

Sborník abstraktů, seznam účastníků a program semináře

SIMONA 2009



SIMULACE, MODELOVÁNÍ A NEJRŮZNĚJŠÍ APLIKACE

Seminář výzkumného centra
„Pokročilé sanační technologie a procesy“
s otevřenou účastí

Technická univerzita v Liberci, 21.–23. září 2009

Obsah

A. SEZNAM PŘIHLÁŠENÝCH ABSTRAKTŮ	1
<u>HANA BAAROVÁ, JAN ŠEMBERA:</u> <i>An approach to evaluate a geochemical model – simulated results vs. results of chemical analyses</i>	3
<u>RADIM BLAHETA:</u> <i>Effective properties of heterogeneous geo-materials: Computational aspects and applications</i>	4
<u>JAN BŘEZINA:</u> <i>Použití knihovny PETSc pro řešení rozsáhlých úloh podzemního proudění</i>	5
<u>ZUZANA CAPEKOVÁ, BLANKA MALÁ, JAN PACINA:</u> <i>Aplikace podporující efektivní návrh modelu pro metodu konečných prvků</i>	6
<u>DALIBOR FRYDRYCH, LUDVÍK PRÁŠIL, VLADIMÍR KRACÍK:</u> <i>Verification of bellows air spring shape model</i>	7
<u>JIŘÍ HAVLÍČEK, MILAN HOKR:</u> <i>Změna hydraulických parametrů v modelu proudění diskrétní puklinovou sítí při zahrnutí vlivu mechaniky</i>	8
<u>MILAN HOKR:</u> <i>Využití dat z monitoringu ve vodárenském tunelu Bedřichov – návrhy úloh pro numerické simulace a předběžné výsledky</i>	9
<u>JOSEF CHUDOBA:</u> <i>Modelování toků pomocí softwaru Flow123D se započtením nejistot vstupních parametrů – případová studie</i>	10
<u>PAVOL KIŠON, JOZEF KAČUR:</u> <i>Numerical model of infiltration process in unsaturated soil and inverse problem</i>	11
<u>ŠTĚPÁNKA KLÍMKOVÁ, MIROSLAV ČERNÍK, JAROSLAV NOSEK, TOMÁŠ PLUHAŘ:</u> <i>Povrchově upravené nanočástice železa pro sanaci podzemních vod</i>	12
<u>JIŘÍ KOPAL:</u> <i>Transport na složité puklinové síti – některé aspekty rychlosti výpočtu</i>	13
DALIBOR FRYDRYCH, <u>IGOR KOPETSCHKE:</u> <i>Reusable classes in designing of mathematical models</i>	14

KAREL KOVÁŘÍK:

Drain element in the boundary elements method 15

JIŘINA KRÁLOVCOVÁ:

Proudění a transport látek v různých typech hostitelské horniny s různou geologickou stavbou 16

MICHAL KURÁŽ:

An adaptive time step for the numerical solution of the Richards' equation 17

JAN LISAL, DALIBOR FRYDRYCH:

Objektově orientovaný pohled na sdružené procesy 18

MOHAMMED SHUKER MAHMOOD:

Discontinuous Galerkin relaxation algorithm for solute transport in porous media 19

BLANKA MALÁ, JAN PACINA, ZUZANA CAPEKOVÁ:

Účelově odvozené geoinformatické modely v procesu předzpracování dat pro tvorbu geometrie modelových sítí 20

JAROSLAV NOSEK, ŠTĚPÁNKA KLÍMKOVÁ, MIROSLAV ČERNÍK:

Měření velikostní distribuce nanoželeza 21

JAN PACINA, BLANKA MALÁ, ZUZANA CAPEKOVÁ:

Možnosti automatizace výstavby modelových sítí v rámci projektu Poohří 22

ŠTĚPÁN PAPÁČEK, VÁCLAV ŠTUMBAUER, DALIBOR ŠTYS:

Multi-compartment model of a photo-bioreactor: Interrelation between experimental technique used for model verification and modelling approach 23

DANA PELIKÁNOVÁ ROSICKÁ, JAN ŠEMBERA:

Model agregace železných nanočástic 24

TOMÁŠ PLUHAŘ, ŠTĚPÁNKA KLÍMKOVÁ, MIROSLAV ČERNÍK, JAROSLAV NOSEK:

Sedimentační analýza železných nanočástic 25

PETR RÁLEK:

Algorithm for reducing the fracture network in 2D flow problem 26

LENKA RUKAVIČKOVÁ:

Zdroje hydrogeologických dat pro matematické modely proudění podzemních vod v puklinovém prostředí granitoidů 27

KAREL SEGETH:

A comparison of some analytical and computational a posteriori error estimates in the FEM 28

ANDREJ ŠOLTÉSZ, DANA BAROKOVÁ:

Impact of planned underground railway structure on the groundwater regime 29

STANISLAV SYSALA:

Modified semismooth Newton method: Numerical examples 30

DAVID TOMČÍK, BLANKA MALÁ:

Geoinformatic modeling in the construction of model meshes 31

ERIKA TROJÁKOVÁ:

Numerical solution of transport problems with adsorption 32

DAGMAR TRPKOŠOVÁ, JIŘÍ MLS:

Reliability of numerical model of a capillary barrier 33

MICHAL VANĚČEK, MARTIN MILICKÝ, JIŘÍ ZÁRUBA; prezentuje DAGMAR TRPKOŠOVÁ:

Methods and tools of the impact assessment of engineering barriers on remote interactions in the environment of a deep geological disposal 34

JAN URBAN, JAN VANĚK, DALIBOR ŠTYS:

Expertomica metabolomics profiling: Using probabilistic system approach to gather more information from LC-MS 35

JAN URBAN, JAN VANĚK, DALIBOR ŠTYS:

Entropy fluxes in cell culture and its parallel implementation on GPU 36

LUKÁŠ ZEDEK, JAN ŠEMBERA:

Využití analýzy hlavních komponent pro redukci dimenze reakčně-transportního modelu 37

B. SEZNAM ÚČASTNÍKŮ 39

C. PROGRAM SEMINÁŘE 45

Pondělí, 21. září 2009 47

Úterý, 22. září 2009 48

Středa, 23. září 2009 49

D. TECHNICKÉ INFORMACE 51

Plánek areálu semináře 53

Doprava do centra Liberce 53

Obědy, uvítací banket a slavnostní večeře 54

Restaurace, hospůdky a další podniky v areálu a okolí 54

Připojení k internetu 54

Kam v Liberci? 55

Místní speciality nejen do žaludku 55

A. ABSTRAKTY

AN APPROACH TO EVALUATE A GEOCHEMICAL MODEL – SIMULATED RESULTS VS. RESULTS OF CHEMICAL ANALYSES

HANA BAAROVÁ

*Institute of Novel Technologies and Applied Informatics,
Technical University of Liberec
e-mail: hana.baarova@tul.cz*

JAN ŠEMBERA

*Institute of Novel Technologies and Applied Informatics,
Technical University of Liberec
e-mail: jan.sembera@tul.cz*

Keywords: evaluation of a geochemical model, accuracy of chemical analyses.

Abstract

We are dealing with modelling of neutralization processes of highly mineralized acid groundwater. As a first step, we decided to model experiments of neutralization by NaOH in The Geochemist's Workbench [1]. We know the chemical analyses before the experiment (neutralization by NaOH) and after it. Some values are lower, some are higher and some almost did not change. Some (e.g. fluorine) have increased without any reason. Our contribution deals with the question how big difference signifies a change due to geochemical reactions. It should be noted that chemical analyses commonly used in laboratories are not suitable to analyze highly mineralized waters. Regarding accuracy of the chemical analyses applied (up to 20 %) we decided that only components with a "significant change" have been understood as they had changed.

The original composition serves as input for the model. The simulated final values (equilibrium concentrations) are compared with the chemical analyses after the neutralization. It revealed that results of chemical analyses and values computed by our model differ. We are studying the following questions: When it can be said that the simulated values fit the results of chemical analyses of the simulated experiment? Do they differ so much that the model is wrong? What is an admissible deviation to decide if our model is correct? The main question arising from such a study is whether it is proper to judge a geochemical model according to only such a comparison.

References

- [1] C. M. Bethke: The Geochemist's Workbench® 6.0, University of Illinois, 2006.

Acknowledgement: This result was realized under the state subsidy of the Czech Republic within the research and development project "Advanced Remediation Technologies and Processes Centre" 1M0554 – Programme of Research Centres supported by Ministry of Education, and with subvention of Grant Agency of the Czech Republic under project No s102/08/H081.

EFFECTIVE PROPERTIES OF HETEROGENEOUS GEO-MATERIALS: COMPUTATIONAL ASPECTS AND APPLICATIONS

RADIM BLAHETA

*Institute of Geonics,
Academy of Sciences of the Czech Republic, Ostrava
e-mail: blaheta@ugn.cas.cz*

Keywords: effective properties, homogenization, upscaling, multiscale modelling, material characterization, optimization of grouting.

Abstract

The paper deals with effective properties for characterization of thermal, hydrogeological and mechanical (THM) properties of heterogeneous geo-materials. The computational aspects consider the numerical procedure for deriving the effective properties from the knowledge of the constitutive laws and spatial distribution of the components. This procedure contains formulation of boundary value problems for testing the material response with both Dirichlet or Neumann boundary conditions and iterative solution of the arising systems. The use of effective properties for both multiscale modelling and characterization of improved rock mass (geocomposite) quality is described.

References

- [1] R. Blaheta, O. Jakl, J. Starý, K. Krečmer: Schwarz DD method for analysis of geocomposites, Proceedings of the Twelfth International Conference on Civil, Structural and Environmental Engineering Computing, B. H. V. Topping, L. F. Costa Neves, R. C. Barros (Editors), Civil-Comp Press, Stirlingshire, Scotland, 12 pp., 2009.
- [2] R. Blaheta, P. Byczanski, P. Harasim: Multiscale modelling of geo-materials and iterative solvers, Proceedings of the Seminar on Numerical Analysis, Institute of Geonics AS CR, Ostrava, 2009.

Acknowledgement: This work is supported by the Grant Agency of the Czech Republic via the project GACR105/09/1830 “Multiscale modelling and X-Ray tomography in geotechnics” and the Academy of Sciences of the Czech Republic via the research plan project AV0Z 30860518.

POUŽITÍ KNIHOVNY PETSC PRO ŘEŠENÍ ROZSÁHLÝCH ÚLOH PODZEMNÍHO PROUDĚNÍ

JAN BŘEZINA

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: jan.brezina@tul.cz*

Klíčová slova: porous media, domain decomposition, Schur complement.

Abstrakt

Při řešení reálných úloh proudění vody v nasyceném porézním prostředí pomocí smíšené hybridní formulace je třeba řešit rozsáhlý systém rovnic se sedlo-bodovou strukturou. V tomto systému je jedna z diagonálních matic blokově diagonální což umožňuje explicitní sestavení Schurova doplňku. Naším cílem je provést výpočet Schurova doplňku paralelně pomocí prostředků knihovny PETSc a to přímo na již paralelně sestavené soustavě rovnic. Tutéž knihovnu pak použijeme pro řešení výsledného pozitivně definitního systému.

Poděkování: Tento výzkum je realizován za podpory státních prostředků České republiky v rámci projektu VaV „Pokročilé sanační technologie a procesy“ č. 1M0554 – program MŠMT „Výzkumná centra“.

APLIKACE PODPORUJÍCÍ EFEKTIVNÍ NÁVRH MODELU PRO METODU KONEČNÝCH PRVKŮ

ZUZANA CAPEKOVÁ, BLANKA MALÁ

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: {zuzana.capekova; blanka.mala}@tul.cz*

JAN PACINA

*Fakulta životního prostředí,
Univerzita Jana Evangelisty Purkyně, Ústí nad Labem
e-mail: jan.pacina@ujep.cz*

Klíčová slova: FEM, mesh model, geometrický model.

Abstrakt

Metoda konečných prvků (FEM) je určena k numerickému řešení parciálních diferenciálních rovnic. V Centru pokročilých sanačních technologií TU Liberec je používán FEM k výpočtu prostorového rozložení časově ustálených jevů (proudění vody apod.) v třírozměrném euklidovském prostoru. K řešení se používá nástroj Flow123D vyvinutý na TUL. Diskretizace tvořící podstatu FEM se pro potřeby Flow123D realizuje v podobě sestavení geometrického modelu studované oblasti v kartézských souřadnicích a parametrizaci modelu materiálovými konstantami. Počáteční podmínky se zadávají ve vazbě na strukturální elementy geometrického modelu. Na základě geometrického modelu se vygeneruje mesh model.

