

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií

Studijní program: N3901 Aplikované vědy v inženýrství

Studijní obor: Přírodovědné inženýrství

Propojení výpočetních prostředků ANSYS a Flow123D

Interconnection of computing software ANSYS and Flow123D

DIPLOMOVÁ PRÁCE

Autor: **Bc. Martin Hušek**

Vedoucí práce: Ing. Josef Novák, Ph.D.

V Liberci 21. 5. 2010

Prohlášení

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

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci (TUL) nezasahuje do mých autorských práv užitím mé diplomové práce pro vnitřní potřebu TUL.

Užiji-li diplomovou práci nebo poskytnu-li licenci k jejímu využití, jsem si vědom povinnosti informovat o této skutečnosti TUL; v tomto případě má TUL právo ode mne požadovat úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše.

Diplomovou práci jsem vypracoval(a) samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím diplomové práce a konzultantem.

Datum

Podpis

Poděkování

Chtěl bych poděkovat vedoucímu diplomové práce Ing. Josefu Novákovi, Ph.D. za odborné vedení a cenné rady získané během konzultací.

Velký dík též patří mým rodičům za jejich finanční a morální podporu během celého studia.

Abstrakt

V diplomové práci se řešil problém propojení výpočetních prostředků ANSYS a Flow123D za účelem řešení sdružených úloh. V jazyce Java byla naprogramována aplikace, která realizuje zmíněné propojení. Jejími úkoly jsou konverze formátu uložení sítě konečných prvků mezi uvedenými simulačními programy a výpočet hydraulické vodivosti z výsledků deformačně-napěťové analýzy programu ANSYS.

Pro předvedení a ověření správnosti navrženého propojení, byla vyřešena testovací úloha, představující proudění v porézním podzemním prostředí. V úloze byla předpokládána závislost hydraulické vodivosti na napjatosti horniny. V ANSYS byla provedena deformačně-napěťová analýza. Pomocí realizované aplikace byly předány potřebné údaje z ANSYS do Flow123D pro výpočet proudění. Kromě numerického výpočtu testovací úlohy byl proveden i výpočet analytický.

Klíčová slova: Metoda konečných prvků (MKP)

Sdružená úloha

Mechanické napětí horniny

Hydraulická vodivost

Podzemní proudění

Abstract

In the diploma thesis a problem of interconnection of computing software ANSYS and Flow123D was solved with the aim of solving coupled problems. An application, which implements the interconnection mentioned above, was written in the Java programming language. It's tasks are a conversion of storage formats of finite element network between simulation programs mentioned above and a calculation of hydraulic conductivity from results of strain-stress analysis computed in the ANSYS software.

In order to demonstrate and verify the correctness of proposed interconnection, the test problem, which represents a flow in a porous underground medium, was solved. In the test problem a hydraulic conductivity - rock stress relation was presumed. In the ANSYS software a strain-stress analysis was performed. Using the application mentioned above necessary information were transmitted from ANSYS to Flow123D for the purpose of flow calculation. In addition to the numerical calculation of test problem an analytical one was performed.

Keywords: Finite element method (FEM)

Coupled problem

Mechanical stress of rock

Hydraulic conductivity

Underground flow

Obsah

Seznam použitých obrázků a tabulek	9
Seznam použitých symbolů	10
Úvod	11
Teoretická část	12
1 Mechanika spojitého prostředí (kontinua)	12
1.1 Rovnováha sil a momentů	12
1.2 Zobecněný Hookeův zákon	13
1.3 Okrajové podmínky	13
2 ANSYS	14
2.1 Preprocessor	14
2.1.1 Modeling	15
2.1.2 Meshing	15
2.1.3 Material properties	15
2.1.4 Define loads	16
2.2 Solution	16
2.3 Postprocessor	17
3 Proudění v porézním prostředí	17
3.1 Vlastnosti horninového prostředí	17
3.1.1 Pórovitost	18
3.1.2 Hydraulická vodivost	19
3.2 Rovnice proudění v porézním prostředí	19
3.2.1 Darcyho zákon	20
3.2.2 Darcyho zákon ve 3D	21
3.2.3 Rovnice bilance hmoty	21
3.2.4 Okrajové podmínky	22
3.3 Vliv zatížení na proudění	22
3.4 Změna hydraulické vodivosti	23
4 Flow123D	24
4.1 Práce s Flow123D	25
4.2 Soubor MSH	25
4.3 Soubor MTR	26
Praktická část	27
5 Realizace aplikace Anflow	28
5.1 Úkoly navržené aplikace	28
5.2 Požadované vstupy a výstupy aplikace Anflow	28
5.3 Uživatelské rozhraní aplikace Anflow	30
5.3.1 Blok MSH file	31
5.3.2 Blok MTR file	31
5.4 Hlavní třídy programu	32
6 Návrh testovací úlohy	32
6.1 Oblast řešení a zavedené okrajové podmínky	32
6.2 Analytický výpočet testovací úlohy	33

7	Řešení testovací úlohy v ANSYS.....	35
7.1	Vytvoření modelu.....	35
7.2	Deformačně-napěťová analýza	36
7.3	Příprava dat pro aplikaci Anflow.....	38
8	Konverze dat	39
9	Řešení testovací úlohy ve Flow123D.....	39
9.1	Nastavení bcd.ini.....	40
9.2	Vizualizace proudění.....	40
10	Srovnání analytického a numerického výpočtu	42
11	Závěr	44
	Literatura	45
	Obsah přiloženého DVD.....	46

Seznam použitých obrázků a tabulek

Obrázek 1: Prostředí ANSYS	14
Obrázek 2: Příklad elementů v ANSYS [1].....	15
Obrázek 3: Nastavení materiálu.....	16
Obrázek 4: Výběr zobrazené veličiny.....	17
Obrázek 5: Proudění vody, $K = \text{konst}$	23
Obrázek 6: Proudění vody, $K \neq \text{konst}$	23
Obrázek 7: Závislost hydraulické vodivosti na napětí.....	24
Obrázek 8: Blokové schéma Flow123D [7]	25
Obrázek 9: Vygenerované listy v ANSYS	28
Obrázek 10: Schéma navrženého propojení	30
Obrázek 11: Navržená aplikace Ansysflow	30
Obrázek 12: Vývojový diagram bloku MSH.....	31
Obrázek 13: Vývojový diagram bloku MTR.....	31
Obrázek 14: Testovací úloha	32
Obrázek 15: Myšlené řezy	33
Obrázek 16: Element plane 42.....	35
Obrázek 17: Nastavení materiálových konstant	36
Obrázek 18: Síť konečných prvků s OKP.....	36
Obrázek 19: Napětí σ_y [Pa]	37
Obrázek 20: Napětí σ_x [Pa]	37
Obrázek 21: Nastavení pro konverzi dat.....	39
Obrázek 22: Proudění v nezatížené hornině	40
Obrázek 23: Proudění zatížené horniny.....	41
Obrázek 24: Proudění s lineární závislostí K na σ	41
Obrázek 25: Hodnoty q na konkrétních elementech.....	42
Obrázek 26: Závislost hydraulické vodivosti na napětí.....	43
Tabulka 1: Orientační hodnoty pórovitostí [5]	19
Tabulka 2: Orientační hodnoty hydraulické vodivosti [5].....	19
Tabulka 3: Příklad typů hydraulických vodivostí ve Flow123D [8]	27

Seznam použitých symbolů

E	modul pružnosti v tahu (tzv. Youngův modul) [Pa]
e_{ij}	tenzor deformace
F	objemová síla [$\text{N}\cdot\text{m}^{-3}$]
g	gravitační zrychlení [$\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$]
h	tlaková výška [m]
K	hydraulická vodivost [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]
m	hmotnost [kg]
n	pórovitost [-]
p	tlak [Pa]
Q	průtok [$\text{m}^3\cdot\text{s}^{-1}$]
q	Darcyovská rychlost [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]
S	plocha [m^2]
T	plošná síla [$\text{N}\cdot\text{m}^{-2}$]
V	objem [m^3]
v	průměrná rychlost [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]
Δh	posun [m]
δ_{ij}	Kroneckerovo delta
ε	poměrná deformace [-]
ν	Poissonův poměr [-]
ρ	hustota [$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$]
σ	mechanické napětí [$\text{m}^{-1}\cdot\text{kg}\cdot\text{s}^{-2} = \text{Pa}$]
σ_{ij}	tenzor mechanického napětí
Φ	piezometrická výška [m]

Úvod

V oblasti numerického modelování se můžeme setkat s tzv. sdruženými úlohami. V případě sdružených úloh se např. zabýváme vztahem mezi mechanickými a hydrogeologickými procesy, kde se řeší interakce na systému hornina a kapalina. Ty mají vliv na samotnou horninu, tak i na proudění kapaliny v tomto porézním materiálu. Tyto fyzikální jevy se staly předmětem zkoumání řady odborníků z nejrůznějších oblastí. Vznikají nové simulační programy pro modelování těchto procesů. Dosažené výsledky pak mohou posloužit na ochranu podzemních vod.

Pokud vazba mezi mechanickou a hydrologickou složkou systému voda a hornina není příliš těsná, je možné danou sdruženou úlohu řešit volně. V případě diplomové práce se tedy jedná o osamostatnění napětově-deformační analýzy a výpočtu proudění v porézním prostředí. Na každý výpočet pak můžeme použít jiný výpočetní prostředek. Výsledek takové sdružené úlohy je pak dán z jednotlivých řešení. Jestliže však jeden program potřebuje spočtené údaje z jiného programu, nastává problém s výměnou dat a konverzí jejich formátů. Tímto problémem se tedy zabývá tato diplomová práce.

Teoretická část

V této části diplomové práce bylo nutné se seznámit s dokumentací a fungováním simulačních programů ANSYS a Flow123D. Dále bylo nezbytné prostudovat si základní vztahy, řešící proudění v porézním prostředí. Jelikož se bude předpokládat zjednodušení materiálu podzemního prostředí, bylo důležité se seznámit i se základní mechanikou kontinua.

1 Mechanika spojitého prostředí (kontinua)

Ve spojitém prostředí dle [6] se setkáváme se dvěma druhy působících sil:

- objemovými - působící na dálku (např. gravitační, setrvačné)
- plošnými - kontaktními

Při silovém působení dochází k posuvu bodu tělesa z polohy \mathbf{x} do polohy \mathbf{y} o \mathbf{u} :

$$\mathbf{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} + \mathbf{u}(\mathbf{x}) \quad (1.1)$$

1.1 Rovnováha sil a momentů

Pro rovnováhu sil spojitého tělesa ve statické rovnováze platí podle [6] následující vztah:

$$\int_V \mathbf{F} dV + \int_S \mathbf{T}(\mathbf{v}) dS = \mathbf{0} \quad , \quad (1.2)$$

kde \mathbf{F} je objemová síla, \mathbf{T} plošná síla, V obecný objem s povrchem S a \mathbf{v} je vnější normála uvažované plochy.

Za plošnou sílu \mathbf{T} dosadíme výraz obsahující tenzor napětí $T_i(\mathbf{v}) = \sigma_{ji}v_j$, kde $\sigma_{ji} = \sigma_{ij}$.

Aplikací Gaussovy věty se plošný integrál převede na objemový:

$$\int_S T_i(\mathbf{v}) dS = \int_S \sigma_{ji}v_j dS = \int_V \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} dV \quad i = 1,2,3 \quad (1.3)$$

Rovnice (1.2) dostane následující tvar

$$\int_V \left(F_i + \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} \right) dV = 0 \quad (1.4)$$

To musí platit dle [6] pro libovolný objem. V každém bodě tělesa musí být integrand nulový, proto je možné napsat

$$F_i(\mathbf{x}) + \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j}(\mathbf{x}) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, i = 1,2,3 \quad (1.5)$$

Pro rovnováhu momentů sil platí:

$$\int_V (\mathbf{r} \times \mathbf{F}) dV + \int_S (\mathbf{r} \times \mathbf{T}(\mathbf{v})) dS = \mathbf{0} \quad , \quad (1.6)$$

1.2 Zobecněný Hookeův zákon

Jestliže podle [6] uvažujeme lineární závislost mezi napětím a deformací, lze použít Hookeův zákon:

$$\sigma_{11} = E e_{11} , \quad (1.7)$$

kde je σ_{11} normálové napětí, E je konstanta úměrnosti (Youngův modul pružnosti) a e_{11} je relativní prodloužení, uvažované ve stejné ose jako působící normálové napětí.

Vztah (1.7) je možné zobecnit pro případ 3D elastického prostředí s použitím tenzoru napětí σ_{ij} a tenzoru deformace e_{ij} , pro který platí $e_{ij} = e_{ji}$. Pro tenzor malé deformace platí vztah

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad i, j = 1, 2, 3 . \quad (1.8)$$

Zobecněný Hookeův zákon pak má tvar

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} e_{kl} , \quad (1.9)$$

kde C_{ijkl} jsou elastické koeficienty.

