

Simulace proudění s nehomogenní hustotou – vliv fyzikálních parametrů na numerické vlastnosti

Milan Hokr

Technická univerzita v Liberci

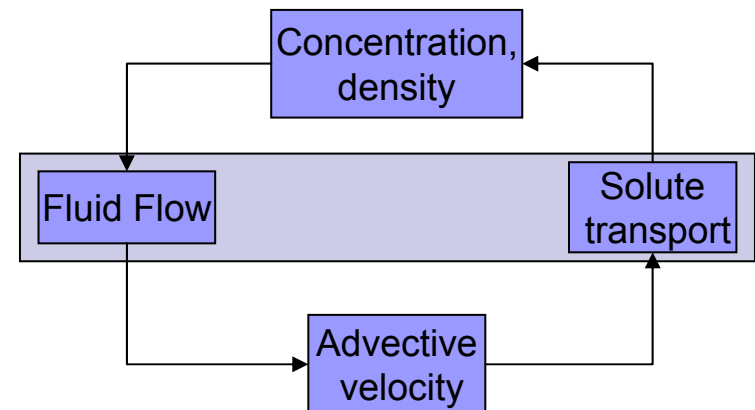
Fakulta mechatroniky

Obsah prezentace

- Úvod
 - Úlohy proudění s proměnnou hustotou, benchmarky
 - Konkrétní lokalita jako motivace
- Definice řešené úlohy
 - 2D svislý řez, kontakt dvou kolektorů
 - Parametrizace: fyzikální, numerické, varianty
 - Numerická schémata a kódy
- Výsledky
 - Intenzita vazby mezi prouděním a transportem díky hustotě
 - Citlivost na fyzikální parametry
 - Vliv zjemnění diskretizace, porovnání schémat/kódů

Proudění s proměnnou hustotou

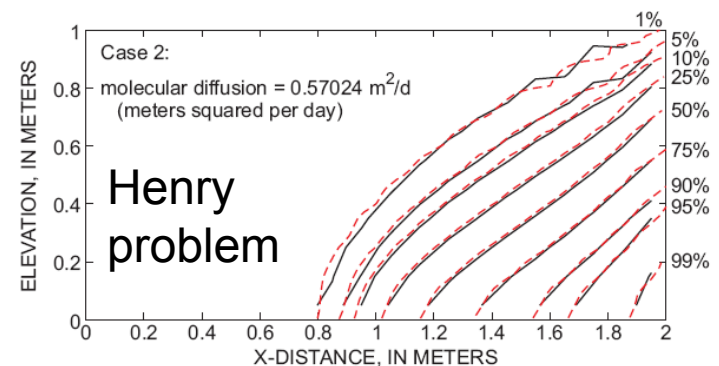
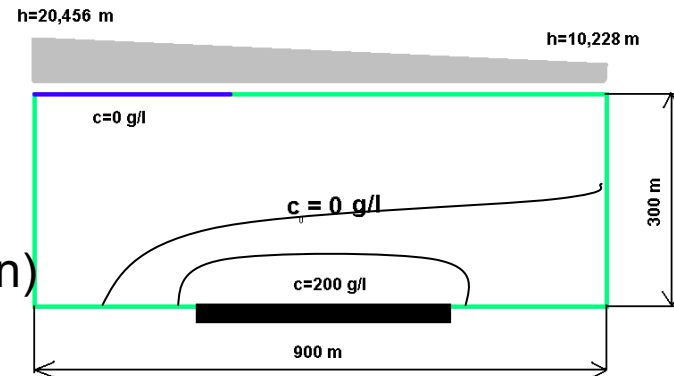
- Pole rychlosti ovlivněné rozložením koncentrace
- Další vazba mezi procesy a nelinearita – numerické obtíže
- Benchmarkové úlohy pro porovnávání a testování numerických schémat a kódů
- Hydraulická síla versus gravitace
- Jak vlastnosti numerického výpočtu závisí na “obtížnosti” úlohy



Benchmarkové úlohy

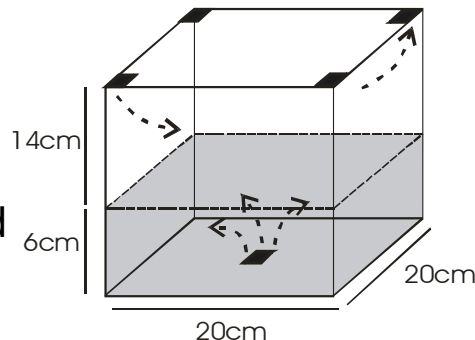
- Geometricky zjednodušené úlohy
 - Odvozené z typických reálných úloh (solné ložisko, pronikání mořské vody)
 - Speciální jevy (fingering)
- Demonstrace, testování kódů, analýza přesnosti výpočtu
- Prezentované inovace
 - Umělá kontaminace místo mořské vody
 - Parametrizace síly hustotní vazby – hydraulická síla (advekce) versus stoupání/klesání vlivem gravitace

Saldome problem
(Hydrocoin)



Salt pool problem –
laboratorrní exp.

