Sborník příspěvků 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 Česká republika

Sborník příspěvků 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 Česká republika

## Editoři Milan Hokr, Martin Plešinger, Jan Šembera

Odborná recenze Milan Hokr, Jan Šembera

 $\odot\,$  Technická univerzita v Liberci — 2009

## Obsah

Hana Baarová · Jan Šembera	
An approach to evaluate a geochemical model-simulated results vs. results of che- mical analyses	9
Jan Březina Parallel Schur complements for mixed-hybrid discretization of fracture flow problem	ı 16
Petr Byczanski · Stanislav Sysala Modified semismooth Newton method: Numerical example	24
Dalibor Frydrych · Igor Kopetschke Reusable classes in designing of mathematical models	31
Dalibor Frydrych · Ludvík Prášil · Vladimír Kracík Verification of bellows air spring shape model	38
Jiří Havlíček · Milan Hokr Změna hydraulických parametrů v modelu proudění diskrétní puklinovou sítí při zahrnutí vlivu mechaniky	45
Josef Chudoba Modelování toků pomocí softwaru Flow123D se započtením nejistot vstupních parametrů – případová studie	52
Karel Kovářík Drain elements in the boundary elements method	59
Jiřina Královcová Proudění a transport látek v hornině s různou geologickou stavbou	66
Michal Kuráž An adaptive time discretisation to the numerical solution of the Richards' equa- tion	74
Jan Lisal · Dalibor Frydrych Objektově orientovaný pohled na sdružené procesy	81
Blanka Malá · Jan Pacina · Zuzana Capeková Účelově odvozované modely v procesu předzpracování dat pro tvorbu geometrie modelových sítí	87
Jaroslav Nosek · Štěpánka Klímková · Miroslav Černík Měření velikostní distribuce nanoželeza	94
Jan Pacina · Blanka Malá · Zuzana Capeková Možnosti automatizace výstavby modelových sítí v rámci projektu Poohří	98
Petr Rálek Algoritmus pro redukci puklinové sítě v úloze 2D proudění	104
Dana Rosická · Jan Šembera Model agregace železných nanočástic	111

Lenka	Rukavičková

Zdroje hydrogeologických dat pro matematické modely proudění podzemních vod v puklinovém prostředí granitoidů	119
Karel Segeth A comparison of some analytical and computational a posteriori error estimates in the FEM	126
David Tomčík · Blanka Malá Geoinformatické modelování v procesu výstavby modelových sítí	139
Erika Trojáková Metóda pohyblivých bodov pre úlohu transportu kontaminantu	145
Dagmar Trpkošová · Jiří Mls Reliability of numerical model of combined capillary barrier	152
Jan Urban · Jan Vaněk · Dalibor Štys Expertomica metabolomics profilling: Using probabilistic system approach to gat- her more information from LC-MS	162
Jan Urban · Jan Vaněk · Dalibor Štys Entropy fluxes in cell culture and its paralell implementation on GPU	170
Michal Vaněček · Martin Milický · Jiří Záruba Metody a nástroje hodnocení vlivu inženýrských bariér na vzdálené interakce v prostředí hlubinného úložiště	178
Lukáš Zedek · Jan Šembera Použití analýzy hlavních komponent pro redukci dimenze reakčně-transportního modelu	189

8\_\_\_\_\_



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

# An approach to evaluate a geochemical model–simulated results vs. results of chemical analyses

Hana Baarová  $\cdot$  Jan Šembera

Abstract Understanding geochemical processes in groundwater aquifers contaminated by in-situ leaching is a crucial point in choosing the best remediation strategy. Geochemical models of such systems are often large-scale, both in space and time. Computing a geochemical model of such a system in its whole natural complexity would be very time-consuming. It is essential to reduce the number of chemical components in the model, however, with a minimum loss of information. By an elimination of the input data an optimal reduced basis is obtained. Thus, computing a large-scale model takes markedly less time. To understand the geochemical system, we performed simple neutralization batch experiments with NaOH. Using the GEOCHEMIST'S WORKBENCH software a geochemical model describing the experiment was made. Differences between the real and model results were explained. A basic sensitivity analysis of the model was done and the components which the model is sensitive to were revealed.

#### 1 Introduction–Uranium mining at Stráž pod Ralskem

In the area of the town Stráž pod Ralskem uranium had been mined for about 30 years, from 1966 to 1996; mostly by classical underground mining (e.g. at Mine Hamr I., Mine Křížany). At the Stráž pod Ralskem deposit, where the ore body was found at the base of Cenomian sandstones, chemical extraction by in-situ leaching (ISL) using diluted sulfuric acid was applied (see Fig. 1.1). The Cenomian aquifer had been enormously contaminated. The groundwater is extremely acid (pH of about 2) and contains many toxic substances in high contents ( $NH_4^+$ ,  $SO_4^{2-}$ ,  $NO_3^-$ , Al, Ni, As, Be, Cr, Cd, Pb, Cu).

This result was realized under the state subsidy of the Czech Republic within the research and development project "Advanced Remediation Technologies and Processes Center" 1M0554–Programme of Reserch Centers supported by Ministry of Education,

and with subvention of Grant Agency of the Czech Republic under project № 102/08/H081.

H. Baarová (⊠) · J. Šembera

Institute of Novel Technologies and Applied Informatics, Faculty of Mechatronics, Informatics and Interdisciplinary Studies, Technical University of Liberec, Studentská 2, 461 17 Liberec 1, Czech Republic

e-mails: hana.baarova@tul.cz  $\cdot$  jan.sembera@tul.cz

Moreover, due to the injection of acid solutions the piezometric level of the Cenomian aquifer increased of up to 100 m in the area and a hydraulic dipole originated. To prevent the acid toxic solutions from leaking out of the extraction area and polluting surrounding groundwater two hydraulic barriers (see Fig. 1.1) were built in 1977 (the Stráž hydraulic barrier close to the chemical extraction area) and in 1987 (the Svébořice hydraulic barrier). However, it took eight years to optimize the first one [2].

#### 1.1 Remediation works

After 1996, the remediation works of the Cenomian aquifer started, conducted by the state enterprise Diamo. The remediation sought two goals. Firstly, to set and maintain a negative balance within the leaching sites of the aquifer and, thus, to eliminate the leaking of the acid solutions during the post-mining periods, after the hydraulic barriers are switched off. And secondly, to neutralize the contaminated Cenomian groundwater and to immobilize toxic metals contained in the groundwater. By the remediation, such chemical composition of the Cenomian aquifer should be reached that the upper Turonian aquifer (supplying with drinking water) is not polluted. These aquifers are connected by an interlaying Turonian aquitard and by injection wells.

Neutralization has been tested there, mainly by laboratory tests of neutralization by various agents. Also several in-situ pilot tests were performed there. One of the possibilities is to re-use the contaminated Cenomian groundwater as a neutralization agent: the groundwater would be pumped out, neutralized in a neutralization unit (from pH about 2 neutralized to pH of about 11), decontaminated, evaporated, and injected back. Thus, neutral pH of groundwater and negative balance of the Cenomian aquifer would be set.



Fig. 1.1 Sketch map of the area [2].

#### 2 Laboratory experiment

To understand neutralization processes of waters with such a complex chemical composition we simulated the neutralization by the geochemical software called THE GEO-CHEMIST'S WORKBENCH  $\bigcirc$  6.0 (GWB), [1]. Samples of the Cenomian groundwater were analyzed by the Aquatest Laboratories. For cations ICP-OES method (inductively coupled plasma optical emission spectrometry) was applied. For anions IC (liquid ion chromatography) was applied. Values of pH were measured by potentiometry. Afterwards, neutralization batch experiment with NaOH was performed. A one-liter-sample of extremely acid (pH = 1.8) was neutralized by titration of 0.1 M NaOH to reach pH equal to 3. During the tests, contact with the air was minimalized by covering the samples with parafilm. Changes in the chemical composition due to the neutralization are listed in Tab. 2.1.

Table 2.1 Significant changes in the chemical composition due to the neutralization from pH = 1.8 to pH = 3; model components, their changes, and general trends.

Decrease		Inc	rease	Emersion		
$NO_2^-$	100%	$K^+$	108%	$\mathbf{F}^{-}$	4320%	
Pb	100%	$\mathbf{Ba}$	25%			
V	98%					
As	96%					
$\mathrm{Fe}_{tot.}$	95%					
Ba	89%					
$PO_4^{3-}$	88%					
Cr	70%					
$Cl^{-}$	45%					
Cu	18%					

#### 3 Geochemical model

An equilibrium model describing the neutralization of the acid Cenomian groundwater by 0.1 M NaOH to reach pH equal to three was done. We considered a closed anoxic system. The selection of an appropriate suite of reactive solid phases was cruciali.e. to decide which solid phases should we allow to precipitate, and which minerals should be suppressed. In GWB, solid phases that are not likely to form under conditions similar to that of the laboratory experiment and in the time period of a simulation were suppressed. First, a model with no phases suppressed was done. Consequently phases that developed, but are not expected to form were suppressed. Following solid phases were suppressed:

- a. Hematite and Goethite-these are solid phases of iron that form either under oxic conditions or in much longer time than our experiment was;
- b. Ferrite-Cu and Ferrite-Zn, CuFeO<sub>2</sub>-these are industrially produced materials;
- c. Strengite-a secondary iron phosphate that occurs under high oxic conditions;
- d. Plumbogummite-a rare secondary mineral found in the oxidized zone over leadbearing deposits;
- e. ZnCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-minerals that occur in metamorphic rocks;

- f. Dawsonit-a rare secondary mineral found in CO<sub>2</sub>-rich environments that forms by dissolution of Al-bearing minerals in Na-bearing brines;
- g. Dolomite-a secondary organogenic mineral or evaporit;
- h. Siderite and Rodochrozite-hydrothermal carbonate minerals-these minerals form in hot solutions that circulate in rock fissures;
- i. Nontronites and Kaolinite–secondary clay minerals that occur in soils that have formed by the chemical weathering of rocks;
- j. Chromite, Magnetite, NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, and Cronstedt-7A–iron minerals that are found in some intrusive or metamorphic rocks.

Solid phases that precipitated in the model at a total of 2.3194 g were Jarosite-Na, Alunite, Quartz, and Barite (chemical formulas listed in Tab. 3.1).

Chemical formula Solid phase name Amount [g] NaFe<sub>3</sub>(SO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>(OH)<sub>6</sub> Jarosite-Na 1.7270 $KAl_3(OH)_6(SO_4)_2$ Alunite 0.5401MnHPO<sub>4</sub> \_\_\_1 0.0134 $BaSO_4$ Barite 0.0001Quartz  $^2$  $SiO_2$ 0.0388

 Table 3.1 Chemical formulas and amounts of precipitated solid phases.

According to the precipitated minerals and to the equilibrium speciation, changes in concentrations due to the neutralization by 0.1 M NaOH (Tab. 2.1) could be explained. We presume that all nitrates reduced to ammonium. The high decrease in barium may be due to the precipitation of Barite. The decrease in iron is likely due to the precipitation of Jarosite-Na and Alunite. However, the precipitation of iron is underestimated. In the model the Jarosite-Na contains 597 mg of iron. In the sample, however, the detected decrease in iron was 923 mg. So, the amount of iron precipitated in model is lower by 326 mg compared to the analysis. It can be assumed that the decrease in heavy metals is probably due to the sorption onto iron and aluminium hydroxides comprised in Jarosite-Na and Alunite. As to phosphates, the model precipitation of 0.0134 g of MnHPO<sub>4</sub> does not fully explain the decrease of 232.9 mg (0.0134 g of MnHPO<sub>4</sub> represents 8.44 mg). A decrease in phosphates due to sorption is not likely regarding the pH of the sample (ranging from 2 to 3) [5].

#### 4 Evaluation of the geochemical model

The analyses performed before and after the neutralization were evaluated regarding the relative accuracy of the analytical methods used in the laboratory. By adding and subtracting this value from the measured value, the interval in which the real value can be expected with a probability of 95% is obtained. The accuracy ranges from 7 to 20%, depending on the analytical method and the measured substance (Tab. 4.1). Only components that showed a change in molality higher than the accuracy of the appropriate method were investigated. In this way only compounds with a statistically

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> MnHPO<sub>4</sub>-manganese hydrogenphosphate monohydrate-does not have any name.

 $<sup>^2</sup>$  The precipitation of quartz is not correct. It is caused by the very high content of dissolved solids that the geochemical code can not treat in a more plausible way.

significant change in molality were treated (i.e. changes due to chemical reactions, not caused by the inaccuracy of analytical methods). These changes are listed in Tab. 2.1.

Accuracy	Chemical substances
10%	Metals: Fe, Mn, Cu
15%	Metals: Al, As, Ba, Be, Ca, Cd, Cr, K, Mg,
	$\dots$ , Ni, Pb, Na, Ca, Fe, Zn; and SiO <sub>2</sub>
7%	Anions: $NO_2^-$ , $PO_4^{3-}$
8%	Anions: $\operatorname{Cl}^-$ , $\operatorname{NO}^{3-}$ , $\operatorname{F}^-$ , $\operatorname{SO}_4^{2-}$
3%	Cation: $NH_4^+$
$\pm 2$	pH
	$     \begin{array}{r} Accuracy \\             10\% \\             15\% \\             7\% \\             8\% \\             3\% \\             \pm 2 \\         \end{array} $

 ${\bf Table \ 4.1} \ {\rm Accuracy \ of \ analytical \ methods}$ 

#### 4.1 One-at-a-time sensitivity analysis

Model outputs were compared with chemical analyses. We were interested in what components is the model sensitive to. We investigated the sensitivity regarding the final value of pH after the neutralization. Since we lack replicable measurements we made one-at-a-time sensitivity analysis by the sensitivity index, changing the values by 50% [4]. The sensitivity index for each component was calculated as the original pH value minus the pH value obtained with the changed molality of the component (decreased by 50%), all divided by the original pH value:

$$\frac{pH(100\%) - pH(50\%)}{pH(100\%)}$$

The major components that the model is sensitive to are free carbon dioxide, sulphates, nitrates, aluminium, and iron. The calculated sensitivity indices are in Tab. 4.2.

Table 4.2 Sensitivity indices of components.

Components	Sensitivity index
$CO_{2(aq)}$	0.5367
$NO_3^-$	0.0603
$SO_4^{2-}$	0.0307
$PO_4^{3-}$	0.0090
Al	0.0076
Fe <sub>tot</sub>	-0.0571

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Ammonium was analyzed using Spectroquant MERCK. The accuracy of this spectrophotometer is given by its wavelength accuracy which is  $\pm 0.3$  nm [7]. The accuracy of measuring the concentration of ammonium was estimated to be 3% according to [3].

#### 5 Discussion

We assume, that the increases in fluorides (the content of fluorides was zero in the original sample), potassium (an increase of of 100%) and silicic acid shall not be viewed as a consequence of the neutralization process. Laboratory analytical methods that are used for common waters are not suitable to analyze such extreme water samples. In the case of measuring the concentration of fluorides by liquid chromatography, the extremely low pH of the sample coupled with and big differences in anions (F<sup>-</sup>, Cl<sup>-</sup>, NO<sub>2</sub><sup>-</sup>, NO<sub>3</sub><sup>-</sup>, PO<sub>4</sub><sup>3-</sup>, SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>) might have caused an erroneous analytical determination [6]. Further, a contamination of the demineralized water used for the preparation of 0.1 M NaOH might be the point as well.

The correctness of the model was affected by the very high ionic strength of the groundwater. The thermodynamic database we used (called thermo.dat) [1] is suitable for very dilute solutions (i.e. waters with ionic strength lower than 0.2). However, the studied sample of Cenomian groundwater shows higher ionic strength (0.37).

As to the sensitivity analysis, we expected the sensitivity index towards  $SO_4^{2-}$  to be higher. However, even though the input concentration of sulphates was reduced by 50%, the reduced concentration is still high enough that the model response is not more pronounced. Very important observation is the extremely high sensitivity of pH to free CO<sub>2</sub>. It shows high importance of neutralization experiment prevention of contact with air.

#### 6 Conclusions

According to the model it can be assumed that:

- a. all nitrates reduced to ammonium;
- b. the decrease in iron is likely due to the precipitation of Jarosite-Na and Alunite;
- c. the decrease in barium can be explained by the precipitation of Barite;
- d. the decrease in phosphates is caused by the precipitation of  $MnHPO_{4(c)}$ ;
- e. the decrease in heavy metals is probably due to the sorption on to iron and aluminium hydroxides contained in Jarosite-Na and Alunite.

Regarding the very low pH of the samples (ranging from 2 to 3), the decrease in phosphates due to sorption is not likely. As to the abrupt emersion of fluoride and the increase of almost 100% in potassium, these are probably not related to the neutralization process. In case of fluorides an erroneous analytical measurement by liquid chromatography caused by an extremely low pH and big differences in anions in the samples might be the reason.

By the sensitivity analysis it was revealed that the model is mainly sensitive to free carbon dioxide, sulphates, nitrates, aluminium, and iron. It is mainly by improving measurements of these data that we will make the model better. Some other methods of sensitivity evaluation of the model will be performed in future. We are planning to evaluate sensitivity of other outputs (especially amount of precipitated minerals) on single component molality. The relativity caused by differences in concentrations of input components should be included, too.

Besides the chemical components, the model outputs essentially depend on the solid phases we allowed to precipitate. Solid phases are often not stable and evolve in time, so the choice of the minerals depends on the time of the simulation. Next step will be to set up a model of neutralization by nano-scale zero valent iron. This is complicated by the fact that the chemical behavior of iron nano-particles depends on its physical features, which is difficult to simulate.

#### References

- 1. C. M. Bethke: The Geochemist's Workbench ⓒ 6.0, University of Illinois, 2006. 11, 14
- J. V. Datel, V. Ekert: Environmental Impact of Mine Water from Chemical Extraction and Underground Uranium Mining – Stráž pod Ralskem, Czech Republic. IMWAS, 2008,

http://www.imwa.info/docs/imwa\_2008/IMWA2008\_152\_Datel.pdf. 10

- M. E. Perel'son, A. A. Kir'yanov, B. A. Krivut: Increase in accuracy of the spectrophotometric method of analysis as a result of the introduction of an instrumental correction (exchange of information), Pharmaceutical Chemistry Journal, Vol. 12 (1978), № 8, pp. 1088–1090, Springer Verlag, New York. 13
- J. Smith, P. Smith: Environmental modelling, an introduction, Oxford University Press, 2007. 13
- O. Šráček, J. Datel, J. Mls: Hydrogeology of pollutants (Kontaminační hydrogeologie), in Czech, Charles University, Prague, 2002. 12
- 6. ČSN EN ISO 10304-1 (75 7391): Water quality Determination of fluorids, chlorids, nitrites, phosphates, bromids, nitrates, sulphates by liquid ion chromatography, Part I.: Little polluted waters (Jakost vod Stanovení rozpuštěných fluoridů, chloridů, dusitanů, fosforečnanů, bromidů, dusičnanů a síranů metodou kapalinové chromatografie iontů, Část 1: Metoda pro málo znečištěné vody), in Czech, ČNI, Prague, 1997. 14
- VWR Catalogue, http://ie.vwr.com/app/catalog/Catalog? parent\_class\_id=4&parent\_class\_cd=334572. 13



# Parallel Schur complements for mixed-hybrid discretization of fracture flow problem

Jan Březina

**Abstract** We present an scalable parallel construction of Schur complements for the saddle-point problem arising from mixed-hybrid discretization of a linear multidimensional fracture flow problem in porous media. We show that explicit construction of the Schur complements leads to significant improvements in total solution time. The PETSc library is used for the construction of Schur complements as well as for solution of resulting system via additive Schwartz domain decomposition.

#### 1 Introduction

Common model of the underground water flow is the continuity equation and Darcy's law

$$\operatorname{div} \boldsymbol{v} = f, \qquad \boldsymbol{v} = -\mathbb{K}\nabla p, \qquad (1.1)$$

where the velocity v and the pressure p are unknowns, while given data are the volume density f of the water sources, and the hydraulic permeability tensor K. Although, the velocity in (1.1) can be eliminated, a formulation where the velocity is an explicit unknown is preferred because a precise velocity field is necessary to model transport processes. In particular, we use widely used mixed-hybrid formulation (see [2, 1, 3]), where unknowns are the velocity, the pressure, and the trace of the pressure on the internal edges of the mesh. This leads to linear system of a particular structure, which allows performing several reductions of the system via Schur complement. The analsis in [4] showed that this reduction does not increse the condition number of the problem.

This work is realized under the state subsidy of the Czech Republic within the research and development project "Advanced Remediation Technologies and Processes Center" 1M0554–Programme of Reserch Centers supported by Ministry of Education.

J. Březina (⊠)

Institute of Novel Technologies and Applied Informatics, Faculty of Mechatronics, Informatics and Interdisciplinary Studies, Technical University of Liberec, Studentská 2, 461 17 Liberec 1, Czech Republic e-mail: jan.brezina@tul.cz

In this work, we consider a porous media with fractures and their intersectionschannels. Flow in a fracture is assumed parallel to its surface and constant in the cross direction. Consequently the equation (1.1) can be reduced from the 3D domain to the 2D surface of the fracture. Similarly the flow in channels can be modeled by equation (1.1) on a 1D curve. Since an opening of the fracture is usually much greater then crosssection of pores, the permeability of the fracture is substantially higher then the permeability of the surrounding material, i.e.,  $|\mathbb{K}_1| > |\mathbb{K}_2| > |\mathbb{K}_3|$ . We consider the case when the fracture hydraulically separates the 3D medium, which mathematically means that both the velocity and the pressure can be discontinuous across the fracture. The water exchange between 3D domain and the 2D fracture is only through its walls and is proportional to the pressure difference:

$$\boldsymbol{v}_3 \cdot \boldsymbol{n}^+ = \sigma_{32}^+ (p_3^+ - p_2), \qquad \boldsymbol{v}_3 \cdot \boldsymbol{n}^- = \sigma_{32}^- (p_3^- - p_2), \qquad (1.2)$$

where  $v_3 \cdot n^{+/-}$  is the outflow from the 3D domain,  $p_3^{+/-}$  is a trace of the pressure in 3D domain, and  $\sigma_{32}^{+/-}$  is the transition coefficient. Sign in superscript distinguish between two walls of the fracture. The pressure in the fracture is denoted  $p_2$ . The outflow from 3D domain forms an additional source on the fracture, thus the continuity equation reads

$$\operatorname{div} \boldsymbol{v}_2 = f_2 + \boldsymbol{v}_3 \cdot \boldsymbol{n}^+ + \boldsymbol{v}_3 \cdot \boldsymbol{n}^-.$$
(1.3)

The communication between 2D domain and 1D domain is similar, but one channel can be connected with multiple fractures.

More precise description of the problem and its mixed-hybrid formulation is presented in Sect. 2. Similar setting have been studied by Vohralík in [5]. Rest of the paper is devoted to the resulting linear system. In Sect. 3 we show some structural and numerical properties of the system and its Schur complements. We make some implementation remarks about our parallel code for construction of Schur complements in Sect. 4. Finally, we present some preliminary speedup and scalability benchmarks in Sect. 5.

#### 2 Problem formulation

Let  $\Omega \subset \mathbf{R}^3$  be a domain divided into disjoint sub-domains  $\Omega_3^i$ ,  $i \in I_3$  by a network 2-dimensional manifolds (fractures)  $\Omega_2^i$ ,  $i \in I_2$ . These manifolds constitute an open set  $\Omega_2$ . Their intersections are 1-dimensional manifolds (channels)  $\Omega_1^i$ ,  $i \in I_1$  which constitute an open set  $\Omega_1$ . Intersection of the channels are points  $\Omega_0^i$ ,  $i \in I_0$ . In particular, we assume

$$\Omega_d = \bigcup_{i \in I_d} \Omega_d^i, \qquad \Omega_d^i \quad \text{disjoint}, \qquad \text{for} \quad d = 1, 2, 3$$

and

$$\Omega_{d-1} = \partial \Omega_d \setminus \partial \Omega, \quad \text{for} \quad d = 1, 2, 3$$

On every manifold  $\Omega_d^i$ , we consider equation (1.1), where the velocity v and the permeability tensor  $\mathbb{K}$  live on the tangent space of the manifold. Water exchange between manifolds is given by pressure gradient. Whenever  $\Omega_d^i$  is intersection of manifolds  $\Omega_{d+1}^j$ ,  $j \in I_i$ , we prescribe Newton-like condition

$$\boldsymbol{v}_j(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{n}_j(\boldsymbol{x}) = \sigma_j(\boldsymbol{x})(p_j(\boldsymbol{x}) - p_i(\boldsymbol{x}), \quad \forall j \in I_i, \ \boldsymbol{x} \in \Omega_d^i,$$

where  $v_j(x)$  and  $p_j(x)$  are traces of the velocity and the pressure on the boundary of manifold  $\Omega_{d+1}^i$ ,  $p_i(x)$  is pressure on  $\Omega_d^i$ , and  $\sigma_j(x)$  is the water transfer coefficient of the manifold  $\Omega_{d+1}^{j}$ . The additional source  $\tilde{f}_{d}(\boldsymbol{x})$  on the manifold  $\Omega_{d}^{i}$ , d = 1, 2 has a form

$$\tilde{f}_d(x) = \sum_{j \in I_i} \boldsymbol{v}_j(x) \cdot \boldsymbol{n}_j(x) \,.$$

On the exterior boundary  $\Gamma_d = \partial \Omega \cap \partial \Omega_d$  of the domain  $\Omega_d$ , we prescribe general Newton boundary condition

$$\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{n}(\boldsymbol{x}) = \alpha_d(\boldsymbol{x})(p(\boldsymbol{x}) - P_d(\boldsymbol{x})),$$

where  $\alpha_d$  and  $P_d$  are given data.