Podle [6] by měl tenzor 4. řádu obsahující elastické koeficienty obecně 81 složek. Díky symetrii tenzorů napětí a deformace, lze počet elastických koeficientů snížit na 21.

Existují však anizotropní materiály, které skutečně vyžadují popis pomocí 21 hodnot.

Pro homogenní materiály jsou hodnoty C_{ijkl} funkcemi polohy $C_{ijkl}(\mathbf{x})$.

U izotropních materiálů dle [6], které mají ve všech směrech stejné vlastnosti, lze vztah mezi napětím a deformacemi vyjádřit pomocí 2 nezávislých konstant. Standardně se používají tzv. Laméovy koeficienty λ a μ . Tedy platí

$$\tau_{ij} = \lambda \delta_{ij} e_{ii} + 2\mu e_{ij} , \quad (1.10)$$

kde δ_{ij} je Kroneckerovo delta.

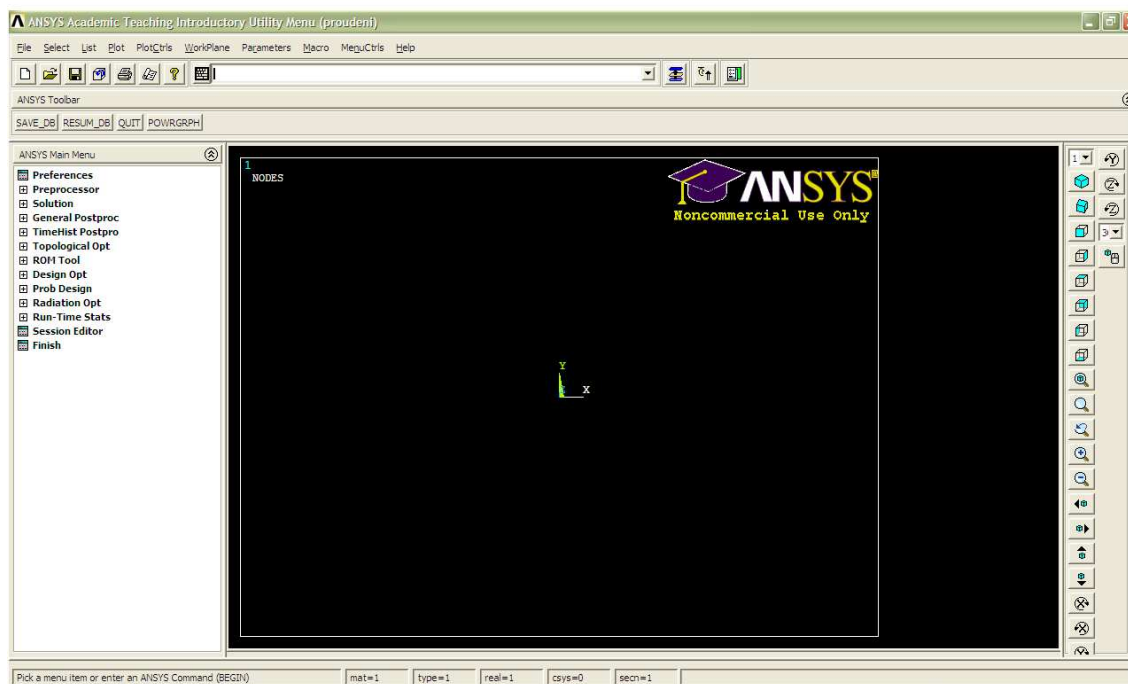
1.3 Okrajové podmínky

Uvažované těleso podle [6] chápeme jako oblast $\Omega \subset \mathbf{R}^3$. Hranice tyto oblasti se označí symbolem Γ . Pak na její části se zavádějí následující okrajové podmínky:

- 1.druhu (Dirichletova), předepsaná hodnota potenciálu – posunutí na Γ_1
- 2.druhu (Neumannova), předepsaná hodnota toku – napětí nebo síly na Γ_2
- 3.druhu (Cauchyova, Newtonova), kombinace potenciálu a toku

2 ANSYS

Společnost ANSYS s téměř čtyřicetiletou tradicí se zabývá vývojem softwarových produktů pro řešení celé řady inženýrských problémů pomocí metody konečných prvků. V diplomové práci byl použit jejich stejnojmenný program ANSYS (Obrázek 1).



Obrázek 1: Prostředí ANSYS

Tento simulační program nachází uplatnění při řešení rozsáhlých lineárních i nelineárních úloh mnoha kategorií, např. elektromagnetické, elektrostatické, strukturální, tepelné a další. Je ovšem vhodný i pro řešení sdružených úloh. V diplomové práci byl využit pro výpočet strukturálního modelu. Program je ovladatelný pomocí příkazového řádku i grafickým prostředím. Složitější úlohy se neobejdou bez využití skriptovacího jazyka APDL (ANSYS Parametric Design Language). Používání ANSYS by se dalo rozdělit na práci v několika základních funkčních blocích.

2.1 Preprocessor

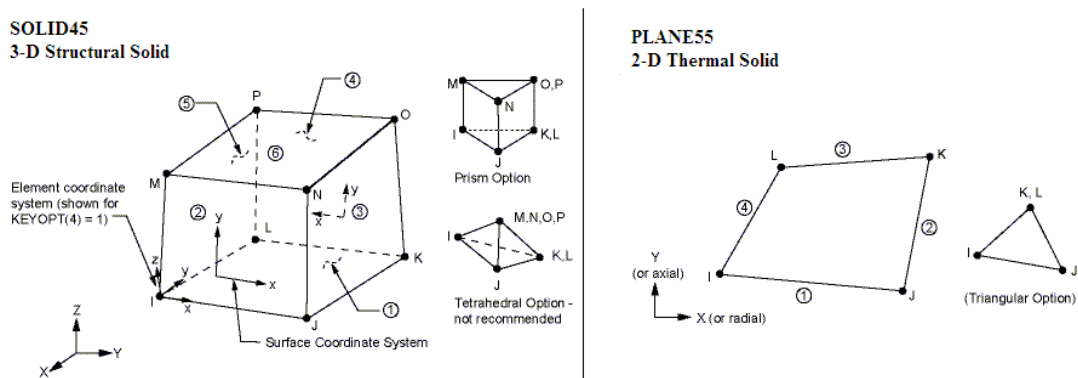
Preprocessor je určený na přípravu modelu, založeného na metodě konečných prvků, vytvořením geometrie modelované oblasti, vyplněním elementy konečných prvků, přiřazením materiálových vlastností a zavedením okrajových podmínek.

2.1.1 Modeling

V této části má uživatel možnost vytvořit geometrii modelu, pomocí základních geometrických prvků. Pro vytváření složitějších geometrií však tento program není příliš vhodný, neboť neobsahuje konstrukční nástroje známé z programů např. CATIA, ProEngineer a dalších. Pracuje však s celou řadou známých datových formátů, proto je možné tyto geometrie do systému importovat.

2.1.2 Meshing

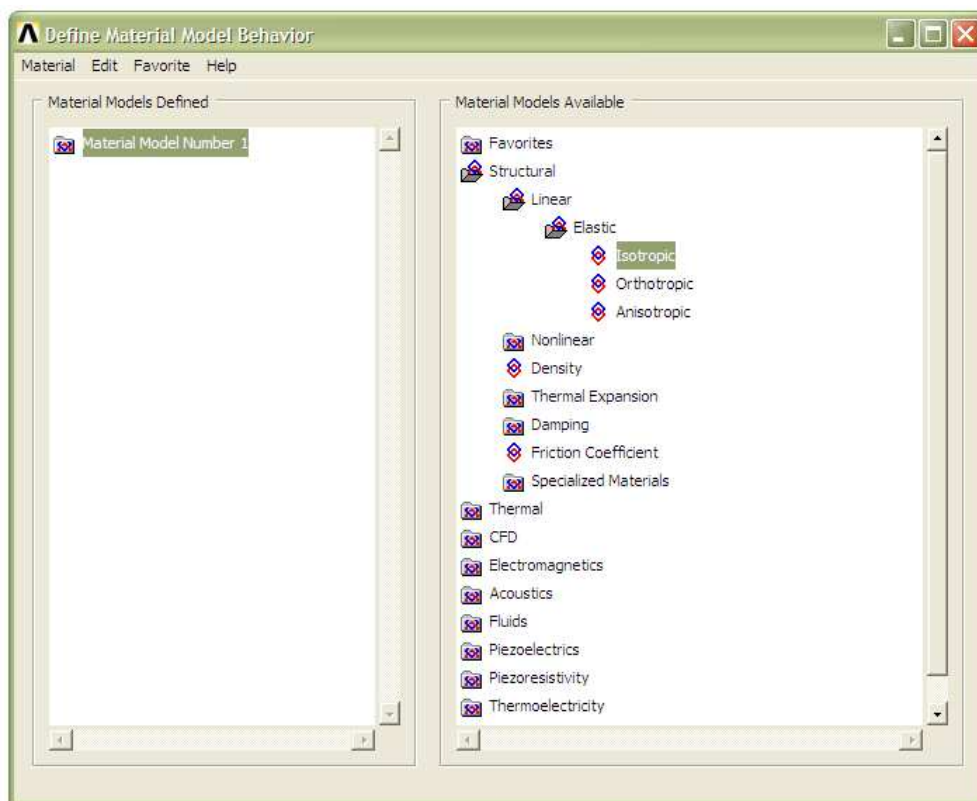
Velkou předností ANSYS je generování sítě konečných prvků. Obsahuje nástroj Meshtool pro automatické generování sítě. Uživatel může generovat síť volně či mapovaně za účelem dosažení pravidelnější sítě, která má obecně lepší aproximační schopnosti. Pro různé kategorie řešených úloh, ANSYS nabízí určité druhy elementů s konkrétními vlastnostmi. Ty je možné získat jak v požadovaných dimenzích, tak v tvarových modifikacích (Obrázek 2). Jestliže vznikne element nevhodného tvaru během generování sítě, ANSYS podá chybové hlášení.



Obrázek 2: Příklad elementů v ANSYS [1]

2.1.3 Material properties

Každé síti konečných prvků je přiřazený materiál. Při volbě materiálu je nejprve nutné vybrat kategorii modelované úlohy. V nabídce programu ANSYS má uživatel mnoho možností jak definovat vlastnosti materiálu (Obrázek 3).



Obrázek 3: Nastavení materiálu

2.1.4 Define loads

Je známo, že úlohy popsané diferenciálními rovnicemi se podle [4] skládají jednak z příslušné rovnice a z dodatečných podmínek, jako jsou okrajové nebo počáteční. Z přirozenosti věci plyne, že při zkoumání jevů v systému se neobejdeme bez specifikace interakce systému s okolím. Diferenciální rovnice tedy popisuje fyzikální podstatu a okrajová podmínka interakci s okolím.

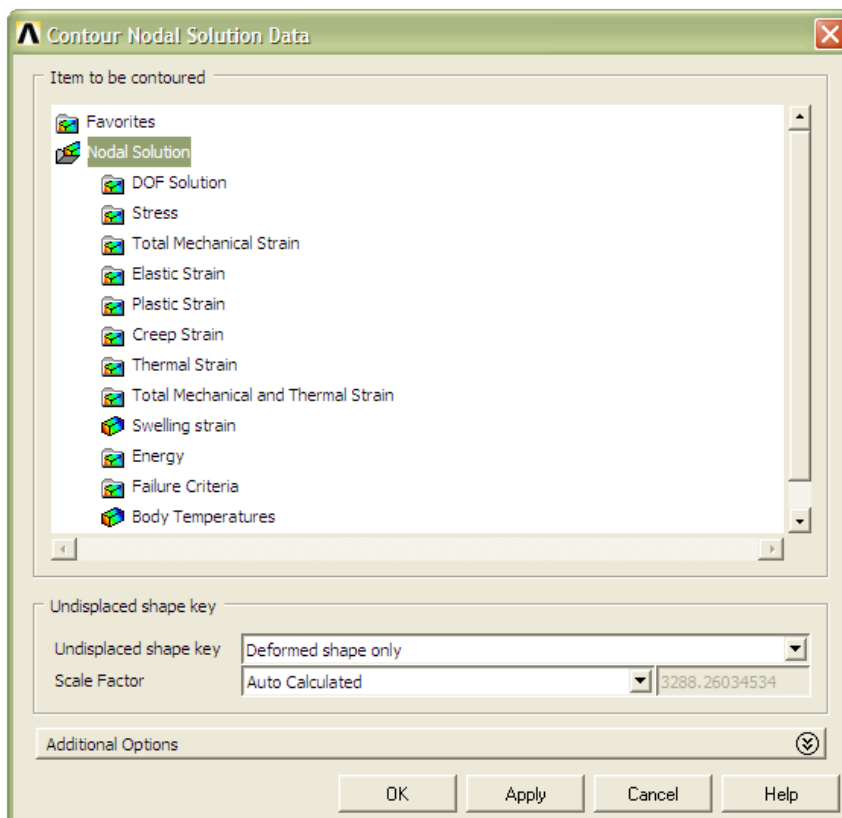
Jestliže je dokončena geometrie modelu, případně vygenerovaná síť konečných prvků, je nutné zadat okrajové podmínky. V modelování rozlišujeme Dirichletovu, Neumannovu a Newtonovu okrajovou podmínku. Podle zvolené kategorie úlohy, zavedeme odpovídající veličiny na hranicích modelu.