V případě řešených úloh tedy model pro FEM obsahuje tři druhy informací:

- popis geometrie modelované oblasti;
- popis materiálových vlastností modelované oblasti;
- popis počátečních (okrajových) podmínek.

Je zřejmé, že kvalita modelu výrazným způsobem ovlivňuje získané výsledky. Model je ale diskrétní – složený z velkého počtu diskrétních elementů. Pro zefektivnění návrhu všech informačních složek modelu je proto používána aplikační podpora.

GeoTools – principem aplikace je dekompozice geometrického modelu na jednodušší podmodely a následně zpětná kompozice geometrického modelu z elementárních podmodelů.

GeoCor – principem aplikace je obohacení mesh modelu o data z GIS.

MeshTran – principem aplikace je analýza mesh modelu, hledání hranic oblastí, specifikace vybraných materiálových vlastností a okrajových podmínek.

Literatura

[1] Zuzana Capeková, Blanka Malá: Aplikace geoinformačního systému v rámci výstavby modelových sítí pro matematické modelování proudění podzemních vod, Geodny 2007.

Poděkování: Tato práce byla realizována za podpory státních prostředků České republiky v rámci projektu VaV „Pokročilé sanační technologie a procesy“ č. 1M0554 – program MŠMT „Výzkumná centra“.

VERIFICATION OF BELLOWS AIR SPRING SHAPE MODEL

DALIBOR FRYDRYCH

*Institute of Novel Technologies and Applied Informatics,
Technical University of Liberec
e-mail: dalibor.frydrych@tul.cz*

LUDVÍK PRÁŠIL

*Department of Design of Machine Elements and Mechanisms,
Faculty of Mechanical Engineering,
Technical University of Liberec
e-mail: ludvik.prasil@tul.cz*

VLADIMÍR KRACÍK

*Department of Applied Mathematics,
Faculty of Science, Humanities and Education,
Technical University of Liberec
e-mail: vladimir.kracik@tul.cz*

Keywords: air spring, static characteristic, shape model, verification.

Abstract

The bellows air springs (BAS) are today widely used suspension elements. They offer many advantages: low cost, long life, small weight, variable load capacity and big working range. The most significant parameters of BAS are their static characteristics: Volume, Effective area and Index of Effective area. These characteristics define the behaviour of BAS (which is important for design process).

This contribution defines briefly the unique mathematical model where individual bellows were replaced by parts of anuloid. Model based on this assumption gives advantages such as good robustness and high calculation speed. Calculation of static characteristics for complete working range of the BAS, takes less than a second. The main part of this contribution is focused on verifying of model precision. Results given by model are compared to results from real BAS testing in a laboratory. Experiments are covering the whole range of produced BAS in load capacity as well as working range of these products.

References

- [1] O. Krejčíř: Pneumatic vibro-isolation (Czech original: Pneumatická vibroizolace), Doctoral thesis, VŠST Liberec, 1986.
- [2] L. Prášil, V. Kracík, D. Frydrych: Shape Modelling of Air Bellows Springs, Algoritmy 2005, pp. 142–149, Podbanské, Slovak Republic, ISBN 80227-21921.

Acknowledgement: This project was supported by the subvention from Ministry of Education of the Czech Republic under Contract Code MSM 4674788501.

ZMĚNA HYDRAULICKÝCH PARAMETRŮ V MODELU PROUDĚNÍ DISKRÉTNÍ PUKLINOVOU SÍTÍ PŘI ZAHRNUTÍ VLIVU MECHANIKY

JIRÍ HAVLÍČEK

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: jiri.havlicek@tul.cz*

MILAN HOKR

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: milan.hokr@tul.cz*

Abstrakt

Príspevek se zabývá problematikou zahrnutí vlivu mechanického napětí do výpočtu proudění rozpukanou horninou. Výpočty jsou prováděny na modelové 2D diskrétní puklinové síti definované v rámci spolupráce na mezinárodním projektu Decovalex-2011. Tato úloha je z hydraulického hlediska značně nehomogenní a dominantní pukliny zajišťují převážnou většinu toku oblastí. Podle předpokladu při působícím mechanickém napětí některé pukliny zmenší svoje rozevření a jejich hydraulická vodivost poklesne. U vhodně orientovaných puklin vůči vnějšímu napětí dochází ke zvětšení rozevření a hydraulická vodivost roste. Vznikají tak ještě větší nehomogenity v hydraulických vlastnostech úlohy [1].

Použitá metoda je založena na analytickém výpočtu napětí a deformace pro jednotlivé pukliny, se zahrnutím vlivu geometrického umístění pukliny vůči vnějšímu napětí, nelineárního vztahu napětí-deformace pro puklinu a mechanických vlastností okolní horniny. V normálovém směru jde o nelineární hyperbolickou závislost změny rozevření na tlaku. V tečném směru je to pak elasto-ideálně plastický model s Mohr-Coulombovou pevnostní podmínkou, způsobující při plastickém tečném posunutí zvětšení rozevření v normálovém směru (dilatace) [1].

Vliv napětí je vyhodnocen v podobě ekvivalentní hydraulické vodivosti bloku horniny a v podobě rozložení toku podél hranice. Srovnávají jsou výsledky pro různé varianty materiálových parametrů a několik definovaných vnějších mechanických napětí. Z výsledků vyplývá potvrzení předpokladu o zvyšování hydraulické vodivosti ve směru výraznějšího mechanického zatížení.

Literatura

[1] A. Baghbanan, L. Jing: Stress effects on permeability in fractured rock mass with correlated fracture length and aperture, International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, Vol. 45(8) (2008), pp. 1320–1334.

Poděkování: Tato práce byla realizována za podpory státních prostředků České republiky v rámci projektu VaV „Pokročilé sanační technologie a procesy“ č. 1M0554 – program MŠMT „Výzkumná centra“.

VYUŽITÍ DAT Z MONITORINGU VE VODÁRENSKÉM TUNELU BEDŘICHOV – NÁVRHY ÚLOH PRO NUMERICKÉ SIMULACE A PŘEDBĚŽNÉ VÝSLEDKY

MILAN HOKR

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: milan.hokr@tul.cz*

Klíčová slova: podzemní proudění, puklinové prostředí, kalibrace a verifikace modelu.

Abstrakt

Vodárenský tunel mezi přehradou Josefův důl a úpravnou vody Bedřichov v Jizerských horách je v mnoha ohledech významnou lokalitou z hlediska možností pozorování jevů v granitovém prostředí. V minulosti byl v rámci série projektů Správy úložišť radioaktivních odpadů (SÚRAO) prováděn výzkum a monitoring v široké škále geovědních disciplín [1].

Modelování fyzikálních jevů v puklinovém prostředí typicky granitických hornin je často významně limitováno nedostatkem dat pro sestavení modelu i pro jeho verifikaci. Získaná data z Bedřichovského tunelu dle našich předpokladů mohou přispět k možnosti získání relevantnějších koncepčních modelů a pro demonstrování možností kalibrace a verifikace modelů na základě terénních dat.

Na semináři bude v první části příspěvku prezentován přehled aktuálně měřených dat s předpokladem jejich využití pro modelování především proudění podzemní vody, ale též napjatosti a tepelného pole. Obsahem druhé části bude řešení úlohy proudění jako prostředku identifikace hydraulických vlastností prostředí z hodnot přítoku do tunelu ve dvou variantách, analytické řešení ve 2D a numerické řešení na 3D geometrii skutečného terénu. V závěru bude nastíněna struktura dalších modelových úloh, které budou řešeny i dalšími zahraničními týmy v rámci projektu Decovalex, zejména s využitím databáze puklin pozorovaných na stěně tunelu a zahrnutím vzájemného ovlivnění proudění, tepla a napjatosti (sdružené úlohy).

Literatura

[1] Klomínský a kol.: Studium dynamiky puklinové sítě granitoidů ve vodárenském tunelu Bedřichov v Jizerských horách, etapa 2006–2008, 2008, zpráva SÚRAO.

Poděkování: Tato práce byla realizována za podpory státních prostředků České republiky v rámci projektu VaV „Pokročilé sanační technologie a procesy“ č. 1M0554 – program MSMT „Výzkumná centra“ a projektu SÚRAO na základě smlouvy č. 2009/012/Mi.

MODELOVÁNÍ TOKŮ POMOCÍ SOFTWARE FLOW123D SE ZAPOČTENÍM NEJISTOT VSTUPNÍCH PARAMETRŮ – PŘÍPADOVÁ STUDIE

JOSEF CHUDOBA

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: josef.chudoba@tul.cz*

Klíčová slova: Flow123D, normální rozdělení, vícerozměrné normální rozdělení, beta rozdělení, riziková analýza, bezpečnostní analýza.

Abstrakt

Pro modelování toků v horninovém prostředí využívá software Flow123D následujících vstupů: geometrie sítě, materiálové konstanty horniny, počáteční a okrajové podmínky úlohy.

Předpokladem modelu jsou známé vstupní hodnoty okrajových podmínek a materiálových konstant horniny. Tento požadavek však obecně není splněn. Výsledkem modelované úlohy je konstantní koncentrace látky v daném čase a místě.

V řadě úloh nejsou vstupní parametry úlohy přesně známé. Standardně je možné vstupy definovat pomocí střední, minimální a maximální hodnoty parametru, nebo pomocí střední hodnoty a rozptylu. Vstupní parametry lze popsat například pomocí beta rozdělení nebo (vícerozměrného) normálního rozdělení. Výsledkem úlohy vycházející z upravených vstupních parametrů je funkce koncentrace látky v daném čase a místě.

Modelování nejistot vstupních parametrů je využitelné při rizikových a bezpečnostních analýzách, kdy je nutné stanovit pravděpodobnost s jakou může nastat nějaká popsaná nežádoucí událost.

Literatura

- [1] O. Severýn, M. Hokr, J. Královcová, J. Kopal, M. Tauchman: Flow123D Numerical simulation software for flow and solute transport problems in combination of fracture network and continuum, zpráva Technická univerzita v Liberci.
- [2] J. Hátle, J. Likeš: Základy počtu pravděpodobnosti a matematické statistiky, SNTL Praha, 1972.
- [3] J. Anděl: Matematická statistika, SNTL Praha 1978.
- [4] URL: <<http://www.weibull.com>>.

Poděkování: Tento práce byla realizována za podpory státních prostředků České republiky v rámci projektu VaV „Pokročilé sanační technologie a procesy“ č. 1M0554 – program MŠMT „Výzkumná centra“.

NUMERICAL MODEL OF INFILTRATION PROCESS IN UNSATURATED SOIL AND INVERSE PROBLEM

PAVOL KIŠON

*Department of Mathematical Analysis and Numerical Mathematics,
Faculty of Mathematics, Physics and Informatics,
Comenius University, Bratislava
e-mail: pavol.kison@gmail.com*

JOZEF KAČUR

*Department of Mathematical Analysis and Numerical Mathematics,
Faculty of Mathematics, Physics and Informatics,
Comenius University, Bratislava
e-mail: jozef.kacur@fmph.uniba.sk*

Keywords: infiltration process, numerical modeling, inverse problem.

Abstract

This contribution deals with the numerical modeling of infiltration process in unsaturated region and the solution of the inverse problem. The model is based on the Richard's nonlinear equation with Van Genuchten soil parameters ansatz [1].

This mathematical model represents a strongly nonlinear and degenerated parabolic equation with free boundary. The determination of soil parameters we realize via Levenberg-Marquardt method. The proposed method requires only simple measurements.

References

- [1] Van Genuchten: A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils, *Soil. Sci. Soc. Am. J.* 44 (1980), pp. 892–898.
- [2] D. Constaes, J. Kačur: Determination of soil parameters via the solution of inverse problems in infiltration, *Computational Geoscience* 5 (2001), pp. 25–46.
- [3] J. Šimůnek, J. R. Nimmo: Estimating soil hydraulic parameters from transient flow experiments in a centrifuge using parameter optimization technique, *Water Resources Research*, 41 (2005), W04015.

POVRCHOVĚ UPRAVENÉ NANOČÁSTICE ŽELEZA PRO SANACI PODZEMNÍCH VOD

ŠTĚPÁNKA KLÍMKOVÁ, MIROSLAV ČERNÍK, JAROSLAV NOSEK, TOMÁŠ PLUHAR

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci*

*e-mail: {stepanka.klimkova; miroslav.cernik; jaroslav.nosek1;
tomas.pluhar}@tul.cz*

Abstrakt

Schopnost nanočástic elementárního železa (NZVI) poměrně rychle a účinně odstraňovat chlorované uhlovodíky v kontaminované podzemní vodě je v dnešní době známa a výsledky z pilotních aplikací jsou nadějně. Dechloračních účinků železa, které je prakticky netoxické, se již delší dobu využívá při konstrukci propustných reaktivních bariér plněných železnými pilinami. Výhoda nanočástic spočívá nejen v jejich vyšší reaktivitě, ale také v jejich mobilitě horninovým prostředím, což umožňuje aplikaci nanočástic in-situ přímým vtlačáním do vrtu.