In order to obtain good approximation of the velocity field for the transport model, we use discretization based on mixed-hybrid formulation. We denote  $\tilde{\Omega}_d^i, i \in \tilde{I}_d$  a further decomposition of  $\Omega_d^i, i \in I_d$  and we denote

$$\Gamma_d^i = \overline{\Omega_d^i} \setminus \bigcup_{i \in \tilde{I}_d} \tilde{\Omega}_d^i \,.$$

the interior and boundary edges of the decomposed set  $\Omega_d^i$ . Then we introduce spaces

$$V = V_3 \times V_2 \times V_1 = \prod_{d \in 3, 2, 1} \prod_{j \in \tilde{I}_d} H(\operatorname{div}, \tilde{\Omega}^j_d), \qquad (2.1)$$

$$P = P_3 \times P_2 \times P_1 \times \mathring{P}_3 \times \mathring{P}_2 \times \mathring{P}_1, \qquad (2.2)$$

$$P_d = L^2(\Omega_d), \qquad \mathring{P}_d = \prod_{i \in I_d} H^{1/2}(\Gamma_d^i).$$

In following, we use notation  $v_d^j$  for components of  $v \in V$  and  $p_d$ ,  $\mathring{p}_d^i$  for components of  $p \in P$ . Noting, that on  $\Omega_d^i$ ,  $d \in 1, 2$ , we have one pressure  $p_d$  on the fracture  $p_d$  and possibly several traces  $\mathring{p}_d^i$  of the pressure on neighbouring subdomains.

For every  $j \in \tilde{I}_d$  we denote

$$i(j) \in I_d : \Omega^j_d \subset \Omega^{i(j)}_d$$

the index of "mother" domain of  $\Omega_d^j$ . Now we define mixed-hybrid solution as follows.

**Definition 2.1** We say that pair  $(v, p) \in V \times P$  is MH-solution of the problem if it satisfy abstract saddle point problem

$$a(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w}) + b(\boldsymbol{w}, p) = 0, \qquad \forall \boldsymbol{w} \in V,$$
 (2.3)

$$b(\boldsymbol{v},q) - c(p,q) = \langle F,q \rangle, \qquad \forall q \in P,$$

$$(2.4)$$

where

$$\begin{split} a(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w}) &= \sum_{d=1,2,3} \sum_{j \in \tilde{I}_d} \int_{\tilde{\Omega}_d^j} \boldsymbol{v}_d^j \mathbb{K}_d^{-1} \boldsymbol{w}_d^j \,, \\ b(\boldsymbol{v}, q) &= \sum_{d=1,2,3} \sum_{j \in \tilde{I}_d} \left( \int_{\tilde{\Omega}_d^j} -\operatorname{div} \boldsymbol{v}_d^j q_d + \int_{\partial \tilde{\Omega}_d^j} (\boldsymbol{v}_d^j \cdot \boldsymbol{n}) \mathring{q}_d^{i(j)} \right) \,, \\ c(p,q) &= \sum_{d=1,2,3} \sum_{j \in \tilde{I}_{d-1}} \left( \int_{\tilde{\Omega}_{d-1}^j} (p_{d-1} - \mathring{p}_d^j) (q_{d-1} - \mathring{q}_d^j) + \int_{\Gamma_d} \alpha_d \mathring{p}_d \mathring{q}_d \right) \,, \\ \langle F, q \rangle &= -\sum_{d=1,2,3} \left( \int_{\Omega_d} f_d q_d + \int_{\Gamma_d} \alpha_d P_d \mathring{q}_d \right) \,. \end{split}$$

To simplify formula for c(p,q), we have formally set  $\tilde{I}_0 = \emptyset$  since the first integral is taken only over 1D and 2D communication interfaces, while the second term corresponds to the Newton boundary condition for every dimension. In the term c(p,q), the symbols  $\mathring{p}$  and  $\mathring{q}$  should be understood as elements of  $L^2 \supset H^{1/2}$ .

In the following we consider lowest order approximation of the MH-formulation. Assume that  $\Omega_d$  are polyhedrons triangulated by simplexes  $\tilde{\Omega}_d^j$ ,  $j \in \tilde{I}_d$ . Then, we approximate the space  $H(\text{div}, \tilde{\Omega}_d^j)$  by the Raviart-Thomas space  $RT_0(\tilde{\Omega}_d^j)$  (see [2]) and the spaces  $L^2(\Omega_d)$  and  $H^{1/2}(\Gamma_d^i)$  by piecewise constant functions on elements and their edges respectively (for details see [3]).

#### 3 Linear system and its Schur complements

The lowest order discretization leads to the linear system which follows a saddle-point structure of the system (2.3), (2.4). The full matrix  $\mathbb{A}$  has a form

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} A & B & \mathring{B} \\ B^T & C & \mathring{C} \\ \mathring{B}^T & \mathring{C} & \widetilde{C} \end{pmatrix}$$

where block A is discrete version of  $a(\cdot, \cdot)$  and consists of positive-definite blocks  $(d + 1) \times (d + 1)$  on the diagonal. Therefore, the inverse  $A^{-1}$  is also positive-definite and easy to compute. The rows and columns of A correspond to all sides of elements of the mesh. The blocks B and  $\mathring{B}$  come from the first and the second term of the form  $b(\cdot, \cdot)$  respectively. Columns of B correspond to elements, columns of  $\mathring{B}$  correspond to the neighbourings of sides. The block B has (d + 1) non-zeroes in the column of d-dimensional element at the rows of its sides. The block  $\mathring{B}$  has one nonzero element per row (side) with value 1. The blocks C,  $\mathring{C}$ ,  $\check{C}$  are discretizations of the form  $-c(\cdot, \cdot)$ , thus whole C block is negative-definite. In Fig. 3.1(a), you can see full matrix for a 3D problem Test 1: A cube cut by two diagonal 2D planes (fractures) into four prisms. Note, four semitriangular shapes in block  $\mathring{C}$ , which are formed by internal neighbourings of the four prisms. The diagonal line at the right of this block is formed by boundary sides of the prisms.



Fig. 3.1 Sparsity pattern: (a) original matrix; (b) first Schur complement; (c) second Schur complement.

Full analysis of the system matrix and its Schur complements for the 3D domain and prismatic finite elements was done by Maryška, Rozložník, and Tůma in [4], here we only mention main properties. As  $A^{-1}$  is positive-definite and C is negative-definite, the first Schur complement

$$\mathbb{A}/A = C - (B\,\mathring{B})^T A^{-1} (B\,\mathring{B})$$

is also negative-definite. Moreover,  $\mathbb{A}_1 = B^T A^{-1} B$  is diagonal. Hence we can perform the second Schur complement  $\mathbb{A}_2 = (-\mathbb{A}/A)/\mathbb{A}_1$  (see Figs. 3.1(b), 3.1(c)). Since our setting can be viewed as a perturbation of the pure 3D case, one can use similar arguments as in [4] to prove that  $\mathbb{A}_2$  is positive-definite.

Apart from being positive-definite the Schur complements offer substantial reduction of the problem size. In Tab. 3.1, we can compare matrices  $\mathbb{A}$ ,  $\mathbb{A}1$ ,  $\mathbb{A}_2$  for the problem Test 1 discretized by 1444 elements. For the second Schur complement, we get reduction of the size by factor 3 and reduction of the fill by factor 2. At the same time, we get also reduction of the condition number computed by MATLAB, which is in agreement with spectral analysis in [4].

Table 3.1 Comparison of Schur complements.

Schur	cizo	number of	condition
complement	Size	nonzeros	number
A	10258	45013	$9.8\times10^5$
$\mathbb{A}_1$	4662	29166	$1.0  imes 10^6$
$\mathbb{A}_2$	3218	19036	$1.1  imes 10^5$

Table 3.2 reports results of numerical experiments for two discretizations of the problem Test 1. We have used BiCGStab method preconditioned by ILU with variable factor levels. For every linear system, we were looking for the factor level that gives the optimal time of the whole solver. Notice that for higher factor levels we get better preconditioning and thus less iteration number, but because of higher fill of the preconditioner, the iterations are much slower. An important observation is that in contrast to the full matrix, the optimal factor level for the Schur complements is independent of the problem size.

Table 3.2 Convergence of BiCGStab with ILU and optimal factor level.

	112	755 elem	29028	81 elem	ents	
Schur complement	A	$\mathbb{A}_1$	$\mathbb{A}_2$	A	$\mathbb{A}_1$	$\mathbb{A}_2$
ILU factor level	9	3	2	13	3	3
iterations	45	31	44	42	46	49
solver time	40.4  s	$18.6 \mathrm{~s}$	$15.4 \mathrm{~s}$	$118 \mathrm{~s}$	72  s	$63 \mathrm{s}$

#### 4 Implementation using PETSc library

In this section we want to make few remarks concerning our parallel construction of the Schur complements using the PETSC library. The PETSC library have been chosen as it provides wide range of parallel operations with vectors and matrices, parallel solvers and preconditioners, and interface to many other projects. It is a mature piece of software and de facto standard in parallel computing. Very usefull feature is the command-line interface which allows tuning of internal parameters as well as various experiments with various solvers and preconditioners.

In the following we describe main part of a general function for composition of the Schur complement system and data for the reconstruction of eliminated unknowns. We use typewriter font style to set off computer structures against mathematical objects. The function gets as parameters the full matrix M and the inverse IA of block A. Both are sparse matrices with rows distributed among processors in compatible way, i.e., same distribution of IA and block A of M. The construction of the Schur complement matrix

$$-\mathbb{M}/A = B^T A^{-1} B - C$$
, for  $\mathbb{M} = \begin{pmatrix} A & B \\ B^T & C \end{pmatrix}$ 

is performed as follows. First we use distribution of rows of M and IA to construct distributed index sets IS\_A and IS\_B containing rows of block A and B respectively. We create also full local versions full\_IS\_A and full\_IS\_B on every processor. Then we use appropriate index sets to get block B and compute  $A^{-1}B$ .

MatGetSubMatrix( M, IS\_A, full\_IS\_B, loc\_size\_B, reuse, & B ); MatMatMult( IA, B, reuse, 1.0 ,& IAB ); // 6/7 fill est.

Similarly, we get block  $B^T$  and we compute  $B^T A^{-1}B$ . Note that matrix Bt can not be computed as transpose of B because of different distribution of rows.

```
MatGetSubMatrix( M, IS_B, full_IS_A, loc_size_A, reuse, & Bt );
MatMatMult( Bt, IAB, reuse, 1.1 , & BIAB ); // 1.1 fill est.
```

In both parallel matrix multiplications we had to specify a fill ratio estimate. In the first multiplication the estimate is in fact less then one, but value at least 1 is requested by PETSC. Finally we get block C scale it by -1 and add  $B^T A^{-1} B$ .

MatGetSubMatrix( M, IS\_B, full\_IS\_B, loc\_size\_B, reuse, & C ); MatAYPX( C, -1.0, BIAB, SUBSET\_NONZERO\_PATTERN );

The addition of two sparse, parallel matrices is not trivial a trivial operation and in PETSC it is efficient only if one matrix has a sparsity pattern which is subset of the other. Therefore we have to insert zero entries into C block of M to allocate the sparsity pattern of the Schur complement. This is probably the most restricting assumption for general use of our functions.

#### 5 Benchmarks

We have tested the parallel solver on the problem Test 1 described in Sect. 3. Solving procedure is as follows. The full linear system is reduced appling two Schur complements computed in parallel. Then we employ conjugate gradients preconditioned by additive Schwartz with overlap 4 to solve the reduced system. As a local preconditioner we use ILU with factor level 3 (see optimal values in Tab. 3.2. ILU was used instead ICC as it appeared to be faster, but one have to use option

-sub\_pc\_factor\_shift\_positive\_definite

to ensure a positive definite preconditioner. All benchmarks were run on SGI Altix computer at CTU in Prague equipped by 32 processors Intel Ithanium 2.

In the first test we study the speedup when running the problem of the same size on increasing number of processors. Beside the speedup we are interested also in efficiency defined by fraction

efficiency = 
$$\frac{\text{run time on 1 processor}}{N \times \text{run time on } N \text{ processors}}$$
.

Although the absolute value of the efficiency is important, more significant is whether it does not decrease to much with increasing number of processors. It means that the overhead when running in parallel do not grow.

In our speedup test we have used a mesh with 72877 elements. At a graph in Fig. 5.1, you can see timing of three parts of the whole program. The red part is time of the second Schur complement construction. For more then two processors the efficiency is nearly constant 0.2, but there is quite big initial parallel overhead. The green part is the iterative solver. The efficiency is about 70% for two processors but drops to 30% on 10 processors. The white part is timing of non-parallel part of the program: input, mesh topology setup, and output. The table in Fig. 5.1(b) reports timing and efficiency of the parallel part, i.e., the Schur complement construction and the solver.



Fig. 5.1 Speedup test results.

Much more important property of parallel numerical software is the test of the scalability. We solve problem of size O(N) on N processors, in ideal case we should obtain constant timing. Because it is hard to construct an unstructured mesh of a prescribed size, we introduce a normalized time

normalized time = time 
$$\times \frac{N \times \text{problem size on 1 processor}}{\text{problem size on } N \text{ processors}}$$

Timings for our program on 1 up to 8 processors are summarized in Fig. 5.2. The graph in Fig. 5.2(a) shows normalized timings for the Schur complement composition, the solver, and their sum. Remarkable is perfact scalability of the Schur complement part which mainly proofs good scalability of the MatMatMult function from PETSC. On the other hand the solver does not scale very well. In the table at the right we can see correlation between time and number of iterations. So the that bad scalability is caused by poor preconditioning for large number of processors. This could be improved by using second level Schwartz decomposition, which is also the number one in our future planes.



Fig. 5.2 Scalability test results.

#### References

- T. Arbogast, M. F. Wheeler, N.-Y. Zhang: A Nonlinear Mixed Finite Element Method for a Degenerate Parabolic Equation Arising in Flow in Porous Media. SIAM Journal on Numerical Analysis, 33(4), pp. 1669–1687 (August 1996). 16
- M. Fortin, F. Brezzi: Mixed and Hybrid Finite Element Methods. Springer-Verlag Berlin and Heidelberg GmbH & Co. K, December 1991. 16, 19
- J. Maryška, M. Rozložník, M. Tůma: Mixed-Hybrid Finite Element Approximation Of The Potential Fluid Flow Problem, J. Comp. Appl. Math., 63, pp. 383–392 (1995). 16, 19
- J. Maryška, M. Rozložník, M. Tůma: Schur Complement Systems In The Mixed-Hybrid Finite Element Approximation Of The Potential Fluid Flow Problem. SIAM J. Sci. Comput. (SISC), 22(2), 2000. 16, 19, 20
- J. Maryška, O. Severýn, M. Vohralík: Mixed-hybrid FEM Discrete Fracture Network Model of the Fracture Flow, 2002. 17



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

## Modified semismooth Newton method: Numerical example

Petr Byczanski · Stanislav Sysala

**Abstract** The modified semismooth Newton method is introduced in this contribution. The modification is based on a "damping" in each Newton iteration. The damping coefficient are computed by a minimisation problem. The method is described on an abstract problem with the main convergence results. Then it is applied to solving an elasto-plastic problem with hardening and illustrated on a numerical example.

#### 1 Introduction

Newton-like methods are often used to solving non-linear systems of equations. Concretely, if the corresponding operators are semismooth (i.e. non-differentiable in general), it is possible to use the semismooth Newton method introduced in [3]. To ensure the global convergence of Newton-like methods, there were introduced many modifications. Some of them are based on damping or underrelaxation, see for example [4]. In the presented modified semismooth Newton method (MSNM), the damping coefficient is computed by a minimisation problem in a search line in each iteration. MSNM has been for example applied to a problem of a beam on a non-linear subsoil [5] or to elasto-plastic problems [6].

In Sect. 2, we formulate an abstract system of equation with specific properties, for which MSNM is suitable. We summarise the main convergence results of the method and mention inexact inner solvers. In Sect. 3, we briefly introduce an elasto-plastic problem after time and space discretisation and apply MSNM to solving the problem. In Sect. 4, the elasto-plastic problem is illustrated on a numerical example in 2D and implemented in MATLAB.

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

P. Byczanski  $\cdot$  S. Sysala ( $\boxtimes$ )

Institute of Geonics AS CR, v. v. i., Academy of Sciences of the Czech Republic, Studentská 1768, 70 800 Ostrava Poruba,

Czech Republic

e-mails: byczansk@ugn.cas.cz  $\cdot$  sysala@ugn.cas.cz

#### 2 MSNM for abstract system of equations

Let us consider the following system of non-linear equations:

find 
$$\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$$
:  $F(\mathbf{u}) = \mathbf{f}$ , (2.1)

where  $\mathbf{u}, \mathbf{f} \in \mathbb{R}^n$  and  $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ . We will assume that the function F has the following properties:

(A1) F is semismooth, see [3]. It means that F is Lipschitz continuous and

$$\lim_{V_t \in \partial F(\mathbf{v}+t\mathbf{w}'), \, \mathbf{w}' \to \mathbf{w}, \, t \downarrow 0} \{V_t \mathbf{w}'\} = F'_+(\mathbf{v}; \mathbf{w}), \qquad \forall \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^n,$$

where  $\partial F(\mathbf{v})$  denotes the generalised Jacobian of F at  $\mathbf{v}$  and  $F'_+(\mathbf{v}; \mathbf{w})$  denotes the one-sided directional derivative of F at  $\mathbf{v}$  in the direction  $\mathbf{w}$ .

(A2) The matrices  $V \in \partial F(\mathbf{v})$  are symmetric at any  $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ .

(A3) There exist constants  $c_1, c_2 > 0$  such that

$$c_1 \|\mathbf{w}\|_E^2 \le \langle V\mathbf{w}, \mathbf{w} \rangle \le c_2 \|\mathbf{w}\|_E^2, \qquad \forall \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^n, \qquad \forall V \in \partial F(\mathbf{v})$$

where  $\|.\|_E$  is a suitable norm in  $\mathbb{R}^n$ , for example an energy norm of some linearised problem and  $\langle ., . \rangle$  is the Euclidean scalar product in  $\mathbb{R}^n$ . (A4)

$$F(\mathbf{v} + \mathbf{w}) - F(\mathbf{v}) = \int_0^1 V_\theta \mathbf{w} \, d\theta, \qquad \forall \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^n, \qquad \forall V_\theta \in \partial F(\mathbf{v} + \theta \mathbf{w}),$$

where the integral of a vector is to be understood componentwise. (A5) F has a potential, i.e. there exists a functional  $j : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$  such that

 $\nabla j(\mathbf{v}) = F(\mathbf{v}), \qquad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n.$ 

From the above assumptions, we obtain the following estimates:

$$c_1 \|\mathbf{v} - \mathbf{w}\|_E^2 \le \langle F(\mathbf{v}) - F(\mathbf{w}), \mathbf{v} - \mathbf{w} \rangle \le c_2 \|\mathbf{v} - \mathbf{w}\|_E^2, \qquad \forall \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^n, \quad (2.2)$$

$$j(\mathbf{v} + \mathbf{w}) - j(\mathbf{v}) - \langle F(\mathbf{v}), \mathbf{w} \rangle \ge \frac{1}{2} c_1 \|\mathbf{w}\|_E^2, \qquad \forall \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^n.$$
(2.3)

Hence, the functional

$$J(\mathbf{v}) := j(\mathbf{v}) - \langle \mathbf{f}, \mathbf{v} \rangle, \qquad \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n, \qquad (2.4)$$

is differentiable, strictly convex and coercive. Thus the system (2.1) has a unique solution and it is equivalent to the minimisation problem

find 
$$\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$$
:  $J(\mathbf{u}) \leq J(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n.$ 

Let us consider a mapping  $A : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{n \times n}$  such that  $A(\mathbf{v}) \in \partial F(\mathbf{v})$  for any  $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ . Then A fulfils the assumptions (A1)–(A4). Thus matrices  $A(\mathbf{v})$  are positive definite and symmetric. The corresponding norms  $\|.\|_{A(\mathbf{v})} := \langle A(\mathbf{v}), ., \rangle^{1/2}$  are uniformly equivalent to the norm  $\|.\|_E$ . By (A2), (A3), the sets

$$\{\|A(\mathbf{v})\| : \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n\}, \quad \{\|(A(\mathbf{v}))^{-1}\| : \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n\} \text{ are bounded.}$$
(2.5)

By [3, Theorem 2.3], the assumption (A1) implies that

$$\lim_{\mathbf{w}\to 0} \frac{\|F(\mathbf{v}+\mathbf{w}) - F(\mathbf{v}) - A(\mathbf{v}+\mathbf{w})\mathbf{w}\|_{-E}}{\|\mathbf{w}\|_{E}} = 0, \qquad (2.6)$$

for any  $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$  and sufficiently small  $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$  where  $\|.\|_{-E}$  denotes the dual norm to  $\|.\|_E$ . The mapping A with properties (2.5) and (2.6) is also called a slanting function to F, see [2].

The semismooth Newton iterates have the form

$$\mathbf{u}^{j+1} = \mathbf{u}^{j} + \mathbf{s}^{j}, \qquad j = 0, 1, \dots,$$

where the vector  $\mathbf{s}^{\mathbf{j}}$  solves the linear system of equations

$$A(\mathbf{u}^{\mathbf{j}})\mathbf{s}^{\mathbf{j}} = \mathbf{f} - F(\mathbf{u}^{\mathbf{j}}) =: \mathbf{r}^{\mathbf{j}}.$$
(2.7)

By [3, Theorem 3.2], the properties (2.5) and (2.6) imply that

$$\mathbf{u} - \mathbf{u}^{\mathbf{j}+1} = o(\mathbf{u} - \mathbf{u}^{\mathbf{j}}), \qquad (2.8)$$

if the initial approximation  $\mathbf{u}^0$  is sufficiently closed to  $\mathbf{u}$ , i.e. the method is locally superlinearly convergent.

The modified (damped, underrelaxed) semismooth Newton iterates have the form

$$\mathbf{u}^{\mathbf{j+1}} = \mathbf{u}^{\mathbf{j}} + \alpha_j \mathbf{s}^{\mathbf{j}}, \qquad j = 0, 1, \dots,$$

where the vector  $\mathbf{s}^{\mathbf{j}}$  solves the system (2.7) and

$$\alpha_j = \arg\min_{\alpha\in[0,1]} J(\mathbf{u}^{\mathbf{j}} + \alpha \mathbf{s}^{\mathbf{j}}).$$

We can consequently derive the estimates

$$\langle \nabla J(\mathbf{u}^{\mathbf{j}}), \mathbf{s}^{\mathbf{j}} \rangle \leq -c_1 \|\mathbf{s}^{\mathbf{j}}\|_E^2,$$
 (2.9)

$$\alpha_j \ge \frac{c_1}{c_2}, \text{ if } \mathbf{s}^{\mathbf{j}} \ne 0,$$

$$(2.10)$$

$$J(\mathbf{u}^{j+1}) - J(\mathbf{u}^{j}) \le -\frac{1}{2}c_1\alpha_j^2 \|\mathbf{s}^{j}\|_E^2, \qquad (2.11)$$

$$\sum_{j=0}^{+\infty} \|\mathbf{s}^{j}\|_{E}^{2} \leq 2(J(\mathbf{u}^{0}) - J(\mathbf{u}))\frac{c_{2}^{2}}{c_{1}^{3}}, \qquad (2.12)$$

$$\sum_{j=0}^{+\infty} \|\mathbf{u} - \mathbf{u}^{j}\|_{E}^{2} \leq 2(J(\mathbf{u}^{0}) - J(\mathbf{u}))\frac{c_{2}^{4}}{c_{1}^{5}}, \qquad (2.13)$$

$$\alpha_j \to 1. \tag{2.14}$$

Hence the modified semismooth Newton method converges globally by the estimate (2.13). Since  $\alpha_j \to 1$ , the method also converges superlinearly by the estimate (2.8). The estimates (2.9)–(2.13) are proved in [5, 6] and (2.14) in [6] for concrete problems.

We can also consider inexact inner solvers in MSNM. If we apply an iterative solver for computing the directions  $s^j$  we can use the following stopping criteria:

$$\|A(\mathbf{u}^{\mathbf{j}})\mathbf{\tilde{s}^{\mathbf{j}}} - \mathbf{r}^{\mathbf{j}}\|_{-A(\mathbf{u}^{\mathbf{j}})} \le \eta \|\mathbf{r}^{\mathbf{j}}\|_{-A(\mathbf{u}^{\mathbf{j}})}, \qquad (2.15)$$

$$\|A(\mathbf{u}^{\mathbf{j}})\mathbf{\tilde{s}}^{\mathbf{j}} - \mathbf{r}^{\mathbf{j}}\|_{-E} \le \eta \|\mathbf{r}^{\mathbf{j}}\|_{-E} , \qquad (2.16)$$

where  $\|.\|_{-A(\mathbf{u}^{\mathbf{j}})}$  denotes the dual norm to  $\|.\|_{A(\mathbf{u}^{\mathbf{j}})}$ , and  $\tilde{\mathbf{s}}^{\mathbf{j}}$  is an approximation of  $\mathbf{s}^{\mathbf{j}}$ . The inexact MSNM is convergent if, the approximations  $\tilde{\mathbf{s}}^{\mathbf{j}}$  fulfil the estimate

$$\langle \nabla J(\mathbf{u}^{\mathbf{j}}), \tilde{\mathbf{s}}^{\mathbf{j}} \rangle \leq -\tilde{c} \| \tilde{\mathbf{s}}^{\mathbf{j}} \|_{E}^{2}, \qquad \tilde{c} > 0,$$

$$(2.17)$$

which replaces (2.9). Concretely, the estimate (2.17) holds if we choose the tolerance parameter  $\eta$  less than one in (2.15) and sufficiently small in dependence on parameters  $c_1, c_2$  in (2.16).