2.2 Solution

Pokud byly provedeny zmíněné kroky při tvorbě modelu, je možné nechat model spočítat. ANSYS nabízí celou řadu možných výpočetních metod pro řešení konkrétních fyzikálních úloh. Jestliže se však řeší ustálená strukturální úloha, není potřeba zadávat konkrétní řešič, neboť ANSYS si zvolí automaticky vhodnou iterační metodu.

2.3 Postprocessor

Po úspěšném výpočtu se může přistoupit k zobrazení výsledků. Výsledky je možné nechat vypsat do textového souboru, či je zobrazit na původní (nebo zdeformované) geometrii modelu pomocí barevné škály. Veličinu, určenou k zobrazení po výpočtu strukturální analýzy, je možné zvolit z navrhovaných položek (Obrázek 4).



Obrázek 4: Výběr zobrazené veličiny

3 Proudění v porézním prostředí

V systému hornina a kapalina působí vzájemné interakce, které především ovlivňují proudící kapalinu. Ty je možné popsat určitými veličinami a rovnicemi popisující proudění vody v souvislosti s konkrétními materiálovými vlastnostmi horniny.

3.1 Vlastnosti horninového prostředí

Hornina podle [5] je prostředím s často nehomogenní a anizotropní strukturou. Hornina se skládá z:

- pevné fáze, označované jako horninová matrice, obsahující minerální zrna
- volného prostoru, který představují póry, pukliny a dutiny. Tyto prostory mohou být vyplněné vodou.

V neztvřalých horninách jsou dle [5] minerální zrna většinou těsně uspořádána. Volný prostor tvoří hlavně pukliny, vznikající např. při tektonických procesech. V sedimentárních horninách je volný prostor tvořen hlavně póry, které vytvářejí systém vzájemně propojených i slepých kanálků. Rozlišujeme dva druhy proudění v horninovém prostředí:

- průlinové v porézních horninách
- puklinové v rozpukaných horninách

Pro matematický popis proudění podle [5] uvažujeme horninový masiv jako spojitě prostředí. Interakce mezi vodou a horninou lze charakterizovat veličinami, které zjistíme průměrováním v dostatečně velkém objemu.

Proto se podle [5] zavádí elementární objem (REV), jenž je dostatečně velký na to, aby se v něm již neprojevoval vliv lokální mikrostruktury, a přitom dostatečně malý, aby se do něj nepromítaly nehomogenity.

Jestliže rozměry vyskytujících se puklin nepřevyšují rozměry uvažované oblasti, lze podle [5] rozpukané horniny aproximovat kontinuálním prostředím. Pokud však existují významné pukliny, musíme je uvažovat jako nehomogenity tohoto prostředí.

Mezi nejdůležitější vlastnosti hornin patří pórovitost a hydraulická vodivost.

3.1.1 Pórovitost

Pórovitost vyjadřuje následující podíl:

$$n = \frac{\text{objem volných pórů v REV}}{\text{objem REV}} \quad (3.1)$$

V prostoru puklin podle [5] obvykle rozlišujeme dvojí pórovitost:

- aktivní
- neaktivní

neboť velké množství puklin je často slepých (neaktivních). Ty sice nemají vliv na proudění vody, ale při transportu do nich často difundují rozpuštěné látky.

Hodnoty pórovitostí pro vybrané zeminy a horniny jsou uvedeny v tabulce 1.

Materiál	Pórovitost (%)
šterk hrubý	24 - 36
šterk jemný	25 - 38
písek hrubý	31 - 46
písek jemný	26 - 53
prach	34 - 61
jíl	34 - 60
pískovec	5 - 30
prachovec	21 - 41
vápenec, dolomit	0 - 20
krasový vápenec	5 - 50
rozpukané krystalinikum	0 - 10
nerozpukané krystalinikum	0 - 5
zvětralá žula	34 - 57
zvětralé gabra	42 - 45

Tabulka 1: Orientační hodnoty pórovitostí [5]

3.1.2 Hydraulická vodivost

Dle [5] hydraulická vodivost K má rozměr rychlosti [m/s]. Její hodnota závisí na vlastnostech horniny i na charakteru proudící kapaliny.

Hodnoty hydraulických vodivostí pro vybrané zeminy a horniny jsou uvedeny v tabulce 2.

Druh horniny/zeminy	Hydraulická vodivost K [m/s]
šterk	$10^{-3} - 10^{-2}$
hrubozrnný písek	$10^{-4} - 10^{-3}$
jemný písek	$10^{-5} - 10^{-4}$
jílovité zeminy	$10^{-9} - 10^{-6}$
jíl	$< 10^{-9}$
pískovec	$10^{-6} - 10^{-4}$
prachovitý pískovec	$10^{-8} - 10^{-6}$
prachovec	$10^{-11} - 10^{-8}$
rozpukané krystalické horniny	$10^{-10} - 10^{-7}$
kompaktní krystalické horniny	$< 10^{-13}$

Tabulka 2: Orientační hodnoty hydraulické vodivosti [5]

3.2 Rovnice proudění v porézním prostředí

Proudění kapaliny v saturované oblasti je podle [5] popsáno dvěma diferenciálními rovnicemi:

- pohybovou rovnicí (Darcyho zákon zobecněný pro 3D)
- rovnicí bilance hmoty (rovnice kontinuity).

3.2.1 Darcyho zákon

Tento zákon byl podle [5] formulován na základě výsledků dosažených v provedeném experimentu. Jednalo se o šikmé umístění trubky s porézním materiálem mezi dvěma nádobami. Tímto porézním filtrem začala protékat voda, neboť hladiny v nádobách měly rozdílnou výšku. Průtok vody trubkou Q pak lze zapsat vztahem

$$Q = K \frac{S \cdot (\Phi_2 - \Phi_1)}{L}, \quad (3.2)$$

kde K je koeficient hydraulické vodivosti, S průřez trubky, L délka trubky a Φ je piezometrická výška, která má význam potenciálu. Pro její výpočet platí

$$\Phi = z + \frac{p}{\rho g}, \quad (3.3)$$

kde z je svislá souřadnice, p tlak, ρ hustota a g tíhové zrychlení. Ve vztahu dle [5] vystupuje potenciál tíhového pole a potenciál hydrostatického tlaku pro daný konec trubky. Podíl $\frac{p}{\rho g}$ se nazývá tlaková výška. Ta se značí h a prakticky představuje tlak vyjádřený v délkových jednotkách.

Dále se podle [5] zavede podíl $q = \frac{Q}{S}$, představující plošnou hustotu toku vody, tj. podíl množství protečené vody a plochy kolmé na směr proudění. Ten má rozměr rychlosti a nazývá se Darcyovská rychlost. Jestliže uvažujeme limitu v podélném směru

$$\nabla \Phi = \frac{\Phi_2 - \Phi_1}{L}, \quad (3.4)$$

pak je možné získat Darcyho zákon ve tvaru

$$q = K \nabla \Phi. \quad (3.5)$$

Darcyovská rychlost podle [5] však nepředstavuje rychlost částice vody, případně rozpuštěné látky během transportu pomocí konvekce. Uvažujeme-li celkový objem trubky $V = SL$ obsahující vodu o objemu $V_w = n \cdot SL$, pak při dané rychlosti q proteče tento objem vody kolmým průřezem za dobu

$$t = \frac{V_w}{Sq} = \frac{nL}{q} \quad (3.6)$$

a to znamená, že se po délce L posunul rychlostí

$$v = \frac{q}{n}. \quad (3.7)$$

Ta se nazývá průměrná rychlost vody v pórech [5].

3.2.2 Darcyho zákon ve 3D

Darcyho zákon dle [5] lze zobecnit ve 3D do tvaru

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K}\nabla\Phi, \quad (3.8)$$

kde $\nabla\Phi = \left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}, \frac{\partial\Phi}{\partial y}, \frac{\partial\Phi}{\partial z}\right)$.

Porézní prostředí dle [5] však často má anizotropní strukturu. Proto koeficient hydraulické vodivosti se vyjadřuje jako tenzor druhého řádu:

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{yx} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{zx} & K_{zy} & K_{zz} \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Jestliže však předpokládáme, že prostředí je také nehomogenní, pak tyto koeficienty jsou ještě navíc funkcí polohy.

3.2.3 Rovnice bilance hmoty

V libovolném objemu podle [5] platí, že změna hmotnosti vody je úměrná hmotnosti vody prošlé přes hranici a změně v rámci propadů a zdrojů:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho n dV = - \int_{\partial V} \rho \mathbf{q} \cdot d\mathbf{S} + \int_V P \rho dV, \quad (3.10)$$

kde P je hustota zdrojů (+), či propadů (-), představující objem kapaliny vtlačený do jednotkového objemu porézního materiálu za jednotkový čas. Někdy se nazývá specifickou vydatností zdroje [5].

Jestliže dle [5] výraz (3.10) upravíme pomocí Gaussovy věty (tj. převedením plošného integrálu na objemový) a následně přepsáním složek na jednu stranu, dostáváme nulovost integrandu. Po další úpravě je možné výraz přepsat na tvar

$$\frac{\partial(\rho n)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{q}) = P \rho. \quad (3.11)$$

Jestliže uvažujeme konstantní hustotu a pórovitost, rovnice se pak zjednoduší na

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = \frac{P}{n}. \quad (3.12)$$

Rovnice (3.8) a (3.12) se dle [5] mohou ponechat ve tvaru systému dvou rovnic 1. řádu nebo jejich sloučením získat rovnici druhého řádu

$$\nabla \cdot (-\mathbf{K}\nabla\Phi) = P. \quad (3.13)$$

3.2.4 Okrajové podmínky

Uvažujeme oblasti $\Omega \subset \mathbf{R}^3$ a její hranici $\partial\Omega \equiv \Gamma$. Pro úlohy ustáleného (stacionárního) proudění je nutné zadat okrajové podmínky. V proudění uplatňujeme následující okrajové podmínky dle [5]:

- 1. druhu, Dirichletova OKP

Určuje piezometrickou výšku na části hranice $\Gamma_1 \subset \Gamma$

$$\Phi(x) = \Phi_D(x) \quad \forall x \in \Gamma_1 \quad (3.14)$$

- 2. druhu, Neumannova OKP

Určuje specifický průtok na části hranice $\Gamma_2 \subset \Gamma$

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{v} = q_N(x), \quad (3.15)$$

kde \mathbf{v} je normálový vektor a q_N hodnota specifického průtoku. Jestliže uvažujeme nepropustnou hranici, jedná se o homogenní Neumannovu podmínku

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (3.16)$$

- 3. druhu, Newtonova OKP

Používá se, když hranice $\Gamma_3 \subset \Gamma$ představuje polopropustnou vrstvu.

Podmínku zapíšeme ve tvaru

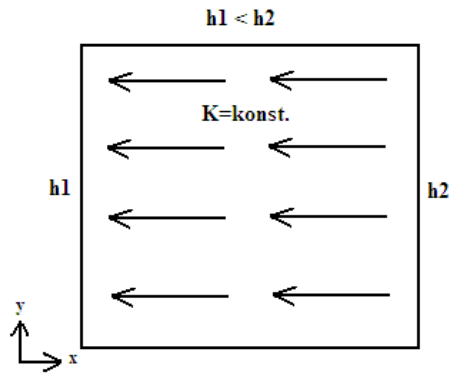
$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{v} = (\Phi - \Phi_0)/C, \quad (3.17)$$

kde Φ je piezometrická výška uvnitř oblasti, Φ_0 piezometrická výška vně oblasti a C odpor překážky vůči proudění. Dále platí, že

$C = B/K$, kde B je šířka překážky a K její hydraulická vodivost.

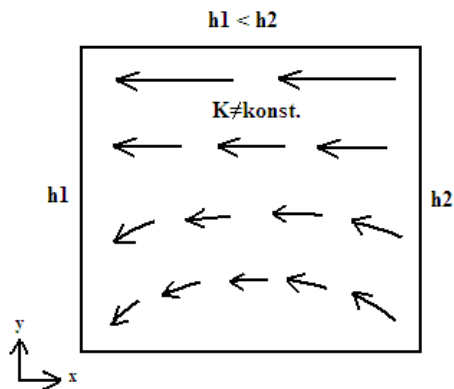
3.3 Vliv zatížení na proudění

Jestliže se předpokládá, že na horninu představující porézní prostředí nepůsobí síla, které by jí stlačovala, pak koeficient hydraulické vodivosti bude mít konstantní hodnotu a rychlost proudící kapaliny bude všude stejná. Obrázek 5 představuje směr rychlosti proudící kapaliny, která teče z míst vyššího tlaku do míst s nižším tlakem. Symbol h označuje tlakovou výšku.



