Numerické metody

Numerické modelování v aplikované geologii

David Mašín

Ústav hydrogeologie, inženýrské geologie a užité geofyziky
Přírodovědecká fakulta
Karlova Univerzita v Praze

Přednášky pro obor Geotechnologie

Obsah

Numerické metody
Přehled

- Většina geotechnických problémů je natolik složitá, že úlohy, jež vedou na soustavu parciálních diferenciálních rovnic, není možné řešit analyticky.
- Můžeme je ale řešit *přibližně* (v konečném počtu bodů prostoru a času) pomocí *numerických metod*. Mezi v geomechanice nejpoužívanější numerické metody patří:
- **Metoda sítí** – Jinak také nazývaná metoda konečných diferencí. Založena na *diskretizaci* parciálních diferenciálních rovnic popisujících daný problém.

Numerické metody
Přehled

- **Metoda konečných prvků** – V geomechanice nejpoužívanější numerická metoda, vyvíjená od padesátých let minulého století. Plné využití bylo možné až s nástupem výpočetní techniky.
- Založena na *principu virtuálních prací*, řešíme podmínky rovnováhy vnějších a vnitřních sil.
- **Metoda oddělených prvků** – Nejpoužívanější metoda pro diskotinuum (vhodná pro řešení problémů v rozpukaném horninovém masivu, apod.).
  Studovaná oblast je opět rozdělena na prvky (reprezentující zrna či skalní bloky). V tomto případě jsou sice zrna považována za kontinuum (většinou dokonale tuhé), ale *výsledné chování je dáno pravidly interakce mezi jednotlivými prvky*.

Jádro řešení úlohy - bilanční rovnice

- Bilanční rovnice (zákony zachování) představují základní fyzikální principy jež musí být splněny *nezávisle na modelovaném materiálu*.
- V úlohách geomechaniky se jedná především o
  - Zákon zachování hmotnosti

    Izolovaná soustava hmotných objektů má celkovou hmotnost konstantní
  - Zákon zachování hybnosti

    Izolovaná soustava hmotných objektů má celkovou hybnost konstantní
- Zákon zachování hybnosti vede k *parciální diferenciální rovnici*. Tu musíme řešeit pomocí numerických metod.

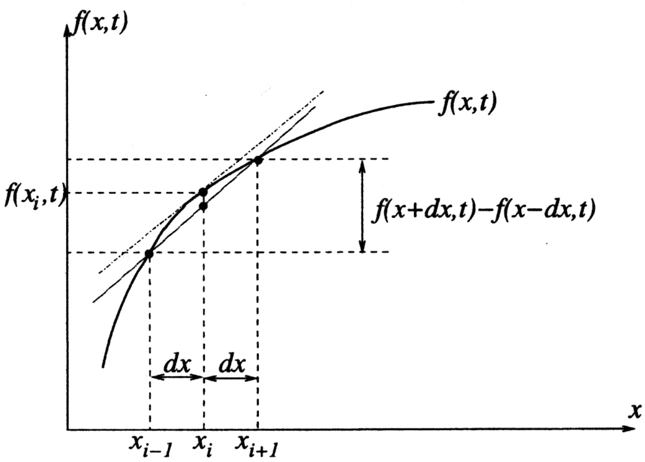
Metoda sítí

- Princip řešení úlohy pomocí numerických metod si budeme demonstrovat na základě *metody sítí*.
- Metoda sítí je jinak také nazývaná *metoda konečných diferencí*. Založena na *diskretizaci* parciálních diferenciálních rovnic popisujících daný problém.
- Rovnice diskretizujeme v prostoru i čase! Hledáme tedy řešení v konečném množství bodů prostoru a konečném množství časových okamžiků.
- Pracujeme přímo s parciálními diferenciálními rovnicemi, říkáme že řešíme tzv. silnou formulaci (*strong form*) problému. Opakem je *slabá formulace* (*weak form*), kdy pracujeme s řešením integrovaným přes plochu prvku – toto využívá metoda konečných prvků.

