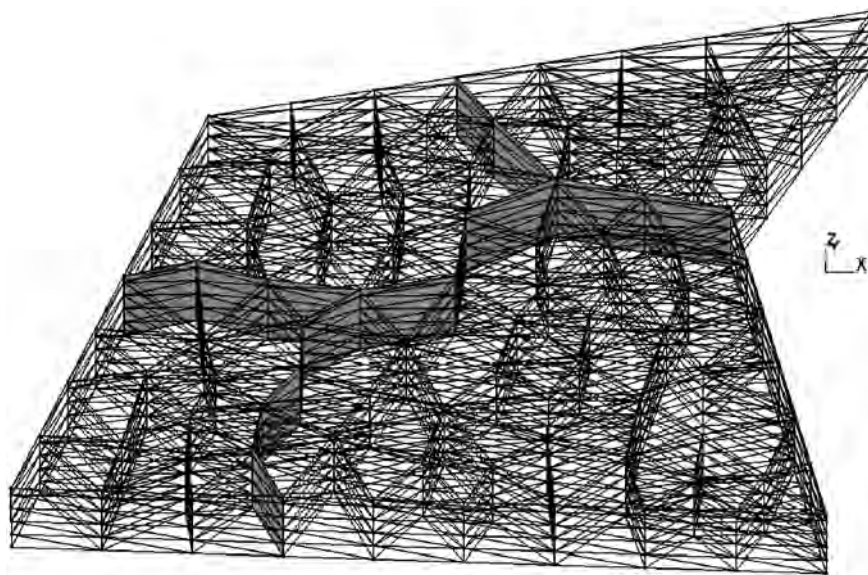


Fig. 1. The area and mesh of the test problems.

Figure 1), are homogeneous Neumann ones (meaning no flow through the boundary). On the front and back parts of the boundary, there the Dirichlet conditions are prescribed. The value of pressure there is prescribed due to z -coordinate so that the flow is induced just by the slope of the layers.

The second test problem is the same area without fractures, the permeability of the porous medium is higher so that at the same boundary conditions the inflow and outflow from the area are the same as in the first problem. The boundary conditions are the same.

Both computations were made on the mesh pictured at Figure 1 with 2271 tetrahedral elements. The fracture in the first problem was represented by 150 triangle mesh.

The resulting flow fields are noticeably different from each other. The flow through the fractured area (see Figure 2) is concentrated to the fracture. Almost no water flows elsewhere. It is not surprising since the permeability of fracture is 3 orders higher than permeability of porous medium. The flow field through purely porous medium area (see Figure 3) is very different, flow is distributed much more evenly in the whole area.

The difference in flow fields projects into dissolved species transport so that the propagation of contamination can be extremely overestimated or underestimated depending on the contamination source placement near or far from a fracture. This result demonstrates that if it is possible, the fractures in the modelled rock should be well localized and taken into account in modelling.

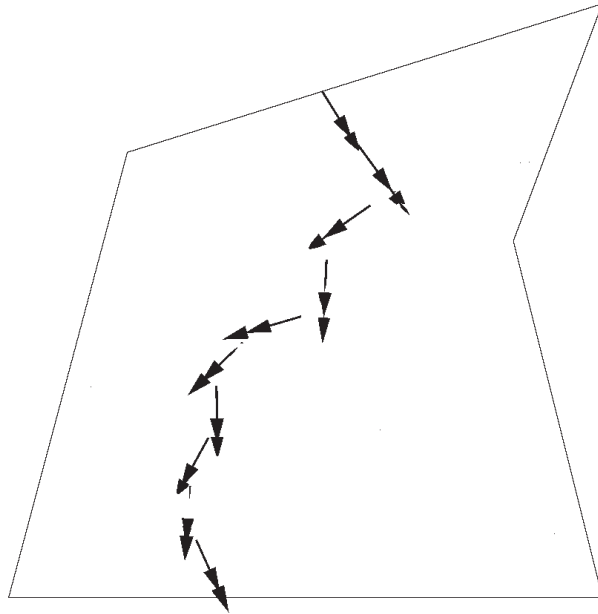


Fig. 2. Visualization of the computed flow field for the problem including fractures.