Obrázek 5: Proudění vody, $K = \text{konst.}$

Pokud však vezmeme v úvahu vnitřní objemovou sílu, tzn. vlastní tíhu horniny, začne ve svislém směru koeficient vodivosti klesat. Pak hornina je v horní části propustnější nežli ve spodní. Toto zatížení způsobí nejen zmenšení Darcyovské rychlosti, ale dojde i k mírné změně jejího směru. Tento jev představuje skutečnost, že voda směřuje do vodivější části oblasti (Obrázek 6).



Obrázek 6: Proudění vody, $K \neq \text{konst.}$

3.4 Změna hydraulické vodivosti

Velikost hydraulické vodivosti je závislá na vnitřním napětově-deformačním stavu horniny. Proto se tedy nabízí koeficient vodivosti určovat z hodnot mechanického napětí či deformace. Z [7] byl vybrán vztah na výpočet hydraulické vodivosti ze znalosti střední hodnoty napětí:

$$K = K_0 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta\sigma}{E} \right)^{\frac{2}{3}} \right]^4, \quad (3.18)$$

kde $\Delta\sigma$ je změna středního napětí. Tento vztah je založen na určitých hypotézách o vzájemném působení kulových zrn. Pro střední hodnotu napětí platí vztah

$$\sigma = (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}) / 3, \quad (3.19)$$

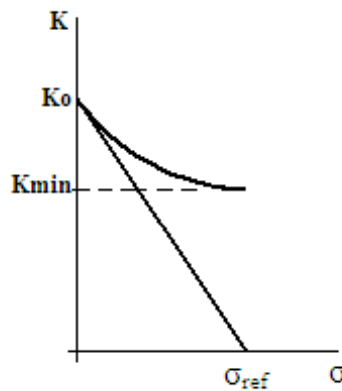
kde vystupují diagonálních složky tenzoru napětí.

Pro účely diplomové práce byla také zvolena lineární závislost

$$K = K_0 \left(1 - \frac{\sigma}{\sigma_{ref}} \right), \quad (3.20)$$

kde význam symbolů je patrný z obrázku 7.

Lineární závislost není fyzikálně přesná, neboť nikdy nemůže dojít k nulové či záporné vodivosti. Je však tento vztah zde uveden, jelikož pomocí vztahu (3.18) není možné dosáhnout změny hydraulické vodivosti v celém rozsahu, tj. od počáteční hodnoty K_0 do nulové hodnoty. Důvod zvolené lineární závislosti je uveden v kapitole 9.2. Průběh obou vztahů znázorňuje následující obrázek:



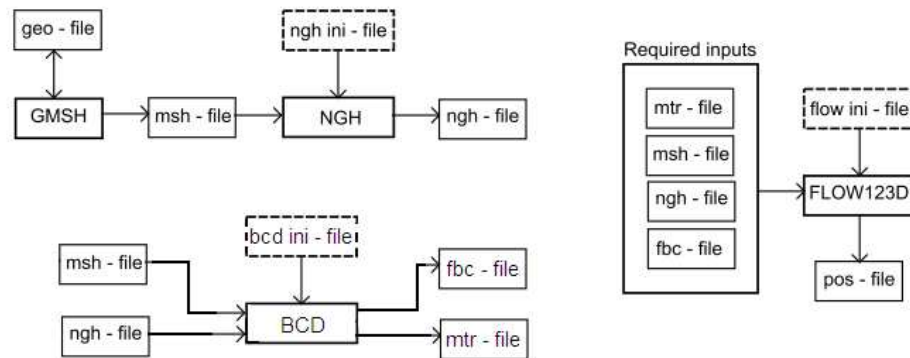
Obrázek 7: Závislost hydraulické vodivosti na napětí

4 Flow123D

Flow123D je simulační program napsaný v prostředí Borland C++ Builder 6.0. Je schopný řešit problém podzemního proudění v heterogenní hornině, počítat transport a interakce s horninou. Je založený na mix-hybridní metodě konečných prvků [8]. Vývoj tohoto programu stále probíhá na Technické univerzitě v Liberci a postupně je doplňován o další funkce. Před použitím v diplomové práci bylo nutné se seznámit s jeho dokumentací. Byla potřeba se hlavně zaměřit na soubory s příponou mtr a msh.

4.1 Práce s Flow123D

V diplomové práci byl Flow123D využit pro výpočet proudění. Proto se pozornost zaměřila pouze na tu část programu, jenž se využívá pro proudění a nikoli pro transport. Jakým způsobem se pracuje s programem, vysvětluje následující schéma.



Obrázek 8: Blokové schéma Flow123D [7]

Schéma je rozdělené na tři hlavní části. Na vlastní program Flow123D a dva pomocné nástroje. Na začátku práce s programem Flow123D je potřeba mít k dispozici soubor msh. Tento soubor obsahuje uloženou síť konečných prvků, která byla vygenerovaná v programu GMSH. Pak přichází na řadu pomocný program NGH na výpočet sousledností elementů sítě konečných prvků. Jeho výstupem je soubor ngh. Druhý pomocný nástroj BCD umožňuje vygenerování souborů fbc a mtr. První jmenovaný obsahuje informace o rozložení okrajových podmínek a druhý o zvolených materiálových vlastnostech podzemního prostředí. Do programu Flow123D pak vstupují soubory msh, mtr, ngh a fbc. Při výpočtu zahrnující i transport, může být těchto vstupních souborů více. Výstupem může být binární či znakový soubor pos. Ten obsahuje výsledky vyřešeného modelu. Vizualizace výsledků se provádí pomocí programu GMSH. Soubory s příponou ini slouží k nastavování zmíněný programů.

4.2 Soubor MSH

Jedná se o textový soubor, obsahující informaci o struktuře sítě konečných prvků. Jeho formát je určený programem GMSH, který se používá i pro vizualizaci výsledků z Flow123D. Musí mít následující strukturu [2]:

```
$MeshFormat
```

```
version-number file-type data-size
```

```
$EndMeshFormat
```

\$Nodes

number-of-nodes

node-number x-coord y-coord z-coord

...

\$EndNodes

\$Elements

number-of-elements

elm-number elm-type number-of-tags < tag > ... node-number-list

...

\$EndElements

Kde

version-number je aktuální verze je 2.0

file-type je 0 pro ASCII formát

data-size je velikost dat, double má velikost 8B

number-of-nodes je počet uzlů

node-number je číslo uzlu

x-coord y-coord z-coord jsou souřadnice uzlu

number-of-elements je počet elementů

elm-number je číslo elementu

elm-type je typ elementu např.: 1 2-node line

2 3-node triangle

3 4-node quadrangle

4 4-node tetrahedron

5 8-node hexahedron

15 1-node point

number-of-tags počet parametrů je 3 <čísla přiřazující element k fyzikální a geometrické entitě či části sítě, ke které náleží>

node-number-list seznam uzlů, které patří elementu

4.3 Soubor MTR

Jedná se o textový soubor, který obsahuje informace o materiálech porézního prostředí. Předmětem zájmu se staly jen ty položky, které se týkají proudění. Jestliže se nepočítá transport, ostatní položky není potřeba uvádět. Jeho struktura je následující [8]:

\$MaterialFormat

1.0 *file-type data-size*

\$EndMaterialFormat

\$Materials

Number-of-materials

material-number material-type < material-type-specific-data >

...

\$EndMaterials

Kde

file-type je 0 pro ASCII formát

data-size je velikost dat, double má velikost 8B

Number-of-materials je počet materiálů

material-number je číslo materiálu

material-type a *< material-type-specific-data >* viz. tabulka 3

<i>material-type</i>	<i>material-type-specific-data</i>	Description
11	k	$\mathbf{K} = (k)$
21	k	$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} k & 0 \\ 0 & k \end{pmatrix}$
22	$k_x \quad k_y$	$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} k_x & 0 \\ 0 & k_y \end{pmatrix}$
23	$k_x \quad k_y \quad k_{xy}$	$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} k_x & k_{xy} \\ k_{xy} & k_y \end{pmatrix}$
31	k	$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} k & 0 & 0 \\ 0 & k & 0 \\ 0 & 0 & k \end{pmatrix}$
33	$k_x \quad k_y \quad k_z$	$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} k_x & 0 & 0 \\ 0 & k_y & 0 \\ 0 & 0 & k_z \end{pmatrix}$
36	$k_x \quad k_y \quad k_z \quad k_{xy} \quad k_{xz} \quad k_{yz}$	$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} k_x & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{xy} & k_y & k_{yz} \\ k_{xz} & k_{yz} & k_z \end{pmatrix}$

Tabulka 3: Příklady typů hydraulických vodivostí ve Flow123D [8]

Praktická část

Tato kapitola se bude zabývat návrhem a realizací aplikace, která bude sloužit pro přenos a konverzi dat z ANSYS do Flow123D. Dále bude navržena testovací úloha. Ta bude vyřešena jak analyticky tak i pomocí uvedených softwarů.

5 Realizace aplikace Anflow

Navržená aplikace dostala název Anflow, neboť umožňuje propojení výpočetních prostředků ANSYS a Flow123D.

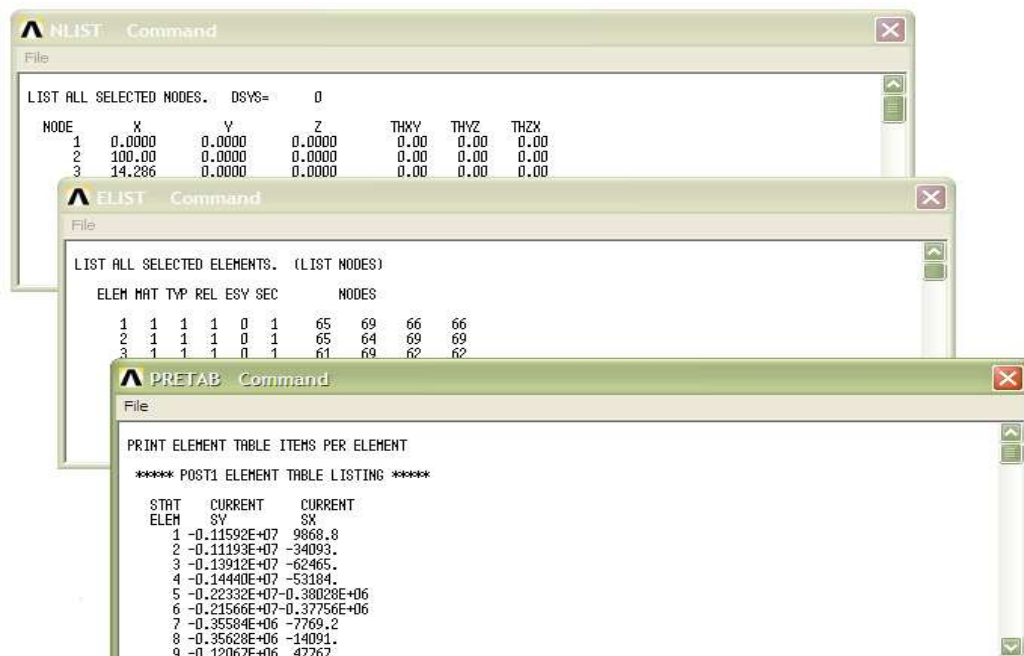
5.1 Úkoly navržené aplikace

Od navržené aplikace Anflow se očekávají tři základní funkce:

- 1) Konverze formátu uložení konečně-prvkové sítě mezi ANSYS a Flow123D a vygenerování souboru s příponou msh.
- 2) Výpočet hydraulické vodivosti a přiřazení její hodnoty ke konkrétnímu elementu sítě a vygenerování souboru s příponou mtr.
- 3) Obsluha pomocí grafického rozhraní.

5.2 Požadované vstupy a výstupy aplikace Anflow

Aby bylo možné provést konverzi formátu uložení konečně-prvkové sítě a následný výpočet hydraulické vodivosti, musí si aplikace Anflow načíst potřebná data z programu ANSYS. Tyto údaje jsou obsaženy v načteném NLISTU, ELISTU a PRETABLISTU (Obrázek 9). O jejich přípravě bude zmíněno v kapitole 7.3.



Obrázek 9: Vygenerované listy v ANSYS

Podle zvoleného výpočtu hydraulické vodivosti do aplikace vstupují další údaje. V případě výpočtu podle (3.18) je to Youngův modul pružnosti E a počáteční hydraulická vodivost K_0 . Jejimi výstupy jsou z teorie zmíněné textové soubory s příponou msh a mtr, určené pro program Flow123D. Ukázka vytvořených výstupních souborů je neúplná, neboť obsahuje veliký počet textových údajů, který je závislý na jemnosti sítě konečných prvků.