Metoda sítí

- V případě diskretizace prostoru nahradíme derivace z parciálních diferenciálních rovnic diferencemi následujícím způsobem (pro tzv. implicitní algoritmus):

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial x} \cong \frac{f(x+dx,t)-f(x-dx,t)}{2dx}$$

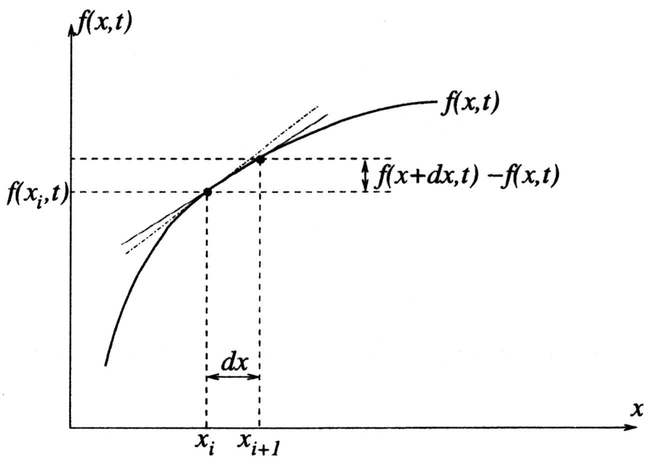


Numerické metody | Metoda sítí

Metoda sítí

- Diskretizace času většinou probíhá tzv. explicitním algoritmem:

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} \cong \frac{f(x,t+dt)-f(x,t)}{dt}$$



Metoda sítí

- Obdobným způsobem můžeme nahrazovat i *derivace druhého řádu*. Využíváme tzv. Taylorova rozvoje:

$$\frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2} \cong \frac{f(x+dx,t) - 2f(x,t) + f(x-dx,t)}{dx^2}$$

Metoda sítí

Jednoosá konsolidace

- Metodu sítí si budeme demonstrovat na jednoduchém příkladu jednoosé konsolidace.
- V tomto případě z *bilančních rovnic* a pružného *konstitučního vztahu* plyne následující rovnice pro jednoosou konsolidaci:

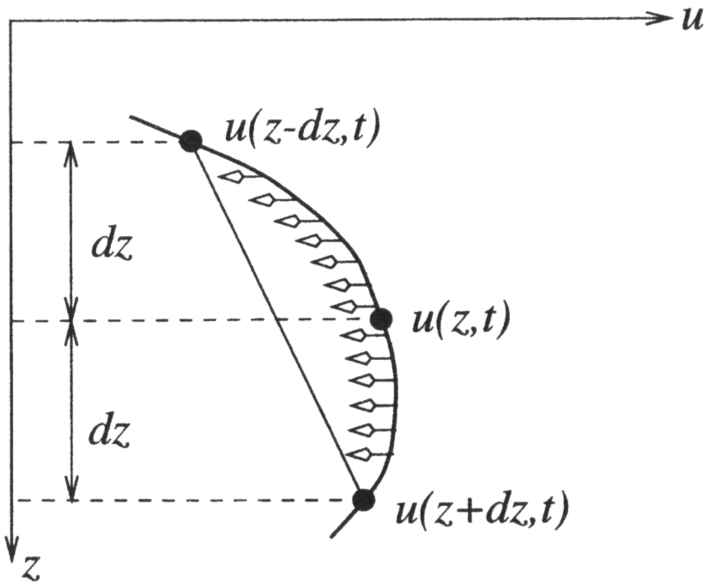
$$\frac{\partial u}{\partial t} = c_v \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$$

kde u je pórový tlak, c_v je součinitel konsolidace, t je čas a z je hloubka.