S ohledem na reálnou aplikaci NZVI je třeba brát v úvahu, že ve srovnání s makroskopickým železem, vykazují nanočástice o rozměrech desítek až stovek nm specifické fyzikálně-chemické, zejména katalytické a magnetické, vlastnosti, související s vysokou aktivitou atomů na povrchu částic. Z důvodu velkého měrného povrchu částic je jejich povrchová energie značná a nanočástice mají tendenci agregovat, protože mezi jednotlivými částicemi působí přitažlivé síly. Nevýhodou povrchově neupraveného NZVI je jeho poměrně rychlá oxidace, která způsobuje nejen ztrátu redukční síly nanočástic, ale změnou povrchového náboje částic mají zoxidované částice větší sklon k agregaci a k ulpívání na materiálu, jehož póry mají procházet. Agregáty lze těsně před aplikací mechanicky rozrušit pomocí ultrazvuku a do značné míry i intenzivním mícháním, ale po aplikaci NZVI do podzemního prostředí už nikoliv. Rovněž přílišná reaktivita NZVI přináší komplikace. Aby tedy byla aplikace nanočástic při odstraňování kontaminantů z horninového prostředí více efektivní, je třeba vytvořit stabilní vodnou disperzi povrchově upraveného NZVI.

Na Technické univerzitě v Liberci probíhá výzkum, jehož záměrem je upravit pomocí surfaktantů, (ko)polymerů, olejů a dalších látek povrchové vlastnosti dostupných nanočástic s ohledem na ekonomickou dostupnost povrchových činidel a jejich neškodnost pro životní prostředí.

Vlastnosti různých typů železných nanočástic lze stanovit pomocí různých analytických metod a experimentů. Z naměřených výsledků je možné posuzovat vhodnost povrchové úpravy nebo hodnotit aplikovatelnost této dekontaminační metody. Na TUL pro tyto účely slouží přístroj Zetasizer Nano ZS, který umožňuje měřit velikost částic a stanovit ζ -potenciál. Další metodou využívanou pro odhad velikosti nanočástic a disperzity suspenze, je stanovení průběhu sedimentačních křivek. Účinnost a kinetiku reakce modifikovaného NZVI s vybranými kontaminanty lze odhadnout pomocí vsádkových experimentů. Prostřednictvím kolonových experimentů je možné posoudit mobilitu modifikovaného NZVI v horninovém prostředí. Pomocí sady geochemických programů The Geochemist's Workbench lze modelovat reakce nanoželeza s kontaminanty a složkami podzemního prostředí a vytvářet diagramy převažující existence oxidačních stavů železa v různém prostředí a iontové síle.

Naším hlavním cílem je optimalizovat tuto relativně novou sanační technologii.

TRANSPORT NA SLOŽITÉ PUKLINOVÉ SÍTI – NĚKTERÉ ASPEKTY RYCHLOSTI VÝPOČTU

JIŘÍ KOPAL

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: jiri.kopal@tul.cz*

Klíčová slova: Flow123D, explicitní upwind schéma, metoda konečných objemů, Decovalex.

Abstrakt

Príspevek se zabývá problematikou transportních úloh v kontextu migrace látek v podzemních vodách. Důraz je kladen především na problematiku časové náročnosti dlouhodobých simulací úloh s vysokým počtem elementů a velkým rozptylem CFL (Courant-Friedrich-Levy) čísla na řešené oblasti. Na složitější geometrii a úloze konvekce, řešené softwarem Flow123D, bude na explicitním upwind schématu metody konečných objemů ukázána jeho interpretace užitím metod lineární algebry. Problém efektivně využívá procesor počítače a vykazuje významné zrychlení oproti předchozí implementaci. Testovací úlohou bude rozsáhlá 2D síť 1D puklin projektu Decovalex.

Literatura

[1] I. S. Duff, A. M. Erisman, J. K. Reid: Direct Methods for Sparse Matrices, Oxford University Press, Oxford, 2003.

Poděkování: Tento výzkum je realizován za podpory státních prostředků České republiky v rámci projektu VaV „Pokročilé sanační technologie a procesy“ č. 1M0554 – program MŠMT „Výzkumná centra“.

REUSABLE CLASSES IN DESIGNING OF MATHEMATICAL MODELS

DALIBOR FRYDRYCH, IGOR KOPETSCHKE

*Institute of Novel Technologies and Applied Informatics,
Technical University of Liberec*

e-mail: {dalibor.frydrych; igor.kopetschke}@tul.cz

Keywords: object-oriented programming, design pattern, mathematical model.

Abstract

In this contribution, the use of object approach [1] and design patterns [2] is presented in mathematics model implementation. It focuses on the contribution of programming opposite the interface using polymorphisms and analysis of possibilities brought by design pattern use.

Standard (two-step) implementation process is extended by two further abstraction steps when implementing mathematics models. Standard procedure transforms, in the first step, parts of reality into individual instances. Consequently, in the second step, a general description – class is searched for. Implementation of mathematics models begins by the search for an applicable mathematics definition (equations) of the process. The search for an apt process in solving of acquired equations is the second step. Both of these two steps are abstract and require a very specific way of thinking, quite different from the programmer's thinking. A process, when the mathematics model is built up and the implementation for this model is carried out, is common. Changes in the event description, eventually the use of different mathematics appliance, mean a brand new implementation. This process is not very effective.

This article presents Framework DF2EM. Framework DF2EM focuses on finite methods implementation, which work with space discretization (Finite Element, Finite Volume, etc.). It brings complex approach to mathematics models. It defines basic model parts on a clearly abstract level, describes their interface and allows implementation of concrete classes.

References

- [1] B. Eckel: Thinking in Java, [online], [cit. 2009.07.29], URL: <<http://mindview.net/Books/TIJ4/>>.
- [2] E. Gamma, R. Helm, R. Johnson, J. Vlissides: Design Patterns: Elements of Reusable Object-Oriented Software, Addison-Wesley, 1994, ISBN 978 0201633610.

Acknowledgement: This work has been realized under the state subsidy of the Czech Republic within the research and development project “Advanced Remediation Technologies and Processes Centre” 1M0554 – Programme of Research Centres supported by Ministry of Education.

DRAIN ELEMENT IN THE BOUNDARY ELEMENTS METHOD

KAREL KOVÁŘÍK

Faculty of Civil Engineering

University of Žilina

e-mail: kovarik@fstav.uniza.sk

Keywords: boundary element, model, drain.

Abstract

The boundary elements method was developed in parallel with the finite element method. We can even find traces that prove that the idea is older, its predecessor being the boundary integrals method. It is based on the inverse formulation of weighting residuals method. The principles of the finite element method were added to the boundary integrals method in the 1980s and this revised method was called the boundary element method. This method was aimed to solve problems in homogenous domains and it presents even greater difficulties than the aforementioned methods when coping with the non-homogeneities which are so characteristic of the groundwater hydraulics. Despite the complications, this method is successfully used in groundwater hydraulics (see [1]).

The drainage is used very often like a cheap instrument for decreasing the groundwater level. The hydraulic modelling of the drainage in the FEM or FDM is not so easy and results are disputable. Therefore we developed the special drain element for 2D and 3D models based on the boundary element method. This element seems to be very useful tool for computing the discharge of drains and it was used also in other practical solutions, e.g. to compute the inflow of groundwater into a planned tunnel.

References

- [1] K. Kovařík: Numerical Models in Groundwater Pollution, Springer Verlag, 2000.

Acknowledgement: This work was supported by European Fund of Regional Development under the contract N^o 26220120027 Centre of Excellence in Transport Engineering.

PROUDĚNÍ A TRANSPORT LÁTEK V RŮZNÝCH TYPECH HOSTITELSKÉ HORNINY S RŮZNOU GEOLOGICKOU STAVBOU

JIŘINA KRÁLOVCOVÁ

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: jirina.kralovcova@tul.cz*

Klíčová slova: simulace, podzemní proudění, transport, rozpukané porézní prostředí.

Abstrakt

Příspěvek se zabývá simulací proudění a transportu rozpuštěných látek v saturovaném horninovém prostředí, které obsahuje jak porézní horninu, tak i hydrogeologicky významné tektonické poruchy. Pro účely studia proudění a transportu látek v rozpukaném porézním prostředí a pro stanovení vlivu heterogenit typu puklina nebo horninové rozhraní byla připravena sada výpočetních sítí reprezentujících hypotetické bloky hornin s různou geologickou stavbou. Na připravených sítích byly provedeny simulační výpočty proudění a transportu zahrnujícího prostou advekci, a to při různých okrajových podmínkách jak proudění, tak i transportu. Ve výsledcích simulačních výpočtů byly sledovány především průtok oblastí, toky jednotlivými částmi hranice, střední rychlost migrace kontaminující látky, globální charakter šíření kontaminace a to především s ohledem na přítomnost či nepřítomnost té které heterogenity. Výpočty byly prováděny pomocí simulačního kódu Flow123D [1], který umožňuje kombinaci elementů různých dimenzí v rámci jediné výpočetní sítě, za účelem studia chování pole vzdálených interakcí hlubinného úložiště nebezpečných odpadů [2]. Příspěvek obsahuje přehled simulačních výpočtů včetně základních vstupních parametrů a výsledných charakteristik a hodnocení vlivu uvažovaných heterogenit za daných podmínek.

Literatura

- [1] J. Královcová, J. Maryška, O. Severýn, J. Šembera: Formulation of mixed-hybrid FE model of flow in fractured porous medium, Proc. of Int. Conf. Numerical Mathematics and Advanced Application, Spain, pp. 1184–1191, 2005.
- [2] J. Královcová, J. Kopal, J. Maryška, D. Pelikánová, L. Zedek: Hodnocení procesů transportu RN v různých typech hostitelské horniny s různou geologickou stavbou, Dílčí závěrečná zpráva DZZ 2.6. projektu Výzkum procesů pole vzdálených interakcí HÚ vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů. Liberec, 2009, 38 stran.

Poděkování: Tato práce byla realizována za podpory státních prostředků České republiky v rámci projektu VaV „Pokročilé sanační technologie a procesy“ č. 1M0554 – program MŠMT „Výzkumná centra“.

AN ADAPTIVE TIME STEP FOR THE NUMERICAL SOLUTION OF THE RICHARDS' EQUATION

MICHAL KURÁŽ

*Department of Water Resources and Environmental Modeling,
Faculty of Environmental Sciences,
Czech University of Life Sciences Prague
e-mail: michal.kuraz@fsv.cvut.cz*

Keywords: Richards' equation, nonlinearity, adaptive time step, mass balance, solution accuracy.

Abstract

A flow in a variably saturated porous environment when satisfying conditions of the Darcy's law is possible to describe by the Richards' equation. The numerical solution of this problem suffers with various difficulties due to nonlinearities based on a nonlinear empirical hydrogeological laws. It is the constitutive law describing a relation between pore suction pressure and a water content, in our case described by the van Genuchten formula [1] and the relation between an unsaturated hydraulic conductivity and a pore suction pressure described by the Mualem form [2].

A time derivate term is usually approximated by a linear function due to the commonly used implicit Euler scheme approximations. Due to a various torsions of the van Genuchten law for different water content values this method brings mass balance errors as mentioned in [3]. A method to control error of this approximation based on an adaptive time step is presented in this paper.

References

- [1] M. T. H. van Genuchten: Calculating the Unsaturated Hydraulic Conductivity with a New, Closed Form Analytical Model Research Report 78-WR-08, Water Resources Program, Department of Civil Engineering, Princeton University, Princeton, 1978.
- [2] Y. Mualem: A New Model for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Porous Media, Water Resources Research, 12 (1976), pp. 513–522.
- [3] M. A. Celia, E. T. Bouloutas, R. L. Zarba: A General Mass-Conservative Numerical Solution for the Unsaturated Flow Equation, Water Resources Research, 26 (1990), pp. 1483–1496.

OBJEKTIVĚ ORIENTOVANÝ POHLED NA SDRUŽENÉ PROCESY

JAN LISAL

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: jan.lisal@tul.cz*

DALIBOR FRYDRYCH

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: dalibor.frydrych@tul.cz*

Klíčová slova: sdružené procesy, metoda konečných prvků, objektivě orientované programování.

