



Bakalářská práce

Homogenizace v mechanice hornin

Studijní program:

B0588A110003 – Aplikované vědy v inženýrství

Studijní obor:

B0588A110003AVI – Aplikované vědy v inženýrství

Autor práce:

Ronald Christopher Siddall

Vedoucí práce:

doc. Mgr. Jan Stebel, Ph.D.

Liberec 2025



Zadání bakalářské práce

Homogenizace v mechanice hornin

Jméno a příjmení:

Ronald Christopher Siddall

Osobní číslo:

M22000074

Studijní program:

B0588A110003 Aplikované vědy v inženýrství

Zadávající katedra:

Ústav nových technologií a aplikované informatiky

Akademický rok:

2024/2025

Zásady pro vypracování:

1. Seznamte se se základy mechaniky hornin, s charakterizací puklinových sítí v krystalických horninách a s principy numerické homogenizace.
2. Vytvořte sadu 2D geometrických modelů krystalické horniny s puklinovou sítí vygenerovanou z vhodného statistického rozdělení.
3. Proveďte numerické simulace mechaniky na vytvořených vzorcích hornin pro různé zátěžové podmínky a vypočtěte efektivní posuny a napětí.
4. Analyzujte výsledky v závislosti na velikosti zatížení: určete efektivní elastické parametry, nalezněte mez pevnosti a pokuste se určit parametry vhodného kritéria plasticity (např. Mohr-Coulombovo nebo Hoek-Brownovo).
5. Aplikujte stochastickou homogenizaci: průměrování přes sadu puklinových sítí se stejným statistickým rozdělením.

Rozsah grafických prací: dle potřeby dokumentace
Rozsah pracovní zprávy: 30–40 stran
Forma zpracování práce: tištěná/elektronická
Jazyk práce: čeština

Seznam odborné literatury:

- [1] J. C. Jaeger, N. G. W. Cook, R. W. Zimmerman: Fundamentals of rock mechanics. Blackwell Publishing, 2007.
- [2] ÖHMAN, Johan; FOLLIN, Sven. Site investigation SFR. Hydrogeological modelling of SFR. Model version 0.2. SKB technical report, 2010.
- [3] J. Březina et al.: BGEM - B-spline GEometry Modeling package.
URL: <https://github.com/GeoMop/bgem>
[Navštíveno 23. 9. 2024].

Vedoucí práce: doc. Mgr. Jan Stebel, Ph.D.
Ústav nových technologií a aplikované informatiky

Datum zadání práce: 8. října 2024
Předpokládaný termín odevzdání: 9. května 2025

L.S.

doc. Ing. Josef Černohorský, Ph.D.
děkan

doc. Mgr. Jan Stebel, Ph.D.
garant studijního programu

Prohlášení

Prohlašuji, že svou bakalářskou práci jsem vypracoval samostatně jako původní dílo s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím mé bakalářské práce a konzultantem.

Jsem si vědom toho, že na mou bakalářskou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb., o právu autorském, zejména § 60 – školní dílo.

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci nezasahuje do mých autorských práv užitím mé bakalářské práce pro vnitřní potřebu Technické univerzity v Liberci.

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

Současně čestně prohlašuji, že text elektronické podoby práce vložený do IS STAG se shoduje s textem tištěné podoby práce.

Beru na vědomí, že má bakalářská práce bude zveřejněna Technickou univerzitou v Liberci v souladu s § 47b zákona č. 111/1998 Sb., o vysokých školách a o změně a doplnění dalších zákonů (zákon o vysokých školách), ve znění pozdějších předpisů.

Jsem si vědom následků, které podle zákona o vysokých školách mohou vyplývat z porušení tohoto prohlášení.

29. 4. 2025

Ronald Christopher Siddall

Homogenizace v mechanice hornin

Abstrakt

Tato bakalářská práce se zaměřuje na numerickou homogenizaci mechanických vlastností krytalických hornin, jejichž heterogenní struktura je popsána diskrétní puklinovou sítí. Na vytvořených dvourozměrných geometrických modelech, reprezentujících tyto náhodné puklinové sítě, byly provedeny numerické simulace mechanického chování hornin při různých zátěžových podmínkách. Simulace provedené v simulátoru Flow123d poskytly tenzorová pole napětí a deformace. Následovala analýza těchto výsledků za účelem stanovení efektivních elastických parametrů. Na závěr byla aplikována stochastická homogenizace, která spočívala v průměrování výsledků z více náhodných puklinových sítí vygenerovaných na základě stejného statistického rozdělení.

Klíčová slova: diskrétní puklinová síť, efektivní elastický tenzor, numerická a stochastická homogenizace, nelineární mechanika krytalických hornin, deformace

Abstract

This bachelor thesis focuses on the numerical homogenization of the mechanical properties of crystalline rocks, whose heterogeneous structure is characterized by a discrete fracture network. Numerical simulations of the mechanical behaviour of these rocks under various loading conditions were conducted using two-dimensional geometric models developed to represent the random fracture networks. The simulations, carried out with the Flow123d software, provided tensor fields of stress and deformation. The results were analysed to determine effective elastic parameters. Finally, stochastic homogenization was performed by averaging the results from multiple random fracture networks generated based on the same statistical distribution.

Keywords: discrete fracture network, effective elastic tensor, numerical and stochastic homogenization, nonlinear mechanics of crystalline rocks, deformation

Poděkování

Chci především poděkovat vedoucímu své práce, doc. Mgr. Janu Stebelovi, Ph.D. Jeho opravdu příkladné vedení, odborné znalosti, konstruktivní kritika, trpělivost, férový přístup a neustálá ochota poskytovat cenné rady, pomoc a připomínky během tvorby této práce byly pro mě skutečně nenahraditelné.

Zároveň bych chtěl vyjádřit vděk doc. Mgr. Janu Březinovi, Ph.D., za poskytnutí užitečných podpůrných materiálů a odbornou pomoc. Kromě toho bych rád poděkoval svým rodičům a rodině, kteří mi též dodávali potřebnou podporu, energii a prostor k práci.

A samozřejmě bych rád poděkoval svým kolegům z AVI, kteří mi také pomáhali.

Bez těchto a dalších lidí by tato práce nikdy nevznikla a jsem moc vděčný za veškerou pomoc a podporu.

Obsah

Seznam použitých zkratek	8
Seznam použitých operátorů	8
Seznam použitých latinských symbolů	8
Seznam použitých řeckých symbolů	9
Seznam ostatních symbolů	10
1 Úvod	11
2 Teorie	12
2.1 Matematický popis mechaniky pružných těles	12
2.1.1 Deformace a posun	13
2.1.2 Zobecněný Hookův zákon, bilance sil a okrajové podmínky .	14
2.1.3 Voigtova notace	14
2.2 Matematický popis puklin	15
2.2.1 Orientace puklin	15
2.2.2 Pravděpodobnostní rozdělení pro orientaci puklin	16
2.2.3 Velikost přirozených puklin	18
2.2.4 Intenzita a prostorové rozložení přirozených puklin	19
2.2.5 Velikost a intenzita uměle generovaných puklin	20
2.3 Matematický model mechaniky hornin	20
2.3.1 Obecný úvod k problematice	21
2.3.2 Semidiskretizace	21
2.3.3 Popis modelu mechaniky DFM	23
2.3.4 Kontaktní podmínky	23
2.3.5 Okrajové podmínky	24
2.4 Numerická homogenizace	25
2.4.1 Definice homogenizace a efektivního elastického tenzoru . .	25
2.4.2 Okrajové podmínky problému a matice zatížení	26
2.4.3 Efektivní elastický tenzor pro obecné matice zatížení . .	26
2.4.4 Efektivní elastický tenzor pro konkrétní matice zatížení .	27
2.4.5 Okrajové podmínky pro konkrétní matice zatížení	28
3 Popis výpočetního programu	29
3.1 Úvod k programu, instalace a předpoklady	29
3.2 Vstup a konfigurační soubor	30
3.2.1 Vstup pro generování umělých puklin a výpočetní sítě	30

3.2.2	Vstup pro tvorbu souboru na homogenizační úlohu	31
3.3	Princip generování umělých puklin a výpočetní sítě	32
3.3.1	Reprezentace puklinové sítě	32
3.3.2	Aplikace puklinové sítě pro generování výpočetní sítě	32
3.4	Tvorba modelu mechaniky	33
3.5	Výstup a výpočet prvků výsledného tenzoru	33
3.6	Výpočet ukázkové úlohy	34
4	Stochastická homogenizace a statistická analýza výsledků	36
4.1	Závislost efektivního elastického tenzoru na orientaci puklin	37
4.2	Závislost efektivního elastického tenzoru na poměru rozevření pukliny ku její délce	37
4.3	Závislost efektivního elastického tenzoru na tuhosti puklin	38
4.4	Závislost efektivního elastického tenzoru na posunu	39
4.5	Závislost efektivního elastického tenzoru na geometrii puklinové sítě .	39
4.6	Shrnutí pozorovaných zjištění	40
5	Závěr	41

Seznam použitých zkratek

BGEM	B-spline GEometry Modeling package (SW knihovna)
DFM	discrete fracture matrix (model)
DFN	discrete fracture network
FFT	fast Fourier transform (rychlá Fourierova transformace)
FEM	finite element method (metoda konečných prvků)
FVM	finite volume method (metoda konečných objemů)
GMSH	open source 3D finite element mesh generator (SW program)
REV	representative elementary volume (reprezentativní elementární objem)
SKB	Svensk Kärnbränslehantering AB (švédská státní organizace pro správu radioaktivního odpadu)
SW	software

Seznam použitých operátorů

$\tilde{\cdot}$	Voigtova notace
$\bar{\cdot}$	semidiskretizace
$\langle \cdot \rangle$	operátor průměrování pro homogenizaci
$\{\{ \cdot \}\}$	operátor průměrování pro semidiskretizaci
$\nabla, \operatorname{div}$	gradient, divergence
$\overline{\nabla}, \nabla_{\tau}, \nabla_{\nu}$	semidiskretizovaný gradient, tečný, normálový gradient
$\overline{\operatorname{div}}, \operatorname{div}_{\tau}, \operatorname{div}_{\nu}$	semidiskretizovaná divergence, tečná, normálová divergence

Seznam použitých latinských symbolů

a_f	rozevření pukliny v závislosti na poli posunu
\mathbf{a}	jednotkový střední normálový vektor puklin
C, C_m, C_f	Hookův elastický tenzor, elastický tenzor pro oblast Ω_m , elastický tenzor pro oblast Ω_f
\tilde{C}^*	efektivní elastický tenzor ve Voigtově notaci
E	obecná matice zatížení
E_1, E_2, E_3	lineárně nezávislé matice zatížení pro příslušné okrajové podmínky
$\mathbf{f}, \mathbf{f}_m, \mathbf{f}_f$	vnější působící (objemová) zátěžová síla v $\Omega, \Omega_m, \Omega_f$
$F(\phi), G(r)$	distribuční funkce pro orientaci a velikost puklin
$g(r)$	hustota pravděpodobnosti pro velikost (průměr) puklin
g_0	normalizační konstanta pro $g(r)$
I	jednotkový tenzor druhého řádu
k_r	exponent škálování velikosti puklin

N	celkový počet puklin
p, p_m, p_f	pole tlaku, tlak v matrici, tlak v puklinách
P_{30}	intenzita puklin tj. počet puklin vztažený na zkoumaný objem
P_{32}	plošná intenzita puklin tj. celková plocha puklin vztažená na zkoumaný objem
r	velikost resp. průměr puklin
$[r_0, r_\infty]$	interval velikostí přirozených puklin
$[r_{\min}, r_{\max}]$	interval velikostí pro umělé pukliny
S	jednotková sféra
\mathbf{t}_N	zadaná povrchová síla
\mathbf{u}	vektorové pole posunu
\mathbf{u}_D	zadané vektorové pole posunutí
$\mathbf{u}_f, \mathbf{u}_m$	vektorové pole posunu v puklinách, vektorové pole posunu v matrici
$\mathbf{u}_{D1}, \mathbf{u}_{D2}, \mathbf{u}_{D3}$	vektorová pole posunutí pro jednotlivé okrajové podmínky
V	zkoumaný objem
\mathbf{x}	vektor určující polohu bodu před deformací
\mathbf{y}	vektor určující polohu bodu po deformaci
Y, Y_m, Y_f	Youngův modul, Youngův modul horninové matrice, Youngův modul puklin

Seznam použitých řeckých symbolů

β	zátěžový parametr resp. poměrná velikost posunutí
δ, δ_{\min}	počáteční rozevření pukliny před deformací, nezáporný parametr určující nejmenší povolenou velikost pukliny
η	poměr rozevření pukliny ku její délce
Γ_{Nm}, Γ_{Dm}	dvě disjunktní části $\partial\Omega_m$
Γ_{Nf}, Γ_{Df}	dvě disjunktní části $\partial\Omega_f$
κ_f, κ_v	parametr koncentrace pro Fisherovo rozdělení, parametr koncentrace pro Von Misesovo rozdělení
$\Lambda^\pm, \Lambda_\tau$	kontaktní síla na opačných stranách pukliny, kontaktní síla v tečném směru
ν	Poissonovo číslo
$\Omega, \Omega_m, \Omega_f$	zkoumaná souvislá otevřená množina resp. výpočetní oblast, oblast horninové matrice, oblast puklin
$\partial\Omega, \partial\Omega_m, \partial\Omega_f$	hranice zkoumané souvislé otevřené množiny resp. hranice výpočetní oblasti, hranice oblasti horninové matrice, hranice oblasti puklin
$\boldsymbol{\nu}, \boldsymbol{\tau}$	normálový vektor k puklině, tečný vektor k puklině
$\phi_d, \phi_s, \phi_t, \phi_p$	úhel dip, strike, trend, plunge
ϕ_{tf}, ϕ_{tv}	úhel trend pro Fisherovo rozdělení, trend pro Von Misesovo rozdělení

$\sigma, \sigma_m, \sigma_f$	tenzor napětí, tenzor napětí v matrici, tenzor napětí v puklinách
ε	tenzor malých deformací
$\bar{\varepsilon}$	semidiskretizovaný tenzor malých deformací
$\langle \tilde{\sigma} \rangle, \langle \tilde{\varepsilon} \rangle$	efektivní tenzor napětí ve Voigtově notaci, efektivní tenzor malých deformací ve Voigtově notaci
ξ	poměr Youngova modulu puklin a horninové matrice

Seznam ostatních symbolů

.	skalární součin vektorů
:	skalární součin tenzorů druhého řádu
\otimes	tenzorový součin vektorů
\emptyset	prázdná množina
∂	hranice množiny
$\text{cl}()$	uzávěr množiny
\top	transpozice
$()^+, ()^-$	hodnota na opačných stranách pukliny
\mathbb{N}	přirozená čísla
$\mathbb{R}, \mathbb{R}^+, \mathbb{R}_0^+$	všechna reálná čísla, kladná reálná čísla, kladná reálná čísla včetně nuly

1 Úvod

Všichni jsme se již někdy setkali s nějakým materiálem, který má heterogenní tj. prostorově proměnnou mikrostrukturu. Materiálů s touto mikrostrukturou je velké množství, ale mezi ty nejvýznamnější patří např. krystalické horniny, biomateriály, dřevo či kompozitní materiály. Co mají všechny tyto materiály společné? Kvůli jejich velmi komplexní mikrostruktuře je extrémně náročné obecně předpovídat resp. modelovat jejich mechanické vlastnosti. Mechanické vlastnosti jako tuhost, pevnost či elasticita jsou charakteristiky materiálu, které popisují jeho chování a reakce na různé mechanické zatížení. Tyto vlastnosti jsou naprostoté stěžejní pro hlubší porozumění chování daného materiálu, protože pokud neznáme mechanické vlastnosti materiálu, je obtížné předpovídat jeho chování v různých situacích. Jinými slovy obecné modelování heterogenních materiálů se složitou mikrostrukturou je velmi náročný až téměř nemožný úkol, který je ale nutné řešit.