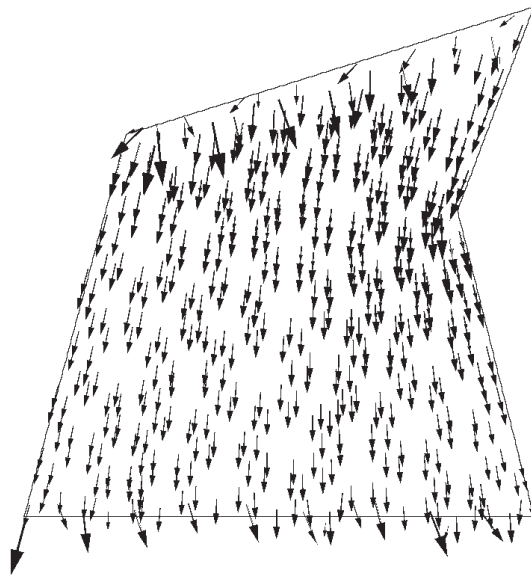


Fig. 3. Visualization of the computed flow field for the problem without fractures.

7. CONCLUSIONS

The presented formulation of water flow is based on connection of 1D, 2D, and 3D porous medium systems via the source terms only. It allows to construct meshes of the three systems independently on each other. It can save number of elements of constructed meshes, which saves computational time and allows to model large-scale real-world problems with less computational costs.

Actually, the model based on this formulation was implemented and it is a subject of testing at the time. The results of small-scale tests show qualitatively good behaviour of the model. The most recent open questions are the identification of σ_{ij} parameters in real problems and behaviour of the model in a large scale.

ACKNOWLEDGEMENT

This work was supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic under project number 1M4674788502, Research Centre Advanced Remediation Technologies and Processes.

(Received February 1, 2006.)

REFERENCES

- [1] I. I. Bogdanov, V. V. Mourzenko, J. F. Thovert, and P. M. Adler: Effective permeability of fractured porous media in steady state flow. *Water Res. Research* *39* (2003), 1023–1038.
- [2] D. M. Diodato: Compendium of Fracture Flow Models. Center for Environmental Restoration Systems, Energy Systems Division, Argonne National Laboratory, USA 1994. Available on: <http://www.thehydrogeologist.com/docs/cffm/cffmtoc.htm>.
- [3] E. F. Kaasschieter and A. J. M. Huijben: Mixed-hybrid finite elements and streamline computation for the potential flow problem. *Numer. Methods Partial Differential Equations* *8* (1992), 221–266.
- [4] J. Maryška: Approximation of the Mixed-hybrid Formulation of the Porous Media Flow Problem (in Czech). Technical Report No. 609, Institute of Computer Science of the Academy of Sciences of the Czech Republic, Prague 1995.
- [5] J. Maryška, M. Rozložník, and M. Tůma: Mixed-hybrid finite-element approximation of the potential fluid-flow problem. *J. Comput. Appl. Math.* *63* (1995), 383–392.
- [6] J. Maryška, M. Rozložník, and M. Tůma: Schur complement systems in the mixed-hybrid finite element approximation of the potential fluid flow problem. *SIAM J. Sci. Comput.* *22* (2000), 704–723.
- [7] J. Maryška, O. Severýn, and M. Vohralík: Mixed-hybrid finite elements and streamline computation for the potential flow problem. *Computational Geosciences* *18* (2005), 8/3, 217–234.
- [8] M. Vohralík, J. Maryška, and O. Severýn: Mixed and nonconforming finite element methods on a system of polygons. To appear in *Appl. Numer. Math.*

Jan Šembera, Jiří Maryška, Jiřina Královcová, and Otto Severýn, Technical University of Liberec, Háfkova 6, 461 17 Liberec. Czech Republic.

e-mails: jan.sembera@tul.cz, jiri.maryska@tul.cz, jirina.kralovcova@tul.cz, otto.severyn@tul.cz