Abstrakt

Objektivě-orientované programování (OOP) vyžaduje změnit úhel pohledu na vytvářený systém modelování Metodou konečných prvků (MKP). Sdružené procesy z pohledu OOP, jimiž se zabývá tato práce, je nutné pochopit jako několik relativně oddělených částí a ne jako soustavu rovnic závislých jedna na druhé. Hlavní myšlenkou převodu sdruženého procesu do OOP je separace dvou částí rovnice na hlavní fyzikální proces (primární proces) a vazební část (sekundární proces), která ovlivňuje jiný primární proces. Takto již vytvořené stavební entity není nutné při dalším použití v jiném modelu znovu programovat. Při rozšíření modelu o nový fyzikální proces, redukuje se tento požadavek pouze na implementaci samotného primárního procesu a v případě požadavku určitých vazeb i sekundárních procesů. Získáváme tím databázi primárních a sekundárních procesů pro rychlejší implementaci nového modelu.

DISCONTINUOUS GALERKIN RELAXATION ALGORITHM FOR SOLUTE TRANSPORT IN POROUS MEDIA

MOHAMMED SHUKER MAHMOOD

Department of Applied Mathematics,

Faculty of Mechanical Engineering

University of Žilina

e-mail: mahmoodm@fstroj.uniza.sk

Keywords: fluid flow in porous media, convection-diffusion, discontinuous Galerkin method, approximation methods.

Abstract

We continue investigation of discontinuous Galerkin method for a nonlinear parabolic convection dominated equation with memory term which models the transport of contaminant in porous media with nonequilibrium adsorption. The numerical scheme is fulfilled by combining the DG – Discontinuous Galerkin Method with an efficient relaxation algorithm that recently developed. Numerical results show the efficiency of our scheme.

References

- [1] M. Mahmood: Solution of a strongly nonlinear convection-diffusion problems by a conservative Galerkin-characteristics method, *Numerische Mathematik*, Vol. 112, No. 4 (2009), pp. 601–636.
- [2] M. Mahmood: Discontinuous Galerkin relaxation algorithm for solute transport in porous media, *PAMM Proc. Appl. Math. Mech.* Vol. 7, Issue 1, (2008) pp. 2020095–2020096.

Acknowledgement: This work was supported in part by the scientific grant agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic (ME SR) and of Slovak Academy of Sciences (SAS); 1/0843/08 (21).

ÚČELOVĚ ODVOZOVANÉ GEOINFORMATICKÉ MODELY V PROCESU PŘEDZPRACOVÁNÍ DAT PRO TVORBU GEOMETRIE MODELOVÝCH SÍTÍ

BLANKA MALÁ

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: blanka.mala@tul.cz*

JAN PACINA

*Fakulta životního prostředí,
Univerzita Jana Evangelisty Purkyně, Ústí nad Labem
e-mail: jan.pacina@ujep.cz*

ZUZANA CAPEKOVÁ

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: zuzana.capekova@tul.cz*

Klíčová slova: geoinformatický model, geometrie modelové sítě, předzpracování dat, účelový model, geoinformatická generalizace.

Abstrakt

Z pohledu geoinformatického modelování je výhodné na předzpracování dat geografické povahy pro účely následného matematického modelování nahlížet jako na tvorbu odvozených účelových modelů. Možnost vytváření účelových odvozených modelů je podmíněna prvotní výstavbou geoinformačního systému invariantního vůči množině aplikací, které budou data organizovaná v GIS využívat. Konkrétním příkladem je model vytvářený v procesu výstavby geometrie modelové sítě.

V příspěvku jsou shrnuty základní požadavky na geoinformační systém využívaný jako báze dat pro odvozování variant modelů a jejich naplnění daty. Vlastní odvozování účelových modelů nutně zahrnuje postupy geoinformatické generalizace, které jsou zásadní hlavně v odvozování modelů pro tvorbu geometrií modelových sítí. Příspěvek blíže seznamuje s obecným postupem odvozování účelových modelů na příkladu konkrétních dat vybraných modelových lokalit. V rámci předzpracování dat jsou využívány analytické funkce GIS, velkou výhodou je možnost v libovolném okamžiku vizualizovat databázi a tím udržet kontrolu nad návazností odvozovaného modelu na modelovanou realitu.

Postupy geoinformatického modelování v rámci tvorby geometrie modelových sítí je možné v určitých fázích zautomatizovat, čímž se odvozování modelů na základě správně vytvořeného originálního geoinformačního systému může dostat až roviny uživatelské. Postupy automatizace výstavby geometrie sítě a automatizace naplnění sítě daty jsou v současnosti testovány a uváděny do praxe.

Poděkování: Tento příspěvek byl realizován za podpory státních prostředků České republiky v rámci projektu VaV „Pokročilé sanační technologie a procesy“ č. 1M0554 – program MŠMT „Výzkumná centra“.

MĚŘENÍ VELIKOSTNÍ DISTRIBUCE NANOŽELEZA

JAROSLAV NOSEK

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: jaroslav.nosek1@tul.cz*

ŠTĚPÁNKA KLÍMKOVÁ, MIROSLAV ČERNÍK

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: {stepanka.klimkova; miroslav.cernik}@tul.cz*

Abstrakt

Při posuzování vhodnosti použití železných nanočástic (NZVI) pro sanaci kontaminovaného horninového prostředí, je třeba znát dva základní parametry ovlivňující efektivitu této metody: i) reaktivitu NZVI s cílovým kontaminantem v daném prostředí a ii) migrační schopnosti železných nanočástic horninou.

Mobilita nanočástic horninou ovlivňuje způsob jejich aplikace a správné dimenzování sanačního systému (metodu injektáže, množství injektážních vrtů a jejich vzdálenost). Bez ohledu na typ horninového prostředí má zásadní vliv na migraci částic jejich velikost (velikostní distribuce). Podle velikosti migrující částice se uplatňují různé mechanismy, které mohou mít za následek její vypadnutí z konvekčního proudění a tedy zmenšení migračního horizontu. Pro vodné prostředí je optimální velikost železných částic z pohledu migrace na úrovni 100 nm.

S velikostí migrujících částic úzce souvisí i jejich tendence ke shlukování a vytváření větších agregátů. Tento proces rozhodující měrou závisí na velikosti povrchového náboje částic v daném prostředí.

Pro měření těchto dvou parametrů železných nanočástic je na Technické univerzitě v Liberci používán přístroj Zetasizer Nano ZS firmy Malvern UK – model ZEN3601, který umožňuje měření velikostní distribuce částic rozptýlených v kapalinách metodou dynamického rozptylu světla „DLS“ a měření jejich zetapotenciálu metodou fázové analýzy rozptýleného světla. Na posteru budou prezentovány výsledky získané při měření několika typů nanoželez.

Literatura

- [1] Kompendium Sanační technologie, Ekomonitor 2005, Czech Rep., ISBN 80-86832-15-5.
- [2] Zetasizer Nano – příručka uživatele, Malvern Instruments, 2007, UK.

Poděkování: Tento výzkum je realizován za podpory státních prostředků České republiky v rámci projektu VaV „Pokročilé sanační technologie a procesy“ č. 1M0554 – program MŠMT „Výzkumná centra“, grantem GA ČR 102/08/H081 v rámci projektu „Nestandardní aplikace fyzikálních polí – analogie, modelování, ověřování a simulace“ a projektem MŠMT ČR FRVŠ 2008/98/A „Vytvoření laboratoře experimentální techniky“.

MOŽNOSTI AUTOMATIZACE VÝSTAVBY MODELOVÝCH SÍTÍ V RÁMCI PROJEKTU POOHŘÍ

JAN PACINA

*Fakulta životního prostředí,
Univerzita Jana Evangelisty Purkyně, Ústí nad Labem
e-mail: jan.pacina@ujep.cz*

BLANKA MALÁ

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: blanka.mala@tul.cz*

ZUZANA CAPEKOVÁ

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: zuzana.capekova@tul.cz*

Klíčová slova: modelové sítě, automatická výstavba, GIS, Poohří.

Abstrakt

V rámci projektu Poohří jsou pro účely zatápění povrchových hnědouhelných dolů modelovány a predikovány pohyby nadzemních i podzemních vod a jejich předpokládané chemické složení. Zájmové území je severo-západní část Poohří – od řeky Ohře směrem na severozápad – až po hřebeny Krušných hor. Pro potřeby modelování proudění vod v územích postižených těžbou hnědého uhlí (SHR) je potřeba připravit modelové sítě pokrývající danou zájmovou oblast.

S ohledem k rozloze území, bylo nutné zautomatizovat výstavbu geometrie modelových sítí. V rámci přípravné fáze projektu Poohří byla provedena rešerše dostupných softwarových produktů, které byly potenciálně schopné automatizovaně vytvářet plnohodnotně prostorové sítě (většina GIS produktů generuje tzv. 2.5D modely). Z dostupných zdrojů byly vybrány tři komerční produkty a jeden SW šířený na základě OPEN-GNU licence. Vzhledem k výsledkům testování jsme přikročili k budování vlastní aplikace s důrazem na rychlou tvorbu sítí v požadovaném formátu, různého rozsahu a hustot z identických vstupních dat. Za tímto účelem byly vytvořeny dvě aplikace, které jsou aktuálně testovány na různých typech vstupních dat.

Poděkování: Tento výzkum je realizován za podpory státních prostředků České republiky v rámci projektu VaV „Pokročilé sanační technologie a procesy“ č. 1M0554 – program MSMT „Výzkumná centra“.

MULTI-COMPARTMENT MODEL OF A PHOTO-BIOREACTOR: INTERRELATION BETWEEN EXPERIMENTAL TECHNIQUE USED FOR MODEL VERIFICATION AND MODELLING APPROACH

ŠTĚPÁN PAPÁČEK

*Institute of Physical Biology,
University of South Bohemia, Nové Hradý
e-mail: papacek@greentech.cz*

VÁCLAV ŠTUMBAUER, DALIBOR ŠTYS

*Institute of Physical Biology,
University of South Bohemia, Nové Hradý
e-mail: stumbav@gmail.com; stys@jcu.cz*

Keywords: Multi-compartment model, bioreactor, CFD, RTD.

Abstract

Modelling of (photo)bioreactors is of major interest in bioreaction engineering and environmental technology. Computational Fluid Dynamics (CFD) may simulate via User Defined Functions (UDF) almost everything but could be expensive for everyday use. Moreover, it needs an experimental verification, e.g. by Residence Time Distribution (RTD) measurements. RTD measurements can be interpreted and simulated using compartmental models which consist in interconnection of elementary zones, so-called well mixed units.

In our previous paper [1], we provided research concerning a methodology designed to reduce the complexity of PDE based high-dimensional process model to a hybrid Multi-compartment/CFD model leading to an ODE system. The present investigation is aimed at developing a new straightforward algorithm for the automatic generation of compartment size based both on RTD curves and the adequate description of the evolved bio-processes. The derivation is based on the calculation of a scalar field of the smallest characteristic reaction time (according to the bioprocess model, see e.g. [2]), as well as on the characteristic mixing time derived from RTD curves.

References

- [1] Š. Papáček, D. Štys, P. Dolínek, K. Petera: Multicompartment/CFD modelling of transport and reaction processes in Couette-Taylor photobioreactor, *Applied and Computational Mechanics*, 1 (2007), pp. 577–586.
- [2] B. Reháček, S. Čelikovský, Š. Papáček: Model for Photosynthesis and Photoinhibition: Parameter Identification Based on the Harmonic Irradiation O₂ Response Measurement, *Joint Special Issue of TAC IEEE and TCAS IEEE* (2008), pp. 101–108.

Acknowledgement: This research was supported by grant N_o MSM 600 7665808.

MODEL AGREGACE ŽELEZNÝCH NANOČÁSTIC

DANA PELIKÁNOVÁ ROSICKÁ

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: dana.pelikanova@tul.cz*

JAN ŠEMBERA

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: jan.sembera@tul.cz*

Klíčová slova: matematický model, agregace, nanočástice, nulmocné železo.

Abstrakt

Nanočástice nulmocného železa (NZVI; nanoscale zero valent iron) jsou v současné době používány pro dekontaminaci podzemních půd a vod. Problémem sanačních zásahů s použitím NZVI je však transport těchto částic. Dochází u nich totiž k agregaci, částice se shlukují, a tím se jejich transport porézním prostředím omezuje.