The damping coefficients  $\alpha_j < 1$  can be approximated by  $\tilde{\alpha}_j \leq 1$  which fulfills

$$-\delta(\|\mathbf{\tilde{s}^{j}}\|_{E})c_{1}\tilde{\alpha}_{j}\|\mathbf{\tilde{s}^{j}}\|_{E}^{2} \leq \langle \nabla J(\mathbf{u^{j}}+\tilde{\alpha}_{j}\mathbf{\tilde{s}^{j}}), \mathbf{\tilde{s}^{j}}\rangle \leq \frac{1}{2}qc_{1}\tilde{\alpha}_{j}\|\mathbf{\tilde{s}^{j}}\|_{E}^{2}, \qquad (2.18)$$

where  $q \in (0,1)$  and  $\delta(y) > 0$  for y > 0,  $\lim_{y \downarrow 0} \delta(y) = 0$ . Notice that the first estimate in (2.18) implies

$$\tilde{\alpha}_j \geq \frac{1}{1 + \delta(\|\mathbf{\tilde{s}j}\|_E)} \alpha_j \,,$$

thus the damping is not too strong. The second estimate in (2.18) ensures the convergence properties of the method, concretely it holds

$$J(\mathbf{u}^{\mathbf{j}} + \tilde{\alpha}_{\mathbf{j}} \tilde{\mathbf{s}}^{\mathbf{j}}) - J(\mathbf{u}^{\mathbf{j}}) \leq -\frac{1}{2} c_1 (1-q) \tilde{\alpha}_{\mathbf{j}}^2 \|\tilde{\mathbf{s}}^{\mathbf{j}}\|_E^2,$$

instead of the estimate (2.11). For more details, see [6].

MSNM can be applied to some problems, for example beams or plates on non-linear subsoils [5], elasto-plasticity [6], non-linear elasticity or quasilinear elliptic problems.

#### **3** Application MSNM to elasto-plasticity

Elasto-plastic problems are the so-called quasi-static problem where the history of loading is taken into account. We will consider the von Mises elasto-plasticity with the strain isotropic hardening and the incremental finite element method with the return mapping concept. For more details see [1]. We can similarly work with other elasto-plastic models and time discretisation schemes, see [6].

The elasto-plastic deformation of an investigated body  $\Omega$  after loading is described by the Cauchy stress tensor  $\sigma$ , the small strain tensor  $\varepsilon$ , the displacement u and the nonnegative hardening parameter  $\kappa$ . Symmetric tensors of the second order will be represented by the vectors and their deviatoric part will be denoted by the symbol dev.

Let us denote the space of continuous and piecewise linear functions by  $V_h$  which approximates the space of all admissible displacements. Let

 $0 = t_0 < t_1 < \ldots < t_k < \ldots < t_N = T$ 

be a partition of the time interval [0, T]. Then the problem after time and space discretisation has the form for k = 0, 1, ...:

Given  $\sigma_h^k$ ,  $\kappa_h^k$ ,  $u_h^k$  compute  $\Delta \sigma_h^k$ ,  $\Delta \kappa_h^k$ ,  $\Delta u_h^k$ :

$$\int_{\Omega} \left\langle D\varepsilon(\bigtriangleup u_{h}^{k}) - a_{h}^{k}(\varepsilon(\bigtriangleup u_{h}^{k})), \varepsilon(v_{h}) \right\rangle dx = \bigtriangleup f_{h}^{k}(v_{h}), \quad \forall v_{h} \in V_{h}, \quad (3.1)$$
$$\bigtriangleup \sigma_{h}^{k} = D\varepsilon(\bigtriangleup u_{h}^{k}) - a_{h}^{k}(\varepsilon(\bigtriangleup u_{h}^{k})),$$
$$\bigtriangleup \kappa_{h}^{k} = (2\mu\sqrt{3/2})^{-1} \|a_{h}^{k}(\varepsilon(\bigtriangleup u_{h}^{k}))\|.$$

 $\text{Put } \sigma_h^{k+1} = \sigma_h^k + \bigtriangleup \sigma_h^k, \ \kappa_h^{k+1} = \kappa_h^k + \bigtriangleup \kappa_h^k, \ u_h^{k+1} = u_h^k + \bigtriangleup u_h^k.$ 

Here, the matrix D denotes the Hook's matrix,  $\mu, \lambda$  are Lamé coefficients,  $\triangle f_h^k$  represents the load increment. The function  $a_h^k$  is given in the form

$$a_h^k(\varepsilon) := \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{3\mu}{3\mu + H_m} P^+(\sigma_h^k + D\varepsilon, \kappa_h^k) \hat{n}_h^k(\varepsilon) \,,$$

where

$$\hat{n}_{h}^{k}(\varepsilon) := \frac{dev(\sigma_{h}^{k} + D\varepsilon)}{\|dev(\sigma_{h}^{k} + D\varepsilon)\|},$$
$$P(\sigma, \kappa) := \sqrt{\frac{3}{2}} \|dev(\sigma)\| - (Y + H_{m}\kappa), \qquad Y, H_{m} > 0.$$

are the plastic flow direction and the yield function respectively. The sign plus means the positive part of P which characterises the plastic behaviour. The function  $a_h^k$  is semismooth and potential, see [6], concretely its generalised Jacobian  $a_h^{o,k}$  and potential  $b_h^k$  have the forms

$$a_{h}^{o,k}(\varepsilon) = \begin{cases} \nabla a_{h}^{k}(\varepsilon) , P(\sigma_{h}^{k} + D\varepsilon, \kappa_{h}^{k}) > 0 , \\ 0 , P(\sigma_{h}^{k} + D\varepsilon, \kappa_{h}^{k}) \leq 0 , \end{cases}$$
(3.2)  
$$\nabla a_{h}^{k}(\varepsilon)\eta = 2\mu \frac{3\mu}{3\mu + H_{m}} \left\{ I - \frac{\sqrt{\frac{2}{3}}(Y + H_{m}\kappa_{h}^{k})}{\|dev(\sigma_{h}^{k} + D\varepsilon)\|} (I - \hat{n}_{h}^{k}(\varepsilon)\hat{n}_{h}^{k}(\varepsilon)^{T}) \right\} dev(\eta) ,$$
$$b_{h}^{k}(\varepsilon) = \frac{1}{3} \left[ P^{+}(\sigma_{h}^{k} + D\varepsilon, \kappa_{h}^{k}) \right]^{2} .$$
(3.3)

Notice that the main problem in each time step is to solve the non-linear equation (3.1). If we represent a function  $v_h \in V_h$  by the vector  $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$  and miss the index k then (3.1) can be rewritten as the system of non-linear equations

$$F(\Delta \mathbf{u}) = \Delta \mathbf{f} \,, \tag{3.4}$$

where

$$\langle F(\mathbf{v}), \mathbf{w} \rangle := \int_{\Omega} \langle D\varepsilon(v_h) - a_h(\varepsilon(v_h)), \varepsilon(w_h) \rangle \, dx \,, \qquad \forall \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^n \,, \\ \langle \Delta \mathbf{f}, \mathbf{w} \rangle := \Delta f_h(v_h) \,, \qquad \forall \mathbf{w} \in \mathbb{R}^n \,.$$

The function F fulfils the assumptions (A1)–(A5), see [6], and thus the system (3.4) can be solved by MSNM. Concretely, the energy norm  $\|.\|_E = \langle A_e, ., \rangle^{1/2}$  represents elastic behaviour. The matrix  $A_e$ , the functional J and the mapping A have the forms

$$\begin{split} \langle A(u)\mathbf{v},\mathbf{w}\rangle &:= \int_{\Omega} \left\langle D\varepsilon(v_h) - a^o(\varepsilon(u_h))\varepsilon(v_h), \varepsilon(w_h) \right\rangle dx \,, \qquad \forall \mathbf{u},\mathbf{v},\mathbf{w} \in R^n \\ \left\langle A_e \mathbf{v},\mathbf{w} \right\rangle &:= \int_{\Omega} \left\langle D\varepsilon(v_h), \varepsilon(w_h) \right\rangle dx \,, \qquad \forall \mathbf{v},\mathbf{w} \in R^n \,, \\ J(\mathbf{v}) &:= \frac{1}{2} \|\mathbf{v}\|_E^2 - \int_{\Omega} b(\varepsilon(v_h)) dx - \left\langle \Delta \mathbf{f}, \mathbf{v} \right\rangle \,, \qquad \forall \mathbf{v} \in R^n \,, \end{split}$$

by (3.2) and (3.3). The constants  $c_1, c_2$  in the assumption (A3) are equal to  $H_m/(3\mu + H_m)$  and 1 respectively. Notice that the estimates (2.6), (2.8) and consequently the superlinear convergence of the method are dependent on the discretisation parameter h in general. On the other hand, the estimates (2.9)–(2.13) are independent on h, thus the global convergence in sense of the estimate (2.13) is independent on h.

#### 4 Numerical example in 2D

We will consider a plain strain problem with a thin plate which is represented by the domain  $\Omega$ , see Fig. 4.1. Homogeneous Dirichlet boundary conditions in the normal direction are prescribed on two sides of  $\Omega$ . The surface load  $g(t) = 450 \sin(2\pi t)$ ,  $t \in [0, 1/4]$ , is applied to the upper side of  $\Omega$ . The material parameters are set to E = 206900,  $\nu = 0.29$ , Y = 450,  $H_m = 100$  and the time interval is divided into 50 equidistant steps. We will consider three different meshes with 2028, 7600 and 29400 elements. The worsest of them is depicted in Fig. 4.1.



Fig. 4.1 Geometry of the example (left), and the worsest applied mesh (right).

The initial approximation  $\Delta \mathbf{u}^{\mathbf{0}}$  is obtained by solving the linear elastic problem  $A_e \Delta \mathbf{u}^{\mathbf{0}} = \Delta \mathbf{f}$ . The vectors  $\mathbf{s}^{\mathbf{j}}$  are found by a direct solver and the coefficients  $\alpha_j$  by the regula-falsi method. We choose q = 0.99 and  $\delta(\|\mathbf{s}^{\mathbf{j}}\|_E) = \|\mathbf{s}^{\mathbf{j}}\|_E / (\|\mathbf{u}^{\mathbf{j}} + \mathbf{s}^{\mathbf{j}}\|_E + \|\mathbf{u}^{\mathbf{j}}\|_E)$  in the stopping criterion (2.18). The MSNM algorithm is stopped if  $\delta(\|\mathbf{s}^{\mathbf{j}}\|_E) < 10^{-10}$ .

The calculation was performed using a MATLAB 7.0 code. The numbers of MSNM and regula-falsi iterations and the damping coefficients at time steps are depicted in Fig. 4.2 for the finest mesh. Notice that the maximal numbers of Newton iterations and regula-falsi iterations are small, therefore the method is suitable for the problem and computing of the damping coefficients is not too costly. The problem was also solved by the standard semismooth Newton method and numbers of the Newton iteration were practically the same here. The coefficients  $\alpha_j$  are not computed, if  $\delta(||\mathbf{s}^j||_E) < 10^{-10}$ . Concretely,  $\mathbf{s}^j = 0$  in time steps  $1, \ldots, 11$  since the plastic behaviour is not indicated. Notice that the coefficients  $\alpha_j$  are increasing and tends to 1 in time steps  $12, \ldots, 50$ .

The superlinear convergence of MSNM is demonstrated in Tab. 4.1 for chosen time steps and for three different meshes. The values  $\delta(||\mathbf{s}^{\mathbf{j}}||_{E})$  for iterations  $j = 0, 1, \ldots, 7$  are in the table. Notice that the converge slightly depends on the finite element discretisation parameter.

#### 5 Conclusion

The modified semismooth Newton method has been used to solve the elasto-plastic problem. The main advantage of MSNM is a global convergence which does not hold for the Newton method. For example, the initial approximation  $\Delta \mathbf{u}^{\mathbf{0}}$  need not to be



Fig. 4.2 Numbers of MSNM iterations (at the top), the damping coefficients (in the middle), and maximal numbers of regula-falsi iteration (at the bottom) at time steps.

**Table 4.1** Convergence of MSNM at chosen time steps (NoTS) for 3 meshes characterised by different numbers of elements (NoFE).

NoTS	25			37			46		
NoFE	2028	7600	29400	2028	7600	29400	2028	7600	29400
$j \\ 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5$	$\begin{array}{c} 1.0 \times 10^{-1} \\ 1.6 \times 10^{-2} \\ 1.8 \times 10^{-3} \\ 4.0 \times 10^{-6} \\ 3.2 \times 10^{-11} \end{array}$	$\begin{array}{c} 1.1 \times 10^{-1} \\ 2.7 \times 10^{-2} \\ 4.3 \times 10^{-4} \\ 3.2 \times 10^{-7} \\ 7.3 \times 10^{-13} \end{array}$	$\begin{array}{c} 1.1 \times 10^{-1} \\ 2.9 \times 10^{-2} \\ 5.9 \times 10^{-4} \\ 4.0 \times 10^{-5} \\ 8.4 \times 10^{-9} \\ 3.2 \times 10^{-15} \end{array}$	$\begin{array}{c} 3.7 \times 10^{-1} \\ 2.7 \times 10^{-2} \\ 1.5 \times 10^{-3} \\ 2.7 \times 10^{-7} \\ 2.0 \times 10^{-14} \end{array}$	$\begin{array}{c} 4.1 \times 10^{-1} \\ 2.9 \times 10^{-2} \\ 2.1 \times 10^{-3} \\ 4.0 \times 10^{-4} \\ 4.8 \times 10^{-8} \\ 5.7 \times 10^{-15} \end{array}$	$\begin{array}{c} 4.3 \times 10^{-1} \\ 4.0 \times 10^{-2} \\ 4.7 \times 10^{-3} \\ 8.7 \times 10^{-4} \\ 1.4 \times 10^{-4} \\ 4.7 \times 10^{-5} \end{array}$	$7.5 \times 10^{-1} \\ 3.1 \times 10^{-2} \\ 1.0 \times 10^{-4} \\ 7.0 \times 10^{-10} \\ 3.8 \times 10^{-15} \\ \end{cases}$	$7.9 \times 10^{-1} \\ 3.2 \times 10^{-2} \\ 4.4 \times 10^{-3} \\ 3.2 \times 10^{-4} \\ 1.1 \times 10^{-8} \\ 4.0 \times 10^{-15} \\ \end{cases}$	$\begin{array}{c} 8.0 \times 10^{-1} \\ 3.3 \times 10^{-2} \\ 2.5 \times 10^{-3} \\ 5.2 \times 10^{-4} \\ 2.5 \times 10^{-4} \\ 1.5 \times 10^{-7} \end{array}$
6 7						$7.0 \times 10^{-9}$ $6.1 \times 10^{-15}$			4.2×10 <sup>-14</sup>

closed to  $\Delta \mathbf{u}$  for larger loads or  $H_m \to 0$  (ideal plasticity). Then the convergence of the Newton method can be problematic in general. On the other hand, computing of the damping coefficients could not be very costly. The proposed stopping criterion (2.18) ensures all the theoretical convergence results of MSNM and yields good numerical results in combination with the regula-falsi method.

#### References

- R. Blaheta: Numerical methods in elasto-plasticity, Documenta Geonica 1998, PERES Publishers, Prague, 1999. 27
- X. Chen, Z. Nashed, L. Qi: Smoothing methods and semismooth methods for nondifferentiable operator equations, SIAM J. Numer. Anal. 38, pp. 1200–1216 (2000). 26
- L. Qi, J. Sun: A nonsmooth version of Newton's method, Mathematical Programming 58, pp. 353–367 (1993). 24, 25, 26
- J. Stoer, R. Bulirsch: Introduction to Numerical Analysis. Springer-Verlag, New-York, 1993 (second edition). 24
- 5. S. Sysala: Numerical modelling of semi-coercive beam problem with unilateral elastic subsoil of Winkler's type, App. of Mathematics, Prague, in press. 24, 26, 27
- S. Sysala: Application of the Modified Semismooth Newton Method to Some Elasto-plastic Problems, Mathematics and Computer in Simulation, Modelling 2009, submitted. 24, 26, 27, 28



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

## Reusable classes in designing of mathematical models

Dalibor Frydrych · Igor Kopetschke

Abstrakt In this paper, the use of object approach [1] and design patterns [2] is presented in mathematics model implementation. It focuses on the contribution of interface based programming 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 mathematical 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 mathematical definition (equations) of the process. The search for an suitable 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 mathematical 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 mathematical appliance, mean a brand new implementation. This process is not very effective. This article presents Framework DF<sup>2</sup>EM. Framework DF<sup>2</sup>EM focuses on numerical techniques implementation, which work with space discretization (finite element, finite volume, etc). It brings complex approach to mathematical models. It defines basic model parts on a clearly abstract level, describes their interface and allows implementation of concrete classes.

Tato práce je realizována za podpory státních prostředků České republiky v rámci projektu VaV "Pokročilé sanační technologie a procesy" č. 1M0554 – program MŠMT "Výzkumná centra".

D. Frydrych · I. Kopetschke  $(\boxtimes)$ 

Ústav nových technologií a aplikované informatiky, Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, Technická univerzita v Liberci, Studentská 2, 461 17 Liberec 1, Česká republika

e-maily: dalibor.frydrych@tul.cz · igor.kopetschke@tul.cz

#### 1 Úvod

Složitější matematicko-fyzikální úlohy sebou nutně přinášejí potřebu vývoje stále komplexnějšího specializovaného software. Rozložíme-li celý proces na jednotlivé fáze dle časové osy, získáme následující základní kroky:

- a. definice a zadání úlohy,
- b. analýza problematiky,
- c. návrh modelu a matematických instrumentů,
- d. praktická implementace software.

Zatímco prvním třem bodům je vždy věnován maximální důraz a pečlivost, samotná implementace zůstává často v pozadí pozornosti a konečný produkt neodpovídá moderním standardům vývoje software. Výsledkem je tedy často software pouze jednoúčelově použitelný, obtížně rozšiřitelný, málo výkonný a v souhrnu degradující předcházející práci specialistů z oblasti matematiky a modelování.

Tento jev je také často zapříčiněn problémy v komunikaci mezi vývojáři a ostatními specialisty, kdy profesionální programátor často nerozumí složitému matematickému aparátu a naopak, matematik není schopen jasně a pro vývojáře srozumitelně definovat své požadavky.

Tento článek se zabývá řešením výše uvedených nedostatků. Nejdříve se zaměří na nejčastější chyby a nedostatky a následně popíše cesty k jejich řešení za použití moderních technologií. Maximální důraz bude kladen na univerzálnost a znovupoužitelnost jednotlivých modulů a komponent.

#### 2 Návrh a implementace modelu ISpace

Návrh a implementacie modelu **ISpace** řešícího práci s diskretizací prostoru demonstrují použití výše uvedených principů.

#### 2.1 Návrh datové struktury sítě

Diskretizace prostoru začíná definicí jednotlivých uzlů. Uzel (nod) je v síti jednoznačně definován označením, což je celočíselný identifikátor. Další vlastností uzlu je jeho třírozměrný vektor polohy.

Uzly jsou následně spojeny hranami, které vytyčují jednotlivé prvky(elementy) sítě. Počet hran uzavírajících prvek může být různý a tudíž datová struktury musí tuto skutečnost reflektovat a nesmí se omezit pouze na jediný typ prvku. Prvek je tedy charakterizován seznamem uzlů tvořících jeho vrcholy a následně celočíselným identifikátorem.

Další důležitou charakteristikou prvků je materiál. V rámci sítě se ovšem mohou vyskytovat prvky s lišící se materiálovou charakteristikou a tak se nabízí řešení registrovat tuto vlastnost přímo v prvku. Mnohem častěji je ovšem potřeba pracovat s množinou prvků stejného materiálu a proto je jako další vrstva datové struktury zaveden pojem domény.

Doména je ve své podstatě pouze virtuálním objektem sdružujícím prvky se stejnou materiálovou charakteristikou. Vlastnostmi domény tedy jsou seznam prvků patřících pod doménu a jednoznačná identifikace domény pomocí celočíselného identifikátoru. Jednotlivé domény jsou následně včleněny do vrstev (layers). Každá vrstva si uchovává svůj seznam domén a je podobně jako domény identifikována svým názvem (jménem).

Hierarchicky nejvyšším prvkem datové struktury je samotná síť zapouzdřující výše uvedené vrstvy. Každá síť je taktéž identifikována názvem (jménem). Celkový pohled na datovou strukturu je tedy vidět na obr. 2.1.



Obrázek 2.1 Schéma datové struktury sítě.

#### 2.2 Klasická implementace modelu

Nejčastěji užívaný přístup vytváření a implementace modelu má 2 stupně abstrakce a 2 stupně implementace. Nejdříve je stávající realita transformována na jednotlivé instance (objekty), poté jsou specifikovány třídy pro skupiny instancí. Následuje definice matematického aparátu popisujícího děj a sestavení konečného modelu. Posledním krokem je implementace zmíněných rovnic a modelu do tříd.

Tento přístup je sice z podstaty jednoduchý a objektově správný, ale nese sebou řadu nedostatků. Tím nejvážnějším je nutnost nové implementace a zásahů do původního kódu při každé změně diskretizace, topologie, matematického aparátu nebo popisů dějů. Dalším nedostatkem je tzv. těsnost vazeb mezi aplikačními komponentami, které jsou pevně provázány v aplikačním kódu.

#### 2.3 Implementace pomocí rozhraní

Rozhraní mohou sloužit jako datový typ místo konkrétní třídy. Rozhraní obsahují pouze deklaraci metod pro skupinu tříd toto rozhraní implementujících, čímž splňuje podmínku polymorfismu. Částečně tedy umožňuje zobecnění kódu a celkovou modularitu. Neodstraňuje však zcela těsné vazby, jelikož se v kódu programu vždy musí nakonec použít konkrétní třída pro vytvoření instance. Tuto nepříjemnou skutečnost lze částečně odstínit použitím reflexe nebo implementací dle návrhového vzoru Factory [3]. 2.4 Návrhové vzory a Spring Framework

Kombinace použití rozhraní a specializovaného frameworku Spring [4, 5] dává vývojáři konečně nástroj, jak vytvořit obecný a znovupoužitelný kód aplikace. Navíc umožňuje vyčlenění potenciálně variabilních prvků (např. cesty ke konfiguračním souborům, inicializace konstant a standardních hodnot, volba implementační třídy pro rozhraní, aj.) z kódu aplikace do snadno uživatelsky editovatelného xml souboru. Jednou ze základních funkcí Spring Frameworku je odstranění těsných vazeb z výsledného kódu. Spring principiálně aplikuje myšlenku neinvazivnosti, tzn. nepromíchává kód aplikace s vlastním API na rozdíl od klasických knihoven či jiných specializovaných frameworků. K tomuto účelu využívá návrhový vzor Inversion of Control (IoC).

Návrhové vzory (Design Patterns) [2, 3] lze obecně chápat jako pojmenovaná a popsaná řešení typických problémů. Nejedná se o konkrétní implementace řešící tyto problémy, ale jsou tvořeny souborem pravidel a vztahů popisující jak dosáhnout řešení problému. Návrhové vzory neřeší specifické problémy s malou mírou znovupoužití, naopak základní podmínkou je opakovatelnost problému, aby bylo možné použít popsané řešení i v budoucnu.

Výše zmíněný návrhový vzor IoC řeší odstranění těsných vazeb tím, že přenáší odpovědnost za vytváření, inicializaci a provázání objektů ven z aplikačního kódu, na takzvaný IoC kontejner. Objekty mají pouze povinnost poskytnout rozhraní pro vložení potřebných objektů z vnějšku. Konkrétní třída implementující rozhraní je dodána kontejneru přes výše zmíněný konfigurační xml soubor stojící mimo samotnou zkompilovanou aplikaci.

Spring implementuje ještě jeden návrhový vzor – Dependency Injection. Jedná se o speciální případ IoC a řeší samotné vkládání a spojování výsledných objektů.

#### 3 Praktické využití

Technologie programování proti rozhraní za využití specializovaných frameworků jsme využili pro implementaci modulu zodpovědného na načtení dat sítě a jejich konverzi na datový model sítě. Základním požadavkem byla robustnost, jednoduchá konfigurovatelnost, variabilita a znovupoužitelnost pro různé zdroje a formáty vstupních dat.

#### 3.1 Popis modulu pro čtení a konverzi dat

Základní komponentou modulu je rozhraní **IDataProvider**. Toto rozhraní poskytuje veřejné metody pro načtení, respektive uložení dat sítě a jejich konverzi na finální instanci rozhraní **ISpace**. Toto rozhraní poskytuje odkazy na jednotlivé datové struktury sítí v něm registrovaných.

Celý proces práce s daty je popsán pomocí rozhraní datové úlohy (ITaskData). Ve vstupním xml souboru jsou definovány následující logicky navazující sekce:

- název (identifikace) sítě,
- alias třídy zodpovědné za načtení dat sítě, cesta ke zdroji dat a jejich formát,
- volitelně lokální úložiště (např. relační databáze) včetně aliasů požadovaných tříd,
- $-\,$ seznam a identifikace vrstev sítě,
- -konverzní pravidla pro data (kopírování, přesun uzlů a prvků, aj.),
- alias třídy pro konverzi a výstup datové struktury sítě.
Implementace rozhraní IHolder registruje pomocí Spring Frameworku známé komponenty pro čtení (IReader), zápis (IWriter) a konverzi dat sítě (IConverter) a jejich aliasy. Na základě načtených pravidel v ITaskData poskytuje IHolder prostřednictvím IoC kontejneru instance konkrétních tříd pro čtení dat, jejich případný lokální zápis a konverzi pouze na základě tzv. *bean id* bez nutnosti vytvářet těsné vazby na konkrétní třídy přímo v aplikaci. IHolder je následně pomocí IoC instanciován v implementaci IDataProvider, viz obr. 3.1.



Obrázek 3.1 Schéma modulu pro čtení a konverzi dat sítě.