Numerická homogenizace nabízí jeden z možných způsobů, jak k tomuto problému přistupovat. Tato bakalářská práce se věnuje právě aplikaci numerické homogenizace na modelování krystalických hornin obsahující náhodnou puklinovou síť. Význam tohoto tématu spočívá mj. v tom, že krystalické horniny tvoří významnou část zemské kůry a jsou nepochyběně důležitým materiálem souvisejícím třeba s úložištěm jaderného odpadu či geotermálními továrnami.

Tato problematika bude nejprve formulována teoreticky. Zaměříme se na matematický popis puklin, a to především na popis jejich orientace, rozložení a velikosti. Následně se budeme věnovat nelineární mechanice puklinové sítě, kde se mimo jiné zaměříme na definici okrajových a kontaktních podmínek našeho problému.

Další část práce se věnuje samotnému implementovanému programu a jeho jednotlivým částem. Zprvu je popsáno základní schéma zvoleného postupu a použitých metod pro generování puklin a puklinových sítí. Tyto sítě jsou vytvářeny pomocí balíčku BGEM, který umožňuje generování puklin, které jsou následně různě seskupovány do rodin, a to podle statistických rozdělení, orientací, délky a dalších parametrů. Po vytvoření puklinové sítě je studovaná oblast diskretizována pomocí dvourozměrné sítě konečných prvků, která je optimalizována před uskutečněním simulací v simulátoru Flow123d. Výsledkem těchto simulací jsou tenzorová pole napětí a deformace.

V závěru práce bude aplikována metoda stochastické homogenizace, která spočívá v průměrování výsledků z více náhodně vygenerovaných puklinových sítí se stejným statistickým rozdělením. Kromě toho se analyzuje vliv jednotlivých parametrů na výsledek.

2 Teorie

Teoretická část je strukturována do čtyř podkapitol. Nejprve kapitola 2.1 shrnuje základní poznatky z matematické teorie mechaniky pružných těles. Poté kapitola 2.2 popisuje vztahy určující velikosti, orientaci a rozložení puklin v krystalické hornině. V kapitole 2.3 je následně představen model nelineární mechaniky puklinové sítě, včetně okrajových a kontaktních podmínek. Poslední kapitola 2.4 se věnuje numerické homogenizaci a obecnému postupu pro získání efektivního elastického tenzoru.

2.1 Matematický popis mechaniky pružných těles

Začneme zavedením potřebných pojmu a značení. Skalární součin vektorů $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ definujeme následovně:

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{i=1}^n a_i b_i. \quad (2.1)$$

Podobně skalární součin tenzorů druhého řádu $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ se definuje takto:

$$\mathbf{A} : \mathbf{B} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n A_{ij} B_{ij}. \quad (2.2)$$

Dále tenzorový součin¹ vektorů $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ a $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^m$ je tenzor druhého řádu:

$$\mathbf{v} \otimes \mathbf{w} = \begin{bmatrix} v_1 w_1 & \cdots & v_1 w_m \\ v_2 w_1 & \cdots & v_2 w_m \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ v_n w_1 & \cdots & v_n w_m \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times m}. \quad (2.3)$$

Uzávěr² otevřené množiny \mathcal{O} je definován jako sjednocení jejího vnitřku a hranice:

$$\text{cl}(\mathcal{O}) = \mathcal{O} \cup \partial\mathcal{O}. \quad (2.4)$$

Matice \mathbf{A}^\top značí matici transponovanou, která vznikne z matice \mathbf{A} vzájemnou výměnou řádků a sloupců, pro prvky platí:

$$(\mathbf{A}^\top)_{ij} = (\mathbf{A})_{ji}, \quad \forall i, j. \quad (2.5)$$

¹Nazývá se také vnější součin.

²Obvyklejší je značení $\overline{\mathcal{O}}$. Zde se zvolilo cl, aby se předešlo kolizi značení v kap. 2.3.2.

Gradient je vektor, který je definován působením operátoru nabla na skalární pole ($F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$) nebo vektorové pole ($\mathbf{F} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$):

$$\nabla F = \left[\frac{\partial F}{\partial x_1}, \frac{\partial F}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial F}{\partial x_n} \right]^\top, \quad \text{resp.} \quad \nabla \mathbf{F} = \left[\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x_1}, \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x_n} \right]^\top. \quad (2.6)$$

Pro vektorové pole $\mathbf{F} = (F_1, F_2, \dots, F_n)$ je divergence definována jako skalár:

$$\operatorname{div} \mathbf{F} = \frac{\partial F_1}{\partial x_1} + \frac{\partial F_2}{\partial x_2} + \dots + \frac{\partial F_n}{\partial x_n}. \quad (2.7)$$

2.1.1 Deformace a posun

Naším cílem je popsat reakci heterogenního tělesa či materiálu při působení zátěže resp. **při deformaci**. V této práci uvažujeme pro zjednodušení dvoudimenzionální (rovinné) problémy.

Pojmem deformace tělesa rozumíme změnu tvaru či objemu tělesa způsobenou působením nějakých sil. Tyto síly, také označované jako deformační, vyvolávají v tělese napětí a existuje jich více typů. Mezi ty nejčastější řadíme deformační síly v tahu, tlaku, smyku, ohybu či torzi. Deformace jako takové se dělí na dva základní typy, a to **elastické** (pružné) a **plastické** (nepružné). Elastická deformace je reverzibilní (vratný) děj, tj. pokud těleso elasticky deformujeme, tak se po ukončení působení těleso vrátí do původního stavu. Pokud se jedná o plastickou deformaci, mluvíme o irreverzibilních (nevratných) dějích. Jinými slovy při plastických deformacích dojde k permanentní změně tvaru daného materiálu (Brdička et al., 2005, kap. 5.2.). Je celkem přirozené usoudit, že k elastickým deformacím dojde pro relativně malé síly (samozřejmě závisí na typu materiálu), zatímco k plastickým deformacím dojde při působení větších sil. Pro matematický popis elastické deformace nejprve zavedeme tzv. **vektorové pole posunutí**. Mějme libovolný bod, jehož kartézské souřadnice před deformací označíme x_i . Působením vnějších sil dojde k posunu bodu, který je popsán vektorovým polem $\mathbf{u}(\mathbf{x})$, do jiného bodu se souřadnicemi y_i . Vektorové pole posunutí (či zkráceně pole posunu) $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ je poté definováno následovně (Brdička et al., 2005, kap. 4.1.):

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{y} - \mathbf{x}, \quad (2.8)$$

kde vektor \mathbf{x} se složkami $x_i, i = 1, 2$ je poloha bodu před deformací a vektor \mathbf{y} se složkami $y_i, i = 1, 2$ je poloha bodu po deformaci.

Je nutné zdůraznit, že vektorové pole posunutí je **obecný** popis změny polohy bodu. Jinými slovy, pole posunutí sice souvisí s deformací, ale nejsou to ekvivalentní pojmy. Například translace (fyzický posun) nebo rotace (otočení) povedou k netrieviálnímu (nenulovému) poli posunutí, tj. $\mathbf{u}(\mathbf{x}) \neq 0$. Nicméně při těchto pohybech nedochází k deformaci, protože nedošlo ke změně tvaru a objemu tělesa. Změnu tvaru popisuje tzv. **tenzor malých deformací** (Zohdi a Wriggers, 2005, kap. 2.1.2):

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^\top \right). \quad (2.9)$$

2.1.2 Zobecněný Hookův zákon, bilance sil a okrajové podmínky

Lineárně elastický materiál je popsán **zobecněným Hookovým zákonem**:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}), \quad (2.10)$$

kde $\boldsymbol{\sigma}$ je tenzor napětí a \mathbf{C} je Hookův elastický tenzor čtvrtého řádu. Pro izotropní materiál je tento tenzor možné reprezentovat pomocí dvou konstant - Youngova modulu $Y > 0$ a Poissonova čísla³ ν :

$$\mathbf{C}\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) = \frac{Y}{1+\nu}\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) + \frac{Y\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}(\operatorname{div} \mathbf{u})\mathbf{I}, \quad (2.11)$$

kde \mathbf{I} je jednotkový tenzor druhého řádu. Bilanci sil v tomto materiálu vyjadřuje soustava Lamého rovnic, kterou lze zapsat ve tvaru:

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{f}, \quad (2.12)$$

kde \mathbf{f} je působící objemová síla.

Interakci tělesa s okolím popisují okrajové podmínky. Nejčastěji se používají dva základní typy: **Dirichletova** podmínka předepisuje posunutí na povrchu tělesa:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_D, \quad (2.13)$$

zatímco **Neumannova** podmínka udává působení vnější povrchové síly:

$$\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n} = \mathbf{t}_N. \quad (2.14)$$

Zde \mathbf{u}_D představuje zadané pole posunutí, \mathbf{n} je vnější jednotkový normálový vektor a \mathbf{t}_N je zadaná povrchová síla.

2.1.3 Voigtova notace

V matematice je Voigtova notace způsob, jak reprezentovat **symetrický** tenzor pomocí tenzoru nižšího řádu (Povey, 2023).

Uvažujme dvoudimenzionální symetrický tenzor druhého řádu $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ a dvoudimenzionální symetrický tenzor čtvrtého řádu $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{2 \times 2 \times 2 \times 2}$.

Ve Voigtově notaci se tenzor \mathbf{A} zredukuje na tenzor prvního řádu (vektor) a tenzor \mathbf{B} se zredukuje na tenzor druhého řádu (matici):

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{2 \times 2} &\longrightarrow \tilde{\mathbf{A}} \in \mathbb{R}^3, \\ \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{2 \times 2 \times 2 \times 2} &\longrightarrow \tilde{\mathbf{B}} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

kde $\tilde{\mathbf{A}}$ a $\tilde{\mathbf{B}}$ značí zredukované tenzory. Tyto zredukované tenzory obsahují pouze různé prvky původních tenzorů:

$$\tilde{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} A_{11} \\ A_{22} \\ A_{12} \end{bmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{B}} = \begin{bmatrix} B_{1111} & B_{1122} & B_{1112} \\ B_{2211} & B_{2222} & B_{2212} \\ B_{1211} & B_{1222} & B_{1212} \end{bmatrix}.$$

³Poissonovo číslo je definované jako záporný podíl podélné a příčné deformace a pro většinu materiálů leží v intervalu $(0, \frac{1}{2})$. Existují však i tzv. auxetické materiály s $\nu < 0$.

2.2 Matematický popis puklin

Krystalické horniny se často vyznačují přítomností puklin, což jsou liniové a plošné útvary, jejichž vlastnosti se **výrazně** liší od okolní horniny. Tyto pukliny obvykle vznikají v důsledku různých geologických procesů a zásadním způsobem ovlivňují hydromechanické (a jiné s tím související) procesy v horninovém masivu. Puklinová síť má obvykle náhodný charakter a její struktura se popisuje pomocí několika základních veličin.

První klíčovou vlastností puklinové sítě je **orientace**. Orientace puklinové sítě definuje směr, ve kterém pukliny leží v prostoru, a bývá obvykle popsána různými úhly a hustotami pravděpodobnosti.

Další důležitou veličinou pro popis puklin v puklinové síti je **velikost**, která se obvykle definuje jako délka liniových puklin nebo plocha plošných puklin. Tento parametr přímo určuje vliv dané pukliny na okolní prostředí, např. puklinové sítě s většími puklinami obvykle vykazuje nižší pevnost, což zapříčiní větší výslednou deformaci.

Intenzita puklinové sítě udává, kolik puklin se v daném prostoru resp. rovině nachází. Lze ji definovat buď jako plošnou hustotu či počet puklin v jednotkovém objemu horniny. S intenzitou úzce souvisí i **poloha** resp. **prostorové rozložení** puklin.

Všechny tyto veličiny je možné do určité míry stanovit z experimentálních dat, a to z výchozů, vrtů či tunelů. Proces extrapolace těchto veličin z experimentálních dat je velmi komplikovaný, protože zahrnuje nejen mechanické, ale i hydrologické aspekty a obvykle se provádí ve třech rozdílných rechách.

Z toho důvodu jenom odkážeme na relevantní články publikovaných v rámci *Svensk Kärnbränslehantering AB* (SKB), kde je tato problematika rozebraná podrobněji a obecněji. Patří mezi ně např.: (Oehman a Sven Follin, 2010, kap. 2 a Appendix E, F, H, I), (S. Follin et al., 2006, kap. 2, 3) či případně (Davis, Sampson et al., 2002, kap. 4, 5).

2.2.1 Orientace puklin

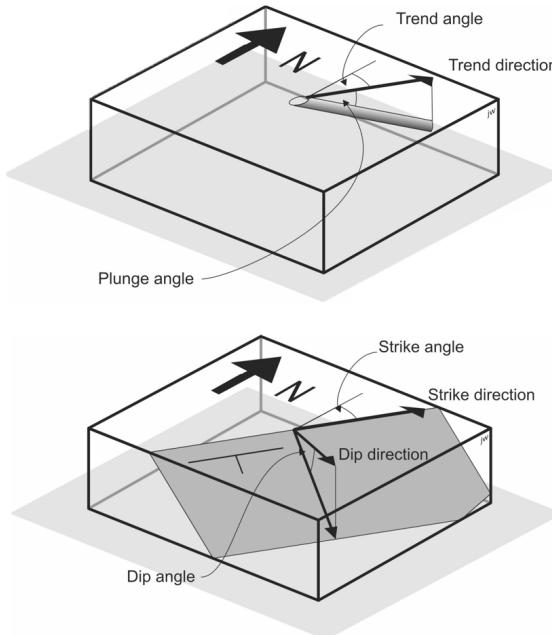
K popisu orientace jednotlivé pukliny ve zkoumaném prostoru lze využít několik geologických parametrů.