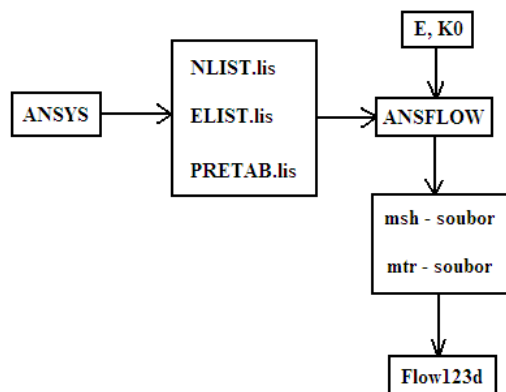
Ukázka vytvořeného souboru MSH:

```
$MeshFormat
2 0 8
$EndMeshFormat
$Nodes
73
1 0.0000 0.0000 0.0000
2 100.00 0.0000 0.0000
...
72 90.383 90.383 0.0000
73 9.6172 90.383 0.0000
$EndNodes
$Elements
116
1 2 3 1 0 0 65 69 66
2 2 3 2 0 0 65 64 69
...
115 2 3 115 0 0 26 27 30
116 2 3 116 0 0 27 28 29
$EndElements
```

Ukázka vytvořeného souboru MTR:

```
$MaterialFormat
1.0 0 8
$EndMaterialFormat
$Materials
116
1 21 0.31512525366891364
2 21 0.3151247010778644
3 21 0.31508546923968195
... ...
114 21 0.31513295084800796
115 21 0.31509191197388803
116 21 0.3150449020476673
$EndMaterials
```

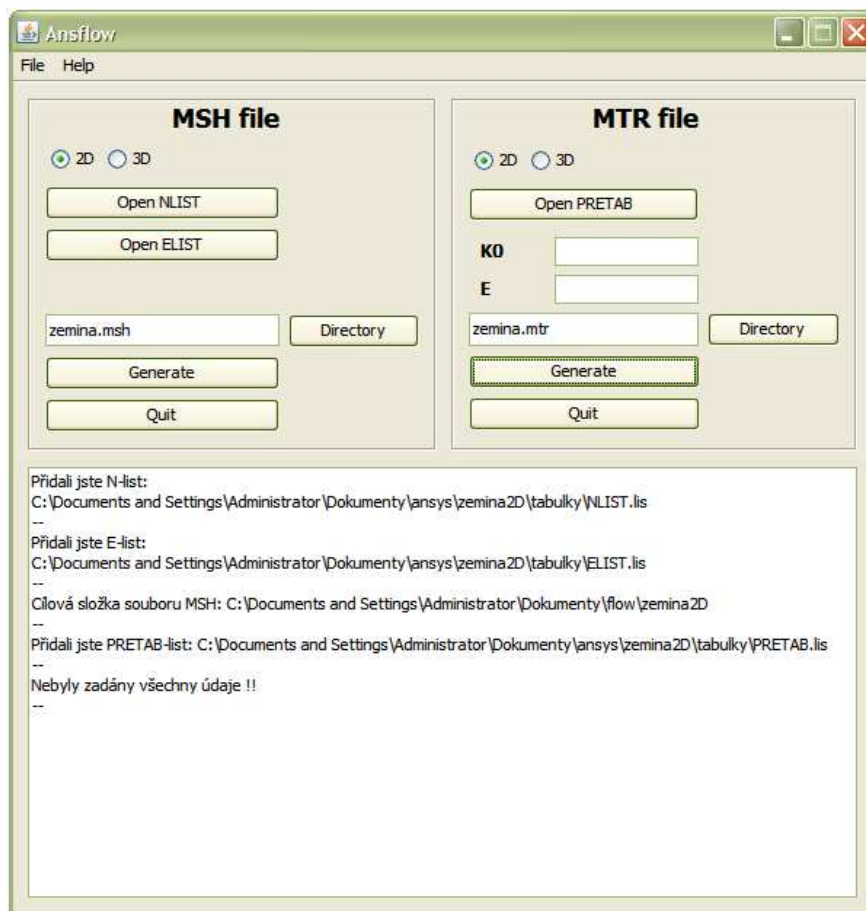
Postup při konverzi dat je znázorněný v blokovém schématu (Obrázek 10).



Obrázek 10: Schéma navrženého propojení

5.3 Uživatelské rozhraní aplikace Anflow

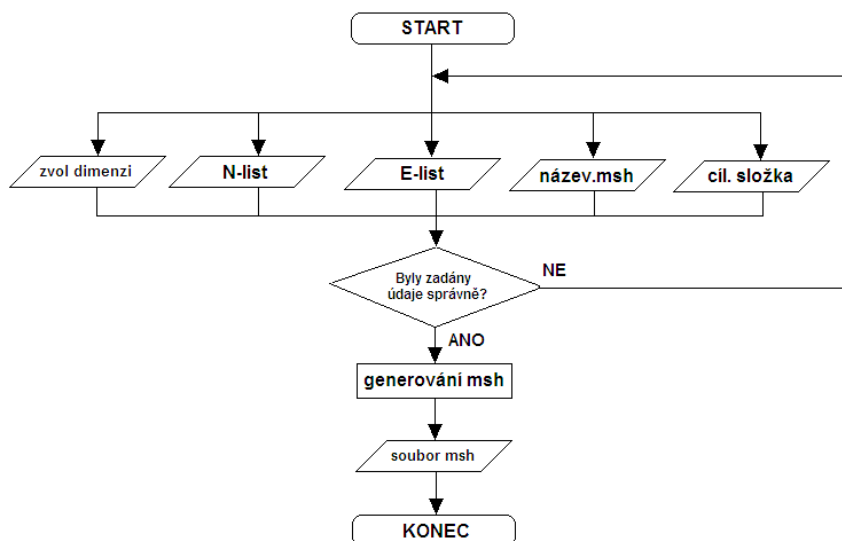
Grafické prostředí navržené aplikace bylo vytvořené s ohledem na požadavek jednoduché a intuitivní obsluhy (Obrázek 11). Proto grafické prostředí obsahuje základní funkční prvky, které jsou součástí dvou bloků. O každé zadané položce, či chybě v programu, aplikace informuje obsluhu v textové ploše. Ve volbě Help uživatel najde návod na správnou obsluhu aplikace.



Obrázek 11: Navržená aplikace Anflow

5.3.1 Blok MSH file

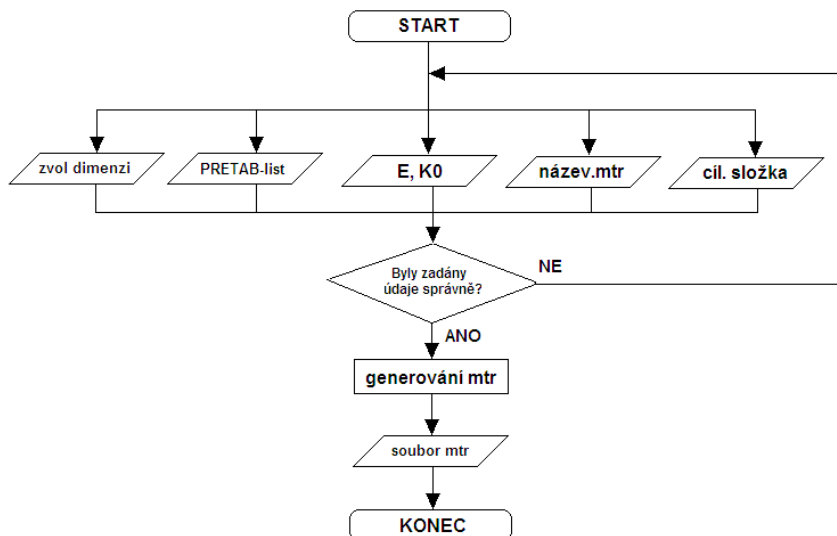
Blok MSH file je určený pro vytvoření výstupního souboru s příponou msh. Pomocí RadioButtons se určí dimenze modelu. Pak standardními Open Dialogy se načte NLIST a ELIST. V textovém poli obsluha musí zadat název výstupního souboru a dalším Open Dialogem určit cílovou složku jeho uložení.



Obrázek 12: Vývojový diagram bloku MSH

5.3.2 Blok MTR file

Blok MTR file je určený pro vytvoření výstupního souboru s příponou mtr. Pomocí RadioButtons se určí dimenze modelu. Pak standardním Open Dialogem se načte PRETABLIST. V textovém poli obsluha musí zadat název výstupního souboru a dalším Open Dialogem určit cílovou složku jeho uložení. Také je nutné zadat vstupní konstanty K_0 a E. Jako desetinný oddělovač se požaduje tečka.



Obrázek 13: Vývojový diagram bloku MTR

5.4 Hlavní třídy programu

Pro realizaci programu byl použit jazyk Java a vývojové prostředí NetBeans IDE. Program obsahuje tři hlavní třídy:

1) `MainWindow.java`

Třída obsahuje zdrojový kód hlavního okna a prvků grafického uživatelského prostředí.

2) `Mesh_AnsysToGmsh.java`

Její metody jsou volány ze třídy `MainWindow`. Třída obsahuje metodu `read_Nodes()` pro přečtení NLISTU, `readElements()` pro přečtení ELISTU a `writeMesh()` pro vygenerování souboru s příponou `msh`.

3) `Material_AnsysToFlow123d.java`

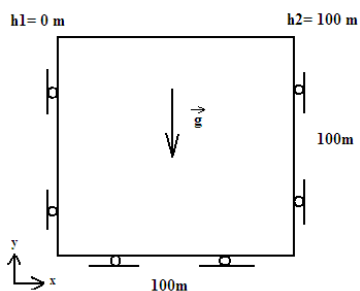
Její metody jsou opět volány ze třídy `MainWindow`. Obsahuje metodu `readPretab()` pro přečtení PRETABlistu a `writeMtr()` pro vygenerování souboru s příponou `mtr`.

6 Návrh testovací úlohy

Pro předvedení a ověření funkčnosti navrženého propojení výpočetních prostředků ANSYS a Flow123D pro řešení sdružených úloh, bylo nutné vytvořit testovací úlohu. Ta byla navrhována jako volně sdružená, umožňující analytický výpočet. Bude se zvláště provádět deformačně-napěťová analýza a výpočet proudění. Materiálové vlastnosti porézního prostředí budou předpokládány jako lineární, izotropní a homogenní. Tímto porézním médiem bude lineárně a laminárně proudit voda. Dále se bude předpokládat, že tlak proudící kapaliny nebude ovlivňovat napjatost horniny.

6.1 Oblast řešení a zavedené okrajové podmínky

Jako oblast řešení bude brána krychle ve 3D resp. čtverec ve 2D o hraně 100m. Tato oblast představuje zeminu, která je zatížena objemovou silou v podobě její vlastní tíhy (Obrázek 14).



Obrázek 14: Testovací úloha

Tlak v proudící kapalině se bude lineárně zvyšovat ve směru osy x. Na levé straně oblasti je zvolená tlaková výška 0 m a na pravé 100 m.

6.2 Analytický výpočet testovací úlohy

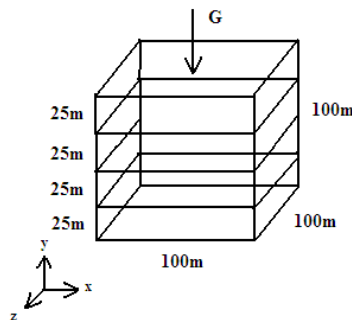
Na zadané testovací úloze byl proveden analytický výpočet, jehož výsledky budou porovnány s řešením programů ANSYS, Anflow a Flow123D. Pro zadanou testovací úlohu byly zvoleny materiálové vlastnosti takto:

Youngův modul pružnosti $E = 80 \text{ GPa}$

hustota $\rho = 2500 \text{ kg/m}^3$

počáteční hydraulická vodivost $K_0 = 10^{-8} \text{ m/s}$

Metodou myšlených řezů se nejprve určily reakce ve čtyřech místech oblasti (Obrázek 15).