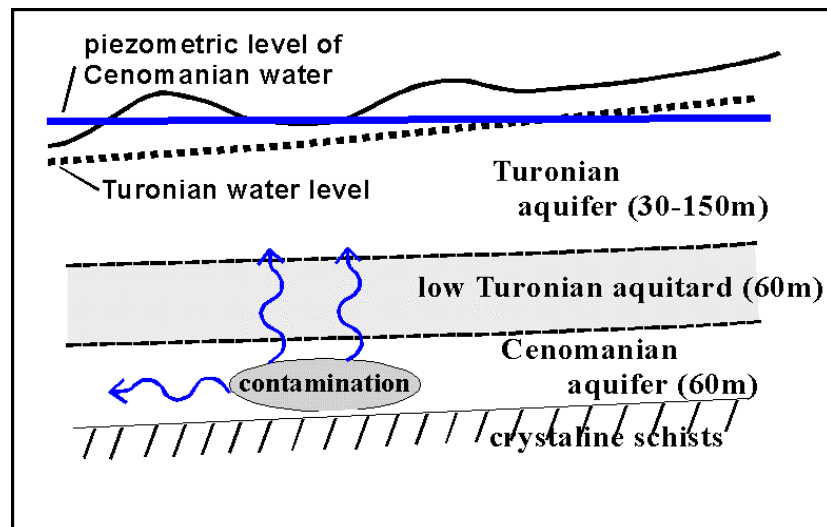
(Kinzelbach, Oswald
et al)



Lokalita Stráž pod Ralskem

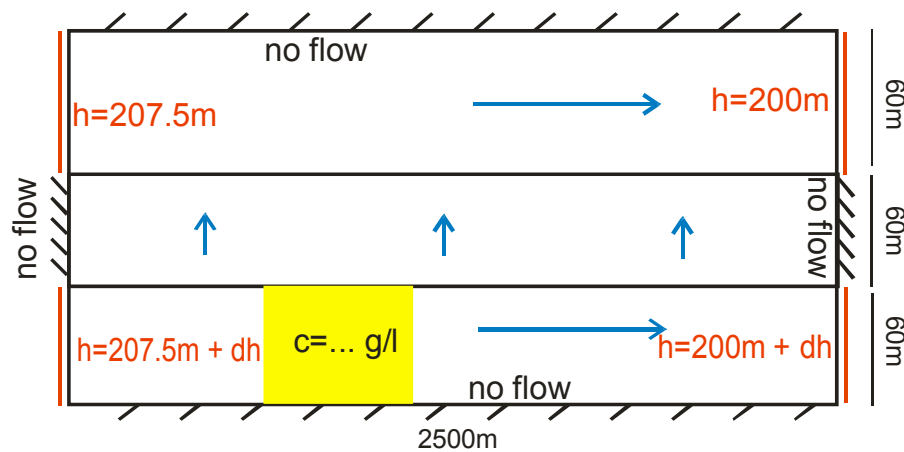
- Severočeská křídová pánev
- Kontakt cenomanského a turonského pískovcového kolektoru
- Loužení uranu v minulosti – zdroj kontaminace v cenomanském kol (až 50g/l)
- Izolátor narušen vrtnou činností – zvýšení vodivosti
- Studie dlouhodobého chování zbytkové kontaminace po sanaci
- Očekáván vliv hustoty na proudění

Situation of Stráž block within the Czech republic



Definice benchmarkové úlohy

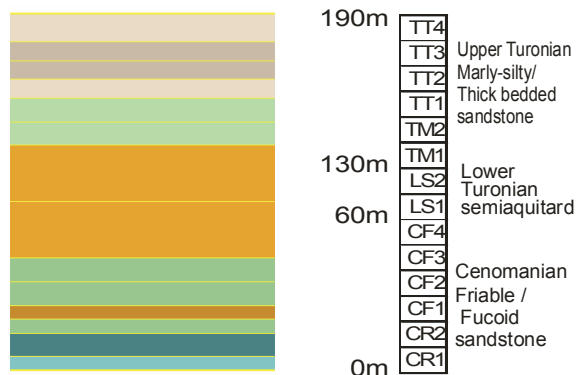
- Svislý řez s realistickými nebo zjednodušenými fyzikálními parametry
- Vodorovný a svislý hydraulický gradient (dh)
- Počáteční koncentrace v dolní části (c_0)
- Hydraulická/gravitační síla - parametrizace vlivu nehomog hustoty: dh , c_0



Materiálové a další parametry

Realistické

- Obtížné vyhodnocení kvůli kombinaci a vzájemnému zesílení vlivů
- Hokr, Mužák 2006



Layer code	K_{xx}	K_{yy} [m/d]	K_{zz} [m/d]	n_m	n_t	dz	$c_{ini}(10)$	$c_{ini}(30)$	$c_{ini}(50)$
TT1-4	6--10	6--10	6--10	0.07	0.27	15	0	0	0
TM1,2	0.4	0.1	0.1	0.07	0.27	12.5	0	0	0
LS1,2	1.00E-04	4.00E-04	4.00E-04	0.05	0.1	30	0	0	0
CF1,3,4	0.5	0.25	0.25	0.08	0.32	12.5	10	25	40
CF2	0.05	0.025	0.025	0.04	0.32	7.5	10	20	30
CR1,2	2--4	1--2	1--2	0.1	0.25	12	10	30	50

Zjednodušené

$K=1\text{ m/d}$	$n=0.1$	$D=1e-9\text{ m}^2/\text{s}$ $\alpha I=0.5$ $\alpha L=5$
$K=1e-3\text{ m/d}$	$n=0.05$	
$K=1\text{ m/d}$	$n=0.1$	

- Homogenní diskretizace
- Homogenní koncentrace

Časový úsek simulace: $T=36000$ dní

Pozice oblasti počáteční koncentrace: $250\text{m} < x < 750\text{m}$

Studované varianty

	dh=1m	dh=3m	dh=10m
c _{ini} =10 g/l	V1	V2	V3 (nejslabší vazba hust.)
c _{ini} =50 g/l	V4 (nejsilnější vazba hust.)	V5	V6

Rayleighovo číslo:

Vztlak („buoyancy“) versus difuze ... $Ra = d\rho K d / D$

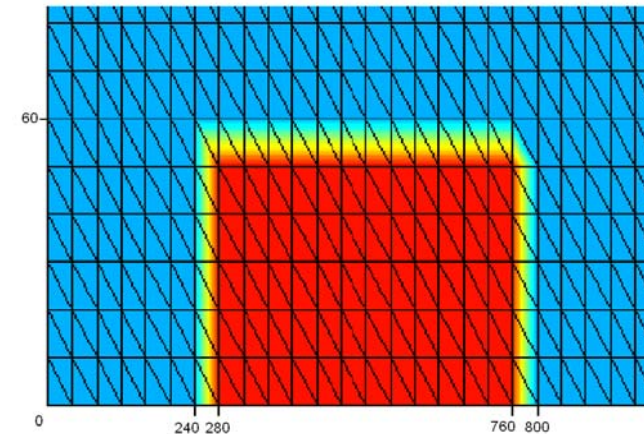
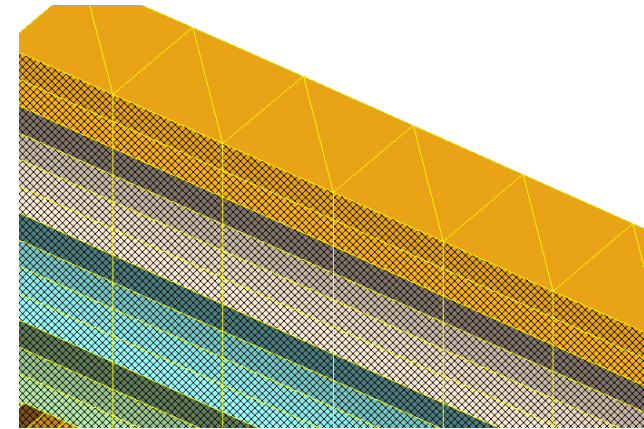
Vztlak („buoyancy“) versus advekce ... ?

Nehomogenní parametry: kolektory vs. izolátor

Numerické řešení

- Vlastní konečněprvkový/konečněobjemový kód (Hokr, Wasserbauer, 2004)
 - 3D diskretizace, triangulace v půdorysu a uspořádání do vrstev
 - Lineární báze funkce, konečné diference, upwind vážení pro advekci
 - „Slabě sdružené“ (explicitní) proudění a transport
- FEFLOW 4.7
 - MKP kód s mnoha pokročilými numerickými postupy
 - Svisle 2D triangulace, lineární MKP,
 - Iterační řešení (implicitní) pro sdružené jevy
 - Stará verze (1998)
- 2264 elementů (trojúhelníky/ trojboké hranoly)
 - 40x10m v xz rovině
 - zjemnění 20m x 5m (9027), 10m x 2.5m (36288)

Fragmenty sítí

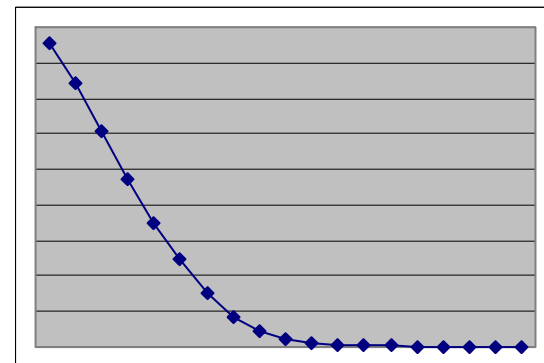
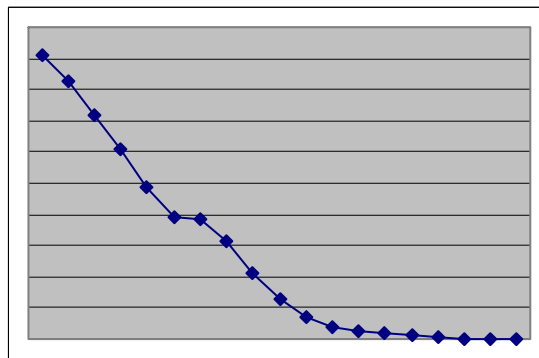
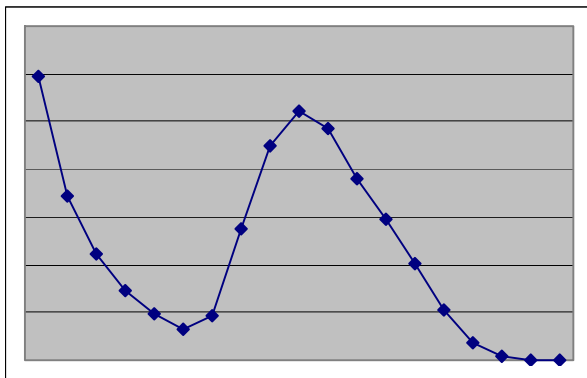
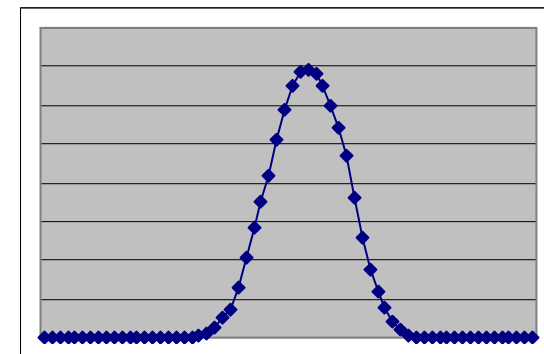
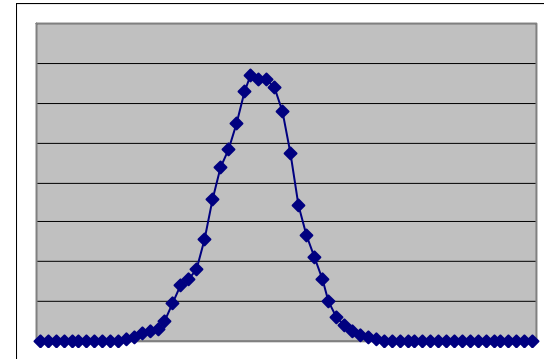
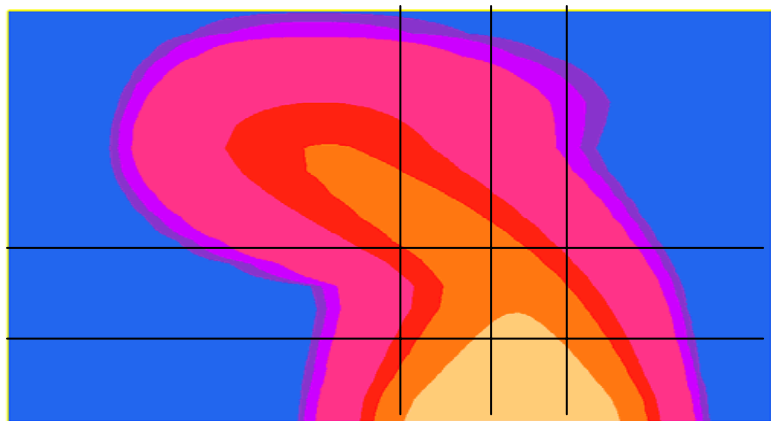