Pro popis orientace rovinné pukliny v prostoru se nejčastěji používají úhly *dip*⁴ a *strike*. První z těchto dvou úhlů se značí ϕ_d a vyjadřuje nejstrmější úhel klesání roviny pukliny. Úhel *strike*, ϕ_s , je úhel svíraný mezi přímkou danou průnikem roviny pukliny s vodorovnou rovinou a severem (Maptek Pty Ltd, 2024).

Pro popis orientace liniové pukliny v prostoru se používají úhly *trend* a *plunge*. Trend, ϕ_t , je úhel svíraný mezi severem a průmětem pukliny do vodorovné roviny. Plunge, ϕ_p , je úhel svíraný mezi puklinou a vodorovnou rovinou. Úhly ϕ_d a ϕ_p jsou definované na intervalu $(0, \frac{\pi}{2})$, úhly ϕ_t a ϕ_s leží v rozmezí $(0, 2\pi)$. Tyto úhly jsou

⁴Pro všechny následující parametry neexistuje jednoznačný český překlad, a proto byly zanechány v anglickém tvaru.

následně využívány jako jeden z několika vstupních parametrů při generování puklinové sítě (viz kap. 3.2.1), kde je navíc nutné rozlišovat mezi úhly ϕ_t pro Fisherovo rozdělení, kde se úhel trend označuje jako ϕ_{tf} , a Von Misesovým rozdělením, kde se úhel trend zavádí jako ϕ_{tv} .



Obrázek 2.1: Vizualizace úhlů a směrů určující orientaci puklin, převzato z (Waldron a Snyder, 2020, str. 21/22)

Na obrázku 2.1 vidíme vizualizaci všech zmíněných parametrů. V horní části obrázku máme zobrazenou liniiovou puklinu a k ní odpovídající úhly trend, plunge, vektor určující směr pukliny (trend direction) a sever. Ve spodní části je rovinná puklina a k ní odpovídající úhly strike, dip, vektory určující směr roviny (strike, dip direction) a sever.

2.2.2 Pravděpodobnostní rozdělení pro orientaci puklin

Jak bylo uvedeno v úvodu kapitoly 2.2, pukliny vykazují náhodný charakter. To znamená, že jednotlivé pukliny jsou sice náhodně orientovány, ale zároveň se předpokládá, že jejich orientace jsou soustředěny kolem určitého směru daného jednotkovým vektorem \mathbf{a} .

Pro pravděpodobnostní popis orientace v p -rozměrném prostoru se obecně využívá *Von Mises-Fisherova* rozdělení (podrobnosti viz (Figueiredo, 2009, kap. 2)). Následující dvě podkapitoly jsou tedy jenom konkrétním případem tohoto zobecněného rozdělení, a to v třírozměrném a dvourozměrném prostoru.

Fisherovo rozdělení ve 3D

Pro popis orientace ve 3D se používá jednorozměrné Fisherovo rozdělení, jehož hustota pravděpodobnosti je definována následovně:

$$f_3(\mathbf{n} \mid \mathbf{a}, \kappa_f) = \frac{\kappa_f e^{\kappa_f(\mathbf{n} \cdot \mathbf{a})}}{2\pi(e^{\kappa_f} - e^{-\kappa_f})}, \quad (2.16)$$

kde \mathbf{n} je normálový jednotkový vektor náhodné pukliny, \mathbf{a} je jednotkový střední normálový vektor puklin a $\kappa_f > 0$ je parametr tzv. *Fisherovy koncentrace* určující rozptyl puklin, o jehož fyzikální interpretaci se rozepíšeme podrobněji později. Označíme-li $\theta \in [0, \pi]$ úhel mezi vektory \mathbf{n} a \mathbf{a} , pak pro distribuční funkci Fisherova rozdělení platí:

$$\int_S f_3(\mathbf{n} \mid \mathbf{a}, \kappa_f) d\mathbf{n} = \int_0^\pi f(\theta) d\theta, \quad (2.17)$$

kde S je jednotková sféra a pro $f(\theta)$ platí:

$$f(\theta) = \frac{\kappa_f e^{\kappa_f \cos \theta} \sin \theta}{e^{\kappa_f} - e^{-\kappa_f}}. \quad (2.18)$$

Pokud zintegrujeme $f(\theta)$ dostaneme novou distribuční funkci $F(\theta)$:

$$F(\theta) = \int_0^\theta f(\vartheta) d\vartheta = \frac{e^{\kappa_f} - e^{\kappa_f \cos \theta}}{e^{\kappa_f} - e^{-\kappa_f}}. \quad (2.19)$$

Ted je možné z rovnice (2.19) analyticky vyjádřit θ :

$$\theta = \cos^{-1} \left\{ \frac{1}{\kappa_f} \ln \left(e^{\kappa_f} - F(\theta) (e^{\kappa_f} - e^{-\kappa_f}) \right) \right\}. \quad (2.20)$$

Rovnice (2.20) umožňuje generovat náhodné orientace θ z rovnoměrného rozdělení hodnot distribuční funkce F . Pro limitní případ $\kappa_f \rightarrow 0$ dostáváme *rovnoměrné* rozdělení tzn. normály, a tím pádem pukliny, mohou mít libovolný směr. V tomto případě je θ určené takto:

$$\theta = \cos^{-1}(1 - 2F), \quad (2.21)$$

zatímco pro limitu $\kappa_f \rightarrow \infty$ nemáme žádný rozptyl mezi puklinami. Jinými slovy všechny normály jsou přesně ve směru definovaném podle \mathbf{a} a jsou tedy navzájem rovnoběžné. Co se týče rozdělení, případ $\kappa_f \rightarrow \infty$ odpovídá *Diracovu delta* rozdělení⁵.

⁵Nebudeme zde podrobněji rozebírat, pro více informací viz (Hur, 2009).

Von Misesovo rozdělení ve 2D

Von Misesovo rozdělení lze použít pro úhel natočení pukliny kolem normály nebo orientaci puklin ve 2D. Jeho hustota pravděpodobnosti je dána vztahem:

$$f_2(\mathbf{n} \mid \mathbf{a}, \kappa_v) = \frac{e^{\kappa_v(\mathbf{n} \cdot \mathbf{a})}}{2\pi I_0(\kappa_v)}, \quad (2.22)$$

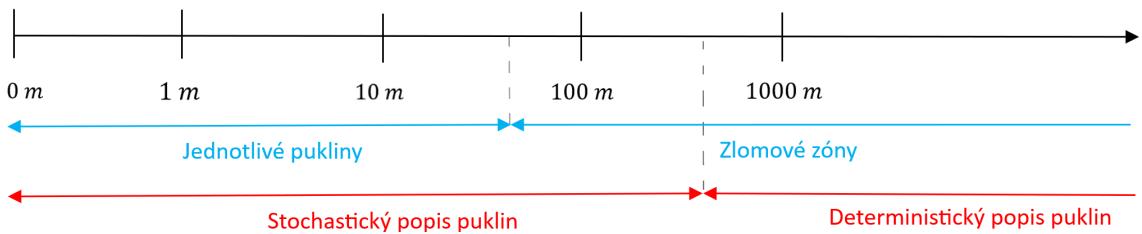
kde

$$I_0(\kappa_v) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi e^{\kappa_v \cos \theta} d\theta. \quad (2.23)$$

Pro rostoucí κ_v se Von Misesovo rozdělení přibližuje *normálnímu*⁶ rozdělení se střední hodnotou \mathbf{a} a rozptylem $\frac{1}{\kappa_v}$.

2.2.3 Velikost přirozených puklin

V geologii lze velikost puklin zkoumat v různých měřítkách - od centimetrů až po několik metrů na povrchu výchozů, případně i ve větších strukturách, jako jsou tzv. *zlomové zóny*. Zlomové zóny představují protáhlé shluky puklin, které dosahují rozměrů od stovek metrů až po několik kilometrů (S. Follin et al., 2006, kap. 2.1).



Obrázek 2.2: Znázornění vztahu mezi zlomovými zónami (deterministický popis) a puklinovou sítí (stochastický popis), inspirace (S. Follin et al., 2006, obr. 2.1).

S tímto souvisí i stěžejní parametr, který charakterizuje rozložení velikosti puklin, a to tzv. **exponent škálování velikosti puklin** $k_r > 2$.

Tento parametr popisuje pravděpodobnostní rozložení velikostí puklin v dané oblasti. Hustota pravděpodobnosti pro velikost (průměr) puklin r je obvykle popisována pomocí zkráceného mocninného zákona:

$$g(r) = \frac{1}{g_0} r^{-(k_r+1)}, \quad (2.24)$$

kde normalizační konstanta

$$g_0 = \int_{r_0}^{r_\infty} r^{-(k_r+1)} dr = \frac{r_0^{-k_r} - r_\infty^{-k_r}}{k_r} \quad (2.25)$$

⁶Nazývá se také Gaussovo rozdělení.

je zvolena s ohledem na rozsah velikostí přirozených puklin $[r_0, r_\infty]$. Distribuční funkce $G(r)$ je dána vztahem:

$$G(r) = \int_{r_0}^r g(\mu) d\mu = \frac{k_r}{r_0^{-k_r} - r_\infty^{-k_r}} \int_{r_0}^r \mu^{-(k_r+1)} d\mu = \frac{r_0^{-k_r} - r^{-k_r}}{r_0^{-k_r} - r_\infty^{-k_r}}, \quad (2.26)$$

jehož inverzí dostaneme vyjádření pro r :

$$r = \left\{ r_0^{-k_r} - G(r)(r_0^{-k_r} - r_\infty^{-k_r}) \right\}^{-\frac{1}{k_r}}. \quad (2.27)$$

2.2.4 Intenzita a prostorové rozložení přirozených puklin

Faktorem, který má největší vliv na množství, resp. intenzitu vytvořených puklin v daném intervalu, je počet velkých puklin v objemu horniny. Nicméně celkový počet puklin je výsledek složité souhry různých parametrů popisujících pukliny. Pro danou intenzitu může model obsahovat buď málo velkých zlomů, nebo velké množství mnohem menších puklin (S. Follin et al., 2006, kap. 3.1).

Pro popis intenzity puklin se zavádí označení pomocí dvou čísel v indexu příslušné veličiny, která vyjadřuje příslušné dimenze intenzity. Například $P_{32}[r_0, r_\infty]$ označuje celkovou plochu puklin vztaženou na zkoumaný objem. Jednotkou $P_{32}[r_0, r_\infty]$ je $\left[\frac{m^2}{m^3}\right]$. Obdobně lze definovat i $P_{30}[r_0, r_\infty]$ s jednotkou $\left[\frac{1}{m^3}\right]$:

$$P_{30}[r_0, r_\infty] = \frac{N}{V}, \quad (2.28)$$

kde $N \in \mathbb{N}$ je celkový počet puklin a $V > 0$ je zkoumaný objem. Rovnici (2.28) lze ekvivalentně zapsat i následovně (Munier, 2007, kap. 3.1):

$$P_{30}[r_0, r_\infty] = \frac{P_{32}[r_0, r_\infty]}{I}, \quad I = \int_{r_0}^{r_\infty} \pi r^2 g(r) dr, \quad (2.29)$$

přičemž:

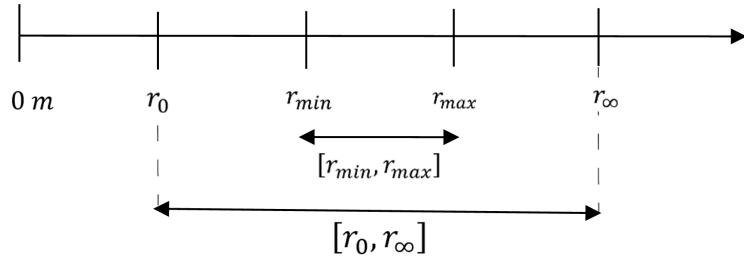
$$I = \frac{\pi k_r}{r_0^{-k_r} - r_\infty^{-k_r}} \int_{r_0}^{r_\infty} r^{1-k_r} dr = \frac{\pi k_r (r_0^{2-k_r} - r_\infty^{2-k_r})}{(r_0^{-k_r} - r_\infty^{-k_r})(k_r - 2)}. \quad (2.30)$$

Rovnice (2.30) je definována pro $k_r > 2$.

2.2.5 Velikost a intenzita uměle generovaných puklin

Přesná geometrie přirozené puklinové sítě není obvykle známá. Pro výpočetní účely se používá uměle generovaná síť puklin, která má stejnou pravděpodobnostní charakterizaci jako síť přirozená.

Aby byl počet vygenerovaných puklin reprezentativní a zároveň přiměřený, je nutné omezit rozsah jejich velikostí na menší interval $[r_{\min}, r_{\max}] \subseteq [r_0, r_\infty]$, viz obr. 2.3. Pro intenzitu puklin na tomto podintervalu platí:



Obrázek 2.3: Vizualizace intervalů používaných pro generování umělé puklinové sítě

$$P_{30}[r_{\min}, r_{\max}] = P_{30}[r_0, r_\infty] \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} g(r) dr. \quad (2.31)$$

Pokud do vztahu (2.31) dosadíme předešlé závislosti, tj. (2.30), (2.29), a určíme hodnotu integrálu, tak dostáváme finální tvar pro $P_{30}[r_{\min}, r_{\max}]$:

$$P_{30}[r_{\min}, r_{\max}] = \frac{P_{32}[r_0, r_\infty] (k_r - 2) (r_{\min}^{-k_r} - r_{\max}^{-k_r})}{\pi k_r (r_0^{2-k_r} - r_\infty^{2-k_r})}. \quad (2.32)$$

Pro $k_r = 3$ je pravděpodobnostní model puklin *soběpodobný*, tj. pravděpodobnostní distribuce příslušných veličin jsou nezávislé na měřítku (velikosti oblasti).

2.3 Matematický model mechaniky hornin

V předchozí podkapitole jsme se věnovali matematickému popisu samostatné pukliny či puklin. Jinými slovy jsme se vůbec nezabývali tím, jak matematicky popsat interakci puklinové sítě se svým okolím a se sebou, což je nepochybně velmi důležité pro pochopení námi používaného modelu kombinace diskrétních puklin a matrice. Matematický popis tohoto modelu z hlediska mechaniky je cílem této podkapitoly.

