

Euler-Lagrangeov numerički model pronosa u heterogenim poroznim formacijama

Martinić Perme, Juro

Master's thesis / Diplomski rad

2015

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj:

University of Split, Faculty of Civil Engineering, Architecture and Geodesy / Sveučilište u Splitu, Fakultet građevinarstva, arhitekture i geodezije

Permanent link / Trajna poveznica: <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:123:683814>

Rights / Prava: [In copyright / Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-04-18**

Repository / Repozitorij:



[FCEAG Repository - Repository of the Faculty of Civil Engineering, Architecture and Geodesy, University of Split](#)



UNIVERSITY OF SPLIT



DIGITALNI AKADEMSKI ARHIVI I REPOZITORIJ

**SVEUČILIŠTE U SPLITU FAKULTET GRAĐEVINARSTVA,
ARHITEKTURE I GEODEZIJE**

DIPLOMSKI RAD

Juro Martinić Perme

Split, 2015.

**SVEUČILIŠTE U SPLITU FAKULTET GRAĐEVINARSTVA,
ARHITEKTURE I GEODEZIJE**

Juro Martinić Perme

**Euler-Lagrangeov numerički model pronosa u
heterogenim poroznim formacijama**

Diplomski rad

Split, 2015.

Euler-Lagrangeov numerički model pronosa u heterogenim poroznim formacijama

Sažetak:

U ovom diplomskom radu je razvijena Euler-Lagrangeova formulacija pronosa u heterogenim poroznim formacijama. Kao osnova korišten je nestacionarni model tečenja koji je prethodno razvijen na osnovu stacionarnog modela FI. Cilj je bio napraviti model koji bi uz tečenje omogućio rješavanje i pronosa. Iz tečenja je iskorišten algoritam nestacionarnog proračuna (uz blage preinake) za rješavanje disperzivnog Eulerovog koraka, dok se advektivni Lagrangeov korak riješio pomoću metode povratnog praćenja čestica "particle backtracking". Model se verificirao na realnim primjerima i traser testovima te pokazao dobre rezultate, posebice u srednjim i malim heterogenim poroznim formacijama te advektivno dominantnim slučajevima pronosa.

Ključne riječi:

Euler-Lagrange, tečenje podzemne vode, pronos, nestacionarni numericki model, metoda konačnih elemenata, heterogena porozna sredina, advekcija, disperzija.

Euler-Lagrangian solute transport model in heterogeneous porous media

Abstract:

In this Thesis, Euler-Lagrange finite element solute transport model is developed. Basis for this model was the previously developed models: finite element algorithm of unsteady flow FI and random walk Lagrangian transport model. Developed model uses two steps: Lagrangian advective step with backtracking particle algorithm and Euler dispersive step with finite element unsteady algorithm. Developed model is verified on two real examples and tracer tests. Model shows good performances, especially in the cases of low and moderate heterogeneity and advection dominated transport.

Kew words: Euler-Lagrange, flow, transport, unsteady numerical model, finite element method, heterogeneous porous medium, advection, dispersion

SVEUČILIŠTE U SPLITU

FAKULTET GRAĐEVINARSTVA, ARHITEKTURE I GEODEZIJE

STUDIJ: DIPLOMSKI SVEUČILIŠNI STUDIJ GRAĐEVINARSTVA

KANDIDAT: Juro Martinić Perme

BROJ INDEKSA: 472

KATEDRA: **Katedra za privrednu hidrotehniku**

PREDMET: Modeliranje toka i pronosa u podzemlju

ZADATAK ZA DIPLOMSKI RAD

Tema: Euler-Lagrangeov numerički model pronosa u heterogenim poroznim formacijama

Opis zadatka:

U ovom diplomskom radu potrebno je razviti Euler-Lagrangeovu formulaciju pronosa u heterogenim poroznim formacijama na osnovi Eulerovog nestacionarnog modela tečenja FI kojem je programsko rješenje napisano u Fortranu te koristi klasičnu tehniku konačnih elemenata i Galerkinovu nejaku formulaciju. Proračun treba izvesti iz dva koraka, disperzivnog Eulerovog koraka koji se treba izvesti na bazi postojećeg modela, dok se advektivni Lagrangeov korak treba riješiti pomoću metode povratnog praćenja čestica "particle backtracking". Model treba verificirati na realnim primjerima i traser testovima.

U Splitu, 18.09.2015.

Voditelj Diplomskog rada:

Izv.prof.dr.sc. Hrvoje Gotovac

Predsjednica Povjerenstva
za završne i diplomske ispite:
Prof.dr.sc. Mirela Galić

Sadržaj

1. Uvod.....	1
2. Matematički model procjeđivanja.....	3
2.1. Darcy-ev zakon	3
2.2. Zakon održanja mase na kontrolnom volumenu	4
2.3. Zapreminska svojstva vodonosnika	6
2.3.1. Koncept efektivnog tlaka (Terzaghi, 1925.)	6
2.3.2. Deformacija vodonosnika i zbijanje.....	8
2.4. Izvod jednadžbe toka podzemne vode	10
2.5. Potencijalna formulacija jednadžbe tečenja	11
2.6. Početni i rubni uvjeti	12
2.6.1. Početni uvjeti.....	12
2.6.2. Rubni uvjeti.....	12
3. Numerički nestacionarni model procjeđivanja.....	14
3.1. Variaciona formulacija problema.....	14
3.2. Preslikavanje na virtualno područje	20
3.3. Numerička integracija	25
3.4. Algoritam nestacionarnog proračuna	27
4. Matematički model pronosa.....	30
4.1. Hidrodinamička disperzija	30
4.2. Diferencijalna jednadžba pronosa	34
4.3. Euler-Lagrange formulacija pronosa.....	35

5. Numerički nestacionarni model pronosa	37
5.1. Algoritam proračuna	37
5.2. Početni i rubni uvjeti	39
5.2.1. Početni uvjeti.....	39
5.2.2. Rubni uvjeti.....	39
5.3. Pogreške interpolacije	40
6. Verifikacija numeričkog modela	41
6.1. Pronos u heterogenom vodonosniku uslijed jednolikog srednjeg tečenja.....	41
6.1.1. Opis problema	41
6.1.2. Rezultati proračuna	43
6.2. Traser test s dva bunara.....	67
6.2.1. Opis problema	67
6.2.2. Rezultati proračuna	71
7. Zaključak	87
8. Prilozi.....	88
8.1. Potprogram STIFFP_C.....	88
8.2. Potprogram RAT	91
8.3. Vremenska petlja/kontinuirane brzine	97
9. Literatura.....	101

1. UVOD

Modeliranje toka i pronosa u podzemlju danas ima veliku važnost i primjenu kod niza realnih inženjerskih zadataka kao što su procesi kretanja zagađenja i zbrinjavanja otpada, prodora soli u obalne vodonosnike, odvodnjavanja i navodnjavanja, korištenja vode u bunarima za vodoopskrbu, određivanja hidro-geoloških karakteristika vodonosnika kod testova crpljenja i traser testova, kao i mnogih drugih. Numeričko modeliranje pronosa i trasera u heterogenom poroznom mediju uvelike kompliciraju velike brzine i gradijenti koncentracije uzrokovanih prostornom varijacijom hidrauličke propusnosti. Numeričko modeliranje se koristi sve češće za istraživanje ponašanja otopljenih tvari koje se kreću u heterogenom poroznom mediju. U takvim medijima, fluktuacije brzina na mikro skalama doprinose povećanju disperzije i miješanju na makro skalama te uz to uzrokuju povećanje koncentracije otopljene tvari na mikro skalama. Aspekti ovog procesa još nisu dovoljno istraženi, posebno na područjima gdje se geološka promjenjivost ne može adekvatno opisati jednostavnim modelima.

Numerički modeli koji eksplicitno rješavanju varijaciju brzina na mikro skalama mogu pružiti korisne informacije o makrodisperziji (mehanička disperzija uzrokovana efektom miješanja heterogenih brzina sa heterogenosti na većim skalama koji su prisutni u vodonosnicima). Fickov zakon u takvim slučajevima se koristi za disperziju na skali pore dok se advekcija koristi za disperziju uzrokovanu fluktuacijama brzina na skalama većima od skale pore. Kod pronosa/transporta kod kojeg je dominantna advekcija ovakva vrsta problema je vrlo komplicirana i može zahtijevati različite pristupe za razliku od modela kretanja transporta koji uopće ne uzima u obzir fluktuaciju brzina na tako malim skalama.

Lagrangeova (particle-tracking) metoda praćenja čestica za rješavanje pronosa predstavlja oblak zagađenja ili trasera kao konačan broj čestica koje se kreću zbog brzine (advekcije). Koordinate kretanja svih čestica su dobivene pomoću kinematičke jednadžbe gibanja materijalne točke u promjenjivom Lagrangeovom koordinatnom sustavu. Prosječna koncentracije otopljene tvari u kontrolnom volumenu određena je brojanjem čestica koje se nalaze u tom volumenu u svakom vremenskom trenutku. Točnost metode ovisi o broju čestica u kontrolnom volumenu. Što je veći broj čestica to je rješenje preciznije. Ako broj čestica teži ka beskonačnosti, onda i teoretski metoda konvergira. „Random walk“ metoda

osim advektivnog koraka uvodi i disperzivni slučajni korak koji opisuje širenje trasera ili oblaka zagađenja zbog fluktuacija brzina na skali manjoj od skale na kojoj se mjere ili generiraju brzine, tj. definira heterogenost poroznog medija. Ove metode principijelno rješavaju pronos bez numeričkih oscilacija, no to za heterogenije medije često nije slučaj, te je metoda također opterećena mnogim drugim izvorima pogrešaka.

Pomoću Eulerove metode dobiva se rješenje problema pronosa integrirajući advekcjsko-disperzijsku jednadžbu po prethodno definiranoj mreži konačnih elemenata koja je obično fiksna u vremenu. Kod slučajeva sa dominantnom advekcijom ova metoda može biti zahtjevnija, čak i za današnja super računala kada je za postizanje stabilnosti i točnosti potrebno odabrati manje dimenzije konačnih elemenata i manje vremenske korake. Unatoč tome, Eulerova metoda je često korištena zbog mogućnosti koju nudi u rješavanju svih vrsta rubnih i početnih uvjeta te opisa opterećenja u vidu izvora i ponora.

Euler-Lagrangeova pristup spada u hibridnu metodu koja ima značajke i Eulerove i Lagrangeove metode. Većina Euler-Lagrangeovih metoda zasniva se na podjeli problema pronosa/transporta u dva koraka. Prvi korak koristi metodu sličnu metodi praćenje čestica (particle tracking) za rješavanje advektivnog dijela promatrane jednadžbe. Drugi korak se zasniva na Eulerovom pristupu za rješavanje preostalog disperzivnog dijela.

Algoritam ponavlja proračun za ova dva koraka dobijajući tako koncentracije otopljene tvari na diskretnim točkama mreže za odabrane vremenske korake. U nekim slučajevima, hibridna Euler-Lagrangeova metoda može dati bolju točnost i / ili razlučivost od Lagrangeove ili Eulerove metode. Nekoliko studija ukazuju da je točnost modela prostorne interpolacije korištene u advekcijском koraku ima značajan utjecaj na točnost Euler-Lagrangeovim pristupu. To posebno vrijedi kod slučajeva sa dominantnom advekcijom.

U ovom diplomskom radu potrebno je razviti Euler-Lagrangeovu formulaciju pronosa u heterogenim poroznim formacijama na osnovi Eulerovog nestacionarnog modela tečenja FI kojem je programsko rješenje napisano u Fortranu te koristi klasičnu tehniku konačnih elemenata i Galerkinovu nejaku formulaciju. Proračun treba izvesti iz dva koraka, disperzivnog Eulerovog koraka koji se treba izvesti na bazi postojećeg modela, dok se advektivni Lagrangeov korak treba riješiti pomoću metode povratnog praćenja čestica "particle backtracking". Model treba verificirati na realnim primjerima i traser testovima.

2. MATEMATIČKI MODEL PROCJEĐIVANJA

2.1. Darcy-ev zakon

Darcy-ev zakon procjeđivanja kroz porozni medij u punom matričnom obliku je definiran ovim izrazom:

$$q_i(x) = -K_{ij}(x) \frac{\partial h(x)}{\partial x_j} \quad (2.1)$$

gdje je q Darcy – eva brzina ili specifično istjecanje [L/T], h je piezometarska visina [L], x je prostorna koordinata (x, y, z) ili (x_1, x_2, x_3), a K [L/T] je simetričan tenzor hidrauličke propusnosti:

$$K_{ij} = \begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} & K_{13} \\ K_{21} & K_{22} & K_{23} \\ K_{31} & K_{32} & K_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} & K_{13} \\ K_{12} & K_{22} & K_{23} \\ K_{13} & K_{23} & K_{33} \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

gdje je k_{ij} – komponenta tenzora hidrauličke propusnosti koja karakterizira propusnost sredine u i -tom koordinatnom smjeru zbog toka u j -tom koordinatnom smjeru.

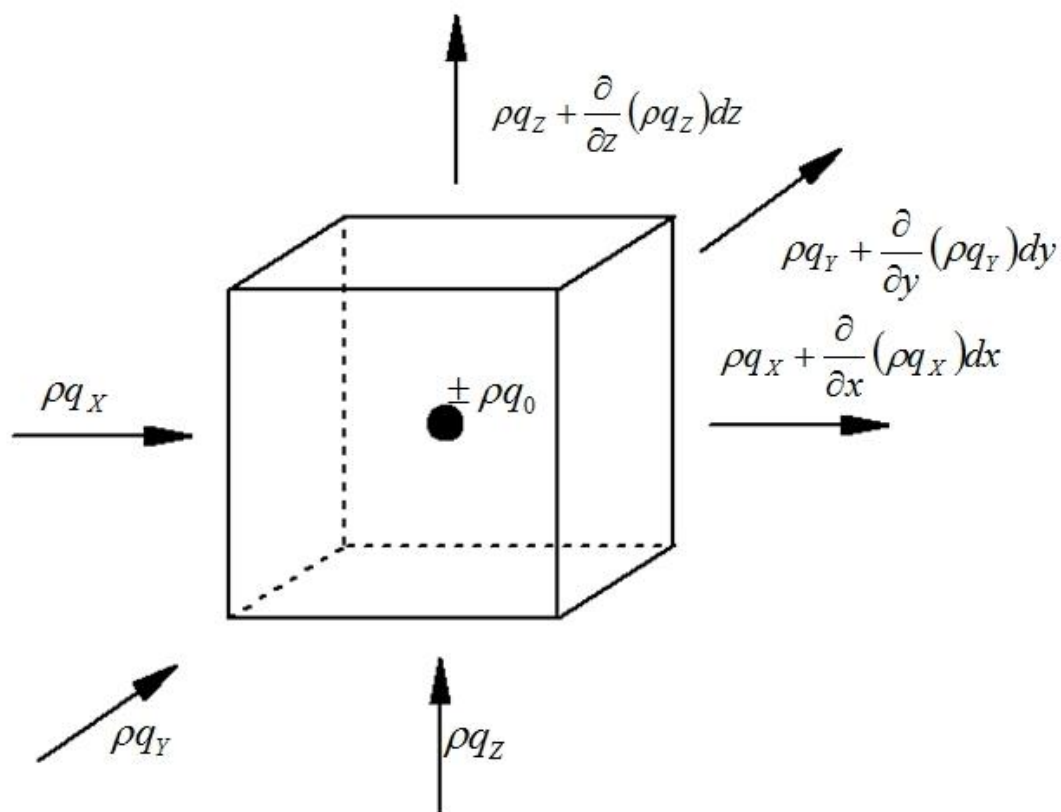
Darcy-ev zakon na ovaj način definira srednje istjecanje kroz cijeli odabrani presjek. Tečenje podzemne vode karakterizira tok kroz porozni medij koji ima dvije faze: čvrstu i pornu fazu. Pošto se tok odvija samo kroz povezani sustav porne faze stvarna brzina toka je:

$$v_i = \frac{q_i}{n} \quad (2.3)$$

gdje je v [L/T] stvarna brzina toka, q [L/T] je Darcy-eva brzina ili specifično istjecanje i n [-] je poroznost.

2.2. Zakon održanja mase na kontrolnom volumenu

Tečenje se matematički opisuje jednačbom kontinuiteta – zakona održanja mase (2.4) koji se izvodi promatranjem toka kroz kontrolni volumen (Slika 2.1.). U općenitom slučaju nestacionarnog tečenja, zakon održanja mase se manifestira u tome što neto protok mase vode kroz kontrolni volumen mora biti jednak vremenskoj promjeni mase tekućine unutar volumena. Korisno je napomenuti da u bilo kojem mediju i pri bilo kojim fizikalnim procesima zakon održanja neke mjerljive veličine se riječima opisuje kao: vremenska promjena veličine jednaka je negativnoj divergenciji toka te veličine. U podzemnoj sredini i korištenjem Darcy-evog zakona za protok vode, zakon održanja mase matematički se opisuje kao:



Slika 2.1. Kontrolni volumen

$$\begin{aligned} & \rho q_x dydz - \left(\rho q_x + \frac{\partial(\rho q_x)}{\partial x} dx \right) dydz + \rho q_y dx dz - \left(\rho q_y + \frac{\partial(\rho q_y)}{\partial y} dy \right) dx dz + \rho q_z dx dy - \\ & \left(\rho q_z + \frac{\partial(\rho q_z)}{\partial z} dz \right) dx dy = \frac{\partial(\rho n)}{\partial t} + \rho q_o dx dy dz \end{aligned} \quad (2.4)$$

ili kraće:

$$-\frac{\partial(\rho q_x)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho q_y)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho q_z)}{\partial z} = \frac{\partial(\rho n)}{\partial t} + \rho q_o \quad (2.5)$$

iz čega slijedi:

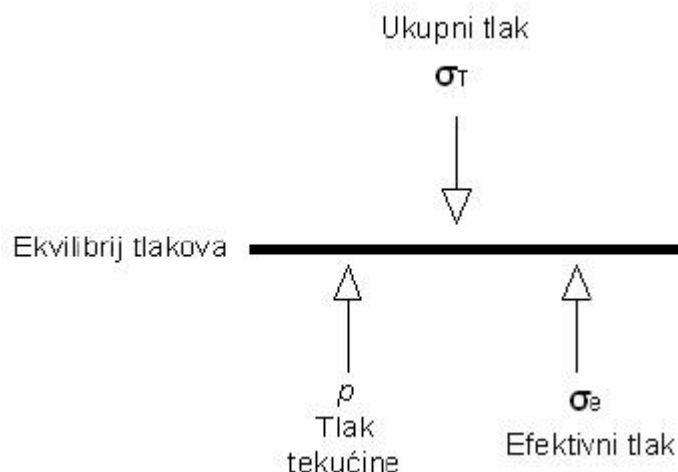
$$-\operatorname{div}(\rho q) = \frac{\partial(\rho n)}{\partial t} + \rho q_o \quad (2.6)$$

Obično se uzima pretpostavka da je voda nestišljiva pa izraz (2.6) postaje:

$$-\operatorname{div}(q) = \frac{\partial(\rho n)}{\partial t} + q_o \quad (2.7)$$

2.3. Zapreminska svojstva vodonosnika

2.3.1. Koncept efektivnog tlaka (Terzaghi, 1925.)



Slika 2.2. Ravnoteža tlakova

σ_T - ukupni tlak koji djeluje prema dolje na plohu (može biti rezultat težine same porozne sredine s vodom, a može biti rezultat građevnog objekta).

Ravnotežu ukupnom tlaku daje tlak tekućine p i efektivni tlak σ_e . Upravo ovaj efektivni tlak djeluje na skelet porozne sredine i uzrokuje preraspodjelu zrna poroznog materijala koja konačno rezultira kompresijom skeleta porozne sredine. U ravnotežnom stanju možemo pisati:

$$\sigma_T = \sigma_e + p \quad (2.8)$$

odnosno u obliku promjene (diferencijalnom obliku):

$$d\sigma_T = d\sigma_e + dp \quad (2.9)$$

U većini slučajeva težina porozne formacije ili težina objekta konstantna u vremenu $d\sigma_T = 0$ što rezultira jednakosti

$$d\sigma_e = -dp \quad (2.10)$$

(porast tlaka tekućine prati pad efektivnog tlaka).

Dakle, efektivni tlak u bilo kojoj točki poroznog sistema kontroliran je tlakom tekućine u toj točki. Kako je u bilo kojoj točki

$$p = \rho g(h - z) \quad (2.11)$$

tj. $z = konst.$, svaka promjena efektivnog tlaka je kontrolirana promjenom hidrauličke visine

$$d\sigma_e = -\rho g dh. \quad (2.12)$$

Ova analiza efektivnog pritiska omogućava definiciju stišljivosti porozne sredine u obliku:

$$\alpha = \frac{-dV_U / V_U}{d\sigma_e} \quad (2.13)$$

gdje je V_U ukupni volumen porozne mase, definiran kao

$$V_U = V_S + V_V \quad (2.14)$$

pri čemu V_S označava volumen krute faze dok V_V označava volumen tekućine.

Povećanje efektivnog napona σ_e rezultira smanjenjem dV_U ukupnog volumena porozne sredine kao rezultat reorganizacije zrnatog materijala porozne sredine. Kako se općenito može pisati,

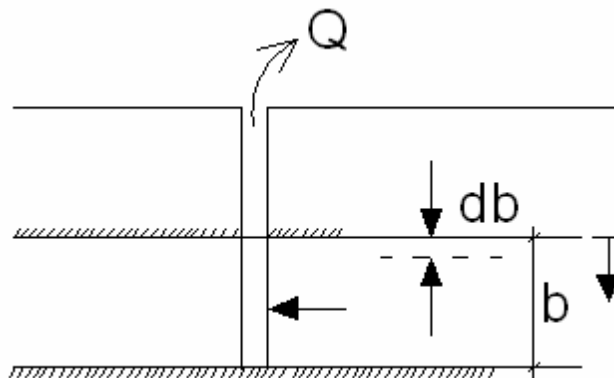
$$dV_U = dV_S + dV_V \quad (2.15)$$

tada pod pretpostavkom da je kruta faza nestišljiva ($dV_S = 0$) pišemo

$$dV_U = dV_V. \quad (2.16)$$

Povećanje $d\sigma_e$ (efektivni tlak) rezultira smanjenjem dV_U koje rezultira preraspodjelom poroznog materijala.

2.3.2. Deformacija vodonosnika i zbijanje



Slika 2.3. Deformacija vodonosnika uslijed crpljenja

Ako je $\sigma_T = \text{const.}$, smanjenje hidrauličke visine $-dh$ rezultira povećanjem efektivnog napona σ_e . Slijedi:

$$db = -\alpha b d\sigma_e = -\alpha b \rho g dh \quad (2.17)$$

(negativni znak pokazuje da se radi o smanjenju debljine vodonosnika). Dakle, prekomjerno pumpanje prouzrokuje horizontalne gradijente, h opada, σ_e raste i vodonosnik se zbija. Ako se ovo zbijanje propagira sve do površine zemlje tada dolazi do pojave ("land subsidence") spuštanja tla.

Specifična zapremina vodonosnika se definira kao volumen vode kojeg jedinični volumen vodonosnika ispusti uslijed jediničnog spuštanja hidrauličke visine (potencijala). Padom hidrauličkog potencijala opada tlak tekućine i raste efektivni napon σ_e . Ispuštena voda iz zapremine vodonosnika rezultat je dva mehanizma: zbijanja vodonosnika uslijed povećanja σ_e i uslijed opadanja tlaka tekućine p . U prvom slučaju, rezultat promjene volumena je ispuštanje vode, pa se dobiva:

$$dV_V = -dV_U = \alpha V_U d\sigma_e = \alpha \rho g \quad (2.18)$$

pri čemu je zadnja jednakost dobivena uzimanjem jediničnog volumena, $V_T = 1$, te činjenicom da je promjena efektivnog tlaka σ_e kontrolirana promjenom hidrauličke visine,

$d\sigma_e = -\rho g dh$ (2.12). Jedinično opadanje hidrauličke visine rezultira sa $dh = -1$. U drugom slučaju voda koja se izluči opadanjem tlaka može se pisati:

$$dV_v = \beta n \rho g \quad (2.19)$$

pri čemu smo koristili

$$V_v = n V_u \quad (2.20)$$

(n je porozitet) i

$$dp = \rho g d(h - z) \quad (2.21)$$

uz jedinični volumen i jedinično opadanje hidrauličkog tlaka, $dh = -1$.

Specifični volumen je zbroj navedena dva mehanizma koji opisuju način ispuštanja vode iz jedinične zapremine vodonosnika:

$$S_s = \rho g (\alpha + n\beta) \quad (2.22)$$

Jedinica gornjeg izraza je [dužina-1] što i proizlazi iz definicije koja kaže da je S_s volumen vode iz jediničnog volumena vodonosnika ispušten pod djelovanjem jediničnog pada hidrauličke visine. U vodonosniku koji je pod tlakom (npr., hidraulička visina iznad gornjeg nivoa vodonosnika) i koji ima visinu b , definiramo koeficijent zapremine kao:

$$S = S_s b = \rho g b (\alpha + n\beta) \quad (2.23)$$

$S \rightarrow$ volumen vode kojeg vodonosnik može ispustiti po jediničnoj površini i jediničnom padu komponente hidrauličke visine okomite na tu površinu. Kod vodonosnika sa slobodnim vodnim licem parametar zapremine se definira kao specifična izdašnost ("specific yield"), S_y .

$S_y \rightarrow$ volumen vode kojeg vodonosnik sa slobodnim licem ispusti po jediničnoj površini kao rezultat jediničnog pada hidrauličke visine.

U vodonosniku sa slobodnom vodnim licem koeficijent uskladištenja je približno jednak specifičnom otpuštanju ili efektivnoj poroznosti (n_e). Vrijednosti koeficijenta uskladištenja za slojeve pod tlakom kreću se od 0.0001-0.001, a za slojeve sa slobodnim vodnim licem 0.01-0.35.

Korištenjem Darcy-evog zakona za protok vode, zakon održanja mase matematički se može opisati kao:

$$-\text{div}(\rho q) = \rho S_s \frac{\partial h}{\partial t} + \rho q_0 \quad (2.24)$$

odnosno u slučaju pretpostavke nestišljive tekućine $\rho(x, y, z) = \text{const.}$, gustoća se eliminira iz gornjeg izraza:

$$-\text{div}(q) = S_s \frac{\partial h}{\partial t} + q_0 \quad (2.25)$$

2.4. Izvod jednadžbe toka podzemne vode

Ako se u zakon održanja (2.25) uvrsti generalizirani Darcy-ev izraz za brzinu ili specifično istjecanje q (2.1), dobiva se puna jednadžba nestacionarnog tečenja kroz anizotropni i heterogeni medij:

$$-\text{div}\left(-K_{ij}(x) \frac{\partial h(x)}{\partial x_j}\right) = S_s \frac{\partial h}{\partial t} + q_0 \quad (2.26)$$

ili raspisano:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} + K_{xy} \frac{\partial h}{\partial y} + K_{xz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yx} \frac{\partial h}{\partial x} + K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} + K_{yz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zx} \frac{\partial h}{\partial x} + K_{zy} \frac{\partial h}{\partial y} + K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) \\ & = S_s \frac{\partial h}{\partial t} + q_0 \end{aligned} \quad (2.27)$$

Primijenjeno na dvodimenzionalni sustav koji se rješava programskim zadatkom jednažba glasi:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} + K_{xy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yx} \frac{\partial h}{\partial x} + K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + Q = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2.28)$$

gdje je Q količina crpljenja ili prihranjivanja u jedinici vremena po jediničnom volumenu medija, odnosno Q je gustoća toka u jedinici vremena.

2.5. Potencijalna formulacija jednažbe tečenja

Potencijalna funkcija $\Phi(x,y)$ definirana je na sljedeći način:

$$q_x = -K_{xx} \frac{\partial \Phi}{\partial x} - K_{xy} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \quad ; \quad q_y = -K_{yx} \frac{\partial \Phi}{\partial x} - K_{yy} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \quad (2.29)$$

tako da vrijedi:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} = \frac{\partial h}{\partial x} \quad ; \quad \frac{\partial \Phi}{\partial y} = \frac{\partial h}{\partial y} \quad (2.30)$$

te funkcija potencijala glasi:

$$\Phi(x, y) = h(x, y) + C \quad (2.31)$$

što znači da se funkcija potencijala i piezometarske visine razlikuju samo za konstantu, dakle linije jednakih piezometarskih visina su ujedno i linije jednakih potencijala, tzv. ekvipotencijala. Sada izraz (2.28) postaje:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial \Phi}{\partial x} + K_{xy} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yx} \frac{\partial \Phi}{\partial x} + K_{yy} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + Q = S_s \frac{\partial \Phi}{\partial t} \quad (2.32)$$

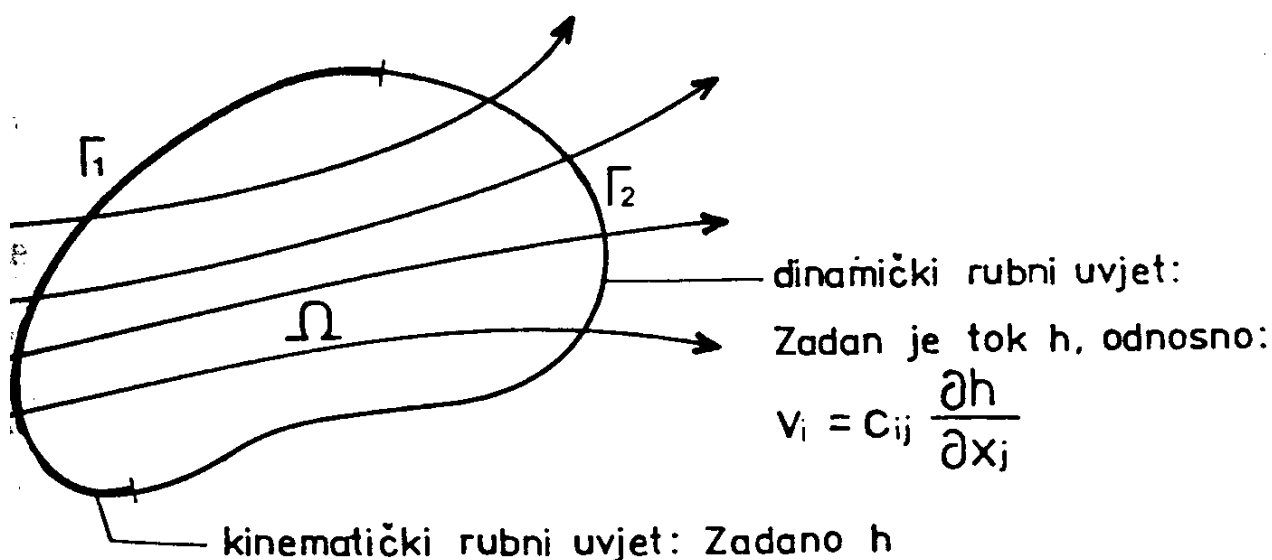
2.6. Početni i rubni uvjeti

2.6.1. Početni uvjeti

Početni uvjeti predstavljaju raspored potencijala (odnosno piezometarske razine podzemne vode) u početnom trenutku. Poznavanje početnih uvjeta nužno je za rješavanje jednadžbe nestacionarnog toka. Utjecaj početnih uvjeta na nestacionarnu pojavu koja je podvrgnuta rubnim uvjetima iščezava s vremenom, isto tako nestacionarna pojava se stacionira bez obzira na početne uvjete ako su rubni uvjeti stacionarni.

2.6.2. Rubni uvjeti

Generalno, kinematički ili prisilni rubni uvjeti se zadaju kao poznate vrijednosti intenzivnog polja, a predstavljaju poznate vrijednosti potencijalne ili strujne funkcije na rubu. Dinamički ili prirodni rubni uvjeti se zadaju preko derivacije intenzivnog polja, a fizikalno predstavljaju tok unutrašnjeg ekstenzivnog polja u smjeru vanjske normale na granici promatranog volumena, odnosno promjenu potencijalne ili strujne funkcije u zadanom smjeru.



Slika 2.4. Prikaz rubnih uvjeta

Rubni uvjeti se definiraju na sljedeći način za formulaciju potencijalne formulacije: na dijelu granice (ruba) gdje je poznata piezometarska visina ili potencijal Φ zadaje se prisilni ili Dirichletov rubni uvjet $\Phi=\Phi_R$, i ovaj rubni uvjet mora biti zadan makar u jednoj točki, jer bi u protivnom cjelokupno rješenje bilo pomaknuto za neku nepoznatu konstantu ili kruti pomak.

Na drugom dijelu granice zadaje se prirodni ili dinamički (Cauchy) rubni uvjet:

$$(K_{xx} \frac{\partial \Phi}{\partial x} + K_{xy} \frac{\partial \Phi}{\partial y}) n_x + (K_{yx} \frac{\partial \Phi}{\partial x} + K_{yy} \frac{\partial \Phi}{\partial y}) n_y + q = 0 \quad (2.33)$$

gdje su n_x i n_y kosinusi kuta između osi x , y i vanjske normale na rubu, respektivno, dok je q zadani flux na rubu. Ovdje se razlikuje osim ovog generalnog dinamičkog rubnog uvjeta i specifičan slučaj kada je $q=0$, tada je fluks kroz granicu jednak nuli što znači da je zapravo riječ o nepropusnoj granici (Neumannov prirodni rubni uvjet).

3. NUMERIČKI NESTACIONARNI MODEL PROCJEĐIVANJA

3.1. Variaciona formulacija problema

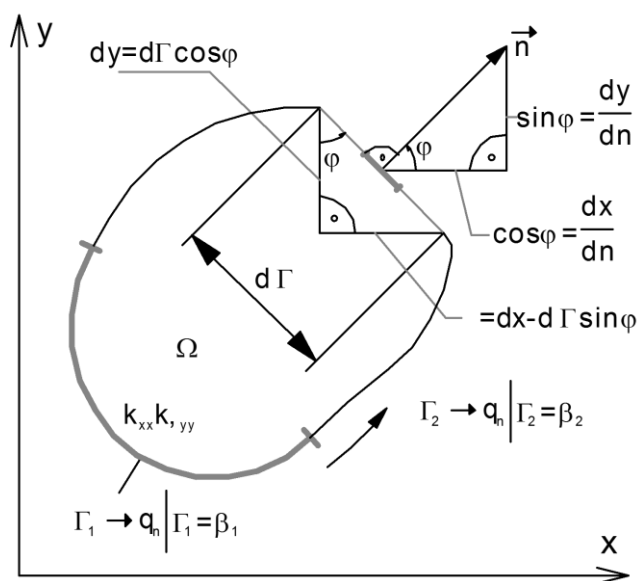
Polazeći od matematičkog modela potencijalnog strujanja može se prijeći na varijacionu formulaciju koja u praktičnoj primjeni ima niz prednosti. Pod varijacionom formulacijom podrazumjeva se veoma široki spektar korištenja varijacionog računa, te fizikalnih karakteristika i posebnosti konkretnog problema. Ovdje će se ograničiti na Galjerkinovu nejaku formulaciju.

Zadano je otvoreno područje Ω , ograničeno granicom Γ za koju vrijedi:

$$\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \quad \Gamma_1 \cap \Gamma_2 = \emptyset \quad (3.1)$$

Na dijelu granice Γ_1 zadan je kinematički rubni uvjet, odnosno poznato je rješenje $\Phi|_{\Gamma_1} = \beta_1$, a na dijelu granice Γ_2 zadan je protok kroz granicu u obliku:

$$q_u|_{\Gamma_2} = ((K_{xx} \frac{\partial \Phi}{\partial x} + K_{xy} \frac{\partial \Phi}{\partial y})n_x + (K_{yx} \frac{\partial \Phi}{\partial x} + K_{yy} \frac{\partial \Phi}{\partial y})n_y)|_{\Gamma_2} = [q]|_{\Gamma_2} \quad (3.2)$$



Slika 3.1. Područje i elementi granice područja

Područje i rubni uvjeti prikazani su na slici 3.1. Polazeći od diferencijalne jednadžbe kvazipotencijalnog strujanja (2.28) i rubnih uvjeta prikazanih na slici 3.1., te koristeći Galjerkinovu nejaku formulaciju sa testnim funkcijama w , slijedi:

$$\int_{\Omega} S_s \frac{\partial h}{\partial t} w d\Omega = \int_{\Omega} \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + Q \right] w d\Omega \quad (3.3)$$

gdje je h polje potencijalne funkcije.

Koristeći Green – Gauss – Ostrogradski poučak i pravilo parcijalne integracije može se smanjiti stupanj derivacije polja potencijala:

$$\int_{\Omega} S_s \frac{\partial h}{\partial t} w d\Omega = \int_{\Gamma} w K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} n_i d\Gamma - \int_{\Omega} K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \frac{\partial w}{\partial x_i} d\Omega + \int_{\Omega} w Q d\Omega \quad (3.4)$$

Približno rješenje je dano u sljedećem obliku:

$$h = h_r N_r(x) \quad ; \quad r = 1, 2, 3, \dots, m \quad (3.5)$$

gdje su N_r bazne funkcije, a h_r nepoznati parametri koji predstavljaju vrijednosti traženog polja potencijala u čvorovima mreže konačnih elemenata. Kod Galjerkinove formulacije test funkcije su jednake baznim funkcijama:

$$w_s = N_s(x) \quad ; \quad s = 1, 2, 3, \dots, m \quad (3.6)$$

Uvrštenjem (3.2), (3.5) i (3.6) u izraz (3.4) dobije se sustav od m običnih diferencijalnih jednadžbi:

$$\frac{dh_r}{dt} \int_{\Omega} S_s N_r N_s d\Omega + h_r \int_{\Omega} K_{ij} \frac{\partial N_r}{\partial x_j} \frac{\partial N_s}{\partial x_i} d\Omega = \int_{\Omega} Q N_s d\Omega + \int_{\Gamma_1} N_s K_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} n_i d\Gamma_1 + \int_{\Gamma_2} N_s q d\Gamma_2 \quad (3.7)$$

$$C_{rs} \frac{dh_r}{dt} + D_{rs} h_r = F_s + X_s + Q_s \quad (3.8)$$

gdje je,

$$C_{rs} = \int_{\Omega} S_s N_r N_s d\Omega \quad (3.9)$$

kapacitivna matrica,

$$D_{rs} = \int_{\Omega} K_{ij} \frac{\partial N_r}{\partial x_j} \frac{\partial N_s}{\partial x_i} d\Omega \quad (3.10)$$

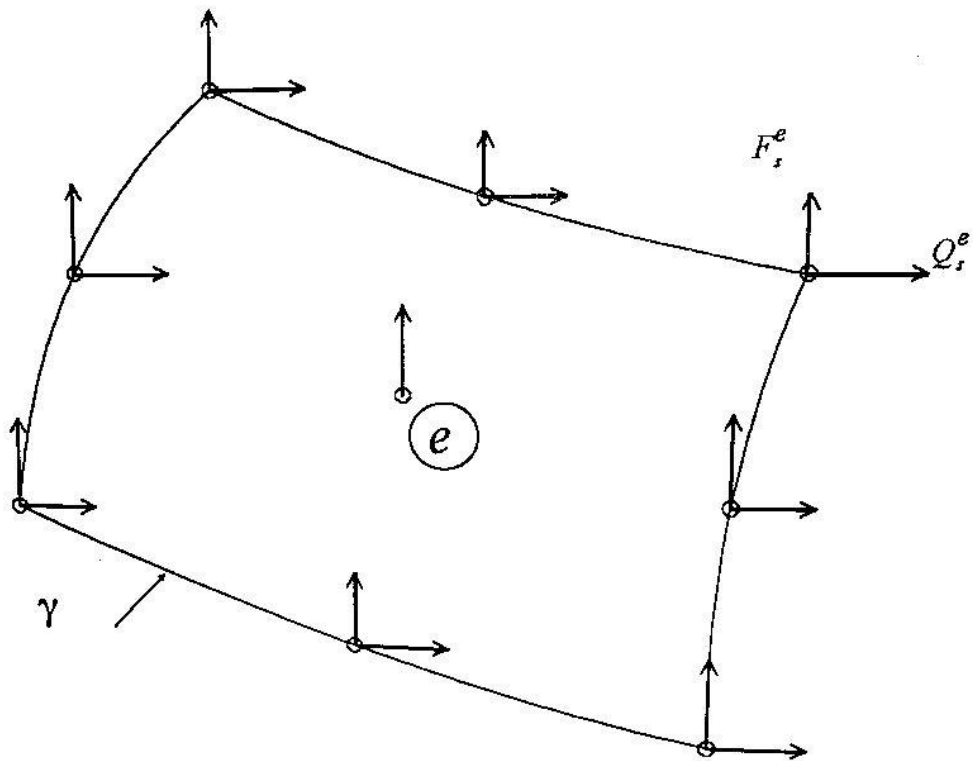
matrica provođenja,

$$F_s = \int_{\Omega} Q N_s d\Omega \quad ; \quad Q_s = \int_{\Gamma_2} N_s q d\Gamma_2 \quad (3.11)$$

vektori vanjskog opterećenja i rubnog dotoka na dijelu granice s prirodnim rubnim uvjetom, a

$$X_s = \int_{\Gamma_1} N_s K_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} n_i d\Gamma_1 = \int_{\Gamma_1} N_s k_{ij} \frac{\partial (u_r N_r)}{\partial x_j} n_i d\Gamma_1 \quad (3.12)$$

vektor reakcija ili rubnih dotoka na dijelu granice s prisilnim rubnim uvjetom.