Cíle porovnání a použité postupy

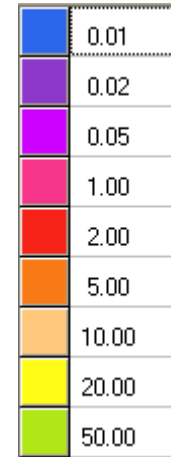
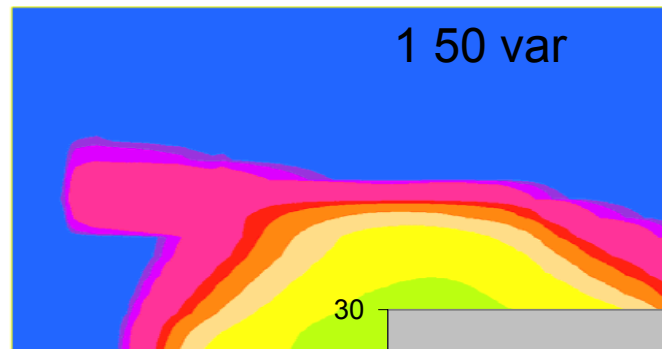
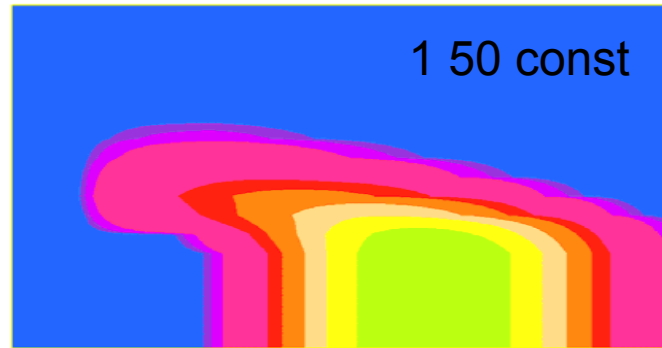
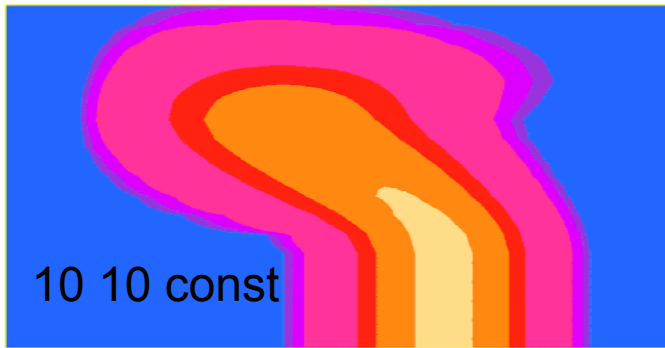
- Vliv fyzikálních parametrů – porozumění kvalitativnímu chování problému
- Citlivost na volbu simulace s konstantní/proměnnou hustotou
- Test „konvergence“ při zjemňování diskretizační sítě
- Výběr numerického schématu

- Vyhodnocení výsledků
 - Izolinie koncentrace
 - Profily koncentrace (liniové řezy)
 - Úhrny hmotnosti látky po vrstvách

Příklad výsledků



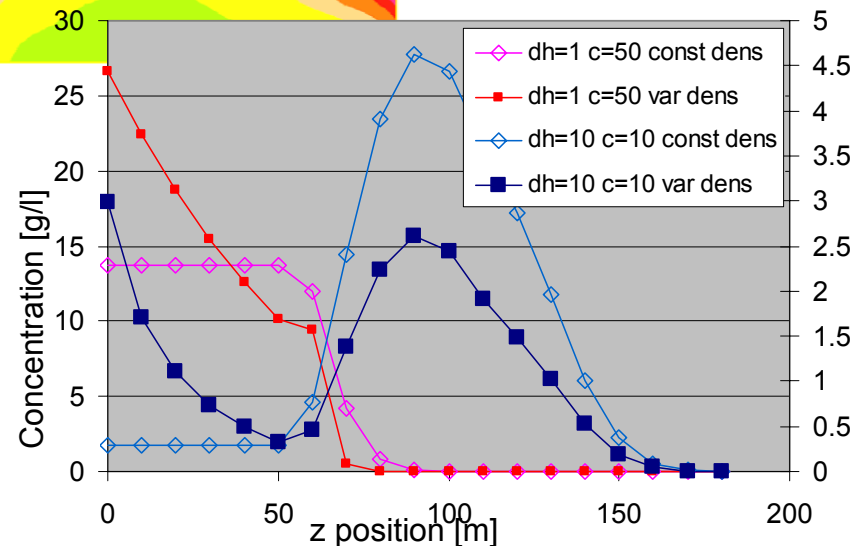
Model s konstantní/proměnnou hust.