Metoda sítí

Jednoosá konsolidace

- Rovnice vyjadřuje, že změna pórového tlaku je přímo úměrná zakřivení profilu pórového tlaku s hloubkou:



Metoda sítí

Jednoosá konsolidace

V rovnici

$$\frac{\partial u}{\partial t} = c_v \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$$

nahradíme derivaci podle času pomocí explicitního algoritmu

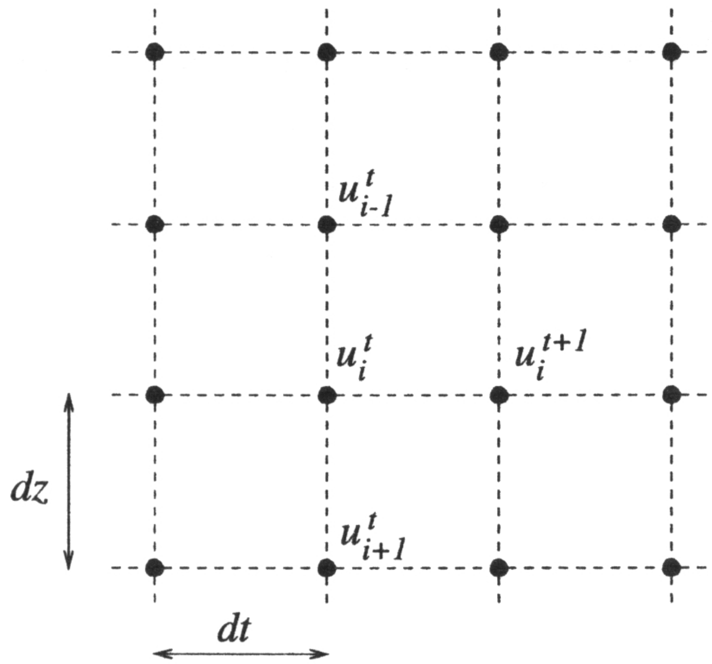
$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u(z, t + dt) - u(z, t)}{dt}$$

a derivaci podle hloubky pomocí implicitního algoritmu

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = \frac{u(z + dz, t) - 2u(z, t) + u(z - dz, t)}{dz^2}$$

Metoda sítí
Jednoosá konsolidace

- Časoprostor diskretizujeme např. následujícím způsobem:



Numerické metody | Metoda sítí

Metoda sítí
Jednoosá konsolidace

S využitím náhrady derivací diferencemi pro danou diskretizaci získáme

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_i^{t+1} - u_i^t}{dt} \qquad \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = \frac{u_{i-1}^t - 2u_i^t + u_{i+1}^t}{dz^2}$$

Dosazením do základní rovnice máme

$$u_i^{t+1} = u_i^t + c_v \left(u_{i-1}^t - 2u_i^t + u_{i+1}^t\right) \frac{dt}{dz^2}$$

Metoda sítí

Jednoosá konsolidace

Rovnici

$$u_i^{t+1} = u_i^t + c_v \left(u_{i-1}^t - 2u_i^t + u_{i+1}^t\right) \frac{dt}{dz^2}$$

snadno vyřešíme pro příslušné okrajové a počáteční podmínky

- Počáteční podmínky: $u(x, 0)$
- Okrajové podmínky:

$u(z_{min}, t) = 0$, $u(z_{max}, t) = 0$ pro oboustrannou drenáž

$\frac{\partial u(z_{min},t)}{dt} = 0$, $u(z_{max}, t) = 0$ pro jednostrannou horní drenáž

Okrajové a počáteční podmínky

- Je zřejmé, že matematickým modelem můžeme postihnout pouze konečnou část prostoru.
- Na okrajích oblasti je třeba předepsat buď hodnoty uvnitř hledaných neznámých veličin, anebo jejich derivace pro všechny výpočtové kroky (jinak by měly diferenciální rovnice popisující problém nekonečně mnoho řešení) – *okrajové podmínky*.
- *Počáteční podmínky* představují hodnoty neznámých veličin uvnitř řešené úlohy na počátku výpočtu.
- Přestože mají počáteční podmínky značný vliv na výsledky výpočtu, jejich určování je u geomateriálů často obtížné (např. měření napětí a určování objemové hmotnosti *in situ*).