Slika 3.2. Konačni element kao diskretni sustav

Na svakom konačnom elementu (slika 3.2.) formalno vrijedi zapis (3.8) jer Galjerkinova formulacija vrijedi za cijelu domenu, ali također i za svaki njen pojedini dio, odnosno konačni element, za kojeg se može po istom principu napisati diskretni sustav jednažbi:

$$C_{rs}^e \frac{dh_r}{dt} + D_{rs}^e h_r = F_s^e + X_s^e + Q_s^e \quad ; r, s = 1, 2, 3, \dots, M \quad (3.13)$$

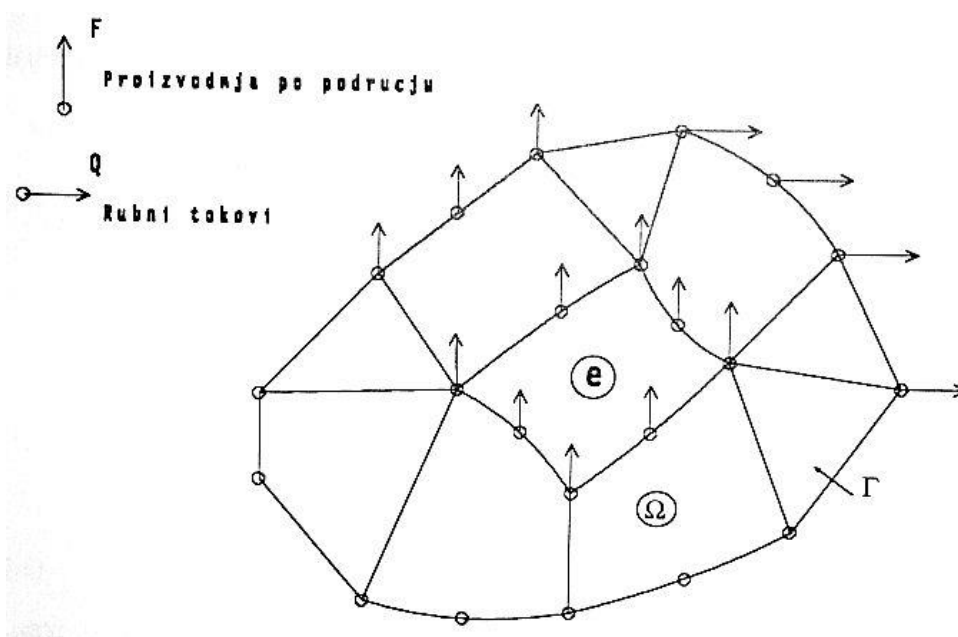
gdje je M ukupni broj čvorova na konačnom elementu. Matrice i vektori konačnog elementa dobiju se tako da se globalna baza zamijeni lokalnom, tj. oblikovnim funkcijama, područje Ω s elementom e , te rub Γ s rubom elementa γ :

$$C_{rs}^e = \int_e S_r n_r S_s n_s de \quad (3.14)$$

$$D_{rs}^e = \int_e K_{ij} \frac{\partial n_r}{\partial x_j} \frac{\partial n_s}{\partial x_i} de \quad (3.15)$$

$$F_s^e = \int_e Q n_s de \quad ; \quad Q_s^e = \int_{\gamma_2} n_s q d\gamma_2 \quad (3.16)$$

$$X_s^e = \int_{\gamma_1} n_s K_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} n_i d\gamma_1 = \int_{\gamma_1} n_s k_{ij} \frac{\partial(u_r n_r)}{\partial x_j} n_i d\gamma_1 \quad (3.17)$$



Slika 3.3. Diskretni sustav

Matrica provođenja na svakom konačnom elementu čini lokalnu matricu tog konačnog elementa. Vektori na desnoj strani (3.8) čine lokalni vektor desne strane (3.13) konačnog elementa.

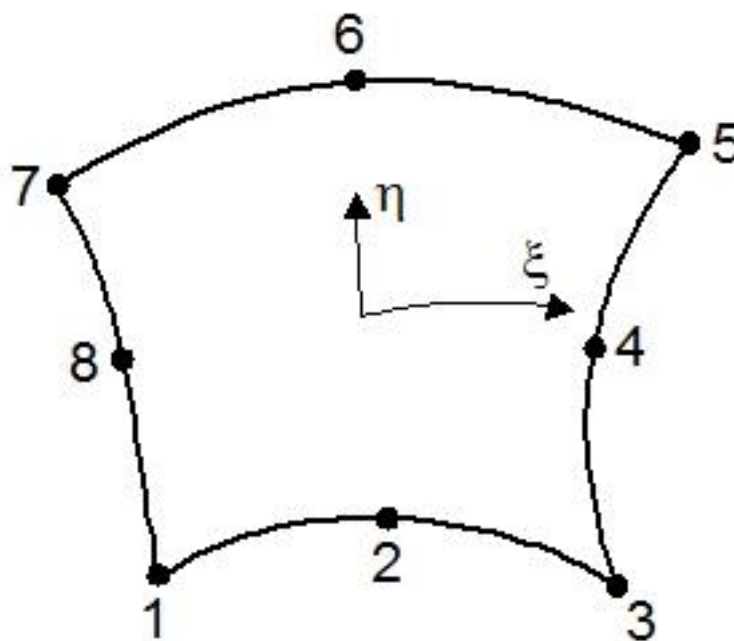
Asembliranjem (slaganjem) globalne matrice po svim konačnim elementima i njihovim lokalnim matricama i vektorima kreiramo diskretni sustav (3.8) s m jednadžbi i isto toliko nepoznanica. Vektori na desnoj strani izraza (3.8) predstavljaju koncentrirane protoke u čvorovima konačnog elementa. Njihov predznak ovisi o tome da li je tok usmjeren prema čvoru (pozitivan predznak) ili od čvora (negativan predznak), odnosno da li masa ulazi ili izlazi iz čvora. Ovo programsko rješenje dopušta da se koncentrirani

protok može zadati u bilo kojem čvoru. Taj protok u tom slučaju ima interpretaciju crpljenja ili prihranjivanja. Rubni dotok na dijelu granice s prirodnim rubnim uvjetom može se zadati pomoću koncentriranih protoka ili fluksa $-q$. Fluks $-q$ je pozitivan ako je usmjeren suprotno od smjera vanjske normale jer tada podzemna voda ulazi u područje. Prihvaćanje takve konvencije predznaka omogućeno je izrazima (3.2) i (3.8).

Sustav (3.8) nije regularan jer mu nedostaju rubni uvjeti. Prisilni rubni uvjeti se uvode tako da se za sve čvorove ruba Γ_1 pripadajuće jednadžbe “zapamte” i zamijene s novim jednadžbama iz kojih se direktno mogu izračunati vrijednosti funkcije rješenja u tim čvorovima. Prirodni rubni uvjeti zadaju se direktno preko vrijednosti fluksa $-q$. U rubnim čvorovima u kojima nije specificiran rubni uvjet smatra se da je automatski zadan fluks $-q$ koji je jednak nuli. U preostalim jednadžbama koje su ostale nepromijenjene vektor reakcija je jednak nuli zbog svojstava odabranih test funkcija koje ne kidaju kinematičke veze i poništavaju se na rubu Γ_1 , pa vektor reakcija X ne ulazi u sustav (3.8) koji nakon uvrštenja svih rubnih uvjeta postaje regularan i riješi se po nepoznanicama h_r . Nakon toga iz “zapamćenih” jednadžbi jednostavno se mogu izračunati reakcije ili rubni dotoci u čvorovima u kojima je zadan prisilni rubni uvjet. Na kraju, uvjet ravnoteže protoka na cijelom području mora i dalje vrijediti, pa zbroj protoka Q , F i X mora biti jednak nuli.

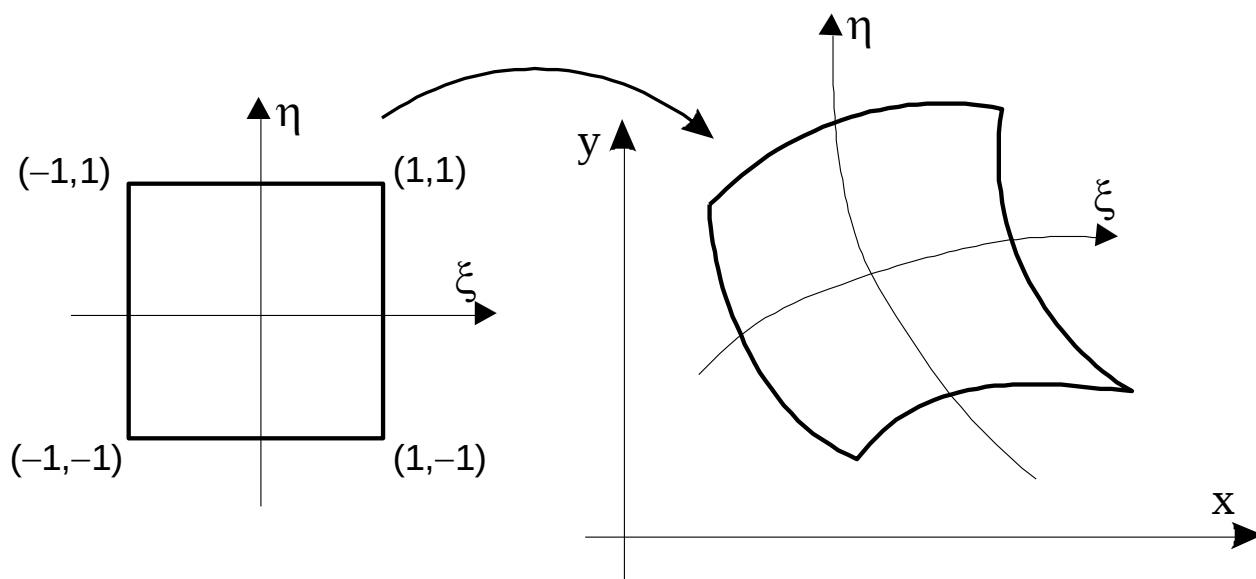
3.2. Preslikavanje na virtualno područje

Prvi korak u numeričkoj analizi dvodimenzionalnog problema kakav se obrađuje u ovom programu je podjela kontinuuma na konačne elemente. Za generiranje mreže odabrani su osmočvorni kvadrilateralni konačni elementi (Serendipity) koji vrlo dobro opisuju područje – Slika 3.4.. Vršiti se **izoparametarsko** preslikavanje što znači da se za opisivanje geometrije područja i za funkcionalno prikazivanje potencijala (opisivanje približnog rješenja) koriste iste bazne funkcije.

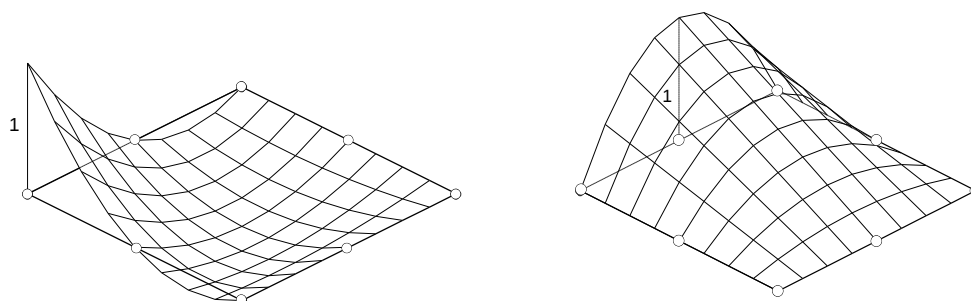


Slika 3.4. Izoparametarski kvadrilateralni 8 – čvorni element

Prvi korak u izoparametarskoj formulaciji je definiranje bezdimenzionalnog koordinatnog sustava (ξ, η) s ishodištem u središtu elementa. Na ovaj način su bezdimenzionalne koordinate četiri ugaone točke uvijek +1 ili -1 (Slika 3.5.). Sljedeći korak je odabiranje baznih funkcija $\mathbf{N} = [N_1, \dots, N_i, \dots, N_n]$ pomoću kojih se vrši preslikavanje jediničnog kvadrilateralnog elementa u realno područje definirano koordinatnim sustavom (x, y) , te izražavanje tih funkcija preko bezdimenzionalnih koordinata ξ, η .



Slika 3.5. Preslikavanje jediničnog elementa



Slika 3.6. Bazne funkcije izoparametarskih konačnih elemenata za rubni i središnji čvor

Bazne funkcije 8 – čvornog konačnog elementa i njihove derivacije su prikazane u tablici 3.1.

Čvor	Lokalne koordinate čvora		Bazne funkcije	Derivacije baznih funkcija	
	ξ_i	η_i		$\partial N_i / \partial \xi$	$\partial N_i / \partial \eta$
1	-1	-1	$-\frac{1}{4} \cdot (1-\xi)(1-\eta)(1+\xi+\eta)$	$\frac{1}{4} \cdot (2\xi+\eta) \cdot (1-\eta)$	$\frac{1}{4} \cdot (1-\xi) \cdot (\xi+2\eta)$
2	0	-1	$\frac{1}{2} \cdot (1-\xi^2)(1-\eta)$	$-\xi \cdot (1-\eta)$	$-\frac{1}{2} \cdot (1-\xi^2)$
3	1	-1	$\frac{1}{4} \cdot (1+\xi)(1-\eta)(-1+\xi-\eta)$	$\frac{1}{4} \cdot (2\xi-\eta) \cdot (1-\eta)$	$-\frac{1}{4} \cdot (1+\xi) \cdot (\xi-2\eta)$
4	1	0	$\frac{1}{2} \cdot (1+\xi)(1-\eta^2)$	$\frac{1}{2} \cdot (1-\eta^2)$	$-(1+\xi) \cdot \eta$
5	1	1	$\frac{1}{4} \cdot (1+\xi)(1+\eta)(-1+\xi+\eta)$	$\frac{1}{4} \cdot (2\xi+\eta) \cdot (1+\eta)$	$\frac{1}{4} \cdot (1+\xi) \cdot (\xi+2\eta)$
6	0	1	$\frac{1}{2} \cdot (1-\xi^2)(1+\eta)$	$-\xi \cdot (1+\eta)$	$\frac{1}{2} \cdot (1-\xi^2)$
7	-1	1	$\frac{1}{4} \cdot (1-\xi)(1+\eta)(-1-\xi+\eta)$	$\frac{1}{4} \cdot (2\xi-\eta) \cdot (1+\eta)$	$-\frac{1}{4} \cdot (1-\xi) \cdot (\xi-2\eta)$
8	-1	0	$\frac{1}{2} \cdot (1-\xi)(1-\eta^2)$	$-\frac{1}{2} \cdot (1-\eta^2)$	$-(1-\xi) \cdot \eta$

Tablica 3.1. Bazne funkcije i njihove derivacije

Svaka od ovih baznih funkcija ima jediničnu vrijednost u čvoru kojemu je pridružena, a u preostalim čvorovima elementa ima vrijednost jednaku nuli. Bazne funkcije konačnog elementa imaju i svojstvo da je njihov zbroj u bilo kojoj točki unutar elementa također jednak jedinici. Izrazi za bazne funkcije strogo ovise o orijentaciji lokalnih koordinatnih smjerova ξ i η . Varijable ξ i η su krivocrtno koordinate pa se njihov smjer mijenja s položajem elementa u realnoj ravnini. Međutim, njihovi opći smjerovi su uvijek poznati u odnosu na stranice elementa. Uvažavaju se sljedeće zavisnosti između redosljeda numeriranja čvorova elementa i lokalnih osi ξ i η :

a) čvorovi elementa se označavaju u pozitivnom smjeru obilaska elementa (suprotno od kazaljke na satu) počinjući od bilo kojeg ugaonog čvora.

b) pozitivan smjer osi ξ je tada definiran, za 8 – čvorni konačni element, pomicanjem duž stranice elementa počevši od prvog čvora prema drugom i trećem (Slika 3.4)

c) pozitivan smjer osi η je definiran pomicanjem duž stranice elementa počevši od trećeg čvora prema četvrtom i petom (Slika 3.4.).

Vrijednosti koordinata $x(\xi, \eta)$ i $y(\xi, \eta)$ u bilo kojoj točki (ξ, η) konačnog elementa izražavaju se pomoću baznih funkcija i koordinata čvornih točaka elementa kao:

$$\begin{aligned} x(\xi, \eta) &= \sum_{i=1}^n N_i(\xi, \eta) \cdot x_i \\ y(\xi, \eta) &= \sum_{i=1}^n N_i(\xi, \eta) \cdot y_i \end{aligned} \quad (3.18)$$

gdje su (x_i, y_i) koordinate čvora i , N_i je bazna funkcija pridružena čvoru i prema tablici 3.1, a n je broj čvorova konačnog elementa. Nepoznata funkcija rješenja $\mathbf{h}$ (u našem slučaju potencijalna funkcija) na svakom konačnom elementu izražava se pomoću n parametara h_i koji su pridruženi vrijednostima ove funkcije u čvornim točkama u obliku:

$$h(\xi, \eta) = \sum_{i=1}^n N_i(\xi, \eta) \cdot h_i \quad (3.19)$$

Analogno, derivacije neke funkcije $f(\xi, \eta)$ po smjerovima ξ i η dobivaju se kao:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial \xi}(\xi, \eta) &= \sum_{i=1}^n \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \cdot f_i \\ \frac{\partial f}{\partial \eta}(\xi, \eta) &= \sum_{i=1}^n \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \cdot f_i \end{aligned} \quad (3.20)$$

gdje $f(\xi, \eta)$ mogu biti koordinate točaka $x(\xi, \eta)$, $y(\xi, \eta)$ ili komponente vektora $h(\xi, \eta)$. Za konstruiranje matrice elementa prema (3.8), treba odrediti hidrauličke gradijente koji se dobiju deriviranjem potencijala po x i y smjeru. Međutim, u formulaciji pomoću MKE, (izraz 3.19), funkcija rješenja $\mathbf{h}$ je funkcija koordinata ξ i η . Dakle, mora se naći veza

između derivacija po x i y smjeru i derivacija po smjerovima ξ i η . To se vrši pomoću pravila deriviranja složene funkcije:

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial \xi} &= \frac{\partial x}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial f}{\partial y} \\ \frac{\partial f}{\partial \eta} &= \frac{\partial x}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial f}{\partial y}\end{aligned}\tag{3.21}$$

odnosno u matričnom obliku:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial \xi} \\ \frac{\partial f}{\partial \eta} \end{pmatrix} = \mathbf{J} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial y} \end{pmatrix}\tag{3.22}$$

gdje je $\mathbf{J}$ matrica prvih derivacija dimenzija 2×2 , a zove se matrica preslikavanja ili Jacobijeva matrica (Jacobiana), i može se napisati koristeći prethodne izraze u obliku:

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^n \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \cdot x_i & \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \cdot y_i \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \cdot x_i & \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \cdot y_i \end{bmatrix}\tag{3.23}$$

Kartezijske derivacije funkcije $f(\xi, \eta)$ se prema tome određuju kao

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial y} \end{pmatrix} = \mathbf{J}^{-1} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial \xi} \\ \frac{\partial f}{\partial \eta} \end{pmatrix}\tag{3.24}$$

gdje je $\mathbf{J}^{-1}$ inverzna matrica preslikavanja

$$\mathbf{J}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \xi}{\partial x} & \frac{\partial \eta}{\partial x} \\ \frac{\partial \xi}{\partial y} & \frac{\partial \eta}{\partial y} \end{bmatrix} = \frac{1}{\det \mathbf{J}} \cdot \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial \eta} & -\frac{\partial y}{\partial \xi} \\ -\frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \xi} \end{bmatrix}\tag{3.25}$$

Dakle, da bi se mogle odrediti Kartezijeve derivacije, determinanta Jacobiane mora biti različita od nule odnosno sustav čvorova konačnog elementa mora biti takav da matrica $\mathbf{J}$ ne bude singularna. Kartezijeve derivacije baznih funkcija određuju se korištenjem pravila deriviranja složene funkcije:

$$\begin{aligned}\frac{\partial N_i}{\partial x} &= \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} &= \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y}\end{aligned}\quad (3.26)$$

Derivacije $\frac{\partial \xi}{\partial x}$, $\frac{\partial \eta}{\partial x}$, $\frac{\partial \xi}{\partial y}$ i $\frac{\partial \eta}{\partial y}$ izračunavaju se iz inverzne Jacobijanove matrice $\mathbf{J}^{-1}$

. Diferencijalni element površine $dx dy$ se u svim integracijama zamjenjuje sa

$$dx dy = \det \mathbf{J} d\xi d\eta \quad (3.27)$$

gdje $\det \mathbf{J}$ označava determinantu Jacobiane $\mathbf{J}$, a granice integracije postaju -1 i $+1$.

Eksplisitno određivanje matrice provođenja i vektora desne strane izraza (3.8) nije općenito izvedivo, pa se koeficijenti ove matrice i vektora desne strane moraju izračunavati numeričkom integracijom.

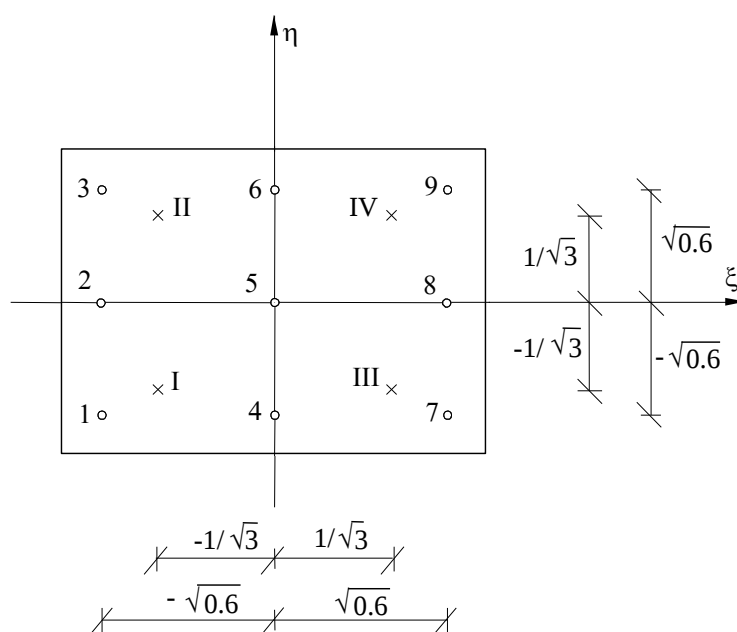
3.3. Numerička integracija

Zbog jednostavne implementacije i visoke točnosti integrali se izračunavaju pomoću Gauss-Legendre-ove kvadrature formule. Za dvodimenzionalno područje korištenjem svojstva Kartesijevog produkta, ona glasi:

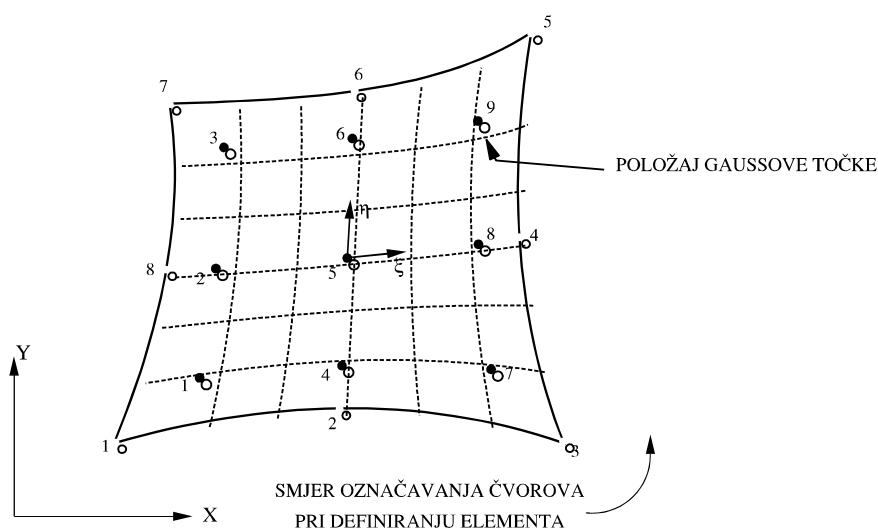
$$I_{n,m} = \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} f(\xi, \eta) d\xi d\eta = \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n W_i W_j f(\xi_i, \eta_j) \quad (3.28)$$

gdje su (ξ_i, η_j) koordinate Gaussovih točaka kao uređenih parova po koordinatnim osima ξ i η , $f(\xi_i, \eta_j)$ su vrijednosti podintegralne funkcije u Gaussovim točkama, a W_i i W_j su

integracijski težinski faktori za Gaussove točke, a indeksi m i n predstavljaju broj čvorova - 8. Na slici 3.7. prikazan je primjer rasporeda Gaussovih točaka na kvadrilateralnom elementu i to za integracijsko pravilo 2×2 s rimskim brojevima, odnosno za integracijsko pravilo 3×3 s arapskim brojevima. Svakom uređenom paru indeksa (i, j) pridružen je jedinstven indeks Gaussove točke. Raspored točaka je dogovoran. Za 8 – čvorni konačni element i Gaussovo integracijsko pravilo 3×3 usvojen je raspored integracijskih točaka prema slici 3.8.



Slika 3.7. Raspored Gaussovih integracijskih točaka



Slika 3.8. Raspored Gaussovih integracijskih točaka za 8 – čvorni konačni element

3.4. Algoritam nestacionarnog proračuna

Metodom konačnih elemenata i Galjerkinovom nejakom formulacijom dobili smo sustav običnih diferencijalnih jednadžbi (3.8) tj.:

$$C_{rs} \frac{dh_r}{dt} + D_{rs} h_r = F_s + X_s + Q_s \quad ; \quad r, s = 1, 2, 3, \dots, m$$

gdje je;

C_{rs} - kapacitivna matrica diskretnog sustava (3.9), koja se gradi postupkom slaganja kapacitivnih matrica konačnih elemenata (3.14),

D_{rs} - matrica provođenja diskretnog sustava (3.10), koja se gradi postupkom slaganja matrica provođenja konačnih elemenata (3.15),

$F_s = F_s(t)$ - vektor vanjskog opterećenja diskretnog sustava (3.11), koji se gradi postupkom slaganja vektora vanjskog opterećenja konačnih elemenata (3.16),

$Q_s = Q_s(t)$ - vektor rubnog dotoka na dijelu granice s prirodnim rubnim uvjetom (3.11), koji se gradi iz integrala preko rubnih elemenata s prirodnim rubnim uvjetom (3.16),

$X_s = X_s(t)$ - vektor reakcija ili rubnih dotoka na dijelu granice s prisilnim rubnim uvjetima (3.12.), koji se gradi iz integrala preko rubnih elemenata s prisilnim rubnim uvjetom (3.17),

$h_r = h_r(t)$ - čvorni potencijali, vremenski promjenjive funkcije,

m - ukupan broj čvorova diskretnog sustava.

Rješenje sustava običnih diferencijalnih jednadžbi (3.8) rješava se vremenskom integracijom pomoću mješovite Eulerove metode prvog reda, tj. integracijom jednadžbi za srazmjerno mali vremenski interval Δt . Stanje na početku vremenskog intervala, tj. u trenutku t , je poznato početno stanje, a stanje na kraju vremenskog intervala, tj. u trenutku $t + \Delta t$ je nepoznato stanje koje se treba odraditi. Pri tome se pod stanjem podrazumijevaju vrijednosti potencijala u čvorovima mreže konačnih elemenata $h_r(t)$ i $h_r(t + \Delta t)$.

Diskretni sustav jednađžbi (3.8) integrirat će se za svaki vremenski korak:

$$\int_{\Delta t} \left(C_{rs} \frac{dh_r}{dt} + D_{rs} h_r = F_s + X_s + Q_s \right) dt = 0 \quad (3.29)$$

što primjenom mješovitog postupka integracije daje sustav linearnih algebarskih jednađžbi:

$$C_{rs}(h_r^+ - h_r) + (1 - \theta)\Delta t [D_{rs} h_r - F_s - X_s - Q_s] + \theta\Delta t [D_{rs} h_r^+ - F_s^+ - X_s^+ - Q_s^+] = 0 \quad (3.30)$$

Prije nego se riješi sustav jednađžbi (3.30) po nepoznicama h_r^+ , potrebno je uvrstiti poznate čvorne vrijednosti na kraju vremenskog intervala koje proizlaze iz prisilnih rubnih uvjeta. Kako svakom čvoru s odgovara jedna od jednađžbi iz (3.30), prisilni rubni uvjeti uvrštavaju se tako da se naprosto za odgovarajući čvor npr. čvor d , jednađžba iz (3.30) zamijeni jednađžbom:

$$h_d^+ - h_d(\text{zadano}) = 0 \quad (3.31)$$

gdje je d globalni indeks čvora.

Za izgradnju sustava jednađžbi (3.30) i određivanje nepoznanica h_r^+ , primjenjuje se frontalni postupak.

Globalna Jacobijana za sustav jednađžbi (3.30) je:

$$A_{rs} = C_{rs} + \theta\Delta t D_{rs} \quad (3.32)$$

a vektor desne strane:

$$b_s = C_{rs} h_r - (1 - \theta)\Delta t [D_{rs} h_r - F_s - X_s - Q_s] - \theta\Delta t [-F_s^+ - X_s^+ - Q_s^+] \quad (3.33)$$

što čini sustav:

$$A_{rs}h_r^+ = b_s \quad (3.34)$$

Nestacionarni proračun započinje od poznatog početnog stanja (početni uvjeti). Izračunato nepoznato stanje na kraju vremenskog intervala postaje početno stanje za sljedeći interval.

Jacobijana globalnog sustava jednadžbi (3.30) izgrađuje se frontalnim postupkom slaganja pomoću odgovarajućih matrica konačnih elemenata, tj. pomoću kapacitivnih matrica C_{rs} i matrica provođenja D_{rs} . Matrice provođenja D_{rs} ne ovise o vremenu, te su iste kao i u stacionarnom problemu, za koji vrijede izrazi (3.15).

4. MATEMATIČKI MODEL PRONOSA

4.1. Hidrodinamička disperzija

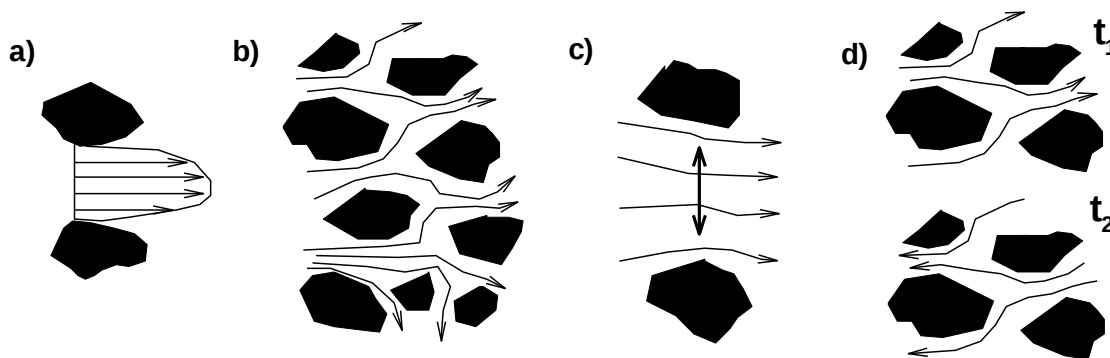
Hidrodinamička disperzija predstavlja općenito proces miješanja u poroznom mediju. Npr. kada se ubaci neki traser, onda se intuitivno može predočiti da se traser širi sve više i pri tom razrijeđuje. Da bi se ova na prvi pogled logična pojava širenja trasera mogla objasniti na fizikalno korektan način, potrebno je tečenje promatrati drukčije nego je to rađeno u Darcy – evom osrednjenom zakonu. Naime, neophodno je uvesti pojam skale na kojoj se promatra tečenje. Općenito se skala kreće od mikroskopske do neke velike makro – skale. Mikroskopska skala je jednaka veličini REV – a (reprezentativnog elementarnog volumena), tj. skale na kojoj mjerene veličine (npr. propusnost i poroznost) prestaju pokazivati fluktuacijska svojstva. Uzima se da ta mikroskopska skala mora obuhvatiti volumen koji će osigurati da proces osrednjavanja daje jednu reprezentativnu vrijednost. Zbog prirodne heterogenosti poroznog medija na svim skalama javljaju se varijacije brzina po veličini i smjeru što predstavlja osnovni mehanizam miješanja. Na mikroskopskoj skali varijacije brzina u svakoj pori se javljaju zbog neravnomjerne distribucije brzina jer je brzina najveća u sredini pore, a jednaka nuli na površini zrna (slika 4.1a). Također, zbog različite površine pora javlja se razlika brzina u različitim porama te zbog općenito nepravilnog oblika pornog sustava strujnice fluktuiraju oko smjera srednje brzine (4.1b), (Bear, 1979). Osim prostorne fluktuacije brzina treba uključiti i utjecaj vremenske promjenjivosti tečenja (4.1d), (Holzbecher, 1998). Na slici 4.1 su prikazani svi navedeni razlozi varijacije brzina na mikroskopskoj skali. Proces miješanja uzrokovan varijacijom brzina na mikroskopskoj skali se zove mehanička disperzija.

Na većim skalama koje se obično zovu makroskopske skale proces miješanja je uzrokovan nehomogenošću poroznog medija što se ogleda u varijaciji permeabiliteta koji indirektno zbog postojanja tečenja stvara varijaciju brzina na svim skalama većim od mikroskopske skale. Paralelno s tim događa se proces molekularne difuzije koji predstavlja dodatni mehanizam miješanja te je determiniran gradijentom koncentracije (slika 4.1c). Proces miješanja koji uključuje oba spomenuta mehanizma, mehaničku disperziju i molekularnu difuziju, je hidrodinamička disperzija.

Matematički opis hidrodinamičke disperzije u općem heterogenom anizotropnom poroznom mediju je veoma kompleksan. Fluksevi koji nastaju zbog miješanja na svim skalama mogu se prikazati klasičnim postupkom osrednjavanja:

$$\overline{C \mathbf{q}} = \overline{(C + C')(\mathbf{q} + \mathbf{q}')} = \overline{C} \overline{\mathbf{q}} + \overline{C' \mathbf{q}'} \quad (4.1)$$

gdje su protok i koncentracija prikazani kao zbroj srednje vrijednosti i fluktuacija oko srednje vrijednosti. Dva člana su ispuštena jer je osrednjavanje fluktuacija jednako nuli. Prvi član na desnoj strani predstavlja prenosnu ili advektivnu komponentu pronosa, dok drugi član definira dodatni disperzivni fluks na nekoj većoj makroskopskoj skali. Taj dodatni fluks (ne postoji na mikroskopskoj skali) se javlja zbog prijelaza s manje na veću skalu i prezentira gubitak informacija koji je nastao pri tom prijelazu.



Slika 4.1. Hidrodinamička disperzija na mikroskopskoj skali

Disperzivni fluks je jednak kovarijanci koncentracije i brzine te je definiran njihovim varijacijama, a prikazuje se po analogiji s Fickovim zakonom (Bear, 1979) po kojemu fluks ovisi o gradijentu koncentracije:

$$\overline{C' \mathbf{q}'} = -\mathbf{D} \cdot \nabla C \quad (4.2)$$

gdje je $\mathbf{D}$ tenzor mehaničke disperzije koji je ovisan o brzini. Izraz (4.2) je aproksimacija disperzivnog fluksa i tenzor mehaničke disperzije mijenja svoje vrijednosti s promjenom skale. Međutim, u analizama toka i pronosa s promjenjivom gustoćom najčešće se promatra tzv. makrodisperzija definirana na nekoj relativno velikoj makroskopskoj skali. U praksi je veoma teško pravilno interpretirati elemente tenzora disperzije. Bear i Bachmat (1967) su ekperimentalno utvrdili tenzor disperzije:

$$D_{ij} = a_{ijk} \frac{v_k v_m}{v} f(Pe, \delta_D) \quad (4.3)$$

gdje je a_{ijk} [L^2/T] tenzor četvrtog reda geometrijske disperzije, Pe [-] je Pecletov broj koji je jednak Lv/D^* i prikazuje odnos advektivne i difuzne komponente na mikroskopskoj skali, gdje je L [L] karakteristična duljina pora, a D^* [L^2/T] koeficijent molekularne difuzije, dok je δ_D omjer karakteristične duljine pornog kanala i njegovog hidrauličkog radijusa. Funkcija $f(Pe, \delta_D)$ opisuje efekt molekularne difuzije u tenzoru disperzije. Osim ovog efekta molekularna difuzija nezavisno od postojanja brzine definira fluks koji je definiran osnovnim Fickovim zakonom:

$$\bar{\mathbf{J}}_m = -\mathbf{D}_m \cdot \nabla C \quad (4.4)$$

gdje je $\mathbf{D}_m$ tenzor molekularne difuzije. U podzemlju se utjecaj molekularne disperzije obično može zanemariti. Izuzetak su zone s malim brzinama u kojima je ovaj utjecaj neophodno uključiti zbog pravilne fizikalne interpretacije procesa miješanja. Tenzor hidrodinamičke disperzije je jednak zbroju tenzora mehaničke disperzije i molekularne difuzije:

$$\mathbf{D}_H = \mathbf{D} + \mathbf{D}_m \quad (4.5)$$

Tenzor hidrodinamičke disperzije povezuje utjecaj geometrije poroznog medija, brzine i molekularne difuzije. Utjecaj geometrije se prije svega ogleda u simetričnom tenzoru geometrijske disperzije koji općenito ima jako složenu strukturu. Zbog toga se gotovo uvijek radi s tenzorom koji je definiran za izotropni medij, a koji određivanje tenzora geometrijske disperzije svede na određivanje dvaju koeficijenata: longitudinalne disperzije, α_L [L] i transverzalne disperzije, α_T [L]:

$$a_{ijk} = \alpha_T \delta_{ij} \delta_{km} + \frac{\alpha_L - \alpha_T}{2} (\delta_{ik} \delta_{jm} + \delta_{im} \delta_{jk}) \quad (4.6)$$

Dakle, za izotropni porozni medij tenzor hidrodinamičke disperzije ima oblik:

$$D_{Hij} = D^* \delta_{ij} + \alpha_T v \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) \cdot \frac{v_i v_j}{v} \quad (4.7)$$

gdje je δ_{ij} Kroneckerov delta simbol. Određivanja koeficijenata disperzije je u načelu veoma teško i Welthy i Gelhar (1992) dali su vrijednosti koeficijenata disperzije za određena istraživana područja. Koeficijent transverzalne disperzije je manje poznat i obično je prilično manji od koeficijenta longitudinalne disperzije. Obično se odnos α_L / α_T kreće u rasponu od 5 do 24 (Bear, 1979). Tenzor mehaničke disperzije je ovisan o brzini i u slučaju nepostojanja brzine jednak je nuli. S druge strane, jedna od glavnih osiju tenzora disperzije se poklapa sa smjerom vektora brzine. U tom slučaju tenzor mehaničke disperzije izgleda ovako:

$$D = \begin{bmatrix} \alpha_L v & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_T v & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_T v \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

Voss (1984) je u svom poznatom programskom paketu SUTRA modificirao koeficijent longitudinalne disperzije za analizu toka i pronosa s promjenjivom gustoćom u anizotropnom poroznom mediju:

$$\alpha_L = \frac{\alpha_{L\max} \alpha_{L\min}}{(\alpha_{L\min} \cos^2 \theta_{kv} + \alpha_{L\max} \sin^2 \theta_{kv})} \quad (4.9a)$$

$$\alpha_T = \frac{\alpha_{T\max} \alpha_{T\min}}{(\alpha_{T\min} \cos^2 \theta_{kv} + \alpha_{T\max} \sin^2 \theta_{kv})} \quad (4.9b)$$

gdje su $\alpha_{L\max}$ koeficijent longitudinalne disperzije u smjeru maksimalne permeabilnosti, $\alpha_{L\min}$ koeficijent longitudinalne disperzije u smjeru minimalne permeabilnosti, $\alpha_{T\max}$ koeficijent transverzalne disperzije u smjeru maksimalne permeabilnosti, $\alpha_{T\min}$ koeficijent transverzalne disperzije u smjeru minimalne permeabilnosti, α_L koeficijent longitudinalne disperzije u smjeru vektora brzine, α_T koeficijent transverzalne disperzije u okomitom smjeru od vektora brzine, a θ_{kv} kut između glavne osi tenzora permeabilnosti $k_{\max}$ i vektora brzine. U zadnja dva desetljeća napravljeni su mnogi radovi stohastičkog tipa koji su proučavali koeficijente disperzije u heterogenom anizotropnom mediju, a mogu se spomenuti npr. Gelhar i Axness (1983), Dagan (1984, 1985), Welty i Gelhar (1991, 1992), Dagan i Cvetković (1992) i Andričević i Cvetković (1998). U ovom radu, zbog složenosti i nedovoljnog poznavanja fenomena disperzije, analiza se ograničava na tenzor disperzije u

izotropnom mediju, pa se zbog toga matematički model toka i pronosa reducira na izotropni, ali heterogeni porozni medij.