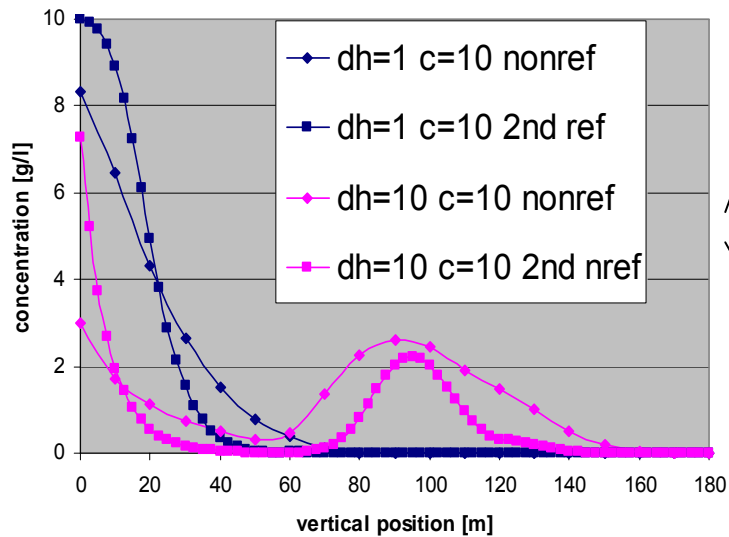
x=1240 profile

dh=10 c=10 nejslabší vliv

dh=1 c=50 nejsilnější vliv

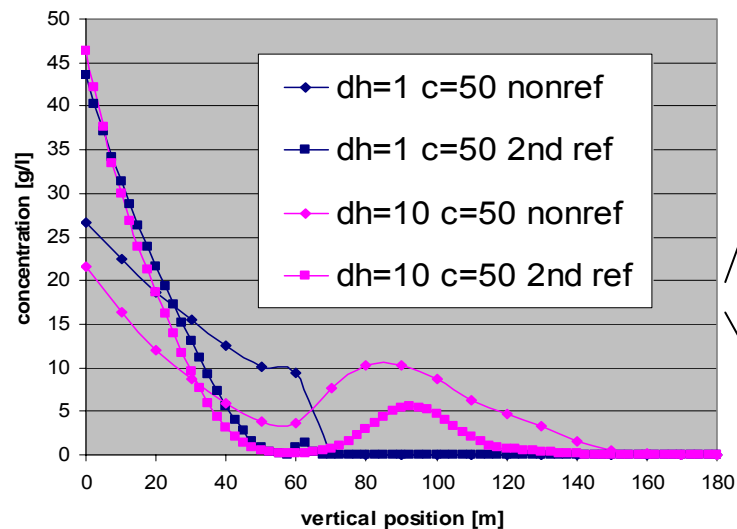


Fyzikální parametry dh, c0



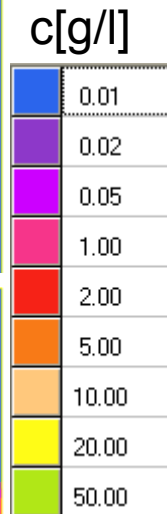
dh=1 c=10

dh=10 c=10



dh=1 c=50

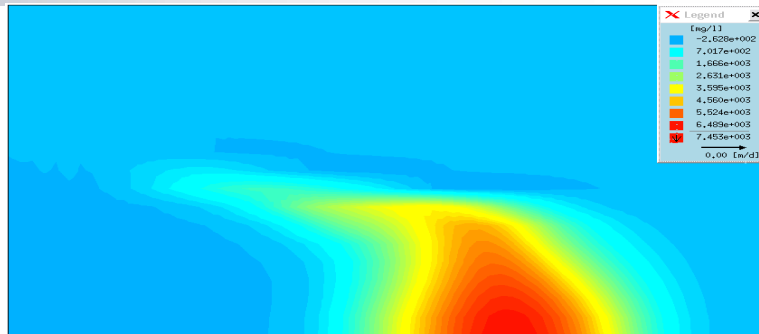
dh=10 c=50



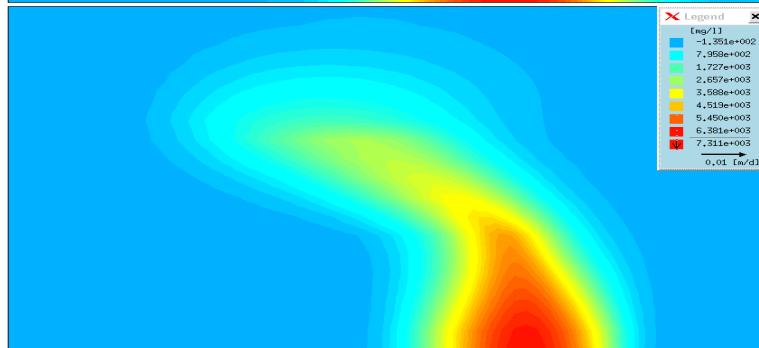
Fyzikální parametry