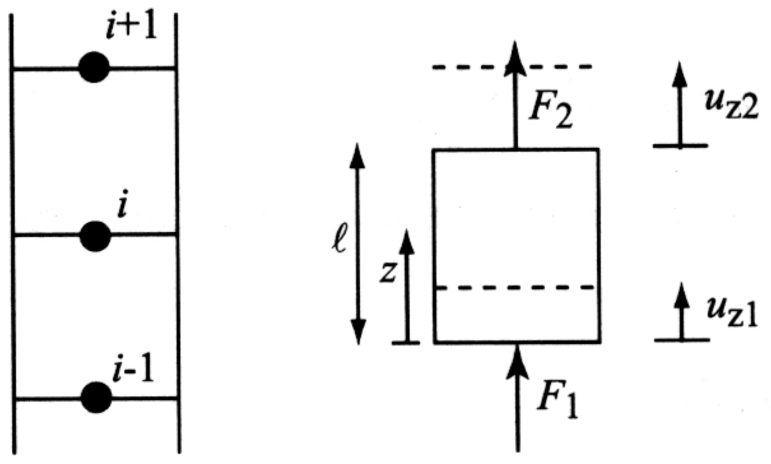
Metoda konečných prvků

- V geomechanice nejpoužívanější numerická metoda pro řešení okrajových úloh.
- Vyvíjená od padesátých let minulého století, její plné využití bylo možné až s nástupem výpočetní techniky.
- Princip metody konečných prvků si v úvodu demonstrujeme na její jednorozměrné formulaci s lineárně elastickým konstitučním vztahem.

Metoda konečných prvků

MKP v 1D

- Jednorozměrný problém si rozdělíme na sérii elementů s délkou l, jež jsou spojeny v uzlech. Posuny uzlů budou značeny u_{z1} a u_{z2}.



Metoda konečných prvků

MKP v 1D

V dalším kroku si definujeme tzv. *interpolační funkci*, jež nám bude udávat rozložení posunů v celém jednorozměrném konečném prvku na základě posunu jednotlivých uzlů.

$$u_z = N_1 u_{z1} + N_2 u_{z2}$$

Což můžeme zapsat pomocí vektorového zápisu (vektor posunutí uzlů označíme $\mathbf{d} = [u_{z1}, u_{z2}]$)

$$u_z = \mathbf{N} \cdot \mathbf{d}$$

V nejjednodušším případě bude funkce **N** předepisovat lineární změnu posunu uvnitř prvku. (z je definováno v rámci lokální soustavy souřadnic pro každý element)

$$N_1 = \frac{l - z}{l} \qquad N_2 = \frac{z}{l}$$

Metoda konečných prvků

MKP v 1D

Pomocí *interpolační funkce* můžeme vypočítat rozložení *přetvoření* ϵ_z pro jakýkoli bod elementu.

$$\epsilon_z = \frac{\partial u_z}{\partial z} = \frac{\partial N_1}{\partial z} u_{z1} + \frac{\partial N_2}{\partial z} u_{z2} = \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial z} \cdot \mathbf{d}$$

Pro náš jednorozměrný element evidentně platí

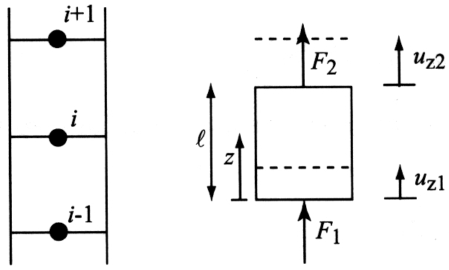
$$\epsilon_z = \frac{u_{z2} - u_{z1}}{l}$$

Přetvoření je tedy pro různé souřadnice z konstantní.