V této práci odvozujeme příčiny agregace NZVI a na základě těchto příčin sestavujeme matematický model míry agregace NZVI za daných podmínek. Míru agregace vyjadřuje takzvaný koeficient přestupu, který spolu s hustotou částic v roztoku určuje pravděpodobnost shluku dvou částic. Tento koeficient přestupu byl odvozen pro základní procesy, a to pro sedimentaci, Brownův pohyb a rychlostní gradient kapaliny, která částici unáší (publikováno v [1]). V práci odvozujeme koeficient přestupu pro další procesy, které mají nezanedbatelný vliv na agregaci železných nanočástic. Model poté aplikujeme v programu pro výpočet transportu rozpuštěných látek gen-tran a výsledky porovnáváme s výsledky z experimentálních kolonových zkoušek.

Literatura

[1] J. Buffle, H. Van Leeuw: Environmental Particles, Lewis publishers, Vol. 2 (1993), pp. 353–360.

Poděkování: Tento výzkum je realizován za podpory státních prostředků České republiky v rámci projektu VaV „Pokročilé sanační technologie a procesy“ č. 1M0554 – program MŠMT „Výzkumná centra“.

SEDIMENTAČNÍ ANALÝZA ŽELEZNÝCH NANOČÁSTIC

TOMÁŠ PLUHAR

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: tomas.pluhar@tul.cz*

ŠTĚPÁNKA KLÍMKOVÁ, MIROSLAV ČERNÍK, JAROSLAV NOSEK

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: {stepanka.klimkova; miroslav.cernik; jaroslav.nosek1}@tul.cz*

Abstrakt

Referát je zaměřen na porovnání rychlosti sedimentace různých typů železných nanočástic. Rychlost sedimentace částic souvisí s jejich velikostí a rychlostí jejich agregace, a proto je možné z rychlosti sedimentace odvodit a posoudit určité vlastnosti železných nanočástic. U hrubých disperzí je možno provádět sedimentační analýzu v gravitačním poli. Částice dostatečně velké hmotnosti působením gravitačního pole sedimentují a v systému se tak po určité době ustaví rovnovážné rozdělení částic. Vlivem gravitace se částice zpočátku pohybuje zrychleně, při malých rychlostech převažuje gravitační síla zmenšená o vztlak. Se zrychlováním pohybu vzrůstá úměrně i třecí síla a v určitém okamžiku se mohou síly vyrovnat. V ustáleném stavu se částice pohybuje konstantní rychlostí, která je v případě sedimentace kulovitých částic nepřímo úměrná viskozitě prostředí a přímo úměrná rozdílu hustot disperzního podílu a disperzního prostředí a čtverci poloměru částice

$$\nu_{\text{sed}} = \frac{2}{9} \frac{\rho - \rho_0}{\mu_0} r^2 g.$$

Tento přístup je ale bohužel použitelný pouze pro relativně velké částice. V disperzním systému se po určitém čase sedimentace ustavuje sedimentační rovnováha. V systému dochází k charakteristickému rozdělení částic (v závislosti na výšce). Tato situace nastane ve stadiu, při kterém se vyrovná sedimentační rychlost s difúzním tokem. V tomto případě se ustaví tzv. dynamická rovnováha, kterou lze popsat diferenciální rovnicí

$$\left(\frac{\partial \log(c_i)}{\partial y} \right)_{T,p} = - \frac{\nu_i g (\rho_i - \rho_0)}{k_B T}.$$

Tento vztah ovšem platí opět pouze ve zjednodušené představě monodisperzního systému. U polydisperzního systému je popis rozdělení mnohem složitější.

K měření sedimentačních křivek bylo zkonstruováno zařízení, které po připojení k PC umožňuje v reálném čase snímat aktuální hodnotu nasedimentovaných částic. V čase $t = 0$ je do odměrného válce nadávkováno určité množství (většinou cca 1 g) železné suspenze. Od tohoto okamžiku je průběh sedimentace monitorován také pomocí fotoaparátu, jehož režim je rovněž ovládán prostřednictvím PC. Po ukončení experimentu je odebrán vzorek ke stanovení celkové koncentrace železa metodou ICP-OES. Naměřená data jsou následně porovnávána s výsledky měření velikosti nanočástic metodou DLS.

ALGORITHM FOR REDUCING THE FRACTURE NETWORK IN 2D FLOW PROBLEM

PETR RÁLEK

*Institute of Novel Technologies and Applied Informatics,
Technical University of Liberec
e-mail: petr.ralek@tul.cz*

Keywords: fracture network flow, Decovalex.

Abstract

The aim of the contribution is to describe the reduction algorithm for 2D fracture network. The original task is a part of Task C of Decovalex-2011 project [1] which is the numerical modeling of water flow in fractured rock environment with mechanical loading.

We deal with the case study, which is the 2D square domain of fractured rock. The distribution of the fractures is stochastically generated with the knowledge of the lengths and apertures of fractures (the stochastic parameters come from real observations). Then, in the preprocessing phase, the combination of the GIS software and our own C++ code is used to generate the geometry and the mesh of the fractured rock domain. Numerical solution is obtained by the hybrid FEM implemented in C++ code Flow123D with an external algebraic solver ISOL (both developed in TUL). The post-processing uses the GMSH code.

The problem is quite large due to the many intersections between fractures and the great difference in size between the smallest and the largest fracture. The efficient computation of mechanical loading brings the necessity of reducing the number of the fractures. Reduction algorithm, combining the blanking and the composition of the fractures and their intersections, is used to reduce the mesh complexity. Parameters of the algorithm should be chosen so that the algorithm preserves the global hydraulic behavior of the domain.

In the contribution, the case studies showing the typical behavior of the reduction algorithm are presented and their influence to the total fracture flow is shown.

References

- [1] John A. Hudson, Ivars Neretnieks, Lanru Jing: DECOVALEX-2011 project, Technical Definition of the 2-D BMT Problem for Task C, May 2008.

Acknowledgement: This research was realized under the state subsidy of the Czech Republic within the research and development project “Advanced Remediation Technologies and Processes Centre” 1M0554 – Programme of Research Centres supported by Ministry of Education.

ZDROJE HYDROGEOLOGICKÝCH DAT PRO MATEMATICKÉ MODELY PROUDĚNÍ PODZEMNÍCH VOD V PUKLINOVÉM PROSTŘEDÍ GRANITOIDŮ

LENKA RUKAVIČKOVÁ

Česká geologická služba,

Geologická 6, 152 00 Praha 5

e-mail: lenka.rukavickova@geology.cz

Abstrakt

Puklinové prostředí granitoidů je a v budoucnu bude stále více využíváno pro umístění podzemních zásobníků a úložišť nebezpečných látek včetně radioaktivních odpadů. Matematický model proudění podzemních vod a včetně predikce případného transportu kontaminantů je součástí bezpečnostní analýzy úložišť. Realnost modelu závisí na množství a kvalitě vstupních geologických dat. Rychlost a prostorové rozložení toku podzemních vod jsou dány zejména propustností (hydraulickou vodivostí) hornin. V současné době jsou pro území České republiky k dispozici 2 základní zdroje dat. Jsou to data z výzkumných lokalit melechovský masiv na Českomoravské vrchovině a Potůčky-Podlesí v Krušných horách a dále regionální data z hydrogeologické databáze Geofondu. V prvním případě se jedná o výsledky etážových (na izolovaných úsecích vrtů) hydrodynamických zkoušek ve vrtech do hloubky 200–300 m, v případě druhém o výsledky čerpacích zkoušek na vodárenských objektech s hloubkovým dosahem do 100 m. Hydraulická vodivost se u granitů pohybuje v širokém rozpětí 8 řádů od 10^{-12} po 10^{-5} $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$. Od spodních částí granitových těles se výrazně odděluje zóna připovrchového rozvolnění puklin s hydraulickou vodivostí v řádu 10^{-8} $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ a vyšší. Tato zóna sahá u většiny granitových těles do hloubky 100–120 m. Hydraulická vodivost významných puklin a poruchových zón je obvykle o jeden až dva, výjimečně o tři řády vyšší než okolního horninového prostředí. Vyšší hydraulickou vodivost mají hrubozrnné, porfyrické typy granitů a granitoidy s vyšším obsahem křemene. Pokud srovnáme hodnoty hydraulické vodivosti z detailního měřítka výzkumných lokalit a regionálního hodnocení vrtů z databáze Geofondu, je patrný rozdíl dvou řádů mezi průměrnými hodnotami ve srovnatelných hloubkových úrovních. Hodnoty získané detailním testováním jsou výrazně nižší. Zjištěný rozdíl je způsoben efektem měřítka měření a účelovým umístěním hydrogeologických vrtů. Pro hloubky pod 200–300 m nejsou pro území České republiky relevantní data k dispozici, modely hlubších částí granitových masivů v současné době musí vycházet z expertních odhadů založených na zhodnocení dat ze zahraničních lokalit.

Poděkování: Tento výzkum je realizován za podpory státních prostředků České republiky v rámci projektu VaV „Pokročilé sanační technologie a procesy“ č. 1M0554 – program MŠMT „Výzkumná centra“.

A COMPARISON OF SOME ANALYTICAL AND COMPUTATIONAL A POSTERIORI ERROR ESTIMATES IN THE FEM

KAREL SEGETH

*Faculty of Science, Humanities and Education,
Technical University of Liberec
e-mail: karel.segeth@tul.cz*

Keywords: finite element method, a posteriori error estimate, adaptive hp -method, second order Poisson equation, stationary Navier-Stokes equations, convection-diffusion-reaction equation.

Abstract

Adaptive finite element methods belong to very important numerical procedures for solving ordinary as well as partial differential equations arising from various technical applications. The classical a posteriori error estimates are oriented to the use in h -methods, are usually constructed only for lowest-order polynomial approximation, and often depend on unknown constants or functions. The contemporary higher-order adaptive hp -methods, on the other hand, require new computational approaches in a posteriori error estimation.

In this review paper, we present several error estimation procedures for some particular simple and more complicated partial differential problems with special regards to the needs of the hp -method. Some error estimators for the second order Poisson equation with Dirichlet and Neumann boundary conditions, error estimates for the stationary Navier-Stokes equations, and two error estimation approaches for the stationary convection-diffusion-reaction equation are considered. We compare the advantages and drawbacks of a posteriori error estimators concerned.

Acknowledgement: This research was realized under the state subsidy of the Czech Republic within the research and development project “Advanced Remediation Technologies and Processes Centre” 1M0554 – Programme of Research Centres supported by Ministry of Education.

IMPACT OF PLANNED UNDERGROUND RAILWAY STRUCTURE ON THE GROUNDWATER REGIME

ANDREJ ŠOLTÉSZ

*Department of Hydraulic Engineering,
Faculty of Civil Engineering,
Slovak University of Technology in Bratislava
e-mail: andrej.soltesz@stuba.sk*

DANA BAROKOVÁ

*Department of Hydraulic Engineering,
Faculty of Civil Engineering,
Slovak University of Technology in Bratislava
e-mail: dana.barokova@stuba.sk*

Keywords: interaction of surface- and groundwater, underground wall, numerical modelling, finite element method.

Abstract

In frame of improvement the transport infrastructure in Bratislava region the connection between the airport and railway network is planned. One part of it should be built in the underground tunnel along the Carpathian Mountains and it will affect the groundwater flow regime. This was the reason for establishing a 2D finite element numerical model for evaluating the impact of the railway tunnel on the groundwater level regime as well as for introduction of technical measures to neglect the impacts. Such a model was elaborated and the results have shown the analysis, prognosis as well as possibilities of control the groundwater regime in the aquifer affected by a railway tunnel construction.

References

- [1] Royal Haskoning: Triwaco a Simulation Package for Groundwater, Version 3.0 internal release RH, Royal Haskoning division Water, Rotterdam, Netherlands, 2002.
- [2] J. Škvarka, Š. Kupka, M. Takáčová, G. Šikula: Štúdia prepojenia železničného koridoru TEN-T s letiskom a železničnou sieťou v Bratislave, Záverečná správa z orientačného inžiniersko-geologického prieskumu, EKOGEOS Zakladanie spol. s r. o., Bratislava, 2007, 129 s.
- [3] A. Šoltész, D. Baroková: Modelové riešenie vplyvu trasy prepojenia železničného koridoru TEN-T na prúdenie a režim podzemných vôd v úseku žel. st. Bratislava Predmestie – žel. st. Bratislava Filiálka, KHTE SvF STU, Bratislava 2007, 65 s.
- [4] A. Šoltész, D. Baroková: Modelové riešenie vplyvu trasy železničného koridoru TEN-T na prúdenie a režim podzemných vôd v úseku Dunaj – súbeh so železničnou traťou Petržalka, čiastkové riešenie pre „Štúdiu prepojenia železničného koridoru TEN-T s letiskom a železničnou sieťou v Bratislave“, čiastková správa, SvF STU v Bratislave 2008, 54 s.