### 3.2 Ukázka implementace

Jako praktickou ukázku využití výše popisovaných technologií jsme zvolili rozhraní IWriter, IReader, dále xml soubor konfigurující IHolder a část kódu implementační třídy rozhraní IDataProvider demonstrující celý postup při načítání, ukládání a konverzi dat na výslednou ISpace.

```
public interface IReader<A,B> {
    public void setTask( A task );
    public B read();
}
```

Kód 3.1 Rozhraní IReader.

```
public interface IWriter<A,B> {
    public void setTask( A task );
    public void write( B data );
}
```

Kód 3.2 Rozhraní IWriter.

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<beans xmlns="http://www.springframework.org/schema/beans">
  <bean id="holder" class="holder.Holder" scope="singleton">
    <property name="readersRegister"></property name="readersRegister">
      <map>
        <entry key="Derby" value-ref="derbyReader"/>
        <entry key="MeshFile" value-ref="meshFileReader"/>
        <entry key="MeshSimpleFile" value-ref="meshSimpleFileReader"/>
      </map>
    </propertv>
    <property name="writersRegister"></property name="writersRegister">
      <map>
        <entry key="Derby" value-ref="derbyWriter"/>
      </map>
    </property>
    <property name="convertersRegister"></property name="convertersRegister">
      <map>
        <entry key="MeshConverter" value-ref="meshConverter"/>
      </map>
    </property>
  </bean>
  <!-- instance IReader -->
 <bean id="derbyReader" class="holder.readers.DerbyReader"/>
  <bean id="meshFileReader" class="holder.readers.MeshFileReader"/>
  <bean id="meshSimpleFileReader" class="holder.readers.MeshSimpleFileReader"/>
  <!-- instance IWriter -->
 <bean id="derbyWriter" class="holder.writers.DerbyWriter"></bean>
 <!-- instance IConverter -->
  <bean id="meshConverter" class="holder.converter.MeshConverter"/>
</beans>
```

Kód 3.3 Soubor xml s konfigurací pro IHolder.