Metoda konečných prvků

MKP v 1D

Uzlové posuny budou způsobeny uzlovými silami F_1 a F_2



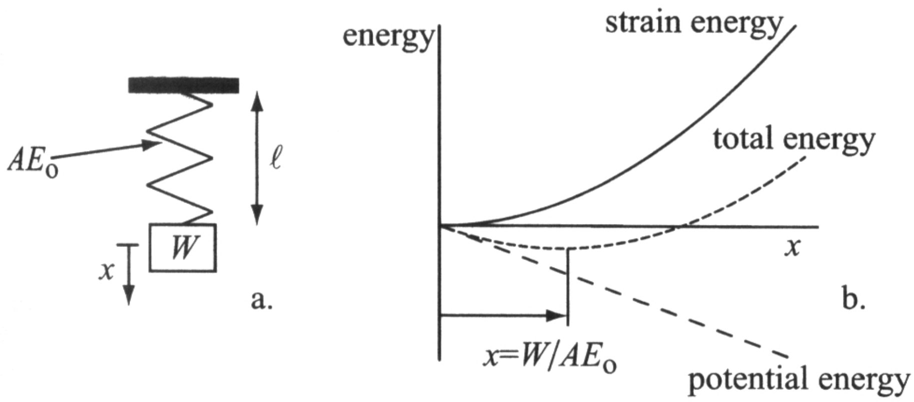
Pro naše řešení požadujeme aby síly působící v uzlech na jednotlivé elementy byly v rovnováze. Využijeme tzv. *Princip virtuálních prací* jež říká, že:

> *Těleso je v rovnováze, jestliže pro libovolé přípustné virtuální posuny bodů tělesa je virtuální práce vnitřních sil rovna virtuální práci vnějších sil*

Metoda konečných prvků

MKP v 1D

Princip lze dobře demonstrovat na případě jediné pružiny:



Práce vnějších sil je dána změnou potenciální energie závaží ($-Wx$)
Práce vnitřních sil je dána silou nutnou k deformaci pružiny ($\frac{1}{2l}AE_0x^2$)
Celková energie systému je tedy

$$V = \frac{1}{2l}AE_0x^2 - Wx$$

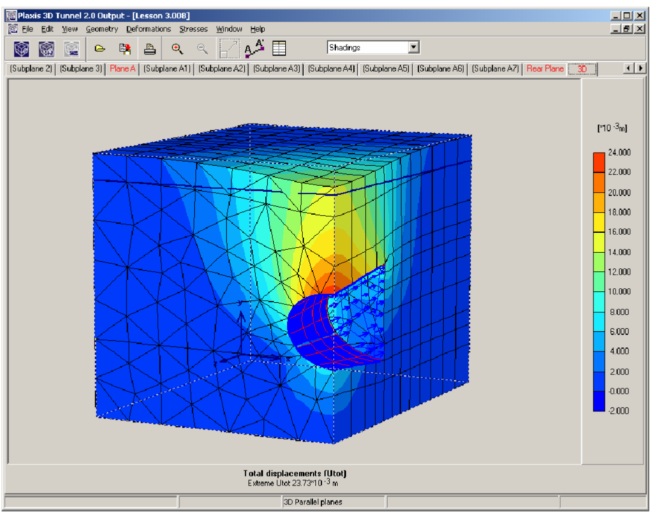
Metoda konečných prvků

MKP v 1D

Práce vnějších sil bude rovna práci vnitřních sil v situaci, kdy je *celková energie systému minimální*, tedy pro $\partial V/\partial x = 0$, což je splněno pro $x = lW/(AE_0)$

Metoda konečných prvků

- Ve 2D a 3D, diskretizujeme oblast pomocí *sítě metody konečných prvků*



Metoda konečných prvků

- Na základě znalosti *geometrie prvků*, *typu prvků* a *materiálových vlastnostech* sestavíme tzv. *globální matici tuhosti* **K**, která vztahuje *uzlové posuny* a *vnější síly* systému.

$$\Delta\mathbf{R} = \mathbf{K} \cdot \Delta\mathbf{U}$$

  kde $\Delta\mathbf{R}$ je vektor přírůstku vnějších sil ve všech uzlech a $\Delta\mathbf{U}$ je vektor přírůstku posunů v uzlech.