Acknowledgement: This work was supported by VEGA, N^o 1/4210/07.

MODIFIED SEMISMOOTH NEWTON METHOD: NUMERICAL EXAMPLES

STANISLAV SYSALA

*Institute of Geonics,
Academy of Sciences of the Czech Republic, Ostrava
e-mail: sysala@ugn.cas.cz*

Keywords: semismooth Newton method, damping, elasto-plasticity, hardening.

Abstract

The semismooth Newton method generalize the Newton method for non-differentiable operators. The method has been developed for both finite and infinite dimensional cases and the corresponding superlinear convergence results have been presented. Various modifications of the Newton method have been introduced to ensure the global convergence.

In the contribution, the non-linear variational equations with strictly monotone, semismooth operators are considered. These problems can be equivalently formulated as minimization problems with the corresponding potential functional. Such problems are for example solved in each time step of some elasto-plastic models with hardening.

The semismooth Newton is suitable for such problems. The proposed modification is based on the damping coefficients which are computed in each Newton iteration by the minimization of the potential functional in the suitable descent direction. The global convergence and local superlinear convergence results hold for such a method.

The method is numerically illustrated on the model problem which is related to the Äspö pillar stability experiment described in Task B of the Decovalex-2011 project. The elasto-plasticity approach is used here.

Acknowledgement: This research was supported by the Academy of Sciences of the Czech Republic, Institutional Research Plan No AV0Z 30860518.

GEOINFORMATIC MODELING IN THE CONSTRUCTION OF MODEL MESHES

DAVID TOMČÍK

*Institute of Novel Technologies and Applied Informatics,
Technical University of Liberec
e-mail: david.tomcik@gmail.com*

BLANKA MALÁ

*Institute of Novel Technologies and Applied Informatics,
Technical University of Liberec
e-mail: blanka.mala@tul.cz*

Keywords: geoinformatic, GIS, geometry, mesh, GEO, Convert2GEO.

Abstract

This work deals with the construction of model meshes from the beginning, when there are initial data (e.g. drilling, the site boundary), up to the model geometry and the model mesh. Initially, the work is an introduction to the basics of geographic information systems and their resources. There are listed tools, methods and systems which can be used in creating models. The work solves the construction of model geometry on the basis of data preprocessing in GIS and automatic transfer from GIS into GEO. Theoretical solution provides an overview of the procedures and methods (Delaunay triangulation, interpolation of the surface), which lead to the successful construction of model mesh. Practical solution more precisely specifies requirements for the preparation of data in GIS, so that they are acceptable for Convert2GEO, which is executing the transfer. Finally, the work describes verification of the solution and documentation of procedures on specific dates and a summary of benefits of the work.

References

- [1] David Tomčík: Geoinformatické modelování v procesu výstavby modelových sítí, Master thesis, TUL 2009, URL: <<http://knihovna.tul.cz>>.

Acknowledgement: This work was realized under the state subsidy of the Czech Republic within the research and development project “Advanced Remediation Technologies and Processes Centre” 1M0554 – Programme of Research Centres supported by Ministry of Education.

NUMERICAL SOLUTION OF TRANSPORT PROBLEMS WITH ADSORPTION

ERIKA TROJÁKOVÁ

*Department of Mathematical Analysis and Numerical Mathematics,
Faculty of Mathematics, Physics and Informatics,
Comenius University, Bratislava
e-mail: erika.trojakova@fmph.uniba.sk*

Keywords: contaminant transport, adsorption, direct problems, inverse problems, moving grids.

Abstract

A precise numerical scheme is developed for the simulation of contaminant transport with nonequilibrium adsorption. This method uses the idea of moving grids, to catch the sharp fronts of the solution. We have applied the method of moving grids to the equation with the nonequilibrium adsorption, transformed by a bipolar transformation. Examples are provided to show, that this method of solving the direct problem is precise and suitable for parameter identification in inverse problems. Much work was done for equations without nonequilibrium adsorption [1].

In solving the inverse problems, identification of parameters of the aquifer or the contaminant material, is required. This solving needs multiple solving of direct hydrogeological problems. We use the modern method of Levenberg-Marquardt [2].

References

- [1] B. Malengier: On numerical methods for direct and inverse convection-diffusion problems, Ghent, 2006.
- [2] Wenyu Sun, Ya-Xiang Yuan: Optimization theory and methods, LLC, 2006.

RELIABILITY OF NUMERICAL MODEL OF A CAPILLARY BARRIER

DAGMAR TRPKOŠOVÁ

*Institute of Hydrogeology, Engineering Geology and Applied Geophysics,
Faculty of Science,
Charles University in Prague
e-mail: dagmartrpkosova@seznam.cz*

JIŘÍ MLS

*Institute of Hydrogeology, Engineering Geology and Applied Geophysics,
Faculty of Science,
Charles University in Prague
e-mail: mls@natur.cuni.cz*

Keywords: numerical modelling, capillary barrier, suction apparatus, large scale tipping trough.

Abstract

The report deals with the issue of simulating numerically a surface sealing system of landfills – a capillary barrier. A capillary barrier is a kind of landfill closing consisting of two soil layers: the fine-grained capillary layer overlying the coarse-grained capillary block. Water enters the barrier from above and, under conditions of sufficiently low pressure head, flows along the capillary layer rather than across into the capillary block.

In this study, a numerical model is introduced based on hydraulic characteristics obtained by means of measurements of samples [1] of capillary barrier materials. To make a comparison possible, samples of a laboratory investigated barrier were measured [2]. Two laboratory experiments testing a simple and a combined capillary barrier were repeated numerically and a good agreement of computed and measured results was found. These results suggest that the laboratory investigation of a capillary barrier could be replaced by measuring the material samples and subsequent numerical modelling.

References

- [1] J. Havlíček, A. Myslivec: The Influence of Saturation and Stratification on the Shearing Properties of Certain Soils, In Proc. 6th Int. Conf. Soil and Mech. Found. Engineering, Vol. 1, Univ. of Toronto Press, pp. 235–239, 1965.
- [2] S. Wohnlich: Untersuchungsbericht-Dichtigkeitsnachweis der Kombikapillardichtung (KKD), in 3. Kipprinnenversuch, Bochum, 2006.

Acknowledgement: This article is based upon work supported by the Grant Agency of the Czech Republic under grant N^o 205/09/1879 and by the Ministry of Education of the Czech Republic under grant N^o MSM0021620855.

METHODS AND TOOLS OF THE IMPACT ASSESSMENT OF ENGINEERING BARRIERS ON REMOTE INTERACTIONS IN THE ENVIRONMENT OF A DEEP GEOLOGICAL DISPOSAL

MICHAL VANĚČEK

*ISATech, s. r. o.,
S. K. Neumannova 1316, 532 07 Pardubice
e-mail: vanecek@isatech.cz*

MARTIN MILICKÝ

*ProGeo, s. r. o.,
Tiché údolí 113, 252 63 Roztoky u Prahy
e-mail: progeo@mbox.vol.cz*

JIŘÍ ZÁRUBA

*ARCADIS Geotechnika, a. s.,
Geologická 988, 152 00 Praha 5
e-mail: pzaruba@arcadisgt.cz*

Keywords: disposal of radioactive waste, deep geological disposal, engineering barriers, numerical model, fracture flow.

Abstract

The project arises from a social need for a safe and long-term solution of the disposal of radioactive waste in the geological environment. Aside from ensuring the fixation of radionuclides, the security of the deposit is secured by engineering and natural barriers. They represent both the applied sealants infilling the handling and technological space of the underground structure, and the properties of the geological environment. In the Czech Republic only the geological environment, the homogeneity of which is violated by fracture flow systems, comes into consideration as the host environment. When evaluating the secure function of barrier systems it will be necessary to use mathematical modeling, using specialized software and experts on modeling. The research project co-financed by the Ministry of Industry and Trade of the Czech Republic aims to evaluate the ability of modeling experts to capture the hydrodynamic and hydrogeochemical reality of a chosen environment through a model solution. To fulfill the set objective it was necessary to implement a wide range of geological-prospecting methods. Hydrogeological conditions and selected hydrogeochemical parameters of the sight of interest are treated by long-proven software tools used for the evaluation of deep structures in granite formations in Sweden by the SKB company.

The work was carried out both in laboratory conditions, and in the field scale. The aim of the laboratory tests was to prepare and verify the method of monitoring the required parameters before the execution of the more time-consuming and economically challenging field test. Each test, whether laboratory or field, was implemented in the hydrodynamic model of a fracture flow environment. During the field work a test site has been selected and the fracture flow system defined as accurately as possible. In the context of the laboratory tests various grout mixtures and sealants were tested as engineering barriers. Along with the field pumping and trace tests the hydraulic and migration characteristics of the fracture flow system were calculated. The change of the environment's migration parameters due to the application of selected engineering barriers was examined in the final tracing test. The results obtained were used to calibrate the "basic" numerical model. Experience and information obtained during the calibration of the basic numerical model has been the springboard for setting a new "prediction" numerical model using a professional estimate for some input parameters. The results of the prediction model are compared with the parameters measured in the field.

Acknowledgement: This work was supported by Ministry of Industry and Trade of the Czech Republic under Project 1H-PK/31.

EXPERTOMICA METABOLOMICS PROFILING: USING PROBABILISTIC SYSTEM APPROACH TO GATHER MORE INFORMATION FROM LC-MS

JAN URBAN

*Institute of Physical Biology,
University of South Bohemia, Nové Hradý
e-mail: urban@greentech.cz*

JAN VANĚK

*Institute of Physical Biology,
University of South Bohemia, Nové Hradý
e-mail: vanekyj@kky.zcu.cz*

DALIBOR ŠTYS

*Institute of Physical Biology,
University of South Bohemia, Nové Hradý
e-mail: stys@jcu.cz*

Keywords: analytical chemistry, mass-spectrometry, metabolomics, stochastic approach.

Abstract

Mass spectrometers are sophisticated, fine instruments which are essential in many applications. However, their results are usually interpreted in a rather primitive way, without knowing the errors of the results we get. We divide the output of the LC-MS into three parts: (a) useful output, (b) random noise (c) systematic noise of the instrument related to the particular experiment. The characteristics of the systematic noise change in time and depend on the analyzed substance. This allows us to quantify the probability of error and, at the same time, retrieve some peaks which get lost in the noise when using the existing methods. There are no user-defined parameters. Our software tool, Expertomica [1], automatically evaluates the given instrument, detects compounds and calculates the probability of individual peaks.

References

[1] URL: <<http://sourceforge.net/projects/expertomica-eda>>.

Acknowledgement: This work was supported by grant HCTFOOD A/CZ0046/1/0008 of EEA funds.

ENTROPY FLUXES IN CELL CULTURE AND ITS PARALLEL IMPLEMENTATION ON GPU

JAN URBAN

*Institute of Physical Biology,
University of South Bohemia, Nové Hradý
e-mail: urban@greentech.cz*

JAN VANĚK

*Institute of Physical Biology,
University of South Bohemia, Nové Hradý
e-mail: vanekyj@kky.zcu.cz*

DALIBOR ŠTYS

*Institute of Physical Biology,
University of South Bohemia, Nové Hradý
e-mail: stys@jcu.cz*

Keywords: Image analysis, phase-contrast microscopy, Shannon's entropy.

Abstract

This document presents a novel method of entropy fluxes as the evaluation of changes between images based on Shannon's entropy [1]. The method is developed specially for microscopy images captured in phase-contrast mode [2]. But it can be used in many others applications. Illustrative description of using entropy is proposed in the paper and advantages are discussed. This method simply shows the amount of observable information transferred in discrete time period from/to the location represented by current pixel, for all pixels in the images. This transfer corresponds to the matter exchanges, shape development and intracellular mobling. The noise contribution is significantly decreased and details, even the non-conspicuous are preserved. Finally, implementation on graphics cards to overpass higher computation requirements of the algorithm is described.

References

- [1] C. E. Shannon: A mathematical theory of communication, Bell System Technical Journal, Vol. 27, pp. 379–423 and 623–656, July and October, 1948.
- [2] J. Urban, J. Vanek, D. Štys: Preprocessing of microscopy images via Shannon's entropy, Pattern Recognition and Information Processing, Minsk, Belarus, 2009.

Acknowledgement: This work was supported by grant HCTFOOD A/CZ0046/1/0008 of EEA funds and GAJU grant 091/2008/P of Grant Agency of South Bohemia.