4.2. Diferencijalna jednadžba pronosa

Diferencijalna jednadžba pronosa dobiva se primjenom zakonom održanja mase na pripadajućem kontrolnom volumenu:

$$\frac{\partial(n\rho C)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho C \mathbf{q}) - \nabla \cdot (n \mathbf{D}_H \cdot \nabla (\rho C)) = C Q_p + C^* Q_R \quad (4.10)$$

gdje je C^* - maseni udio ili masena koncentracija [M/M] injektiranog fluida ili prihranjivanja. Prvi član predstavlja vremensku promjenu mase pronosa, drugi član pokazuje promjenu mase pronosa zbog promjene ili divergencije advektivnog fluksa pronosa na granici ili rubu kontrolnog volumena, treći član pokazuje promjenu mase pronosa zbog promjene ili divergencije sume disperzivnog i difuznog fluksa pronosa na granici ili rubu kontrolnog volumena, dok desna strana uključuje utjecaj crpljenja i prihranjivanja kao vanjskog djelovanja unutar volumena.

Prvi član lijeve strane se nadalje razvija:

$$\frac{\partial(n\rho C)}{\partial t} = C \frac{\partial(n\rho)}{\partial t} + n\rho \frac{\partial C}{\partial t} \quad (4.11)$$

Drugi član postaje:

$$\nabla \cdot (\rho C \mathbf{q}) = C \nabla \cdot (\rho \mathbf{q}) + \rho \mathbf{q} \cdot \nabla C \quad (4.12)$$

Treći član u (4.10) $n \mathbf{D}_H \cdot \nabla (\rho C)$ se može razdijeliti na dva faktora: $\rho n \mathbf{D}_H \cdot \nabla C$ i $C n \mathbf{D}_H \cdot \nabla \rho$. Gotovo uobičajena aproksimacija (npr. Voss, 1984; Ackerer i dr., 1999) koja se uvodi je da se drugi faktor zanemari jer je veličina manjeg reda u odnosu na drugi član lijeve strane jednadžbe (4.10). U približnom smislu ta dva člana se npr. u smjeru vektora

brzine s zanemarenjem molekularne difuzije i transverzalne disperzije mogu usporediti na sljedeći način: $\rho v \gg \alpha_L v \Delta \rho / \Delta L_p$ gdje je ΔL_p karakteristična duljina na kojoj je došlo do promjene gustoće u smjeru vektora brzine. Ako se gradijent gustoće shvati kao srednji gradijent koji vrijedi za cijelu tranzicijsku zonu ($\Delta \rho = \rho$) onda vrijedi da je $\Delta L_p \gg \alpha_L$ jer se varijacija gustoće događa na mnogo većoj skali od one na kojoj je definirana longitudinalna disperzija. Ako se izrazi (4.11) i (4.12) uz navedenu aproksimaciju supstituiraju u osnovnu jednadžbu kontinuiteta (4.10):

$$C \left[\frac{\partial(n\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{q}) \right] + n\rho \frac{\partial C}{\partial t} + \rho \mathbf{q} \cdot \nabla C - \nabla \cdot (\rho n \mathbf{D}_H \cdot \nabla C) = C Q_p + C^* Q_R \quad (4.13)$$

Konačni oblik diferencijalne jednadžbe pronosa:

$$n\rho \frac{\partial C}{\partial t} + \rho \mathbf{q} \cdot \nabla C - \nabla \cdot (\rho n \mathbf{D}_H \cdot \nabla C) = (C^* - C) Q_R \quad (4.14)$$

4.3. Euler-Lagrange formulacija pronosa

Diferencijalnu jednadžbu pronosa (4.14) u slučaju konstantne gustoće i eliminirajući efektivnu proznost, nakon sređivanja dobijemo u općoj (nekonzervativnoj) formi na domeni Ω i sa vremenskim intervalom $J = (0, T]$ koju koristimo u daljnjem proračunu:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c &= \nabla \cdot (D \nabla c) + s & (x, t) \in \Omega \times J \\ c(x, 0) &= c_0(x) & x \in \Omega \\ c &= \bar{c}(x, t) & (x, t) \in \Omega_1 \times J \end{aligned} \quad (4.15)$$

gdje je t vrijeme, $c(x, t)$ koncentracije otopljene tvari, $\mathbf{v}(x)$ polje brzina, $s(x, t)$ su izvori i ponori i D je tenzor disperzije.

Granica domene Ω , $\partial\Omega = \partial\Omega_1 + \partial\Omega_2$ je podijeljena u dva dijela: Ω_1 granica gdje je $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \leq 0$, i Ω_2 granica gdje je $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} > 0$ što fizikalno predstavlja tok unutrašnjeg

ekstenzivnog polja u smjeru vanjske normale (n) na granici promatrane domene. Lokacije ovih granica se mogu odrediti rješavanjem jednadžbe (4.15) pošto je polje brzina $v(x)$ poznato. Kod većina Euler-Lagrangeovih algoritma dovoljno je zadati samo prisilne rubne uvjete. Razlog tome je način razdvajanja advektivnog i disperzivnog koraka kao šta je prikazano u nastavku.

Lijeva strana u (4.15) se može prikazati kao tzv. materijalna derivacija koja prikazuje vremensku promjenu koncentracije materijalne točke duž strujnice:

$$\frac{Dc}{Dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial x}{\partial t} \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial t} \frac{\partial c}{\partial y} \quad (4.16)$$

Vrijeme u materijalnoj derivaciji predstavlja vrijeme putovanja τ čestice po strujnici. Vrijeme putovanja ne mora imati iste vrijednosti kao stvarno vrijeme t , ali je promjena oba vremena ista, dakle vrijedi $\Delta\tau = \Delta t$, pa onda ni formalno bez gubitka općenitosti ne moramo stvarno vrijeme zamjenjivati s vremenom putovanja. Izraz (4.16) na desnoj strani je dobiven koristeći poznate kinematičke jednadžbe gibanja materijalne točke koje su definirane poljem brzina:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = v_x \quad \frac{\partial y}{\partial t} = v_y \quad (4.17)$$

Jednadžba pronosa zapisana u Lagrangeovom obliku sa istim početnim i rubnim uvjetima:

$$\frac{Dc}{Dt} = \nabla \cdot (D\nabla c) + s \quad (4.18)$$

Materijalna derivacija se može približno riješiti numerički koristeći metodu konačnih razlika:

$$\frac{Dc_i}{Dt} = \frac{c[x_i(t_{n+1}), t_{n+1}] - c[x_i(t_n), t_n]}{\Delta t} \quad (4.19)$$

gdje $x_i(t_{n+1})$ i $x_i(t_n)$ predstavljaju lokaciju čestice u trenutku t_{n+1} i t_n koja putuje duž strujnice i .

5. NUMERIČKI NESTACIONARNI MODEL PRONOSA

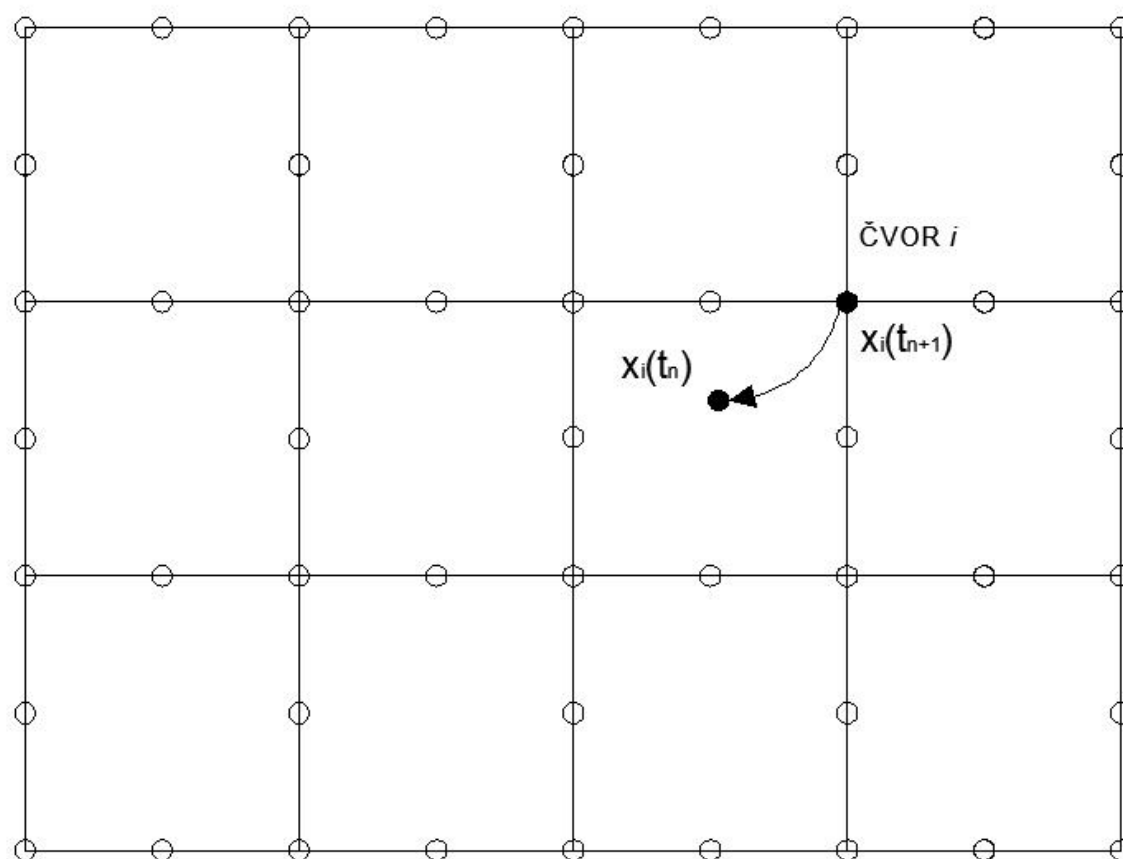
5.1. Algoritam proračuna

U prvom Lagrangeovom (advektivnom) koraku Euler-Lagrangeova postupka vrši se izračun polja koncentracije u čvorovima $x_i(t_{n+1})$ mreže konačnih elemenata tako da se praćenjem čestice unatrag („backward particle tracking“) odredi položaj čestice $x_i(t_n)$ koja je prešla put od čvora i mreže konačnih elemenata do točke $x_i(t_n)$ za pripadajući vremenski korak Δt samo zbog postojanja polja brzine koristeći gore navedene kinematičke jednadžbe:

$$x_i(t_n) = x_i(t_{n+1}) - \int_{t_n}^{t_{n+1}} v[x_i(\xi)] d\xi \quad i = 1, \dots, N \quad (5.1)$$

Za svaku česticu (tj, čvor mreže konačnih elemenata) sustav (5.1) od dvije jednadžbe s dvije nepoznanice rješava se eksplicitno koristeći najčešće Eulerovu metodu prvog reda ili klasičnu Runge-Kutta metodu četvrtog reda. Vremenski korak Δt treba biti dovoljno mali da točka koja se nalazi u čvoru mreže pri putovanju po strujnici ne pređe jedan element mreže konačnih elemenata (slika 5.1.). Ako se ovo pravilo koristi u slučaju vremensko nepromjenjivih – stacionarnih vektora brzina točnost advektivnog koraka ne ovisi o koraku Δt . Pošto advekcija ne mijenja koncentraciju čestice koja putuje po strujnici u tom vremenskom koraku ($Dc/Dt=0$ što znači da ovaj korak predstavlja homogeno rješenje jednadžbe 4.18 i daje $c=\text{const.}$ po strujnici i), izračun koncentracije se vrši pomoću slijedeće relacije: $c^A[x_i(t_{n+1})] = c[x_i(t_n)]$, što znači da je koncentracija zbog utjecaja advekcije u svakom čvoru mreže konačnih elemenata na kraju vremenskog intervala jednaka koncentraciji iz prethodnog koraka u točki $x_i(t_n)$. Nakon određivanja strujnice i iz (5.1), koncentracija $c[x_i(t_{n+1}), t_{n+1}]$ se dakle dobije linearnom kombinacijom baznih funkcija i poznatih koncentracija u čvorovima mreže konačnih elemenata u trenutku t_n . Ta koncentracija se koristi kao početni uvjet za drugi (disperzivni) korak Euler-Lagrangeove metode.

Potrebno je poznavati brzinu u točkama koje se nalaze pomaknute za vremenski korak Δt koje su koriste za rješavanje sustava (5.1). Brzine u tim točkama se dobiju primjenom Darcy-evog zakona (vidi poglavlje o tečenju). Problem nastaje u tome što na rubovima konačnih elemenata dolazi do diskontinuiteta brzina zbog dva razloga: a) promjena tenzora hidrauličke propusnosti od elementa do elementa i b) diskontinuitet derivacija baznih funkcija na rubovima elemenata. Ove numerički izazvane varijacije brzina uzrokuju dodatnu numeričku disperziju i umjetno dodatno širenje trasera ili oblaka zagađenja. Da bi dobili kontinuirano polje brzina vrši se dodatni računski korak opisivanja postojećeg polja brzina koristeći nejaku Galerkinovu formulaciju tako da se dobiju jedinstvene čvorne brzine na osnovi postojećih brzina u Gaussovima točkama (Galešić, 2010). Stoga je uzet taj modul kako bi se u svakom koraku došlo do kontinuiranog polja brzina.



Slika 5.1. Prikaz povratnog praćenja čestice koja završava svoj put u čvoru mreže konačnih elemenata kod Euler-Lagrange metode.

U drugom (disperzivnom) koraku Euler-Lagrangeova postupka vrši se izračun polja koncentracije u trenutku t_{n+1} iz jednadžbe koja je dobivena zamjenom (4.19) u (4.18):

$$c[x_i(t_{n+1}), t_{n+1}] - \Delta t [\nabla \cdot (D \Delta c) + s]_{x_i(t_{n+1}), t_{n+1}} = c[x_i(t_n), t_n] \quad (5.2)$$

gdje je $c[x_i(t_n), t_n]$ poznata koncentracija u čvorovima mreže konačnih elemenata x_i , koja je dobivena iz prvog koraka Euler-Lagrangeove metode, a derivacije disperzivnog fluksa su razvijene u t_{n+1} . Prostorno diferencijalna jednadžba (5.2) se rješava implicitnom vremenskom integracijom koja daje vrijednosti koncentracije $c[x_i(t_{n+1}), t_{n+1}]$ u čvorovima mreže konačnih elemenata u trenutku t_{n+1} koristeći istovjetni postupak kao nestacionarnog rješenja tečenja. Rješenje sustava običnih diferencijalnih jednadžbi se koristi kao početni uvjet za idući vremenski korak. Dakle, postupak rješenja jednadžbe (5.2) je analogan postupku opisanom kod tečenja u poglavlju (3.4.) osim što je umjesto tenzora hidrauličke propusnosti K_{ij} potrebno pisati tenzor disperzije koji se za razliku od tenzora hidrauličke propusnosti mijenja u svakoj Gaussovoj točki te u svakom vremenskom koraku pošto je ovisan o brzinama. Kod pronosa je još jedina razlika koeficijent specifičnog uskladištenja vodonosnika koji za pronos ne postoji.

5.2. Početni i rubni uvjeti

5.2.1. Početni uvjeti

Početni uvjeti se zadavaju kao poznato polje koncentracije u trenutku $t=0$. Za sljedeći vremenski trenutak $t+\Delta t$ početni uvjeti su jednaki rješenju dobivenom iz prethodnog koraka t . Početni uvjeti se nekad pretpostavljaju, te nakon dovoljno velikog broja pseudo vremenskih koraka može se doći do stacionarnog rješenja.

5.2.2. Rubni uvjeti

Rubni uvjeti Euler-Lagrangeove metode se koriste i u advektivnom i disperzivnom koraku. Kod advektivnog koraka za koncentraciju je dovoljno zadati samo rubne uvjete na dijelu granice gdje je tok usmjeren prema domeni (suprotno od vanjske normale). U slučaju da strujnica prilikom vraćanja unazad od trenutka t_{n+1} do t_n dođe do granice,

uzima se koncentracija u točki na rubu, pa u tom slučaju Δt u (4.21) bi trebao biti zamijenjen s $\Delta t'' = t_{n+1} - t'$ gdje je t' vrijeme kada je strujnica došla do granice. U disperzivnom koraku, rubne uvjete je potrebno postaviti na čitavi rub Ω da bi se dobilo jedinstveno rješenje za (4.21) i (5.2). Na dijelu granice gdje je tok usmjeren iz domene uzima se da je koncentracija iz advektivnog koraka jednaka koncentraciji u disperzivnom koraku. Ovakav pristup omogućava da ta granica ostane „otvorena“.

5.3. Pogreške interpolacije

Postoji nekoliko tipičnih pogrešaka koje se mogu pojaviti kod Euler-Lagrangeove metode. Prvo su to pogreške prilikom interpolacije brzina, te kod metode vraćanja unazad kod advektivnog koraka. Naime ako je polje brzina nepromjenjivo u vremenu pogreška se smanjuje tako da se povećava broj konačnih elemenata i smanjuje vremenski korak Δt . Druga pogreška je povezana sa interpolacijom koncentracija i njihovim širenjem po promatranoj domeni. Ove pogreške također ovise o gustoći mreže konačnih elemenata. Tipično kod ovog tipa pogreške je njihovo gomilanje od koraka do koraka tako da se ovakva pogreška povećava sa smanjenjem koraka Δt . Pogreške uzrokovane interpolacijom brzina mogu se isto gomilati ako je vremensko polje ovisno o vremenu. Treće pogreške su rezultat odvajanja advektivnog i disperzivnog koraka. Ova pogreška se smanjuje sa smanjenjem vremenskog koraka. I zadnja četvrta pogreška je uzrokovana diskretizacijom kod disperzivnog koraka. One ovise o načinu odabira mreže i broju konačnih elemenata mreže.

Veličina navedenih grešaka ovisi o mnogo faktora osim veličine mreže i vremenskog koraka a to su: veličina izvora, stupanj heterogenosti u polju brzina, vrijeme putovanja i vrijednosti lokalne disperzije. Za advektno-disperzivno dominantni problem, pogreške nastale radi odvajanja advektivno i disperzivnog koraka te pogreške radi diskretizacije disperzivnog koraka su relativno male u odnosu na ostale navedene pogreške (prve i druge). U slučaju da je vremenski korak prevelik, pogreške nastale radi razdvajanja advektivno i disperzivnog koraka postaju dominantne. Bitno je za napomenuti da konačno rješenje također ovisi i o odabiru baznih funkcija što u ovom radu nije razmatrano već su se koristile samo kvadratne bazne funkcije.

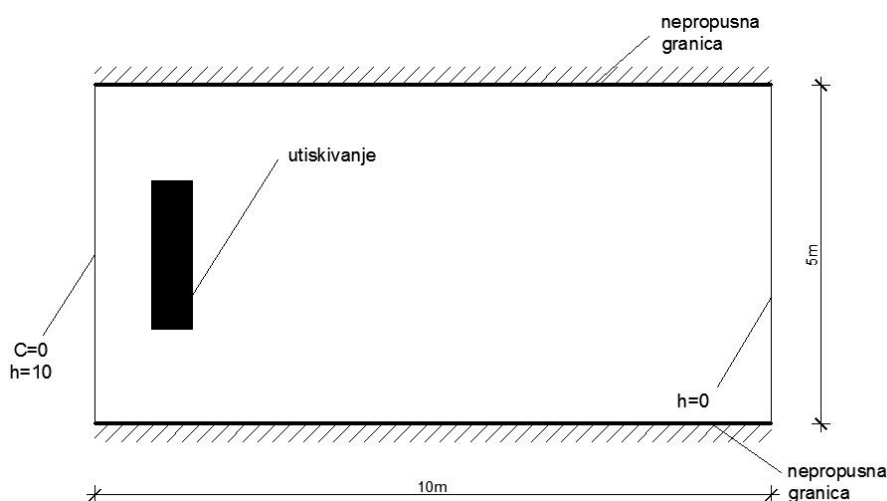
6. VERIFIKACIJA NUMERIČKOG MODELA

Upute za sastavljanje ulazne datoteke, kao i ulazne datoteke svih obrađenih primjera, njihovi rezultati dani su u elektroničkom obliku priloženom uz diplomski rad.

6.1. Pronos u heterogenom vodonosniku uslijed jednolikog srednjeg tečenja

6.1.1. Opis problema

Geometrija sa pripadajućim rubnim uvjetima te lokacijom utiskivanja traser je prikazana na slici 6.1. Diskretizacija je napravljena s 625 konačna osmočvorna elementa, a ukupni broj čvorova je 1976. Gornja i donja granica su nepropusne. Na lijevoj i desnoj granici zadan je prisilni rubni uvjet za tečenje, tj. vrijedi hidrostatska raspodjela tlaka, što znači da je u 51 čvor poznata vrijednost potencijalne funkcije. Na lijevoj granici prisilni rubni uvjet za pronos kaže da je koncentracija jednaka nuli, obje horizontalne granice su i za pronos također nepropusne, a desna granica je „otvorena“. Koeficijent poroznosti n je 0.2, specifični koeficijent skladištenja je $S_s = 0.0001(m^{-1})$, a vrijednost potencijalne funkcije za početne uvjete zadana je linearnom raspodjelom od lijeve granice ($h=10$) prema desnoj desne ($h=0$). Početni uvjeti za koncentraciju su svugdje nula, osim u zoni utiskivanja gdje je $c=1$. Na ovaj način definiranja početnih i rubnih uvjeta, traser je utisnut trenutno u trenutku $t=0$, te dalje procesom advekcije i disperzije kreće se prema desnoj granici domene.



Slika 6.1. Geometrija i rubni uvjeti problema

Napravljeno je 9 kombinacija čiji se rezultati prikazuju u nastavku. Polje heterogenosti dobiveno je slučajnim generatorom sa ulaznim podacima: srednja hidraulička propusnost $\bar{K}_{xx} = e^{-3.4}$ i $\bar{K}_{yy} = e^{-3.4}$ te korelaciona duljina $\lambda = 1\text{m}$. Generirana su tri Gaussova polja sa varijancom log-propusnosti: $\sigma_1^2 = 0.25$, $\sigma_2^2 = 1$ i $\sigma_3^2 = 4$. Za svako polje napravljene su još po tri kombinacije sa različitim Pecletovim brojem:

- | | |
|-------------------------------------|---|
| 1. kombinacija: $\sigma_1^2 = 0.25$ | $\alpha_L = 0.2 \rightarrow Pe = 2$ |
| 2. kombinacija: $\sigma_1^2 = 0.25$ | $\alpha_L = 0.01 \rightarrow Pe = 40$ |
| 3. kombinacija: $\sigma_1^2 = 0.25$ | $\alpha_L = 0.001 \rightarrow Pe = 400$ |
| 4. kombinacija: $\sigma_1^2 = 1$ | $\alpha_L = 0.2 \rightarrow Pe = 2$ |
| 5. kombinacija: $\sigma_1^2 = 1$ | $\alpha_L = 0.01 \rightarrow Pe = 40$ |
| 6. kombinacija: $\sigma_1^2 = 1$ | $\alpha_L = 0.001 \rightarrow Pe = 400$ |
| 7. kombinacija: $\sigma_1^2 = 4$ | $\alpha_L = 0.2 \rightarrow Pe = 2$ |
| 8. kombinacija: $\sigma_1^2 = 4$ | $\alpha_L = 0.01 \rightarrow Pe = 40$ |
| 9. kombinacija: $\sigma_1^2 = 4$ | $\alpha_L = 0.001 \rightarrow Pe = 400$ |

Svi ulazni podaci su sadržani u ulaznim datotekama *KO1.inp*, *KO2.inp* *KO9.inp* koje su priložene u elektronskom obliku uz diplomski rad.

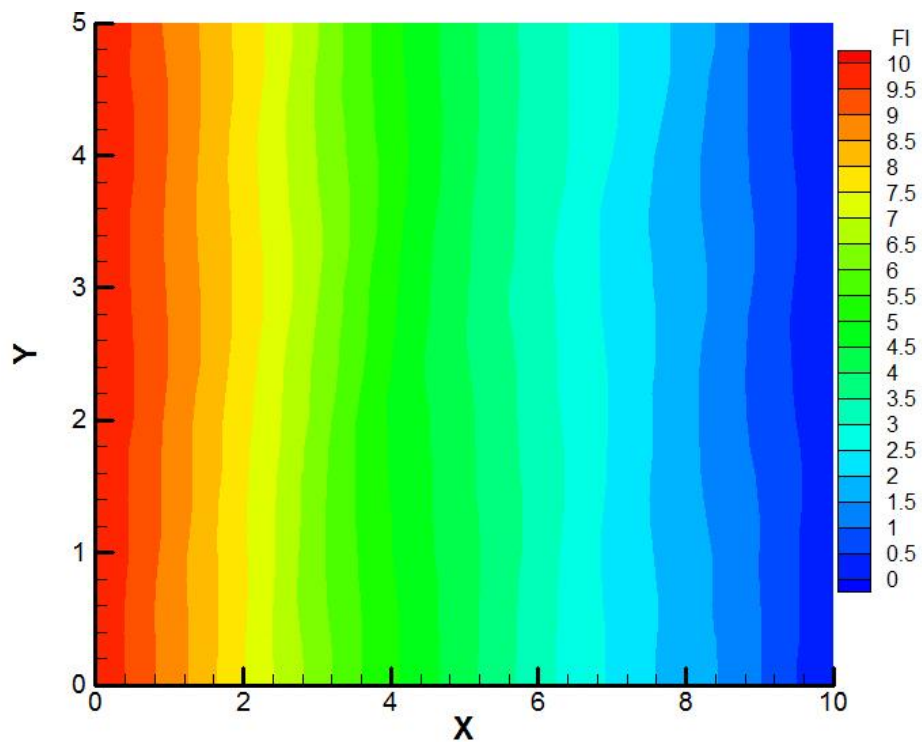
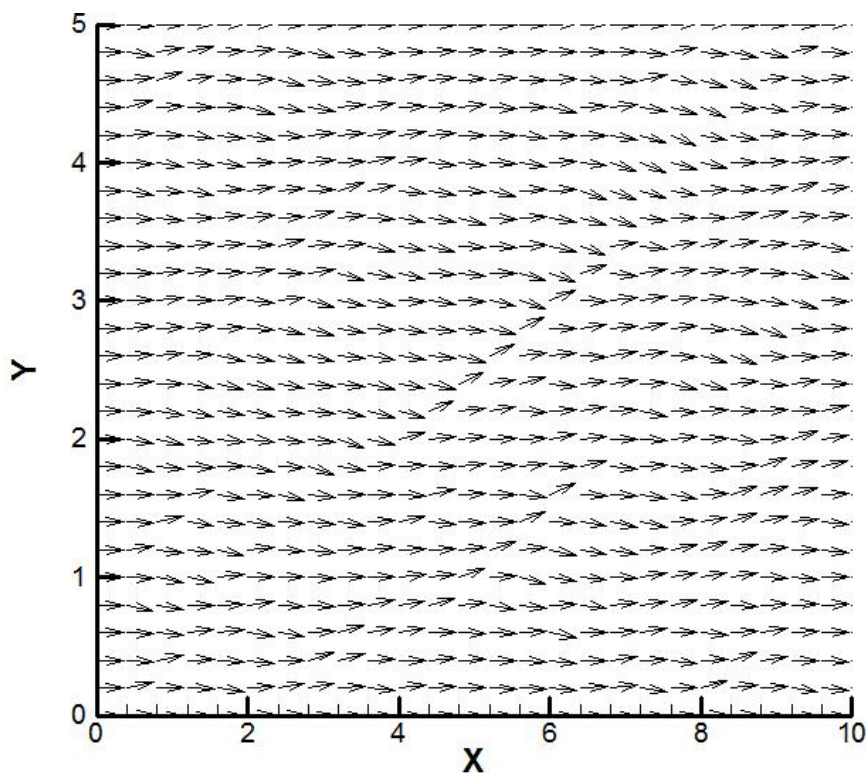
6.1.2. Rezultati proračuna

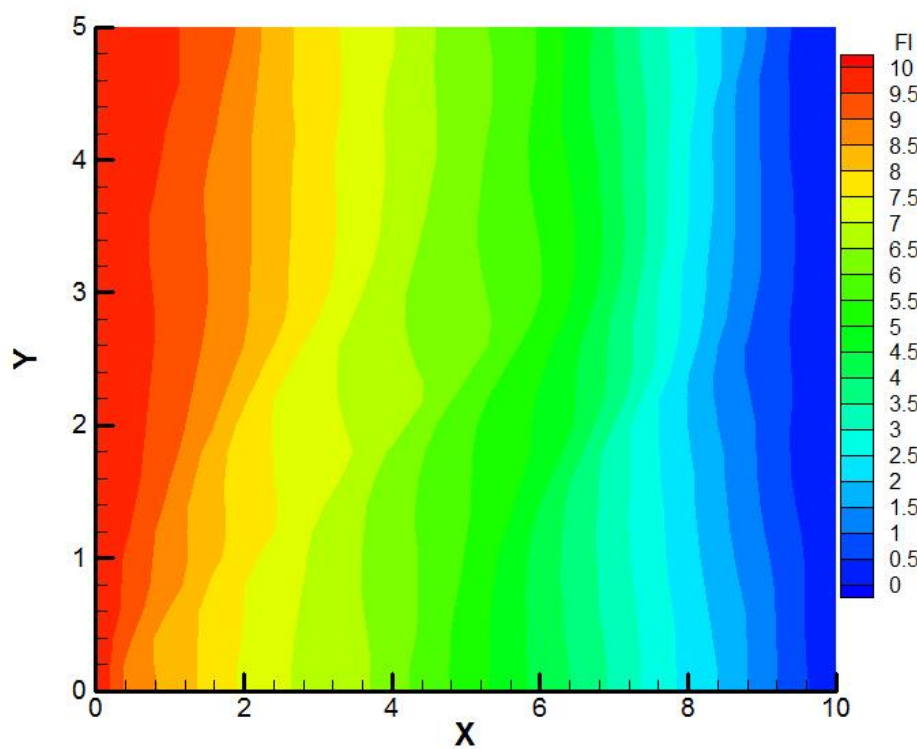
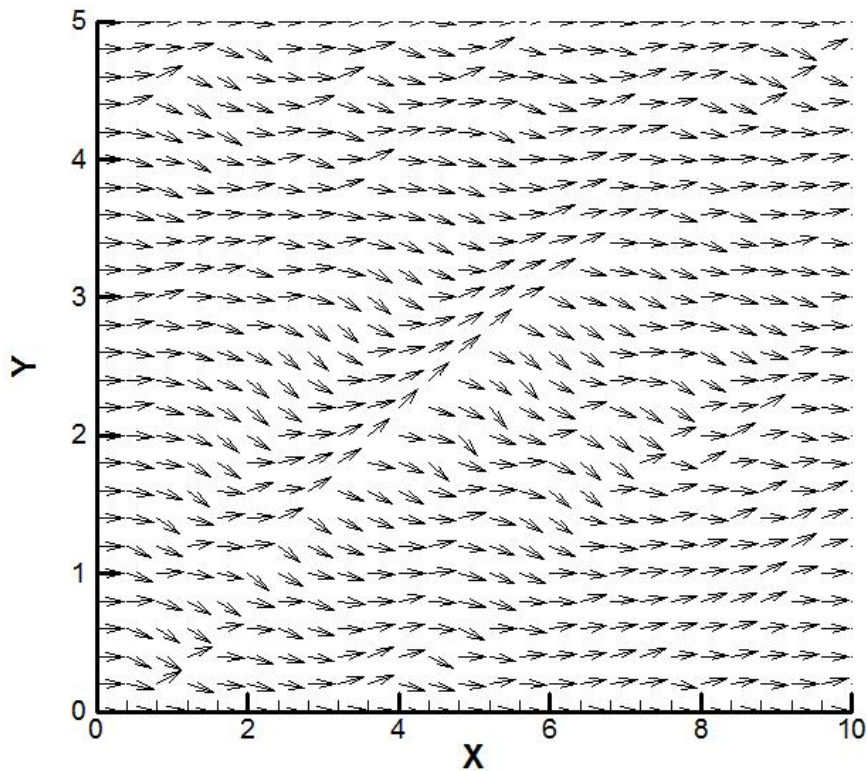
Dani rezultati prikazuju koncentracije u četiri trenutka: 0, 2.5, 17.5 i 62.5 s. Kod prvih 6 kombinacija se jasno vidi da je sva koncentracija izašla iz domene u zadnjem prikazanom trenutku od 62.5 s, dok se kod zadnje tri kombinacije kod kojih varijanca iznosi 4 primjećuje da je koncentracija nakon 62.5s još uvijek prisutna unutar domene. Razlog tome su veća odstupanja u hidrauličkoj propusnosti pa su takvi rezultati bili za i očekivati. Heterogenost direktno ovisi o varijanci te znatno utječe na same rezultate proračuna. Naime veća heterogenost znači da veća advekcija uzrokuje veće širenje trasera, pa je za očekivati u rezultatima da kod kombinacija s većom varijancom oblak zagađenja proširi na veće područje.

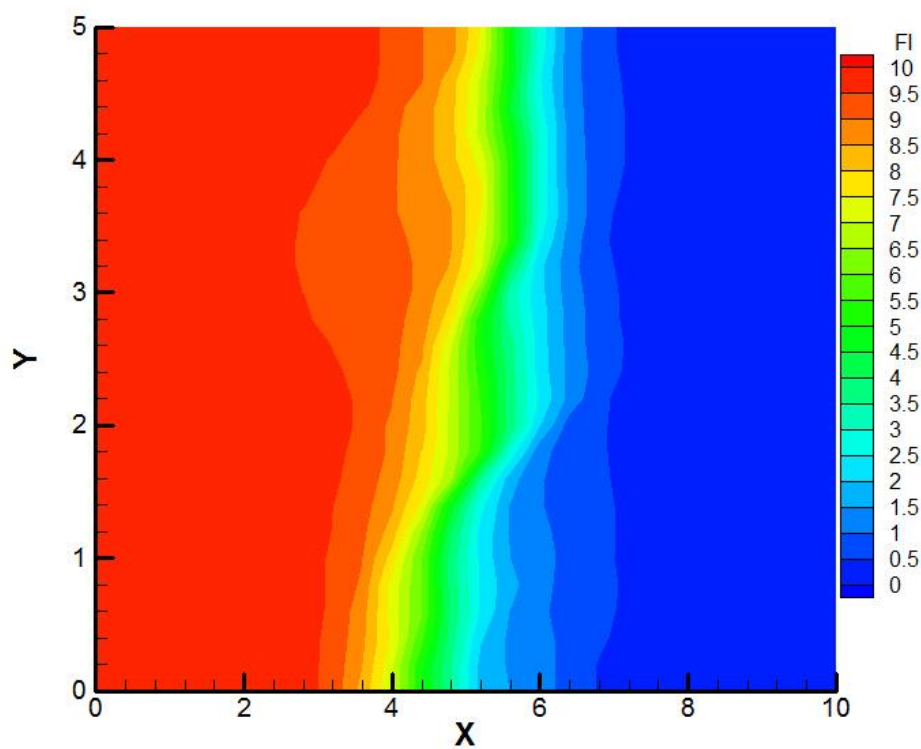
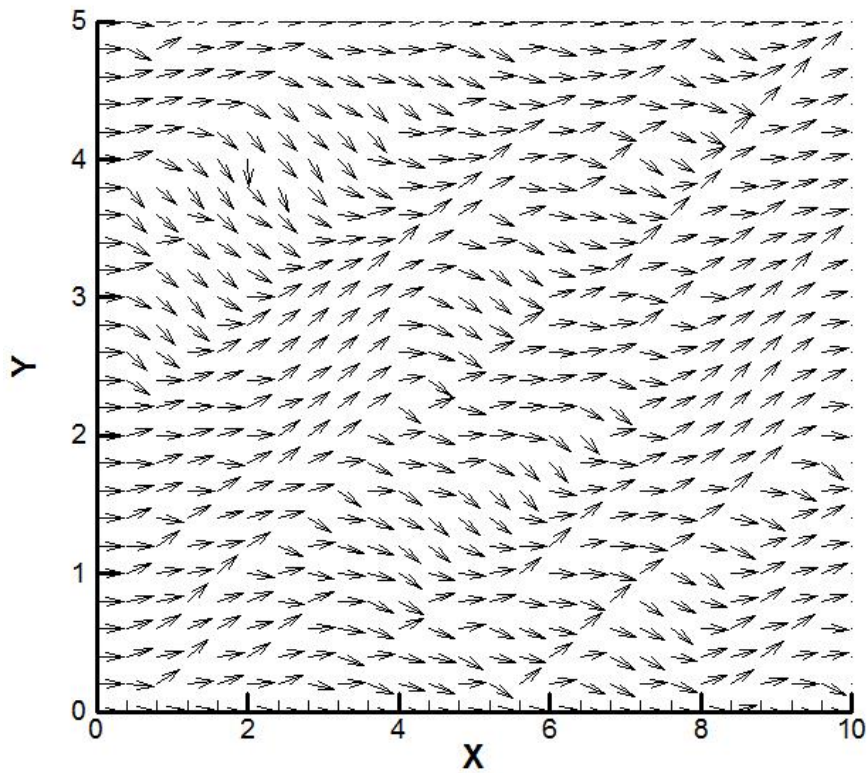
Kod kombinacija 7, 8 i 9 gdje je varijanca $\sigma_1^2 = 4$ bilo je potrebno povećati vrijeme simulacije te smanjiti vremenski korak. Razlog tome je postojanje sporijih i bržih zona pošto je odstupanje hidrauličke propusnosti K u tom slučaju veće. Dio zagađenja zapne u sporijim zonama što rezultira povećanjem vremena potrebnim da čitavo zagađenje prođe promatranom domenom. Isto tako kod brzih zona se sa velikim vremenskim korakom ne može simulirati putovanje zagađenja pošto oblak brzo prođe kroz tu zonu i već u idućem koraku se nalazi u sporoj zoni gdje opet zapne. Za zadnje tri kombinacije izvršena je simulacija koja je pokazala da je potrebno vrijeme od 150 s da oblak koncentracije izađe iz promatrane domene.

Pecletov broj predstavlja odnos advekcije i disperzije. Što je on veći znači da je advekcija dominantnija od disperzije. Isto tako, mali Pecleov broj ukazuje na to da disperzija ima značajni utjecaj na sami proces širenja oblaka. U slučajevima kada je advekcija dominantna, oblak zagađenja se širi samo zbog varijacija polja brzina. U svim kombinacijama primjećuje se kako se sa povećanjem Pecleovog broja oblak koncentracije manje širi. Za zadnji slučaj kada je $Pe=400$ utjecaj disperzije je zanemariv te je dominantna samo advekcija. I na samim rezultatima se vidi da za slučajeve s većim Pecleovim brojem nema smanjenja koncentracije već ona putuje s onom bliskom početnoj vrijednosti kroz čitavi porozni medij.