Obrázek 15: Myšlené řezy

$$G = m \cdot g = \rho \cdot V \cdot g = \rho \cdot S \cdot h \cdot g = 2500 \cdot 100 \cdot 100 \cdot 25 \cdot 9,81 = 6,1 \text{ GN} \quad (6.1)$$

Kde G je tíha, m hmotnost, V objem, g tíhové zrychlení, ρ hustota, S plocha a h výška každého samostatného úseku. Pak reakce v každém úseku jsou:

$$1) N(h)_1 = G = 6,1 \text{ GN} \quad (6.2)$$

$$2) N(h)_2 = 2 \cdot G = 12,2 \text{ GN}$$

$$3) N(h)_3 = 3 \cdot G = 18,3 \text{ GN}$$

$$4) N(h)_4 = 4 \cdot G = 24,4 \text{ GN}$$

Dále se v každém úseku určily jednotlivé posuvy podle následujícího vzorce:

$$\Delta h_i = \frac{N(h)_i h_i}{ES} \quad (6.3)$$

$$\Delta h_1 = \frac{N(h)_1 h_1}{ES} = \frac{6,1 \cdot 10^9 \cdot 25}{8 \cdot 10^{10} \cdot 10^4} = 191 \mu\text{m}$$

$$\Delta h_2 = 382 \mu\text{m}$$

$$\Delta h_3 = 573 \mu\text{m}$$

$$\Delta h_4 = 764 \mu\text{m}$$

Normálová napětí se vypočítaly pomocí Hookova zákona:

$$\sigma_i = E \cdot \varepsilon_i = E \cdot \frac{\Delta h_i}{h_i}, \quad (6.4)$$

kde σ je napětí a ε je deformace každého jednotlivého úseku.

$$\sigma_1 = E \cdot \varepsilon_1 = E \cdot \frac{\Delta h_1}{h_1} = 8 \cdot 10^{10} \frac{191 \cdot 10^{-6}}{25} = 0,6 \text{ MPa}$$

$$\sigma_2 = 1,2 \text{ MPa}$$

$$\sigma_3 = 1,8 \text{ MPa}$$

$$\sigma_4 = 2,4 \text{ MPa}$$

Výsledná hydraulická vodivost se vypočítala podle (3.18), kde napětí se uvažuje pouze ve směru y. To je možné provést, neboť napětí v ose x a z jsou zanedbatelná, jestliže zemina je zatížena pouze vlastní tíhou.

$$K_1 = K_0 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_1}{E} \right)^{\frac{2}{3}} \right]^4 = 10^{-8} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{0,6 \cdot 10^6}{8 \cdot 10^{10}} \right)^{\frac{2}{3}} \right]^4 = 0,3151 \text{ m/rok} \quad (6.5)$$

$$K_2 = 0,3150 \text{ m/rok}$$

$$K_3 = 0,3149 \text{ m/rok}$$

$$K_4 = 0,3148 \text{ m/rok}$$

Byly tedy vypočítány hydraulické vodivosti ve čtyřech vrstvách oblasti. Podle předpokladu vodivost klesá s hloubkou. Dále se pomocí Darcyho zákona určily rychlosti v jednotlivých úsecích.

$$q_i = K_i \frac{\Phi_2 - \Phi_1}{L}, \quad (6.6)$$

kde q je Darcyovská rychlost, L délka oblasti a Φ piezometrická výška určená vztahem

$$\Phi = y + \frac{p}{\rho g} = y + h, \quad (6.7)$$

kde y je souřadnice na ose y, p hydrostatický tlak, ρ hustota vody a h tlaková výška.

$$q_1 = K_1 \frac{\Phi_2 - \Phi_1}{L} = 0,3151 \frac{75 + 100 - (75 + 0)}{100} = 0,3151 \text{ m/rok}$$

$$q_2 = 0,3150 \text{ m/rok}$$

$$q_3 = 0,3149 \text{ m/rok}$$

$$q_4 = 0,3148 \text{ m/rok}$$

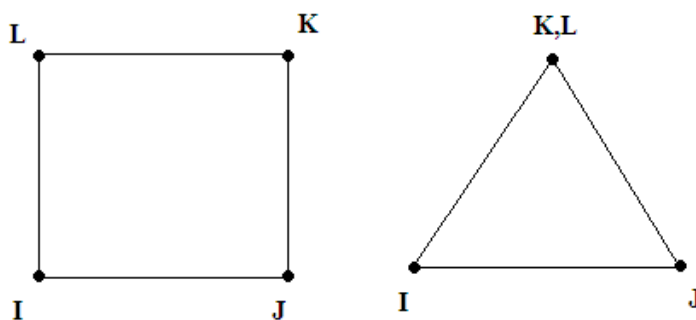
Vhodným navrhnutím testovací úlohy se tedy velikost Darcyovské rychlosti rovná hodnotě hydraulické vodivosti.

7 Řešení testovací úlohy v ANSYS

Jestliže se přistoupí k numerickému výpočtu testovací úlohy, musíme s jejím řešením začít v programu ANSYS. Bude provedena deformačně-napěťová analýza a příprava dat pro aplikaci Anflow.

7.1 Vytvoření modelu

V zadané testovací úloze působí zatížení v podobě objemové síly, představující tíhu horniny. Proto bylo možné úlohu zjednodušit na 2D. Začalo se vytvořením geometrie oblasti, která byla vyplněna konečnými prvky. Zvolený typ elementu musel mít schopnost degenerovat ze čtyřstěnu na trojúhelník, jelikož Flow123D počítá na síti tvořené trojúhelníky. Proto byl zvolen 2D prvek typu plane 42 (Obrázek 16).



Obrázek 16: Element plane 42

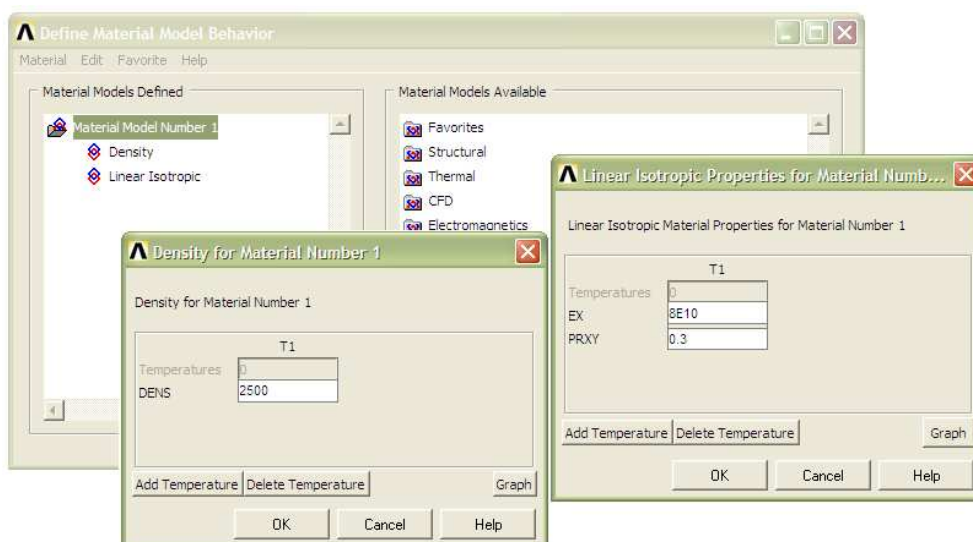
Dále se přistoupilo k určení materiálu. Zde došlo k zjednodušení horninových vlastností, neboť úloha byla řešena jako lineární a isotropní s následujícími materiálovými konstantami:

Poissonův poměr $\nu = 0.3$

Youngův modul pružnosti $E = 80 \text{ GP}$

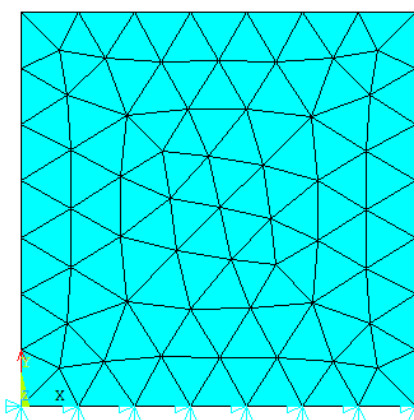
hustota $\rho = 2500 \text{ kg/m}^3$

Na obrázku 17 je vidět toto materiálové nastavení v oknech ANSYS.



Obrázek 17: Nastavení materiálových konstant

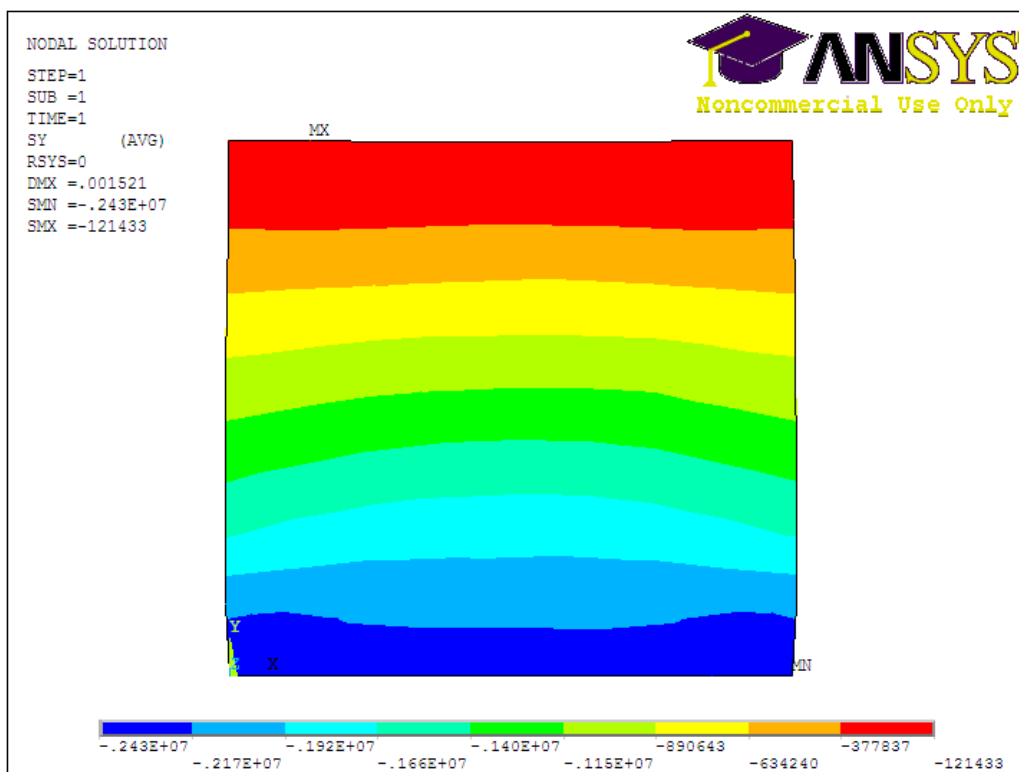
Pak už bylo potřeba jen zadat okrajovou podmínku 1.druhu (Dirichletovu), jako nulové posunutí na spodní hraně oblasti a podmínku 2.druhu (Neumannovu), jako objemovou sílu. Pro objemovou sílu představující gravitaci, se zadalo tíhového zrychlení $g = 9,81 \text{ m/s}^2$. Na obrázku 18 je ukázka vysít'ovaného modelu se zavedenými okrajovými podmínkami.



Obrázek 18: Síť konečných prvků s OKP

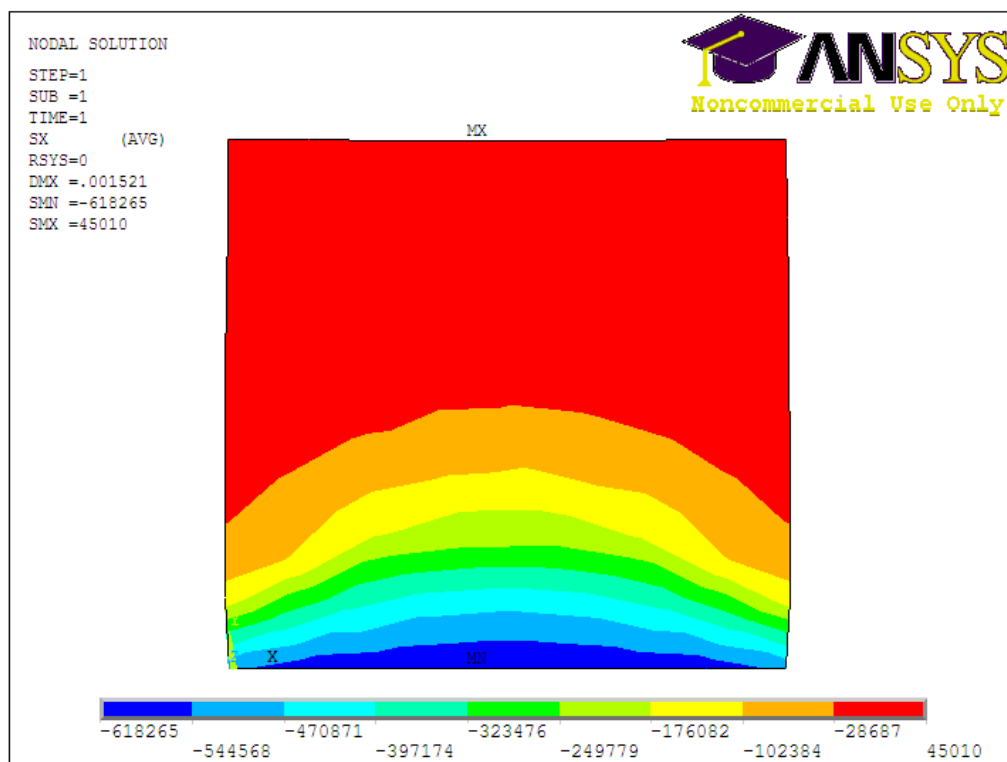
7.2 Deformačně-napět'ová analýza

Na sestaveném modelu mohl být spuštěn výpočet. Před poskytnutím vypočítaných hodnot napětí aplikaci Ansoft, bylo vhodné si dosažené výsledky zobrazit a porovnat je s analytickým výpočtem. Zde nás hlavně zajímalo napětí σ_y . Jestliže uvažujeme hodnotu napětí na barevné škále obrázku 19 v absolutní hodnotě, můžeme konstatovat shodu s analytickým výpočtem. V obou případech vyšlo napětí přibližně 2,4 MPa ve spodní části modelu.