První v této kapitole je obecný úvod, kde se seznámíme s jednotlivými modely hornin s puklinami, jak se navzájem liší a jak souvisí s kontextem této práce. Dále se zaměříme na úvod k matematickému popisu modelu kombinujícího diskrétní puklinovou síť a horninovou matrici a potřebných definic popisujících náš model. Nejprve se budeme věnovat semidiskretizaci diferenciálních operátorů a různých veličin. Tyto operátory (a nejen ony) se v závěru použijí k formulaci kontaktních a okrajových podmínek, které jsou pro náš model zcela zásadní. Mezitím se rozepíšeme o obecné mechanice kombinující matrici a diskrétní puklinové sítě.

2.3.1 Obecný úvod k problematice

V současné době existují tři typy přístupů k popisu puklin v modelech založených na kontinuu:

- modely ekvivalentního kontinua,
- modely diskrétních puklinových sítí, značí se DFN - discrete fracture network,
- modely kombinace diskrétních puklin a matrice, značí se DFM - discrete fracture matrix.

První dva zmíněné modely zde sice nebudeme dopodrobna rozebírat⁷, ale aspoň si je velmi krátce představíme, abychom lépe pochopili koncept DFM.

V modelech ekvivalentního kontinua je vliv malých puklin zahrnut do makroskopických vlastností horniny, takže jsou vhodné i pro popis hornin obsahujících mnoho malých puklin. Nicméně v těchto modelech není zachycen velmi vysoký poměr velikosti pukliny vůči její šířce, což vede k zanedbání velkých gradientů rychlosti proudění a posunu, které nelze řešit klasickými metodami diskretizace (jako je metoda konečných objemů, FVM nebo metoda konečných prvků, FEM).

Oproti tomu modely DFN popisují přímo jednotlivé pukliny. Tyto modely jsou vhodné pro detailní popis konkrétních puklin a nemáme zde problém s gradienty, ale na druhou stranu zanedbávají vlastnosti horninové matrice a nejsou schopné efektivně popsat problém s velkým množstvím malých puklin.

Potom existují různé hybridní modely, mezi které patří i modely DFM. Tyto modely popisují fyzikální procesy nejen v horninové matrici, ale také v puklinové síti a jejich vzájemné působení. Obvykle bývají modely DFM spjaté i s prouděním (hydromechanické modely), což je ale mimo rozsah této práce.

V následujících podkapitolách přiblížíme **zjednodušený model DFM** popisující **mechaniku**. Celý hydromechanický model je odvozen a detailně popsán v (Stebel et al., 2024) nebo (Březina a Stebel, 2024).

2.3.2 Semidiskretizace

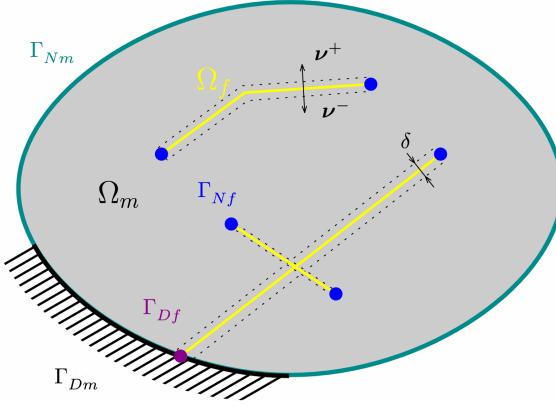
Nechť Ω je souvislá otevřená množina (oblast) v \mathbb{R}^2 s Lipschitzovskou⁸ hranicí $\partial\Omega$. Dále předpokládejme, že Ω je složena ze dvou podoblastí:

První podoblast, Ω_m , je **matrice**, jejíž hranice $\partial\Omega_m$ je složena ze dvou disjunktivních částí, tj. $\partial\Omega_m = \Gamma_{Nm} \cup \Gamma_{Dm}$, kde $\Gamma_{Nm} \cap \Gamma_{Dm} = \emptyset$. Druhá podoblast, Ω_f , značí **diskrétní puklinovou síť** a pro její hranici platí $\partial\Omega_f = \Gamma_{Nf} \cup \Gamma_{Df}$, přičemž $\Gamma_{Nf} \cap \Gamma_{Df} = \emptyset$. Předpokládáme, že Ω_f je sjednocením úseček, jejichž tečné a normálové vektory budeme značit $\boldsymbol{\tau}$, resp. $\boldsymbol{\nu}$. Šířku pukliny, kterou daná úsečka reprezentuje, budeme značit symbolom δ .

V Ω_f zavedeme tzv. **semidiskrétní operátory**, které se budou **značit s pruhem**. Slovně by se daly do určité míry semidiskretizované operátory a veličiny popsat jako určité *approximace* plnohodnotných verzí těchto operátorů a veličin.

⁷Pro více podrobností a kontextu viz (Berre et al., 2019)

⁸Definice Lipschitzovské hranice viz (Nečas, 2011, kap. 1.1.3).



Obrázek 2.4: Vizualizace mechaniky DFM, inspirace (Stebel et al., 2024, obr. 1)

Obecně lze vztah pro semidiskrétní gradient skalárního (např. pole tlaku $p = (p_m, p_f)$, kde p_m, p_f značí tlak v matrici resp. v puklinách) a vektorového pole (např. pole posunutí $\mathbf{u} = (\mathbf{u}_m, \mathbf{u}_f)$) definovat takto⁹:

$$\begin{aligned}\nabla p &\approx \bar{\nabla} p = \nabla_{\tau} p_f + \nabla_{\nu} p, \\ \nabla \mathbf{u} &\approx \bar{\nabla} \mathbf{u} = \nabla_{\tau} \mathbf{u}_f + \nabla_{\nu} \mathbf{u},\end{aligned}\quad (2.33)$$

kde $\nabla_{\tau}, \nabla_{\nu}$ značí tečný resp. normálový gradient. Dále definujeme semidiskrétní divergenci pro vektorové pole:

$$\operatorname{div} \mathbf{u} \approx \bar{\operatorname{div}} \mathbf{u} = \operatorname{div}_{\tau} \mathbf{u}_f + \operatorname{div}_{\nu} \mathbf{u}, \quad (2.34)$$

kde $\operatorname{div}_{\tau}, \operatorname{div}_{\nu}$ je tečná resp. normálová divergence. A na závěr definujme i semidiscretizaci tenzoru malých deformací, který byl popsán v (2.9):

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \left(\bar{\nabla} \mathbf{u} + (\bar{\nabla} \mathbf{u})^T \right). \quad (2.35)$$

Diferenciální operátory v normálovém směru vyjádřené v rovnicích (2.33) a (2.34) lze popsát pomocí *operátoru průměrování* $\{\{\cdot\}\}$, který je definován jako:

$$\nabla_{\nu} p = \{\{p_{\nu}\}\} = \frac{\Delta^+ p_{\nu}^+ + \Delta^- p_{\nu}^-}{2}, \quad (2.36)$$

kde $\Delta^{\pm} p = \frac{2}{\delta} (p_m^{\pm} - p_f)$ a $\boldsymbol{\nu}^+ = \boldsymbol{\nu}$ je opačný vektor k $\boldsymbol{\nu}^-$. Jinými slovy lze normálový gradient skalárního pole interpretovat jako zprůměrovaný součin hodnoty tohoto pole a $\boldsymbol{\nu}$. Analogicky pro vektorové pole \mathbf{u} platí:

$$\begin{aligned}\nabla_{\nu} \mathbf{u} &= \{\{\Delta \mathbf{u} \otimes \boldsymbol{\nu}\}\} = \frac{\Delta^+ \mathbf{u} \otimes \boldsymbol{\nu}^+ + \Delta^- \mathbf{u} \otimes \boldsymbol{\nu}^-}{2}, \\ \operatorname{div}_{\nu} \mathbf{u} &= \{\{\Delta \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\nu}\}\} = \frac{\Delta^+ \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\nu}^+ + \Delta^- \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\nu}^-}{2},\end{aligned}\quad (2.37)$$

⁹Správněji bychom měli psát u veličin závislost na prostoru resp. na \mathbf{x} , ale kvůli úspoře místa to necháme takto.

kde $\Delta^\pm \mathbf{u} = \frac{2}{\delta} (\mathbf{u}_m^\pm - \mathbf{u}_f)$. Všechny tyto semidiskrétní operátory můžeme definovat i pro dílčí hranice pukliny, např. $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^\pm(\mathbf{u})$, $\bar{\operatorname{div}}^\pm \mathbf{u}$. V podstatě se jedná o to samé, ale v rovnicích (2.36) a (2.37) se místo operátoru průměrování použije přímo příslušný součin hodnoty daného pole a $\boldsymbol{\nu}$ na dané hranici pukliny. Pro názornost si ukážeme jeden příklad, a to $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^\pm(\mathbf{u})$:

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^\pm(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \left(\bar{\nabla}^\pm \mathbf{u} + (\bar{\nabla}^\pm \mathbf{u})^T \right), \quad (2.38)$$

kde $\bar{\nabla}^\pm \mathbf{u} = \nabla_\tau \mathbf{u}_f + \Delta^\pm \mathbf{u} \otimes \boldsymbol{\nu}^\pm$.

2.3.3 Popis modelu mechaniky DFM

Bilanci sil v modelu DFM lze popsat následovně (Stebel et al., 2024, rovnice (2.6), (2.8), (2.10), (2.12)):

$$\left. \begin{aligned} -\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_m &= \mathbf{f}_m \\ \boldsymbol{\sigma}_m &= \mathbf{C}_m \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_m) \end{aligned} \right\} \text{v } \Omega_m, \quad \left. \begin{aligned} -\bar{\operatorname{div}}(\delta \boldsymbol{\sigma}_f) &= \delta \mathbf{f}_f \\ \boldsymbol{\sigma}_f &= \mathbf{C}_f \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{u}) \end{aligned} \right\} \text{v } \Omega_f, \quad (2.39)$$

kde $\boldsymbol{\sigma}_*$ je tenzor napětí, \mathbf{f}_* je vnější působící (zátěžová) síla, $\boldsymbol{\varepsilon}$ je tenzor malých deformací, \mathbf{C}_* je Hookův elastický tenzor, $\delta > 0$ je počáteční rozvření pukliny před deformací a $* \in \{m, f\}$. První rovnici v Ω_* lze vnímat jako bilanci sil v Ω_* , viz (2.12). Druhá rovnice je tzv. **zobecněný Hookův zákon**.

Vzhledem k tomu, že $\boldsymbol{\sigma}_*$, $\boldsymbol{\varepsilon}$ i \mathbf{C}_* jsou symetrické tenzory, je možné je reprezentovat ve Voigtově notaci (2.15). Pro tenzor malých deformací $\boldsymbol{\varepsilon}$ se však zavádí drobná korekce:

$$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \gamma_{12} \end{bmatrix}, \quad (2.40)$$

kde $\gamma_{12} = 2\varepsilon_{12}$. Díky tomu je pak zachován skalární součin $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_* \cdot \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} = \boldsymbol{\sigma}_* : \boldsymbol{\varepsilon}$, což je veličina důležitá pro vyjádření mechanické energie. Ve Voigtově notaci přejde zobecněný Hookův zákon v rovnici (2.39) na tvar:

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_m = \tilde{\mathbf{C}}_m \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{u}_m) \quad \text{resp.} \quad \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_f = \tilde{\mathbf{C}}_f \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{u}), \quad (2.41)$$

kde

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_* = \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{C}}_* = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1112} \\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2212} \\ C_{1211} & C_{1222} & C_{1212} \end{bmatrix}, \quad (2.42)$$

což je zobecněný Hookův zákon ve Voigtově notaci na podoblastech Ω_* .

2.3.4 Kontaktní podmínky

Přenos sil mezi horninovou matricí a puklinou vyjadřuje tzv. kontaktní podmínky. Pro jejich vyjádření nejprve definujeme **kontaktní sílu** působící na každou hranici pukliny:

$$\boldsymbol{\Lambda}^\pm = (\mathbf{C}_f^\pm \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^\pm(\mathbf{u}) - \mathbf{C}_m \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}_m^\pm)) \boldsymbol{\nu}^\pm. \quad (2.43)$$

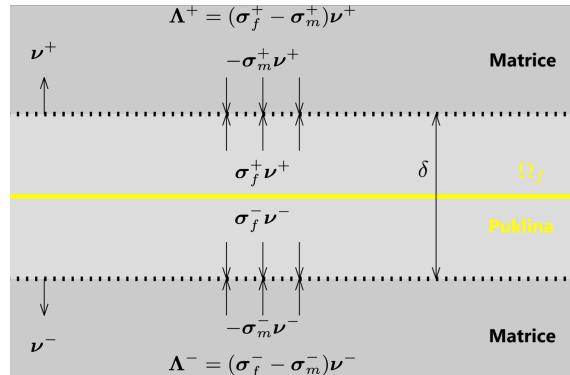
Kontaktní sílu působící v tečném směru pukliny budeme značit Λ_τ . Poslední, co potřebujeme zde definovat, je veličina související s šířkou, která má následující tvar¹⁰:

$$a_f(\mathbf{u}) = \delta + \mathbf{u}_m^+ \cdot \boldsymbol{\nu}^+ + \mathbf{u}_m^- \cdot \boldsymbol{\nu}^- . \quad (2.44)$$

Fyzikálně veličina $a_f(\mathbf{u})$ představuje šířku resp. rozevření pukliny v závislosti na poli posunu v okolí pukliny. Hodnota $a_f(\mathbf{u})$ je vždy kladná, což odpovídá tzv. *otevřené puklině*. Jakmile na puklinu začne působit síla, resp. posun, pukлина se začne zavírat. Kvůli drsnosti povrchu pukliny a dalším vlivům $a_f(\mathbf{u})$ nemůže klesnout pod určitou nezápornou minimální hodnotu, kterou označujeme jako δ_{\min} . Tato minimální hodnota zajistuje, že puklinu nemůže pod vlivem působících sil skrz sebe sama proniknout. Tento koncept je součástí jedné ze tří kontaktních podmínek mechaniky DFM. Další z kontaktních podmínek je bilance kontaktních sil, tj. Λ^\pm musí být navzájem opačné. Poslední z těchto podmínek souvisí s tím, že zanedbáváme tření v tečném směru kontaktních sil na každé hranici pukliny a mezi matricí. Ve výsledku tedy dostáváme **kompletní kontaktní podmínky** (Stebel et al., 2024, rovnice (2.16) až (2.18)):

$$\begin{aligned} a_f(\mathbf{u}) &\geq \delta_{\min} && \text{(nepronikání).} \\ \Lambda^+ &= -\Lambda^- && \text{(bilance kontaktních sil),} \\ \Lambda_\tau^\pm &= \mathbf{0} && \text{(bez tření).} \end{aligned} \quad (2.45)$$

Pro lepší vizualizaci kontaktní mechaniky je vhodný následující obrázek 2.5:



Obrázek 2.5: Vizualizace kontaktní mechaniky, inspirace (Stebel et al., 2024, obr. 2)

2.3.5 Okrajové podmínky

Pro úplný popis vektorových polí posunutí \mathbf{u} a napětí $\boldsymbol{\sigma}$ v celé oblasti Ω je nutné stanovit také **okrajové podmínky**:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_* &= \mathbf{u}_{D*} && \text{na } \Gamma_{N*}, \\ \boldsymbol{\sigma}_* \mathbf{n} &= \mathbf{t}_{N*} && \text{na } \Gamma_{D*}, \end{aligned} \quad (2.46)$$

kde \mathbf{n} je jednotkový vnější normálový vektor, \mathbf{u}_D je zadané vektorové pole posunutí a \mathbf{t}_N je zadaná povrchová síla.