FEFLOW results

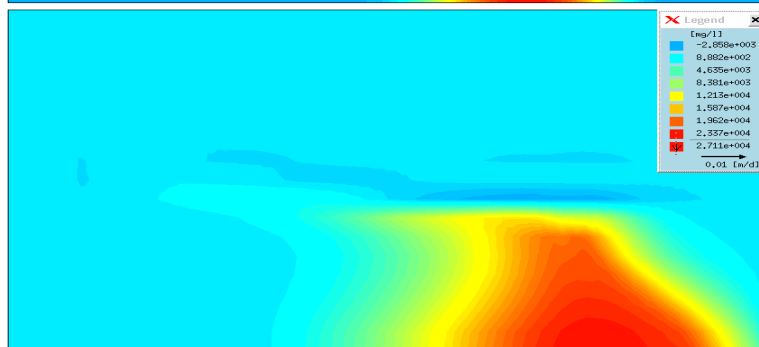
dh=1 c=10



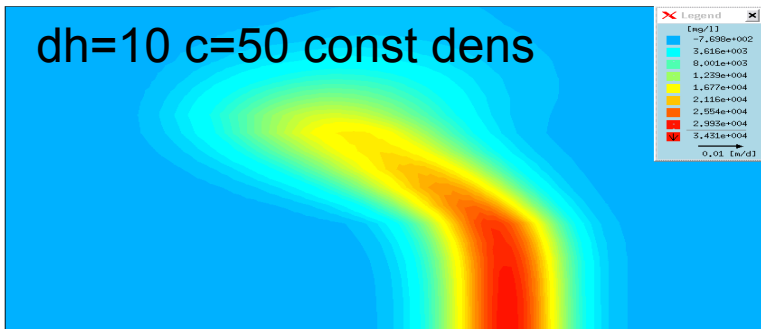
dh=10 c=10



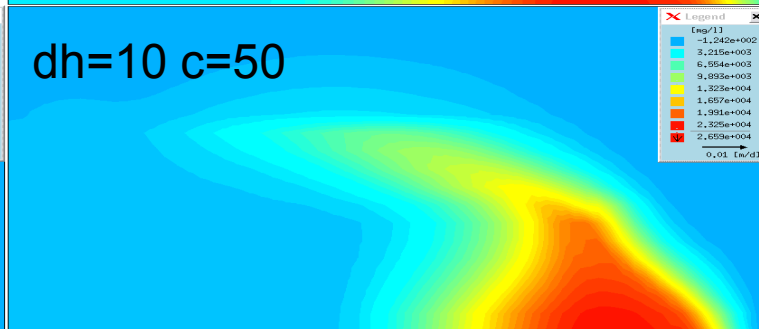
dh=1 c=50



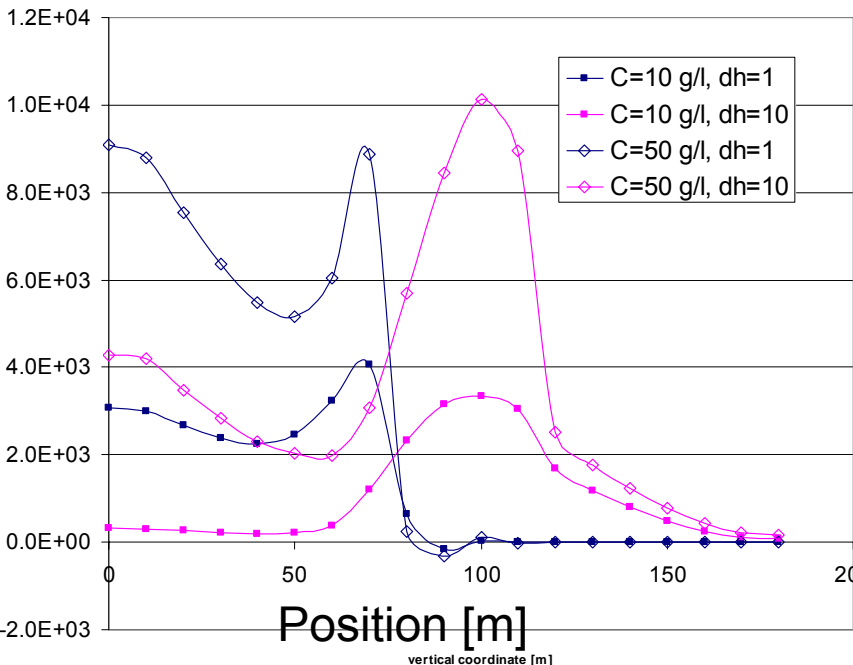
dh=10 c=50 const dens



dh=10 c=50



c[mg/l]



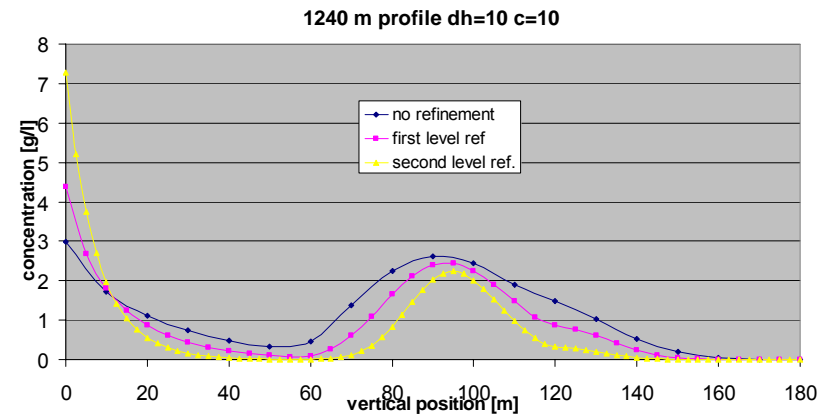
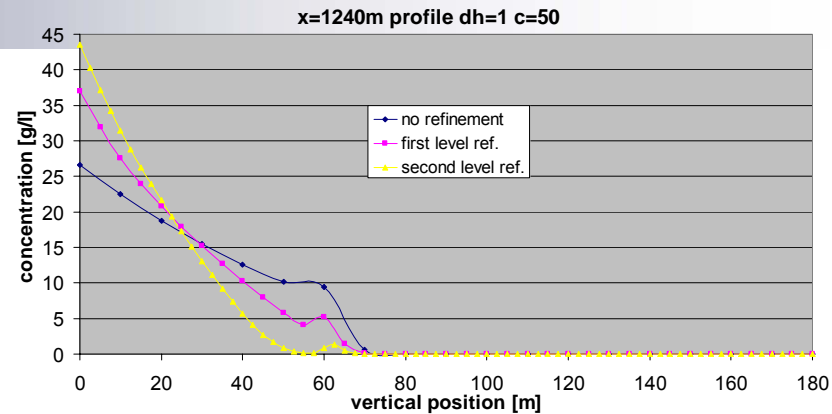
concentration [mg/l]