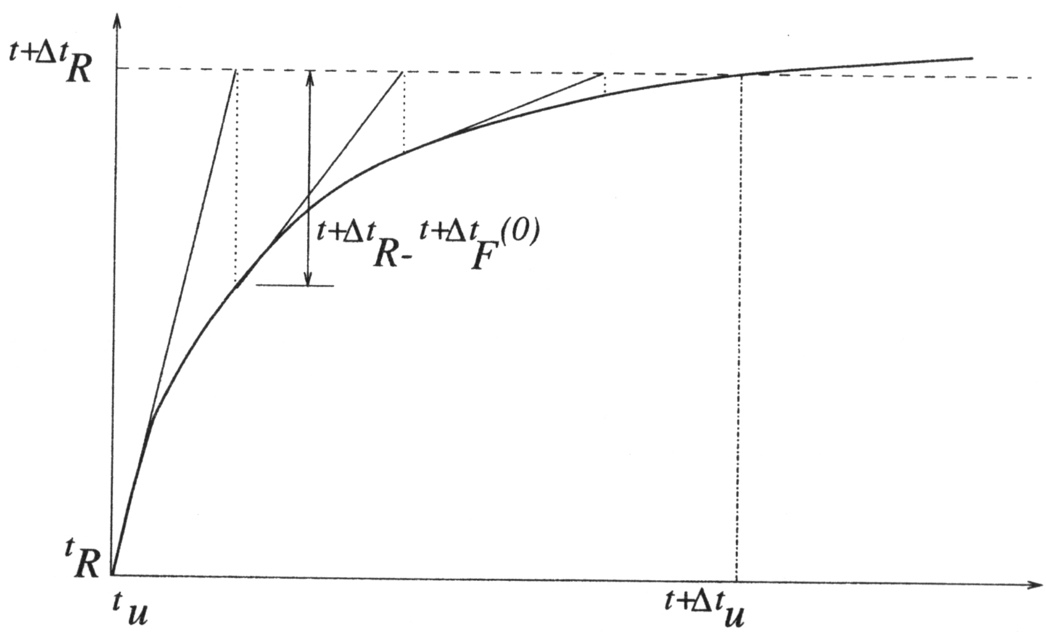
- Vnířní síly v prvcích $\Delta\mathbf{F}$ získáme z přetvoření prvku $\Delta\epsilon$ a *konstitučních modelu*

$$\Delta\sigma = \mathcal{M}\Delta\epsilon$$

  napětí v prvcích σ musíme *extrapolovat* do uzlů abychom získaly vnitřní uzlové síly.

Metoda konečných prvků

- Rovnováhu vnitřních a vnějších sil hledáme pomocí *iterační metody*. Nejběžnější je tzv. *Newton-Raphsonova metoda*.



Metoda oddělených prvků

- *Modely mechaniky kontinua* patří k nejpoužívanějším matematickým nástrojům v geomechanice.
- Pro řešení některých úloh však modely mechaniky kontinua nejsou vhodné, zejména potom tam kde je chování významně ovlivněno *partikulární povahou materiálu* (rozpukaný horninový masiv. . .) a také tam kde dochází k výrazné *lokalizaci deformace* (smyková zóna - při využití MKP dochází k tak velkým deformacím elementů, že je výpočet nepřesný).
- Nejznámějším reprezentantem modelů diskontinua je *Metoda oddělených prvků*.

Metoda oddělených prvků

- Studovaná oblast je opět rozdělena na prvky (reprezentující zrna či skalní bloky). V tomto případě jsou sice zrna považována za kontinuum (většinou dokonale tuhé), ale *výsledné chování je dáno pravidly interakce mezi jednotlivými prvky*.