¹⁰Značení převzaté z anglického termínu *aperture*.

2.4 Numerická homogenizace

Numerická homogenizace je klíčovým nástrojem pro efektivní modelování heterogenních materiálů, zejména kompozitů a porézních struktur. Mezi hlavní metody patří metoda **reprezentativního elementárního objemu** (REV), také označovaná jako *upscaleing*, která spočívá ve výpočtu efektivních materiálových vlastností na základě periodického nebo náhodného vzorku mikrostruktury (Hill, 1963). Často se při tom využívá FEM pro řešení pomocných úloh na mikroúrovni. Komplexnější provázanost mikro a makroskopických jevů umožňuje **víceúrovňová homogenizace** (*multiscale homogenization*), v níž jsou simultánně řešeny problémy na několika škálách (Kouznetsova et al., 2001). Další přístup představuje vícerozměrná **asymptotická homogenizace**, která využívá rozvoj neznámých veličin podle malého parametru charakterizujícího poměr měřítek (Bensoussan et al., 2011). V poslední době se rozvíjí také numerické metody založené na **rychlé Fourierově transformaci** (FFT), které umožňují efektivní výpočty na pravidelných mřížkách a jsou vhodné pro materiály s komplexní mikrostrukturou (Moulinec a Suquet, 1998). V této práci je použita metoda reprezentativního elementárního objemu pro výpočet efektivního elastického tenzoru krystalické horniny.

Cílem homogenizace je nalézt ekvivalentní parametry nezávislé na \mathbf{x} , které budou zohledňovat heterogenitu původních veličin. Konkrétně chceme nahradit elastický tenzor $\tilde{\mathbf{C}}_m(\mathbf{x})$ konstantním tenzorem $\tilde{\mathbf{C}}^*$.

2.4.1 Definice homogenizace a efektivního elastického tenzoru

Homogenizace se provede s využitím operace průměrování $\langle \cdot \rangle$, definované jako:

$$\langle \cdot \rangle = \frac{1}{|\Omega_m|} \int_{\Omega_m} \cdot d\Omega_m. \quad (2.47)$$

Tato operace zanedbává chování příslušné veličiny v Ω_f , neboť tuhost i napětí je v puklinách typicky o několik rádů menší než v horninové matrici. Pokud aplikujeme tento operátor na rovnici (2.41), dostáváme:

$$\langle \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \rangle = \frac{1}{|\Omega_m|} \int_{\Omega_m} \tilde{\mathbf{C}}_m(\mathbf{x}) \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{u}_m(\mathbf{x})) d\Omega_m. \quad (2.48)$$

Naším cílem je nahradit tenzor $\tilde{\mathbf{C}}_m(\mathbf{x})$ tenzorem $\tilde{\mathbf{C}}^*$ takovým, že je nezávislý na \mathbf{x} a splňuje následující požadavek:

$$\frac{1}{|\Omega_m|} \int_{\Omega_m} \tilde{\mathbf{C}}_m(\mathbf{x}) \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{u}_m(\mathbf{x})) d\Omega_m = \tilde{\mathbf{C}}^* \frac{1}{|\Omega_m|} \int_{\Omega_m} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{u}_m(\mathbf{x})) d\Omega_m$$

resp.

$$\langle \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \rangle = \langle \tilde{\mathbf{C}}_m \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle = \tilde{\mathbf{C}}^* \langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle. \quad (2.49)$$

Homogenizaci rovnice (2.41) lze tedy symbolicky zapsat následujícím způsobem:

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_m = \tilde{\mathbf{C}}_m \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \xrightarrow{\text{homogenizace}} \langle \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \rangle = \tilde{\mathbf{C}}^* \langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle. \quad (2.50)$$

2.4.2 Okrajové podmínky problému a matice zatížení

Vzhledem k tomu, že $\tilde{\mathbf{C}}^* \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ a $\langle \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \rangle, \langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle \in \mathbb{R}^3$, vztah (2.50) představuje soustavu 3 rovnic o 9 neznámých, což není dostatečné množství rovnic pro nalezení $\tilde{\mathbf{C}}^*$.

Pro kompletní určení všech prvků tenzoru $\tilde{\mathbf{C}}^*$ je nutné provést určitý počet **lineárně nezávislých** zatížení prostřednictvím **okrajové podmínky** definované takto:

$$\mathbf{u}_D = \mathbf{E}\mathbf{x}, \quad (2.51)$$

kde \mathbf{u}_D je vektorové pole posunutí, $\mathbf{E} = \begin{bmatrix} E_{11} & E_{12} \\ E_{21} & E_{22} \end{bmatrix}$ značí symetrickou **obecnou matici zatížení** a $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$.

Dosazením těchto okrajových podmínek do modelu mechaniky (2.39), (2.46) získáme pole posunutí \mathbf{u} a pole napětí $\boldsymbol{\sigma}$ v celé oblasti Ω .

Výsledkem průměrování jsou pak 3 různé zprůměrované složky napětí. Takto získáme 3 rovnice pro prvky $\tilde{\mathbf{C}}^*$. Pro určení celého tenzoru $\tilde{\mathbf{C}}^*$ je nutné mít 3 různé případy, abychom měli 9 rovnic pro 9 neznámých. Abychom mohli obecnou matici zatížení aplikovat na rovnici (2.49), je nejprve nutné definovat vztah mezi $\tilde{\mathbf{E}}$ (obecná matice zatížení ve Voigtově notaci) a $\langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle$. Tato rovnost je výsledkem "The Average Strain Theorem", což je popsáno detailně v (Zohdi a Wriggers, 2005, kap. 4.1.1):

$$\tilde{\mathbf{E}} = \langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle \iff \begin{bmatrix} E_{11} \\ E_{22} \\ 2E_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \varepsilon_{11} \rangle \\ \langle \varepsilon_{22} \rangle \\ \langle \gamma_{12} \rangle \end{bmatrix}. \quad (2.52)$$

Nyní si ukážeme postup určení efektivního elastického tenzoru $\tilde{\mathbf{C}}^*$.

2.4.3 Efektivní elastický tenzor pro obecné matice zatížení

Aplikací tří různých matic zatížení získáme z rovnice (2.49) podmínky:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \rangle^1 &= \tilde{\mathbf{C}}^* \langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle^1, \\ \langle \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \rangle^2 &= \tilde{\mathbf{C}}^* \langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle^2, \\ \langle \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \rangle^3 &= \tilde{\mathbf{C}}^* \langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle^3, \end{aligned} \quad (2.53)$$

kde $\langle \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \rangle^i$ a $\langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle^i, i = 1, 2, 3$, představují získané zprůměrované tenzory pro jednotlivé případy. Soustavu rovnic (2.53) lze rozepsat do maticového tvaru:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & & \\ & \mathbf{K} & \\ & & \mathbf{K} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_1 \\ s_2 \\ s_3 \end{bmatrix}, \quad (2.54)$$

kde \mathbf{K} , \mathbf{c}_1 , \mathbf{c}_2 , \mathbf{c}_3 , \mathbf{s}_1 , \mathbf{s}_2 a \mathbf{s}_3 jsou definované následovně:

$$\begin{aligned}\mathbf{K} &= \begin{bmatrix} E_{11}^1 & E_{22}^1 & 2E_{12}^1 \\ E_{11}^2 & E_{22}^2 & 2E_{12}^2 \\ E_{11}^3 & E_{22}^3 & 2E_{12}^3 \end{bmatrix}, \\ \mathbf{c}_1 &= \begin{bmatrix} C_{1111}^* \\ C_{1122}^* \\ C_{1112}^* \end{bmatrix}, \quad \mathbf{c}_2 = \begin{bmatrix} C_{2211}^* \\ C_{2222}^* \\ C_{2212}^* \end{bmatrix}, \quad \mathbf{c}_3 = \begin{bmatrix} C_{1211}^* \\ C_{1222}^* \\ C_{1212}^* \end{bmatrix}, \\ \mathbf{s}_1 &= \begin{bmatrix} \langle \sigma_{11} \rangle^1 \\ \langle \sigma_{11} \rangle^2 \\ \langle \sigma_{11} \rangle^3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{s}_2 = \begin{bmatrix} \langle \sigma_{22} \rangle^1 \\ \langle \sigma_{22} \rangle^2 \\ \langle \sigma_{22} \rangle^3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{s}_3 = \begin{bmatrix} \langle \sigma_{12} \rangle^1 \\ \langle \sigma_{12} \rangle^2 \\ \langle \sigma_{12} \rangle^3 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (2.55)$$

Naším cílem je vyjádřit \mathbf{c}_1 , \mathbf{c}_2 a \mathbf{c}_3 z každé příslušné rovnice, čímž získáme prvky efektivního elastického tenzoru $\tilde{\mathbf{C}}^*$. Tuto soustavu rovnic je možné řešit analyticky nebo numericky.

2.4.4 Efektivní elastický tenzor pro konkrétní matice zatížení

Konkrétní volbou matic \mathbf{E}_1 , \mathbf{E}_2 , \mathbf{E}_3 lze získat prvky tenzoru $\tilde{\mathbf{C}}^*$ explicitně. Dále budeme uvažovat následující tři lineárně nezávislé matice zatížení:

$$\mathbf{E}_1 = \begin{bmatrix} \beta & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{E}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \beta \end{bmatrix}, \quad \mathbf{E}_3 = \begin{bmatrix} 0 & \beta \\ \beta & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.56)$$

kde $\beta \neq 0$ je zátěžový parametr, který odpovídá poměrné velikosti zatížení resp. posunutí.

Tyto matice zatížení lze ekvivalentně vyjádřit pomocí Voigtovy notace (2.15):

$$\tilde{\mathbf{E}}_1 = \begin{bmatrix} \beta \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{E}}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ \beta \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{E}}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 2\beta \end{bmatrix}. \quad (2.57)$$

Dosazením (2.57) do vztahů (2.52), (2.55), dostaneme:

$$\begin{aligned}C_{1111}^* &= \frac{\langle \sigma_{11} \rangle^1}{\beta}, & C_{1122}^* &= \frac{\langle \sigma_{11} \rangle^2}{\beta}, & C_{1112}^* &= \frac{\langle \sigma_{11} \rangle^3}{2\beta}, \\ C_{2211}^* &= \frac{\langle \sigma_{22} \rangle^1}{\beta}, & C_{2222}^* &= \frac{\langle \sigma_{22} \rangle^2}{\beta}, & C_{2212}^* &= \frac{\langle \sigma_{22} \rangle^3}{2\beta}, \\ C_{1211}^* &= \frac{\langle \sigma_{12} \rangle^1}{\beta}, & C_{1222}^* &= \frac{\langle \sigma_{12} \rangle^2}{\beta}, & C_{1212}^* &= \frac{\langle \sigma_{12} \rangle^3}{2\beta}. \end{aligned} \quad (2.58)$$

2.4.5 Okrajové podmínky pro konkrétní matice zatížení

Pokud použijeme matice zatížení definované v (2.56), získáme z (2.51) pro příslušné okrajové podmínky, následující vztahy:

$$\mathbf{u}_{D1} = \mathbf{E}_1 \mathbf{x} \iff \mathbf{u}_{D1} = \begin{bmatrix} \beta & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta x_1 \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{u}_{D2} = \mathbf{E}_2 \mathbf{x} \iff \mathbf{u}_{D2} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \beta x_2 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{u}_{D3} = \mathbf{E}_3 \mathbf{x} \iff \mathbf{u}_{D3} = \begin{bmatrix} 0 & \beta \\ \beta & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta x_2 \\ \beta x_1 \end{bmatrix}.$$

Pokud je β kladné, jedná se o tah, zatímco záporná hodnota odpovídá stlačení. Výsledná pole posunutí \mathbf{u}_{D1} , \mathbf{u}_{D2} a \mathbf{u}_{D3} fyzikálně reprezentují relativní posuny způsobené zatížením o velikosti β ve vodorovném, svislém a diagonálním (smykovém) směru.

3 Popis výpočetního programu

Cílem této kapitoly je popsat postupy použité při řešení homogenizační úlohy mechaniky, a to včetně způsobu jejich implementace do výpočetního programu. **Hlavní úlohovou** implementovaného výpočetního nástroje **je v tomto pořadí:**

1. Generování puklinové a výpočetní sítě,
2. Simulace mechaniky,
3. Výpočet efektivního elastického tenzoru.

Těmito třemi hlavními částmi se zabývají podkapitoly 3.3, 3.4 a 3.5. Předcházejí jim dvě úvodní podkapitoly: 3.1, která se věnuje instalaci a obecným předpokladům, a 3.2, kde jsou popsány požadované vstupní parametry. V závěrečné podkapitole 3.6 je na konkrétním příkladu předvedeno použití programu v praxi a vizualizace získaných výsledků.

3.1 Úvod k programu, instalace a předpoklady

Pro použití implementovaného programu k numerické homogenizaci v mechanice hornin je zapotřebí nejprve nainstalovat či stáhnout několik SW:

- BGEM - balíček na vytváření a síťování geometrie (BGEM, [2025](#))
- Flow123d - výpočetní simulátor (Flow123d, [2025](#))
- GitHub repozitář - repozitář s kompletním kódem (Siddall, [2025](#))

Dále zde nebude uvedeno, jak se s zmíněnými programy pracuje resp. jak je používat. Případné návody jsou k dohledání v jejich dokumentaci. Každému z hlavních kroků uvedených v úvodu kapitoly 3 odpovídá jeden z **hlavních skriptů**:

- `create_mesh.py` - generuje puklinovou a výpočetní síť (kap. 3.3),
- `create_yaml.py` - vytváří model mechaniky (kap. 3.4),
- `create_tensor.py` - počítá efektivní elastický tenzor (kap. 3.5).

Každý z těchto skriptů generuje specifické výstupní soubory: `.msh` (výpočetní síť), `.yaml` (vstup do simulátoru) a `.txt` (efektivní elastický tenzor). Všechny zmiňované tři kroky resp. skripty jsou podrobně rozebrány ve zmíněných podkapitolách.