Position [m]

vertical coordinate [m]

Zjemnění sítě

- Nástroj na kontrolu numerické přesnosti a konzistence modelu
- Problém s numerickou difuzí
- 1 krok zjemnění: $dx:=dx/2$, $dz:=dz/2$, dt podle podmínky stability (typicky 40-60x výpočetní náročnost)
- 2 úrovně pro vlastní kód, 1 úroveň pro FEFLOW



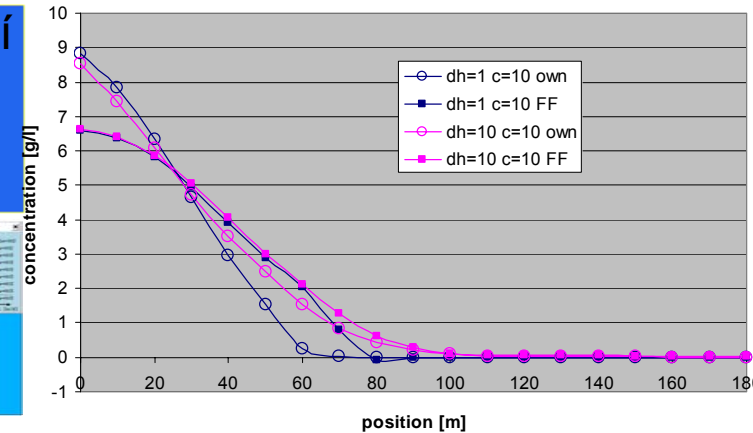
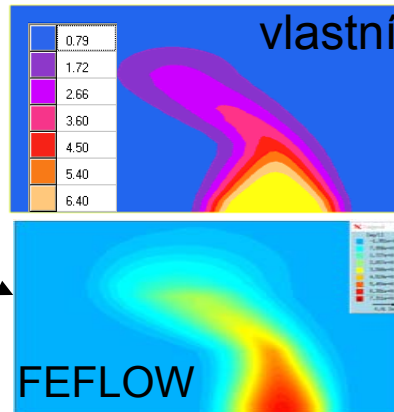
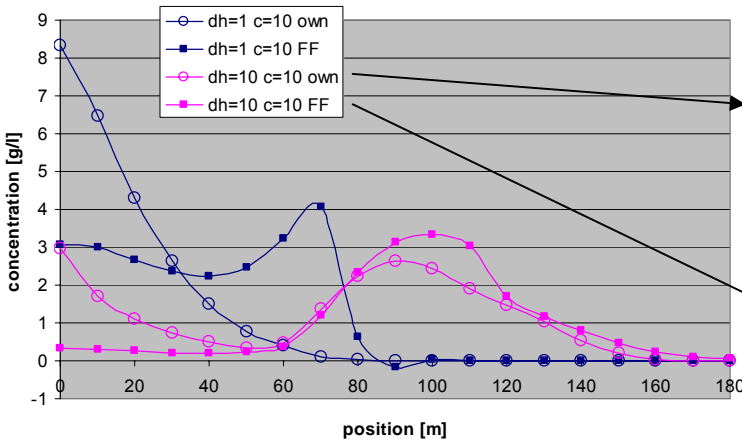
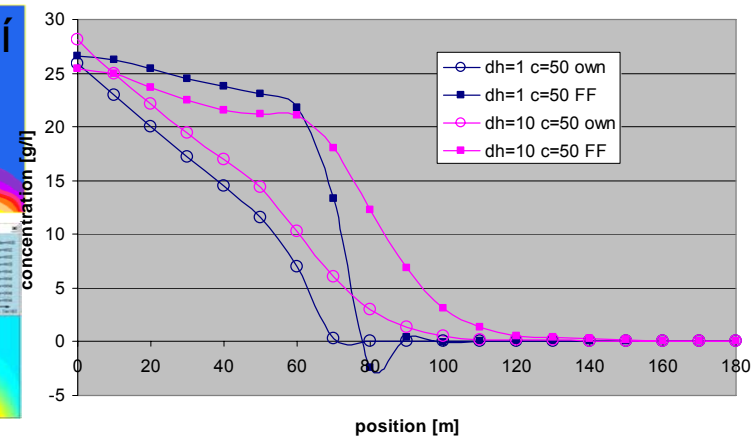
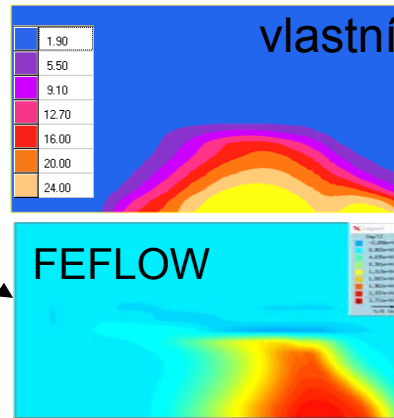
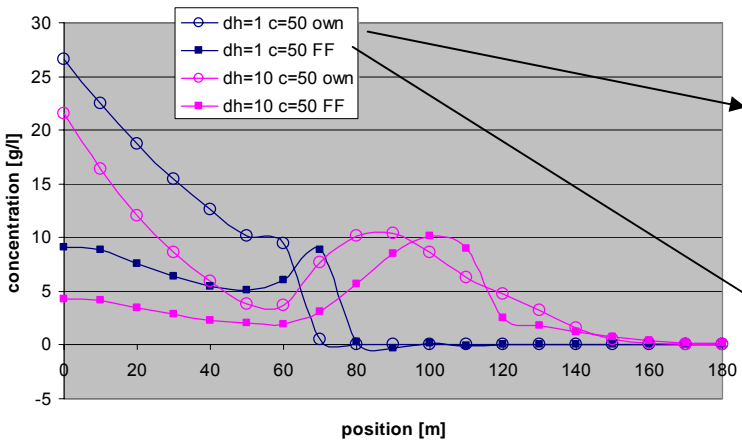
Vyhodnocení přenosu hmoty