POLJE POTENCIJALA I BRZINA ZA SVA TRI SLUČAJA HETEROGENSOT

Slika 6.2. Prikaz potencijala za $\sigma_1^2 = 0.25$ Slika 6.3. Prikaz strujnica za $\sigma_1^2 = 0.25$

Slika 6.4. Prikaz potencijala za $\sigma_1^2 = 1.0$ Slika 6.5. Prikaz strujnica za $\sigma_1^2 = 1.0$

Slika 6.6. Prikaz potencijala za $\sigma_1^2 = 4.0$ Slika 6.7. Prikaz strujnica za $\sigma_1^2 = 4.0$

X	Y	FI	Vx	Vc	Vxcon	Vycon
4,0000	5,0000	5,1927	0,1185	-0,0013	0,1183	-0,0013
4,0000	4,7368	5,1991	0,1550	0,0083	0,1495	0,0089
4,0000	4,4737	5,2241	0,1928	0,0172	0,1778	0,0161
4,0000	4,2105	5,2519	0,1864	0,0182	0,1834	0,0207
4,0000	3,9474	5,2837	0,1632	0,0137	0,1570	0,0130
4,0000	3,6842	5,2631	0,1015	-0,0178	0,1182	-0,0172
4,0000	3,4211	5,2046	0,0941	-0,0142	0,0955	-0,0155
4,0000	3,1579	5,1364	0,0926	-0,0148	0,0970	-0,0188
4,0000	2,8947	5,0965	0,1095	-0,0102	0,1008	-0,0099
4,0000	2,6316	5,0567	0,0958	-0,0115	0,0977	-0,0129
4,0000	2,3684	5,0019	0,0931	-0,0206	0,1061	-0,0212
4,0000	2,1053	4,9451	0,1139	-0,0001	0,1267	-0,0004
4,0000	1,8421	4,9671	0,1643	0,0150	0,1447	0,0135
4,0000	1,5789	4,9711	0,1456	-0,0020	0,1452	-0,0052
4,0000	1,3158	4,9963	0,1566	0,0230	0,1442	0,0218
4,0000	1,0526	5,0214	0,1256	0,0098	0,1478	0,0136
4,0000	0,7895	5,0526	0,1928	0,0266	0,1681	0,0270
4,0000	0,5263	5,0904	0,1530	0,0182	0,1535	0,0187
4,0000	0,2632	5,1064	0,1099	0,0065	0,1274	0,0084
4,0000	0,0000	5,1219	0,1237	0,0012	0,1239	0,0012

Tablica 6.1. Prikaz vrijednosti potencijala i brzina za $\sigma_1^2 = 0.25$

X	Y	FI	Vx	Vc	Vxcon	Vycon
4,0000	5,0000	7,0417	0,0890	0,0019	0,0897	0,0019
4,0000	4,7368	6,9961	0,0596	-0,0329	0,0891	-0,0287
4,0000	4,4737	6,9281	0,0961	-0,0134	0,1326	-0,0118
4,0000	4,2105	6,9303	0,1777	0,0233	0,1953	0,0304
4,0000	3,9474	6,9289	0,1451	-0,0274	0,1920	-0,0225
4,0000	3,6842	6,8947	0,1466	-0,0262	0,1482	-0,0255
4,0000	3,4211	6,8368	0,1507	-0,0565	0,1289	-0,0536
4,0000	3,1579	6,7098	0,0904	-0,0511	0,1017	-0,0589
4,0000	2,8947	6,5998	0,0762	-0,0146	0,1256	-0,0261
4,0000	2,6316	6,5897	0,1752	0,0219	0,2597	0,0567
4,0000	2,3684	6,6328	0,6881	0,1902	0,4611	0,2516
4,0000	2,1053	6,7111	0,6056	0,6717	0,4220	0,3364
4,0000	1,8421	6,4881	0,0174	-0,0420	0,0992	-0,0328
4,0000	1,5789	6,2950	0,0846	-0,0255	0,0571	-0,0261
4,0000	1,3158	6,2429	0,1051	-0,0134	0,1139	-0,0135
4,0000	1,0526	6,2318	0,1447	0,0042	0,1663	0,0027
4,0000	0,7895	6,2516	0,2936	0,0630	0,2553	0,0533
4,0000	0,5263	6,2858	0,3722	0,0713	0,2978	0,0589
4,0000	0,2632	6,2992	0,3394	-0,0435	0,2862	-0,0278
4,0000	0,0000	6,2618	0,2187	-0,0138	0,2190	-0,0135

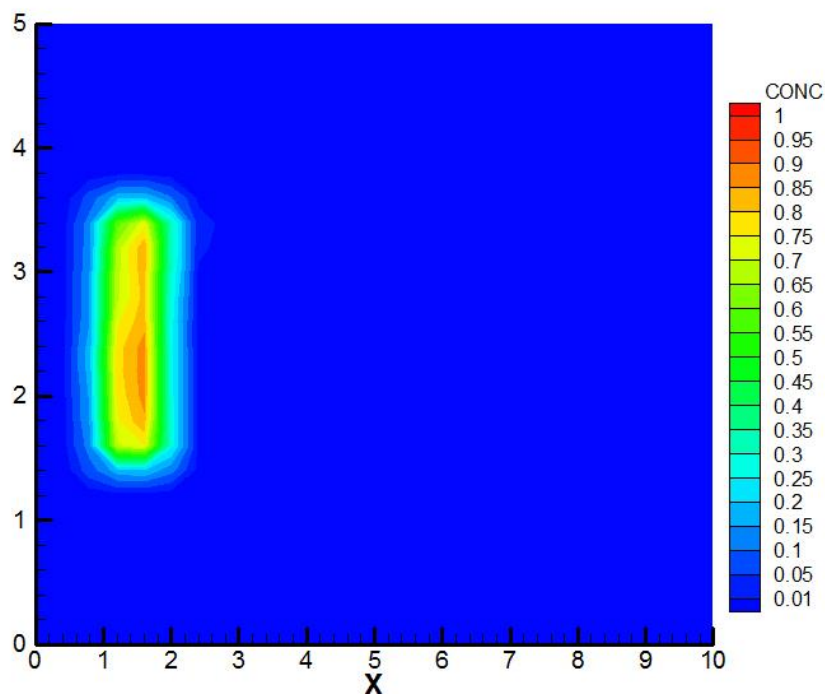
Tablica 6.2. Prikaz vrijednosti potencijala i brzina za $\sigma_1^2 = 1.0$

X	Y	FI	Vx	Vc	Vxcon	Vycon
4,0000	5,0000	9,3850	0,0601	0,0015	0,0601	0,0015
4,0000	4,7368	9,3740	0,0257	-0,0050	0,0337	-0,0045
4,0000	4,4737	9,2378	0,0079	-0,0106	0,0162	-0,0094
4,0000	4,2105	9,0900	0,0050	-0,0039	0,0171	-0,0021
4,0000	3,9474	9,0590	0,0244	-0,0080	0,0362	-0,0043
4,0000	3,6842	9,0398	0,0787	-0,0117	0,1213	0,0024
4,0000	3,4211	9,0821	0,1309	0,1426	0,4720	0,3773
4,0000	3,1579	9,1279	0,2140	0,1849	0,2744	0,1160
4,0000	2,8947	9,1549	0,1252	0,0415	0,1506	0,0371
4,0000	2,6316	9,1477	0,1134	-0,0312	0,1118	-0,0012
4,0000	2,3684	9,1133	0,0877	-0,0347	0,0888	-0,0020
4,0000	2,1053	8,9576	0,0398	-0,0235	0,0839	-0,0370
4,0000	1,8421	8,8944	0,0435	-0,0020	0,0390	-0,0004
4,0000	1,5789	8,7554	0,0243	-0,0232	0,0298	-0,0185
4,0000	1,3158	8,4405	0,0300	-0,0274	0,0294	-0,0175
4,0000	1,0526	7,8991	0,0485	-0,0398	0,0465	-0,0309
4,0000	0,7895	7,2911	0,0564	-0,0132	0,0505	-0,0244
4,0000	0,5263	7,3089	0,0385	0,0108	0,0345	0,0086
4,0000	0,2632	7,1887	0,0106	-0,0041	0,0172	-0,0041
4,0000	0,0000	6,9940	0,0158	-0,0008	0,0158	-0,0008

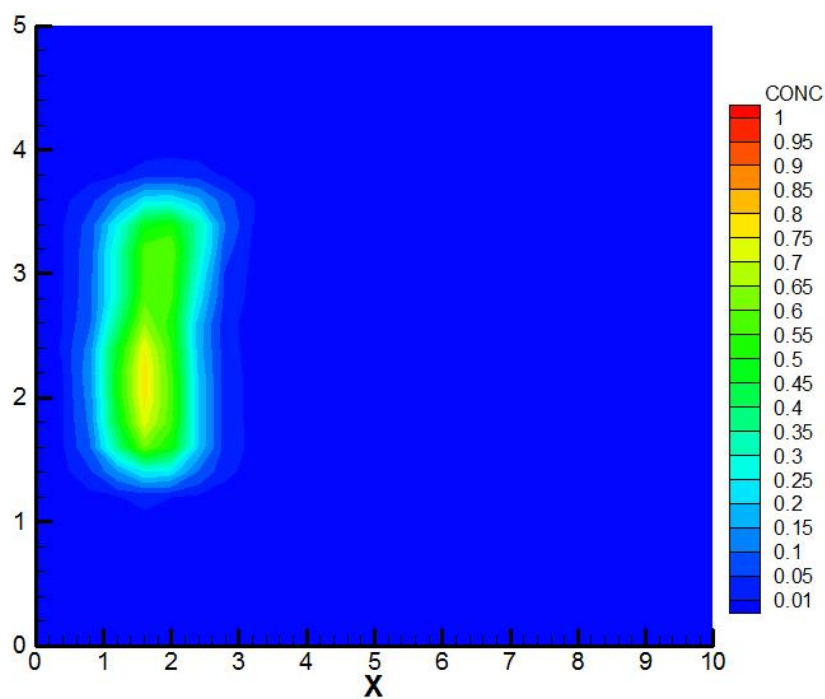
Tablica 6.3. Prikaz vrijednosti potencijala i brzina za $\sigma_1^2 = 4.0$

REZULTATI ZA SVE KOMBINACIJE

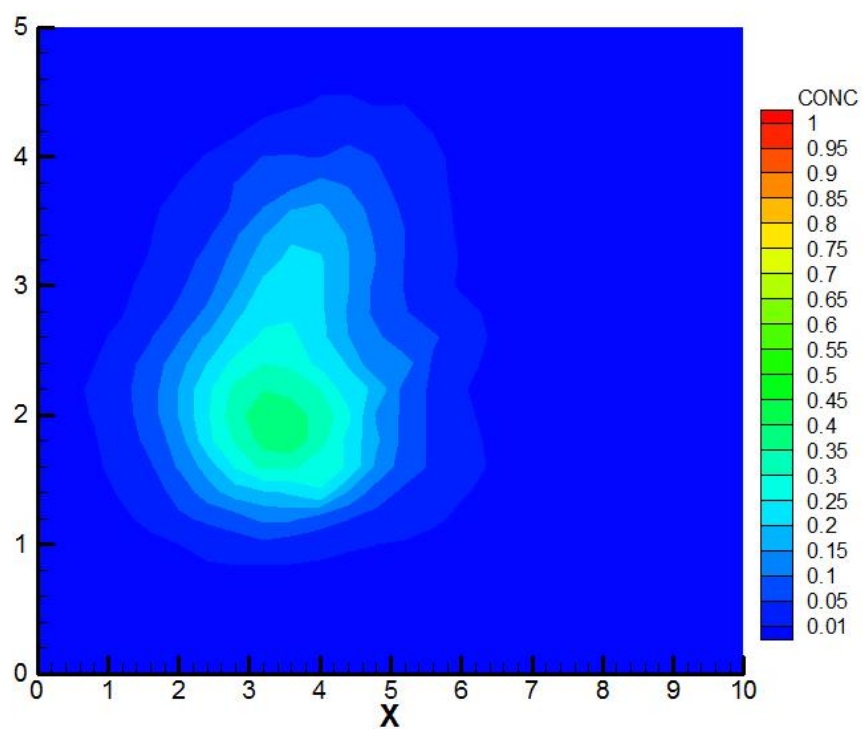
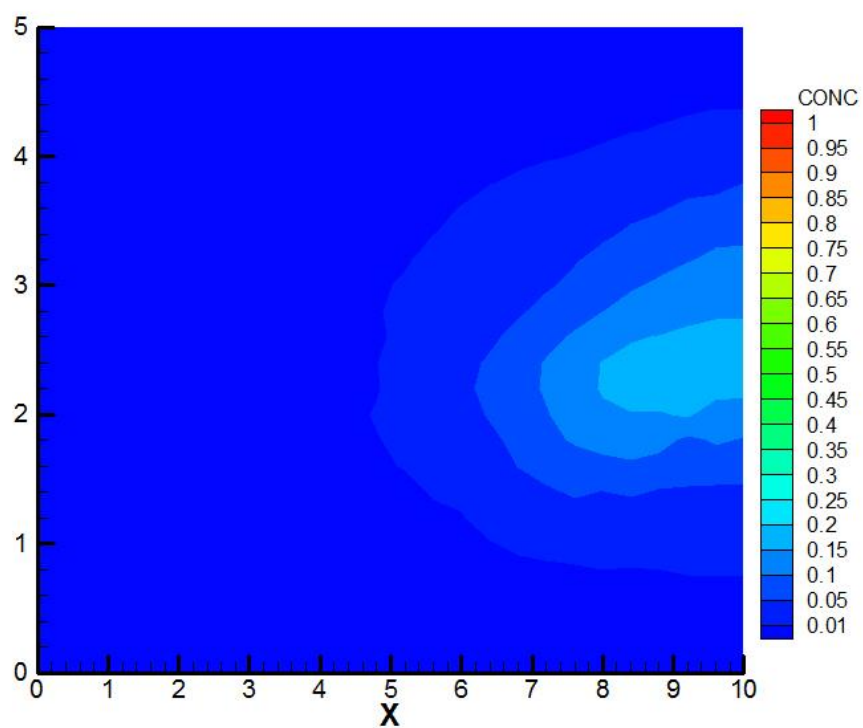
1. Kombinacija: $\sigma_1^2 = 0.25$; $\alpha_L = 0.2 \rightarrow Pe = 2$



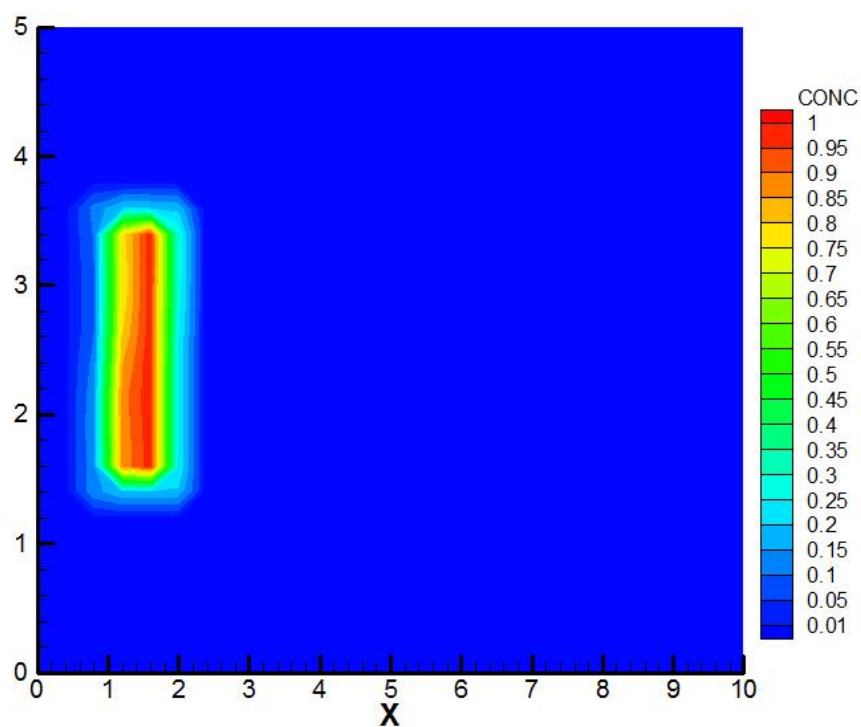
Slika 6.8. Prikaz koncentracije za 1.komb. u trenutku $t=0s$



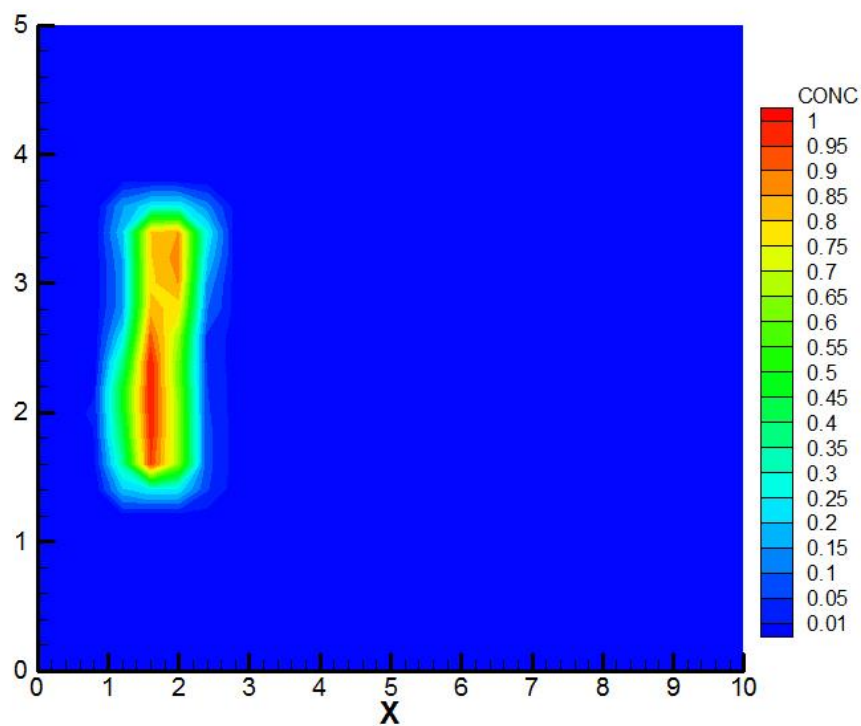
Slika 6.9. Prikaz koncentracije za 1.komb. u trenutku $t=2.5s$

Slika 6.10. Prikaz koncentracije za 1.komb. u trenutku $t=17.5s$ Slika 6.11. Prikaz koncentracije za 1.komb. u trenutku $t=62.5s$

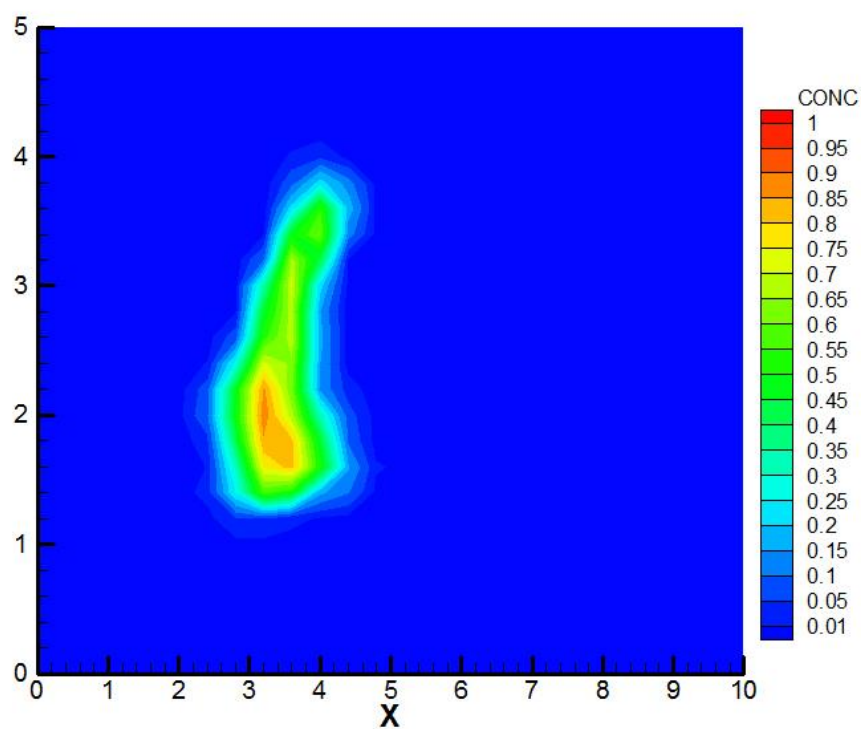
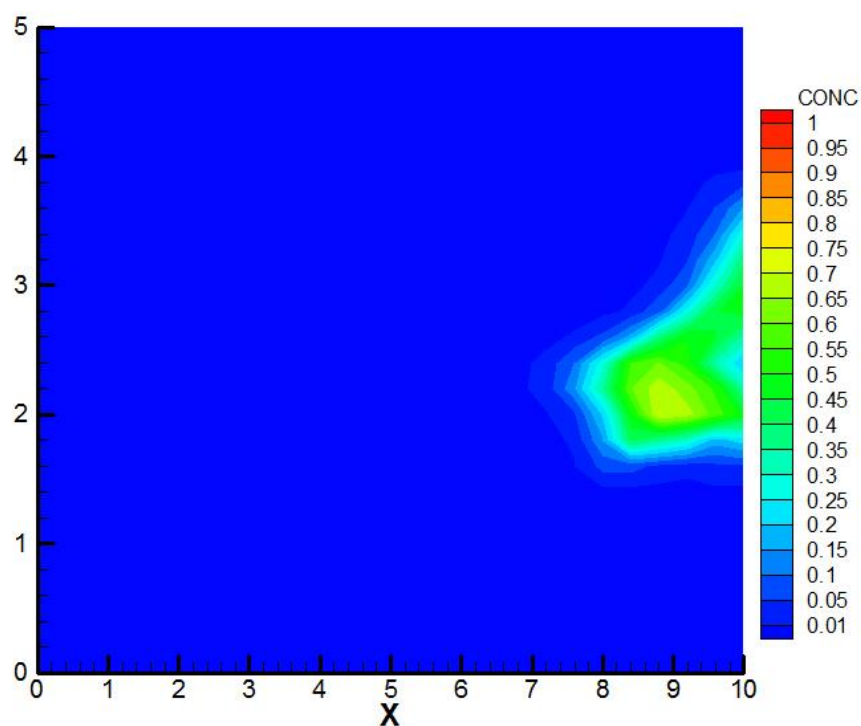
2. Kombinacija: $\sigma_1^2 = 0.25$; $\alpha_L = 0.01 \rightarrow Pe = 4$



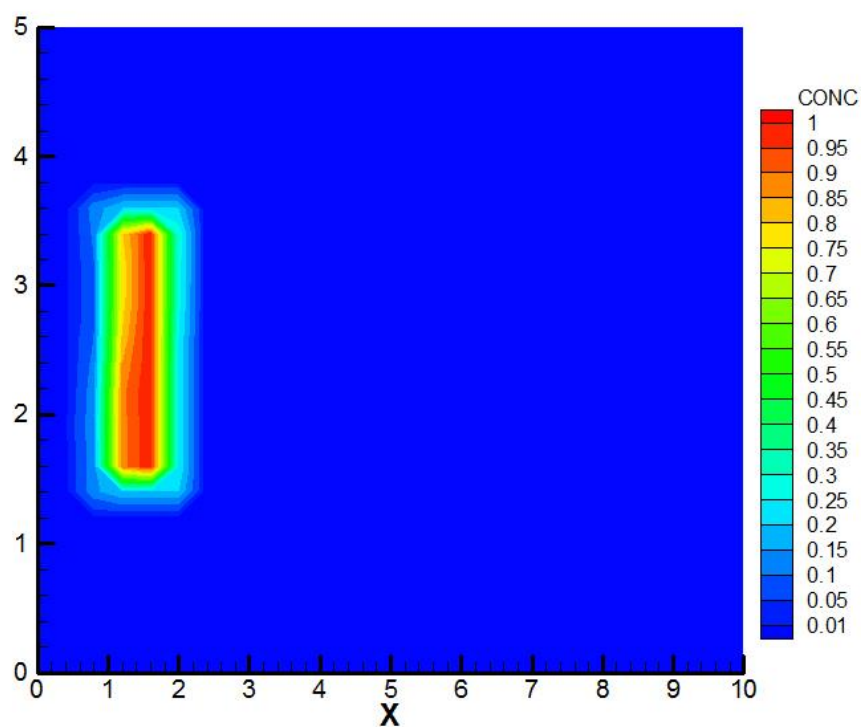
Slika 6.12. Prikaz koncentracije za 2.komb. u trenutku $t=0s$



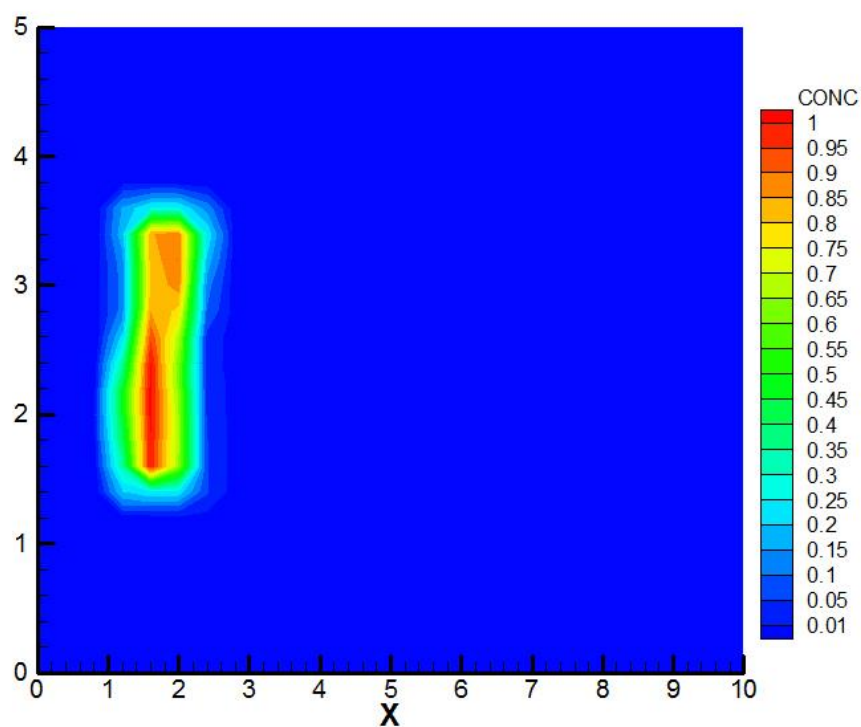
Slika 6.13. Prikaz koncentracije za 2.komb. u trenutku $t=2.5s$

Slika 6.14. Prikaz koncentracije za 2.komb. u trenutku $t=17.5s$ Slika 6.15. Prikaz koncentracije za 2.komb. u trenutku $t=62.5s$

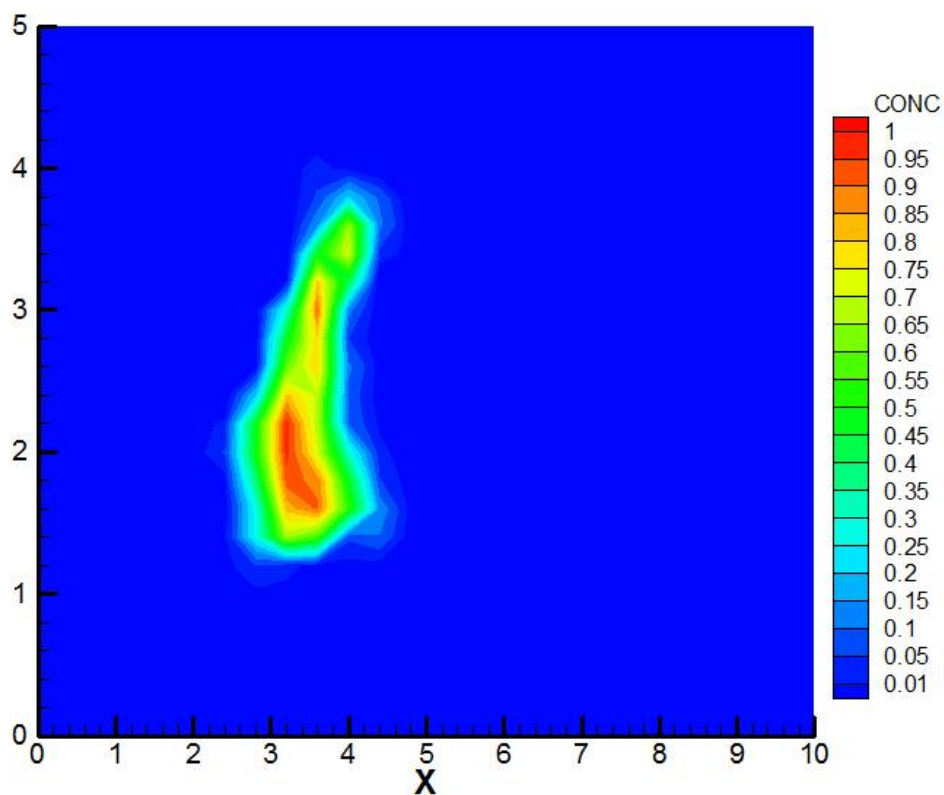
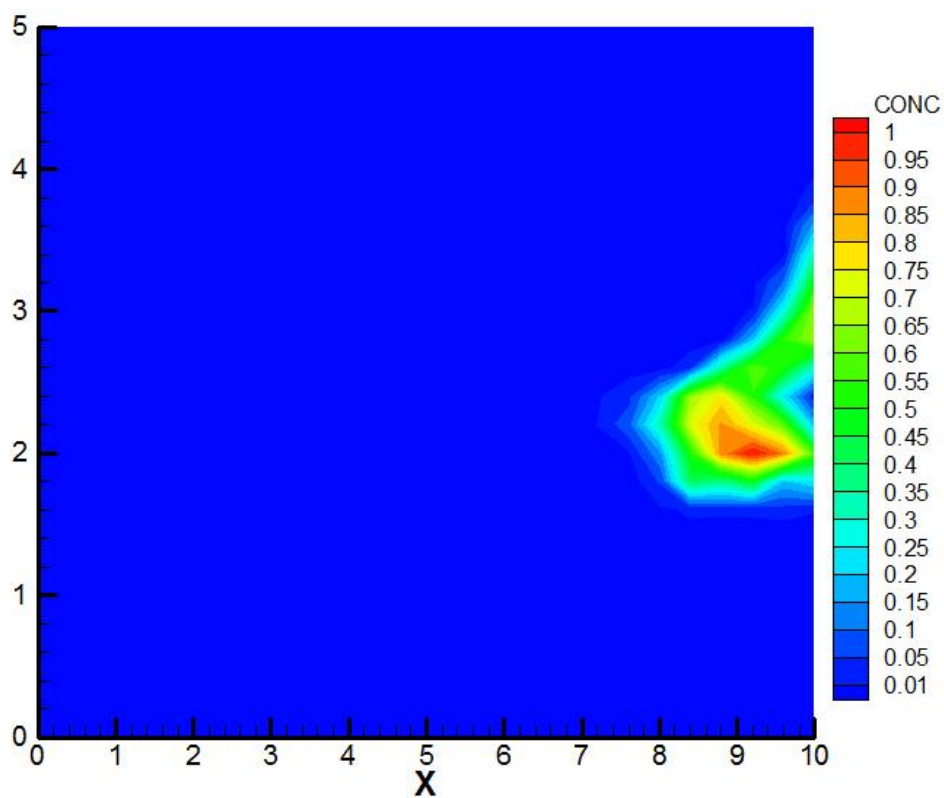
3. Kombinacija: $\sigma_1^2 = 0.25$; $\alpha_L = 0.001 \rightarrow Pe = 400$



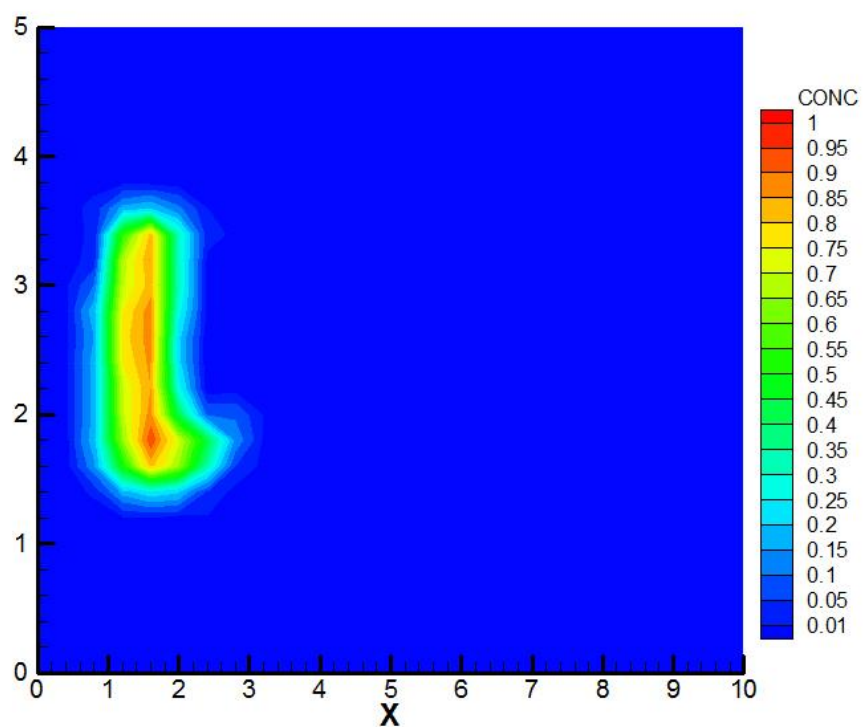
Slika 6.16. Prikaz koncentracije za 3.komb. u trenutku $t=0s$



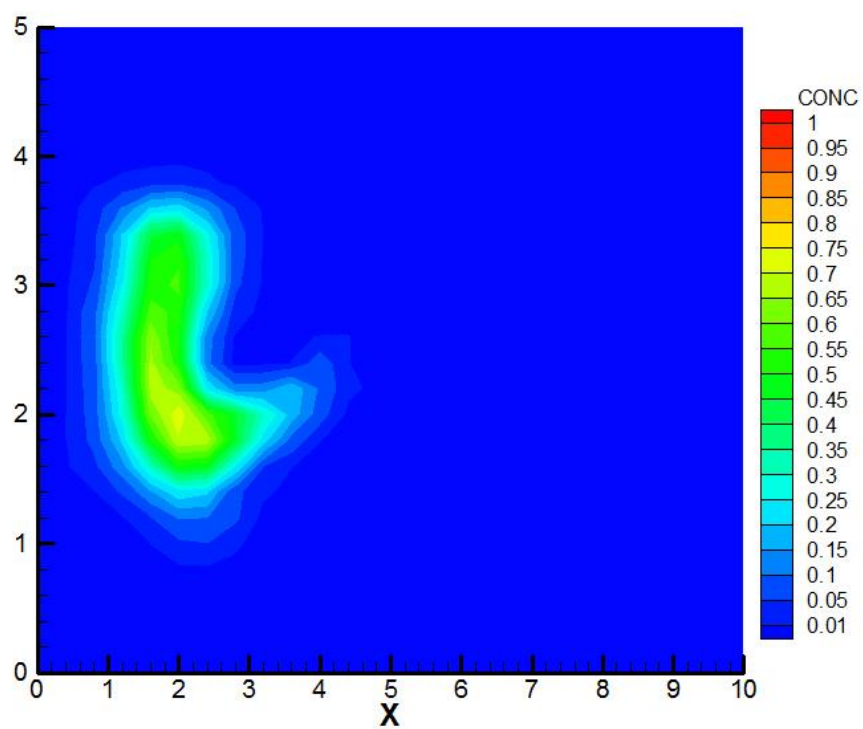
Slika 6.17. Prikaz koncentracije za 3.komb. u trenutku $t=2.5s$

Slika 6.18. Prikaz koncentracije za 3.komb. u trenutku $t=17.5s$ Slika 6.19. Prikaz koncentracije za 3.komb. u trenutku $t=62.5s$

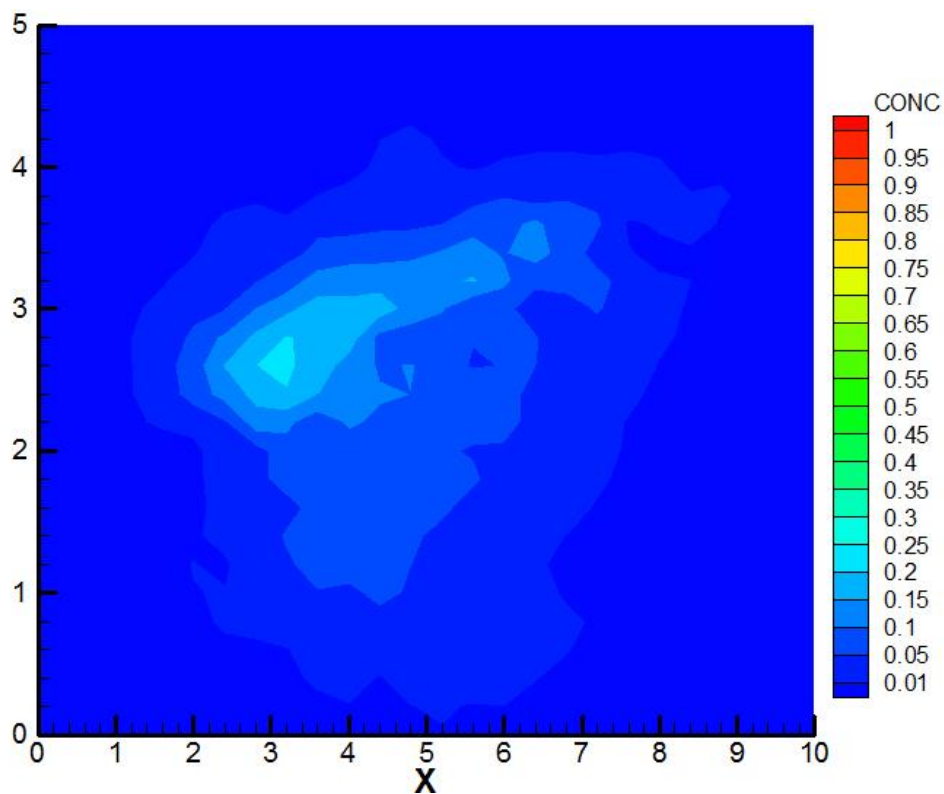
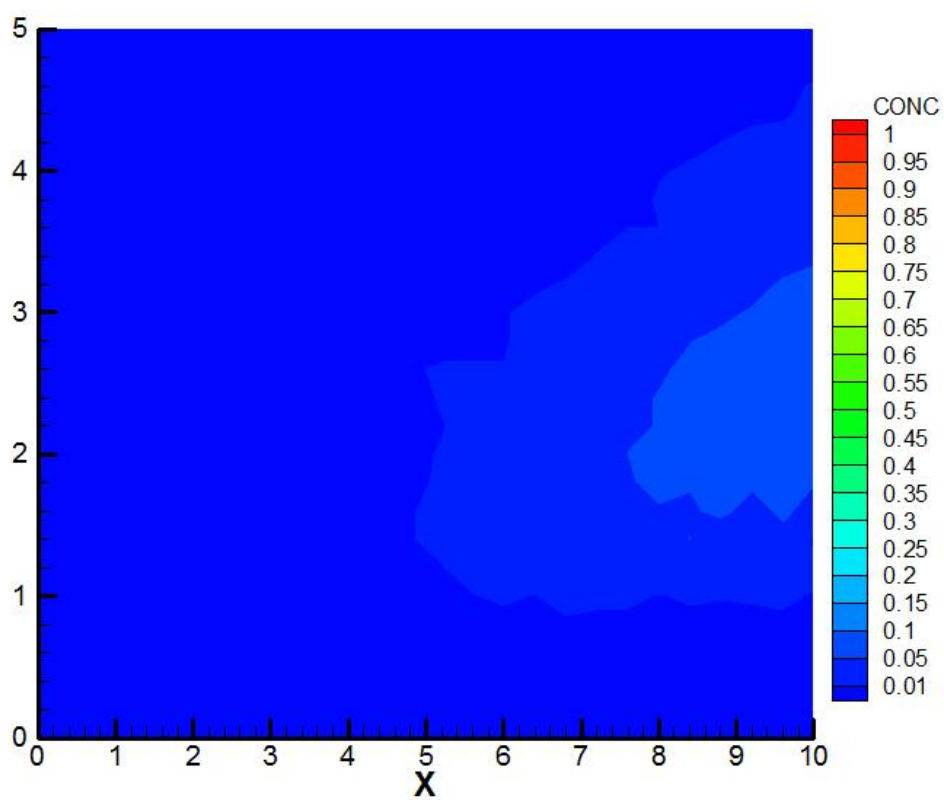
4. Kombinacija: $\sigma_1^2 = 1.0$; $\alpha_L = 0.2 \rightarrow Pe = 2$