```
/* vytvoreni aplikacniho kontextu Spring Frameworku */
ApplicationContext ac = new FileSystemXmlApplicationContext( "spring-config.xml");
IHolder holder = (Iholder)ac.getBean( "holder");
ITaskData<XMLElement> taskData = (ItaskData<XMLElement>)ac.getBean( "taskdata");
IReader<ITaskData,IMeshEntity> meshFileReader = holder.getReader( taskData,false );
IMeshEntity me = meshFileReader.read();
/* volitelne ukladani do lokalni DB */
IWriter<ITaskData,IMeshEntity> writer = holder.getWriter( taskData );
writer.write( me );
/* konec volitelne casti */
IConverter converter = holder.getConverter( taskData );
ISpace space = converter.convert( me );
```

#### Kód 3.4 Vzorová implementace rozhraní IDataProvider.

#### 4 Závěr

V článku byl popsán proces implementace použitý při výstavbě složitých matematicko-fyzikálních úloh. Tento postup je důsledně uplatňován v projektu  $DF^2EM$ . Tím je u to-

hoto projektu zajištěna znovupoužitelnost již vyvinutých a implementovaných komponent. Definice rozhraní a jejich důsledné využívání zajišťují snadnou rozšiřitelnost.

Princip obecnosti a znovupoužitelnosti byl aplikován při volbě úrovně, na níž je postupně realizován projekt  $DF^2EM$ . Jako základní úroveň byl zvolen aplikační rámec Spring Framework. Použití Springu umožnilo oddělení aplikační logiky od implementujících tříd a jejich případných iniciací a konfigurací. Uživatel projektu  $DF^2EM$  tedy není nucen zabývat se implementací na úrovni programovacího jazyka, ale může se soustředit pouze na sestavení matematického jádra modelu.

# Reference

- 1. B. Eckel: Thinking in Java, http://mindview.net/Books/TIJ4. 31
- E. Gamma, R. Helm, R. Johnson, J. Vlissides: Design Patterns: Elements of Reusable Object-Oriented Software, Addison-Wesley, 1994. 31, 34
- 3. R. Pecinovský: Návrhové vzory, Computer Press, 2007. 33, 34
- R. Johnson, J. Hoeller, A. Arendsen, T. Risberg, C. Sampaleanu: Professional Java Development with the Spring Framework, Wiley, 2005. 34
- 5. SpringSource Community, http://www.springsource.org. 34



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

# Verification of bellows air spring shape model

Dalibor Frydrych · Ludvík Prášil · Vladimír Kracík

**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 torus. 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. 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.

e-mail: dalibor.frydrych@tul.cz

Ludvík Prášil Department of Design of Machine Elements and Mechanisms, Faculty of Mechanical Engineering, Technical University of Liberec, Studentská 2, 461 17 Liberec 1, Czech Republic e-mail: ludvik.prasil@tul.cz

Vladimír Kracík Faculty of Education, Technical University of Liberec, Studentská 2, 461 17 Liberec 1, Czech Republic e-mail: vladimir.kracik@tul.cz

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

Dalibor Frydrych  $(\boxtimes)$ 

Institute of Novel Technologies and Applied Informatics, Faculty of Mechatronics, Informatics and Interdisciplinary Studies, Technical University of Liberec, Studentská 2, 461 17 Liberec 1, Czech Republic

# 1 Introduction

Even though the design of a BAS seems simple, see the Fig. 2.1(a), defining of statics characteristics of a BAS is quite a complex task.

The calculation has to take into account the following:

- Behaviour of compressed air inside of BAS.
- Behaviour of BAS fabric reinforced elastomer bellow, which is very anisotropic, in addition this anisotropy is changing with the level of deformation of the bellow.
- Contact between the BAS bellow and its retainer or between neighbour bellows together.

This calculation can be done by using a standard model systems based on FEM. However, such a solution is very time consuming. Only the preparation of input data for model takes several hours. In addition, in case of even a small change in design of the BAS or retainers, the job have to be reworked right from the beginning.

To solve this problem, a new alternative model with following advantages was developed:

- Model is easy to apply: user enters only a few main technical characteristics from the BAS drawing.
- Results available in a short time: calculation of the whole job should not take more than a few seconds.
- Sufficient precision of results: results are precise enough for the standard technical applications.

#### 2 Basic equations of bellows air springs

Model is based on following assumptions. Force generating axial shift (vertical moving of the upper retainer, denoted z), it is given only by air's work. For practical purposes is used positive direction for compression and negative direction for extension.



**Fig. 2.1** Design (a) and scheme (b) of the bellows air spring  $\Omega_1$  lower retainer;  $\Omega_2$  upper retainer; k meridian curve of fabric-reinforced elastomer bellows;  $R_e$  radius of the circular effective area; P, Q terminal points of bellows;  $T_1$ ,  $T_2$  contact points; M, N fictive points of release.

The entire axial force of BAS is caused by air pressure on the circle area with radius  $R_e$ . Part of the k curve laying on the right side from line M, N can be taken off, as forces in these points are only in radial direction. This circle area with radius  $R_e$  is known as effective area [1] and is defined by equation

$$S(z) = \pi R_e^2(z) , \qquad (2.1)$$

where  $R_e(z)$  is radius of release points M or N. When the principle of virtual work is used, equation for effective area is

$$S(z) = -\frac{dV(z)}{dz} , \qquad (2.2)$$

where V(z) is volume of BAS.

In this contribution is assumed that the fabric reinforced elastomer bellows are ideal (by ideal is meant absolute rigidity in tension and absolute elasticity in bend). This assumption reduces a spatial problem to a planar problem [1].

# 2.1 Theory of multi bellows air spring

Demand of enhancement of the axial shift is solved by serial assembly of bellows for the same value of effective area (loading). The separate bellows are isolated by detach rings. Detach rings have usually circle crosscut today. In big depression, neighbour bellows can get in contact between each other. In the specific conditions (high temperature of elastomer) bellows can get "glued" together. When this bond is broken in next opening of the bellows, pieces of rubber can be torn out. This cause faster wear and tear and has negative impact of their lifetime. In new trends, designer try do develop detach rings, which inhibit the contact of neighbour bellows.



Fig. 2.2 Design of the multi-bellows air spring; H height of whole multi-BAS,  $H_i$  height of one bellow of multi-BAS.

#### 2.2 Equations of multi bellows air spring

There is a common BAS assembly by n belows see Fig. 2.2. All belows are part of one spring, they share inside pressure, then

$$p = p_i, \qquad i = 1, 2, \dots, n,$$
 (2.3)

where p is pressure inside BAS,  $p_i$  is pressure inside *i*-th bellow and n is number of BAS bellows. For serial type of bellows then governing action/reaction law is

$$F = F_i = pS_i, \qquad i = 1, 2, \dots, n,$$
 (2.4)

where F is loading capacity of BAS,  $F_i$  is loading capacity of *i*-th bellow and  $S_i$  is effective area of *i*-th bellow. From equations above follows, that every bellows in multi-BAS must have the same effective area

$$S_i = S(z), \qquad i = 1, 2, \dots, n,$$
 (2.5)

where S(z) is effective area of multi-BAS for given shift z.

As concerns height  $H_i$  of bellows in multi-BAS similar equation applies

$$H = \sum_{i=1}^{n} H_i \,, \tag{2.6}$$

where H is sum height of whole multi-BAS and  $H_i$  is height of *i*-th bellow.

# 3 Mathematical core of model

Model is based on substitution of the free part of the meridian k as a part of circle [2].



**Fig. 3.1** Principle of model;  $\Omega_1$  lower retainer;  $\Omega_2$  upper retainer; P, Q terminal points of bellows;  $T_1$ ,  $T_2$  contact points;  $v_1$  length of boundary  $\Gamma_1$  between point Q and  $T_1$ ;  $v_2$  length of boundary  $\Gamma_2$  between point P and  $T_2$ ;  $\mathbf{x}_1$ ,  $\mathbf{x}_2$  vectors of coordinates of contact points T;  $\mathbf{n}_1$ ,  $\mathbf{n}_2$  unit vectors of exterior normal of boundary of domain  $\Omega$  in contact points T;  $\varphi_1$ ,  $\varphi_2$  angles of unit vectors  $\mathbf{n}_1$  and  $\mathbf{n}_2$ ; R radius of the circular arc of bellow.

This means to solve

$$v_1 + v_2 + R\Big((\pi - \varphi_{1(v_1)}) + (\varphi_{2(v_2)} - \pi)\Big) - L = 0, \qquad (3.1)$$

$$\left(\mathbf{x}_{1(v_{1})} + R \ \mathbf{n}_{1(v_{1})}\right) - \left(\mathbf{x}_{2(v_{2})} + R \ \mathbf{n}_{2(v_{2})}\right) = \mathbf{0}, \qquad (3.2)$$

where  $v_1$  is length of meridian part which is laying on boundary domain  $\Omega_1$  between points Q and  $T_1$ ,  $v_2$  is length of meridian part which is laying on boundary domain  $\Omega_2$ between points P and  $T_2$ , R is radius of the circular arc of bellows,  $\varphi_1$ ,  $\varphi_2$  are arguments of vectors  $\mathbf{n}_1$ ,  $\mathbf{n}_2$ , see Fig. 3.1.

The system of three equations (3.1) and (3.2) with three unknown variables  $v_1$ ,  $v_2$  and R is solved numerically by the generalized Newton's method. Iteration process of this model converge very fast, just a few hundredths of second for one shift z.

#### 3.1 Multi bellows problem solution

There are several approaches to multi-BAS issues. One of them is that a model for each type of spring is built (two-bellows, three-bellows spring), obviously free part of the below is always replaced by part of circle. This approach was tested but it proved to be too complicated. Each type of spring needs a different model designed and developed from the scratch. As much more efficient way of modelling multi-BAS was found, when is worked with multi-BAS as with several one-bellow air springs connect in into a series. This approach is limited by equations (2.5) and (2.6). They are solved in iterative process. At the beginning, heights of the bellows are chosen so the equation (2.6) equals. Effective area of all bellows should fit in equation (2.5), in convergent criterion respectively

$$|S_i - S(z)| < \epsilon, \qquad i = 1, 2, \dots, n.$$
 (3.3)

Good efficiency (speed and stability of convergence) is reached with bisection method.

#### 4 Verification of model

Results received from the model were compared to BAS characteristics received from an experiment which was performed in Laboratory of Department of Design of Machine Elements and Mechanisms at the Technical University of Liberec. Measurements in this experiment were done at constant inner pressure (isobaric process), so it was possible to replace the air inside of BAS by water. Usage of water allowed also to measure the inner volume V of the BAS. Second parameter which was measured was load capacity from which was calculated the effective area  $S_e$ .

Several BAS were measured. Following data come from smallest and biggest BAS type available:

- VJ 80–07: one bellow BAS with load capacity 700 kg and shift range  $\pm 30$  mm, see Figs. 5.1(a) and 5.1(b).
- VT 280-50: three bellows BAS with load capacity 5000 kg and shift range +120 mm, -150 mm, see Figs. 5.1(c) and 5.1(d).

Static characteristic received from model show good correlation with characteristics received from experiments. The deviation is more important for volume parameter V of smallest type of BAS VJ 80-07. This deviation seems to be caused by simplification used in the model (replacement of free part of the bellow curve by a circle arc). However, important fact is that this deviation is constant and can not therefore impact negatively the calculation of effective area  $S_e$  by the formula (2.2).

An important point is the deviation of the effective area of BAS VT 280-50, see Figs. 5.1(c) and 5.1(d). This deviation appeared at the extension range of the BAS when the extension reached the point, when the load capacity of BAS is not depending only on the contained air anymore, but start to depend on the elasticity of BAS bellow itself. This situation comes, when the deformation of the BAS reach beyond -90 mm of extension When extension reached -150 mm, the BAS bellow was torn our from the retainer. It has to be said that the extension is behind working range defined by producer.

#### 5 Conclusion

Model described in this contribution is applicable to calculation of geometrical characteristics of BAS. Model was finalized in format of CAD system and was equipped with a user-friendly interface. Designer, who is not familiar with modelling, can use it as a black-box tool. Designer of BAS, using the system and its graphical outputs can improve BAS designs and adjust the characteristics of newly designed spring so they fulfil exactly customer expectations. Designer of machines where BAS is used can, using this system, change shapes of BAS retainers so they fit in these machines.

Verification of model proved, that despite important simplifications in its structure, this model is sufficiently precise, to be used by designers for the choice of right type of BAS.

There are areas for further development. The assumption of constant bellows length is not quite exact. Bellows from fabric-reinforced elastomer change the length in dependence on deformation and on air pressure too. This issue needs new formulation of problem involving the interaction in the fabric-reinforced elastomer out of which bellows are made.

#### References

- O. Krejčíř: Pneumatic vibro-isolation (czech original: Pneumatická vibroizolace). Doctoral thesis, VŠST Liberec, 1986. 40
- L. Prášil, V. Kracík, D. Frydrych: Shape Modelling of Air Bellows Springs, Algoritmy 2005, pp. 142–149, Podbanské, Slovakia. 41



Fig. 5.1 Static characteristics (the effective area on upper picture, the volume on lower picture) of bellows air springs (a), (b) VJ 80-07; and (c), (d) VT 280-50; comparison of experimental data (dashed line) with data obtained by model (solid line).



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

# Změna hydraulických parametrů v modelu proudění diskrétní puklinovou sítí při zahrnutí vlivu mechaniky

Jiří Havlíček · Milan Hokr

Abstrakt Příspěvek se zabývá problematikou zahrnutí vlivu mechanického napětí do výpočtu proudění rozpukanou horninou. Výpočty jsou prováděny na modelové 2D diskrétní puklinové síti. 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.

Použitá metoda je založena na analytickém výpočtu napětí a deformace pro jednotlivé pukliny. Vliv napětí je vyhodnocen v podobě ekvivalentní hydraulické vodivosti bloku horniny a v podobě rozložení toku podél hranice.

# 1 Úvod

Z problematiky ukládání radioaktivního odpadu vychází mnoho otázek mezi nimiž je i úloha vlivu mechanického namáhání horniny na její hydraulické vlastnosti. Úložiště radioaktivního odpadu se předpokládá jako hlubinné, umístěné v kompaktních granitových horninách. Takovéto prostředí je však vždy porušené systémem puklin, které vznikaly v průběhu let geologickými ději a nakonec také při ražení tunelů úložiště.

Podobné horninové struktury se často popisují pomocí diskrétní puklinové sítě, čehož využíváme i v této práci. Řešíme vliv mechanického napětí ve zjednodušeném

Práce popsané v tomto článku byly provedeny v rámci mezinárodního projektu DECOVALEX (DEmonstration of COupled models and their VALidation against EXperiments). Názory vyjádřené v tomto článku jsou však názory autorů a nemusí být nutně názory financujících organizací.

Autoři děkují financující organizaci, kterou je SÚRAO, smlouva č. 2008/031/Slo.

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".

J. Havlíček  $(\boxtimes) \cdot M$ . Hokr

Ústav nových technologií a aplikované informatiky, Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, Technická univerzita v Liberci, Studentská 2, 461 17 Liberec 1, Česká republika

e-maily: jiri.havlicek@tul.cz  $\cdot$  milan.hokr@tul.cz

modelu, kdy uvažujeme jednotlivé pukliny nezávisle na okolních. Získané změny hydraulických parametrů puklin pak vstupují do výpočtu proudění.

Naším cílem je později rozšíření popisu pouze významných puklin, reprezentovaných v diskrétní puklinové síti, o okolní horninovou strukturu a vzájemné ovlivňování mechaniky puklin, čímž bychom reálněji popsali zkoumanou strukturu a děje v ní probíhající.

#### 2 Koncepce zahrnutí vlivu mechanického napětí

Základní myšlenkou je náhrada skutečného nepravidelného rozložení napětí ovlivněného složitou geometrickou strukturou puklin a jimi vymezených bloků matrice rovnoměrným rozložením napětí, což umožní vyhodnotit napětí na konkrétní puklinu nezávisle na ostatních.

Normálové a tečné napětí je vypočteno z mechanického modelu samostatné pukliny podle vztahů

$$\sigma_N = \sigma_x \sin^2 \alpha + \sigma_y \cos^2 \alpha \,, \tag{2.1}$$

$$\tau = \sigma_x \sin \alpha \cos \alpha - \sigma_y \sin \alpha \cos \alpha \,, \tag{2.2}$$

kde  $\sigma_x$  [MPa] a  $\sigma_y$  [MPa] jsou složky vnějšího napětí ve směrech souřadných os a  $\sigma_N$  [MPa] a  $\tau$  [MPa] jsou normálová a tečná složka napětí na puklině. Úhel  $\alpha$  [°] svírá osa pukliny s osou x.

Výpočet změny rozevření pukliny je popsán materiálovým modelem, který je definován zvlášť pro normálový a tečný směr.

Pro normálový směr je využita nelineární křivka napětí – deformace [2]. Změna rozevření  $\Delta b_{normal}$  [m] je dána vztahem

$$\Delta b_{normal} = \frac{9b\sigma_N}{10\sigma_N + \sigma_{nc}},\tag{2.3}$$

kde b [m] je původní rozevření,  $\sigma_N$  [MPa] normálové napětí a  $\sigma_{nc}$  [MPa] je kritické normálové napětí stanovené dle empirického vztahu

$$\sigma_{nc} = 0.487b + 2.51, \quad b \ [\mu m]. \tag{2.4}$$

Při započtení vlivu smykového napětí  $\tau$  v tečném směru uvažujeme elasto-ideálně plastický model s Mohr-Coulombovou pevnostní podmínkou. Očekáváme, že po překonání smykové pevnosti pukliny dojde k plastické deformaci, při které vlivem nerovností stěn pukliny (vyjádřeno parametrem dilatačního úhlu) dojde k mírnému rozevření pukliny. Pro ideálně plastický model smyku ale nelze stanovit deformaci z daného napětí bez zahrnutí nějakého druhu upnutí a dalších omezení.

Navržená metoda aproximuje plasticitu velmi slabě elastickým modelem (viz obr. 2.1, [4]). Cílem je obdržet kvantitativní vyjádření předpokladu, že delší puklina bude mít menší tuhost ve smyku než kratší puklina. Uvažujeme následující:

- bloky horniny jsou fixovány na koncích pukliny (hornina má řádově vyšší tuhost),
- normálová deformace v kolmých puklinách je zanedbatelná,
- pukliny končící na hranici nejsou upevněny v takovém případě je zapotřebí rozšíření předpokladu – např. měkký materiál nahrazující plasticitu,
- pro výpočet změny rozevření uvažujeme konstantní posunutí podél celé pukliny (i když právě ve středu pukliny je posunutí největší).



Obrázek 2.1 Modely nahrazení ideální plasticity, [4], rozšířeno J. Rutqvistem.

Obrázek 2.1 vpravo dole ukazuje mechanickou analogii pukliny jako dvou klouzajících bloků upevněných na koncích: jednoosý model nosníku upnutý na obou koncích a zatížený v ose rozloženou silou. Posunutí pak je

$$\Delta L = \frac{FL}{8ES} = \frac{\tau L}{8E}, \qquad (2.5)$$

$$k_s = \frac{\tau}{\Delta L} = \frac{8E}{L} \tag{2.6}$$

kde $k_s \; [{\rm MPa}\,\cdot\,{\rm m}^{-1}]$ ekvivalentní smyková tuhost v "plastickém" režimu.

Pro výpočet změny rozevření potřebujeme pouze část smykového posunutí  $u_{S,plast}$ [m], která přispívá k dilataci. To je

$$u_{S,plast} = \left(\tau - \tau_{strength}\right)/k_s \tag{2.7}$$

a odpovídající dilatace  $\Delta b_{shear}$  [m] (příspěvek smyku ke změně rozevření)

$$\Delta b_{shear} = \min\left(u_{S,plast}, U_{CS}\right) \tan\Psi, \qquad (2.8)$$

kde  $U_{CS}$  [m] je limit smykového posunutí přispívajícího k dilataci a  $\Psi$  [°] je dilatační úhel. Konečně nové rozevření  $b_{new}$  [m] při mechanickém zatížení je

$$b_{new} = b - \Delta b_{normal} + \Delta b_{shear} \,. \tag{2.9}$$

# 3 Definice modelové úlohy

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.

Oblast je tvořena čtvercem ve 2D o straně 20 m se středem v počátku souřadného systému (x, y), obsahující nehomogenní puklinovou síť definovaných parametrů. Síť puklin byla vygenerována stochasticky na základě dodaných hydrogeologických parametrů [1, 2] a proti běžným modelům zohledňuje korelaci mezi délkou pukliny a jejím rozevřením (šířkou), která koresponduje s reálným pozorováním hornin. Každé puklině přísluší jiná šířka (rozevření). Tabulka 3.1 ukazuje počet puklin v síti rozsah jejich základních parametrů, kterými jsou délka puklin L [m], rozevření puklin b [m] a jejich hydraulická vodivost K [m · s<sup>-1</sup>].

Tabulka 3.1 Parametry základní sítě.

počet puklin	7786
$L_{min}$ [m]	$1.87 \times 10^{-3}$
$L_{max}$ [m]	$2.03  imes 10^{+1}$
$b_{min}$ [m]	$4.19  imes 10^{-6}$
$b_{max}$ [m]	$1.97  imes 10^{-4}$
$K_{min}  [\mathrm{m \cdot s^{-1}}]$	$1.44 \times 10^{-5}$
$K_{max} \left[ \mathbf{m} \cdot \mathbf{s}^{-1} \right]$	$3.18 \times 10^{-2}$

#### 3.1 Varianty nahrazení plasticity

Výpočty níže jsou provedeny pro varianty, kdy je smyková pevnost globálně definovaná nebo kdy je závislá na délce pukliny. V prvním případě jde o parametrizaci přímou volbou  $k_S$  a v druhém případě Youngovým modulem E.

Tabulka 3.2 obsahuje čtyři varianty volby parametrů nahrazení ideálně plastického modelu jednou nebo druhou variantou zmíněnou výše. Varianta D je pak kombinací obou, kdy tuhost puklin uvnitř oblasti závisí na jejich délce a pro pukliny na hranici oblasti je zadána konstantní tuhost.

#### 3.2 Okrajové podmínky

Pro proudění je zadána Dirichletova okrajová podmínka po celé hranici odpovídající konstantnímu gradientu ve směru x resp. y. Maximální rozdíl tlakové výšky na hranici oblasti je  $p_2 - p_1 = 20$  m.

Pro výpočet mechaniky jsou zadány okrajové podmínky, kdy na oblast působíme vnějším tlakem ve směru osy x resp. y o hodnotách dle tab. 3.3. Poměr vertikálního a horizontálního napětí nabývá tedy hodnot 1, 2, 3 a 5.

Tabulka 3.2 Varianty nahrazení ideální plasticity.

Var.	Plastická smyková	Youngův	Efekt
	tuhost $k_S$	modul $E$	
А	45  GPa/m (1/10)	_	neznatelná hydraulická změna
В	4.5  GPa/m (1/100)		změna pro malé pukliny
$\mathbf{C}$		2000 MPa	změna pro velké pukliny
D	0.45  GPa/m (1/1000)	86.4  GPa	změna pro hraniční pukliny

Tabulka 3.3 Hodnoty zadaného vnějšího napětí.

Napětí ve směru osy $x$	Napětí ve směru osy $y$
$\sigma_x = 5 \text{ MPa}$	$\sigma_y = 5 \text{ MPa}$
$\sigma_x = 10 \text{ MPa}$	U U
$\sigma_x = 15 \text{ MPa}$	
$\sigma_x = 25 \text{ MPa}$	

## 4 Řešení úlohy

Pro výpočet úlohy uvažujeme ustálené proudění, které se na jednotlivých puklinách řídí vztahy

$$\mathbf{u} = -K\nabla p\,,\tag{4.1}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = q \,, \tag{4.2}$$

kde **u** [m · s<sup>-1</sup>] je rychlost, p [m] tlaková výška a q [m · s<sup>-1</sup>] zdroje a propady. K je hydralická vodivost závislá na rozevření pukliny b dle vztahu

$$K = \frac{\rho g}{12\mu} b^2 \,. \tag{4.3}$$

V místě průsečíků puklin je předpokládána spojitost tlaků a bilance toku.

Úloha je numericky řešena smíšenou hybridní metodou konečných prvků s lineárními vektorovými bázovými funkcemi pro rychlost a po částech konstantními funkcemi pro tlaky. Pro úlohu s multidimenzionální kombinací 1D, 2D a 3D elementů je metoda formulována v [6] a implementována v kódu FLOW123D vyvinutém na Technické univerzitě v Liberci [5]. Kód používá externí řešič soustavy lineárních rovnic, která pro uvedenou formulaci má indefinitní symetrickou matici. V tomto případě byl využit řešič programu MATLAB. Pro postprocesing je použit program GMSH.

Vlivem složité struktury protínání puklin jde o rozsáhlou úlohu se 74826 elementy s velkým poměrem délky nejdelšího a nejkratšího. Podmíněnost úlohy je ovlivněna kombinací geometrických a materiálových koeficientů, což je podrobněji rozebráno v [3].

## 5 Výsledky výpočtů se zahrnutím vlivu mechanického zatížení

Na výše definovanou úlohu byly aplikovány okrajové podmínky vnějšího napětí dle tab. 3.3. Dále byly otestovány varianty nahrazení plasticity zmíněné v tab. 3.2.

Výsledky vyhodnocení vlivu mechanického napětí (parametrizace vodorovného při konstantním svislém 5 MPa) na tok ve vodorovném a svislém směru znázorňuje obr. 5.1. Jednotlivé varianty A, B, C, D jsou různé typy modelu nahrazujícího ideální plasticitu dle tab. 3.2.

Příklad výsledků je uveden na obr. 5.2 a 5.3. Vidíme očekávanou koncentraci toku do vybraných velkých puklin vhodné orientace a nárůst vodivosti při zvyšování rozdílu mezi vodorovným a svislým zatížením, proti stavu se stejným zatížením v obou směrech. Hodnota závisí na konkrétních zvolených parametrech modelu plasticity.

Výsledky předběžného porovnání výpočtů TUL s dalšími týmy potvrzují shodu v míře běžných nejistot takovýchto typů modelů. Prezentovaná metoda výpočtu a následné simulace proudění je schopna reprodukovat pozorované zvýšení hydraulické vodivosti při velkém poměru mechanického napětí ve směru tohoto napětí.



**Obrázek 5.1** Vyhodnocení vlivu mechanického napětí na tok ve vodorovném (vlevo) a svislém (vpravo) směru.



**Obrázek 5.2** Porovnání nezatíženého stavu (vlevo) a zatížení 5 : 5 MPa (vpravo) se stejnou barevnou škálou.

#### Spolupráce v projektu Decovalex-2011

V rámci projektu Decovalex-2011 se na výpočtech prezentované úlohy účastnily tři týmy. Tým KTH Stockholm (Lanru Jing, Zhihong Zhao) použil program UDEC pro mechaniku i proudění. Tým NDA/ICL/Serco/LBNL (Colin Leung, Andrew Hoch, Jonny Rutqvist, Robert Zimmermann) aplikoval dva různé postupy. V prvním využil program NAPSAC pro proudění na diskrétní síti s doprovodným jednoduchým výpočtem mechaniky na jednotlivých puklinách a ve druhém kombinaci programů TOUGH (proudění) a FLAC (napjatost) s puklinou reprezentovanou vybranými elementy diskretizace 2D kontinua. Tým TUL (M. Hokr a kol.), který použil program FLOW123D s doplňkovým výpočtem mechaniky na podobném základě jako výše uvedené řešení s NAPSAC.

## Reference

 A. Baghbanan, L. Jing: Hydraulic properties of fractured rock masses with correlated fracture length and aperture, Int. J. of Rock Mech. and Min. Sci. 44(5), pp. 704–719 (2007). 48



**Obrázek 5.3** Nahrazení plasticity pro poměr napětí 25 : 5. Varianty A–D: vlevo nahoře (A) tuhost 45 GPa/m, vpravo nahoře (B) globální tuhost 4.5 GPa/m vlevo dole (C) délkově závislá tuhost E = 2000 MPa, vpravo dole (D) délkově závislá tuhost E = 86.4 GPa a globální tuhost 0.45 GPa/m pro okrajové pukliny.

- A. Baghbanan, L. Jing: Stress effects on permeability in fractured rock mass with correlated fracture length and aperture, Int. J. of Rock Mech. and Min. Sci. 45(8), pp. 1320–1334 (2008). 46, 48
- M. Hokr, J. Kopal, J. Havlíček: Řešení úlohy proudění v rozsáhlé diskrétní síti puklin v kontextu sdružených úloh proudění-mechanika, Seminar on Numerical Analysis, Institute of Geonics AS CR Ostrava, 2009 pp. 46–49.
- J. A. Hudson, L. Jing, I. Neretnieks: Technical Definition of the 2-D BMT Problem for Task C, Decovalex-2011 project, 5 May 2008. 46, 47
- 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, Technical report, TU Liberec, 2008. 49
- J. Šembera, J. Maryška, J. Královcová, O. Severýn: A novel approach to modelling of flow in fractured porous medium, Kybernetika 43/4 (2007), pp. 577–588.



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

# Modelování toků pomocí softwaru Flow123D se započtením nejistot vstupních parametrů – případová studie

Josef Chudoba

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.

# 1 Úvod

Cílem příspěvku je v rámci případové studie modelovat toky přes hranici a koncentraci transportující látky na jednotlivých elementech výpočtové sítě hypotetické oblasti. Danou oblast zde představuje zjednodušený model hlubinného úložiště radioaktivních odpadů. V rámci citlivostní analýzy vstupních parametrů je uveden způsob určení pravděpodobnosti průniku radioaktivních látek na povrch. Vypočtená pravděpodobnost je jedním ze vstupů pro následné stanovení celkového rizika.

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".

J. Chudoba  $(\boxtimes)$ 

Ústav nových technologií a aplikované informatiky, Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, Technická univerzita v Liberci, Studentská 2, 461 17 Liberec 1, Česká republika

e-mail: josef.chudoba@tul.cz

Při modelování proudění podzemní vody a transportu kontaminantů se v současné době předpokládá, že vstupní parametry jsou přesně předem známé. Ve skutečnosti řadu těchto parametrů není možné přesně predikovat a je nutné provést citlivostní analýzu vstupních parametrů. Mimo to, je nutné důvěryhodně prokázat, že kontaminant se v průběhu statisíc let nedostane k povrchu a tím neohrozí bezpečnost budoucích generací a zároveň nepoškodí kvalitu podzemních vod a ovzduší.

Pro modelování proudění podzemní vody a transportu kontaminantů byl sestaven software FLOW123D [5], který je v této práci využíván pro stanovení pravděpodobnosti průniku kontaminantu k povrchu.

Problém při stanovení výstupů je nepřesnost vstupních dat. Nepřesnosti vstupních dat jsou dány například nepřesným měřením, nemožností získání přesných vstupních údajů, nehomogenitou horninové matrice, nepřesným geologickým průzkumem, nepřesným určením puklin v horninové matrici, chybami při měření, zjednodušením modelu atd.

Ve vstupních parametrech softwaru se předpokládá, že všechny hodnoty jsou přesně dány. V předcházejícím odstavci jsou uvedeny některé důvody, proč dochází k nepřesnostem vstupů. Cílem úlohy je změnou okrajových podmínek a nebo geologických vlastností hornin určit citlivost modelu na výstupu.

V této práci je kladen důraz na posouzení rizik v případě, že budou proti předpokladu výrazně odlišné okrajové podmínky úlohy nebo jiné geologické vlastnosti horninové matrice. Příspěvek by měl přispět k popsání míry rizika, že kontaminace dosáhne povrchu oblasti. V současné době je riziko definováno jako součin pravděpodobnosti nežádoucí události a předpokládaných následků. V této zprávě je provedeno vyhodnocení pravděpodobnostní složky rizika. Pomocí metody Monte Carlo, která je založena na mnohonásobném opakování stejného náhodného pokusu s odlišnými vstupními parametry lze stanovit pravděpodobnost, že kontaminace dosáhne povrchu oblasti. Určení této pravděpodobnosti se zabývá citlivostní analýza vstupních parametrů.

#### 2 Typy citlivostních úloh

Lze rozlišit dva základní typy citlivostních úloh. U prvního typu se vypočtou minimální a maximální hodnoty neznámých parametrů. U druhého typu se měnící se parametry generují stochasticky.