Obrázek 19: Napětí σ_y [Pa]

Program Ansysflow však počítá se střední hodnotou napětí. Pro zajímavost bylo tedy možné si zobrazit i napětí σ_x . Jak se lze přesvědčit na dalším obrázku, napětí σ_x má o řád nižší hodnotu oproti σ_y , neboť dochází k zatížení pouze ve svislém směru.



Obrázek 20: Napětí σ_x [Pa]

7.3 Příprava dat pro aplikaci Ansflow

V programu ANSYS bylo nutné vygenerovat informace o uzlech, elementech sítě a vypočítaných napětích. Podmínkou k vytvoření těchto seznamů je vysíťování daného modelu konečnými prvky a provedení výpočtu. Tyto seznamy se jistě dají vytvořit více způsoby. Např. využitím skriptovacího jazyka programu ANSYS k vytvoření si vlastních výpisů těchto údajů. Ovšem z uživatelského hlediska je nejjednodušší do příkazového řádku napsat klíčové slovo k zobrazení již nadefinovaných tabulek s potřebnými údaji. K tomuto formátu textového souboru je tedy přizpůsobena aplikace Ansflow. K vygenerování seznamu uzlů se musí zadat příkaz NLIST bez dalších parametrů. Pro seznam elementů zas příkaz ELIST, také bez dalších parametrů. Vypočítané hodnoty napětí jsou však přiřazeny uzlům. Požadavkem je ovšem vytvořit seznam napětí, které budou přiřazeny jednotlivým elementům. V případě 2D úlohy toho docílíme postupným zadáním následujících příkazů:

```
ETABLE,SX,S,X
```

```
ETABLE,SY,S,Y
```

```
PRETAB,SX,SY
```

V případě 3D úlohy je nutné zadat tyto příkazy:

```
ETABLE,SX,S,X
```

```
ETABLE,SY,S,Y
```

```
ETABLE,SZ,S,Z
```

```
PRETAB,SX,SY,SZ
```

kde příkaz ETABLE znamená přiřazení hodnot k elementům pro další zpracování a příkaz PRETAB zas vypsání zvolených položek.

Význam parametrů zadaných příkazů:

ETABLE, popisek zvolené položky, druh zvolené položky tj. S pro stress (napětí), zvolené napětí z konkrétní osy (tj. pro x,y,z)

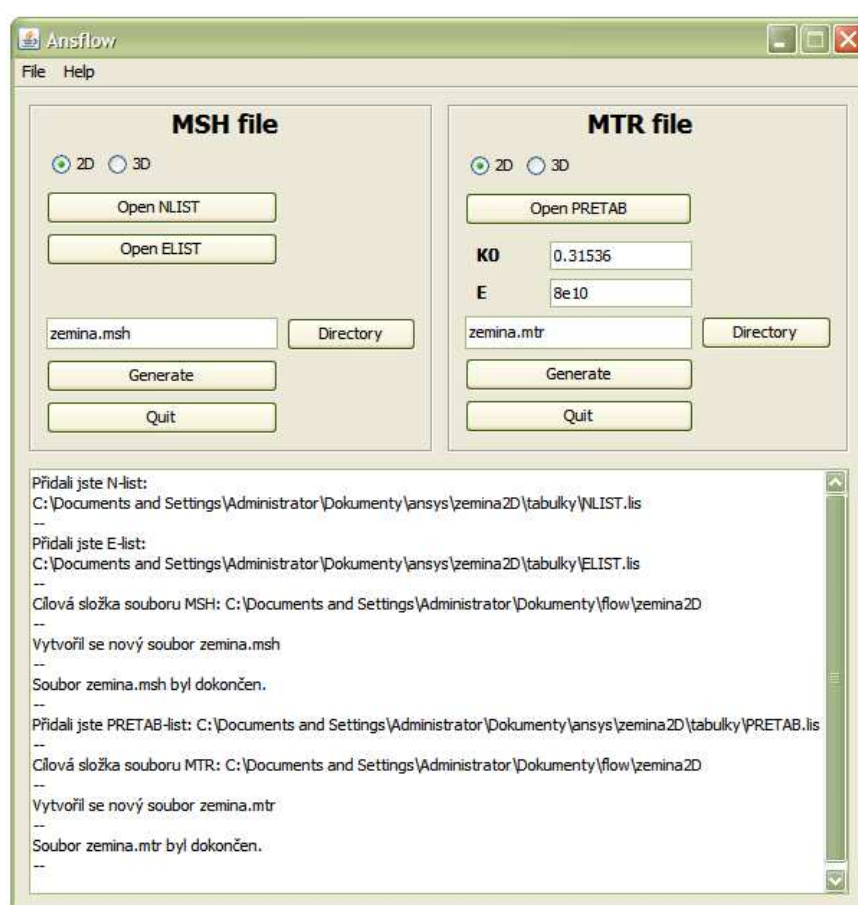
PRETAB, výpis položky SX a SY případně SZ

Sekvenčí uvedených příkazů dostaneme listy s požadovanými údaji, které si uložíme jako textové soubory. Teď jsou připravené vstupy do aplikace Ansflow. Uvedené tabulky můžeme vytvořit i pomocí grafického rozhraní ANSYS.

8 Konverze dat

Jestliže jsou k dispozici údaje z ANSYS, je možné přistoupit ke konverzi dat pro program Flow123D. Podle obrázku níže dojde k nastavení potřebných údajů v navržené aplikaci. Zde je nutné podotknout, že při zadávání počáteční hydraulické vodivosti K_0 , není vhodné zadávat malá desetinná čísla jako např. $K_0 = 10^{-8}$ m/s. S těmito malými čísly má Flow123D při výpočtu problém. Proto je vhodnější uvedenou vodivost zadat v jednotkách m/rok.

Podmínkou je zadat všechny údaje, jinak konverze dat se neprovede. Cestu k zadaným položkám si uživatel může zkontrolovat v textové ploše.



Obrázek 21: Nastavení pro konverzi dat

9 Řešení testovací úlohy ve Flow123D

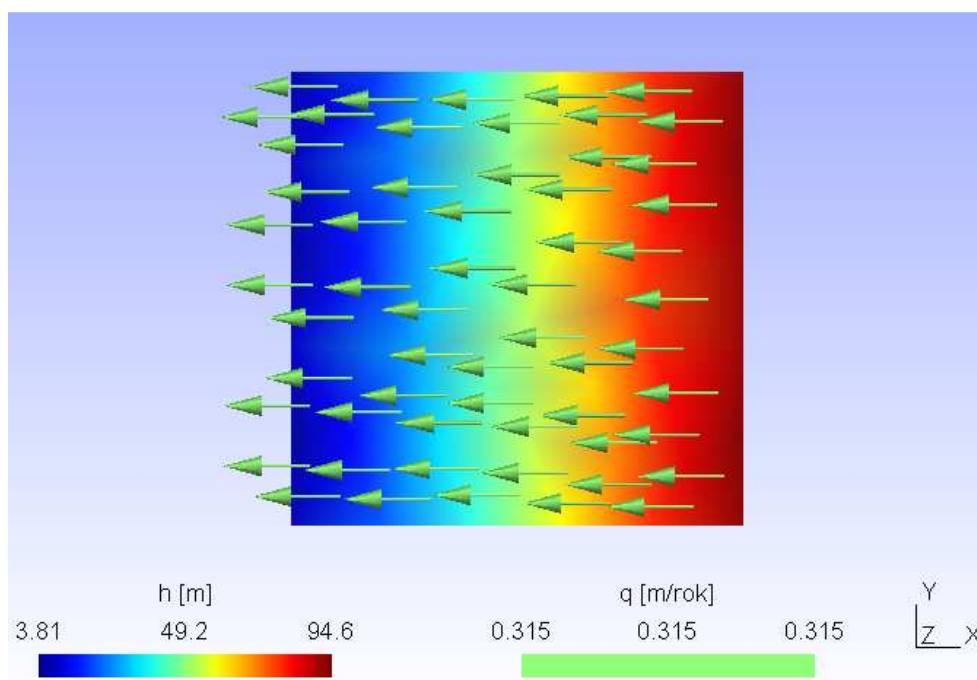
Nyní jsou k dispozici soubory mtr a msh, které byly vygenerovány aplikací Anflow. Soubory musely být uloženy do složky s dalšími soubory programu Flow123D aby byly dostupné pro výpočet proudění.

9.1 Nastavení bcd.ini

V souboru bcd.ini je však nutné zakázat vytvoření souboru mtr, aby nedošlo k přepsání již vytvořeného souboru. Dalším nastavením je zavedení Dirichletovy okrajové podmínky podle zadání testovací úlohy. Tlaková výška bude mít rozložení na hranách modelu podle rovnice $Ix + 0y + 0z + 0d$. Tak se dosáhne rozložení tlakové výšky od 0 do 100m.

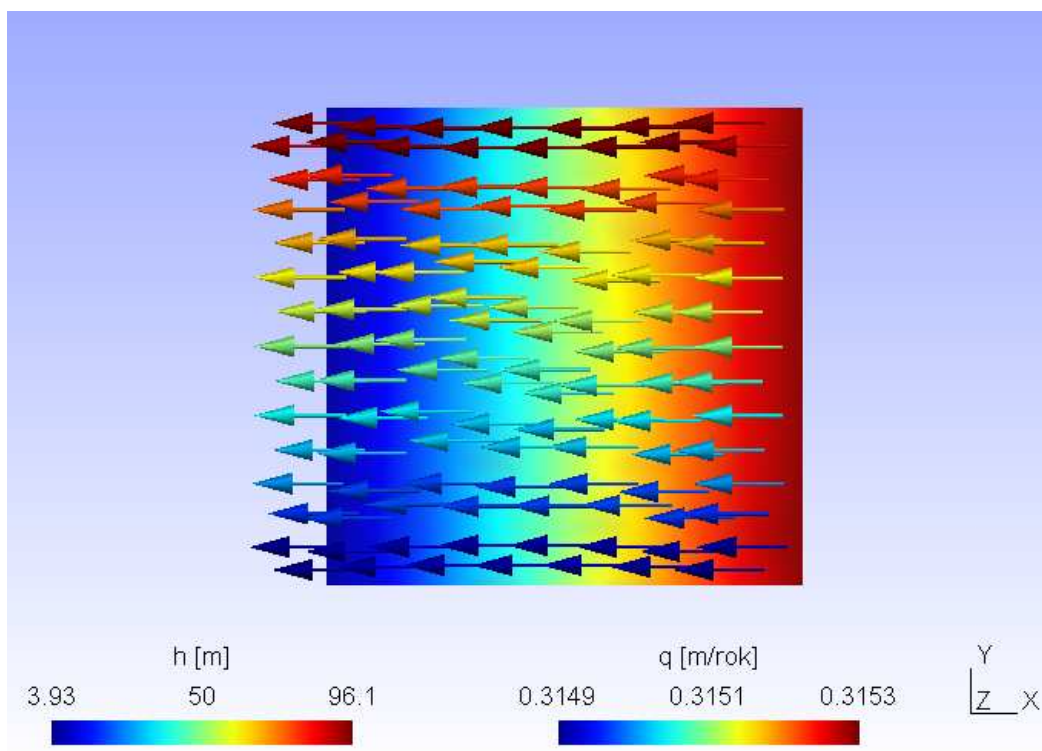
9.2 Vizualizace proudění

Po provedeném výpočtu v softwaru Flow123D je možné provést vizualizaci výsledků. Ta se provádí v programu GMSH. Nejprve bylo zobrazené proudění pro oblast, na kterou nepůsobí žádné zatížení a kde se tudíž nemění hydraulická vodivost (Obrázek 22). Barevná škála vlevo znázorňuje rozložení tlakové výšky a barevná škála vpravo zas velikost Darcyovské rychlosti. Velikost Darcyovské rychlosti je tedy všude stejná a je reprezentovaná jednou barvou.