VYUŽITÍ ANALÝZY HLAVNÍCH KOMPONENT PRO REDUKCI DIMENZE REAKČNĚ-TRANSPORTNÍHO MODELU

LUKÁŠ ZEDEK

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: lukas.zedek@tul.cz*

JAN ŠEMBERA

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci
e-mail: jan.sembera@tul.cz*

Klíčová slova: analýza hlavních komponent, redukce dimenze, lineárně korelovaná data.

Abstrakt

Jedním ze základních problémů spojených s modelováním reakčně-transportních, přírodních procesů je příliš velká dimenze problému, která je vyvolaná velkým množstvím v modelu zohledněných a do modelu zahrnutých vlivů.

Pro snížení výpočetní náročnosti modelu je často nutné dimenzi problému snížit. Toho může být dosaženo za pomoci standardních algebraických nástrojů jakým je například analýza hlavních komponent (PCA; principal component analysis). Aby mohla být použita analýza hlavních komponent, musí být zpracovávána data lineárně korelovaná. Korelovanost dat umožňuje redukci dimenze problému pomocí projekce dat do některého z podprostorů lineárního obalu vektory reprezenovaných dat.

V prezentaci bude představen námi použitý postup redukce dimenze transportní části problému zachovávající v největší možné míře informace pro reakční část problému a výsledky jeho aplikace na simulace konkrétní lokality.

Literatura

- [1] Lars Elden: Matrix Methods in Data Mining and Pattern Recognition, SIAM Publications, Philadelphia PA, 2007.
- [2] Milan Meloun, Jiří Militký: Kompendium statistického zpracování dat, Academia, Praha, 2006.

Poděkování: Tento výzkum je realizován za podpory státních prostředků České republiky v rámci projektu VaV „Pokročilé sanační technologie a procesy“ č. 1M0554 – program MŠMT „Výzkumná centra“.

B. SEZNAM ÚČASTNÍKŮ

HANA BAAROVÁ

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: hana.baarova@tul.cz

DANA BAROKOVÁ

Stavebná fakulta, Katedra hydrotechniky,
Slovenská technická univerzita v Bratislave,
Radlinského 11, 813 68 Bratislava
e-mail: dana.barokova@stuba.sk

RADIM BLAHETA

Ústav geoniky, v. v. i.,
Akademie věd České Republiky,
Studentská 1768, 708 00 Ostrava Poruba
e-mail: blaheta@ugn.cas.cz

JAN BŘEZINA

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: jan.brezina@tul.cz

ZUZANA CAPEKOVÁ

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: zuzana.capekova@tul.cz

MIROSLAV ČERNÍK

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: miroslav.cernik@tul.cz

DALIBOR FRYDRYCH

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: dalibor.frydrych@tul.cz

JIŘÍ HAVLÍČEK

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: jiri.havlicek@tul.cz

MILAN HOKR

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: milan.hokr@email.cz

JOSEF CHUDOBA

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: josef.chudoba@tul.cz

PAVOL KIŠON

Fakulta matematiky, fyziky a informatiky,
Univerzita Komenského v Bratislave,
Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
e-mail: pavol.kison@gmail.com

ŠTĚPÁNKA KLÍMKOVÁ

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: stepanka.klimkova@tul.cz

JIŘÍ KOPAL

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: jiri.kopal@tul.cz

IGOR KOPETSCHKE

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: igor.kopetschke@tul.cz

KAREL KOVÁŘÍK

Stavebná fakulta,
Žilinská univerzita,
Univerzitná 8215/1, 010 26 Žilina
e-mail: kovarik@fstav.uniza.sk

JIŘINA KRÁLOVCOVÁ

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: jirina.kralovcova@tul.cz

MICHAL KURÁŽ

Fakulta životního prostředí,
Česká zemědělská univerzita v Praze,
Kamýcká 129, 165 21 Praha 6 – Suchdol
e-mail: michal.kuraz@fsv.cvut.cz

TOMÁŠ LEVITNER

Ústav fyzikální biologie,
Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích
Zámek 136, 373 33 Nové Hradky
e-mail: levitner@greentech.cz

JAN LISAL

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: jan.lisal@tul.cz

MOHAMMED SHUKER MAHMOOD

Strojnícka fakulta, Katedra aplikovanej matematiky,
Žilinská univerzita,
Univerzitná 8215/1, 010 26 Žilina
e-mail: mahmoodm@fstroj.uniza.sk

BLANKA MALÁ

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: blanka.mala@tul.cz

JIŘÍ MARYŠKA

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: jiri.maryska@tul.cz

JIŘÍ MLS

Přírodovědecká Fakulta,
Univerzita Karlova v Praze,
Albertov 6, 128 43 Praha 2
e-mail: mls@natur.cuni.cz

JAROSLAV NOSEK

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: jaroslav.nosek1@tul.cz

JAN PACINA

Fakulta životního prostředí,
Univerzita Jana Evangelisty Purkyně,
Králova výšina 3132/7, 400 96 Ústí nad Labem
e-mail: jan.pacina@ujep.cz

ŠTĚPÁN PAPÁČEK

Ústav fyzikální biologie,
Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích
Zámek 136, 373 33 Nové Hradky
e-mail: papacek@{greentech.cz; alga.cz}

MARTIN PLEŠINGER

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: martin.plesinger@tul.cz

DANA PELIKÁNOVÁ ROSICKÁ

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: dana.pelikanova@tul.cz

TOMÁŠ PLUHÁŘ

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: tomas.pluhar@tul.cz

PETR RÁLEK

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: petr.ralek@tul.cz

LENKA RUKAVIČKOVÁ

Česká geologická služba,
Geologická 6, 152 00 Praha 5

e-mail: lenka.rukavickova@geology.cz

KAREL SEGETH

Fakulta přírodovědně-humanitní a pedagogická,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: karel.segeth@tul.cz

STANISLAV SYSALA

Ústav geoniky, v. v. i.,
Akademie věd České Republiky,
Studentská 1768, 708 00 Ostrava Poruba
e-mail: sysala@ugn.cas.cz

JAN ŠEMBERA

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: jan.sembera@tul.cz

ANDREJ ŠOLTÉSZ

Stavební fakulta, Katedra hydrotechniky,
Slovenská technická univerzita v Bratislave,
Radlinského 11, 813 68 Bratislava
e-mail: andrej.soltesz@stuba.sk

ILONA ŠKARYDOVÁ

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: ilona.skarydova@tul.cz

DALIBOR ŠTYS

Ústav fyzikální biologie,
Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích
Zámek 136, 373 33 Nové Hradky
e-mail: stys@jcu.cz

DAVID TOMČÍK

Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: david.tomcik@gmail.com

ERIKA TROJÁKOVÁ

Fakulta matematiky, fyziky a informatiky,
Univerzita Komenského v Bratislave,
Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
e-mail: erika.trojakova@fmph.uniba.sk

DAGMAR TRPKOŠOVÁ

Přírodovědecká Fakulta,
Univerzita Karlova v Praze,
Albertov 6, 128 43 Praha 2
e-mail: dagmartrpkosova@seznam.cz

JAN URBAN

*Ústav fyzikální biologie,
Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích
Zámek 136, 373 33 Nové Hradky
e-mail: urban@greentech.cz*

JAN VANĚK

*Ústav fyzikální biologie,
Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích
Zámek 136, 373 33 Nové Hradky
e-mail: vanekyj@kky.zcu.cz*

LUKÁŠ ZEDEK

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: lukas.zedek@tul.cz*

VRATISLAV ŽABKA

*Ústav nových technologií a aplikované informatiky,
Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1
e-mail: vratislav.zabka@tul.cz*

C. PROGRAM SEMINÁŘE

Pondělí, 21. září 2009

11:00–12:30	registrace, od 11:30 oběd
-------------	----------------------------------

12:30–12:50	zahájení semináře – slovo organizátorů úvodem
-------------	--

_____předseda: JIŘÍ MARYŠKA

12:50–13:30	RADIM BLAHETA	<i>Effective properties of heterogeneous geo-materials: Computational aspects and applications</i> (str. 4)
13:40–14:00	KAREL KOVÁŘÍK	<i>Drain element in the boundary elements method</i> (str. 15)

14:05–14:35	přestávka s kávou, čajem a zákusky (30 min.)
-------------	---

_____předseda: JAN ŠEMBERA

14:35–14:55	LENKA RUKAVIČKOVÁ	<i>Zdroje hydrogeologických dat pro matematické modely proudění podzemních vod v puklinovém ...</i> (str. 27)
15:00–15:20	DAGMAR TRPKOŠOVÁ	<i>Methods and tools of the impact assessment of engineering barriers on remote interactions ...</i> (str. 34)
15:25–15:45	MILAN HOKR	<i>Využití dat z monitoringu ve vodárenském tunelu Bedřichov – návrhy úloh pro numerické ...</i> (str. 9)

15:50–16:20	přestávka s kávou a čajem (30 min.)
-------------	--

_____předseda: MILAN HOKR

16:20–16:40	JIŘINA KRÁLOVCOVÁ	<i>Proudění a transport látek v různých typech hostitelské horniny s různou geologickou stavbou</i> (str. 16)
16:45–17:05	JOSEF CHUDOBA	<i>Modelování toků pomocí softwaru Flow123D se započtením nejistot vstupních parametrů ...</i> (str. 10)

18:00–00:00	uvítací banket spojený s prezentací posterů
-------------	--

_____seznam přihlášených posterů

JIŘÍ HAVLÍČEK	<i>Změna hydraulických parametrů v modelu proudění diskrétní puklinovou sítí při zahrnutí vlivu mechaniky</i> (str. 8)
ŠTĚPÁNKA KLÍMKOVÁ	<i>Povrchově upravené nanočástice železa pro sanaci podzemních vod</i> (str. 12)
JAROSLAV NOSEK	<i>Měření velikostní distribuce nanoželeza</i> (str. 21)
TOMÁŠ PLUHÁŘ	<i>Sedimentační analýza železných nanočástic</i> (str. 25)
PETR RÁLEK	<i>Algorithm for reducing the fracture network in 2D flow problem</i> (str. 26)
DAGMAR TRPKOŠOVÁ	<i>Reliability of numerical model of a capillary barrier</i> (str. 33)

Úterý, 22. září 2009

předseda: RADIM BLAHETA

09:00–09:40	KAREL SEGETH	<i>A comparison of some analytical and computational a posteriori error estimates in the FEM</i> (str. 28)
09:50–10:10	STANISLAV SYSALA	<i>Modified semismooth Newton method: Numerical examples</i> (str. 30)

10:15–10:45	přestávka s kávou, čajem a chlebíčky (30 min.)	
-------------	---	--

předseda: KAREL SEGETH

10:45–11:05	ERIKA TROJÁKOVÁ	<i>Numerical solution of transport problems with adsorption</i> (str. 32)
11:10–11:30	MOHAMMED MAHMOOD	<i>Discontinuous Galerkin relaxation algorithm for solute transport in porous media</i> (str. 19)
11:35–11:55	JIRÍ KOPAL	<i>Transport na složité puklinové síti – některé aspekty rychlosti výpočtu</i> (str. 13)

12:00–13:00	přestávka na oběd (60 min.)	
-------------	------------------------------------	--

předseda: DALIBOR FRYDRYCH

13:00–13:20	JAN BŘEZINA	<i>Použití knihovny PETSc pro řešení rozsáhlých úloh podzemního proudění</i> (str. 5)
13:25–13:45	JAN LISAL	<i>Objektově orientovaný pohled na sdružené procesy</i> (str. 18)
13:50–14:10	IGOR KOPETSCHKE	<i>Reusable classes in designing of mathematical models</i> (str. 14)

14:15–14:45	přestávka s kávou, čajem a zákusky (30 min.)	
-------------	---	--

předseda: JIŘINA KRÁLOVCOVÁ

14:45–15:05	BLANKA MALÁ	<i>Účelově odvozované geoinformatické modely v procesu předzpracování dat pro tvorbu ...</i> (str. 20)
15:10–15:30	JAN PACINA	<i>Možnosti automatizace výstavby modelových sítí v rámci projektu Poochří</i> (str. 22)

15:35–16:05	přestávka s kávou a čajem (30 min.)	
-------------	--	--

předseda: KAREL KOVÁŘÍK

16:05–16:25	PAVOL KIŠON	<i>Numerical model of infiltration process in unsaturated soil and inverse problem</i> (str. 11)
16:30–16:50	MICHAL KURÁŽ	<i>The adaptive time discretisation of a numerical solution to the Richards' equation</i> (str. 17)