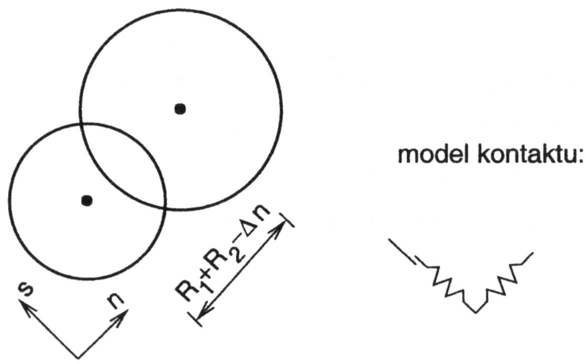
Problém konstitučních vztahů v kontinuu se tedy přenese na úroveň kontaktů.

Metoda oddělených prvků

- Změna kontaktních normálových sil ΔF_n se vypočte z *fiktivního* překrytí prvků v místě kontaktu jako

$$\Delta F_n = k_n \Delta n$$

k_n představuje normálovou tuhost kontaktu a n velikost překrytí $\Delta n = v_n \Delta t$, kde v_n je rychlost částice.



Metoda oddělených prvků

- Kontaktní sílu v tangenciálním směru F_s získáme analogicky, uvažujeme ale navíc možnost plastické deformace na kontaktu.

$$\Delta F_s = k_s \Delta s; \quad F_s \leq F_n \tan \phi + c$$

- Výpočet celkového přetvoření má *dynamický charakter*. Je založen na aplikaci 2. Newtonova zákona, z něhož se získá změna rychlosti:

$$m\frac{dv}{dt} = \sum F \rightarrow \Delta v = \frac{\sum F}{m} \Delta t$$

- Při výpočtu je důležitá vhodná volba časového kroku, tak aby se vzruch v průběhu jednoho kroku mohl šířit jen mezi *sousedními prvky*.

Metoda oddělených prvků

- Do výpočtu se také musí zavést *tlumení*, jinak by docházelo k nekonečným oscilacím díky setrvačným silám. Výsledé vztahy lze zapsat jako

$$m\frac{dv}{dt} = \sum(F + D) - Cv; \qquad \Delta v = \frac{\sum(F + D) - Cv}{m}\Delta t$$

- Kde D značí *kontaktní tlumení* ($D = cv$, c je vazkost kontaktu) a C *globální tlumení*.
- Přestože metoda oddělěných prvků představuje významné doplnění možností numerických metod pro kontinuum, její praktické využití je stále limitováno mnohými nevýhodami a nedostatky$\rightarrow$

Metoda oddělených prvků

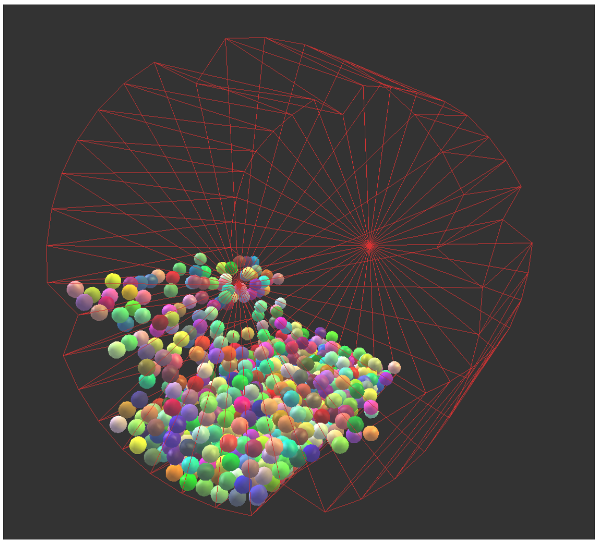
Nevýhody

- Tvar prvků. Nejčastěji se používají kruhové (kulové) prvky, neboť prvky nepravidelného tvaru jsou náročné na numerické zpracování.
- Rozměr úlohy. Většina výpočtů probíhá ve 2D. Nesimulujeme pak chování kulových zrn, nýbržválečků!
- Chování kontaktů a určování parametrů. Problém konstitučních vztahů v kontinuu se přenese na úroveň kontaktních vztahů mezi prvky. Parametry pro chování kontaktů jsou pak *velmi obtížně* kalibrovatelné.
- Výpočetní kapacita. I přes rychlý rozvoj výpočetní techniky je stále výpočetní kapacita nedostatečná pro řešení skutečných geotechnických úloh.