3.2 Vstup a konfigurační soubor

Vstupní konfigurační soubor programu, `config_file.yaml`, je rozdělen do tří částí, přičemž každá odpovídá vstupním parametrům jedné z hlavních skriptů: `create_mesh.py` (kap. 3.2.1), `create_yaml.py` (kap. 3.2.2) a `create_tensor.py`. Zmíněné kapitoly 3.2.2 a kap. 3.2.1 se zaměřují výhradně na klíčové parametry, které **přímo ovlivňují** výpočty. Volitelná a uživatelská nastavení, jako jsou adresáře, názvy souborů či zobrazování výsledků, zde nejsou zahrnuta.

3.2.1 Vstup pro generování umělých puklin a výpočetní sítě

Většinu parametrů potřebných pro generování umělých puklin jsme podrobně probrali v teoretické části této práce, včetně jejich definičního oboru (třetí sloupec tabulky 3.1). V praxi však tyto parametry nabývají hodnot v užších intervalech, vycházejících z experimentálních měření, což, jak bylo popsáno v úvodu kapitoly 2.2, je velmi náročný proces.

Aby nás model DFM co nejvěrněji odpovídal realitě, snažili jsme se využít reálných experimentálně změřených hodnot vstupních parametrů. Tyto reálné hodnoty, resp. intervaly, jsou uvedeny ve čtvrtém sloupci tabulky 3.1 a byly převzaty především z (S. Follin et al., 2006, kap. 3.4), které byly získány v rámci výzkumu prováděného v okolí jaderné elektrárny *Forsmark* na východním pobřeží Švédská.

Název parametru	Značení	Teorie	SKB	Jednotky
Obecné nastavení geometrie a puklinové sítě				
rectangle_dimensions	$\Omega = l \times h$ ¹	$\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+$	—	$m \times m$
sample_range	$[r_{\min}, r_{\max}]$ ²	\mathbb{R}^+	$[0.038, 169]$	m
k_r	k_r	$(2, \infty)$	$[2.55, 3.45]$ ³	—
diam_range	$[r_0, r_\infty]$	\mathbb{R}^+	$[0.038, 169]$	m
p32_r0_to_r_infty	$P_{32}[r_0, r_\infty]$	\mathbb{R}^+	$[0.59, 2.60]$	$\frac{m^2}{m^3}$
Statistické parametry puklinové sítě				
fisher_trend	ϕ_{tf}	$[0, 360]$	$[2.5, 354.2]$	$^\circ$
fisher_plunge	ϕ_p	$[0, 90]$	$[0.1, 85.4]$	$^\circ$
fisher_kappa	κ_f	\mathbb{R}_0^+	$[6.5, 42.9]$	—

Tabulka 3.1: Přehled parametrů pro generování umělých puklin

Kromě těchto parametrů jsou v první části konfiguračního souboru zahrnutý i další kladné parametry, které souvisejí s vygenerovanou výpočetní sítí. Tyto parametry ovlivňují jemnost vytvořených konečných prvků (elementů), určují přesnost a toleranci při numerických výpočtech (např. `fracture_mesh_step`, `tolerance` aj.).

¹V kap. 2.3.3 bylo Ω definované obecně, ale pro výpočty se uvažuje obdélníková oblast daná karteckým součinem: $l \times h$.

²Definováno podrobně v kapitole 2.2.5.

³Rozsah parametru k_r závisí na zvoleném postupu. Tento širší rozsah je získán analýzou konektivity, zatímco při použití tektonického kontinua je interval užší: [2.55, 2.79].

3.2.2 Vstup pro tvorbu souboru na homogenizační úlohu

Používaný výpočetní simulátor Flow123d vyžaduje vstupní data ve formátu `.yaml`, která definují homogenizační úlohu určenou k řešení. Podrobnosti o struktuře a nastavení tohoto souboru jsou uvedeny v (Březina, Stebel et al., 2025, kap. 4). Pro správné vytvoření souboru je však nutné předem specifikovat hodnoty čtyř dodatečných parametrů, které vstupují do homogenizační úlohy:

	Název parametru	Značení
1	<code>displacement_percentage_all_boundary_conditions</code>	β
2	<code>cross_section_multiplier</code>	η
3	<code>young_modul_rock_gpa</code>	Y_m
4	<code>reduction_value_for_fractures</code>	ξ

Tabulka 3.2: Přehled parametrů a jejich zavedené značení pro homogenizační úlohu

První parametr odpovídá přímo hodnotě β uvedené v rovnici (2.56).

Vzhledem k tomu, že počáteční rozevření pukliny před deformací δ ve skutečnosti nezávisí pouze na poli posunutí, ale také na velikosti výpočetní oblasti, je nutné před výpočty aplikovat škálování δ . To je určeno druhým parametrem, η , který obecně vyjadřuje poměr rozevření pukliny ku její délce. To je matematicky vyjádřeno jako $\delta_f = \eta l_f$ (odpovídá typickému čočkovitému tvaru pukliny). Nicméně v rámci této práce není možné automaticky určovat délky jednotlivých puklin, proto se rozhodlo pro kompromisní řešení, a to vztáhnout δ alespoň k rozmezru oblasti, tedy $\delta = \eta l$. Numericky se typicky volí hodnota $\eta = 0.01$ (Wang et al., 2024, kap. 1), což znamená, že pro výpočetní oblast o velikosti $1 \times 1 m^2$ bude rozevření puklin škálováno na centimetry. Parametr η je matematicky omezen na interval $\eta \in (0, 1]$, ale hodnoty vyšší než $\eta_{\max} \approx 0.1$ nejsou fyzikálně smysluplné.

Třetí parametr je Youngův modul matrice Y_m (jednotky GPa), analogicky se zavádí Youngův modul pro pukliny Y_f . Typické hodnoty Y_m pro různé horniny jsou uvedeny v tabulce 3.3.

Hornina	Y_m [GPa]
Žula	31.5
Andezit	41.9
Čedič	40.0
Vápenec	25.7

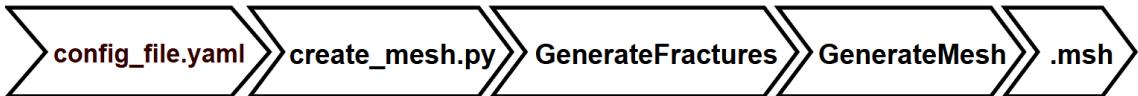
Tabulka 3.3: Youngův modul pro různé horniny, zdroj (Zhang, 2016, tab. 6.12).

Hodnoty Youngova modulu uvedené v tabulce jsou orientační, protože závisí na konkrétní lokalitě, geologických podmínkách a dalších faktorech. Různé typy hornin mohou vykazovat odlišné materiálové vlastnosti. Pro výpočetní účely se v této práci často použila hodnota $Y_m = 31.5$ GPa, což odpovídá žule.

Čtvrtý parametr, ξ , vyjadřuje, kolikrát je Youngův modul puklin menší než Youngův modul okolní horninové matrice, tedy $Y_f = \xi Y_m$. Obvyklé hodnoty se pohybují v rozsahu $\xi \in (100, 1000)$.

3.3 Princip generování umělých puklin a výpočetní sítě

Cílem metody `create_mesh.py` je vytvořit výpočetní síť (soubor ve formátu `.msh`), která se potom použije jako jeden ze vstupů u homogenizační úlohy. Obecné schéma pro vygenerování umělých puklin a výpočetní sítě je vyobrazeno na obrázku 3.1.



Obrázek 3.1: Schéma postupu při generování sítě

Třídu `GenerateMesh` zde nebudeme podrobněji rozebírat, stačí zmínit, že využívá implementovaných funkcí GMSH a BGEM k vytvoření a následnému *zahojení* vygenerované sítě. Proces hojení zlepšuje kvalitu vygenerovaných konečných prvků (elementů), což vede k numericky stabilnějším a přesnějším výsledkům simulace.

3.3.1 Reprezentace puklinové sítě

Výsledná puklinová síť je reprezentována jako soubor jednorozměrných úseček, resp. jednotlivých puklin, z nichž každá je charakterizována svou polohou, orientací, velikostí a příslušností k určité rodině/populaci.

Každá puklina přísluší určité *rodině*. Rodina představuje soubor puklin generovaných na základě stejných statistických a obecných parametrů, které jsou uvedeny v tabulce 3.1.

Rodiny puklin se následně sdružují do *populací*, které jsou definovány nejen jednotlivými rodinami, ale také obecným tvarem puklin (odpovídá úsečkám) a výpočetní oblastí. Populace obvykle obsahují více od sebe odlišných rodin orientovaných v různých směrech, což umožňuje realističtější simulaci přirozeného rozložení puklinových sítí v horninovém masivu. V této práci bylo však rozhodnuto, že pro účely modelování postačí generovat pouze jednu rodinu puklin.

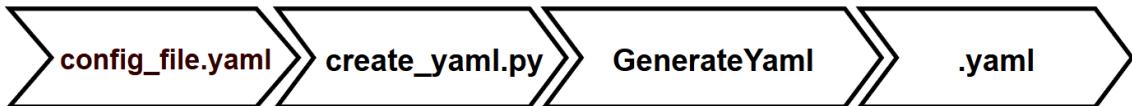
3.3.2 Aplikace puklinové sítě pro generování výpočetní sítě

Proces generování umělých puklin probíhá ve třídě `GenerateFractures` a začíná vytvořením obdélníkové výpočetní oblasti a její hranice pomocí GMSH. Do této oblasti jsou následně přidány náhodné pukliny, jejichž geometrie a orientace vycházejí ze zadaných statistických parametrů.

V rámci tohoto procesu je trojrozměrná puklinová síť promítnuta do rovinné dvoudimenzionální oblasti, čehož je dosaženo nastavením *z*-ových složek u příslušných interních parametrů puklin na nulu. Dále automaticky proběhne tzv. *fragmentace*, při níž se pukliny i hranice výpočetní oblasti rozštěpí ve vzájemných průsečících. Poté dojde k rozdělení těchto objektů do několika fyzikálních oblastí (regionů), tj. na samotné pukliny s jejich průsečíky a hranice oblasti s průsečíky puklin.

3.4 Tvorba modelu mechaniky

Vstupní soubor pro simulátor Flow123d automaticky generuje třída `GenerateYaml`, která je ve skriptu `create_yaml.py`. Detailní popis nastavování vstupních souborů a parametrů pro výpočetní simulátor Flow123d je zpracován v (Březina, Stebel et al., 2025, kap. 4), kde jsou uvedeny všechny formální podrobnosti.



Obrázek 3.2: Schéma postupu při vytváření souboru pro homogenizační úlohu

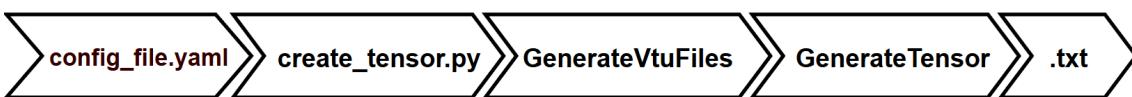
Veškerá specifikace parametrů pro definici homogenizační úlohy probíhá automaticky pomocí metody `generate_yaml.py` ve třídě `GenerateYaml`. Tato metoda generuje `.yaml` soubor, v němž jsou definovány následující klíčové parametry: `cross_section` (ηl), `young_modulus` (Y_m, Y_f), `poisson_ratio` ($\nu = 0$), `bc_displacement` ($\mathbf{u}_{D1}, \mathbf{u}_{D2}, \mathbf{u}_{D3}$), a `mesh_file` je absolutní cesta k vygenerované výpočetní síti (`.msh`).

Poissonovo číslo bylo s ohledem na dvoudimenzionální charakter zkoumaného modelu nastaveno na $\nu = 0$, což eliminuje vznik napětí ve třetím směru. Parametr `cross_section_min` odpovídá hodnotě δ_{\min} (viz kap. 2.3.4) a pro usnadnění výpočtu jsme také použili hodnotu nula.

Dále parametr `contact` je nastaven na hodnotu `true`, čímž se aktivuje aplikace kontaktních podmínek v modelu. Při zapnutých kontaktních podmínkách je mechanický model řešen jako úloha kvadratického programování s lineárními omezeními.

3.5 Výstup a výpočet prvků výsledného tenzoru

Pokud byly postupy popsané v kapitolách 3.3 a 3.4 úspěšně dokončeny, lze přistoupit k samotné simulaci pomocí výpočetního simulátoru Flow123d. Tento proces je realizován ve třídě `GenerateVtuFiles`. Výstupem simulací jsou tři různé `.vtu` soubory, z nichž každý odpovídá jedné okrajové podmínce, která byla popsána v kapitole 2.4.5. Finální efektivní elastický tenzor je následně vypočítán ve třídě `GenerateTensor` na základě dat z těchto souborů.



Obrázek 3.3: Schéma postupu při vytváření souboru s výsledným tenzorem

Metoda `compute_effect_elast_constants_voigt` ve třídě `GenerateTensor` je klíčová, neboť se v ní na základě rovnice (2.58) určují všechny efektivní elastické konstanty, tedy jednotlivé prvky tenzoru $\tilde{\mathbf{C}}^*$, které jsou následně převedeny do Voigtovy notace.