U prvního typu se provede výpočet pro střední hodnotu měněného parametru a následně opakovaně pro předpokládanou minimální a maximální hodnotu sledovaného parametru. Jestliže se mění více parametrů potom se pro každý zvolí minimální a maximální hodnota. Celkem je potřebné vytvořit 2n+1 výpočtů, kde n značí počet měnících se parametrů. Výstupem z programu FLOW123D je 2n+1 modelů, které se mezi sebou porovnávají a které lze vizualizovat pomocí softwaru GMSH. Tento způsob má výhodu v rychlosti provedení citlivostní analýzy, kdy je předem znám počet výpočtů a jednoduché interpretaci výsledků. Nevýhoda tohoto způsobu spočívá především v tom, že není zohledněn pravděpodobnostní charakter vstupních parametrů. Obvykle lze předpokládat, že skutečná hodnota vstupního parametru (pokud ji lze interpretovat na větší oblasti jednou hodnotou) bude blízká střední hodnotě než minimální/maximální.

Pomocí této metody nelze určit pravděpodobnost nežádoucí události. Například, že kontaminant dosáhne okraje oblasti. Protože míra pravděpodobnosti je jeden ze vstupů pro určení celkového rizika, není tento způsob doporučován pro analýzu rizik. U druhého typu analýzy se zohledňuje pravděpodobnostní charakter vstupních parametrů. U sledovaného parametru se vybere statistické rozdělení, kterým se předpokládá, že lze popsat danou veličinu. Například hodnota koeficientu tenzoru vodivosti lze popsat pomocí logaritmicko normálního rozdělení. Zjistí se charakteristické parametry daného rozdělení – střední hodnota, rozptyl nebo další popisné parametry. Pomocí generátoru náhodných čísel se stanoví hodnoty parametrů. Metodou Monte Carlo se získají z měnících se vstupních hodnot realizace náhodného pokusu. Jejich opakováním (se změněnými vstupy) se získá sada výstupů, které popisují stejný pokus, ale které dávají odlišné výstupy. Jejich vzájemným setříděním lze získat hypotetickou distribuční funkci určitého výstupního parametru. Například distribuční funkci přetoku přes určitou část hranice oblasti nebo míru koncentrace na významném elementu v určitém čase. Pomocí tohoto druhého způsobu se nezíská hodnota parametru, ale distribuční funkce.

Významným elementem mohou být například elementy na horním okraji oblasti, které charakterizují průnik radioaktivních látek a jejich šíření do podzemních vod a biosféry. Výstupem z modelu může být určení pravděpodobnosti, že kontaminující látky dosáhnou daného elementu v určitém čase. Protože tato pravděpodobnost je velmi nízká, je nutné využít pro její určení metody Monte Carlo s generováním vstupních parametrů pomocí metody "importance sampling".

Výhoda tohoto způsobu spočívá především v tom, že lze relativně přesně popsat pomocí pravděpodobnostního přístupu výstupní hodnoty. Jeho nevýhoda spočívá v delší časové náročnosti z důvodu provedení velkého množství realizací a horší intepretovatelností výsledků. Nelze opomenout i mnohem náročnější požadavky na objem uložených dat v počítači.

V rámci tohoto příspěvku se budu zabývat druhým typem citlivostní analýzy, tj. generování vstupů pomocí metody Monte Carlo.

#### 3 Citlivostní metoda založená na stochastickém principu

U druhého typu citlivostní analýzy se zohledňuje pravděpodobnostní charakter vstupních parametrů. Stanoví se parametry, které se mohou měnit v rámci citlivostní analýzy. Pro tyto sledované parametry se vybere statistické rozdělení, kterým je možné popsat danou vstupní veličinu. Pro předpokládané rozdělení se zjistí střední hodnota a často odhadne rozptyl daného rozdělení. Citlivostní analýza se provádí metodou Monte Carlo, kdy se sledují výstupní hodnoty vznikající na základě měnících se vstupních hodnot.

#### 3.1 Typy využívaných statistických rozdělení

Mezi nejčastěji používaná rozdělení při modelování citlivostních úloh a která lze zároveň použít v otázkách hlubinného úložiště patří [2, 1, 6]:

normální rozdělení

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right), \qquad E(X) = \mu, \qquad D(X) = \sigma^2;$$

logaritmicko normální rozdělení

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sigma x \sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-(\ln(x)-\mu)^2}{2\sigma^2}\right), & x > 0, \\ 0, & x \le 0, \end{cases}$$

$$E(X) = \exp\left(\mu + 0.5\sigma^2\right), \qquad D(X) = \exp\left(2\mu + \sigma^2\right)\left(\exp\left(\sigma^2\right) - 1\right);$$

beta rozdělení

$$f(x) = \frac{(x-a)^{\alpha-1}(b-x)^{\beta-1}}{B(\alpha\beta)(b-a)^{\alpha+\beta-1}}, \qquad a < x < b, \quad \alpha, \beta > 0,$$
$$E(X) = a + \frac{b\alpha}{\alpha+\beta}, \qquad D(X) = \frac{\alpha\beta(b-a)^2}{(\alpha+\beta)^2(\alpha+\beta+1)^2}.$$

#### 3.2 Výstupy z modelu

Výstupem z citlivostní úlohy je pravděpodobnostní funkce závislá na:

- hodnotě koncentrace v daném čase t na určitém významném elementu,
- hodnotě toku na určité části stěny.

Pravděpodobnostní funkce označuje pravděpodobnost, že koncentrace látky v daném čase a určitém místě nepřekročí určitou hodnotu. Obdobně lze interpretovat na hodnotu toku určitým místem v daném čase.

Z určené distribuční funkce popisující hodnotu koncentrace na významném elementu lze určit pravděpodobnost nežádoucí míry koncentrace radioaktivní látkou. Podle míry koncentrace lze stanovit možné následky a tím určit celkové riziko vyplývající z umístění hlubinného úložiště. Významný element může představovat část povrchu modelované oblasti, nebo například město či lidské sídlo.

#### 3.3 Řešený příklad

V rámci bezpečnostní analýzy je úkolem stanovit distribuční funkci přetoků přes jednotlivé části hranice a dále určit distribuční funkci koncentrace látky na významných elementech v oblasti.

Ve zprávě [3] a [4] jsou uvedeny modely bloků horniny, které mají různou vnitřní geometrii a odlišnou geologickou strukturu bloků. Bloky, které jsou uvedeny ve zprávě mají velikost  $1000 \times 1000 \times 200$  m nebo 250 m. Pro potřebu příkladu citlivostní analýzy byl vybrán blok MIL113, který neobsahuje horninové rozhraní, ale zahrnuje čtyři vertikální a dva horizontální zlomy. Struktura geometrie je uvedena na obr. 3.1, Geologická struktura bloku je motivována geologickou strukturou melechovského masivu. Pro uvažovaný blok je připravena geometrie a následně vygenerována výpočetní síť. Pro výpočet simulační úlohy je využit program FLOW123D. Síť obsahuje celkem 5672 uzlů a 31645 elementů. Z toho 4271 elementů je 2D a 27374 ve 3D. V úloze je sledován charakter proudění a transportu v bloku horniny v hloubce do 200 m. Pro okrajové podmínky pro proudění je zadána hodnota gradientu 0.05 v příslušném směru. V okrajové podmínce pro transport je na definovaných elementech podél souřadnic (1000, 375, z) vložena konstantní hodnota kontaminace látky. V počáteční podmínkách transportu se předpokládá, že na celé oblasti je nulová kontaminace mimo hranici.

Na oblasti je zadána konstantní hydraulická vodivost na puklinových strukturách 0.1 m/rok a vodivost horniny mimo puklinový systém 0.001 m/rok. Při výpočtech je uvažováno rozevření puklin v hodnotě 0.1 m (puklina včetně okolí). Aktivní porozita porézního prostředí 0.01 a puklin 0.05.



Obrázek 3.1 Náhled geometrie s označením GEO1.

V rámci citlivostní analýzy byl parametr tenzoru hydraulické vodivosti na puklinách popsán pomocí logaritmicko normálního rozdělení. Střední hodnota parametru je 0.1 m/rok. Předpokládá se, že 90 % dat je v intervalu [0.01; 1] m/rok. To znamená, že po zlogaritmování jsou data popsána normálním rozdělením se střední hodnotou -1 a 90 % dat je v intervalu [-2; 0]. Z těchto hodnot byl určen rozptyl normálního rozdělení. Vstupní data jsou generována z normálního rozdělení a substitucí  $y = 10^x$  se získá vstupní hodnota z logaritmicko normálního rozdělení. Pro parametr tenzoru hydraulické vodivosti horniny bylo použito logaritmicko normální rozdělení. Střední hodnota parametru je 0.001 m/rok. Předpokládá se, že 90 % dat je v intervalu [0.0001; 0.01] m/rok. Hodnoty hydraulické vodivosti jsou shodné na celé oblasti horninové matrice i na puklinách. Oprávněnost použít logaritmicko normální rozdělení spočívá v tom, že v literatuře se uvádí hodnoty pro hydraulickou vodivost v řádu  $10^x$ , kde x je celé číslo.

V analýze citlivosti nejsou měněny parametry aktivní porozity porézního prostředí i puklin a velikost rozevření puklin. Obdobně nejsou měněny okrajové a počáteční podmínky.

Metodou Monte Carlo bylo vytvořeno 50 simulací. Program FLOW123D v současnosti neumožňuje, aby byly vstupní informace měněny v souboru bcd.ini, nebo flow.ini. Vstupní parametry je nutné měnit ručně.

Výsledky pro přetoky přes části hranice označené čísly 1, 3 a 5 jsou uvedeny na obr. 3.2. V grafech jsou vyznačeny 5% a 95% kvantily hodnoty přetoků přes danou hranici. Výsledky z grafů lze interpretovat otázkou "s jakou pravděpodobností bude přetok přes hranici menší než nějaká hodnota".

Zajímavé je porovnání s citlivostní analýzou, která byla provedena podle prvního způsobu. Přetok přes hranici 1 se pohyboval v prvním případě v rozmezí [-20.9; 1004] m<sup>3</sup>/rok. Zatímco dle metody Monte Carlo je 90% interval spolehlivosti [25; 760] m<sup>3</sup>/rok. Obdobně pro přetok přes hranici 3 je výsledek [-1.81; 0.35] m<sup>3</sup>/rok a metodou Monte Carlo [20; 0.3] m<sup>3</sup>/rok. Přetok přes hranici 5 původně [-1685; -27.2] m<sup>3</sup>/rok. Metodou Monte Carlo [-1325; -41] m<sup>3</sup>/rok. Obdobně byla vytvořena citlivostní analýza na významných elementech, které již byly zvoleny v minulém příkladu, tj. elementy 23061 a 28816. Výsledky jsou uvedeny na obr. 3.3. Na elementu 23061 je 90% interval spolehlivosti koncentrace látky v čase 50000 h [0.04; 1247]. Z výsledků v grafu lze určit pravděpodobnost, že do daného místa dojde čelo koncentrační vlny, která je asi 80 %.



Obrázek 3.2 Distribuční funkce přetoků přes jednotlivé části hranice oblasti.

Výsledek pro střední hodnoty parametrů dle metody stanovení minima a maxima činí  $1001 \text{ m}^3/\text{rok}.$ 

Na elementu 28816 je 90% interval spolehlivosti koncentrace látky v čase 50000 h [0.01; 647]. Pravděpodobnost, že do daného místa dojde čelo koncentrační vlny je asi 50%. Výsledek pro střední hodnoty parametrů dle metody stanovení minima a maxima činí 67 m<sup>3</sup>/rok. Logaritmicko normální rozdělení lze nahradit i beta rozdělením. Beta rozdělení má oproti logaritmicko normálním rozdělení výhodu, že je definováno i pro záporné hodnoty a je omezeno na interval [a; b].

# 4 Závěr

V rámci řešené úlohy jsou popsány nástroje, které přispívají k posouzení ekologických následků při provozování hlubinného úložiště. Rizika, která vznikají působení nežádoucí události ovlivňují dva základní činitele. Prvním je pravděpodobnost výskytu a druhým jejich následky. Tato práce se zabývá především prvním hlediskem, kdy je popsána metodika ke stanovení pravděpodobnosti nežádoucí události. Ta je popsána jako průnik kontaminace z hlubinného úložiště na povrch oblasti.

Na půdě Technické univerzity v Liberci byl vytvořen software FLOW123D, který umožňuje modelovat proudění vody a transport kontaminující látky v podzemí. Zá-



Obrázek 3.3 Distribuční funkce koncentrací látek na významných elementech oblasti.

roveň byl vytvořen matematický model oblasti melechovského masivu. V rámci této úlohy byly měněny okrajové podmínky modelu a vstupní geologické parametry hornin a puklin. Hodnoty měněných parametrů byly získávány pomocí metody Monte Carlo. Výsledkem těchto úloh je například určení:

- distribuční funkce přetoků přes určitou část hranice oblasti,
- distribuční funkce koncentrace určité látky na významném elementu v pevně daném časovém okamžiku.

Významný element na povrchu oblasti může představovat například město nebo lidské obydlí. V rámci řešení byla řešena řada úloh, jejichž výsledky jsou uvedeny v kap. 3.3. Výsledky tvoří distribuční funkce přetoků přes hranici oblasti a koncentrace na významných elementech.

### Reference

- 1. J. Anděl: Matematická statistika, SNTL Praha, 1978. 54
- J. Hátle, J. Likeš: Základy počtu pravděpodobnosti a matematické statistiky, SNTL Praha, 1972. 54
- J. Královcová, K. Císařová: Výpočet scénářů vývoje migrace vybraných radionuklidů, TU Liberec, 2008. 55
- 4. J. Královcová, J. Kopal, J. Maryška, D. Pelikánová, L. Zedek: Hodnocení procesů transportu RN v různých typech hostitelské horniny s různou geologickou stavbou, TU Liberec, 2008. 55
- 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. 53
- 6. ReliaSoft Corporation, http://www.weibull.com. 54



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

# Drain elements in the boundary elements method

Karel Kovářík

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.

# 1 Basic equations

# 1.1 Governing equations of groundwater flow

This section is dedicated to very brief overview of governing equations of groundwater flow. The basic equation describing the 3D groundwater flow with constant coefficients

K. Kovářík (⊠) Žilinská univerzita, Univerzitná 8215/1, 010 26 Žilina, Slovakia e-mail: kovarik@fstav.uniza.sk

This work was supported by European Fund of Regional Development under the contract Nº 26220120027 Centre of Excellence in Transport Engineering.

of filtration can be written as

$$k_x \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + k_y \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + k_z \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} + \sum_{i=1}^{N_q} q_i = 0.$$
(1.1)

This equation should be transformed by the following co-ordinate transformation

$$\hat{x} = x$$
,  $\hat{y} = y\sqrt{\frac{k_x}{k_z}}$ ,  $\hat{z} = z\sqrt{\frac{k_x}{k_z}}$ 

into Poisson equation

$$\frac{\partial^2 h}{\partial \hat{x}^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial \hat{y}^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial \hat{z}^2} + \sum_{i=1}^{N_q} \frac{q_i}{k_x} = \hat{\bigtriangleup}h + \sum_{i=1}^{N_q} \frac{q_i}{k_x} = 0.$$
(1.2)

The usual boundary conditions of this equation can be expressed as the Dirichlet BC  $(h = h_0 \text{ at the boundary } \Gamma_1)$  or as the Neumann boundary condition  $(\frac{\partial h}{\partial n} = q_0 \text{ at the boundary } \Gamma_2)$ .

#### 1.2 Weighting residuals method

The boundary elements method is a part of the more general group of the weighted residuals methods. The approximate solution is formulated using the base functions as

$$\tilde{h}(x_i) = \sum_{k=1}^{N} \alpha_k \Phi_k(x_i)$$
(1.3)

where  $\Phi_k$  is the set of base functions. Then equation (1.2) and all boundary conditions are not fulfilled exactly but there are errors  $\epsilon$  and  $\epsilon_{\Gamma}$ , respectively. The principle of the weighted residuals method demands that a weighted average of a chosen set of weight functions  $w_i$  equals zero, i.e.

$$\langle (\epsilon - \epsilon_{\Gamma}), w_j \rangle = 0, \quad j = 1, \dots, N.$$
 (1.4)

We can then formulate our basic equation according this principle as

$$\int_{\Omega} \Delta \tilde{h} w_j d\Omega = \int_{\Gamma_2} \left( \frac{\partial \tilde{h}}{\partial n} - q_0 \right) w_j d\Gamma_2 + \int_{\Gamma_1} \left( \tilde{h} - h_0 \right) w_j d\Gamma_1 \,. \tag{1.5}$$

#### 1.3 Inverse formulation

Instead of the Green theorem which is used in the weak solution (see e.g. [1]), we use the Green formula. It uses two functions f, g which are continuous together with their derivatives of the 1st and the 2nd order in a domain  $\Omega$ . When we apply this formula to the equation (1.5) we obtain

$$\int_{\Omega} \tilde{h} \Delta w_j d\Omega = \int_{\Gamma_2} \tilde{h} \frac{\partial w_j}{\partial n} d\Gamma_2 - \int_{\Gamma_2} q_0 w_j d\Gamma_2 - \int_{\Gamma_1} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial n} w_j d\Gamma_1 + \int_{\Gamma_1} \frac{\partial w_j}{\partial n} h_0 d\Gamma_1 .$$
(1.6)

The name inverse formulation is derived from the fact that the functions  $\tilde{h}$  and w"change their places" on the left-hand side of equation (1.6). Simultaneously, we changed the requirements put on the continuity of base functions  $\Phi$  and weight functions w. The base functions belong only to the  $L_2$  space and the weight functions now belong to the  $W_2^{(2)}$  space. As the weight functions can be chosen more or less arbitrarily, we can set them to fulfil the following equation

$$\Delta w_j = \delta_j \tag{1.7}$$

i.e. we choose the fundamental solution  $w^*$  as the weighting functions. The equation (1.6) is now

$$c_i\tilde{h}_i - \int_{\Gamma_2} \tilde{h} \frac{\partial w_j^*}{\partial n} d\Gamma_2 + \int_{\Gamma_2} q_0 w_j^* d\Gamma_2 + \int_{\Gamma_1} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial n} w_j^* d\Gamma_1 - \int_{\Gamma_1} \frac{\partial w_j^*}{\partial n} h_0 d\Gamma_1 = 0.$$
(1.8)

This is the basic equation of the boundary elements method.

#### 2 Boundary elements method

#### 2.1 Simple element

Now we can divide the boundary  $\Gamma$  of the domain  $\Omega$  into the elements and we can approximate the solution over each element according equation (1.3). The basis functions  $\Phi_i(x) \in L_2$  and therefore the simplest and quite sufficient basis function is  $\Phi_i = 1$ . Then the element has only one node placed in the centroid of the element (see Fig. 2.1(a)) and the basic equation is simplified to

$$c_i \tilde{h}_i + \sum_{j=1}^N q_j \int_{\Gamma_j} w_{ij}^* d\Gamma_j - \sum_{j=1}^N \tilde{h}_j \int_{\Gamma_j} \frac{\partial w_{ij}^*}{\partial n} d\Gamma_j = 0$$
(2.1)

where  $h_j$  and  $q_j$  are the potential and the derivative in the outward normal direction in the *j*th element, respectively. The equation (2.1) can be written in matrix form as

$$\mathbf{H} \cdot \mathbf{h} = \mathbf{G} \cdot \mathbf{q} \tag{2.2}$$

where  $H_{ij} = c_i \delta_{ij} + \int_{\Gamma_j} w_{ij}^* d\Gamma_j$  and  $G_{ij} = \int_{\Gamma_j} \frac{\partial w_{ij}^*}{\partial n} d\Gamma_j$ .

Fundamental solution for the 3D Laplace operator is

$$w_{ij}^* = \frac{1}{4\pi r_i j}$$

where  $r_{ij} = ||x_i - x_j||$ . The Dirichlet boundary conditions are prescribed at the elements on the part  $\Gamma_1$  of the boundary, i.e. the values of potential are known  $(\tilde{h}_j = h_0)$ . The Neumann boundary conditions are prescribed at the elements on the other part  $(\Gamma_2)$  of the boundary and the values of derivative of potential in the direction of the outward normal is known  $(q_j = q_0)$ .

## 2.2 Wells and drains

Influence of wells can be simply expressed adding the extra two parts to the equation (2.1) (see (2.3)). The first part concerns about the point wells which create a singular point in the flow field. The second part expresses the influence of line sources

$$c_{i}\tilde{h}_{i} + \sum_{j=1}^{N} q_{j} \int_{\Gamma_{j}} w_{ij}^{*} d\Gamma_{j} - \sum_{j=1}^{N} \tilde{h}_{j} \int_{\Gamma_{j}} \frac{\partial w_{ij}^{*}}{\partial n} d\Gamma_{j} + \sum_{k=1}^{N_{Q}} \frac{Q_{k}}{k_{x}} w_{ik}^{*} + \sum_{k=1}^{N_{Q_{L}}} \frac{q_{k}}{k_{x}} \int_{L_{k}} w_{ik}^{*} = 0.$$
(2.3)

Drains can be included into solution as the line wells with unknown discharge. The specific discharge of drain  $(q_k)$  is then the unknown variable and the potential  $\tilde{h}_k$  is the value of the z-coordinate of the one node in the middle of the drain element (see Fig. 2.1(b)).



Fig. 2.1 (a) simple triangular element; (b) drain element; (c) non-homogeneous domain.

#### 2.3 Non-homogeneous domains

The non-homogeneous domains must be solved like partially homogeneous ones. That means this domain is divided into several zones each of them must be homogeneous. The interface between two zones is then divided into the boundary element. On the contrary to ordinary boundary where the boundary conditions must be prescribed and therefore there is only one unknown variable in the node the interfacial elements have two unknown variables in their nodes; head of potential and derivative in the outward normal direction. These unknowns can be computed from two compatibility conditions; the two potential heads from zone A and B must be the same and discharge from zone A must be equal to recharge into zone B (see Fig. 2.1(c)). The system of equation (2.2) is then block-diagonal but still unsymmetrical.

# 3 Example

This section presents an example of practical application of the boundary element method and especially the drain elements. We choose the 3D model of a prepared repumping water power plant on the river Ipel' (see Fig. 3.1). This power plant consists of two reservoirs joined together with system of adits. The first one serves as an water inlet into the cavern of the power plant and the second adit serves as outflow channel from the turbines into the river. The solution consists from two joined numerical mod-



Fig. 3.1 Schematical situation of the repumping water power plant.

els. The first one was aimed at the infiltration of water from the upper reservoir into the rock massif. The second larger model try to solve the groundwater flow in the rock massif with the cavern and adits and it served to the prognosis of the amount of inflow of groundwater into the outflow tunnel during its construction. Both models used the triangular element with one node in the centroid of the element (see Fig. 2.1(a)). The second model is presented in this paper because the drain elements were used to model the inflow of groundwater into the adits. The system of non-homogeneities and the upper layer of triangles of the model is in Fig. 3.2. Resulting potential heads is



Fig. 3.2 Triangle network of the upper layer of the second model.

presented in Fig. 3.3 in the form of contour lines. The amount of inflow water into the adit is presented in Fig. 3.4.

# 4 Conclusions

The boundary element method is proved to be the quite equivalent tool for numerical models of groundwater flow like any other more often used methods (e.g. FEM). There exist of course some limitations especially in the case of high non-homogeneous areas but there are also some advantages first of all very easy implementation of wells and drains into the model network. Therefore this method is very useful to model some remediation operations where the optimal network of pumping wells and drains can be succesfully modelled.

#### References

 K. Kovářík: Numerical Models in Groundwater Pollution. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Germany, 2000. 59, 60



Fig. 3.3 Countour lines of results (potential).



Fig. 3.4 Inflow of groundwater into the adit.



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

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

Jiřina Královcová

Abstrakt Příspěvek se zabývá simulacemi 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 omezujícího se na prostou advekci a to při různých okrajových podmínkách jak proudění, tak i transportu. Ve výsledcích simulačních výpočtů byly sledovány především globální charakter proudění a globální charakter šíření kontaminace, především s ohledem na přítomnost čí nepřítomnost té které heterogenity. Výpočty byly prováděny pomocí simulačního kódu FLOW123D [2], který umožňuje kombinaci elementů různých dimenzí v rámci jediné výpočetní sítě, za účelem studia chování pole vzdálených interakcí hlubinného úložiště nebezpečných odpadů [1]. Článek obsahuje přehled některých simulačních výpočtů včetně základních vstupních parametrů a výsledných charakteristik a hodnocení vlivu uvažovaných heterogenit za daných podmínek.

# 1 Úvod

Článek se zabývá problematikou proudění a transportu rozpuštěných látek v rozpukaném porézním prostředí za účelem výzkumu procesů v poli vzdálených interakcí hlubinného úložiště radioaktivních a zvláště nebezpečných odpadů. Případné hlubinné

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".

J. Královcová (⊠)

Ústav mechatroniky a technické informatiky, Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, Technická univerzita v Liberci, Studentská 2, 461 17 Liberec 1, Česká republika

e-mail: jirina.kralovcova@tul.cz

úložiště v podmínkách českého státu je plánováno v prostředí krystalinických hornin. Krystalinická hornina je tvořena porézní, prakticky nepropustnou *horninovou matricí* a hydraulicky vodivými *puklinami*.

Horninová matrice sestává z krystalů, které jsou odděleny mikroskopickými póry a mikrotrhlinami, tyto dohromady tvoří systém pórů. Porosita krystalinických hornin, jako žuly a ruly, se pohybuje zpravidla v rozmezí od 0.1 do 0.5 %. Pro transport rozpuštěných látek je potom zpravidla podstatnějším faktorem propojenost pórů než porosita jako taková. Systém pórů působí v transportních procesech zadržením látek prostřednictvím jevů jako je difůze do slepých pórů, sorpce na povrchu pórů a podobně.

*Pukliny* jsou indukovány silným napětím v hornině. V některých případech dochází ke vzniku prostorově rozsáhlých puklinových zón. Pukliny a puklinové zóny, pokud nejsou vyplněny usazenými druhotnými minerály, umožňují proudění podzemní vody a tím i transport v ní rozpuštěných látek.

Proudění vody a transport a zadržení rozpuštěných látek v prostředí rozpukaného skalního masivu jsou determinovány prouděním v systému puklin, které je v popředí zájmu v případě simulací transportu v souvislosti se studiem chování hlubinného úložiště. Prostředí se vyznačuje značnou heterogenitou lokálních hydraulických vodivostí, výsledkem je potom vysoká variabilita lokálních toků. Chování proudění lze vystihnout několika základními vlastnostmi: proudění se děje po puklinách, tok je veden ve velké míře různými preferenčními cestami, blíže viz například [3]. Rozpukané skalní prostředí je tvořeno horninovou matricí a puklinami. Horninová matrice, která je porézní a převážně saturovaná vodou, se na proudění zpravidla nepodílí. Síť puklin je dominantní jak v případě proudění, tak i v případě transportu rozpuštěných látek. Porézní horninová matrice se potom v procesech transportu výrazně podílí na případném zadržení kontaminantů rozpuštěných v proudící vodě. Rozpuštěné látky difundují do slepých pórů a mikrotrhlin v horninové matrici, dochází k sorpci na značném povrchu porézní horniny popřípadě naopak k uvolňování látek z těchto struktur do proudící vody. Zadržovací schopnost geosféry může mít tak zásadní vliv na transport radionuklidů uvolňovaných z hlubinného úložiště.

V případě přípravy modelu uvažované horninové oblasti nelze postihnout strukturu prostředí ve všech detailech hrajících roli v procesech proudění a transportu (od mikrotrhlin až k puklinovým zónám) a je nutné simulované prostředí do jisté míry zjednodušit a nahradit modelem vystihujícím to podstatné pro dané účely a v daném měřítku. V praxi se uplatňují dvě základní koncepce – náhrada *ekvivalentním porézním médiem* a koncepce *diskrétních puklinových sítích*.

Náhrada ekvivalentním porézním médiem (EPM, Equivalent Porous Medium) představuje "průměrování" vlastností reálného horninového prostředí v modelu proudění. To znamená, že individuální hydraulické charakteristiky vyskytující se v systému propojených puklin jsou nahrazeny efektivní hydraulickou vodivostí. Výhodou tohoto přístupu je zpravidla jeho výpočetní realizovatelnost, možnost postihnout rozsáhlé oblasti. Vlastnosti propojených propustných puklin i systému slepých póru jsou průměrovány v celém simulovaném bloku. Náhrada ekvivalentním porézním médiem se používá zpravidla pro simulaci globálního charakteru toku v dané oblasti.

V případě koncepce *diskrétních puklinových sítí* (DFN, Discrete Fracture Network) je simulované prostředí nahrazeno sítí puklin, proudění je potom možné pouze po síti propojených puklin. Hornina mezi puklinami (horninová matrice) je v modelu zanedbána. Potřebná puklinová síť je zpravidla generována stochasticky na základě známé pravděpodobnostní distribuce puklin v reálném horninovém prostředí. Tyto modely zpravidla umožňují zahrnout hydrogeologicky významné pukliny deterministicky. Hyd-

raulické vlastnosti jsou v modelu "průměrovány" na úrovni jednotlivých puklin. Problémy tohoto přístupu se zpravidla vztahují k výpočetní náročnosti výsledného modelu. Počet puklin významně narůstá s velikostí simulované oblasti. Koncepce diskrétních puklinových sítí se používá pro simulace proudění a transportu v menším měřítku.

V praxi se potom stále častěji uplatňuje přístup, kdy blok horniny reprezentovaný porézním médiem obsahuje deterministické pukliny reprezentující hydraulicky propustné pukliny, či rozsáhlé tektonické zóny. Uvedená kombinace je podporována v řadě simulačních kódů vyvíjených v posledních 15 letech.

V případě simulačního kódu kódu FLOW123D vyvíjeného na pracovišti TUL byla přijata koncepce umožňující kombinaci porézního modelu s diskrétní puklinovou sítí. Tato koncepce umožňuje individuálně u každé realizace modelu konkrétní oblasti zvážit, do jaké míry bude provedeno zjednodušení simulovaného reálného prostředí na jedné straně, a do jaké míry bude zohledněna síť hydrogeologicky významných puklin nebo regionálních poruch na straně druhé. Software potom umožňuje využít ryze porézní model, popřípadě ryze puklinový přístup. Pro aproximaci je zde použita metoda konečných prvků založená na smíšené hybridní formulací úlohy proudění. Software umožňuje výpočet ustáleného i neustáleného proudění a je doplněn o transport rozpuštěných látek zahrnující advekci, sorpci a difuzi do imobilní zóny.

V saturovaném prostředí je proudění řízeno gradientem piezometrické výšky. Model ustáleného proudění implementovaný v simulačním kódu FLOW123D vychází z předpokladu, že v případě malých rychlostí proudění nestlačitelné kapaliny (nízká hydraulická vodivost, malý gradient piezometrické výšky) lze rychlost proudění v ustáleném stavu v závislosti na gradientu piezometrické výšky popsat Darcyho zákonem

$$\mathbf{u} = \mathbf{K} \nabla \left( p + z \right) , \qquad p = \frac{\pi}{\rho g} ,$$
 (1.1)

a rovnicí kontinuity

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = q \,, \tag{1.2}$$

kde **u** označuje filtrační rychlost, *p* tlakovou výšku,  $\pi$  dynamickou složku tlaku,  $\rho$  hustotu vody, *g* tíhové zrychlení. Symbol **K** označuje tenzor hydraulické vodivosti, o kterém zpravidla předpokládáme, že je diagonální, a *q* přestavuje hustotu vnitřních zdrojů vody. Pro účely výpočtu konkrétní úlohy proudění na zadané oblasti je nutné zadat okrajové podmínky na hranici oblasti – a to buď konkrétní hodnotu tlakové výšky  $p_D$  (Dirichletova okrajová podmínka),

$$p = p_D \tag{1.3}$$