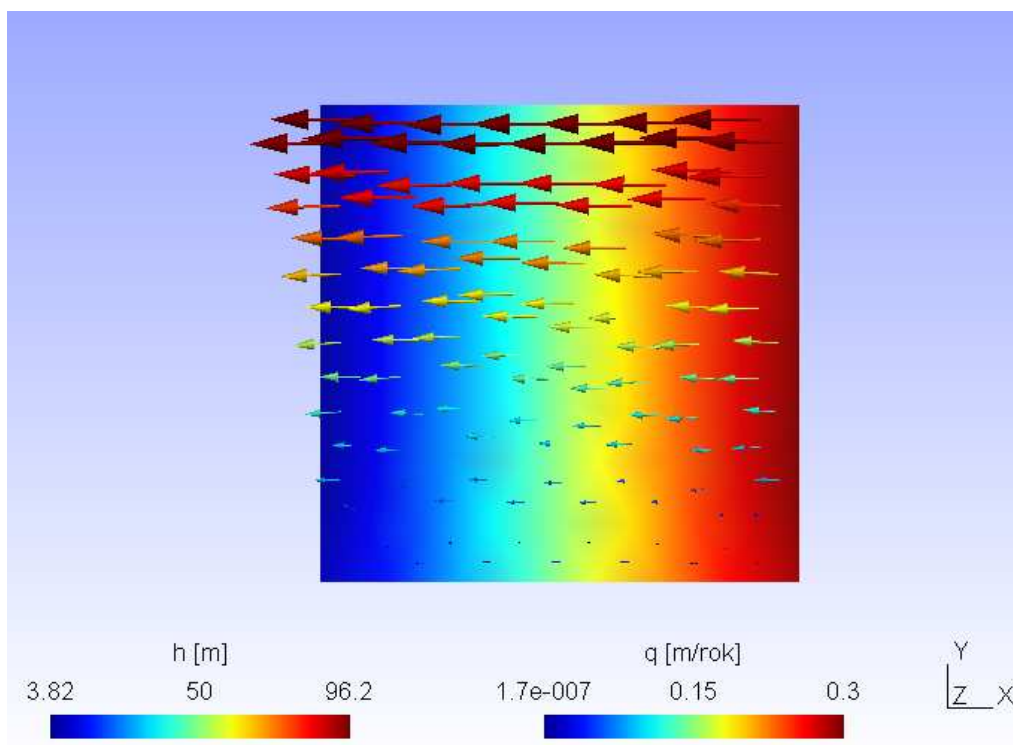
Obrázek 22: Proudění v nezatížené hornině

Další zobrazené proudění (Obrázek 23) je výsledek na zatížené oblasti s proměnlivou velikostí hydraulické vodivosti, která byla vypočítána podle (3.18). Je vidět, že voda v horní části proudí o trochu rychleji nežli ve spodní.



Obrázek 23: Proudění zatížené horniny

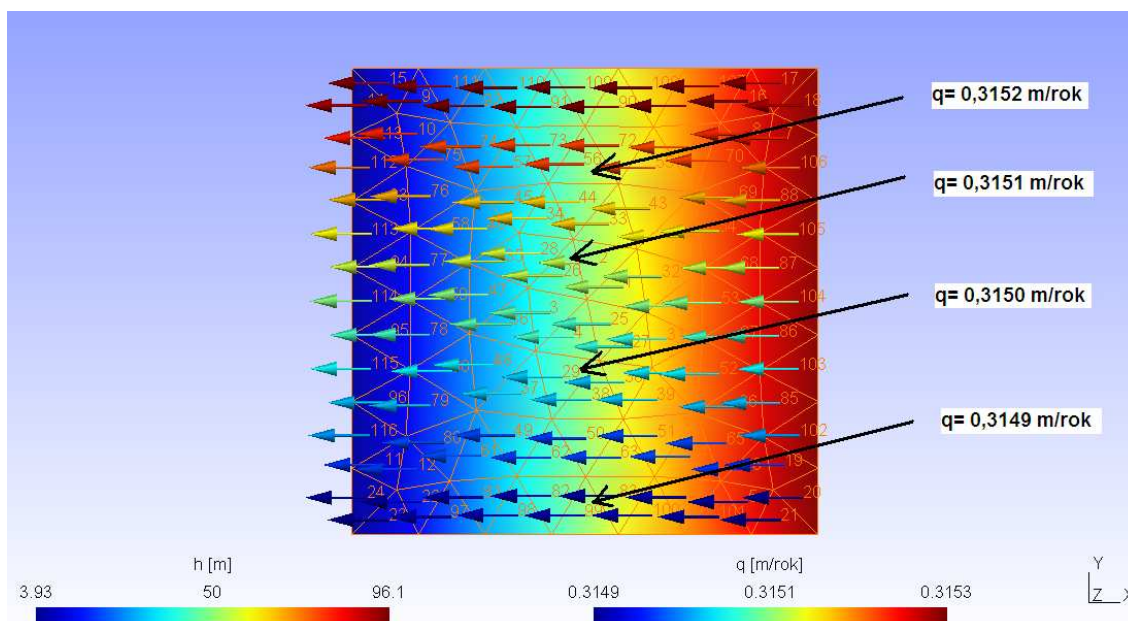
Jestliže uvažujeme lineární závislost hydraulické vodivosti na napětí podle (3.20), je možné dosáhnout rozmezí vodivostí téměř od nuly do počáteční hodnoty. V tomto případě jde spatřit malé stočení vektorů Darcyovské rychlosti (Obrázek 24). Je to způsobeno tím, že voda má snahu proudit do vodivější části oblasti.



Obrázek 24: Proudění s lineární závislostí K na σ

10 Srovnání analytického a numerického výpočtu

Na navržené testovací úloze byl proveden analytický i numerický výpočet pomocí aplikací ANSYS, Anflow a Flow123D. Metodou myšlených řezů byla oblast rozdělena na čtyři pravidelné intervaly. Hranicím myšlených úseků v realizovaném modelu přibližně odpovídaly elementy s čísly 56, 26, 29 a 99. V textovém souboru s příponou pos byla na těchto elementech odečtena hodnota Darcyovské rychlosti (Obrázek 25).

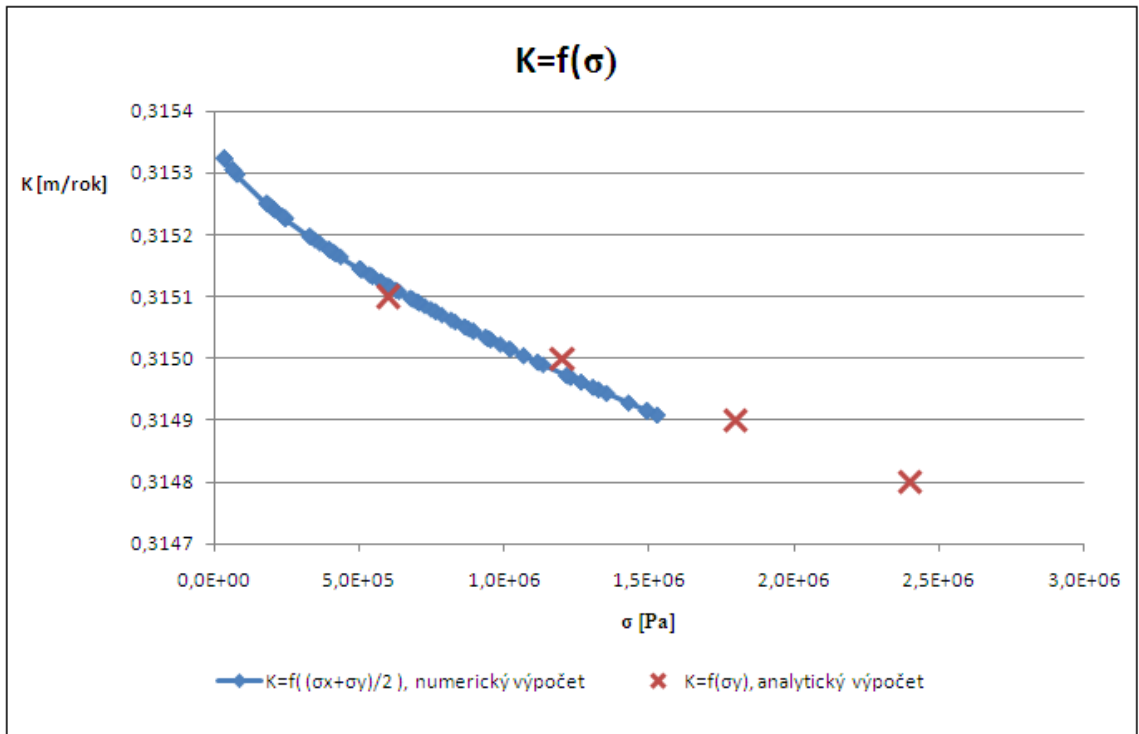


Obrázek 25: Hodnoty q na konkrétních elementech

Dosažené výsledky na zmíněných elementech jsou srovnatelné s hodnotami analytického výpočtu:

$$q_1 = 0,3151 \text{ m/rok}, q_2 = 0,3150 \text{ m/rok}, q_3 = 0,3149 \text{ m/rok}, q_4 = 0,3148 \text{ m/rok}$$

Z vypočítaných hodnot navržené aplikace je možné sestavit graf závislosti hydraulické vodivosti na střední hodnotě mechanického napětí (Obrázek 26). Každý bod v tomto průběhu náleží konkrétnímu elementu sítě konečných prvků. Pro srovnání byly do grafu umístěny i výsledky z analytického řešení.



Obrázek 26: Závislost hydraulické vodivosti na napětí

11 Závěr

V jazyce Java byla naprogramována aplikace řešící propojení výpočetních prostředků ANSYS a Flow123D pro řešení sdružených úloh. Dále byla navržena testovací úloha pro předvedení a ověření správnosti realizovaného propojení.

Aplikace byla navržena s ohledem na jednoduché a intuitivní používání. Proto obsahuje grafické uživatelské prostředí se základními funkčními prvky.

Testovací úloha byla vyřešena pomocí uvedených softwarových nástrojů. V programu ANSYS po vytvoření geometrie oblasti se model upravil na provedení deformačně-napěťové analýzy pomocí metody konečných prvků. Byly zavedeny okrajové podmínky typu nulové posunutí a vektor tíhového zrychlení pro simulaci zatížení horniny vlastní tíhou. Navrženou aplikací byly načteny a zpracovány informace o struktuře sítě konečných prvků a o hodnotách vypočítaného mechanického napětí. Tyto výsledky ze zátěžové analýzy posloužily pro výpočet hydraulické vodivosti. Uvedené údaje byly aplikací předány programu Flow123D. Na provedení simulace proudění musela být zavedena okrajová podmínka v podobě tlakové výšky. Dosažené výsledky pak byly vizualizovány v programu GMSH. Pro ověření dosažených výsledků byl proveden i analytický výpočet. Výsledky z obou řešení se dají považovat za téměř shodné.

Navrženým způsobem jde ovšem řešit volně sdružené úlohy, kde vazba mezi mechanickou a hydrologickou složkou systému hornina a kapalina není tak těsná. Pro zahrnutí složitějších interakcí by bylo nutné v programu Flow123D implementovat výpočet strukturálního modelu.

Vývoj simulačního programu Flow123D stále probíhá na Technické univerzitě v Liberci. Cílem diplomové práce byla tedy snaha o rozšíření jeho využitelnosti.

Literatura

- [1] ANSYS User Guide. Elektronická dokumentace ANSYS.
- [2] GMSH – mesh generator home page [online]. c1997, January 23, 2009
[cit. 2010-05-11].
Dostupný z WWW: <http://www.geuz.org/gmsh>
- [3] HEROUT, Pavel: Učebnice jazyka Java. Třetí rozšířené vydání. Nakladatelství KOOP, 2007. ISBN 978-80-7232-323-4.
- [4] HOKR, Milan: Poznámky k přednáškám z předmětu Aplikace počítačových modelů na FM TUL, 5.4.2006.
- [5] HOKR, Milan: Transportní procesy, Učební text, FM TUL, 23. září 2005.
- [6] HOKR, Milan: Vybrané partie z fyziky, Část „mechanika pružných těles“, FM TUL, 23. září 2005.
- [7] MARYŠKA, BLAHETA, KOHUT, MALÍK, HOKR, SLOVÁK: Analýza zahraničních poznatků o EDZ: Průběžná technická zpráva ke KD 2 úkolu “Výzkum procesů pole blízkých interakcí hlubinného úložiště vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů“, červen 2006.
- [8] SEVERÝN, HOKR, KRÁLOVCOVÁ, BŘEZINA, KOPAL, TAUCHMAN: Flow123D, Numerical simulation software for flow and solute transport problems in combination of fracture network and continuum, Documentation of file formats and brief user manual. Liberec, 20.11.2008.

Obsah přiloženého DVD.

1. Složka s diplomovou prací ve formátu .pdf .
2. Složka s aplikací Ansflow.