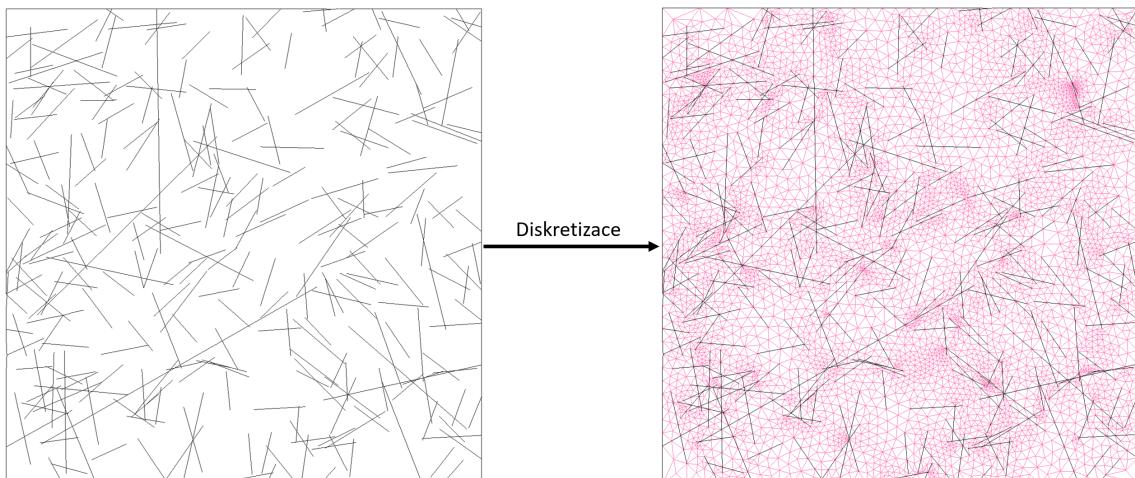
3.6 Výpočet ukázkové úlohy

Cílem této podkapitoly je aplikovat obecné principy a postupy popsané v předchozích podkapitolách na konkrétní ukázkovou úlohu. Všechna data a výpočty zobrazené v této kapitole jsou k dispozici v adresáři `Raw_data`, kde se nachází podadresář `Thesis_example_problem`, který je nahrán na (Siddall, 2025). Začneme uvedením hodnot parametrů použitých k vytvoření souborů `.msh` a `.yaml`, které jsou nezbytné pro provedení výpočtů a analýz v této úloze:

Název parametru	Značení	Hodnoty	Jednotky
rectangle_dimensions	$l \times h$	1×1	m^2
sample_range	$[r_{\min}, r_{\max}]$	$[0.038, 169]$	m
k_r	k_r	2.6	—
diam_range	$[r_0, r_{\infty}]$	$[0.038, 169]$	m
p32_r0_to_r_infty	$P_{32}[r_0, r_{\infty}]$	2	$\frac{m^2}{m^3}$
fisher_trend	ϕ_{tf}	10	°
fisher_plunge	ϕ_p	85	°
fisher_kappa	κ_f	10	—
displacement_..._conditions	β	0.07	—
cross_section_multiplier	η	0.05	—
young_modul_rock_gpa	Y_m	31.5	GPa
reduction_value_for_fractures	ξ	500	—

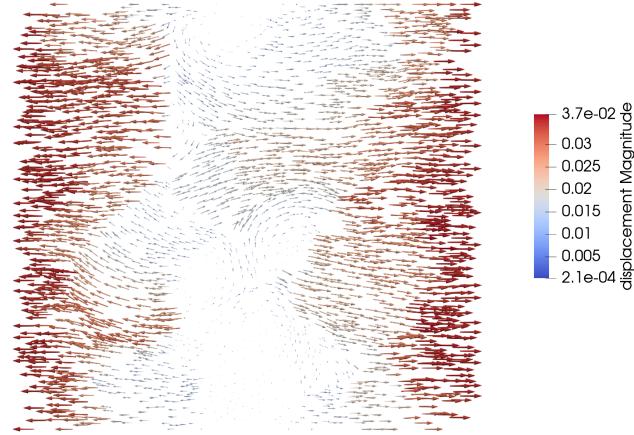
Tabulka 3.4: Parametry použité pro ukázkovou úlohu

Na obrázku 3.4 níže je znázorněno pomocí GMSH, jak vypadají vygenerované umělé pukliny (vlevo) a související výpočetní síť (vpravo) pro ukázkovou úlohu.



Obrázek 3.4: Vygenerované umělé pukliny (vlevo) a výpočetní síť (vpravo)

Dále si ukážeme vektorové pole posunutí \mathbf{u} pro první okrajovou podmínu, tj. posun ve vodorovném směru. Tento a další snímky byly vytvořeny pomocí vizualizačního

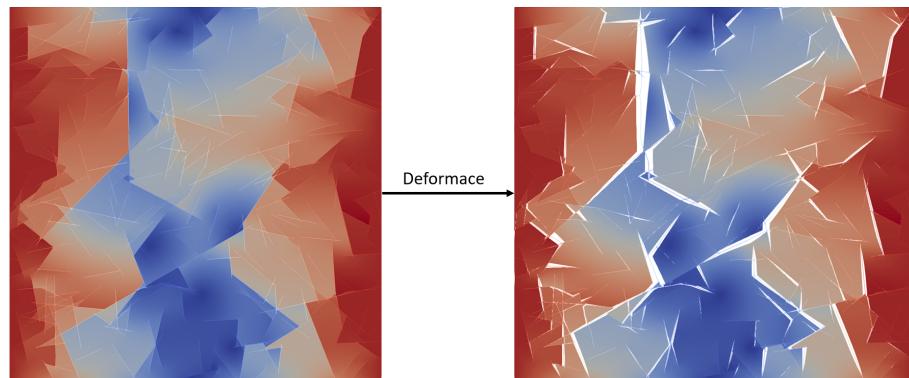


Obrázek 3.5: Vektorové pole posunutí pro vodorovný posun

softwaru *ParaView* (Ahrens et al., 2005).

Na obrázku 3.5 je barevně znázorněno vektorové pole posunutí, každý bod je popsán vektorem, který ukazuje směr a velikost posunutí. Stupnice vpravo (v metrech) vyjadřuje velikost samotného posunutí.

Pro lepší vizualizaci samotné deformace puklinové sítě si můžeme porovnat model před a po zatížení, jak je znázorněno na obrázku 3.6.



Obrázek 3.6: Deformace tahem ve vodorovném směru v ukázkové úloze

Nakonec si ukážeme výsledný efektivní elastický tenzor, který je znázorněn na obrázku 3.7 níže.

===== Effective elastic tensor in matrix form for 2D problems =====			
C =	3205877199.349973 182723454.08514413 -49762563.481876045	181230622.837998 2177755275.4028234 16804988.521057494	-49703200.23166834 18383822.75753099 883477862.6823198

Obrázek 3.7: Výsledný efektivní elastický tenzor pro ukázkovou úlohu

4 Stochastická homogenizace a statistická analýza výsledků

Tato kapitola se věnuje numerickým simulacím, jejichž cílem bylo analyzovat vliv různých parametrů na hodnoty efektivního elastického tenzoru. Díky tomu bylo možné pochopit chování modelu mechaniky DFM. Byly provedeny výpočty na analýzu vlivu těchto parametrů:

1. orientace puklin, κ_f ,
2. relativní plocha puklin, η ,
3. tuhost puklin, ξ
4. velikost posunu, β ,
5. geometrie puklinové sítě (provedena stochastická homogenizace).

Tomuto pořadí odpovídají i následující podkapitoly 4.1, 4.2, 4.3, 4.4 a 4.5, kde jsou dílčí analýzy podrobněji popsány. V poslední podkapitole 4.6 je shrnutí všech pozorování.

Pro všechny dílčí analýzy byly použity konstantní hodnoty parametrů, které nebyly přímo předmětem analýz. Tyto parametry tedy zůstaly stejné ve všech analýzách resp. simulacích a jejich hodnoty jsou uvedeny v tabulce 4.1.

Název parametru	Značení	Hodnoty	Jednotky
rectangle_dimensions	$l \times h$	1×1	m^2
sample_range	$[r_{\min}, r_{\max}]$	$[0.038, 169]$	m
k_r	k_r	2.6	—
diam_range	$[r_0, r_{\infty}]$	$[0.038, 169]$	m
p32_r0_to_r_infny	$P_{32}[r_0, r_{\infty}]$	2	$\frac{m^2}{m^3}$
fisher_trend	ϕ_{tf}	10	°
fisher_plunge	ϕ_p	85	°
young_modul_rock_gpa	Y_m	31.5	GPa

Tabulka 4.1: Hodnoty obecných parametrů použitých u všech analýz

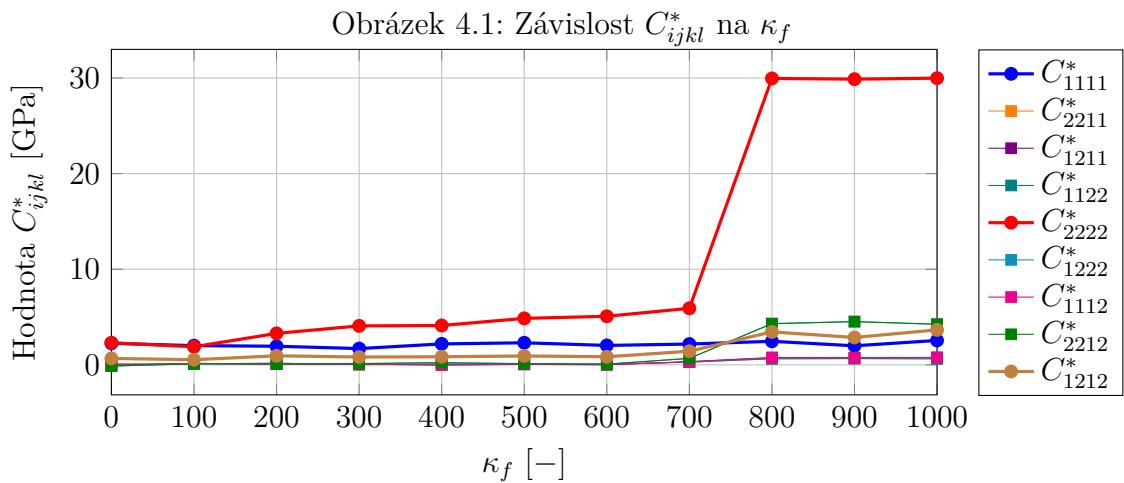
V případě, že konkrétní parametr nebyl měněn, byla jeho hodnota ve všech simulacích konstantní, což zajistilo konzistenci výsledků. Použité hodnoty byly $\kappa_f = 10$, $\eta = 0.05$, $\xi = 500$ a $\beta = 0.07$.

4.1 Závislost efektivního elastického tenzoru na orientaci puklin

Cílem této části bylo analyzovat, jak změna parametru κ_f ovlivňuje složky efektivního elastického tenzoru C_{ijkl}^* . Byly provedeny numerické simulace pro různé hodnoty κ_f , a to v intervalu od 0 do 1000. Pro každou hodnotu κ_f byla vytvořena nová puklinová síť.

Jak bylo popsáno v kapitole 2.2.2, tak s rostoucím κ_f by pukliny měly vykazovat jistý *dominantní směr* (tj. přesně ve směru definovaném podle \mathbf{a} , což je v našem případě 85°), což by mělo způsobit velké navýšení prvku C_{2222}^* , který tomuto směru odpovídá.

Výsledky výpočtů jsou zobrazeny na obrázku 4.1, kde jsou vyneseny hodnoty jednotlivých složek efektivního elastického tenzoru v závislosti na parametru κ_f .



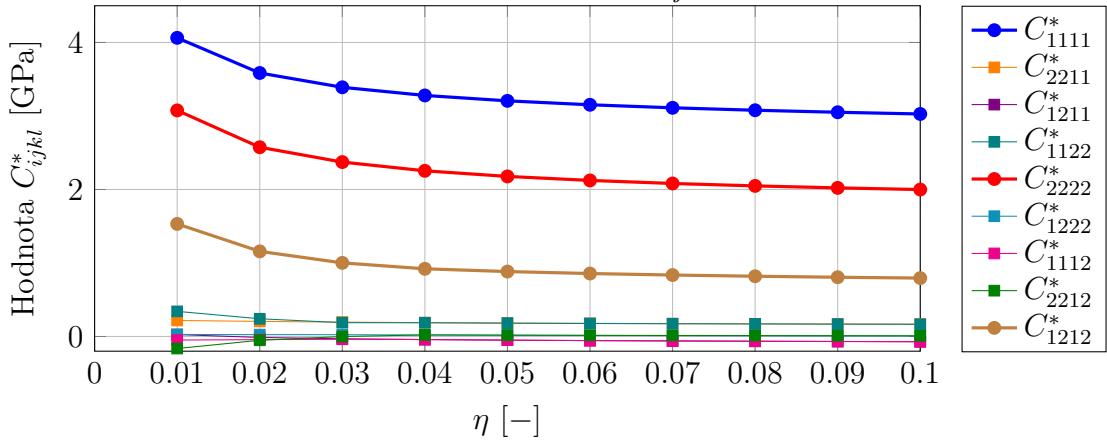
Z výsledků výpočtů je zřejmé, že opravdu došlo k velkému navýšení prvku odpovídajícímu dominantnímu směru puklin, konkrétně C_{2222}^* , zatímco ostatní prvky zůstaly relativně konstantní.

4.2 Závislost efektivního elastického tenzoru na poměru rozevření pukliny ku její délce

V této analýze bylo cílem zkoumat vliv změny parametru η , který reprezentuje poměr rozevření pukliny ku její délce, na složky efektivního elastického tenzoru C_{ijkl}^* . Byly provedeny numerické simulace pro různé hodnoty η v intervalu od 0.01 do 0.1. Pro všechny výpočty byla použita stejná výpočetní síť.

Z teorie víme, že s rostoucí relativní plochou puklin dojde k postupnému snižování celkové tuhosti materiálu, neboť pukliny mají vždy menší tuhost než okolní horninová matrice, což se projeví poklesem hodnot C_{ijkl}^* . Jinak řečeno měli bychom vidět ve výsledku klesající hodnoty C_{ijkl}^* s rostoucím η .

Obrázek 4.2: Závislost C_{ijkl}^* na η

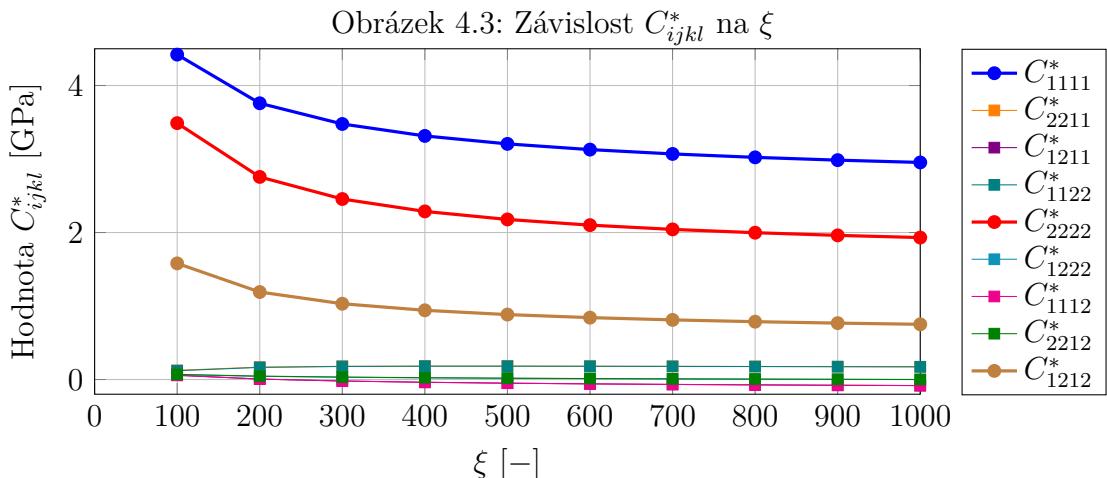


Nejvýraznější pokles je pozorovatelný u hlavních diagonálních složek C_{1111}^* , C_{2222}^* a C_{1212}^* .