Metoda oddělených prvků

Příklady

- Příklady úloh řešených pomocí metody oddělených prvků s využitím software *Yade*

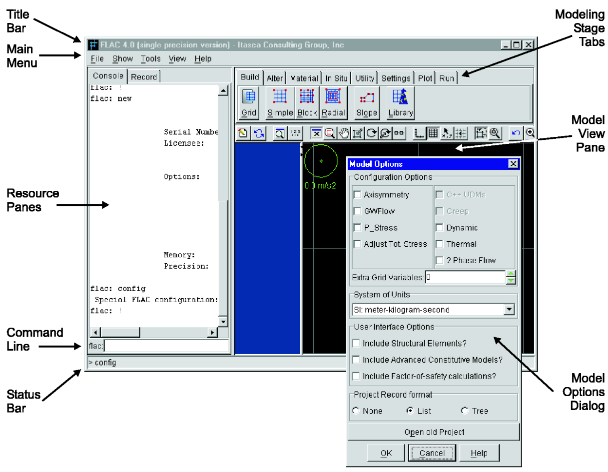


Geotechnický software

- V dnešní době je modelování prováděno standardně ve většině geotechnických firem s využitím software s uživatelsky přístupným grafickým rozhraním.

  FLAC (*http://www.itascacg.com/flac*) - Nejpoužívanější software metody sítí

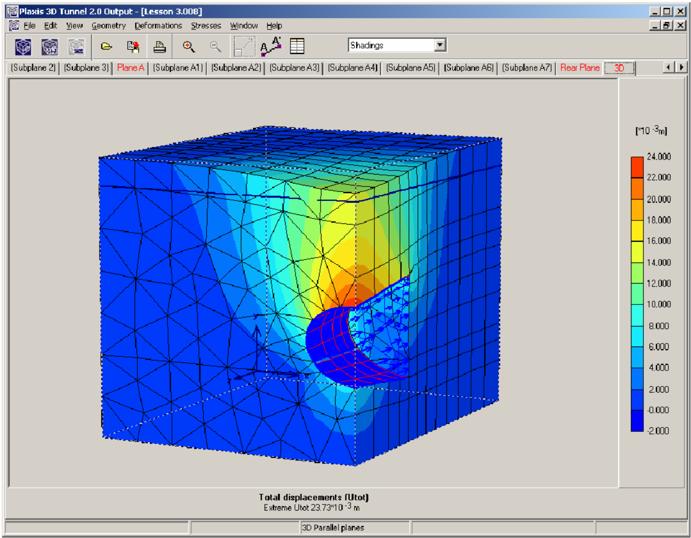
Vhodný pro řešení problémů u nichž dochází k větším deformacím (v tomto případě přestává být obecně používanější metoda konečných prvků efektivní).



Geotechnický software

- **PLAXIS** (*http://www.plaxis.nl*) - software pro metodu konečných prvků, asi nejpoužívanější software v geotechnických firmách.

Vyvíjený specificky pro geotechnické účely → velký výběr *materiálových modelů* a *typ analýz*. *Grafické rozhraní* - výhodné pro rychlé sestavení modelu, nevýhodné pro složité problémy (špatná kontrola vstupních údajů).



Závěr

- Představili jsme si tři základní numerické metody využívané v geotechnických aplikacích: *metoda konečných prvků*, *metoda sítí* a *metoda oddělených prvků*.
- Metody pro kontinuum založeny na tzv. *bilančních rovnicích* - tyto zákony musí být splněny nezávisle na řešeném problému.
- Bilanční rovnice vedou na parciální diferenciální rovnice. Pro jejich řešení je nutné znát počáteční podmínky (na začátku výpočtu) a okrajové podmínky (v celém průběhu výpočtu).
- Materiálový (konstituční) model uzavírá úlohu, s jeho pomocí získáváme vnitřní síly systému a hledáme jejich rovnováhu se silami vnějšími.