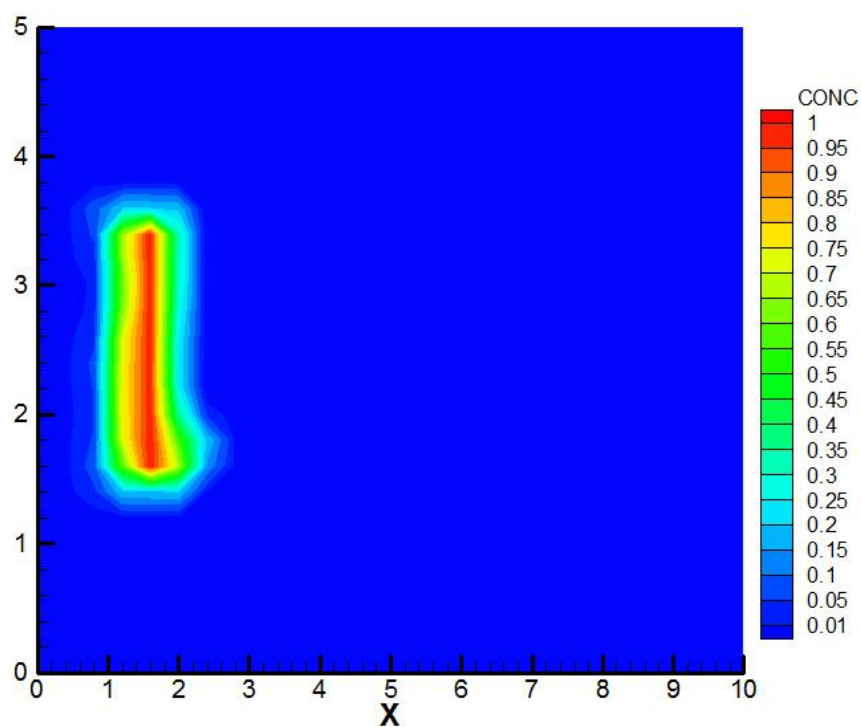
Slika 6.20. Prikaz koncentracije za 4.komb. u trenutku $t=0s$



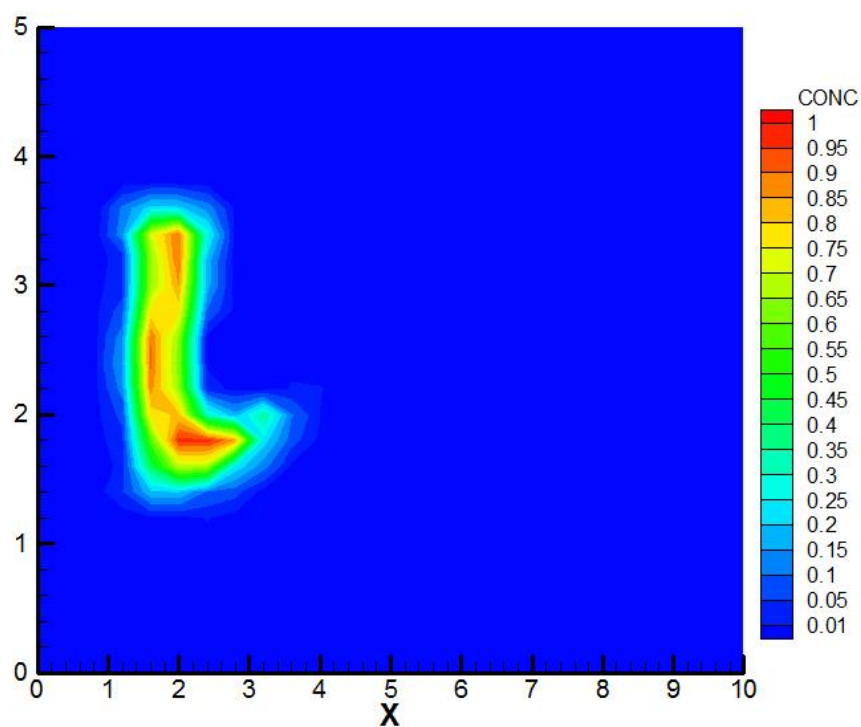
Slika 6.21. Prikaz koncentracije za 4.komb. u trenutku $t=2.5s$

Slika 6.22. Prikaz koncentracije za 4.komb. u trenutku $t=17.5s$ Slika 6.23. Prikaz koncentracije za 4.komb. u trenutku $t=62.5s$

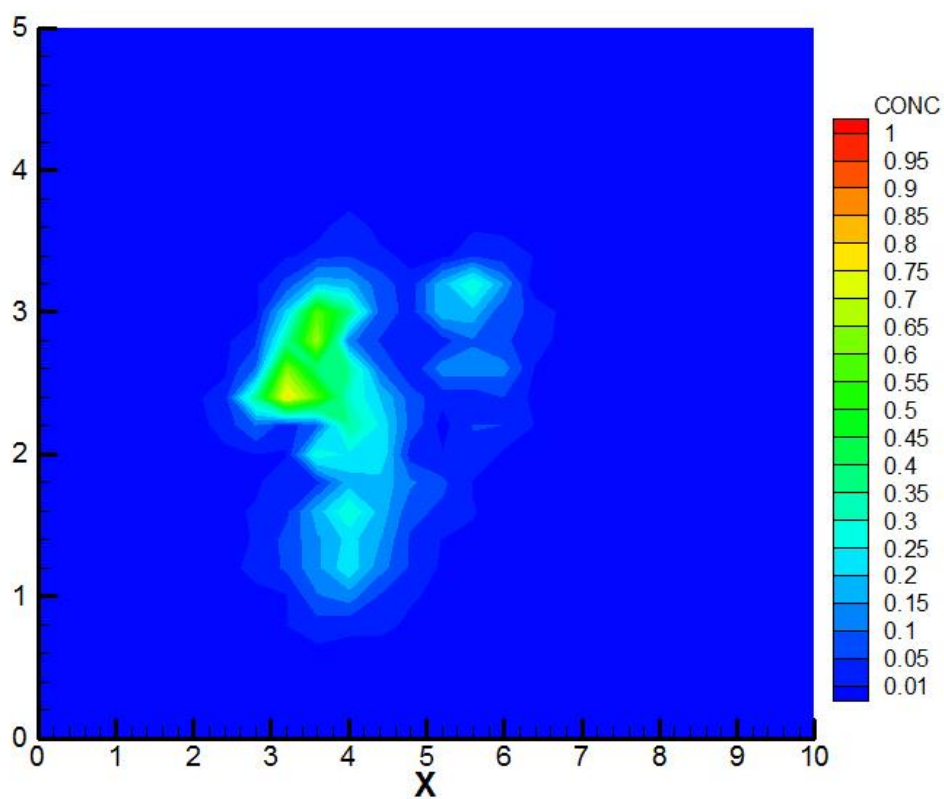
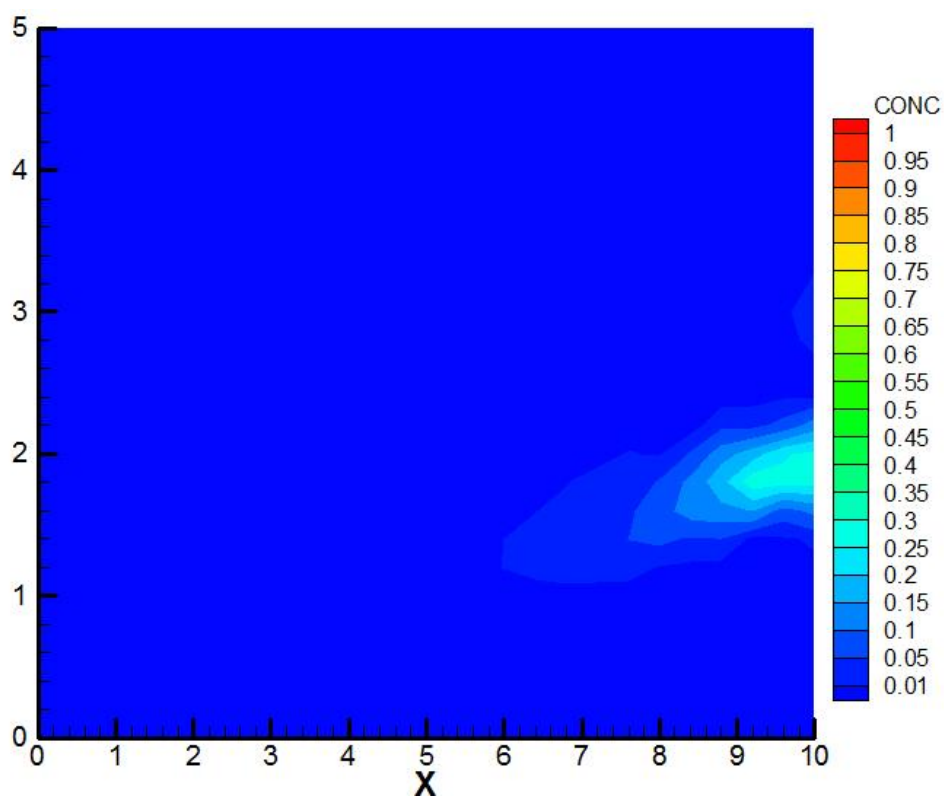
5. Kombinacija: $\sigma_1^2 = 1.0$; $\alpha_L = 0.01 \rightarrow Pe = 40$



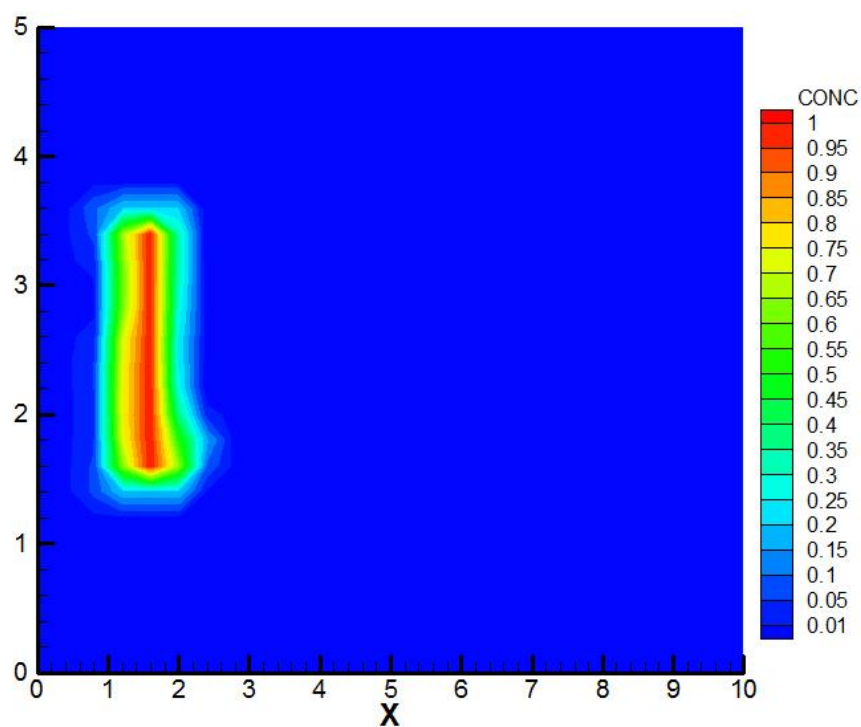
Slika 6.24. Prikaz koncentracije za 5.komb. u trenutku $t=0s$



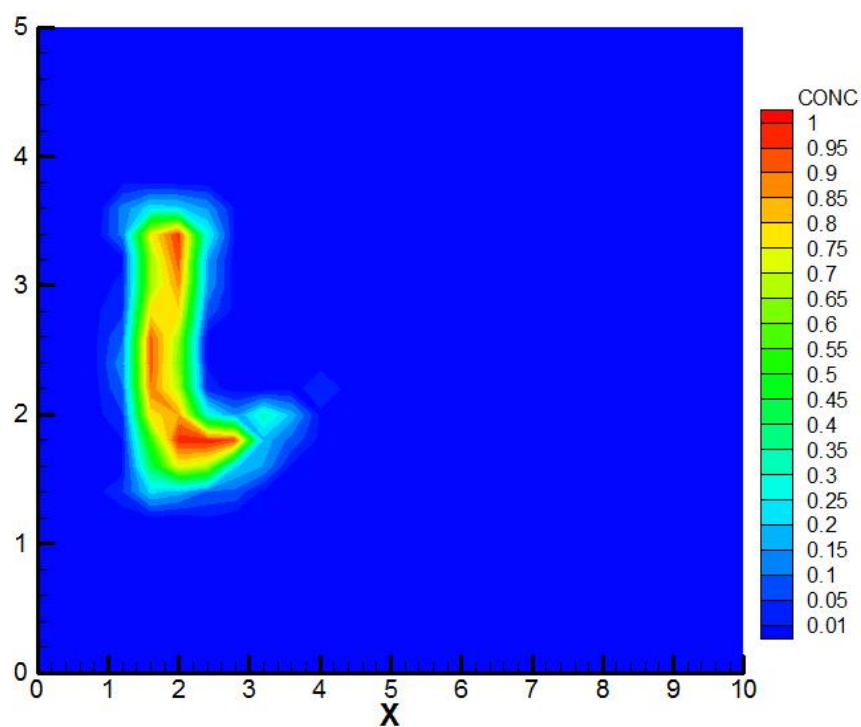
Slika 6.25. Prikaz koncentracije za 5.komb. u trenutku $t=2.5s$

Slika 6.26. Prikaz koncentracije za 5.komb. u trenutku $t=17.5s$ Slika 6.27. Prikaz koncentracije za 5.komb. u trenutku $t=62.5s$

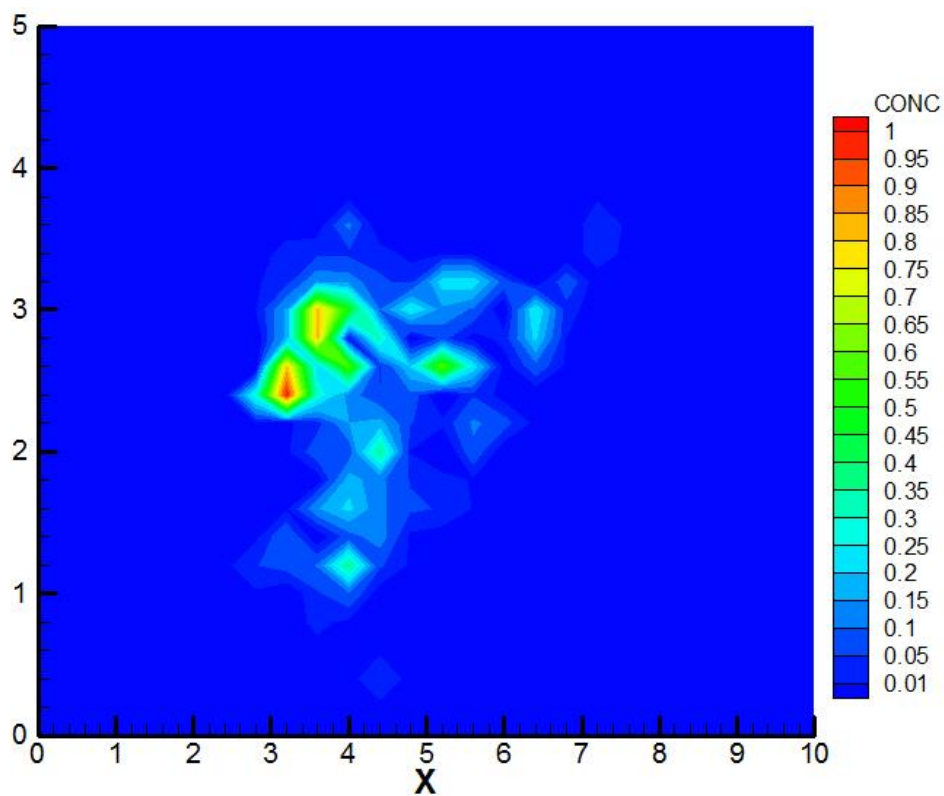
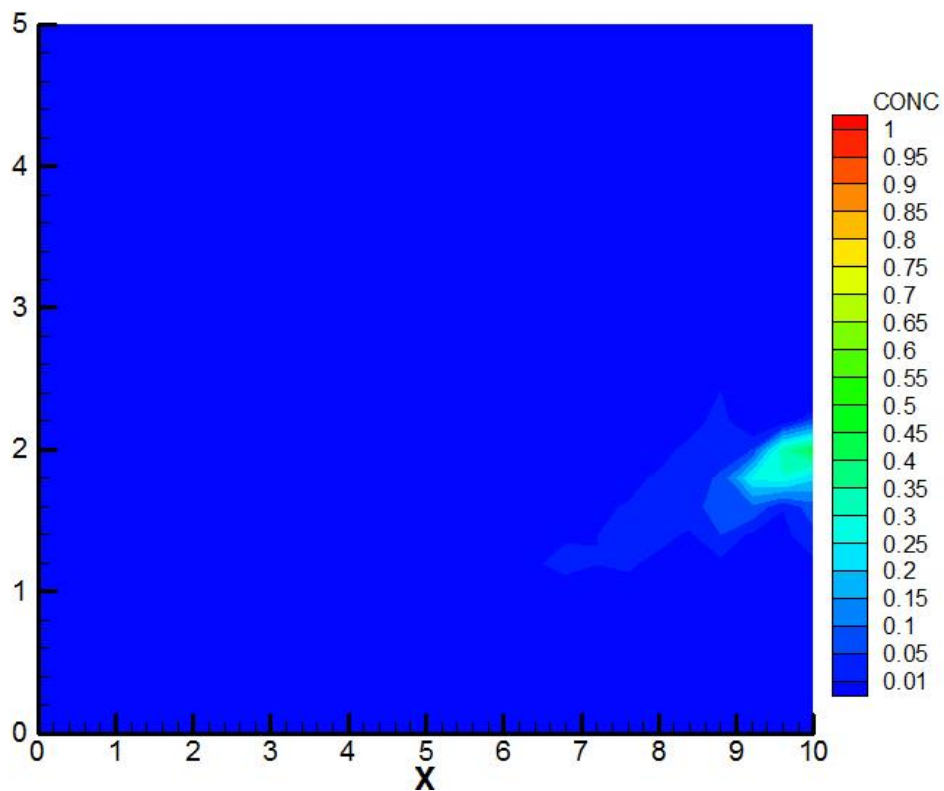
6. Kombinacija: $\sigma_1^2 = 1.0$; $\alpha_L = 0.001 \rightarrow Pe = 400$



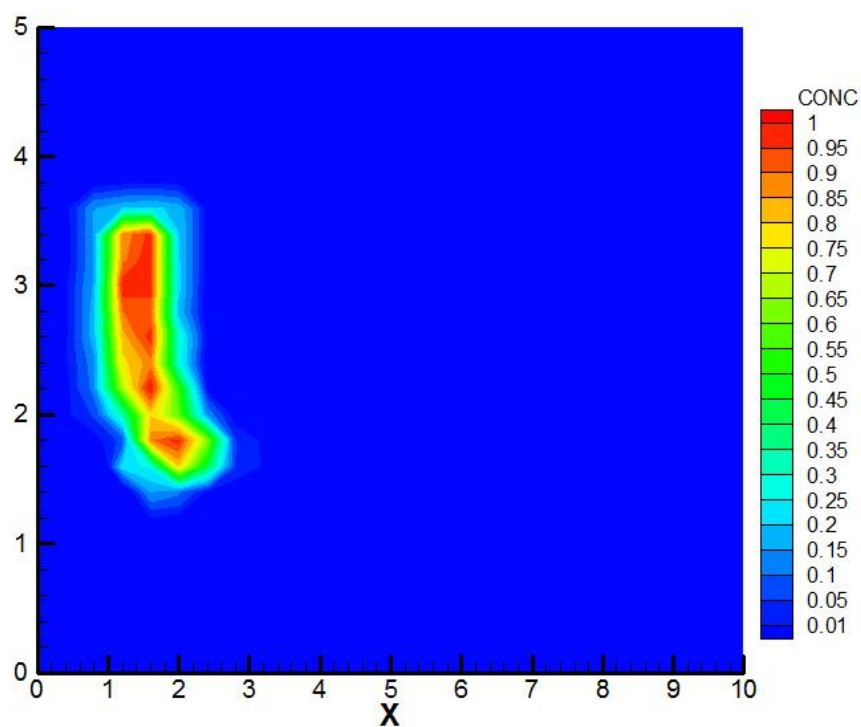
Slika 6.28. Prikaz koncentracije za 6.komb. u trenutku $t=0s$



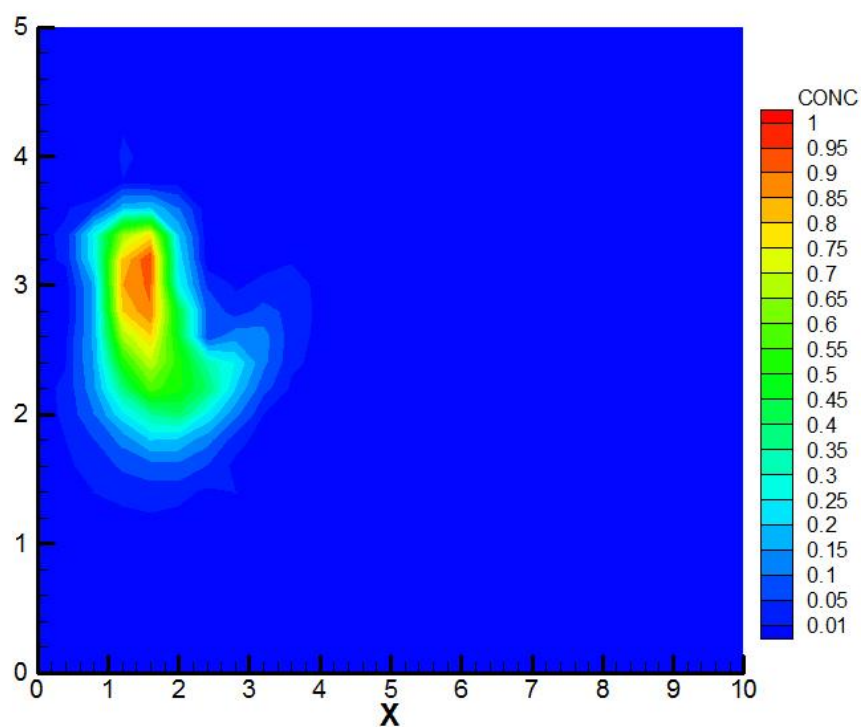
Slika 6.29. Prikaz koncentracije za 6.komb. u trenutku $t=2.5s$

Slika 6.30. Prikaz koncentracije za 6.komb. u trenutku $t=17.5s$ Slika 6.31. Prikaz koncentracije za 6.komb. u trenutku $t=62.5s$

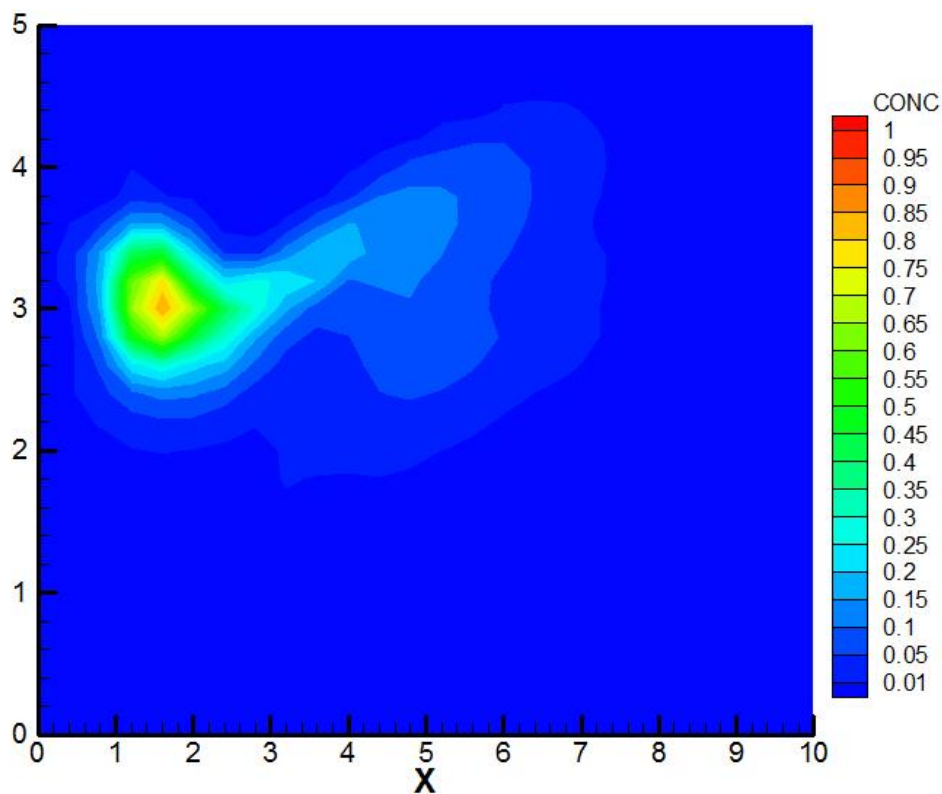
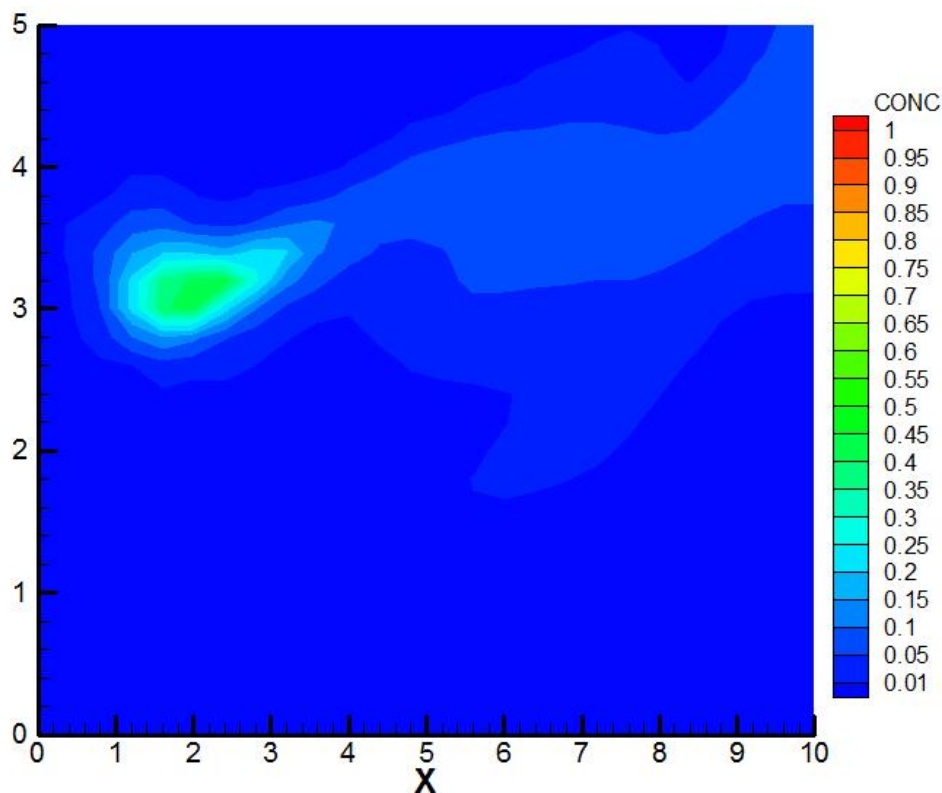
7. Kombinacija: $\sigma_1^2 = 4.0$; $\alpha_L = 0.2 \rightarrow Pe = 2$



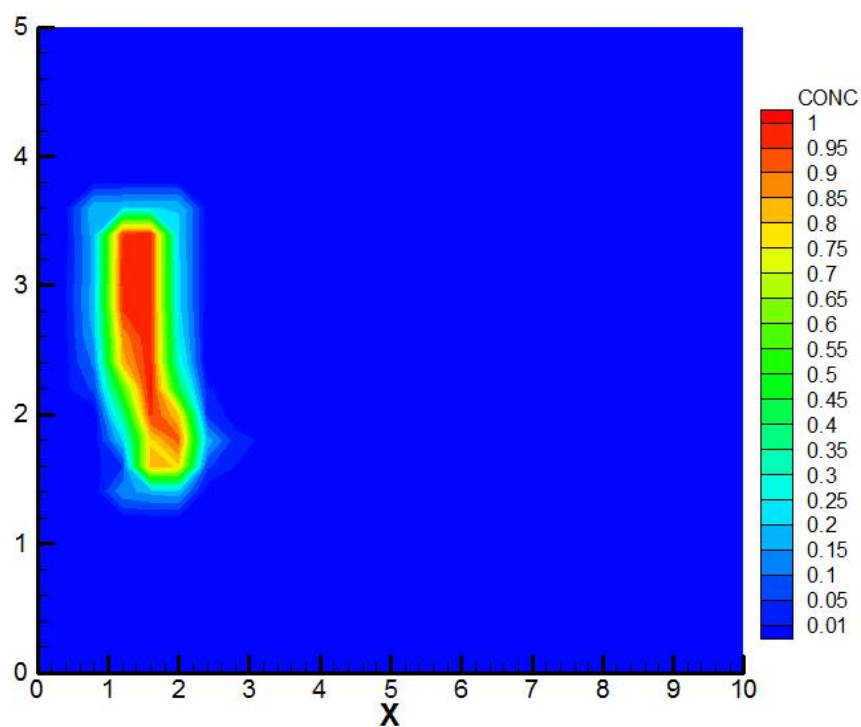
Slika 6.32. Prikaz koncentracije za 7.komb. u trenutku $t=0s$



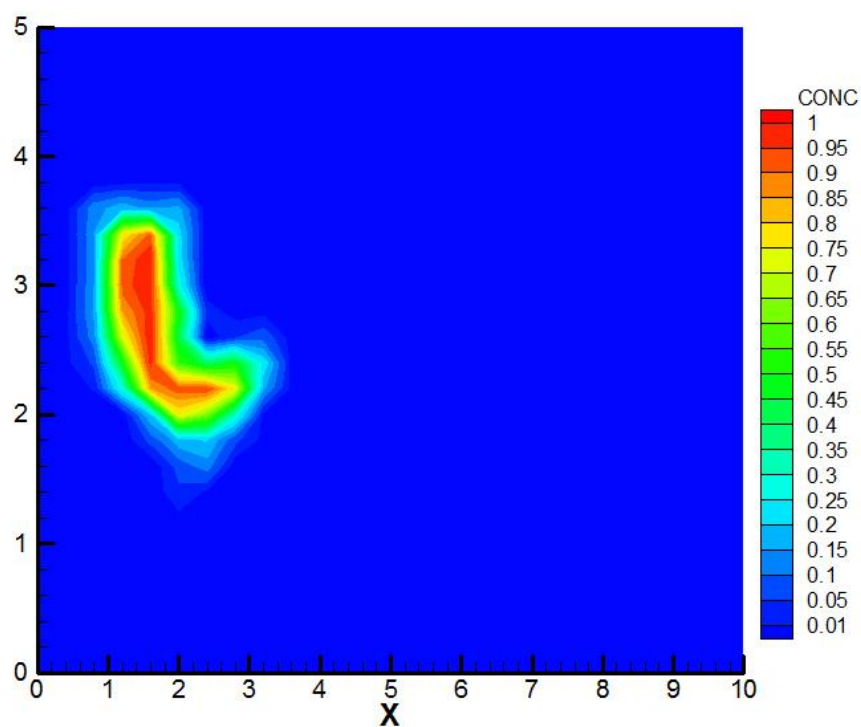
Slika 6.33. Prikaz koncentracije za 7.komb. u trenutku $t=2.5s$

Slika 6.34. Prikaz koncentracije za 7.komb. u trenutku $t=17.5s$ Slika 6.35. Prikaz koncentracije za 7.komb. u trenutku $t=62.5s$

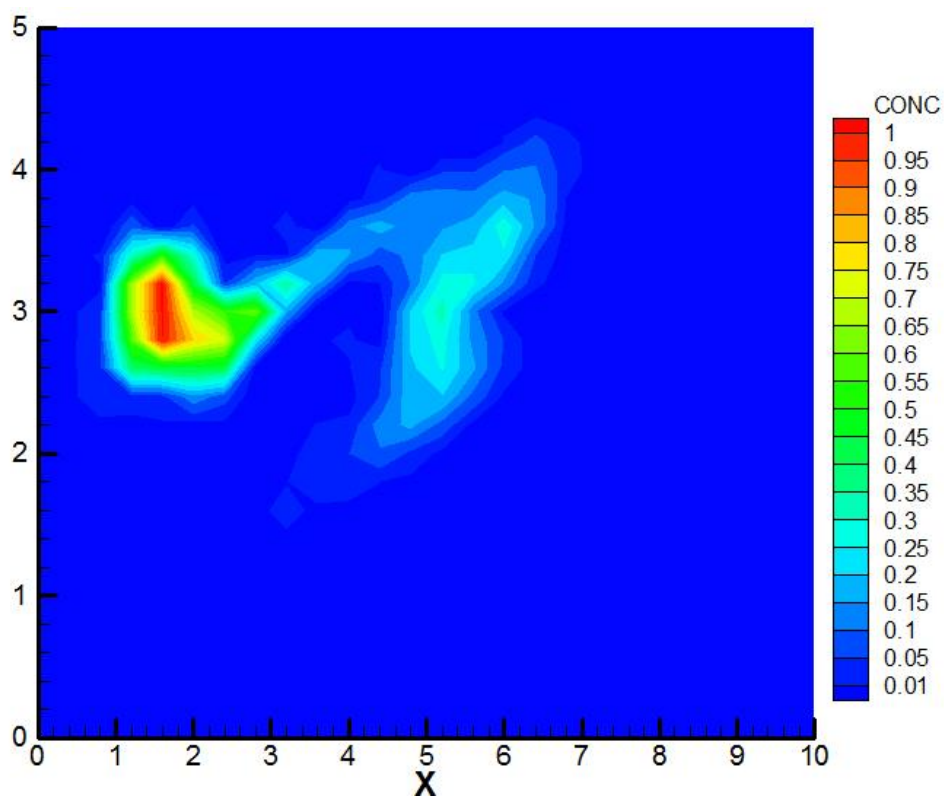
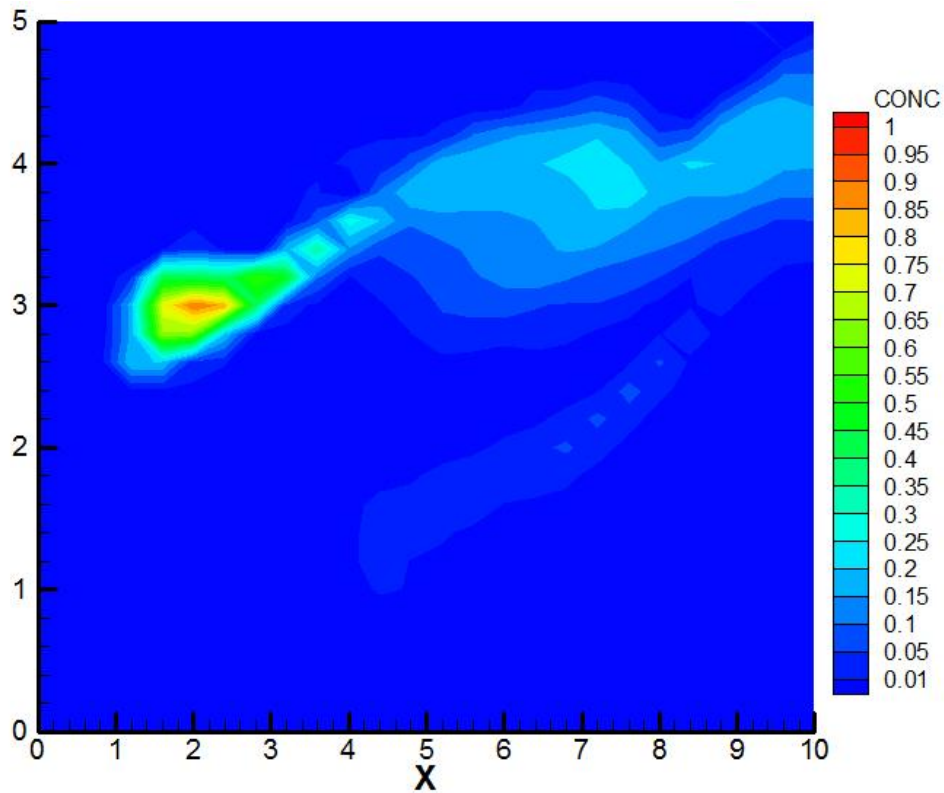
8. Kombinacija: $\sigma_1^2 = 4.0$; $\alpha_L = 0.01 \rightarrow Pe = 40$



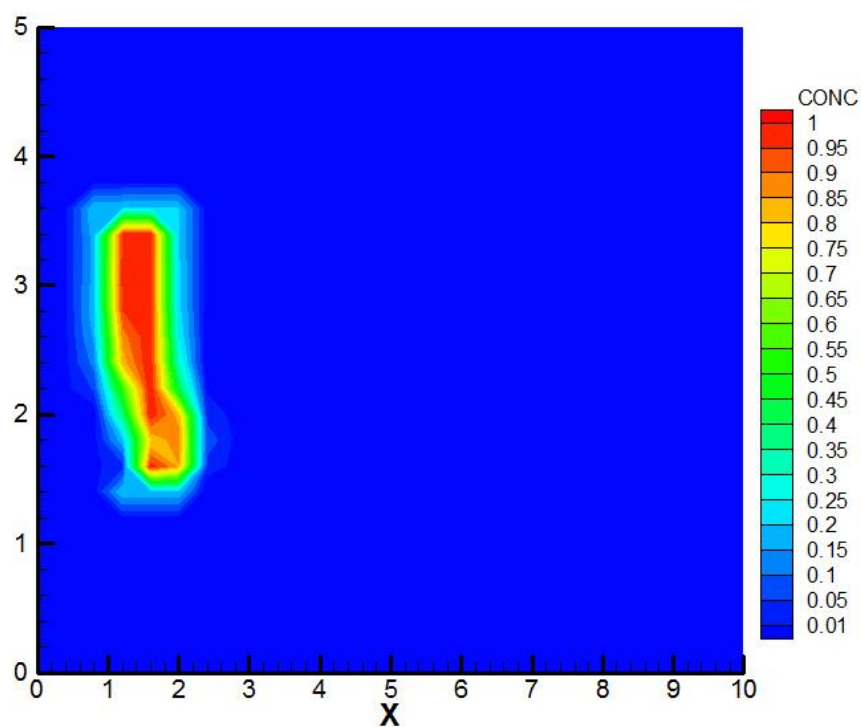
Slika 6.36. Prikaz koncentracije za 8.komb. u trenutku $t=0s$



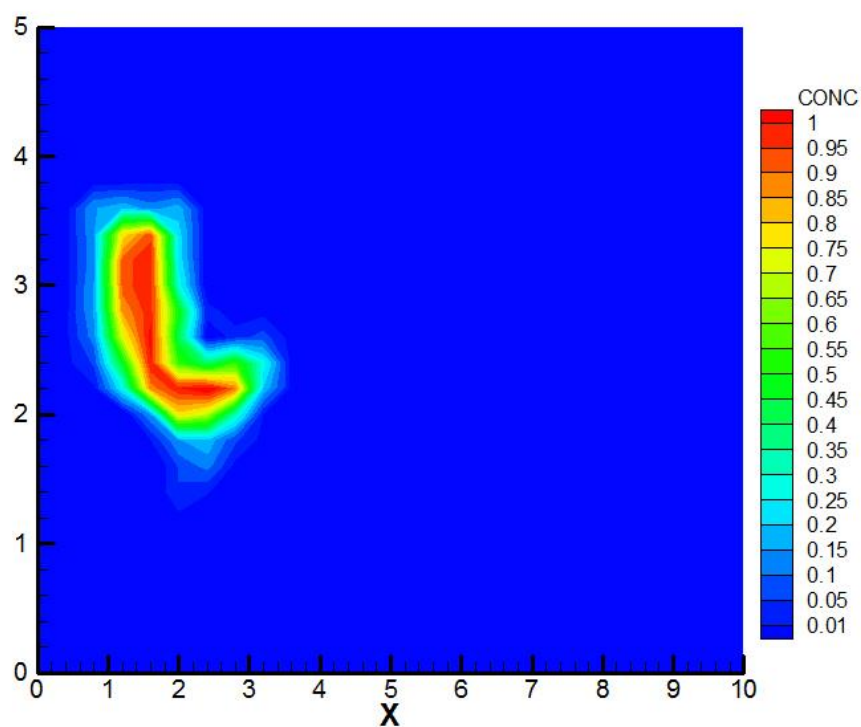
Slika 6.37. Prikaz koncentracije za 8.komb. u trenutku $t=2.5s$

Slika 6.38. Prikaz koncentracije za 8.komb. u trenutku $t=17.5s$ Slika 6.39. Prikaz koncentracije za 8.komb. u trenutku $t=62.5s$