4.3 Závislost efektivního elastického tenzoru na tuhosti puklin

Simulace byly provedeny pro různé hodnoty ξ v intervalu od 100 do 1000. Pro všechny výpočty byla použita jedna puklinová síť, která mj. byla použitá i v předchozí analýze.

Je přirozené předpokládat, že s rostoucí tuhostí puklin poroste i hodnota efektivního tenzoru tuhosti C_{ijkl}^* . Jinými slovy, čím menší bude hodnota parametru ξ , tím vyšší bude celková tuhost materiálu a tím pádem hodnoty C_{ijkl}^* .

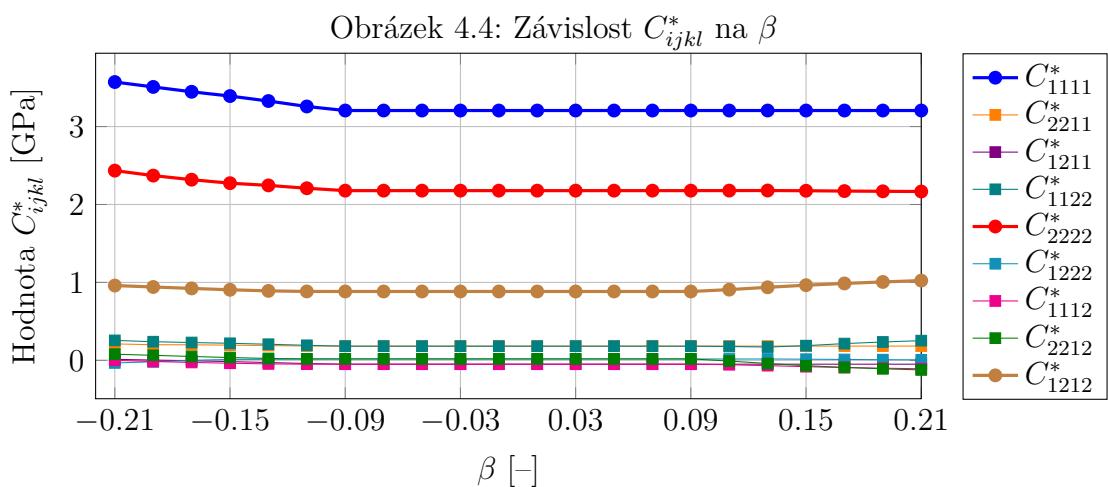


Opět můžeme vidět hlavní změny u diagonálních prvků, zatímco ty mimodiagonální zůstávají vesměs konstantní.

4.4 Závislost efektivního elastického tenzoru na posunu

V této části analyzujeme, jak se mění efektivní elastický tenzor v závislosti na velikosti předepsaného posunu. Pokud by byl náš model čistě lineárně elastický a obsahoval by pouze spojité prostředí bez puklin, výsledné efektivní parametry by byly nezávislé na velikosti zatížení. Jinými slovy C_{ijkl}^* by zůstávaly konstantní bez ohledu na velikostí předepsaného posunu.

Náš model DFM však zahrnuje kontaktní podmínky, viz (2.45). Tím pádem bychom měli pozorovat, že při zvyšujícím se záporném posunu (stlačování) začne docházet k postupnému uzavírání některých puklin, což se projeví nelineárním chováním celého modelu.



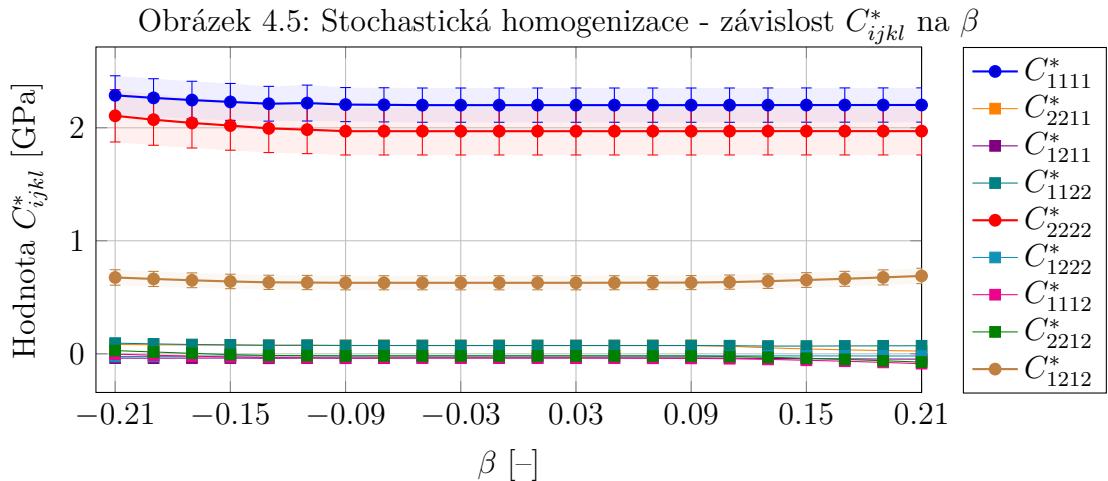
A skutečně, jak ukazují výsledky na obrázku 4.4, efektivní elastické parametry rostou úměrně s rostoucím stlačováním, což potvrzuje očekávané nelineární chování způsobené kontaktními podmínkami.

4.5 Závislost efektivního elastického tenzoru na geometrii puklinové sítě

Tato poslední analýza přímo navazuje na tu předchozí. V principu se jedná o stejnou analýzu, provedenou však pro více různých puklinových sítí. Vzhledem k tomu, že každá vygenerovaná síť je náhodná, výsledné hodnoty efektivního elastického tenzoru se mezi jednotlivými sítěmi liší. Cílem této části je ověřit, zda jsou v **průměru** hodnoty C_{ijkl}^* **nezávislé** na konkrétní puklinové síti.

Analýza byla provedena pro 10 různých náhodně vygenerovaných sítí se stejnými vstupními (statistickými) parametry. Jednotlivé složky efektivního tenzoru se zprůměrovaly (aritmetický průměr) a u diagonálních prvků byla navíc určena standardní chyba ve tvaru $\frac{s}{\sqrt{n}}$, kde s je výběrová směrodatná odchylka a n je rozsah výběru.

U mimodiagonálních prvků byly standardní chyby zanedbané. Tomuto procesu se říká **stochastická homogenizace** a její výsledek je na obrázku 4.5 níže:



Vzhledem k tomu, že průměrné hodnoty pro různé sítě jsou prakticky stejné, můžeme usoudit, že průměrný efektivní elastický tenzor, jak je vypočítán v této analýze, je v průměru nezávislý na konkrétní realizaci puklinové sítě. To naznačuje, že náhodnost v geometrii puklinové sítě nemá zásadní vliv na celkové chování modelu.

To je mj. potvrzené tím, že standardní chyby u diagonálních prvků jsou relativně malé (méně než 10%) což naznačuje malé odchylky od *skutečných* hodnot $\tilde{\mathbf{C}}^*$.

Ve výsledku lze říci, že stochastická homogenizace nám potvrdila nezávislost (invariantnost) efektivních materiálových vlastností resp. prvků C_{ijkl}^* na konkrétní síti puklin.

4.6 Shrnutí pozorovaných zjištění

Analyzovali jsme vliv různých parametrů na efektivní elastický tenzor. Tato analýza nám umožnila popsat chování modelu DFM a ukázala, že výsledky výpočtů jsou v souladu s teoretickými předpovědmi, což by šlo shrnout následovně:

- **Orientace puklin (κ_f):** Větší hodnota κ_f výrazně zvyšuje hodnotu příslušného diagonálního prvku $\tilde{\mathbf{C}}^*$, tudíž orientace puklin ovlivňuje hodnoty $\tilde{\mathbf{C}}^*$.
- **Poměr rozevření pukliny ku její délce (η):** Zvýšení poměru rozevření pukliny ku její délce má za následek snížení hodnot tenzoru $\tilde{\mathbf{C}}^*$.
- **Tuhost puklin (ξ):** Vyšší tuhost puklin vede ke zvýšení hodnot efektivního elastického tenzoru.
- **Posun (β):** Při stlačování byla potvrzena nelineární charakteristika modelu DFM a vliv kontaktních podmínek.
- **Geometrie:** Stochastická homogenizace potvrdila průměrnou nezávislost hodnot $\tilde{\mathbf{C}}^*$ na konkrétní puklinové síti.

5 Závěr

Cílem této bakalářské práce bylo teoreticky popsat a modelovat mechanické chování krystalických hornin s náhodně generovanými puklinovými sítěmi.

V teoretické části práce byly popsány základní principy mechaniky pružných těles a matematický popis puklin. Byly shrnutы možnosti statistického popisu puklin a způsoby jejich modelování. Mimo jiné byl představen matematický model kombinující diskrétní pukliny a spojitou horninovou matrici. Nakonec byly popsány principy numerické homogenizace jakožto metody umožňující řešit úlohy v heterogenních materiálech.

V praktické části byl implementován program umožňující vytvářet dvourozměrné modely hornin s náhodně generovanou puklinovou sítí podle zvoleného statistického rozdělení a dalších parametrů. Na těchto modelech byly pomocí numerických simulací řešeny úlohy mechaniky se zahrnutím kontaktních podmínek. Byly provedeny různé analýzy, včetně stochastické homogenizace, zjišťující vliv jednotlivých parametrů a chování modelu jako celku.

Tímto byly splněny všechny cíle stanovené v zadání. Výsledky výpočtů potvrdily teoretické předpoklady a ukázaly výrazný vliv puklinových sítí na mechanické vlastnosti krystalických hornin.

Motivací pro tuto práci bylo pochopení problematiky heterogenních materiálů s náhodnými puklinami, jejich matematického popisu a metody, jak prakticky získat efektivní mechanické vlastnosti ve dvou dimenzích. Přirozeným pokračováním by mohlo být rozšíření použitých metod do tří dimenzí, což by umožnilo realističtější analýzu vlivu puklin na mechanické vlastnosti materiálu.

Bibliografie

- AHRENS, James, Berk GEVECI a Charles LAW, 2005. ParaView: An End-User Tool for Large Data Visualization. In: *Visualization Handbook*. Elsevier. ISBN 9780123875822.
- BENSOUSSAN, Alain, Jacques-Louis LIONS a George PAPANICOLAOU, 2011. *Asymptotic analysis for periodic structures*. Sv. 374. American Mathematical Soc.
- BERRE, Inga, Florian DOSTER a Eirik KEILEGAVLEN, 2019. Flow in fractured porous media: A review of conceptual models and discretization approaches. *Transport in Porous Media*. Roč. 130, č. 1, s. 215–236.
- BGEM, 2025. *BGEM*. Dostupné také z: <https://github.com/GeoMop/bgem>. [Online; navštíveno 28. 03. 2025].
- BRDIČKA, Miroslav, Ladislav SAMEK a Bruno SOPKO, 2005. *Mechanika kontinua*. Academia.
- BŘEZINA, Jan a Jan STEBEL, 2024. Discrete fracture-matrix model of poroelasticity. *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*. Roč. 104, č. 4, e202200469. Dostupné z DOI: <https://doi.org/10.1002/zamm.202200469>.
- BŘEZINA, Jan, Jan STEBEL et al., 2025. *Dokumentace Flow123d*. Dostupné také z: http://flow.nti.tul.cz/packages/3.9.0/flow123d_3.9.0_doc.pdf. [Online; navštíveno 30. 03. 2025].
- DAVIS, John C, Robert J SAMPSON et al., 2002. *Statistics and data analysis in geology, Third edition*. Sv. 638. Wiley New York.
- FIGUEIREDO, Adelaide, 2009. Discriminant analysis for the von Mises-Fisher distribution. *Communications in Statistics-Simulation and Computation*. Roč. 38, č. 9, s. 1991–2003.
- FLOW123D, 2025. *Flow123d*. Dostupné také z: <https://flow123d.github.io/>. [Online; navštíveno 28. 03. 2025].
- FOLLIN, S. et al., 2006. *Hydrogeological DFN Modelling Using Structural and Hydraulic Data from KLX04: Preliminary Site Description Laxemar Subarea - Version 1.2*. SKB. SKB rapport. Dostupné také z: <https://books.google.cz/books?id=xbCFNwAACAAJ>.

- HILL, Rodney, 1963. Elastic properties of reinforced solids: some theoretical principles. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. Roč. 11, č. 5, s. 357–372.
- HUR, Vera Mikyoung, 2009. *The Dirac Distribution*. Dostupné také z: https://ocw.mit.edu/courses/18-034-honors-differential-equations-spring-2009/resources/mit18_034s09_lec23/. [Online; navštíveno 02. 01. 2025].
- KOUZNETSOVA, Varvara, WAM BREKELMANS a FPT1005 BAAIJENS, 2001. An approach to micro-macro modeling of heterogeneous materials. *Computational mechanics*. Roč. 27, č. 1, s. 37–48.
- MAPTEK PTY LTD, 2024. *Glossary*. Dostupné také z: <https://help.maptek.com/pointstudio/2022.1/glossary.htm>. [Online; navštíveno 15.12.2024].
- MOULINÉC, Hervé a Pierre SUQUET, 1998. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computer methods in applied mechanics and engineering*. Roč. 157, č. 1-2, s. 69–94.
- MUNIER, Raymond, 2007. *Demonstrating the efficiency of the EFPC criterion by means of Sensitivity analyses*. Tech. zpr. Swedish Nuclear Fuel a Waste Management Co.
- NEČAS, Jindřich, 2011. *Direct methods in the theory of elliptic equations*. Springer Science & Business Media.
- OEHMAN, Johan a Sven FOLLIN, 2010. *Site investigation SFR. Hydrogeological modelling of SFR. Model version 0.2*.
- POVEY, Rhys G, 2023. Voigt transforms.
- SIDDALL, Ronald Ch., 2025. *Odkaz na GitHub repozitář s kódem*. Dostupné také z: <https://github.com/RonaldSiddall/Homogenization-Rock-Mechanics-Thesis>. [Online; navštíveno 28. 03. 2025].
- STEBEL, Jan et al., 2024. On the parallel solution of hydro-mechanical problems with fracture networks and contact conditions. *Computers & Structures*. Roč. 298, s. 107339.
- WALDRON, John a Morgan SNYDER, 2020. Geological Structures: A practical introduction.
- WANG, Xiaolin et al., 2024. Empirical prediction of hydraulic aperture of 2D rough fractures: a systematic numerical study. *Frontiers of Earth Science*. Roč. 18, č. 3, s. 579–597.
- ZHANG, Lianyang, 2016. *Engineering properties of rocks*. Butterworth-Heinemann.
- ZOHDI, T. I. a P. WRIGGERS, 2005. *An Introduction to Computational Micromechanics*. Springer.