hodnotu toku  $u_N$  přes hranici oblasti ve směru vnější normály **n** (Neumanova okrajová podmínka)

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = u_N \tag{1.4}$$

nebo hodnotu toku ve směru vnější normály jako funkci tlakového spádu (Newtonova okrajová podmínka)

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = \sigma \left( p - p_T \right) \tag{1.5}$$

přitom Dirichletova okrajová podmínka musí být zadána alespoň na části hranice oblasti.

Clánek prezentuje tři základní simulační úlohy, které byly realizovány na definovaných geologických strukturách se zjednodušenými okrajovými podmínkami za účelem studia vlivu heterogenit jako je puklina nebo horninové rozhraní hornin s výrazně



**Obrázek 2.1** Přehled vytvořených geometrií a ukázka generovaných sítí: (nahoře) oblast bez horninového rozhraní; (uprostřed) oblast s horninovým rozhraním; (dole) oblast se třemi druhy horniny.

odlišnými hydrogeologicými vlastnostmi. Hydraulické vlastnosti prostředí a okrajové podmínky řešených úloh, prezentovaných v tomto příspěvku, byly voleny tak, aby výsledky nebyly ovlivňovány jinými faktory, které jsou geologickému prostředí vlastní, jako jsou například změny hydraulických vodivostí hornin s hloubkou a podobně.

# 2 Simulační úlohy

Pro realizaci různých variant simulačních výpočtů byly vytvořeny tři obecnější geometrie hypotetických oblastí. Každá z těchto geometrií má stanovenou základní konfiguraci vertikálních a horizontálních tektonických poruch. Geometrie se liší především mírou uplatnění horninového rozhraní tj. členěním geometrie té které oblasti do jednotlivých celků označených jako fyzické entity. Na základě předem definovaných geometrií byla generována sada výpočetních sítí. Jednotlivé sítě byly generovány tak, aby obsahovaly 20–40 tisíc objemových elementů. Přehled připravených geometrií a vybraných variant sítí poskytuje obr. 2.1.

2.1 Vliv hydrogeologicky významných puklinových zón

Hydrogeologicky významné poruchy (tektonické zlomy, puklinové zóny, rozsáhlé pukliny) jsou v modelové situaci reprezentovány 2D plochami (puklinami) ve 3D porézním prostředí. Pro sledování jejich vlivu a významnosti na proudění a transport byla vybrána oblast s jedním typem horniny s vertikálními a horizontálními puklinami (na obr. 2.1 nahoře).

#### Úloha A

V této úloze byl sledován charakter proudění a šíření rozpuštěné látky v bloku horniny s definovanou strukturou horizontálních a vertikálních poruch v hloubce do 200 m. Pro výpočet proudění byla prostřednictvím okrajových podmínek Dirichletova typu na celé hranici oblasti zadána hodnota globálního gradientu piezometrické výšky 0.05 ve směru osy x. Na oblasti byla dále zadána hydraulická vodivost na puklinových strukturách 50 m/rok a hydraulická vodivost horniny mimo puklinový systém 1 m/rok. Při výpočtech bylo uvažováno rozevření puklin 0.1 m (puklina včetně okolí), aktivní porozita porézního prostředí 0.01 a puklin 0.05. Při výpočtu transportu je předpokládána nulová počáteční koncentrace kontaminující rozpuštěné látky v celém simulovaném objemu, okrajovou podmínkou transportní úlohy je potom zajištěno šíření kontaminace do oblasti prostřednictvím části hranice bloku, pro kterou  $x = x_{max}$ . Uvažováno bylo pouze šíření rozpuštěné látky prostou advekcí.

Z výsledků výpočtu proudění byla vyhodnocena rychlost proudění (filtrační rychlost vypočtená dle Darcyho zákona), která v porézním objemu horniny je 0.05 m/rok, na horizontálních poruchách 2.5 m/rok a na vertikálních puklinových poruchách 1–2 m/rok v závislosti na orientaci té které části puklinového systému v tlakovém poli. Grafické zobrazení výsledků pro porovnání charakteru proudění a šíření kontaminace puklinovými strukturami obecně orientovanými v tlakovém poli a puklinovými strukturami rovnoběžnými s globálním tlakovým gradientem je uvedeno na obr 2.2. Z porovnání zobrazených výsledků je patrný kvalitativně odlišný charakter šíření kontaminace v horizontálních a vertikálních poruchách. Na vertikálních poruchách, které nejsou rovnoběžné s globálním gradientem, dochází při zadaném poměru hydraulických vodivostí puklin a okolní horniny k silnému ředění kontaminace méně koncentrovaným roztokem přitékajícím do puklionových struktur z porézní horniny. V důsledku této skutečnosti je potom rychlost progrese kontaminantu těmito strukturami srovnatelná s rychlostí v porézní hornině.

#### Úloha B

Úlohou B byl dále sledován vliv poruch obecně orientovaných v globálním tlakovém poli v závislosti na vzájemném poměru hydraulických vodivostí puklinového systému a okolní porézní horniny. Výpočty jsou demonstrovány na stejné oblasti jako v případě úlohy A; globální gradient s hodnotou 0.05 je zadán ve směru vektoru (1,1,0). Výpočty byly provedeny pro hydraulickou vodivost puklinového systému 8 m/rok a pro hydraulické vodivosti okolní porézní horniny 0.1, 0.01 a 0.001 m/rok. Ostatní parametry výpočtů jsou stejné jako v případě úlohy A.

Grafické zobrazení výsledků pro vzájemné kvantitativní porovnání šíření kontaminace v případě simulovaných variant je uvedeno na obr. 2.3. Z obrázků je patrné, že vliv puklinových poruch, jejichž orientace v tlakovém poli je různá od směru globálního tlakového gradientu, se začíná projevovat až v případech, kdy hydraulická vodivost puklinových struktur je o více než 3 řády větší než hydraulická vodivost okolní porézní horniny.


**Obrázek 2.2** Hydraulicky vodivé poruchy v porézní oblasti. Vektory proudění (vlevo), rozšíření kontaminace v čase t = 6 let (uprostřed), rozšíření kontaminace v čase t = 20 let (vpravo). Horní pohled a boční pohled nabízí porovnání vlivu poruch obecně orientovaných v tlakovém poli a poruch rovnoběžných s globálním tlakovým gradientem.



**Obrázek 2.3** Vliv tektonické poruchy na šíření pukliny kontaminace v závislosti na poměru hydraulických vodivostí poruchy a porézní horniny. Poměr hydraulických vodivostí porucha a okolní hornina je zleva 8:0.1, 8:0.01 a 8:0.001.

## 2.2 Vliv horninového rozhraní

Při simulacích na sítích s několika typy hornin byl sledován vliv horninového rozhraní na charakter proudění a migrace rozpuštěných látek. Simulace byly prováděny postupně na oblastech a sítích zobrazených na obr. 2.1 uprostřed a dole. Zde jsou dále na úloze C prezentovány výsledky jedné ze základních variant provedených výpočtů.

## Úloha C

Pro výpočet této úlohy byla použita oblast s jedním horninovým rozhraním. Na síti byl připraven výpočet proudění a následně transportu pro blok horniny do hloubky 200 m s tlakovým gradientem na oblasti 0.05 ve směru vektoru (1,0,0). Při zadávání hydraulických vodivostí byl potom zohledněn jednak typ horniny a jednak hloubka. Hydraulická vodivost porézní horniny byla volena v rozsahu 0.25–10 m/rok, na puklinových strukturách v rozsahu 100–400 m/rok. Ostatní parametry výpočtu proudění a transportu byly zadány stejně jako v případě úlohy A.



Obrázek 2.4 Vliv horninového rozhraní na charakter proudění v oblasti.



**Obrázek 2.5** Vliv horninového rozhraní na charakter transportu v oblasti. Rozšíření kontaminace v časech 50 let (vlevo) a 200 let (vpravo) provedeného výpočtu (kontaminace je zde zobrazena vektorovým polem, kde barva a dékla vektoru odpovídají koncentraci a směr vektorů respektuje směr proudění v příslušném bodě.

Vzhledem k tomu, že voda pro danou konfiguraci proudí z dobře vodivého do méně vodivého prostředí, dochází na rozhraní hornin k turbulenci toku a významnému vychýlení toku ze směru osy x do směru osy z popřípadě y. Pro zadané vstupní parametry se celkem 80 % celkového objemového toku odchyluje ze směru daného globálním gradientem. Nutno podotknout, že tento výsledek byl získán pro případ zadání Dirichletovy okrajové podmínky podél celé hranice simulované oblasti (v řešené úloze nepředpokládáme, že by mimo oblast byly podmínky pro proudění odlišné od podmínek v simulovaném bloku). Výsledný charakter proudění na simulované oblasti je patrný z obr. 2.4. Transport byl počítán pro případ šíření kontaminace do oblasti přes okraj, pro který  $x = x_{max}$ . Obrázek 2.5 zachycuje rozšíření kontaminace pro zadané vstupní parametry v časech 50 a 200 let provedeného výpočtu.

## 3 Závěr

V příspěvku byly prezentovány některé úlohy výpočtu proudění a transportu v různých geologických strukturách. Na základě výsledků uvedených simulací lze konstatovat, že výsledné charakteristiky jsou významně závislé na konkrétní konfiguraci geologických struktur studovaného prostředí. Puklinové zóny s hydraulickou vodivostí o jeden až dva řády vyšší než okolní prostředí jsou pro transport významné především v případě, že jsou přibližně rovnoběžné se směrem globálního gradientu piezometrické výšky. Při jiné orientaci pukliny v tlakovém poli může docházet k významnému ředění kontaminace čistší vodou proudící porézní horninou. Tento efekt je potom eliminován při hydraulických vodivostech porézní horniny o tři a více řádů nižších než je hydraulická vodivost propustných puklinových zón. Obdobně přítomnost horninového rozhraní (hornin

s rozdílnou hydraulickou vodivostí) může podstatným způsobem ovlivňovat celkový charakter proudění v oblasti. Za vhodných podmínek potom může nastat situace, kdy směr proudění vody a postupu kontaminace se odchyluje od směru daného globálním tlakovým gradientem.

## Reference

- 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. 66
- 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, 2005, pp. 1184–1191. 66
- A. Poteri: A Concept for Radionuclide Transport Modelling, Working Report 2007, 24. POSIVA OY, Olkiluoto, Finland, 2007. 67
- 4. IAEA: Scientific and Technical Basis for Geological Disposal of Radioactive Wastes. International Atomic Energy Agency, Vienna, 2003.



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

# An adaptive time discretisation to the numerical solution of the Richards' equation

Michal Kuráž

Abstract A flow in a variably saturated porous media 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 hydropedological laws. These are the constitutive laws describing a relation between a pore suction pressure and a water content, in our case described by the van Genuchten formula [8] and the relation between an unsaturated hydraulic conductivity and a pore suction pressure described by the Mualem form [6].

A time derivation 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 an error of this approximation based on an adaptive time step is presented in this paper.

## 1 Introduction

The problem of predicting the fluid movement in an unsaturated/saturated zone is important in many fields, ranging from agricultural via hydrology to technical applications of dangerous waste disposal in deep rock formations. The mathematical model of unsaturated flow was originally published in [7]. This formula, usually identified as the mixed form of the Richards' equation, states that

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \nabla \left( K(\theta) \nabla h \right) - \frac{\partial K(h)}{\partial z} = 0, \qquad (1.1)$$

where  $\theta$  is the water content of a porous material [-], h is the pressure head [L],  $K(\theta)$  is the unsaturated hydraulic conductivity function  $[LT^{-1}]$ , z denotes the vertical

M. Kuráž (⊠)

Department of Water Resources and Environmental Modeling, Faculty of Environmental Sciences, Czech University of Life Sciences Prague, Kamýcká 1176, 165 21 Praha 6 – Suchdol, Czech Republic

e-mail: michal.kuraz@fsv.cvut.cz

dimension [L], assumed positive upwards, and the porous medium is assumed to be isotropic. Appropriate constitutive relationships between  $\theta$  and h, K and h, are also assumed.

This PDE is nonlinear on its parameters and thus can be generalized as a quasilinear elliptic-parabolic differential equation and as a degenerate convection diffusion problem. A proof of the existence of a solution is given in [1]. A technique for an accurate numerical solution is published in [3]. One of the recent outstanding work presenting a numerical method based on a relaxation scheme to the time derivation term and method of characteristics to the convection term is published in [4] and [5].

The constitutive relations in (1.1) are in many practical applications defined by empirical hydropedological laws of a highly nonlinear nature. If the implicit Euler method is applied for unsteady simulations a time step length should be treated with a respect to the variable torsions of those material parameters.

### 2 Mathematical model

The mathematical model of the Richards' equation with its forms which were later numerically treated is presented in this section.

#### 2.1 Governing equations

Darcy's approach to groundwater flow is basically applicable for both the saturated and the unsaturated flow (moisture movement), and considers the flow as diffusion. By an application of the unsaturated Darcy's flow law to the mass conservation law the Richards' equation is obtained [2]. Three standard forms of the Richards' equation are identified—mixed, h-based and  $\theta$ -based form. In the mixed form, which was originally published in [7], see (1.1), both the pressure head and the water content are the primary solved variable. In the 'h-based' form

$$C(h)\frac{\partial h}{\partial t} - \nabla (K(h)\nabla h) - \frac{\partial K(h)}{\partial z} = 0, \qquad (2.1)$$

where  $C(h) = \frac{d\theta}{dh}$ , is the specific water capacity function  $[L^{-1}]$ , the pressure head is the primary solved variable. In the ' $\theta$ -based' form

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \nabla \left( D(\theta) \nabla \theta \right) - \frac{\partial K(\theta)}{\partial z} = 0, \qquad (2.2)$$

where  $D(\theta) = \frac{K(\theta)}{C(\theta)}$ , is unsaturated diffusivity  $[L^2T^{-1}]$  and the water content is the primary solved variable.

Equations (1.1) and (2.1) are defined for  $\theta \in (\theta_r, \theta_s)$  and  $h \in (-\infty, +\infty)$ ;  $\theta_r$  and  $\theta_s$  are the water content limits of the unsaturated flow. Equation (2.2) is defined only for the unsaturated flow, and thus  $\theta \in (\theta_r, \theta_s)$ . When applying the constitutive relation between  $\theta$  and h this equation solves only negative heads. This limits some technical applications, e.g. a positive pressure head as a boundary condition.

Constitutive relations-unsaturated hydraulic material properties

The solution to the Richards' equation is based on knowledge of the relation between the pore pressure head and the water content, the water content and the unsaturated hydraulic conductivity. The relation between saturation and unsaturated hydraulic conductivity is based on [6]

$$K_r(h) = \sqrt{\left(\frac{\theta}{\theta_s}\right)} \left( \frac{\int\limits_{\theta_r}^{\theta} \frac{1}{h(\theta)} d\theta}{\int\limits_{\theta_r}^{\theta_s} \frac{1}{h(\theta)} d\theta} \right)^2 , \qquad (2.3)$$

where  $K_r(h)$  is the relative hydraulic conductivity [-], and where  $K_r = \frac{K(h)}{K_s}$ , where  $K_s$  is the saturated hydraulic conductivity  $[LT^{-1}]$ .

An analytical formula (van Genuchten's equation) describing the relation between saturation–mass and pore suction was derived in [8]

$$\theta(h) = \begin{cases} \frac{\theta_s - \theta_r}{(1 + (-\alpha h)^n)^m} + \theta_r, & \forall h \in (-\infty, 0), \\ 1, & \forall h \in (0, +\infty), \end{cases}$$
(2.4)

where  $\theta_s$  is the saturation water content equal to porosity [-],  $\theta_r$  is the residual water content [-],  $\alpha$  [ $L^{-1}$ ], n [-], m [-] are empirical porous environment variables, dependent on pore size distribution and shapes,  $\theta$  is the actual saturation [-], h is the pressure head [L], negative for unsaturated conditions.

And the water retention capacity function C(h) was derived from (2.4) as

$$C(h) = \begin{cases} \frac{(1+(\alpha h)^n (m-1)m(\alpha h)^{(n-1)}(n\alpha))}{(1+(\alpha h)^n)^{2m}} (\theta_r - \theta_s), & \forall h \in (-\infty, 0), \\ 0, & \forall h \in (0, +\infty). \end{cases}$$
(2.5)

## **3** Numerical solution techniques

Numerical solution to the h-based equation

The time derivative term was solved by the fully implicit Euler method, and the spatial derivate was solved by Galerkin's finite element method.

The numerical solution to the equation (2.1) was already discussed in [3]. The h-based equation is based on the approximation

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = C(h) \frac{\partial h}{\partial t} \,. \tag{3.1}$$

This approximation is valid in its differential form, its discerete analogue when standard Euler technique applied for the time derivation term produces an error in mass balance [3].

I order to limit this error in some desirable range a technique Retention Curve Zone Approach was designed. This technique maintains an automatic time step selection by defining the ranges of the pressure function change for the each time step solution.

During the program initialization an array [{max\_suction\_pressure},2] is allocated. The {max\_suction\_pressure} is a user definable value of the maximal pressure

suction value during the simulation experiment. Each row number defines the negative suction pressure value that is processed in the following equation to solve the limits  $h_{limit}$  (see Fig. 3.1)

$$\frac{\theta_s - \theta_r}{(1 + (-\alpha h)^n)^m} \pm C(h)(|h - h_{limit}|) - \frac{\theta_s - \theta_r}{(1 + (-\alpha h_{limit})^n)^m} - \varepsilon = 0, \qquad (3.2)$$

each column denotes higher and lower solution to (3.2).

At each node a new time solution is evaluated. The negative integer of the previous time step solution of the pressure function points to ranges of an allowed change in the new solution of this time equation within a certain limits of an error in the approximation (3.1). Because all integers in the desired range of the suction pressure are precalculated, the search algorithm is a very fast and efficient, but for the price of a bit non-efficient operation memory consumption.



Fig. 3.1 An array of ranges is constructed for each negative integer of the pressure head untill a specified limit, the real error in linear approximation  $\varepsilon_{\text{real}}$  is always smaller than the  $\varepsilon$  value.

## 3.1 Numerical solution to the mixed form equation

This method was defined in [3] as a Modified Pickard Iteration. The technique states as

$$\left(\frac{1}{\Delta t}C^{n+1,m}\right)\delta^m - \nabla \cdot \left(K(h)^{n+1,m}\nabla\delta^m\right) = \nabla \cdot \left(K(h)^{n+1,m}\nabla h^{n+1,m}\right) + \frac{\partial K(h)^{n+1,m}}{\partial z} - \frac{\theta^{n+1,m} - \theta^{n,m}}{\Delta t},$$
(3.3)

where  $\delta^m = h^{n+1,m} - h^{n,m}$ , *n* denotes the actual iteration level and *m* denotes the node number. The variables of pressure and mass are both directly solved, and therefore perfect mass conservation is obtained. Equation (2.1) was used as a predictor and (3.3) was the solution corrector.

#### 3.2 Mass balance error definition

An integral mass balance formula was considered as a criteria of an accurate solution to this differential equation. The error function was evaluated from the following

$$\int_{\Omega} \int_{t} \frac{\partial \theta}{\partial t} \mathrm{d}\Omega \mathrm{d}t - \oint_{\Gamma} \int_{t} (q_{in} - q_{out}) \mathrm{d}\Gamma \mathrm{d}t = \varepsilon, \qquad (3.4)$$

where  $\Omega$  is the spatial domain, t is the time domain,  $q_{in}$  and  $q_{out}$  is the boundary  $\Gamma$  influx and outflux and  $\varepsilon$  is the total error in volume over the time spatial domain of simulation. In order to obtain this error in relative number, the total error volume number was divided by the total pore volume on the domain and time.  $(\int_{\Omega} \int_{\Omega} \theta_s d\Omega dt)$ .

#### 4 Case study

A case study was conducted in order to evaluate numerical solution to the classical Richards' equation model. Three different approaches were tested. Solution based on *mixed*-form a so called Modified Pickard Iteration, see (3.3), solution based on *h*-based form (2.1) with time step restriction as defined here as the Retention Curve Zone Approach, and a solution of *h*-based form (2.1) without Retention Curve Zone Approach restrictions to the time step—this is exactly the form that is not recommended by [3]. An adaptive time discretization for the last method was considered as for the *mixed*-form equation (the iteration criterion).

The criterion of successful iteration for all of the three evaluated methods was a minimal relative change of a pressure head h lower then  $10^{-4}$  from the previous iteration level.

#### Description of the case study

A simulation of a vertical one-dimensional infiltration experiment was conducted, see Fig. 4.1. The flow experiment was described by the classical Richards' equation. The selected flow domain was a porous material block 5 m in length and of infinite width. Thus only vertical one-dimensional flow was taking place. Porous material properties was considered for highly permeable sandstone ( $\alpha = 0.075$  cm<sup>-1</sup>, n = 1.89, m = 0.47,  $K_s = 4.42$  cm  $\cdot$  h<sup>-1</sup>). The maximal error of a first-order Taylor series for the Retention Curve Zone Approach was  $5 \times 10^{-6}$ .

The domain was discretized by an uniform mesh of grid size 5 cm. The problem was solved numerically using three different approaches as stated above.

#### Boundary and initial conditions

The initial condition was uniform distribution of the water content, represented by a negative pressure head (h = -8700 cm), for the relation between the negative pressure head and the water content see (2.4).

The top boundary condition was the standard Dirichlet condition of a positive constant pressure head +5.0 cm.



Fig. 4.1 Scheme of the 1D vertical infiltration experiment.

The bottom boundary condition was of a special kind. Technically, it is called a seepage face. Physically this condition states that if the boundary is unsaturated it acts as a no-flow boundary, and when it is saturated it acts as a Dirichlet boundary of a zero pressure head. Mathematically, it is defined as a unilateral boundary condition, a combination of the Dirichlet condition and the Neumann condition. The following form describes the condition

$$\frac{\partial h}{\partial \vec{n}}(x,t) + \nu_3(x) = 0, \quad \text{if} \quad h(x,t) < 0, \quad \forall x \in \Gamma, \quad t > 0, \\
h(x,t) = 0, \quad \text{if} \quad \frac{\partial h}{\partial \vec{n}}(x,t) + \nu_3(x) < 0, \quad \forall x \in \Gamma, \quad t > 0,$$
(4.1)

where  $\vec{n}$  is the direction of the normal vector to the domain boundary,  $\nu_3$  is the vertical component of the normal vector to the domain boundary, and  $\Gamma$  is the boundary where this condition applies.

#### 4.1 Results and conlucions

As stated in [3] the successful iteration criterion for an adaptive time-step of the equation (2.1) is not a sufficient condition to ensure a certain accuracy if the time derivative term is handled by the implicit backward Euler method. The Modified Pickard Iteration method obtains very accurate results, but the computational effort in the evaluated case is excessive. The Retention Curve Zone Approach obtains practically the same results, but the total amount of iteration is only approximately 4% of the amount required for the Modified Pickard Iteration method.

This method offers an efficient condition for a numerical solution to a h-based equation based on an implicit backward Euler scheme, exactly reflecting the problem of the approximation (3.1).

Although the problem with the mass balance of (2.1) would be easily solvable by applying of (2.2), the definition scope of this equation is restricted to a negative pressure head, and thus it is not suitable for the case study evaluated here. For the particular results see Tab. 4.1 and Fig. 4.2.



Fig. 4.2 Simulated outflow from a seepage face with the DRUtES algorithm. The Retention Curve Zone Approach, Modified Pickard Iteration and time-step based on successful iteration of (2.1) were tested.

Table 4.1 Summary of code execution after the numerical infiltration experiment.

method	mass error [%]	number of iterations
Retention Curve Zone Approach	0.193	1746
Modified Pickard Iteration (3.3)	0.201	44382
Simple $h$ -based solution (2.1)	5.842	130

## References

- H. W. Alt, S. Luckhaus: Quasilinear Elliptic-Parabolic Differential Equations, Mathematische Zeitschrift 183, pp. 311–341 (1983). 75
- J. Bear, A. Veruijt: Modeling Groundwater Flow and Pollution, D. Reidel Publishing Company, New York, 1987. 75
- M. A. Celia, E. T. Bouloutas, R. L. Zarba: A General Mass-Conservative Numerical Solution for the Unsaturated Flow Equation, Water Resources Research 26, pp. 1483–1496 (1990). 74, 75, 76, 77, 78, 79
- J. Kačur: Solution of Degenerate Convection-Diffusion Problems, Nonlinear Analysis 47, pp. 123–134 (2001). 75
- J. Kačur, R. van Keer: Numerical Approximation of a Flow and Transport System in Unasaturated-Saturated Porous Media, Chemical Engineering Science 58, pp. 4805–4813 (2003). 75
- Y. Mualem: A New Model for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Porous Media, Water Resources Research 12, pp. 513–522 (1976). 74, 76
- 7. L. A. Richards: Physics 1, DOI:10.1063/1.1745010, pp. 318-333 (1931). 74, 75
- 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. 74, 76



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

# Objektově orientovaný pohled na sdružené procesy

Jan Lisal · Dalibor Frydrych

Abstrakt Objektově-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, redukujeme tento požadavek pouze na implementaci samotného primárního procesu a v případně požadavku určitých vazeb i sekundárních procesů. Získáváme tím databázi primárních a sekundárních procesů pro rychlejší implementaci nového modelu.

## 1 Úvod

Modelování s užitím metody konečných prvků přináší mnohá úskalí, která je nutné dříve či později překonat. Výjimkou není ani systém, který je dlouhodobě vyvíjen na Ústavu nových technologií a aplikované informatiky Technické univerzity v Liberci. K pochopení hlavní části tohoto článku, je nutné nejprve přiblížit samotný systém.

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".

J. Lisal  $(\boxtimes) \cdot D$ . Frydrych

Ústav nových technologií a aplikované informatiky, Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, Technická univerzita v Liberci, Studentská 2, 461 17 Liberec 1, Česká republika

e-maily: jan.lisal@tul.cz  $\cdot$  dalibor.frydrych@tul.cz

## 1.1 Systém DFFEM

Modelovací framework DFFEM je koncipovaný jako objektově-orientovaný modulární systém (obr. 1.1). Jednotlivé moduly logicky rozdělují systém do znovupoužitelných celků.



Obrázek 1.1 Modulové schéma systému DFFEM.

- DFFEM soubor obecně používaných komponent, jako jsou např. objekty zabezpečující přístup k souborům (čtení z zápis dat), přístup k síti (použití např. pro distribuovaný výpočetní systém) a další.
- SPACE balík tříd zastřešující informace ohledně sítě. Poskytuje přístup ke komponentám sítě (package mesh) jako jsou elementy, uzly, a další komponenty sítě, na kterých závisí počítaná úloha. Další částí tohoto balíku je seskupování elementů do větších celků nazvaných domény (package domain).
- TASKDATA do tohoto modulu se ukládají všechna data, která se využívají pro výpočet modelu. Mohou to být materiálové konstanty či funkce, hodnoty okrajových a počátečních podmínek a také výsledky modelu, aby byl zabezpečen jednotný přístup k datovým informacím.

MATRIX – modul pro ukládání matice soustavy a vektoru pravé strany.

SOLVER výpočetní metody mohou být definovány buď přímým uložením algoritmu v tomto modulu, nebo je možné volat externí řešič nad vyexportovanou maticí a vektorem pravé strany z modulu MATRIX.

Nakonec se zaměříme na poslední dva moduly, se kterými budeme pracovat v tomto výkladu. Samozřejmě je zde ještě modul POSTPROCESSING, který ale stojí spíše mimo samotný systém a není nutnou součástí vytvářených modelů.

- MODELFLOW zajišťuje průběh výpočtu dle nadefinovaného postupu. Základní úlohou je výpočet ustáleného stavu, který je ovšem z pohledu zadávání průběhu výpočtu jen specifickým typem evoluční úlohy. Pro složitější úlohy se právě zde definují návaznosti výpočtu sdružených úloh (pokud nejsou definovány přímo výpočtem – v matici).
- PHYSICALTASK tento balík je hlavním modulem pro sestavení matice koeficientů a jsou zde definovány jednotlivé fyzikální úlohy.

## 2 Modelová úloha

Abychom mohli vysvětlit základní definice dekompozice fyzikálních úloh pro použití v systému DFFEM, je nutné nejprve takovou úlohu nadefinovat. Jelikož nám nejde o vnitřní implementaci matematických rovnic, bude odvození provedeno na kvalitativní úrovni.

Budeme tedy uvažovat dvě fyzikální úlohy, abychom dosáhli sdruženosti procesů. První úloha bude popisovat elastické chování materiálu a bude zahrnovat vliv tepelné roztažnosti. Druhá úloha tedy bude formulovat vedení tepla v modelované oblasti. Každá z úloh může být popsána diferenciální rovnicí které tvoří soustavu

$$\underbrace{(\cdot, \cdot) + (\cdot, \cdot)}_{E} + \underbrace{(\cdot, \cdot)}_{E \leftarrow T} = \underbrace{(\cdot, \cdot)}_{R_{E}},$$
(2.1)

$$\underbrace{(\cdot,\cdot)+(\cdot,\cdot)}_{T} = \underbrace{(\cdot,\cdot)}_{R_{T}},$$
(2.2)

kde rovnice (2.1) popisuje výpočet elasticity a rovnice (2.2) úlohu vedení tepla. Oblasti rovnice  $E, E \leftarrow T, R_E, T$  a  $R_T$  budou využity v následujícím textu.

## 3 Analýza sdružených úloh

Zabývejme se chvíli samotným zápisem v rovnicích (2.1), (2.2). Na první pohled rovnice (2.2) popisuje úlohu vedení tepla. Tedy základní fyzikální úloha, která není ovlivněna jiným dějem, tedy primární proces.

Naproti tomu rovnice (2.1) je rozdělena na dvě části. Primární proces popisuje elastické chování modelované oblasti. Toto je znázorněno jako část E. Dále se v této rovnici ale také vyskytuje sekundární proces, což je vazební část ovlivňující elastické chování na základě tepelné roztažnosti.

Samozřejmě jsou zde ještě naznačeny pravé strany, které mají smysl zdrojových členů pro každou fyzikální úlohu.

#### 3.1 Primární proces

Dekompozice fyzikálních úloh nás navede na jasnou objektovou interpretaci každé z úloh. Rovnice (2.1), (2.2) můžeme zapsat i následujícím způsobem v maticovém zápise