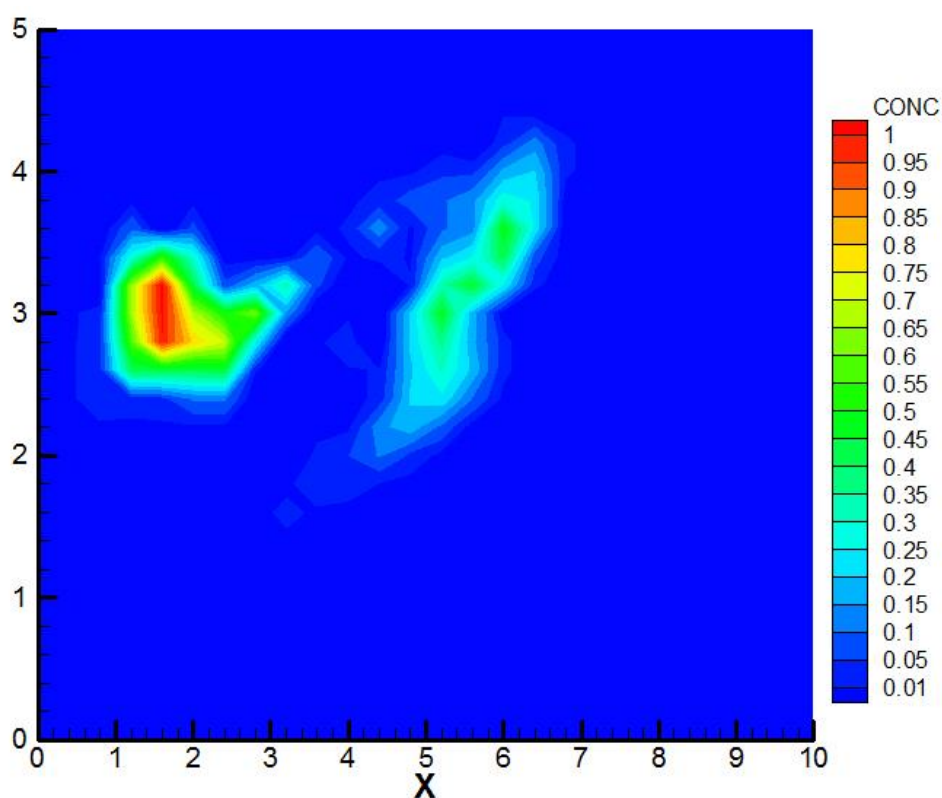
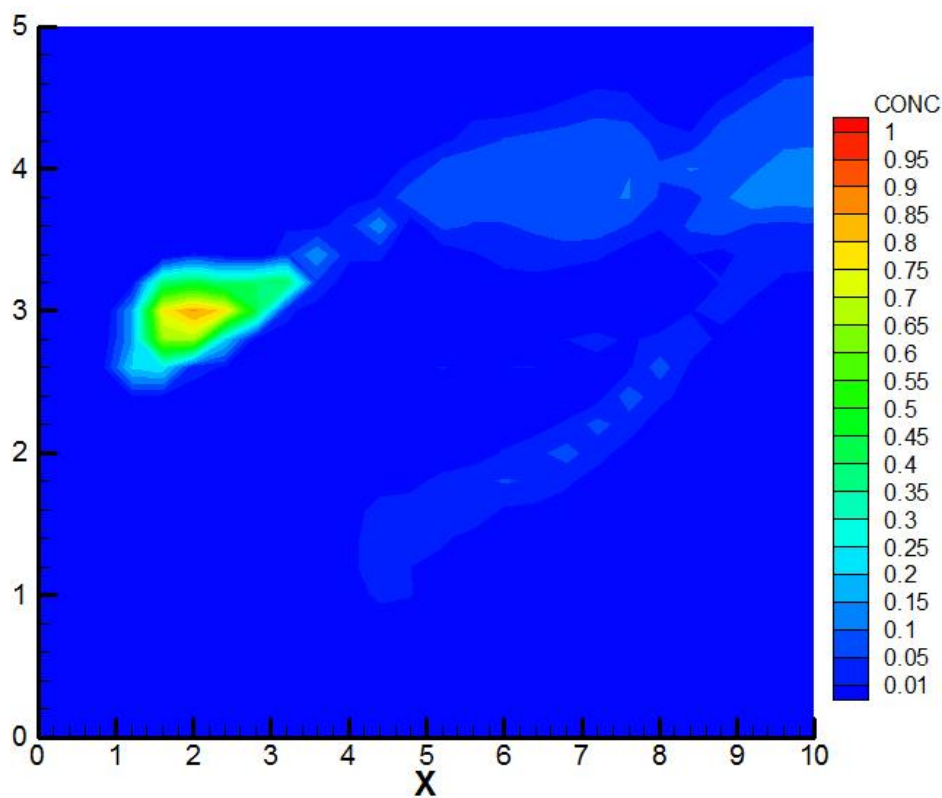
9. Kombinacija: $\sigma_1^2 = 4.0$; $\alpha_L = 0.001 \rightarrow Pe = 400$



Slika 6.40. Prikaz koncentracije za 9.komb. u trenutku $t=0s$



Slika 6.41. Prikaz koncentracije za 9.komb. u trenutku $t=2.5s$

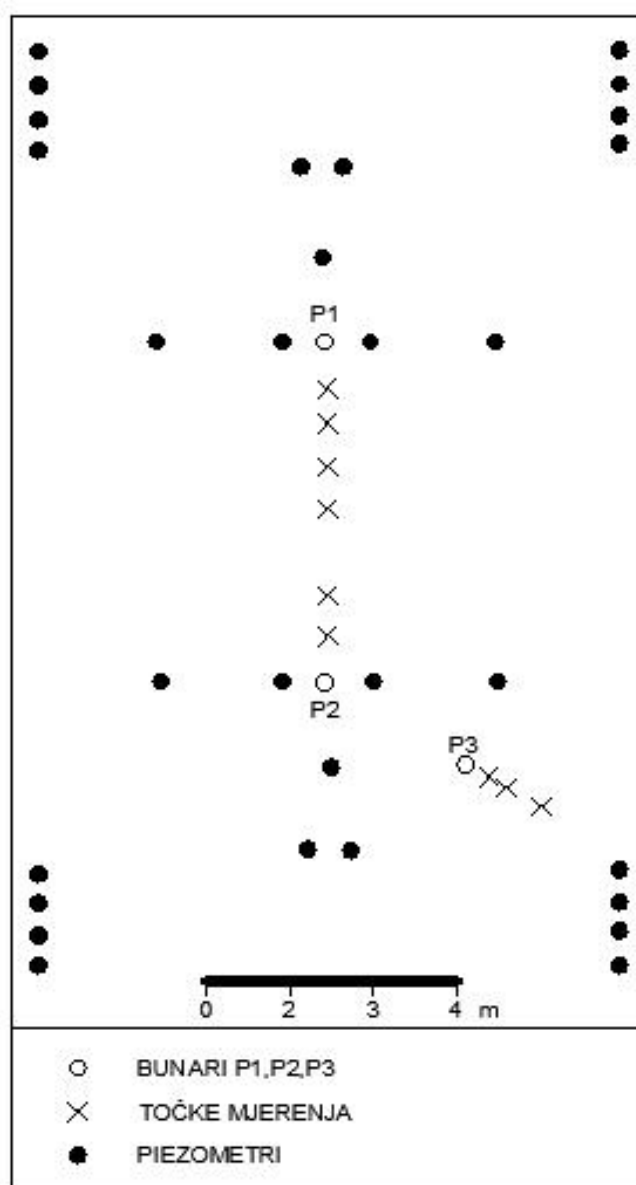
Slika 6.42. Prikaz koncentracije za 9.komb. u trenutku $t=17.5s$ Slika 6.43. Prikaz koncentracije za 9.komb. u trenutku $t=62.5s$

6.2. Traser test s dva bunara

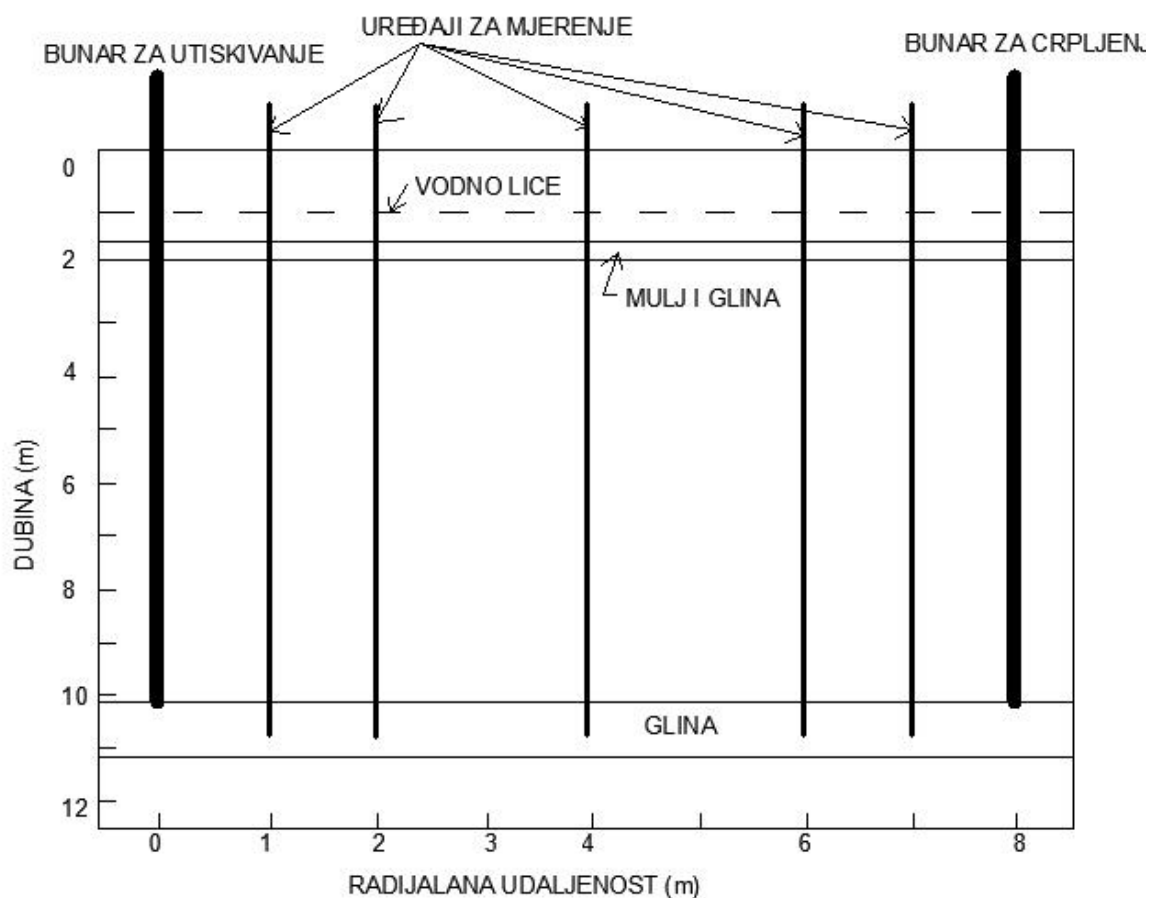
6.2.1. Opis problema

Ovaj test se temelji na istraživanju koje su vršili Pickens i Grisak te opisali u svom radu "Scale-Dependent Dispersion in a Stratified Granular Aquifer" iz 1981. godine.

Oni su istraživali utjecaj malih protoka mase i disperzijskih procesa na pronos između dva bunara. Vrijednost longitudinalne disperzije u slojevitom pjeskovitom vodonosniku istraživana je koristeći laboratorijske stupce i traser testove na terenu. Istraživanja na terenu su uključivala traser test koji se sastojao od recirkulirajuća dva bunara. U jedan bunar se utiskivala tekućina s traserom, a iz drugog se crpila. Traser koji je korišten na terenu je krom (Cr) i to tako da je u bačvi od 22,7 l vode pomiješano 3,7 GBq Cr-EDTA i 0,5 mg stabilnog Cr. U 3,22 dana, traser je dodavan količinom od 0,083 ml/s u vodu koja se dodavala s protokom od 0,449 l/s u utiskivajući bunar. Vrijeme trajanja traser testa je bilo 15 dana. Uzorci vode su uzeti s oba bunara i piezometara koji su locirani 4 m i 7 m od utiskivajućeg bunara. Iz svakog uzorka uzeto je oko 100 ml tekućine koja se koristila za analizu koncentracije trasera. Dobiveni rezultati praćenja svih piezometara pokazuju da je relativni pomak trasera bio prilično konzistentan na svakoj pojedinoj dubini i time možemo smatrati da je vodonosnik relativno homogen između dva bunara. Traser nije detektiran u najplićim, ni u najdubljim dijelovima piezometara dokazujući time da postoje nepropusni slojevi između vrha i dna vodonosnika. U nastavku je prikazan tlocrt (slika 6.38.) i presjek (slika 6.39.) područja nad kojim su Pickens i Grisak vršili test.

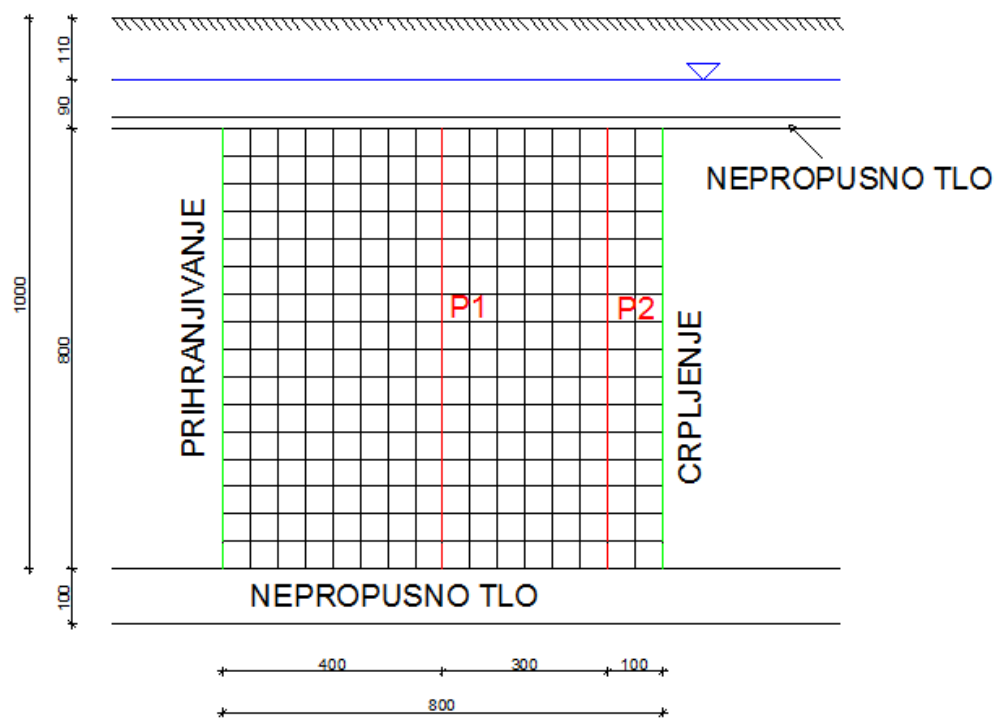


Slika 6.44. Tlocrtni prikaz područja na kojem je vršeno ispitivanje



Slika. 6.45. Presjek područja na kojem je vršeno ispitivanje

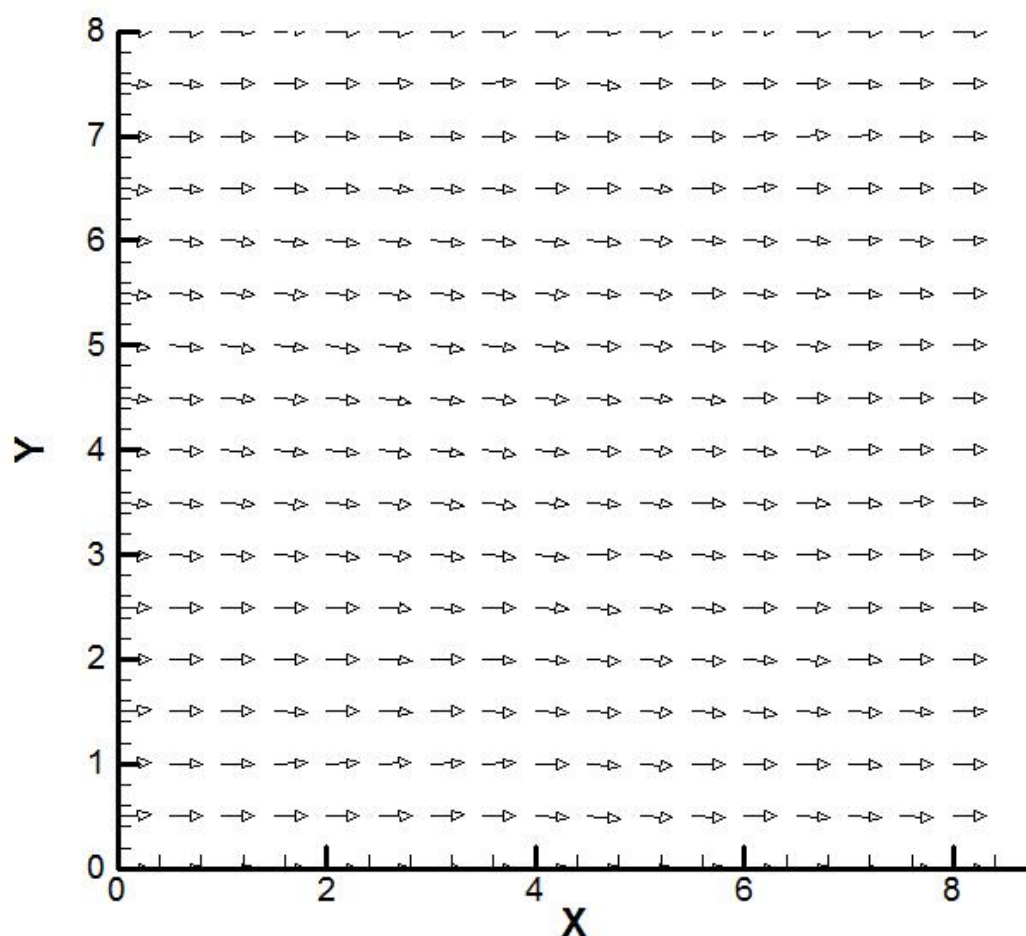
Na osnovu prethodno opisanog testa potrebno je pomoću Euler-Lagrangeova modela izvršiti simulaciju koju su vršili Pickens i Grisak u svome testu te dobivene rezultate usporediti sa stvarnim podacima dobivenim na temelju eksperimenta. Potrebno je na osnovu poznatih vrijednosti konduktiviteta u 2 bušotine (P1 i P2) odrediti polje heterogenosti za promatranu domenu koja se nalazi između bunara za utiskivanje i bunara za crpljenje (slika 6.40.). Polje heterogenosti određujemo metodom Kriginga u računalnom programu Fi tako da se na temelju esperimentalnog varijograma odredi teorijski varijogram. Teorijski varijogram se pretpostavio kao eksponencijalni sa koeficijentima varijance 0,183 i korelacijskom dužinom od 0,388m. Iz varijance se zaključuje da se radi o dosta homeogenom mediju. Nakon dobivenog polja heterogenosti zadajemo prisilne (kinematičke) i prirodne (dinamičke) rubne uvijete kako bi dobili strujnu mrežu koja nam je potrebna za određivanje pronosa i traženih koncentracija utiskivane otopine.



Slika. 6.46. Prikaz diskretizacije područja i loakcije piezometra te dva bunara (prihranjivanje/crpljenje)

Kao prisilni rubni uvjet zadan je piezometarska visina $h=9$ m na desnoj granici, dok se na lijevoj granici zadao dinamički rubni uvjet: $v = 9,35 \times 10^{-6}$ m/s. Za početni uvjet uzete su vrijednosti potencijala dobivene iz stacionarnog modela Fi. Za diskretizaciju je korišteno 256 konačnih elemenata dimenzija $0,5 \times 0,5$ m. Koeficijent poroznosti n je 0.36. Na temelju eksperimentalnog variograma dobiven je teorijski i to eksponencijalni sa parametrima $\sigma^2 = 0,18333$ i $\lambda = 0,3875$. Proračun je napravljen za vremenski korak od 1000sec (16.7min).

Kao glavni ulaz za advekciju je polje brzina koje je prikazanao na slici 6.41. Polje brzina dobiveno nestacionarnom metodom se ne mijenja s vremenom tj. promjene su jako male da se teško mogu i primjetni. Zbog toga može slijedi zaključak da stacionaran i nestacionaran proračun daje isto polje brzina. Razlog tome je činjenica da se traser ubacivao tek nakon što se polje brzina stacioniralo.



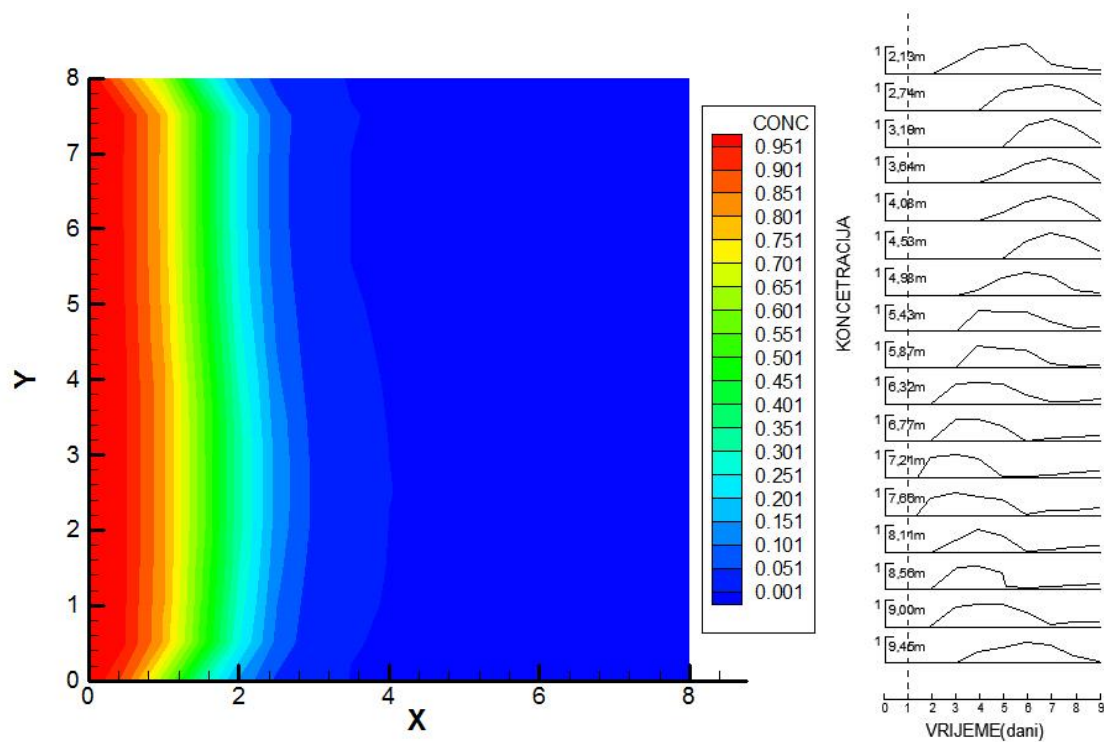
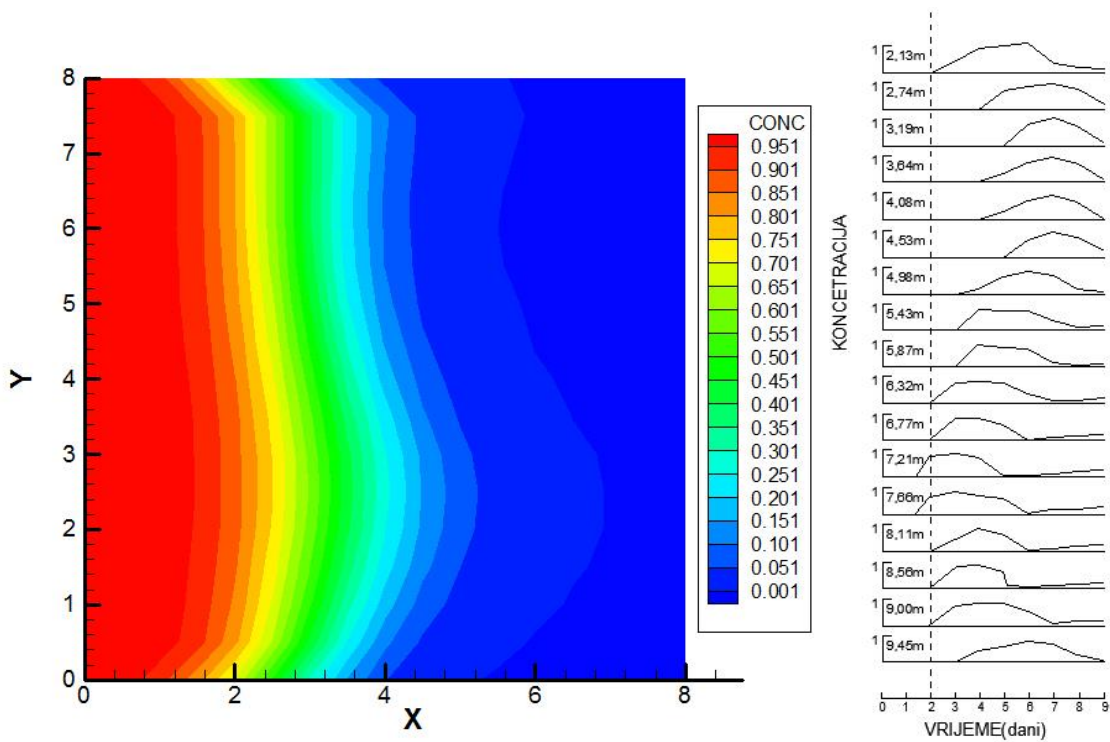
Slika. 6.47. Polje kontinuiranih brzina

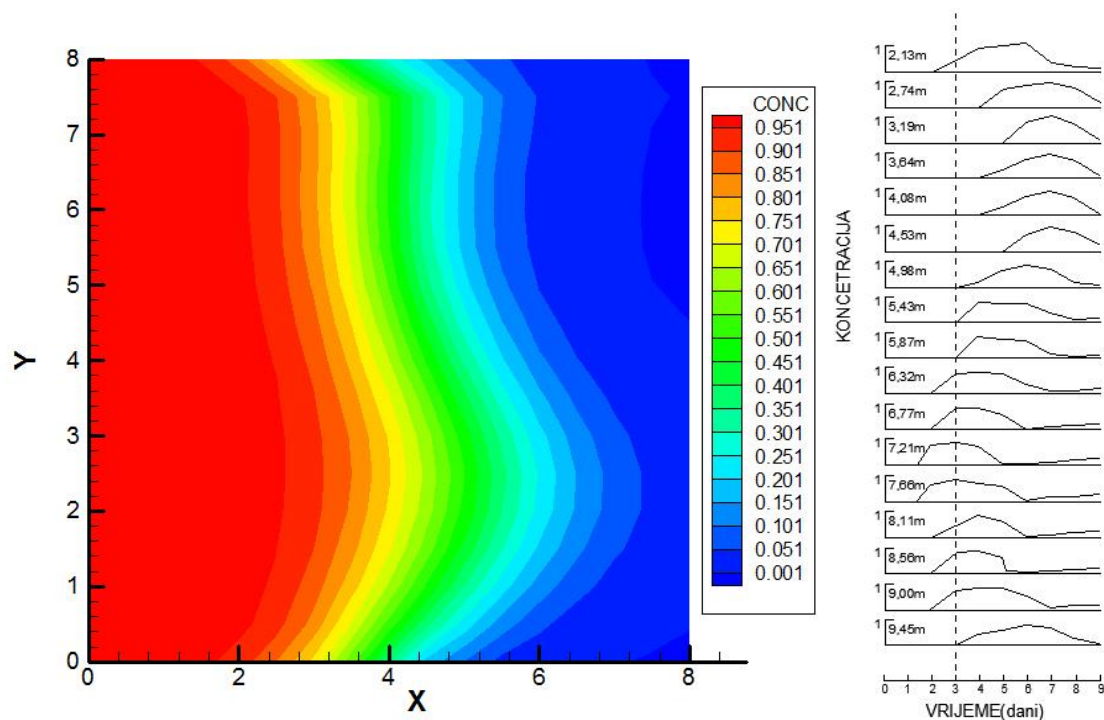
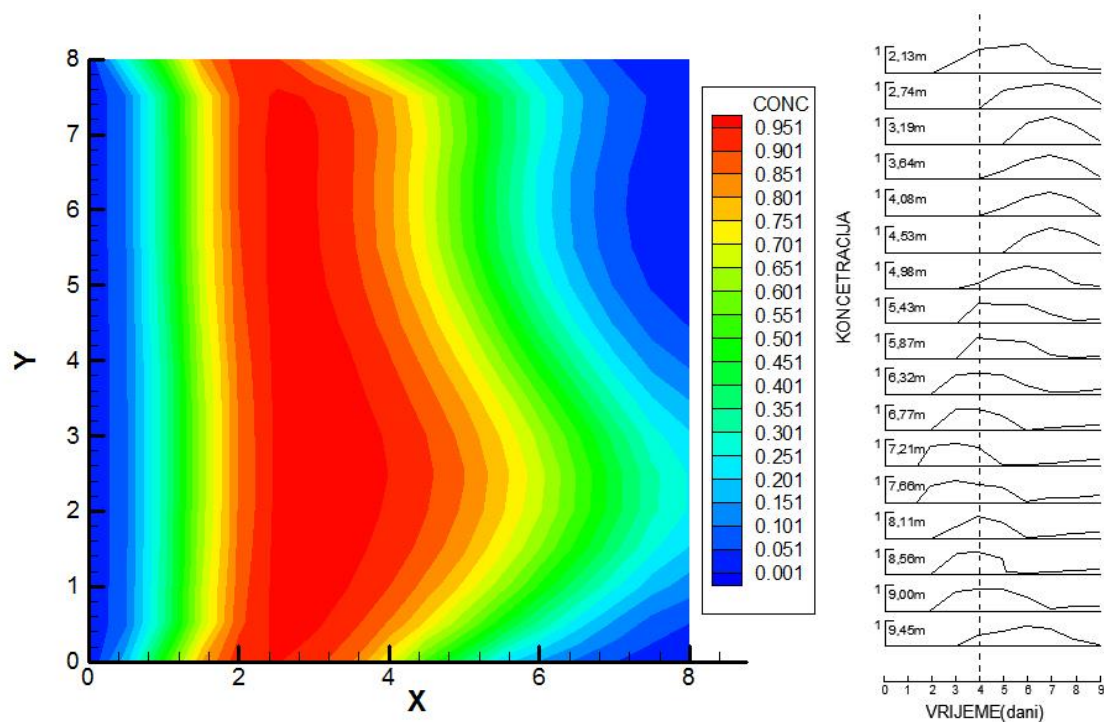
6.2.2. Rezultati proračuna

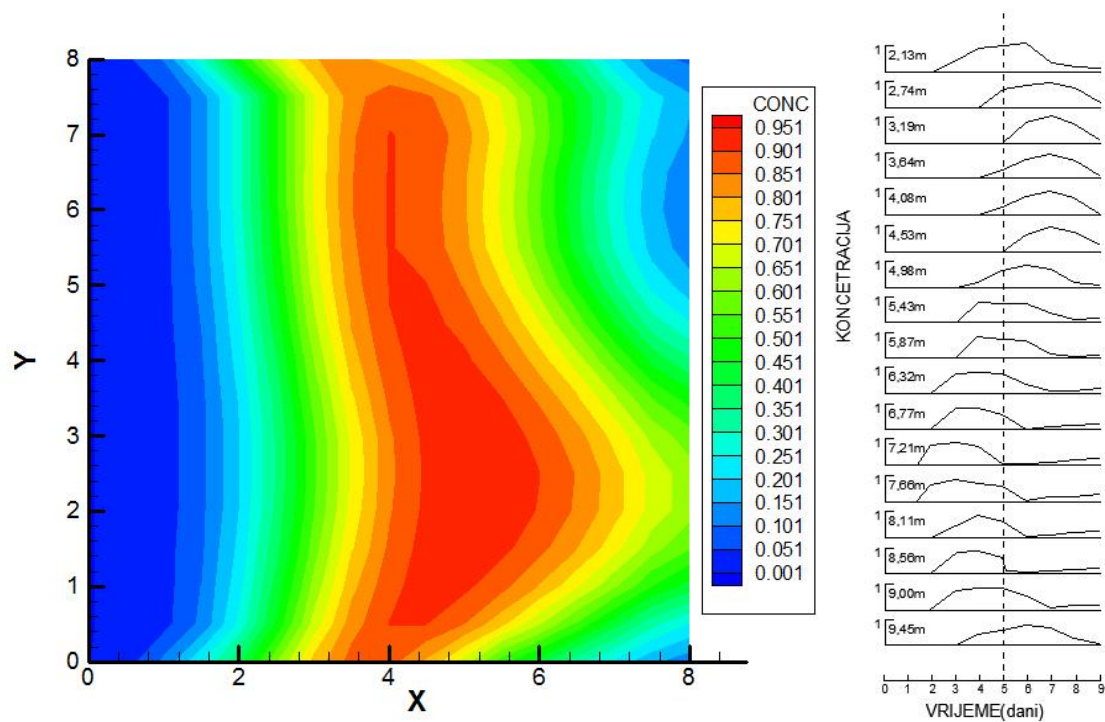
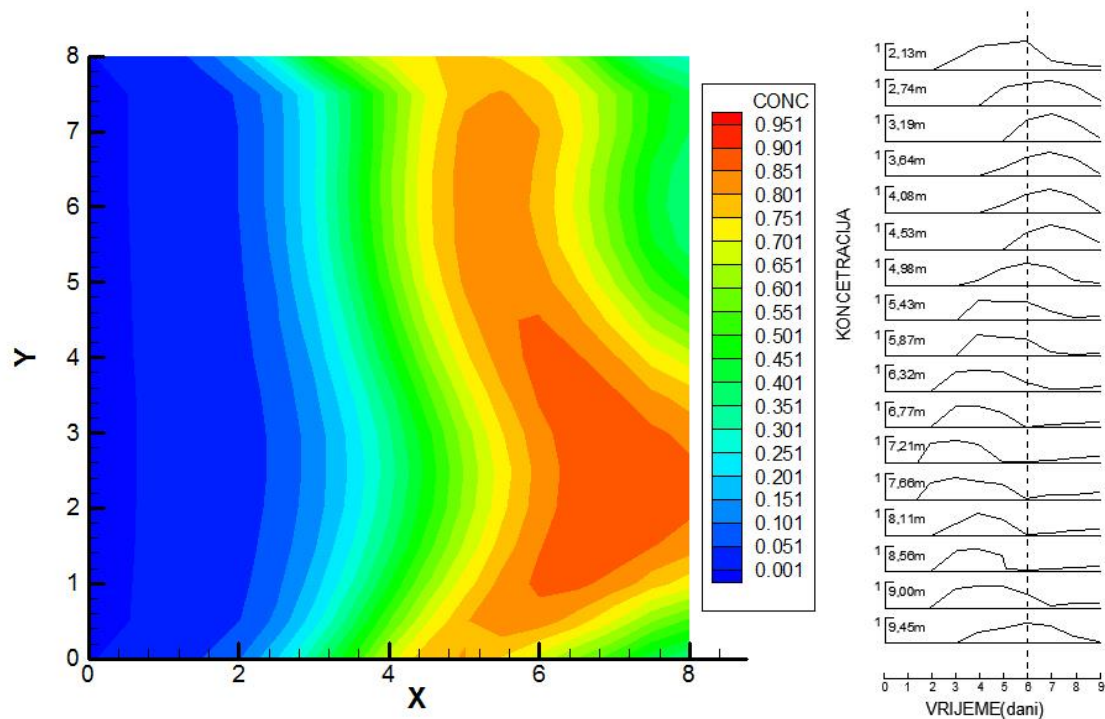
Rezultati prikazuju koncentracije koje se javljaju na promatranoj domeni za svaki dan (ukupno 9 dana) od početka utiskivanja traser. S desne strane na grafikonu vrijeme/koncentracija su prikazani rezultati koje su dobili Pickens i Grisak dok su s lijeve strane rezultati koje su dobiveni Euler-lagrange modela za prethodno navedene parametre. Bitno je za napomenuti da se rezultati prikazani s desne strane koje su dobili Pickens i Grisak očitani iz uređaja za mjerenje koji je prikupljao podatke na udaljenosti 4m od mjesta utiskivanja tj. na sredini promatrane domene.

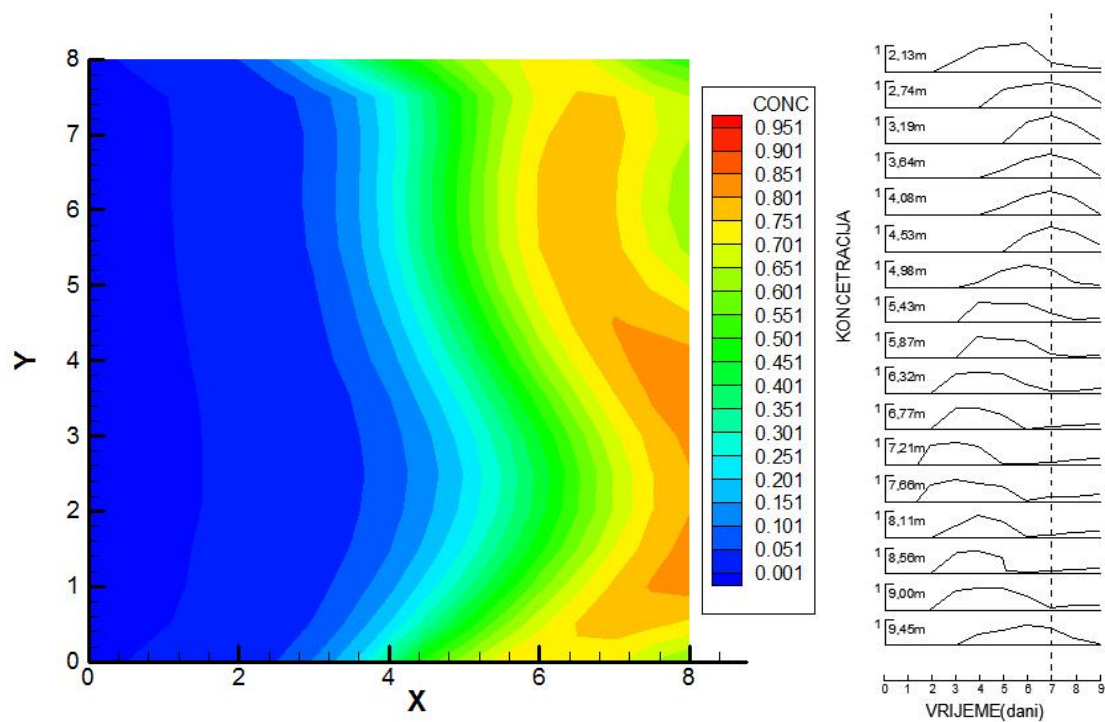
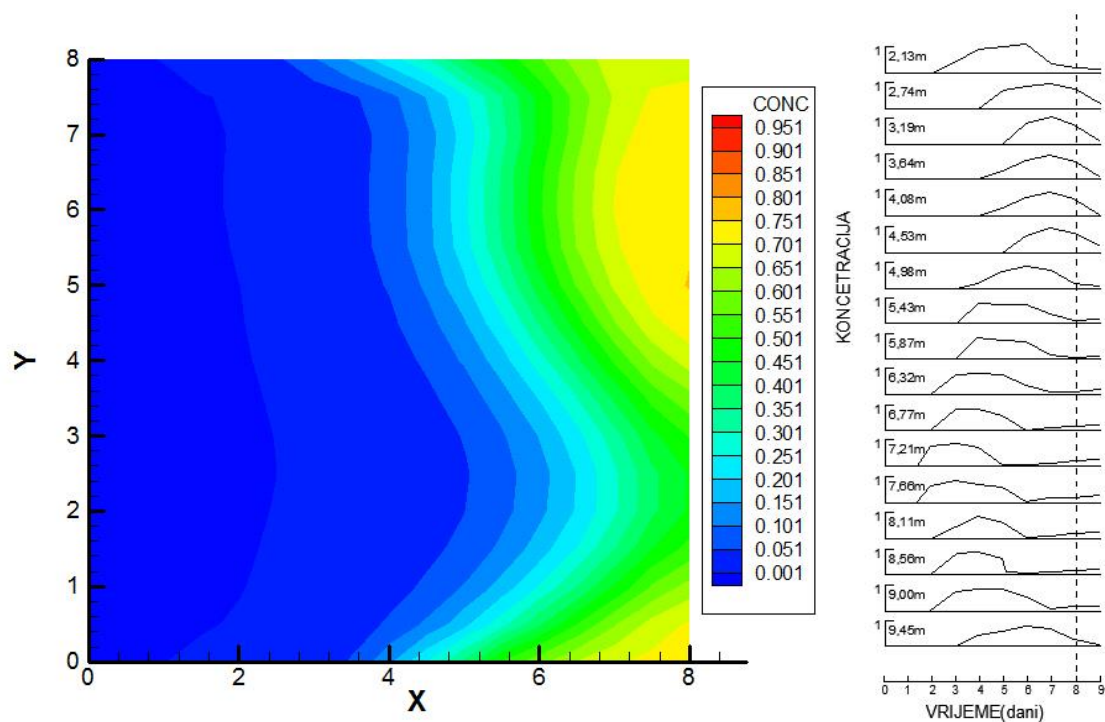
Brzine idu od lijeve prema desnoj strani. Traser je utisnut 3,22 dana isto kao i u eksperimentu pomoću prisilni rubnih uvjeta $C=1$ koji su zadani na mjestu utiskivanja. Nakon 3,22 dana se taj uvjet se zamjenio uvjetom $C=0$ te je oblak tada nastavio putovati prema desnoj granici sve dok nakon 9 dana nije izašao iz domene.