18:00–00:00	slavnostní večeře	
-------------	--------------------------	--

Středa, 23. září 2009

předseda: DALIBOR ŠTYS

09:00–09:20	ŠTĚPÁN PAPÁČEK	<i>Multi-compartment model of a photo-bioreactor: Interrelation between experimental technique ...</i> (str. 23)
09:25–09:45	JAN URBAN	<i>Expertomica metabolomics profiling: Using probabilistic system approach to gather more ...</i> (str. 35)
09:50–10:10	JAN VANĚK	<i>Entropy fluxes in cell culture and its parallel implementation on GPU</i> (str. 36)

10:15–10:45	přestávka s kávou, čajem a chlebičky (30 min.)	
-------------	---	--

předseda: ŠTĚPÁN PAPÁČEK

10:45–11:05	ANDREJ ŠOLTÉSZ	<i>Impact of planned underground railway structure on the groundwater regime</i> (str. 29)
11:10–11:30	HANA BAAROVÁ	<i>An approach to evaluate a geochemical model – simulated results vs. results of chemical analyses</i> (str. 3)
11:35–11:55	LUKÁŠ ZEDEK	<i>Využití analýzy hlavních komponent pro redukci dimenze reakčně-transportního modelu</i> (str. 37)

12:00–13:00	přestávka na oběd (60 min.)	
-------------	------------------------------------	--

předseda: MIROSLAV ČERNÍK

13:00–13:20	DALIBOR FRYDRYCH	<i>Verification of bellows air spring shape model</i> (str. 7)
13:25–13:45	DANA ROSICKÁ	<i>Model agregace železných nanočástic</i> (str. 24)

13:50–14:00	zakoření semináře – slovo oorganizátorů závěrem	
-------------	--	--

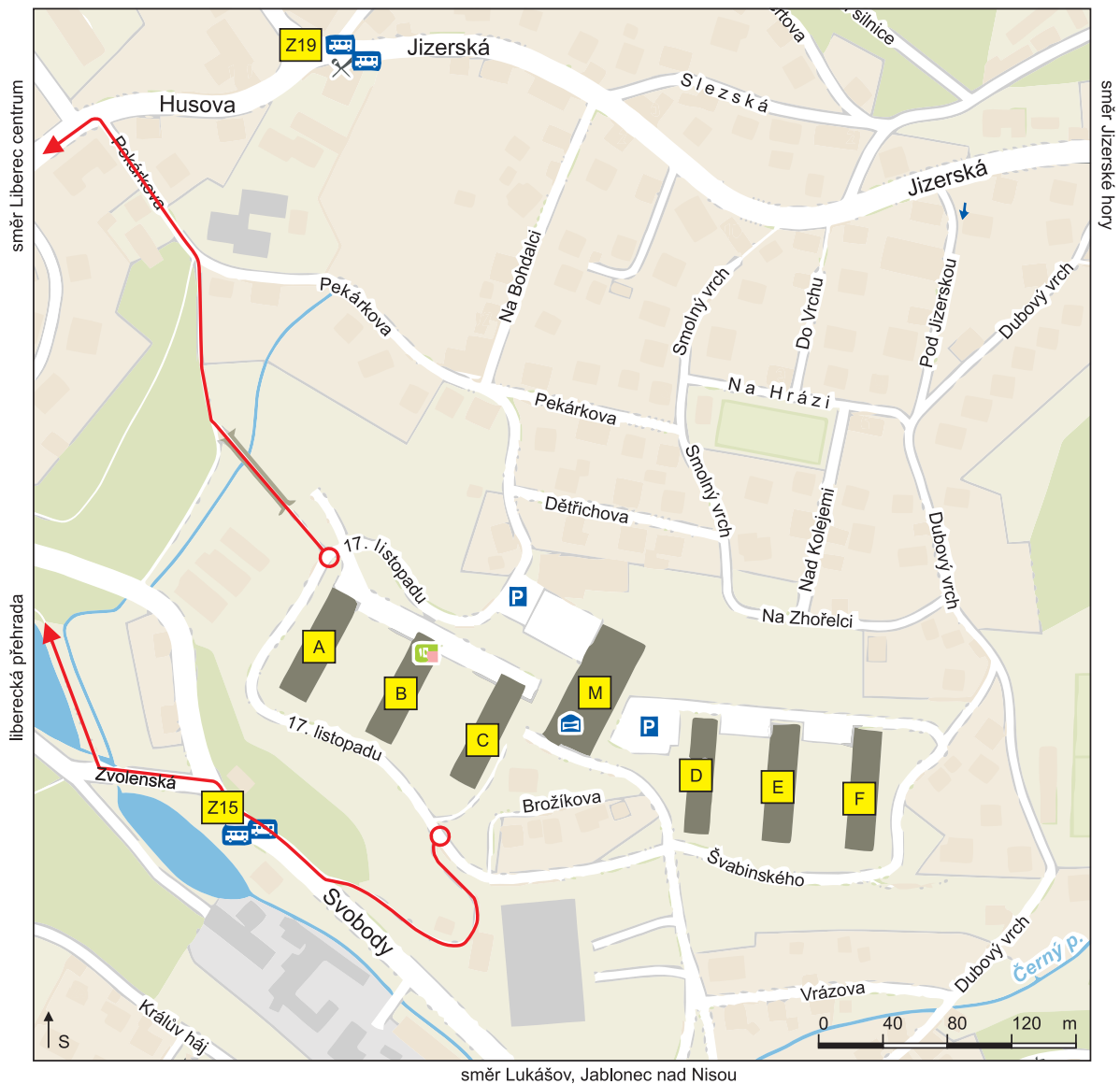
předseda: BLANKA MALÁ

14:00–14:20	DAVID TOMČÍK	<i>Geoinformatic modeling in the construction of model meshes</i> (str. 31)
14:25–14:45	ZUZANA CAPEKOVÁ	<i>Aplikace podporující efektivní návrh modelu pro metodu konečných prvků</i> (str. 6)

září 2012	šťastnou cestu a za tři roky nashledanou :o)	
-----------	---	--

D. TECHNICKÉ INFORMACE

Plánek areálu semináře



Legenda

A — F	budovy kolejí A až F
M	obědová menza a místo konání semináře
Z15	zastávka autobusů MHD linek č. 15 a 29
Z19	zastávka autobusů MHD linky č. 19

Doprava do centra Liberce

Spojení s centrem města je možné

- buď *autobusem* městské hromadné dopravy (MHD) linky č. 15 a 29 (a případně 19)
- nebo *pěšky* (cca 30 min.), a to buď „horní cestou“ přes t. zv. lávku nebo „dolní cestou“ kolem liberecké přehrady, viz plánek.

Obědy, uvítací banket a slavnostní večeře

- Obědy budou podávány v menze v areálu kolejí Harcov, budova M.
- Uvítací banket spojený s prezentací posterů proběhne v pondělí večer v budově M.
- Slavnostní večeře proběhne v úterý večer v restauraci U potůčku.

Restaurace, hospůdky a další podniky skýtající kulturní vyžití v areálu a nejbližším okolí

Restaurace:

- restaurace Březová alej, na křižovatce u zastávky autobusů linky 19;
- restaurace Bílý mlýn, na křižovatce u zastávky autobusů linek 15 a 29;
- restaurace (hospoda) U Váchy, u parkoviště na ulici 17. listopadu, cca 40 m od zadního vchodu do budovy M;
- pizzerie v podchodu v budově M;
- delší procházkou směrem na Lukášov se v Harcově dostaneme k odbočce k restauraci U potůčku a hospůdce Na Zvěřínku;
- směrem na sídliště Králův háj se nachází hospůdka U Krakonoše (Krákora);
- směrem do centra Liberce se nedaleko hlavní budovy Technické Univerzity v Liberci nachází restaurace a hospůdka U Balcarů, a mnoho dalších.

Kulturní vyžití:

- hudební klub Vlák, budova kolejí A;
- hudební klub Had, budova kolejí D;
- studentská hospůdka Hroch, budova kolejí F;
- diskotéka S-klub, budova M;
- diskotéka Zanzibar, tamtéž co restaurace u Váchy, viz výše, a další.

Připojení k internetu

V celém areálu, ve kterém probíhá seminář, je zajištěno bezdrátové WiFi připojení k internetu prostřednictvím evropské akademické roamingové sítě EDUROAM, viz:

- <http://www.eduroam.cz> (<http://www.eduroam.org>);
- <http://liane.tul.cz/cz/Wi-Fi>;
- <http://liane.tul.cz/cz/Wi-Fi-Pokrytí> (budova M, konferenční centrum).

Kam v Liberci?

Pro inspiraci na náplň pondělního a středečního odpoledne doporučujeme navštívit informační stránky města Liberec. Za návštěvu v bezprostředním okolí areálu stojí:

- vodní nádrž Harcov (liberecká přehrada), základní kámen hráze byl položen 27. června 1903 a stavba byla dokončena 29. dubna 1904;
- Strossova vila, která je považovaná za jednu z nejpovedenějších funkcionalistických vil, v roce 1925 ji vyprojektoval Thilo Schoder z Gery a roku 1927 stavitel Adolf Burger dokončil, přezdívá se jí dům-panník, když později musel průmyslník Franz Stross kvůli svému židovskému původu odejít v roce 1937 do Argentiny, nechal si tam prý postavit přesnou kopii domu, nyní je ve vile sídlo KHS Libereckého kraje;
- Severočeské muzeum a muzejní knihovna sídlící v secesní budově postavené v letech 1897–1898 v romanticko-historizujícím stylu na křižovatce Masarykovy třídy a Vítězné ulice, kousek od hlavní budovy Technické univerzity v Liberci.

V centru města nebo v jeho bezprostředním okolí je možno navštívit:

- Náměstí Dr. Edvarda Beneše s novorenesanční budovou radnice postavenou v letech 1888–1891;
- Valdštejnské domky, zbytky trojice domů z let 1678, 1680 a 1681 stojící ve Větrné uličce sousedící s libereckým Sokolovským náměstím;
- Šolcův dům, dřevěný roubený patrový domek kupec plátka Bedřicha Šolce byl postaven v roce 1771, nyní v něm sídlí správa CHKO Jizerské hory;
- horský hotel Ještěd architekta Hubáčka (v pondělí lanovka nejždí).

Turistické informační centrum se nachází za radnicí směrem ke Krajské vědecké knihovně.

Místní speciality nejen do žaludku

V Lukášově se rozkládá v evropském kontextu významné naleziště kriticky ohroženého druhu šafránu, často považovaného za *šafrán Heuffelův* (též nazývaného *šafrán karpatský* neboť vyskytuje se zejména v Karpatech, *Crocus heuffelianus*), pozůstatek doby pole-dové, kdy se až k nám rozšířila stepní flóra z východních oblastí. Zde se mělo jednat o jeho nejzápadněji položené naleziště. Botanici však nejsou v přesném určení zdejšího druhu zajedno a hovoří též o křížencích pocházejících z alpských oblastí, což se zdá být pravděpodobnější. Rezervace zde byla vyhlášena již v roce 1948.

Opět v Lukášově se nalézá velmi významné, dobře zachovalé a nedávno objevené opevnění, dělostřelecké valy t. zv. *šance*, z doby tereziánských válek kolem roku 1750. Vojska Marie Terezie tvořená převážně chorvatskými pluky z Uher zde očekávala vpád vojsk pruských ve směru od Žitavy. Vojska tudy tehdy ale nakonec neprocházela a k bitvě v těchto místech nikdy nedošlo.

Směrem na Lukášov se též nachází rodiný minipivovar Vendelín, originální pivo (s proměnlivým počtem stupňů) je sporadicky k dostání též v areálu kolejí.

Technická univerzita
v Liberci



Fakulta mechatroniky,
informatiky
a mezioborových studií

Ústav nových technologií
a aplikované informatiky



Výzkumné centrum ARTEC:
Pokročilé sanační technologie
a procesy

Recenzovali: MILAN HOKR,
JAN ŠEMBERA.

Texty neprošly redakční úpravou ani jazykovou korekturou, za faktickou i jazykovou správnost odpovídají autoři jednotlivých příspěvků.

Sborník abstraktů semináře Simulace, Modelování a Nejrůznější Aplikace SIMONA 2009
výzkumného centra ARTEC „Pokročilé sanační technologie a procesy“ s otevřenou účastí.

Vydala: Technická univerzita v Liberci,
Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1,
v roce 2009.

Vydání: první, neprodejné.

Náklad: 60 výtisků.

Editoval a graficky upravil MARTIN PLEŠINGER © 2009.

Fotografii na přebalu pořídil a laskavě poskytl ZDENĚK POSPÍCHAL © 2005,

e-mail: zdeno@volny.cz,

www: <http://www.otraso.cz>.

Vysázeno systémem $\mathcal{A}\mathcal{M}\mathcal{S}$ — \LaTeX 2 ϵ .