model parameters				mass [kg] (variable-density model)				Initial	mass [kg] (constant density mdl)	
variant	dh	c	refinement	bottom aq	aquitard	top aq	total		aquitard	top aq
V1	1	10	ref0	1140784.7128	2922.1860	0.0311	1143706.9298	1144000	18854.8392	0.2104
			ref1	1142462.1407	1511.6834	0.0000	1143973.8241		20375.0393	0.0002
			ref2	1143795.7842	187.4976	0.0000	1143983.2818		14009.5325	0.0000
V3	10	10	ref0	870548.6633	208008.0029	65333.0020	1143889.6682	5720000	373937.6238	124866.2549
			ref1	930246.3297	154115.6950	59530.5930	1143892.6177		382823.0217	130621.7001
			ref2	995067.8522	104075.4680	44762.0969	1143905.4171		391984.5631	127831.8681
V4	1	50	ref0	5619949.3183	21371.7845	0.3329	5641321.4357	5720000	94274.1961	1.0518
			ref1	5656667.2077	14620.8492	0.0002	5671288.0570		101875.1965	0.0008
			ref2	5630710.8804	6176.5680	0.0000	5636887.4484		70047.6626	0.0000
V6	10	50	ref0	4615319.7504	878029.5917	224748.6623	5718098.0044	5720000	1869688.1190	624331.2745
			ref1	4869728.4462	643935.8948	204657.7979	5718322.1389		1914115.1086	653108.5006
			ref2	5311306.2491	290303.3856	117298.2782	5718907.9129		1959922.8156	639159.3404

Porovnání kódů

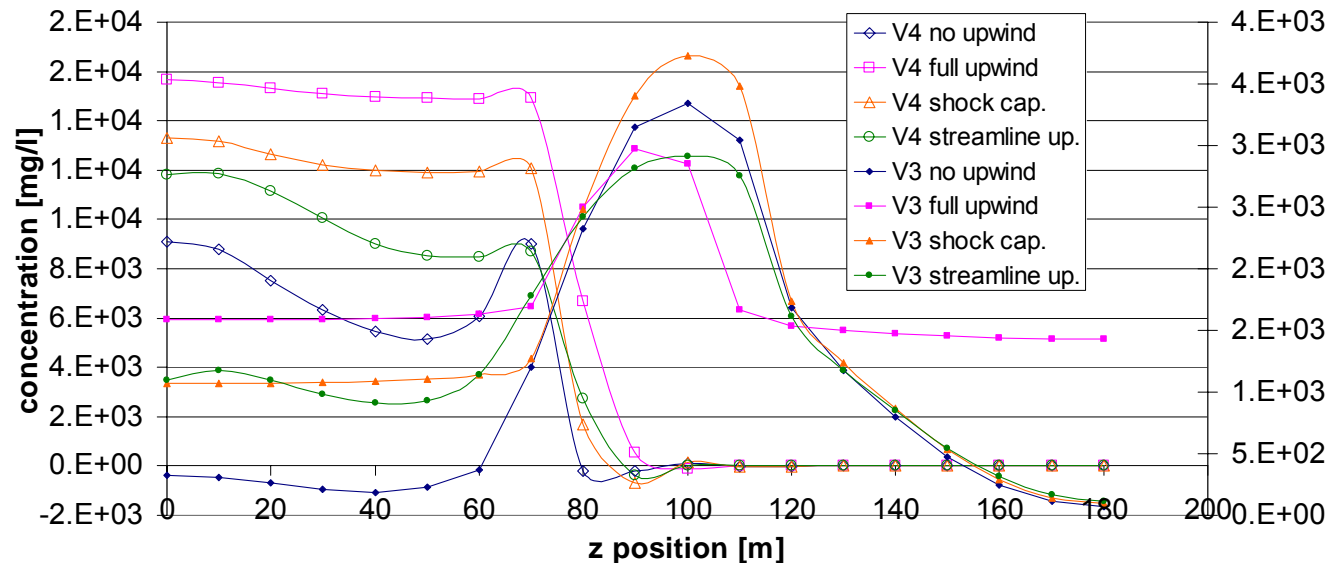
x=1240m profily

x=1840m profily



Numerická schémata v FEFLOW

profile x=1240



No upwind

Streamline upwind

Full upwind

Shock capturing

Test konzistence: αL (10x větší)

- Téměř vymizí rozdíly mezi schémata
- Celkové „rozmazání“ (není zajímavé)

Závěry

- Benchmark výpočty proměnné hustoty
 - Významný vliv hustoty
 - Parametrizace
- Numerické výsledky
 - Komplikované chování
 - Dobrá shoda pro menší závislost na hustotě, horší pro větší závislost na hustotě
 - Volba metodiky porovnání
- Problémy
 - Výpočetní stabilita v FEFLOW (zcela špatné výsledky nebo havárie) ... novější verze?
 - Velká citlivost na numerické schéma (téma k dalšímu studiu?)



Děkuji za pozornost

Milan.hokr@tul.cz