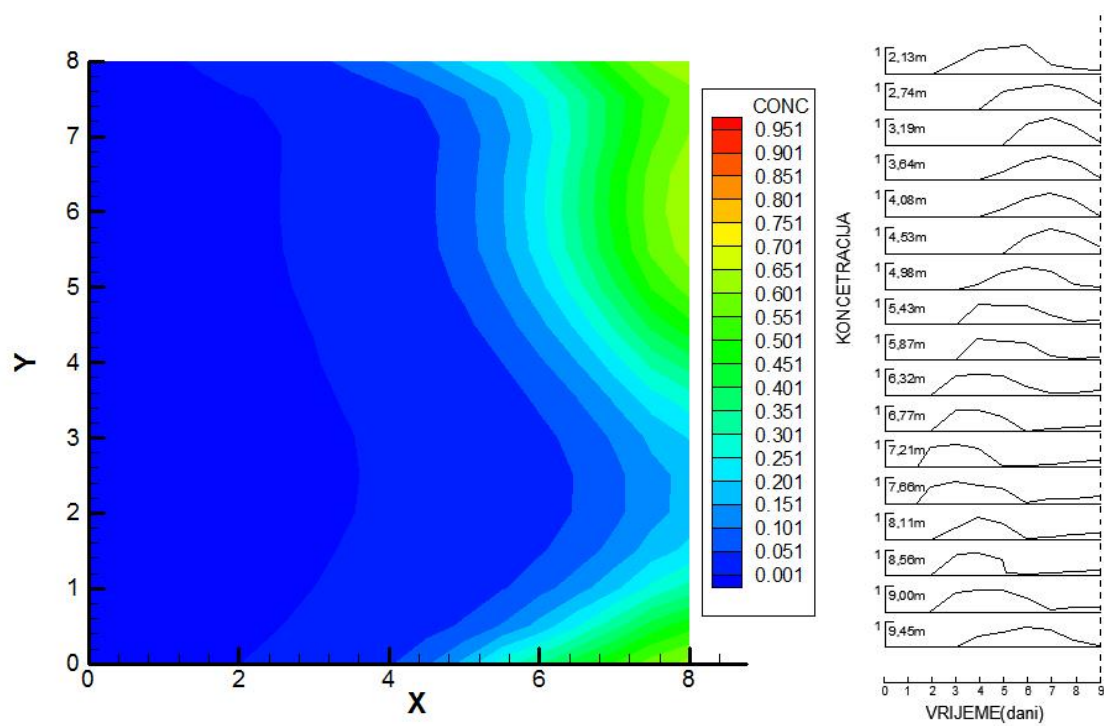
USPOREDBA REZULTATA NA ČITAVOJ DOMENI

Slika. 6.48. Prikaz koncentracije nakon **prvog** dana od početka utiskivanjaSlika. 6.49. Prikaz koncentracije nakon **drugog** dana od početka utiskivanja

Slika. 6.50. Prikaz koncentracije nakon **trećeg** dana od početka utiskivanjaSlika. 6.51. Prikaz koncentracije nakon **četvrtog** dana od početka utiskivanja

Slika. 6.52. Prikaz koncentracije nakon **petog** dana od početka utiskivanjaSlika. 6.53. Prikaz koncentracije nakon **šestog** dana od početka utiskivanja

Slika. 6.54. Prikaz koncentracije nakon **sedmog** dana od početka utiskivanjaSlika. 6.55. Prikaz koncentracije nakon **osmog** dana od početka utiskivanja



Slika. 6.56. Prikaz koncentracije nakon **devetog** dana od početka utiskivanja

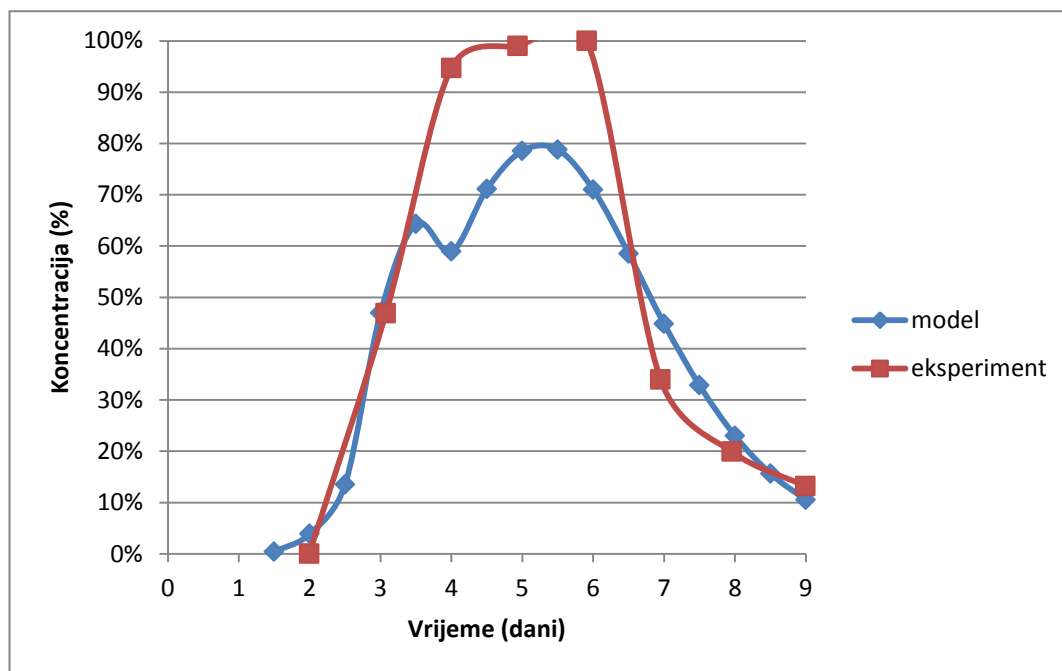
Može se reći da se rezultati dosta slični što govori da model proizišao iz ovog diplomskog rada dosta realno opisuje pronos u poroznim formacijama. Na nekim dubinama je vidljivo da su odstupanja izraženija. Sva ta odstupanja su realna zbog toga šta uspoređujemo 2D model dobiven računalnom metodom sa mjerenjima u stvarnom 3D modelu. Unatoč činjenici da razvijeni model koji je 2D vidljivo je iz rezultata da je model dao iznenađujuće dobra podudaranja sa stvarnim mjerenjima. Sve to ukazuje kako se model može koristiti za relativno dobre simulacije tečenja pronosa u heterogenim formacijama naravno ukoliko imamo dovoljno dobre podatke za polje heterogenosti poroznog medija koji je glavni ulaz za ovaj model.

U nastavku su prikazane usporedbe rezultata mjerenja i modela po dubinama. Na tim usporedbama se može detaljnije primjetiti neke pojave koje se nemogu obuhvatiti sa samim modelom a javljaju se u prirodi. Na dubinama od 2,74m do 4,98m jasno se vidi da rezultati dobiveni modelom imaju isti oblik kao rezultati dobiveni mjerenjem samo šta su translirani duž vremena (x-os). Translacije se javljaju zbog toga šta je ovaj model rađen za 2D problem dok se u stvarnosti javljaju i zaobilazni putevi. Zbog toga je teško pogoditi točnu brzinu. Uz to na dubinama od 5,43m do 8,11m se zamjećuje pojava sporih zona. Koncentracija zapne u sporim zonama, dok ostatak prolazi kroz brže zone. Kad koncentracija iz brzih zona prođe dolazi do povećanja gradijenta koncentracije što uzrokuje da se i koncentracija koja je zapela izađe iz spore zone. Zbog toga se javlja povećanje koncentracije u zadnjim danima praćenja traser testa. To su ograničenja koja ovaj model nije u mogućnosti pokriti.

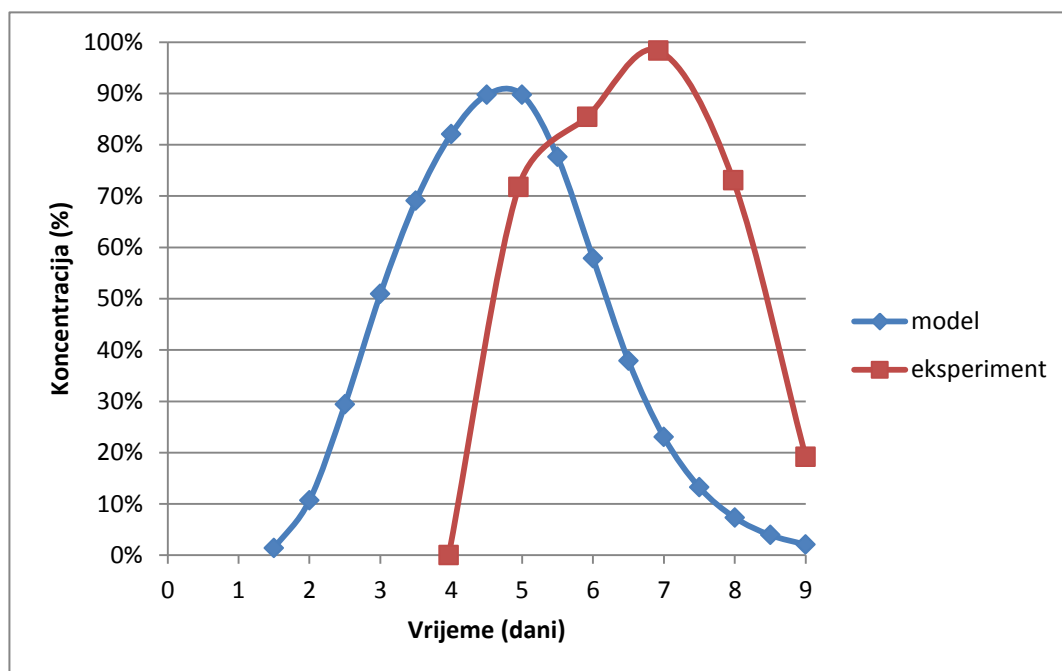
Zbog pojave sporih zona iz rezultata je vidljivo da model nemože opisati u potpunosti ono šta se događa u prirodi što je bilo i za očekivati pošto se model temelji na Fickovom transportu koji nemože pokriti te pojave. Uz to se još radi o mediju male heterogenosti što je još jedan razlog koji utječe na ovakve rezultate modela. Model nije u mogućnosti pokriti ponašanja sporih zona koje imaju utjecaj na prolaznu krivulju u kasnijim vremenima. Koncentracija koja zapne u sporim zonama sporo otječe iz promatrane zone. To otjecanje može potrajati i do nekoliko dana duže nego šta je eksperiment trajao.

Iz svega navedenog kao zaključak verifikacije modela na ovom primjeru uočeno je da model dovoljno dobro zadovoljava simulaciju pronosa.

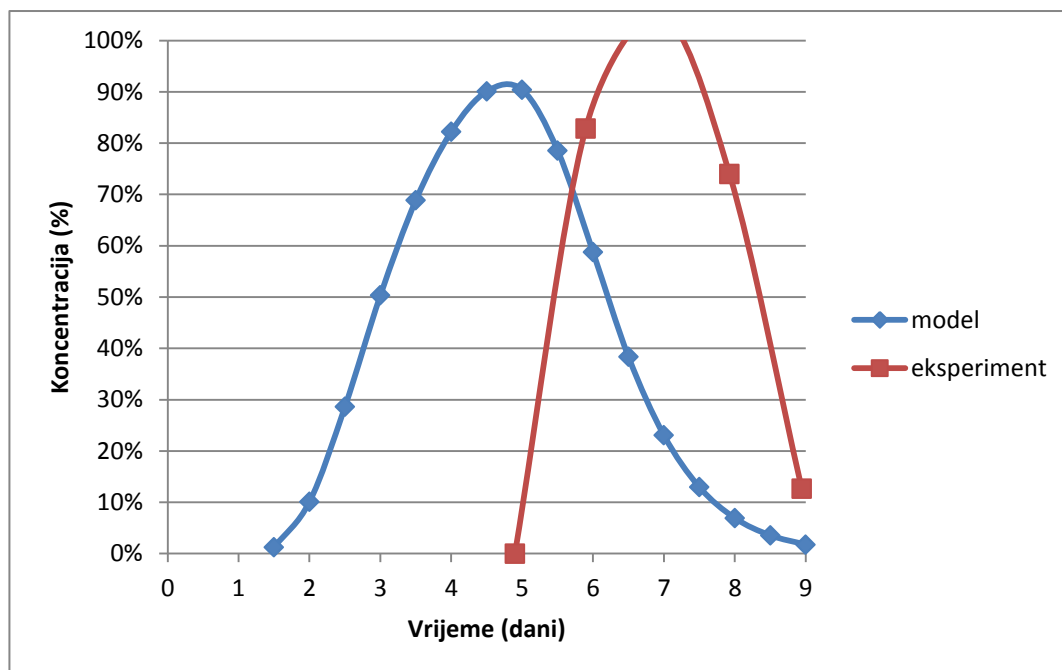
USPOREDBA REZULTAT PO DUBINAMA



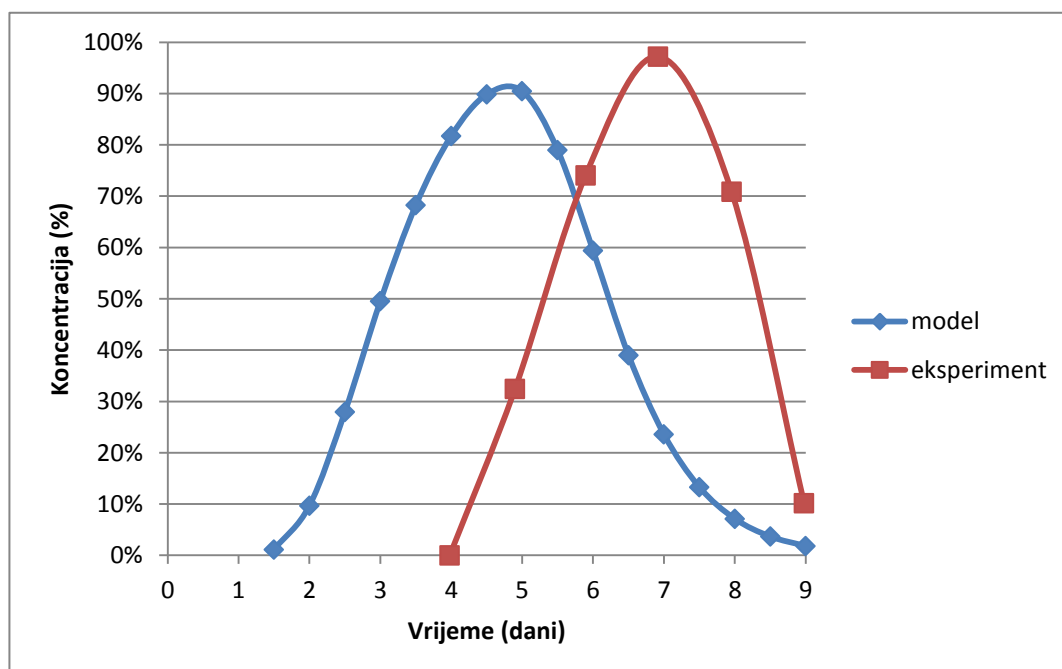
Slika. 6.57. Prikaz koncetnracije na dubini od 2,13m



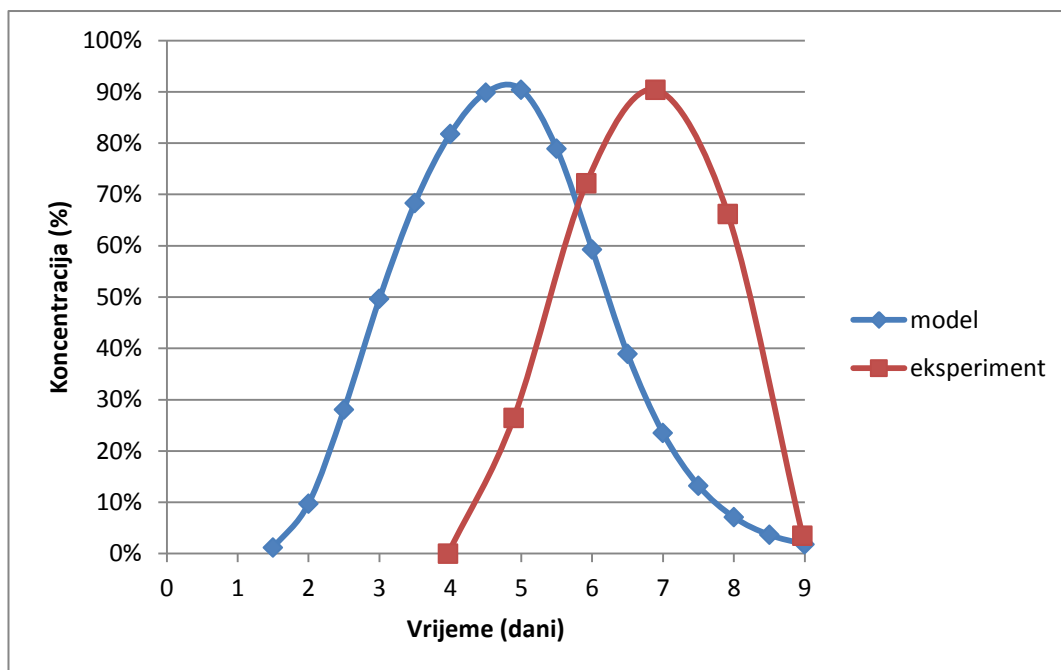
Slika. 6.58. Prikaz koncentracije na dubini od 2,74m



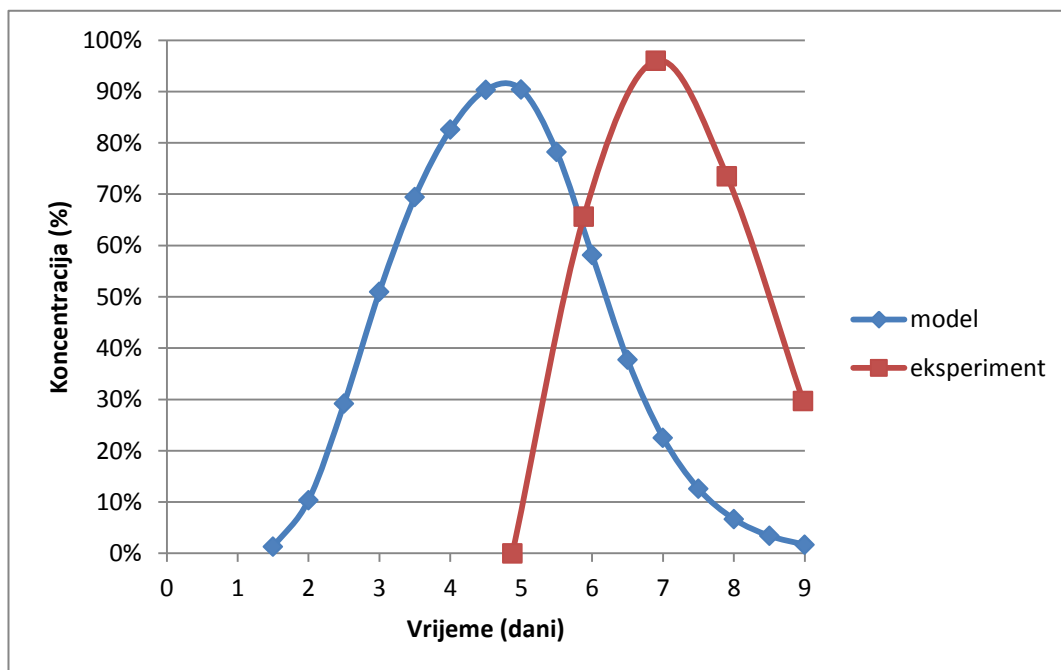
Slika. 6.59 Prikaz koncentracije na dubini od 3,19m



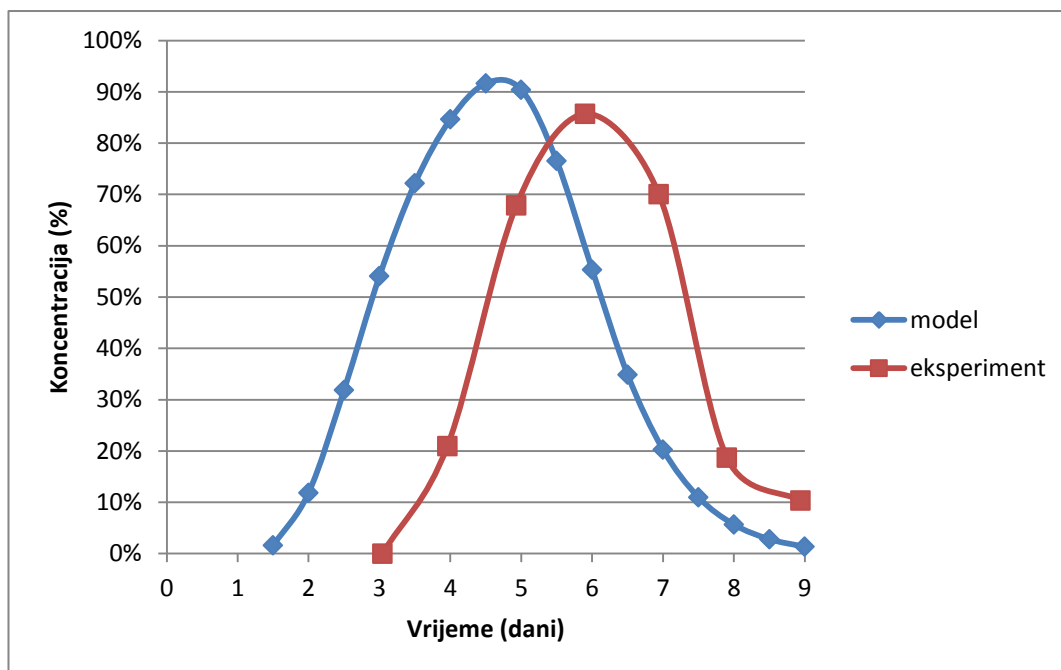
Slika. 6.60. Prikaz koncentracije na dubini od 3,64m



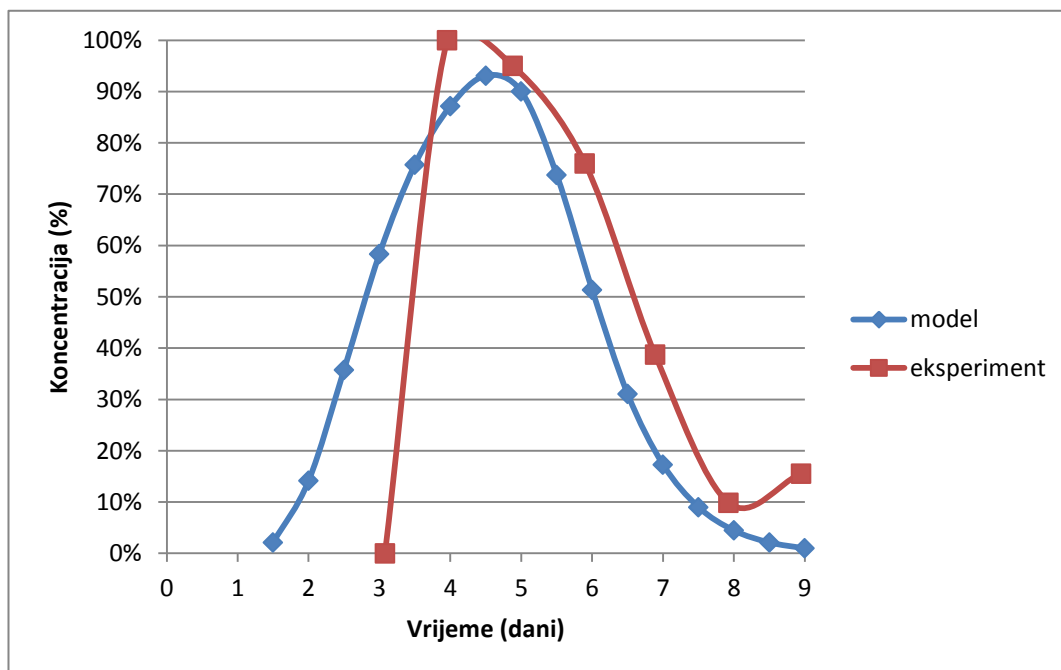
Slika. 6.61. Prikaz koncentracije na dubini od 4,08m



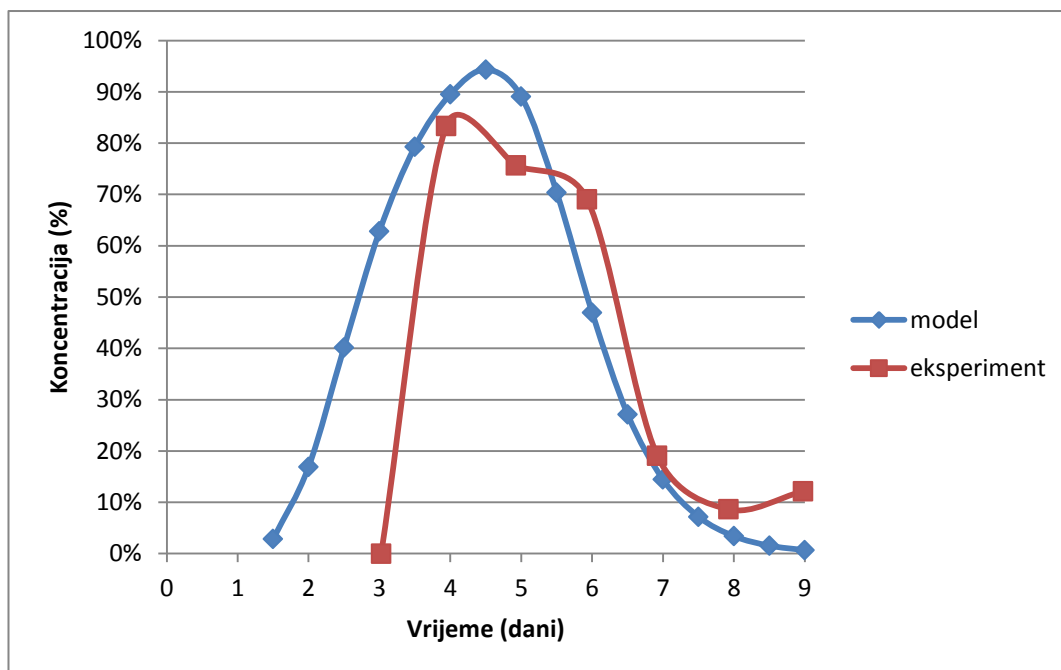
Slika. 6.62. Prikaz koncentracije na dubini od 4,53m



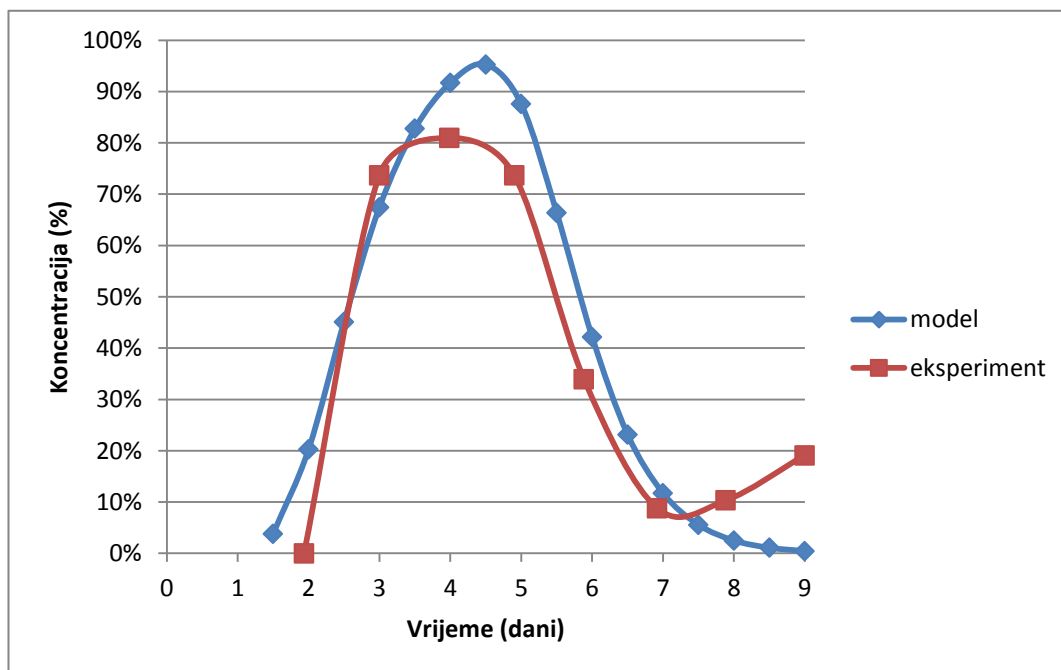
Slika. 6.63. Prikaz koncentracije na dubini od 4,98m



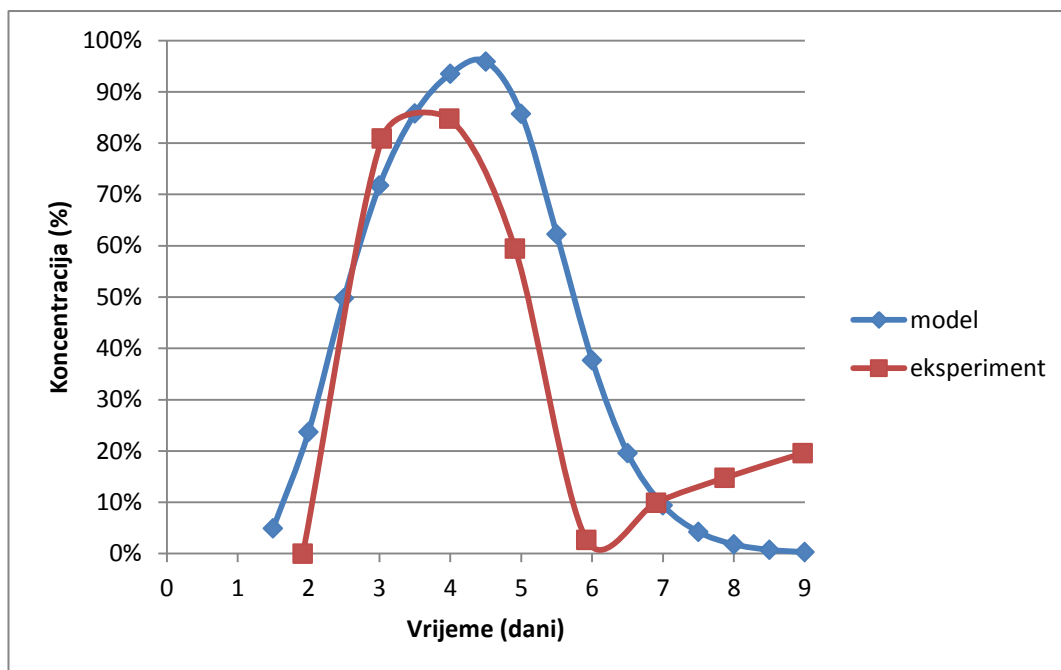
Slika. 6.64. Prikaz koncentracije na dubini od 5,43m



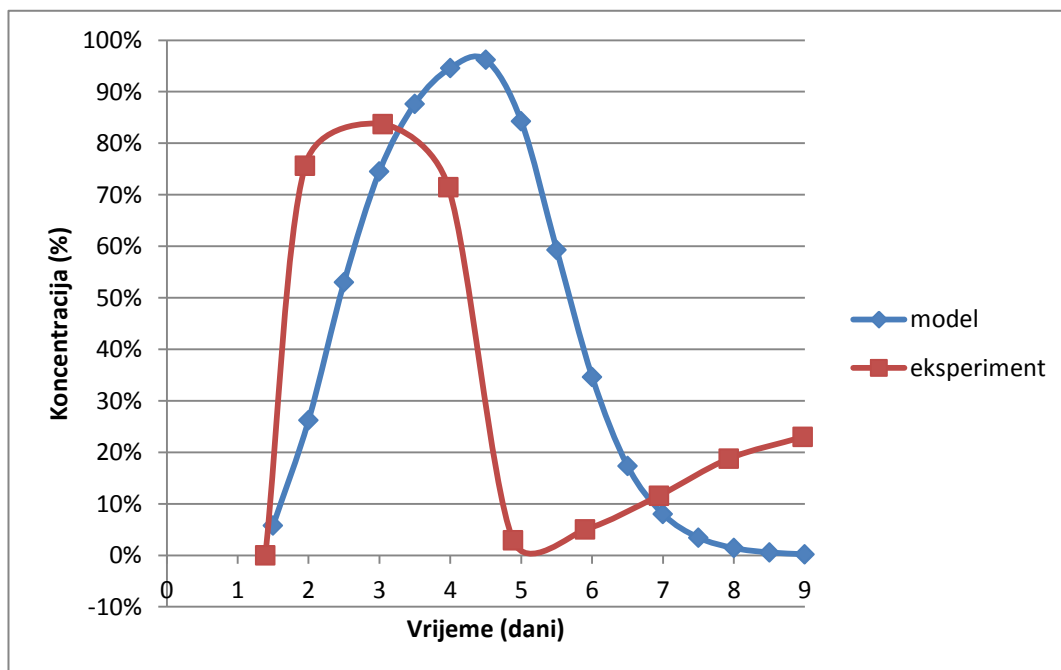
Slika. 6.65. Prikaz koncentracije na dubini od 5,87m



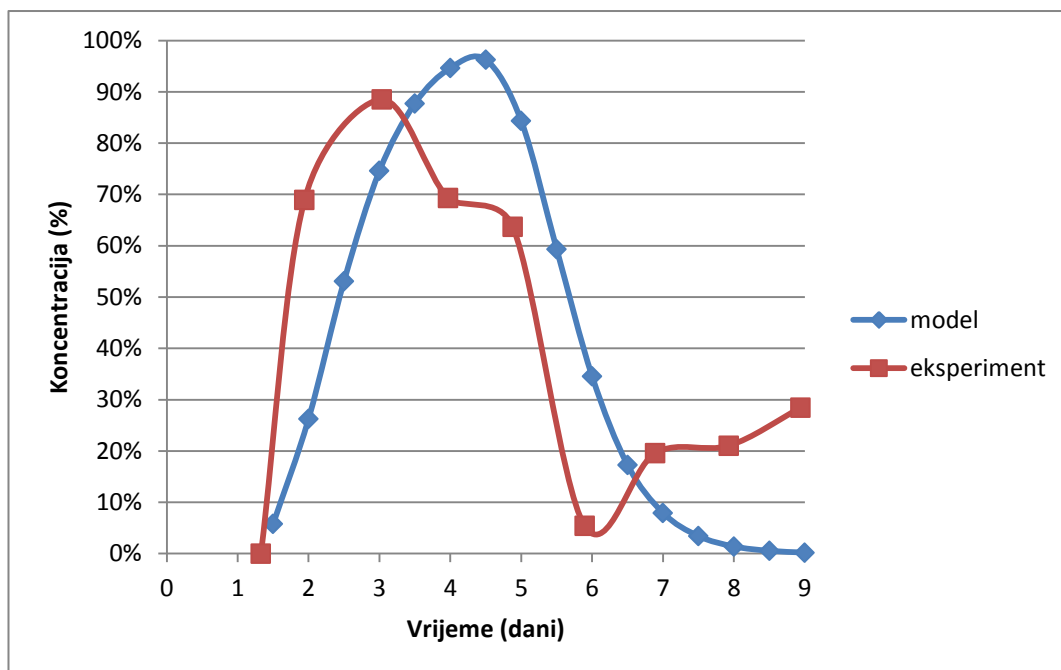
Slika. 6.66. Prikaz koncentracije na dubini od 6,32m



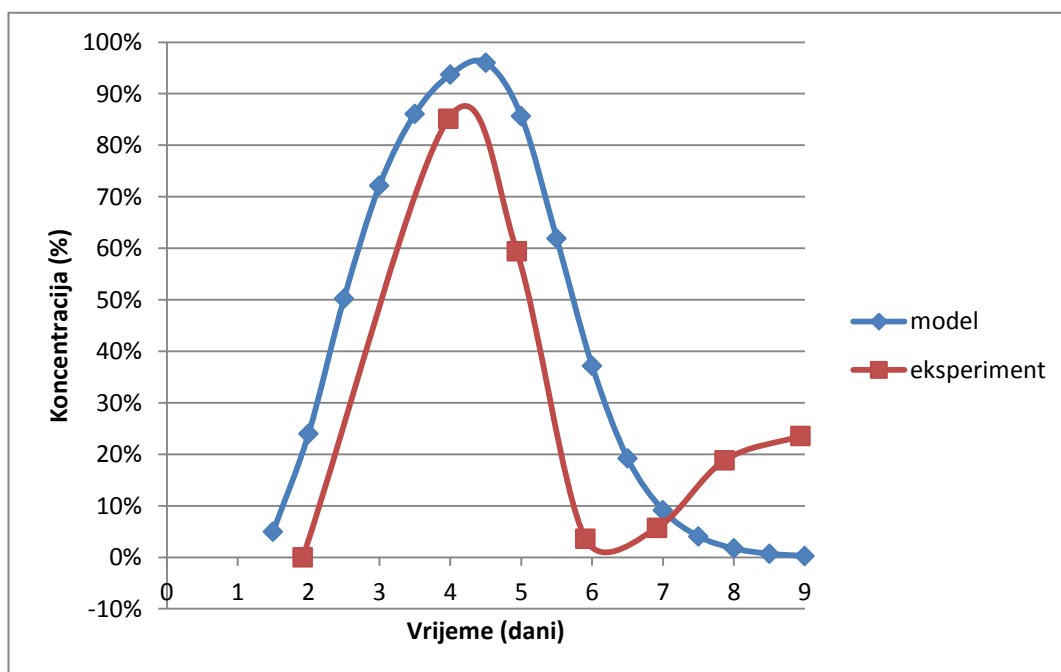
Slika. 6.67. Prikaz koncentracije na dubini od 6,77m



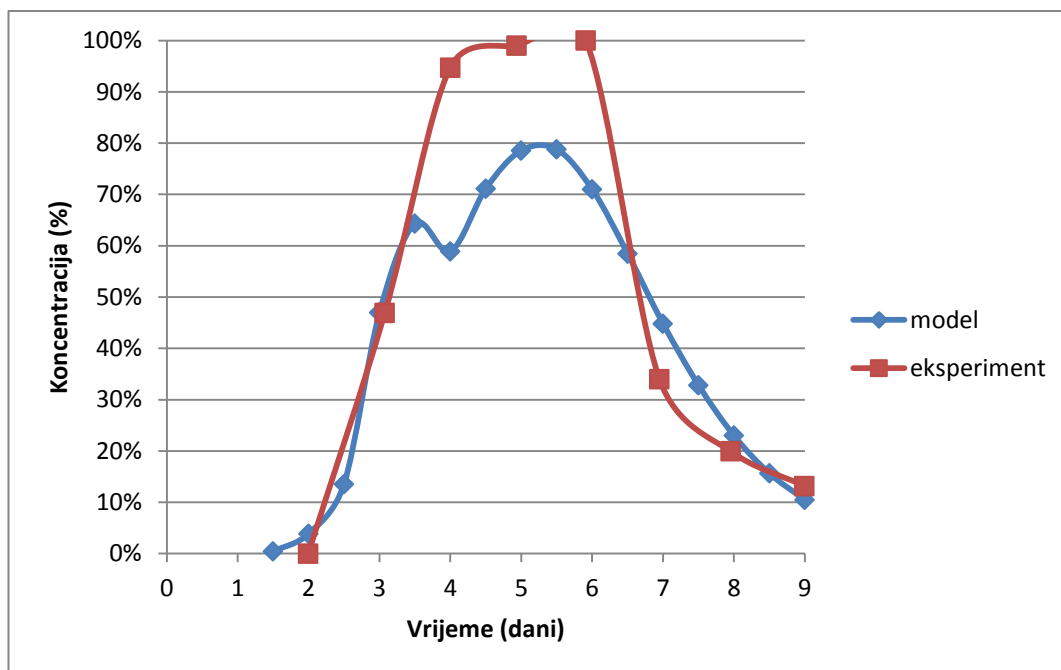
Slika. 6.68. Prikaz koncentracije na dubini od 7,21m



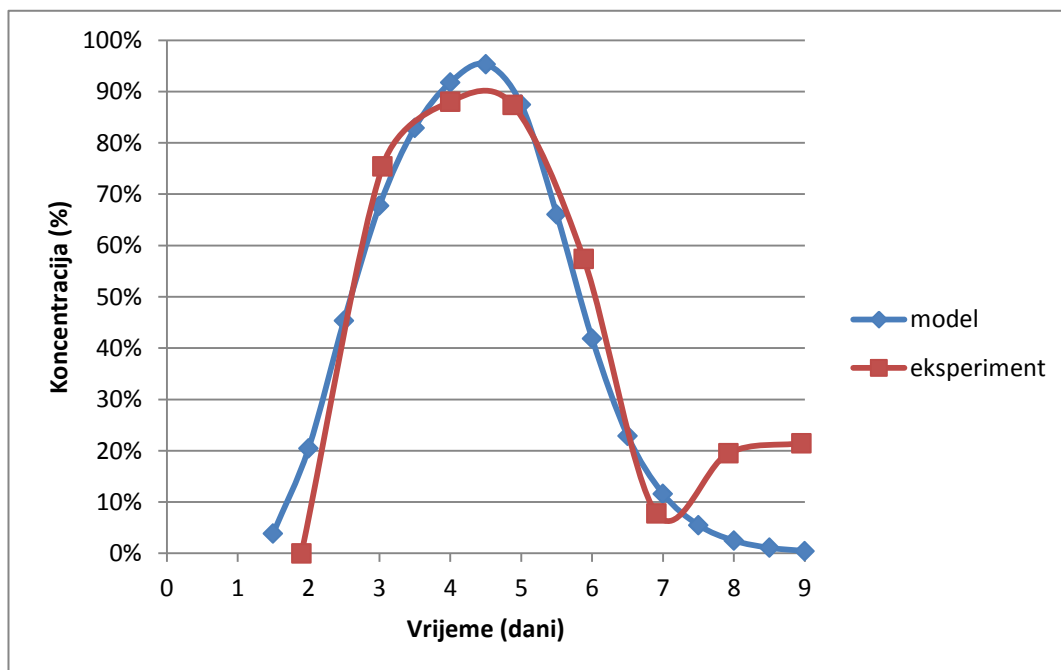
Slika. 6.69. Prikaz koncentracije na dubini od 7,66m



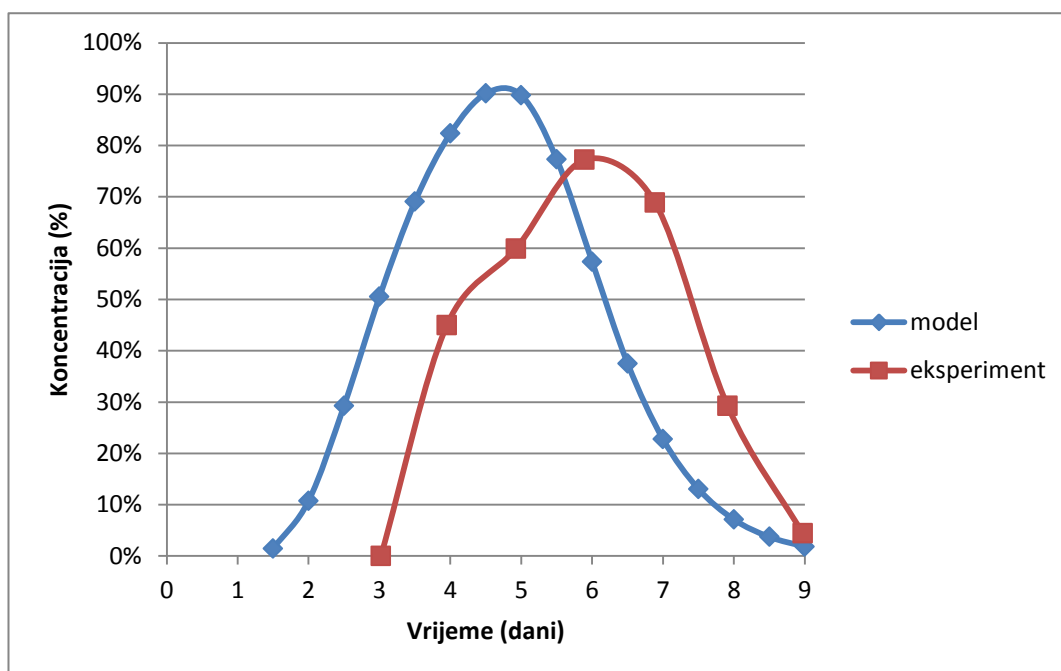
Slika. 6.70. Prikaz koncentracije na dubini od 8,11m



Slika. 6.71. Prikaz koncentracije na dubini od 8,56m



Slika. 6.72. Prikaz koncentracije na dubini od 9,00m



Slika. 6.73. Prikaz koncentracije na dubini od 9,45m

7. ZAKLJUČAK

U ovom radu je razvijena Euler-Lagrangeova formulacija pronosa. Kao osnova korišten je nestacionarni model tečenja (Domazet, 2013) koji je prethodno razvijen na osnovu stacionarnog modela FI. Nestacionarni model omogućava realniji opis tečenja u podzemlju jer uključuje vremenski promjenjive rubne i početne uvjete te crpljenja i prihranjivanja. U nestacionarnom modelu tečenja bilo je još potrebno odrediti kontinuirane brzine koje su potrebne kao ulaz za advektivni dio problema da bi se izbjegla dodatna numerička disperzija (Galešić, 2011) te potprogram koji se bazira na „backtracking particle“ metodi za izvedbu advektivnog Eulerovog koraka. Za disperzivni Lagrangeov korak se koristila ista metodologija kao i kod određivanja potencijala kod tečenja samo što je bilo potrebno adekvatno zamijeniti tenzor hidrauličke propusnosti sa tenzorom disperzije i izbaciti koeficijent specifičnog uskladištenja vodonosnika koje se javljalo kod tečenja.

Model je verificiran na dva primjera. Prvi primjer opisuje pronos u heterogenom vodonosniku uslijed jednolikog srednjeg tečenja te drugi primjer je trasre test s dva bunara. U prvom primjeru je napravljeno 9 kombinacija da se verificirao model za različite Pecletove brojeve i $\ln K$ varijancu. Kod tih kombinacija se došlo do zaključka da je model precizan kod manjih varijanci (0.25 i 1), dok se kod varijance 4 koja je ujedno i najveća varijanca analizirana za ovaj model javljaju numeričke oscilacije (negativne vrijednosti koncentracije) koji se povećavaju s vremenom. To je osobito izraženo kod većih Pecleovih brojeva (40 i 400), dok se za Pecleov broj 2 takve pojave ne javljaju. Kod drugog primjera uspoređivala su se stvarna mjerenja dobivena na terenu sa rješenjima dobivenima iz Euler-Lagrangeova modela. Kod ovog primjera jasno se vidi da se rezultati više nego dobro poklapaju iako se uspoređuje 2D model i stvarna mjerenja u 3D prostoru.

8. PRILOZI

U ovom poglavlju dan je kod vremenske petlje korištene u nestacionarnom proračunu u kojemu je ujedno i dio gdje se računaju kontinuirane brzine i kod potprograma STIFFP_C koji računa lijevu i desnu stranu, tj. A_s i b_s kod pronosa. Uz to je još kao prilog dodan potprogram RAT koji računa advektivni dio pronosa koristeći random-walk metodu unazad. Cijelokupni kod priložen je u elektroničkom obliku uz diplomski rad.

Gore navedeni dijelovi koda su originalno pisani za ovaj diplomski rad te ukomponirani u postojeći model nestacionarnog proračuna tečenja. Tako je dobiven Euler-Lagrange model koji može u tečenje računati i pronos.

8.1. Potprogram STIFFP_C

```
SUBROUTINE STIFFP_C(COORD,LNODS,MATNO,MMATS,MPOIN,NELEM,&
                   NEVAB,NGAUS,NNODE,POSGP,PROPS,WEIGP,MELEM,&
                   NTYPE,SSS,THETA,DTT,ELOAD,RLOAD,TDISP_OLD,&
                   VELX_ALL,VELY_ALL,VY_CON,VX_CON,TTOTALt,TDISP,&
                   YGLMIN,XGLMIN,XGLMAX,VELDEP,MTOTV,ALFA_L,ALFA_T,DMOL)
! *****
!
! *** RAZVIJANJE LIJEVE I DESNE STRANE ZA SVAKI ELEMENT
!
! *****
    DIMENSION CARTD(2,8),COORD(MPOIN,2),&
              DERIV(2,8),WEIGP(4),GPCOD(2,9),XJACM(2,2),&
              ELCOD(2,8),ESTIF(8,8),LNODS(MELEM,8),RECGE(2,2),&
              MATNO(MELEM),POSGP(4),PROPS(MMAT,5),SHAPE(8), &
              CRS (8,8), ELOAD (MELEM, 8), RLOAD (MELEM, 8),TDISP_OLD
(MPOIN), &
              ARS(NEVAB,NEVAB), RLOAD_OLD (MELEM, 8),
VELX_ALL(NELEM,9),VELY_ALL(NELEM,9),&
              VY_CON(MTOTV),VX_CON(MTOTV),TTOTALt(MPOIN),TDISP(MTOTV)
    REAL DTHETA, DTT, SSS, TTT, IGAUS
    REAL*8 YGLMIN,XGLMIN,XGLMAX
    REAL*8 ALFA_L,ALFA_T,DMOL
    REAL*4 DXX,DYY,DXY
    INTEGER*4 VELDEP
!     integer :: IEVAB, JEVAB

    REWIND 1
    DTHETA=DTT*THETA
    KGAUS=0
```

```

CALL VELOC_ONLY (COORD, LNODS, TDISP, VX_CON, VY_CON, POSGP, MPOIN, MELEM, &
                 MTOTV, NGAUS, NGAU2, NNODE, NPOIN, NELEM, NTYPE, MATNO, &
                 MMATS, PROPS, X0, Y0, DT, XSTEP, KPLOT, TTOTALt, XGLMAX, XGLMIN,
YGLMIN, &
                 VELDEP, ALFA_L, ALFA_T, DMOL, VELX_ALL, VELY_ALL)

!
!*** LOOP OVER EACH ELEMENT
!
DO 70 IELEM=1, NELEM
!
!*** INITIALIZE THE ELEMENT STIFFNESS MATRIX
!
DO 20 IEVAB=1, NEVAB
  ELOAD(IELEM, IEVAB)=0.0
  RLOAD_OLD (IELEM, IEVAB)= RLOAD (IELEM, IEVAB)
DO 20 JEVAB=1, NEVAB
  ARS(IEVAB, JEVAB)=0.0
  CRS (IEVAB, JEVAB)=0.0
20 ESTIF(IEVAB, JEVAB)=0.0

  LPROP=MATNO(IELEM)

!
!*** EVALUATE THE COORDINATES OF THE ELEMENT NODAL POINTS
!
DO 10 INODE=1, NNODE
  LNODE=IABS(LNODS(IELEM, INODE))
  IPOSN=(LNODE-1)*2
DO 10 IDIME=1, 2
  IPOSN=IPOSN+1
10 ELCOD(IDIME, INODE)=COORD(LNODE, IDIME)

!
!*** ENTER LOOPS FOR AREA NUMERICAL INTEGRATION
!
KGASP=0
DO 50 IGAUS=1, NGAUS
  EXISP=POSGP(IGAUS)
DO 50 JGAUS=1, NGAUS
  ETASP=POSGP(JGAUS)
  KGASP=KGASP+1
  KGAUS=KGAUS+1
!
!*** EVALUATE THE SHAPE FUNCTIONS, ELEMENTAL VOLUME, ETC.
!
CALL SFR2(DERIV, ETASP, EXISP, SHAPE)
CALL JACOB2(CARTD, DERIV, DJACB, ELCOD, GPCOD, IELEM, KGASP, &
            NNODE, SHAPE, XJACM)

DVOLU=DJACB*WEIGP(IGAUS)*WEIGP(JGAUS)

!***TENZOR DISPERZIJE***

RECCE(1,1) =
DXX(VELX_ALL(IELEM, KGASP), VELY_ALL(IELEM, KGASP), ALFA_L, ALFA_T, DMOL, VELDEP)
RECCE(1,2) =
DXY(VELX_ALL(IELEM, KGASP), VELY_ALL(IELEM, KGASP), ALFA_L, ALFA_T, DMOL, VELDEP)

```

```

      RECGE(2,1) =
DXY(VELX_ALL(IELEM,KGASP),VELY_ALL(IELEM,KGASP),ALFA_L,ALFA_T,DMOL,VELDEP)
      RECGE(2,2) =
DYY(VELX_ALL(IELEM,KGASP),VELY_ALL(IELEM,KGASP),ALFA_L,ALFA_T,DMOL,VELDEP)

      DETR=-RECGE(1,1)*RECGE(2,2)+RECGE(1,2)*RECGE(2,1)

      IF (NTYPE.EQ.1) THEN
      RECGE(1,1) = RECGE(1,1)/DETR
      RECGE(1,2) =-RECGE(1,2)/DETR
      RECGE(2,1) =-RECGE(2,1)/DETR
      RECGE(2,2) = RECGE(2,2)/DETR
      END IF

!
!*** CALCULATE THE ELEMENT STIFFNESSES
!
      DO 30 IEVAB=1,NEVAB
      DO 30 JEVAB=IEVAB,NEVAB
          DO 25 IDIME=1,2
          DO 25 JDIME=1,2
              25 ESTIF(IEVAB,JEVAB) = ESTIF(IEVAB,JEVAB) + &
                  RECGE(IDIME,JDIME)*CARTD(JDIME,IEVAB)*CARTD(IDIME,JEVAB)*DVOLU

      CRS (IEVAB,JEVAB) = CRS(IEVAB,JEVAB) + &
      SHAPE(IEVAB)*SHAPE(JEVAB)*DVOLU

30      CONTINUE
50      CONTINUE
!
!*** CONSTRUCT THE LOWER TRIANGLE OF THE STIFFNESS MATRIX
!
      DO 60 IEVAB=1,NEVAB
      DO 60 JEVAB=1,NEVAB
          CRS(JEVAB,IEVAB)=CRS(IEVAB,JEVAB)
60      ESTIF(JEVAB,IEVAB)=ESTIF(IEVAB,JEVAB)

      DO IEVAB=1,NEVAB
      DO JEVAB=1,NEVAB
          ARS(IEVAB,JEVAB)=CRS(IEVAB,JEVAB)+(DTHETA*ESTIF(IEVAB,JEVAB))!!!!
BRS(IEVAB,JEVAB)
      ENDDO
      ENDDO

! *****
! zapis Ars u datoteku (1)
! *****

      WRITE(1) ARS

```

```

! *****
! računanje desne strane
! *****

      DO IEVAB=1,NEVAB

          CRSUR = 0.0
          DRSUR = 0.0

          DO JEVAB=1,NEVAB

              LNODE=IABS(LNODS(IELEM,JEVAB))

              DRSUR = DRSUR + ESTIF (IEVAB,JEVAB)*TDISP_OLD(LNODE)
              CRSUR  = CRSUR + CRS(IEVAB,JEVAB)*TDISP_OLD(LNODE)
          ENDDO

!
! *****DESNA STRANA****bs*****
!
          ELOAD(IELEM,IEVAB) = CRSUR - ((1.0-THETA)*DTT*(DRSUR - &
          RLOAD_OLD(IELEM,IEVAB))) + (THETA*DTT*RLOAD(IELEM,IEVAB))
          TTT = ELOAD(IELEM,IEVAB)
          ENDDO

70      CONTINUE

      RETURN
      END

```

8.2. Potprogram RAT

```

SUBROUTINE RAT (COORD,LNODS,TDISP,VX_CON,VY_CON,MPOIN,MELEM,&
               MTOTV,NGAUS,NGAU2,NNODE,NPOIN,NELEM,NTYPE,MATNO,&
               MMATS,PROPS,DT,&
               VELDEP,ALFA_L,ALFA_T,DMOL,TDISP_OLD_C,TDISP_C)

!!! Firstly define input variables which need to be specified in input dialog
!!! interactively by user

!!! INPUT:
!!! NPOIN - Number of particles
!!! COORD - x and y coordinates of particles
!!! VELDEP - Velocity dependent (=1) or independent (=0) dispersion tensor
!!! DT - time step used for the time integration of particles
!!! ALFA_L - longitudinal dispersivity (m)
!!! ALFA_T - longitudinal dispersivity (m)
!!! DMOL - molecular diffusivity (m^2/s)

!!! The main output is concentration graph for all particles as a function of time
[t,C(t)]
!!! OUPUT:

```

```

!!! CONC(NTSTEP,NPOIN) - Concentration field for all particles and time steps

      INTEGER*4 VELDEP,NPOIN
      REAL*8   Z_1(0:100000), Z_2(0:100000),XP, XGLMAX, XGLMIN, YGLMIN,
ALFA_L,ALFA_T,DMOL

      REAL*4 TIME_TOTAL, DIXY

      DIMENSION
CARTD(2,8),COORD(MPOIN,2),TDISP(MTOTV),VX_CON(MTOTV),VY_CON(MTOTV),LNODS(MELEM,8),&
      DERIV(2,8),POSGP(4),GPCOD(2,9),XJACM(2,2),&

SHAPE(8),ELCOD(2,8),ELDIS(8),ELVX_CON(8),ELVY_CON(8),XCOR(9),YCOR(9),&

VELX(9),VELY(9),MATNO(MELEM),PROPS(MMATS,5),RECGE(2,2),TTOTALt(MPOIN),X0t(MPOIN),
Y0t(MPOIN),&
      VXt(MPOIN), VYt(MPOIN),
VELX10(MPOIN),VELY10(MPOIN),VELX01(MPOIN),VELY01(MPOIN),&
      IND_OUT(MPOIN),TDISP_OLD_C (MPOIN),ELDIS_C(NNODE), TDISP_C (MPOIN),
DIX(MPOIN), DIY(MPOIN), IND_OUT_N(MPOIN),&
      IND_IN_N(MPOIN)

      NDIME = 2

!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!PRIMJENA IZRACUNA TRAJEKTORIJA NA SVE
CESTICE!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!

!   Initial conditions

!       TIME_TOTAL = 0.0
      TOLER1=0.001
      TOLER2=0.001
      MAX_STEP=50

DO i=1,NPOIN

      X00=COORD(i,1)
      Y00=COORD(i,2)
      X0t(i)=X00
      Y0t(i)=Y00
      IND_OUT(i) = 0
      IND_OUT_N(i) = 0
      IND_IN_N(i) = 0

END DO

!!! Main loop

      DO i=1,NPOIN   !!! Over all particles

!       TIME_TOTAL = TIME_TOTAL + DT

      X00=COORD(i,1)
      Y00=COORD(i,2)

```

```

X0t(i)=X00
Y0t(i)=Y00

    VXt(i)=0.0
    VYt(i)=0.0

    VELX10(i) = 0.0
    VELY10(i) = 0.0
    VELX01(i) = 0.0
    VELY01(i) = 0.0

    XOLD=X0t(i)
    YOLD=Y0t(i)

DIXY=1.0 !BITNO DA JE VEĆI OD TOLER2 TAKO DA PRVI PUT UDE U DO WHILE PETLJU

!!! Find element where particle is located

    CALL POINT(MELEM, NELEM, MPOIN, NNODE, NDIME, X0t(i), Y0t(i), &
        COORD, LNODS, XIT, ETAT, KPOINT, KELEM)

!!! Firstly calculate velocity, then particle displacement and finally concentration

    IF (VELDEP .EQ. 0) THEN      !(SLUCAJ NEOVISNOSTI O BRZINAMA-vel. independent)

        DO INODE = 1,NNODE
            LNODE = IABS(LNODS(KELEM,INODE))
            ELVX_CON(INODE)=VX_CON(LNODE)
            ELVY_CON(INODE)=VY_CON(LNODE)
            ELDIS_C(INODE) = TDISP_OLD_C(LNODE)
            DO IDIME = 1,NDIME
                ELCOD(IDIME,INODE) = COORD(LNODE,IDIME)
            END DO ! IDIME
        END DO ! INODE

        CALL SFR2(DERIV, ETAT, XIT, SHAPE)
        CALL JACOB3(CARTD,DERIV,ELCOD,NNODE)

        VXt(i)    = 0.0
        VYt(i)    = 0.0

        DO INODE = 1,NNODE

            VXt(i) = VXt(i)+ELVX_CON(INODE)*SHAPE(INODE)
            VYt(i) = VYt(i)+ELVY_CON(INODE)*SHAPE(INODE)

        END DO      ! INODE

        DT1 = DT

        X0t(i)=X0t(i)-VXt(i)*DT1
        Y0t(i)=Y0t(i)-VYt(i)*DT1

```

```

ELSE IF (VELDEP .EQ. 1) THEN      !(SLUCAJ OVISNOSTI O BRZINAMA-VEL. DEPENDENT)

    DO INODE = 1,NNODE
        LNODE = IABS(LNODS(KELEM,INODE))
        ELVX_CON(INODE)=VX_CON(LNODE)
        ELVY_CON(INODE)=VY_CON(LNODE)
        ELDIS_C(INODE) = TDISP_OLD_C(LNODE)
        DO IDIME = 1,NDIME
            ELCOD(IDIME,INODE) = COORD(LNODE,IDIME)
        END DO ! IDIME
    END DO ! INODE

    CALL SFR2(DERIV, ETAT, XIT, SHAPE)
    CALL JACOB3(CARTD,DERIV,ELCOD,NNODE)

    VXt(i)  = 0.0
    VYt(i)  = 0.0
    VELX10(i) = 0.0
    VELY10(i) = 0.0
    VELX01(i) = 0.0
    VELY01(i) = 0.0

    DO INODE = 1,NNODE

        VXt(i) = VXt(i)+ELVX_CON(INODE)*SHAPE(INODE)
        VYt(i) = VYt(i)+ELVY_CON(INODE)*SHAPE(INODE)

        VELX10(i) =VELX10(i) + CARTD(1,INODE)*ELVX_CON(INODE)
        VELY10(i) =VELY10(i) + CARTD(1,INODE)*ELVY_CON(INODE)
        VELX01(i) =VELX01(i) + CARTD(2,INODE)*ELVX_CON(INODE)
        VELY01(i) =VELY01(i) + CARTD(2,INODE)*ELVY_CON(INODE)

    END DO ! INODE

    IF (VXt(i).EQ.0.0.AND.VYt(i).EQ.0.0) THEN
        IND_OUT(I) = 1
    ELSE
        DT1 = DT
        V_X = VXt(i)
        V_Y = VYt(i)
        V_MOD = SQRT (V_X**2 + V_Y**2)
        V_X10 = VELX10 (i)
        V_Y10 = VELY10 (i)
        V_X01 = VELX01 (i)
        V_Y01 = VELY01 (i)

        ! KONACNI IZRAZ ZA PUTANJU I VRIJEME PUTOVANJA (SLUCAJ OVISNOSTI O BRZINAMA)

        X0t(i)=X0t(i)-(V_X+ DX10(V_X,V_Y,V_MOD,V_X10,V_Y10, ALFA_L, ALFA_T)+DXY01(V_X,
        V_Y,V_MOD,V_X01,V_Y01, ALFA_L, ALFA_T))*DT1

        Y0t(i)=Y0t(i)-(V_Y+ DY10(V_X,V_Y,V_MOD,V_X10,V_Y10, ALFA_L,
        ALFA_T)+DYY01(V_X,V_Y,V_MOD,V_X01,V_Y01, ALFA_L, ALFA_T))*DT1

    END IF

```

```

END IF ! VELDEP

!!! Calculate concentration of all observation points due to displacement of
current particle

!!! Find element where particle is located

CALL POINT(MELEM, NELEM, MPOIN, NNODE, NDIME, X0t(i), Y0t(i), &
          COORD, LNODS, XIT, ETAT, KPOINT, KELEM)

!!! Check if current particle is outside of the domain

IF (KPOINT.EQ.0) THEN

  IND_OUT(I) = 1

END IF

!!! KOORDINATA TOČKE KOJA JE VAN DOMENE

IF (IND_OUT(I).EQ.1) THEN

  X0t(i)=XOLD
  Y0t(i)=YOLD

DO WHILE (DIXY .GT. TOLER2 .AND. IND_OUT_N(I) .LT. MAX_STEP )

  IF (IND_OUT(I).EQ.1) DT1=DT1/2.0d0

  !!! Firstly calculate velocity, then particle displacement and finally
concentration

  IF (VELDEP .EQ. 0) THEN      !(SLUCAJ NEOVISNOSTI O BRZINAMA-vel. independent)
!
    DT1 = DT

  IND_OUT_N(I)=IND_OUT_N(I)+1

  X0t(i)=X0t(i)-VXt(i)*DT1
  Y0t(i)=Y0t(i)-VYt(i)*DT1

  ELSE IF (VELDEP .EQ. 1) THEN      !(SLUCAJ OVISNOSTI O BRZINAMA-VEL. DEPENDENT)

! KONACNI IZRAZ ZA PUTANJU I VRIJEME PUTOVANJA (SLUCAJ OVISNOSTI O BRZINAMA)

  IND_OUT_N(I)=IND_OUT_N(I)+1

  X0t(i)=X0t(i)-(V_X+ DXX10(V_X,V_Y,V_MOD,V_X10,V_Y10, ALFA_L, ALFA_T)+DXY01(V_X,
V_Y,V_MOD,V_X01,V_Y01, ALFA_L, ALFA_T))*DT1

  Y0t(i)=Y0t(i)-(V_Y+ DYY10(V_X,V_Y,V_MOD,V_X10,V_Y10, ALFA_L,
ALFA_T)+DYY01(V_X,V_Y,V_MOD,V_X01,V_Y01, ALFA_L, ALFA_T))*DT1

```

```
END IF ! VELDEP
```

```
!!! Calculate concentration of all observation points due to displacement of
current particle
```

```
!!! Find element where particle is located
```

```
CALL POINT(MELEM, NELEM, MPOIN, NNODE, NDIME, X0t(i), Y0t(i), &
COORD, LNODS, XIT, ETAT, KPOINT, KELEM)
```

```
!!! Check if current particle is outside of the domain
```

```
IF (KPOINT.EQ.0) THEN
```

```
    IND_OUT(I) = 1
    X0t(i)=XOLD
    Y0t(i)=YOLD
```

```
ELSE
```

```
    IND_OUT(I) = 0
    DIX(I)=ABS(XOLD-X0t(I))
    DIY(I)=ABS(YOLD-Y0t(I))
    DIXY=SQRT(DIX(I)**2+DIY(I)**2)
```

```
    XOLD=X0t(i)
    YOLD=Y0t(i)
```

```
END IF
```

```
END DO
```

```
END IF
```

```
!!! RAČUNANJE KONCENTRACIJE U ČVOROVIMA POMAKNUTIM ZA DT ili za manje od DT ako je
točka na rubu domene
```

```
CALL SFR2(DERIV, ETAT, XIT, SHAPE)
DO INODE = 1, NNODE
    LNODE = IABS(LNODS(KELEM, INODE))
    ELDIS_C(INODE) = TDISP_OLD_C(LNODE)
END DO ! INODE
DO INODE = 1, NNODE
    TDISP_C(I) = TDISP_C(I) + SHAPE(INODE)*ELDIS_C( INODE)
END DO
```

```
END DO !!! N_PART
```

```
RETURN
END SUBROUTINE RAT
```

8.3. Vremenska petlja/kontinuirane brzine

```

!*****TEČENJE*****

! POČETAK VREMENSKE PETLJE

DO I=1, NTIME_PART

    WRITE(*,*) 'VREMENSKI DIO', I

    DO J= 1, NTIME_STEP (I)

! PRIPREMA LIJEVE I DESNE STRANE - TEČENJE

    DTT = DT_STEP(I)

    CALL STIFFP(COORD, LNODS, MATNO, MMATS, MPOIN, NELEM, &
               NEVAB, NGAUS, NNODE, POSGP, PROPS, WEIGP, MELEM, &
               NTYPE, SSS, THETA, DTT, ELOAD_H, RLOAD_H, TDISP_OLD_H)

! RJEŠAVANJE SUSTAVA FRONTALNIM POSTUPKOM - TEČENJE

    CALL FRONT(ASDIS_H, ELOAD_H, EQRHS_H, EQUAT_H, ESTIF_H, FIXED_H, IFFIX_H, &
              GLOAD_H, GSTIF_H, LOCEL_H, MBUFA, MELEM, MEVAB, MFRON, &
              MSTIF, MTOTV, MVFIX, NACVA_H, NAMEV_H, NDEST_H, NDOFN, NELEM, NEVAB, &
              NNODE, NPIVO_H, NPOIN, NTOTV, TDISP_H, TREAC_H, VECRV_H, &
              LNODS1, LNODS, DTT)

!*****KONTINUIRANE BRZINE*****

!*** CALL THE SUBROUTINE WHICH COMPUTES THE CONSISTENT LOAD VECTORS FOR VELOCITY
APPROXIMATION
!   FOR EACH ELEMENT AFTER READING THE RELEVANT INPUT DATA
!

    REWIND 1
    REWIND 2
    REWIND 3
    REWIND 4
    REWIND 8

    TDISP=TDISP_OLD_H

    CALL LOADPSV(COORD, LNODS, TDISP, POSGP, MPOIN, MELEM, &
               MTOTV, NGAUS, NGAU2, WEIGP, NNODE, NPOIN, NELEM, NTYPE, MATNO, &
               MMATS, PROPS, RLOADVX, RLOADVY)

```

```

!*** INITIALISE CERTAIN ARRAYS
!
      DO 41 ITOTV=1,NTOTV
41    VX_CON(ITOTV)=0.0
      NVFIX=NEDGE
      CALL ZERO(ELOAD_VX,MELEM,MEVAB,NDOFN,NELEM,NEVAB,&
                NVFIX,&
                TREAC_VX,MVFIX)

!*** PREPARE SOME FIELD FOR CALCULATION FOR VX
!
      CALL PREPAREVX (ELOAD_VX,FIXED,MELEM,MEVAB,MTOTV,MVFIX,MPOIN,&
                    NDOFN,NELEM,NEVAB,NOFIX,NTOTV,NVFIX,&
                    PRESC,RLOADVX,COORD,LNODS,TDISP,POSGP,&
                    NGAUS,NGAU2,NNODE,NPOIN,NTYPE,MATNO,&
MMATS,PROPS,X0,Y0,KPLOT,VX_EDGE,VY_EDGE,EDGECD,NEDGE,NUEDGE)

!!
!!*** EVALUATION OF THE CONDUCTANCE MATRIX FOR VELOCITIES
!!

      CALL STIFFPV(COORD,LNODS,MPOIN,NELEM,&
                  NEVAB,NGAUS,NNODE,POSGP,WEIGP,MELEM,&
                  NTYPE)
!

!!
!!*** SOLVE EQUATIONS BY THE FRONTAL PROCEDURE, OVDJE??? ELOAD OSTAJE, ALI UMJESTO
TDISP? - STAVITI VX_CON?
!!

      CALL FRONT(ASDIS,ELOAD_VX,EQRHS,EQUAT,ESTIFV,FIXED,IFFIX_V,&
                GLOAD,GSTIF,LOCEL,MBUFA,MELEM,MEVAB,MFRON,&
                MSTIF,MTOTV,MVFIX,NACVA,NAMEV,NDEST,NDOFN,NELEM,NEVAB,&
                NNODE,NPIVO,NPOIN,NTOTV,VX_CON,TREAC_VX,VECRV,&
                LNODS1,LNODS,DTT)
      OPEN (444,file='BRZINE_VX_CON.dat',status='unknown')
      WRITE (444,3333)
3333  FORMAT(/X,13HINDEKS CVORA,X,13HBRZINA VX_CON)
      DO K=1,NPOIN
      WRITE(444,*)K, VX_CON(K)
      END DO

!***** NOW REPEAT SOME PROCEDURES for VY_CON*****

!*** LOADPSV I STIFFPV SE KORISTE I ZA OVO PA SE NECE PONOVO POZIVATI

!
!*** INITIALISE CERTAIN ARRAYS
!
      REWIND 1
      REWIND 2
      REWIND 3
      REWIND 4
      REWIND 8

```

```

DO 42 ITOTV=1,NTOTV
42 VY_CON(ITOTV)=0.0
CALL ZERO(ELOAD_VY,MELEM,MEVAB,NDOFN,NELEM,NEVAB,&
          NVFIX,&
          TREAC_VY,MVFIX)

!*** PREPARE SOME FIELD FOR CALCULATION FOR VY
!
CALL PREPAREVY (ELOAD_VY,FIXED,MELEM,MEVAB,MTOTV,MVFIX,MPOIN,&
               NDOFN,NELEM,NEVAB,NOFIX,NTOTV,NVFIX,&
               PRESC,RLOADVY,COORD,LNODS,TDISP,POSGP,&
               NGAUS,NGAU2,NNODE,NPOIN,NTYPE,MATNO,&
MMATS,PROPS,X0,Y0,KPLOT,VX_EDGE,VY_EDGE,EDGECD,NEDGE,NUEDGE)

CALL FRONT(ASDIS,ELOAD_VY,EQRHS,EQUAT,ESTIFV,FIXED,IFFIX_V,&
           GLOAD,GSTIF,LOCEL,MBUFA,MELEM,MEVAB,MFRON,&
           MSTIF,MTOTV,MVFIX,NACVA,NAMEV,NDEST,NDOFN,NELEM,NEVAB,&
           NNODE,NPIVO,NPOIN,NTOTV,VY_CON,TREAC_VY,VECRV,&
           LNODS1,LNODS,DTT)
OPEN (4441,file='BRZINE_VY_CON.dat',status='unknown')
WRITE(4441,33331)
33331 FORMAT(//X,13HINDEKS CVORA,X,13HBRZINA VY_CON)
DO K=1,NPOIN
WRITE (4441,*)K, VY_CON(K)
END DO

!*****ADVEKCIJA*****

CALL RAT (COORD,LNODS,TDISP,VX_CON,VY_CON,MPOIN,MELEM,&
          MTOTV,NGAUS,NGAU2,NNODE,NPOIN,NELEM,NTYPE,MATNO,&
          MMATS,PROPS,DTT,&
          VELDEP,ALFA_L,ALFA_T,DMOL,TDISP_OLD_C,TDISP_C)

TDISP_OLD_C=TDISP_C

DO 48 ITOTV=1,NTOTV
48 TDISP_C(ITOTV)=0.0

!*****PRONOS*****

! PRIPREMA LIJEVE I DESNE STRANE - PRONOS
CALL STIFFP_C(COORD,LNODS,MATNO,MMATS,MPOIN,NELEM,&
             NEVAB,NGAUS,NNODE,POSGP,PROPS,WEIGP,MELEM,&
             NTYPE,SSS,THETA,DTT,ELOAD_C,RLOAD_C,TDISP_OLD_C,&
             VELX_ALL,VELY_ALL,VY_CON,VX_CON,TTOTALt,TDISP_H,&
             YGLMIN,XGLMIN,XGLMAX,VELDEP,MTOTV,ALFA_L,ALFA_T,DMOL)

! RJEŠAVANJE SUSTAVA FRONTALNIM POSTUPKOM - PRONOS

CALL FRONT(ASDIS_C,ELOAD_C,EQRHS_C,EQUAT_C,ESTIF_C,FIXED_C,IFFIX_C,&
           GLOAD_C,GSTIF_C,LOCEL_C,MBUFA,MELEM,MEVAB,MFRON,&
           MSTIF,MTOTV,MVFIX,NACVA_C,NAMEV_C,NDEST_C,NDOFN,NELEM,NEVAB,&
           NNODE,NPIVO_C,NPOIN,NTOTV,TDISP_C,TREAC_C,VECRV_C,&
           LNODS1,LNODS, DTT)

```

!*****ISPIS REZULTATA*****

```
CALL OUTPUT(MTOTV,MVFIX,NELEM,NGAUS,NOFIX_H,NOFIX_C,&
            NPOIN,NVFIX_H,NVFIX_C,TDISP_H,TDISP_C,TREAC_H,TREAC_C,&
            NTYPE,NPLOT,COORD,&
            LNODS,POSGP,MPOIN,MELEM,NGAU2,&
            NNODE,MATNO,MMATS,PROPS,&
            X0,Y0,DT,XSTEP,TTOTALt,VX_CON,VY_CON,&
            VELDEP,ALFA_L,ALFA_T,DMOL)
```

! PRIPREMA REZULTATA ZA TECPLOT

```
CALL DROTEC( MPOIN, MELEM, NELEM, NDIME, NNODE, MTOTV,&
            COORD, LNODS, TDISP_H, TDISP_C, NTYPE, MMATS, MATNO, PROPS,&
            NPOX,NPOY ,TTOTALt,XGLMAX, XGLMIN, YGLMIN,&
            VX_CON,VY_CON)
```

! ODABIR NOVIH POČETNIH UVJETA

```
DO K=1, NPOIN
  TDISP_OLD_H (K) = TDISP_H (K)
  TDISP_OLD_C (K) = TDISP_C (K)
END DO

DO ITOTV=1,NTOTV
!  TDISP1(ITOTV)=0.0
  TDISP(ITOTV)=0.0
  TDISP_H(ITOTV)=0.0
  TDISP_C(ITOTV)=0.0
ENDDO

CALL ZERO(ELOAD_H,MELEM,MEVAB,NDOFN,NELEM,NEVAB,&
          NVFIX_H,&
          TREAC_H,MVFIX)

CALL ZERO(ELOAD_C,MELEM,MEVAB,NDOFN,NELEM,NEVAB,&
          NVFIX_C,&
          TREAC_C,MVFIX)
!
!*** PREPARE SOME FIELD FOR CALCULATION
```

```
CALL PREPARE (FIXED_H,MELEM,MEVAB,MTOTV,MVFIX,&
            NDOFN,NELEM,NEVAB,NOFIX_H,NTOTV,NVFIX_H,&
            PRESC_H)
```

```
CALL PREPARE (FIXED_C,MELEM,MEVAB,MTOTV,MVFIX,&
            NDOFN,NELEM,NEVAB,NOFIX_C,NTOTV,NVFIX_C,&
            PRESC_C)
```

END DO

END DO

9. LITERATURA

- (1) Jović V., *Osnove hidromehanike*, Element d.o.o., 2006
- (2) Gotovac, H., Gotovac, B., „FI“ – *programsko rješenje procjeđivanja podzemne vode kroz porozni medij koristeći potencijalnu formulaciju pomoću MKE*
- (3) Gotovac, H., *Numerika seminar: Proračun rubnih protoka u čvorovima s prisilnim rubnim uvjetom*
- (4) Gotovac, H., *Tečenje i pronos s promjenjivom gustoćom* – interna skripta
- (5) Harapin, A., *Kratke osnove rada s programskim jezikom Fortran* – interna skripta (Fakultet građevinarstva, arhitekture i geodezije, Split, 2009.)
- (6) Ruan, F. and Dennis M., *An investigation of Eulerian-Lagrangian methods for solving heterogeneous advection-dominated transport problems* (Water Resources Research, vol. 35, no. 8, pages 2359–2373, August 1999)
- (7) Pickens J., and Grisak G., *Scale-Dependent Dispersion in a Stratified Granular Aquifer* (Water Resources Research, vol. 17, no. 4, pages 1191–1211, August 1981)
- (8) Galešić M., *Diplomski rad: Određivanje starosti podzemnih voda* (2011)
- (9) Domazet A., *Diplomski rad: Nestacionarni numericki model procjeđivanja u podzemlju* (2013)
- (10) Martinić-Perme J., Matić T., Taraš L., *Seminarski rad iz predmeta Modeliranje toka i pronosa u podzemlju* (2015)