$$\begin{pmatrix} \mathbb{A} \ \mathbb{B} \\ \mathbb{C} \ \mathbb{D} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_A \\ x_D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{R}_A \\ \mathbb{R}_D \end{pmatrix}, \qquad (3.1)$$

kde bloky  $\mathbb{A}, \mathbb{B}, \mathbb{C}, \mathbb{D}$  tvoří matici soustavy,  $(x_A^T, x_D^T)^T$  je vektor řešení a  $(\mathbb{R}_A^T, \mathbb{R}_D^T)^T$  je vektor pravé strany.

Primární procesy se v této matici vyskytují v diagonálních blocích, tedy blok  $\mathbb{A}$ a  $\mathbb{D}$ . Bloku  $\mathbb{A}$  tedy odpovídá oblast E rovnice (2.1), zatímco oblast T rovnice (2.2) bude zapsána do bloku  $\mathbb{D}$ . 3.2 Sekundární proces

V naší modelové úloze popsané rovnicemi (2.1), (2.2) máme pouze jeden sekundární proces. Ten ovlivňuje elastické chování modelované oblasti v závislosti na rozložení teploty. Můžeme tedy chápat, že blok  $\mathbb{B}$  z rovnice (3.1) je tvořen oblastí  $E \leftarrow T$  rovnice (2.1).

Matice soustavy poskytuje ještě prostor pro možnost opačného ovlivnění (blok  $\mathbb{C}$ ). Tento by byl využit, kdybychom v naší modelové úloze uvažovali i ovlivnění rozložení teploty mechanickými vlastnostmi materiálu. V našem případě se tento jev neuplatňuje a je tedy možné definovat identitu  $\mathbb{C} = \mathbb{O}$ , kde  $\mathbb{O}$  je blok nulových hodnot.

## 4 Objektová interpretace procesů

Nyní se tedy zaměříme na modul PHYSICALTASK a jeho podčást PHYSICALEQUATION (obr. 1.1). V tomto balíku jsou sdruženy všechny fyzikální úlohy pro možnosti výpočtu modelů. Jejich dělení vystihuje UML class diagram [2] v obr. 4.1.



Obrázek 4.1 Struktura fyzikálních úloh z pohledu typu procesu.

Předkem všech výpočtů je rozhraní [1] IPhysicalTask, které poskytuje metodu pro výpočet patřičného bloku v matici (calculate()) a metodu pro získání podpisu (getSignature()). Ta je využívána především při skládání topologie soustavy. Tento postup bude vysvětlen později.

Následuje rozdělení na specializovanější oblasti. Levá část hierarchie závislosti je rezervována pro diagonální bloky, pravá pak pro mimodiagonální, tedy pro sekundární procesy, které není potřeba nijak dále dělit (rozhraní ISecondaryProcess).

Důležitým faktem je, že v diagonálních blocích nemusí vystupovat pouze reálné fyzikální problémy. Abychom se ale vyhnuly chybě v podobě spuštění jednoduchého výpočtu pouze s tímto nefyzikálním problémem, byl rozhraní IPrimaryProcess předřazen ještě jeden člen, IDiagonalBlock, který nelze samostatně umístit do topologie modelované úlohy, aniž by v ní existoval jeden primární blok.

## 4.1 Podpis výpočetních bloků

Abychom mohli sestavit správným způsobem, bez složitých definicí, topologii matice soustavy, je nutné zajistit tzv. podepsání jednotlivých bloků matice. Podpisová funkce bude implementovat následující části:

- definici oblasti, na kterou se daný blok úlohy aplikuje. Jde vlastně o definici prostoru a typu entit, které se budou používat k samotnému výpočtu hodnot bloku matice;
- podpis fyzikální úlohy.

Ukažme si nyní na příkladu, jak bude probíhat sestavení topologie na naší modelové úloze.



Obrázek 4.2 Ukázka topologického uspořádání modelové úlohy.

#### 4.2 Sestavení topologie

Samotné sestavení topologie je již v případě existence podepsaných patřičných bloků snadná záležitost. Budeme tedy vycházet z toho, že máme k dispozici blok pro výpočet elastického chování. V obr. 4.2 je to diagonální blok E. Stejným způsobem máme definovaný blok pro výpočet úlohy vedení tepla T.

Tyto dva bloky jsou z doby návrhu podepsány jako primární procesy, tedy jsou při vložení do topologického objektu vloženy jako diagonální prvky s uspořádáním. Dále jejich podpis nese specifické označení typu úlohy. Blok E je podepsán např. jako ELASTICITA a blok T jako TERMO.

Ve chvíli, kdy vkládáme diagonální procesy do topologie, musíme ještě zajistit jejich druhou část podpisu. Ta je tvořena oblastí, na kterou je blok aplikován. V době návrhu nemusíme znát přesně, pro jakou oblast budeme chtít daný výpočet provést. Proto danému bloku ještě sdělíme, nad jakým prostorem entit má existovat.

Posledním blokem, který vložíme do topologie je vazební část, tedy sekundární proces. Ten je z doby návrhu také již podepsán jako sekundární proces a specifické označení typu úlohy tentokrát nese tři informace:

- a. první ovlivněný primární proces (ELASTICITA)
- b. druhý ovlivnění primární procesu (TERMO)
- c. směr vazby (od  $T \ge E$ )

Směrovost vazby je definující, aby systém věděl, kam přesně umístit vazební prvek. Kdybychom měli podpis pouze dvou primárních procesů, systém by nemohl vyhodnotit, jestli umístit prvek do bloku  $\mathbb{B}$  v rovnici (3.1) nebo do bloku  $\mathbb{C}$ .

Posledním krokem je tak, jako u primárních procesů, přidat k podpisu sekundárního procesu prostor, ve kterém bude daný blok existovat. To nám zabezpečí, že se blok

přiřadí ke správným primárním procesům na základě jednoznačného zobrazení prostoru entit primárních procesů na přidávaný sekundární proces.

## 5 Závěr

Problematika sdružených procesů je mnohem širší, než zde prezentované téma. Nastíněná problematika ale vnáší do budovaného systému DFFEM unifikovaný přístup k základním fyzikálním úlohám a hlavně rychlejší postup při tvorbě a verifikaci nových modelů.

Hlavním přínosem objektově pojatých sdružených úloh je možnost tvorby různorodých modelů a možnost experimentování s vazbami mezi procesy na úrovni definice úlohy, nikoli na úrovni kódování. Nesporným přínosem je pak fakt jednoduchého zjišťování závislosti určitého modelu na určitých primárních či sekundárních procesech.

## Reference

- 1. P. Herout: Učebnice jazyka Java, KOOP, České Budějovice, 2007. 84
- 2. H. Kanisová, M. Müller: UML srozumitelně, Computer Press, Brno, 2006. 84



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

# Účelově odvozované modely v procesu předzpracování dat pro tvorbu geometrie modelových sítí

Blanka Malá · Jan Pacina · Zuzana Capeková

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. 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.

B. Malá (⊠) · Z. Capeková

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".

Ústav nových technologií a aplikované informatiky, Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, Technická univerzita v Liberci, Studentská 2, 461 17 Liberec 1, Česká republika

e-maily: zuzana.capekova@tul.cz $\,\cdot$ blanka.mala@tul.cz

J. Pacina

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

## 1 Úvod

Účelově odvozený model území budeme chápat jako geoinformatický model, který je specifický především svojí geometrií, organizací dat, mírou generalizace a aplikováním generalizačních metod v rámci všech fází výstavby modelu a v neposlední řadě svým účelovým využitím. Základem pro tvorbu takto specifického modelu území je geoinformační systém území jakožto originál, který modelujeme jiným systémem (modelem). Nikoli tedy přímo reálný svět, krajina. Vytváříme-li odvozované modely, jedná se v podstatě o definování nové organizace dat. Organizace dat odvozeného modelu území spočívá ve většině případů ve vytvoření systému konečného počtu dvojrozměrných a trojrozměrných elementů v prostoru pokrývajících území podle stanovených kritérií a v daném prostorovém rozlišení. Každý element území definovaný polohou v prostoru nese dále informaci o poloze v topologickém smyslu a další atributy. Využití modelu je v aplikacích využívajících například metodu konečných prvků.

## 2 GIS při zpracování dat reálného světa

Řešení úkolů, které před nás praxe staví, si žádá hledání nových řešení a přístupů. Vytváření účelově odvozovaných modelů území je problematika, která vzešla z požadavků praxe. Řada praktických úloh je dnes řešena pomocí nástrojů matematického modelování, použitím metody konečných prvků. Pro tyto úlohy je vždy nutné vystavět modelovou prostorovou síť [3]. Pokud je kladen požadavek na použití metod matematického modelování na datech z reálného světa – tedy geografických datech a zpětné interpretování výsledků modelování v krajině, v reálném světě, je pak nutné řešit, jak zpracovat geografická data tak, aby celé území bylo geoinformaticky popsáno v souladu s požadavky matematického modelování a v každé fázi výstavby tohoto modelu (geoinformačního) existovala vazba na původní reálná data. Geoinformatické modelování a nasazení GIS pro zpracování dat reálného světa, vytvoření geoinformačního systému daného území a následné vytvoření odvozeného modelu území je přístup, který umožní zpracovat data jakkoliv rozsáhlého území s požadovanou přesností pro daný účel.

Podle [5, 7] je vytvoření originálního geoinformačního systému, který bude sloužit jako předloha pro odvozené modely, prvním krokem. Je nutné vymezit území, zájmovou oblast, která bude dále zpracovávána. Podle definovaného účelu odvozovaných modelů je potřeba území pokrýt daty, která budou splňovat požadavky z hlediska obsahu, rozlišení, podrobnosti. Zájmové území musí být těmito daty pokryto a zároveň data musí být předzpracována tak, aby jimi byl naplněn geoinformační systém. Problematika vytváření geoinformačních systémů zde nebude řešena.

#### 3 Odvozený model území

Modelování zájmových objektů reality v prostoru a v čase je účinným prostředkem poznávacího procesu. Podle [8] je model zjednodušené zobrazení skutečnosti, části objektivní reality. Zobrazovaná skutečnost se nazývá předmět modelování (předloha, originál). Modelem jsou zobrazeny pouze některé vybrané znaky předlohy, které nás v konkrétním případě zkoumání zajímají, zatímco od ostatních vlastností předlohy se upouští. O tom, které vlastnosti má model zobrazit, rozhoduje především účel, kterému má model sloužit. Cílem modelování je snaha o poznání vlastností studované části reality nebo určité logické konstrukce.

Podle [4] je odvozený model území (mesh model) geoinformatický model, který je specifický především svojí geometrií, organizací dat, mírou generalizace a aplikováním generalizačních metod v rámci všech fází výstavby modelu a v neposlední řadě svým účelovým využitím. Geometrie mesh modelu území je dána konečným počtem dvojrozměrných a trojrozměrných elementů v prostoru pokrývajících území podle stanovených kritérií a v daném prostorovém rozlišení. Každý element území definovaný polohou v prostoru nese dále informaci o poloze v topologickém smyslu a další atributy. Organizace dat mesh modelu území je v souladu s geometrií a spočívá v přiřazení atributů (charakteristik, popisu, vlastností) vytvořeným elementům. Organizace dat nesmí být závislá na systému, v jakém je mesh model území vytvářen a udržován.

#### 4 Východiska pro tvorbu odvozeného modelu

Model je zobrazením systému definovaného na daném objektu. Systém (originál) je modelován jiným systémem (modelem). Předlohou pro vybudování mesh modelu území je geoinformační systém území. Čili předlohou není území samotné, ale již jeho model. Na něm musí být definován systém, který je pak modelován. Záleží na účelu, za jakým je odvozovaný mesh model území vytvářen, podle toho jsou definovány entity a jejich vztahy, které budou součástí mesh modelu území (prvně geometrie). Zároveň musí být definovány požadavky na prostorové rozlišení modelu. Tyto požadavky závisí na měřítku modelování, podle kterého se stanoví kritéria pro geometrickou přesnost. Tu lze také nazvat krokem modelu. Na velikosti kroku modelu pak závisí výsledný počet elementů, který je v podstatě dalším vstupním údajem. Geometrická přesnost modelu tak může být dána implicitně nebo explicitně. Buď přímo – krok modelu bude např. 100 m, nebo nepřímo odvozena z požadovaného počtu elementů – např. 5000–7000. Počet elementů je zde jenom jako příklad, u 3D modelových sítí je obvyklé 5–50 tisíc elementů, čím hustější síť, tím lepší, ale je zde omezení v hustotě sítě dané používaným softwarem pro další aplikační výpočty. Konkrétní omezení počtu elementů je dané zkušenostmi a praxí, jaká rozlišení modelu (tedy i hustota sítě elementů) je potřeba pro dané typy výpočtu a to je věc, kterou neřešíme v rámci našeho modelování v GIS, protože tam lze připravit data jakkoliv podrobná, ale je to podmínka daná zadavatelem. Takže hustota výsledné sítě je jedním z parametrů vytvářeného mesh modelu.

## 5 Generalizace při odvozování modelu

Podle [1] generalizace může být viděna jako transformace obsahu databáze. Generalizace spočívá ve výběru, geometrickém zjednodušení a zevšeobecnění objektů, jevů a jejich vzájemných vztahů pro jejich reprezentaci v modelu, ovlivněné účelem, měřítkem modelu (nebo jeho prostorovým rozlišením) a vlastním předmětem modelování. Cíl je odvodit novou (digitální) databázi s rozdílným nebo užším prostorovým a tematickým obsahem oproti originální databázi. Generalizace je hlavně účelový postup, nemůžeme optimalizovat množinu dat pro všechny účely.

Generalizaci můžeme považovat za sérii transformací vykonanou na určitých prostorových datech s ohledem na definici odvozovaného modelu. Tedy se jedná o proces odvozování méně detailní množiny dat z detailní velkoměřítkové zdrojové množiny dat, prostřednictvím aplikování prostorových a atributových transformací.

Generalizace pro vytváření geometrie a organizace dat mesh modelu území spočívá především ve výběru a zjednodušování tvarů. Výběr znamená, že pracujeme pouze s prvky a jevy reálného světa (nebo originálního geoinformačního systému), které jsou požadovány z hlediska účelu modelování. Od ostatních můžeme upustit. Dále v souladu s rozlišením modelu dojde v rámci jednotlivých vrstev původního geoinformačního systému k výběru prvků podstatných, jedná se o normativní výběr.

Do modelu budou vybrány jenom požadované vrstvy původního geoinformačního modelu v souladu s účelem, pro který je mesh model území vytvářen. Zde cenzus pro výběr je dán právě účelem modelu. Výběr v rámci jednotlivých datových vrstev vstupujících do nového modelu je dále uplatňován v souladu s rozlišením modelu. Pokud dojde k tomu, že na ploše jednoho elementu dojde k několikanásobnému výskytu jednoho prvku, pak jsou tyto prvky eliminovány a zůstane jediný. Tedy dva výskyty stejného prvku nebudou prostorově blíže, než je rozlišení modelu. Např. 4 studny vzdálené od sebe 1–2 m budou modelovány jako studna jediná v modelu s rozlišemín 200 m. Obdobně dochází k prostorové redukci v souladu s rozlišením modelu. Pokud např. máme tektonický zlom o šířce 20 cm, pak bude modelován jako linie, protože v modelu s rozlišením 200 m je šířka zlomu zanedbatelná.

Dochází také k opačnému jevu – např. v mesh modelu území modelujeme vodní toky tak, že vodní tok je reprezentován množinou elementů, kterými protéká. Pokud bychom se zabývali prostorovou stránkou tohoto způsobu modelování, pak vodní tok reprezentovaný linií v původním modelu nyní bude reprezentován jako plocha v novém modelu.

Samozřejmě grafická reprezentace v tomto typu modelování nehraje zásadní roli, protože nejdůležitější jsou topologické vztahy, které musí zůstat zachovány. Tj. sousednost, obsahování. Stejně tak nehraje roli změna geometrie objektu – zjednodušení linií a podobně, protože pokud nedojde k porušení topologických vztahů elementů modelu, mesh model území má pořád tutéž kvalitu.

Na základě vymezení účelu modelu dochází také ke generalizaci atributů původní geografické báze dat. Obvykle se jedná o výběr atributů podle předem stanovených kritéríí a dále změny klasifikace.

## 6 Automatizace v odvozování modelů

Pro snížení časové náročnosti při tvorbě odvozovaných modelů, jak je rozebráno v [6], je vyvíjena metodika a jsou vytvářeny aplikace, což směřuje k tomu, že jsme schopni vytvářet: geoinformatické modely dané oblasti, které slouží jako zdroj požadovaných dat pro aplikace a umožňující vícenásobné využití pro tvorbu odvozovaných modelů, odvozené modely, které účelově popisují danou oblast a lze je vytvářet v různých variantách podle konkrétních požadavků organizace dat popisující odvozený model pro koncové uživatele, geometrii modelové sítě a její popis v různých formátech.

## 7 Praktické řešení

Zde nastíníme konkrétní řešení odvozování mesh modelu dané lokality vytvářeného pro účel modelování migrace podzemních vod. Toto řešení bylo realizováno v prostředí programových systémů ARCGIS, GRASS GIS a AUTOCAD.

## 7.1 Obsah mesh modelu území

Požadavek byl na vytvoření mesh modelu území, který bude obsahovat následující geografické jevy a prvky: hydrogeologické složení, tektoniku, povrchové vodstvo, studny, prameny [2, 3, 7]. Část vrstev předzpracovaných v programu ARCGIS ukazuje obr. 7.1.



Obrázek 7.1 Účelově vybrané vrstvy pro odvozený model.



Obrázek 7.2 Vizualizace elementů podle vybraných vlastností.

#### 7.2 Geometrické parametry

Geometrické parametry mesh modelu území, jak bylo popsáno v [7] se stanovují před samotným vytvářením modelu. Závisí na účelu, také na velikosti modelovaného území. V tomto příkladu se jedná o území rozsahu asi  $15 \times 15$  km, požadováno je prostorové rozlišení 150–200 metrů. Mesh model území bude 2.5D (tj. bude obsahovat dvojrozměrné elementy v prostoru, objemové elementy nejsou požadovány). Území bude pokryto konečným množstvím trojúhelníkových elementů, požadavek je stanoven na maximálně 5–7000 elementů. Strany trojúhelníkových elementů musí ležet na hranicích území, na tektonických liniích a na hranicích hydrogeologických polygonů. Strana elementu je dána požadavkem prostorového rozlišení 150–200 m. Území má být pokryto co nej-

více pravidelnou sítí elementů dané přesnosti. Poznámka: pokud jsou v mesh modelu požadovány objemové elementy, jsou požadavky na geometrii formulovány obdobně.

## 7.3 Organizace dat

Podle [7] je nutné požadavky na organizaci dat formulovat před praktickým řešením modelu, těmito požadavky je ovlivněn výběr datových vrstev originálního modelu, které vstupují do odvozovaného modelu. Požadované atributy mohou pocházet z jiných vrstev originálního modelu, než se kterými se pracuje při zpracování geometrie modelu. Konkrétní požadavky mohou být zformulovány například takto: Každý trojúhelníkový element bude mít jednoznačný identifikátor a dále ponese identifikaci bodů, které tvoří jeho vrcholy. Každý bod (vrchol elementu) bude mít jednoznačný identifikátor a pak souřadnice X, Y, Z. Kromě toho je u bodů požadována informace, k jaké tektonické linii patří nebo k jakému hydrogeologickému rozhraní. U elementů je požadována informace o příslušnosti k hydogeologické oblasti, dále informace o výskytu vodního toku, vodní plochy, pramene a studny. Pokud se bude vyskytovat studna, je vyžadován údaj o nadmořské výšce hladiny.

#### 7.4 Řešení geometrie a organizace dat mesh modelu území

Nejprve bylo vytvořeno pravidelné bodové pole pokrývající zájmovou oblast s krokem 200 m. Z originálního geoinformačního systému byly vybrány vrstvy tektoniky a hydrogeologických polygonů. Tyto liniové vrstvy byly nahrazeny množinami bodů s krokem 150 m a byly přidány do pravidelného bodového pole. Odtud byly pak eliminovány body, které ležely blízko tektonických linií a hranic hydropolygonů. Dále byly eliminovány podle podobného pravidla body na tektonických liniích a hranicích hydropolygonů, které byly blíže, než stanovený krok modelu. Tím bylo vytvořeno pole bodů, které mají požadované vlastnosti. Bodům byl přiřazen jednoznačný identifikátor a pak zaznamenány jako atributy X, Y souřadnice. Souřadnice z byla odvozena z digitálního modelu reliéfu. Dále bodům byly přiřazeny atributy identifikující polohu na hranici modelovaného území, tektonické linii (číslo tektonické linie), hydrogeologickém rozhraní (číslo rozhraní) nebo uvnitř území ostatní body.

V tomto bodovém poli byla vytvořena trojúhelníková síť elementů. Jednalo se o Delaunayovu triangulaci. Elementy byly vytvořeny jako plochy, kterým byl přiřazen jednoznačný identifikátor. Jako atributy elementům byly přiřazeny informace o jejich vrcholech (3 jednoznačné identifikátory vrcholů trojúhelníkového elementu), dále informace o tom, zda se na elementu vyskytuje vodní plocha (a identifikace vodní plochy), vodní tok (samozřejmě s identifikací), pramen, studna (kromě atributu udávajícího výskyt studny je vytvořen atribut udávající nadmořskou výšku hladiny studny – tento atribut je odvozen ze známé hloubky studny v původním geoinformačním systému a z digitálního modelu terénu). Toto přiřazení atributů (a také informace o topologických vztazích) je nejčastěji výsledkem prostorových analýz na obou modelech současně, jak originálním, tak na odvozeném mesh modelu území.

Řešení není triviální, pro vytvoření mesh modelu území byly použity nástroje ARCGIS a GRASS GIS, výsledný mesh model území byl uložen jako systém souborů dbf. Vizualizace byla provedena v systému ARCGIS, ale vizualizace mesh modelu území slouží spíše pro dokreslení celkové situace v území a rozdělení území na jednotlivé elementy, ale pro využití mesh modelu území není nezbytná.

## 8 Závěr

Uvedená definice požadavků na účelový mesh model území je pouze příkladem, v praxi je takových požadavků mnoho, stejně tak konkrétních postupů řešení geometrie modelu a organizace dat. Také použitý software se liší podle toho, jaké požadavky na mesh model území jsou kladeny. Na jedné lokalitě se v rámci matematického modelování používá více mesh modelů téhož území, které se liší svým rozsahem území, prostorovým rozlišením a také množstvím zpracovávaných atributů. Aby bylo možné podle definovaných požadavků vytvářet tyto mesh modely území s různými parametry, je nutné mít kvalitně zpracovaný originální model – geoinformační systém území, který slouží jako výchozí model pro tvorbu mesh modelů daného území. Bylo zjištěno, že se jeví jako velmi vhodné udržovat geoinformační systém území v souborových systémech několika různých softwarových nástrojů, což umožní rychlé vytvoření požadovaných odvozených modelů. Je zároveň nezbytné mít vyřešen vzájemný přenos souborů mezi softwarovými systémy a zároveň udržovat data originálního modelu aktuální. Využití mesh modelu území je v řadě aplikací modelovaných například metodou konečných prvků. Jako příklady aplikačních oblastí lze uvést proudění podzemních vod, doprava, šíření chorob, postup migrací. Vzájemná provázanost originálního modelu a odvozeného mesh modelu území umožní výsledky implementovat do původního GIS.

## Reference

- B. Hálková Malá: Tvorba kartografických modelů pod CAD systémy, Kartografie a geoinformatika, 4 (2002), č. 2, pp. 1–158.
- B. Malá: Tvorba geoinformačního systému Melechov a předzpracování dat v GIS pro tvorbu sítě pro další modelování, 2007, http://www.geoinformatika.wz.cz. 90
- B. Malá, Z. Capeková: Výstavba modelové sítě a její naplnění daty z GIS a stanovení počátečních podmínek pro různé varianty migrace. Zpráva o stavu řešení, NTI, FM, TUL, 2008. 88, 90
- B. Malá, Z. Capeková: Geoinformatické modelování a jeho přístupy v tvorbě mesh modelu území. In. Geodny. Sborník výroční konference České geografické společnosti, TUL Liberec, 2008. 89
- B. Malá, J. Pacina: Vytváření geoinformačního systému Poohří jako datové báze pro výstavbu modelových sítí. Zpráva o stavu řešení, TUL, UJEP, 2009. 88
- B. Malá, J. Pacina: Výstavba modelových sítí a automatizace v rámci tvorby modelových sítí. Projekt Poohří. Zpráva o stavu řešení, TUL, 2009. 90
- 7. J. Maryška, B. Malá: Výstavba modelové sítě a její naplnění hodnotami z GIS SURAO a stanovení počátečních podmínek pro různé varianty migrace. Dílčí závěrečná zpráva. Projekt SÚRAO: Výzkum procesů pole vzdálených interakcí HÚ vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů, TUL Liberec, 2008. 88, 90, 91, 92
- 8. B. Veverka: Teorie systémů a kybernetika. Praha, ČVUT, 1987. 88



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

## Měření velikostní distribuce nanoželeza

Jaroslav Nosek • Štěpánka Klímková • Miroslav Černík

## 1 Úvod

Při posuzování vhodnosti použití železných nanočástic (nano ${\rm Fe}^0)$  pro sanaci kontaminovaného horninového prostředí, je třeba znát dva základní parametry ovlivňující efektivitu této metody: i) reaktivitu nano ${\rm Fe}^0$ 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 [1].

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.

a projektem MŠMT ČR FRVŠ 2008/98/A "Vytvoření laboratoře exprimentální techniky".

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 GAČR 102/08/H081 v rámci projektu "Nestandardní aplikace fyzikálních polí – analogie, modelování, ověřování a simulace"

J. Nosek  $(\boxtimes)$  · Š. Klímková · M. Černík

Ústav nových technologií a aplikované informatiky, Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, Technická univerzita v Liberci, Studentská 2, 461 17 Liberec 1, Česká republika

e-maily: jaroslav.nosek1@tul.cz · stepanka.klimkova@tul.cz · miroslav.cernik@tul.cz

## 2 Měření velikostní distribuce částic metodou DLS

Metoda dynamického rozptylu světla spočívá v měření Brownova pohybu částic, ze kterého je následně usuzováno na jejich velikost. Měření Brownova pohybu se provádí osvětlením částic laserem a analyzováním fluktuací intenzity v rozptýleném světle. Důležitým rysem Brownova pohybu je to, že malé částice se pohybují rychle a velké částice se pohybují pomaleji. Vztah mezi velikostí částice a její rychlostí v důsledku Brownova pohybu je popsán Stokes-Einsteinovou rovnicí

$$D_H = \frac{k_B T}{f} = \frac{k_B T}{3\pi\eta D},$$

kde  $D_H$  značí hydrodynamický průměr,  $k_B$  je Boltzmannova konstanta, T absolutní teplota, f součinitel tření částice,  $\eta$  viskozita rozpouštědla a D difuzní koeficient, viz [2].



**Obrázek 2.1** a) měřící polystyrénová cela (měření velikostní distribuce); b) měřící cela pro měření Zeta potenciálu; c) Zetasizer Nano s autotitrátorem.

## 3 Povrchový náboj částic a jeho měření

Vznik síťového náboje na povrchu částic ovlivňuje distribuci iontů v okolní meziplošné oblasti, což má za následek zvýšenou koncentraci opačných iontů těsně u povrchu. Kolem každé částice tedy existuje *elektrická dvojvrstva*. Vrstva kapaliny obklopující částici existuje jako dvě části; vnitřní oblast, nazývaná *Sternova vrstva*, kde jsou ionty silně vázané, a vnější, difúzní oblast, kde jsou ionty méně pevně připojené. Uvnitř difúzní vrstvy existuje teoretická hranice, uvnitř které ionty a částice tvoří stabilní jednotku. Když se částice pohybuje (např. kvůli gravitaci), ionty uvnitř hranice se pohybují s ní, ale ionty za hranicí s částicí neputují. Tato hranice se nazývá povrch hydrodynamického smyku, nebo rovina skluzu. Potenciál, který existuje na této hranici, je známý jako *potenciál zeta*.

Metoda měření povrchového náboje částic metodou fázové analýzy rozptýleného světla měří, jak rychle se částice pohybuje v kapalině, když je aplikováno elektrické pole tj. rychlost pohybu. Z naměřené rychlosti částice a známe velikosti intenzity aplikovaného elektrického pole, viskozity a dielektrické konstanty prostředí je pomocí Henryovy rovnice

$$U_E = \frac{2\varepsilon\zeta}{3\eta} F(Ka) \,,$$

kde  $U_E$  značí elektroforetickou pohyblivost,  $\varepsilon$  je dielektrická konstanta,  $\zeta$  zeta potenciál,  $\eta$  viskozita a F(Ka) je Henryova funkce, vypočtena velikost zeta potenciálu, podrobněji viz [2].



Obrázek 3.1 Potenciál zeta a elektrická dvojvrstva [2].

## 4 Výsledky měření

Pro měření byly připraveny vodné suspenze s několika typy různě povrchově modifikovaných nano Fe<sup>0</sup> a také komerčně dostupné produkty. Testováno bylo několik druhů surfaktantů, včetně kopolymerů a olejů. Komerční produkty byly zastoupeny dvěma typy produktů: nanoželezem RNIP-10E od japonského výrobce TODA KOGYO corporation a produktem NANOFER 25S od českého výrobce NANO IRON, s. r. o. Oba komerční produkty jsou stabilizovány. V případě nanoželeza RNIP-10E je použita polymaleinová kyselina, u NANOFER 25S výrobce pouze uvádí použití organického stabilizátoru.

Měřené vzorky nanoželeza byly připraveny ředěním zásobních suspenzí v deionizované vodě na úroveň koncentrací desítek mg/L. Následně byly vzorky dispergovány pomocí ultrazvuku. Povrchově modifikované nano $\mathrm{Fe}^0$  byly připraveny nadávkováním "čistého" nanoželeza (NANOFER 25), které je uchováváno v práškové podobě v inertní atmosféře, do vodného roztoku se stabilizátorem a následnou dispergací. Výsledné změřené velikostní distribuce jednotlivých typů nano $\mathrm{Fe}^0$  a změřené hodnoty zeta potenciálu jsou prezentovány na obr. 4.1.

## 5 Závěr

Při interpretaci výsledků získaných pomocí měření dynamického rozptylu světla je nutno brát v úvahu možnosti použitého přístroje Zetasizeru Nano. Tento přístroj je primárně určen k měření Latexových částic, pomocí kterých je také kalibrován. Latexové částice se vyznačují velmi dobrou monodisperzitou, sférickým tvarem a malou tendencí k sedimentaci. Oproti tomu suspenze s dispergovaným nano Fe<sup>0</sup> je velmi polydisperzní, což je dáno vysokou reaktivitou železných nanočástic a jejich tendencí agregovat a vytvářet větší konglomeráty. S tendencí k agregaci dále souvisí i tvar výsledných konglomerátů, kdy je často pozorováno řetězení částic, což opět stěžuje interpretaci výsledků získaných pomocí DLS. Přesto všechno poskytuje měření na Zetasizeru Nano velmi jednoduchou metodu zjištění základní informací o rozložení velikostní distribuce železných nanočástic, popř. lze z jejího vývoje usuzovat na tendence částic k agregaci.



Obrázek 4.1 Změřené velikostní distribuce různých typů nano ${\rm Fe}^0$  a jejich stabilia v čase.

V rámci měření velikostní distribuce nulmocného železa bylo prokázáno, že velikost komerčně dostupných nanoželez je na úrovni stovek nanometrů. Avšak i přes stabilizaci jejich povrchů, mají stále značnou tendenci k agregaci. Z látek, které byly během této studie do dnešní doby testovány, se zatím jako nejperspektivnější jeví axiláty. Nejlepších výsledků bylo dosaženo v případě použití dvou typů axilátů: 2435 a 32SV.

## Reference

- 1. Kompendium Sanační technologie, Ekomonitor, 2005, Czech Republic. 94
- 2. Zetasizer Nano příručka uživatele. Malvern Instruments, 2007, UK. 95, 96



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

# Možnosti automatizace výstavby modelových sítí v rámci projektu Poohří

Jan Pacina  $\,\cdot\,$ Blanka Malá $\,\cdot\,$ Zuzana Capeková

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 severozápadní část Poohří – od řeky Ohře směrem na severozápad – až po hřebeny Krušných hor. Pro potřeby modelování proudění vod v územích s těžbou hnědého uhlí 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 software šířený na základě 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. Součástí přípravy projektu Poohří je i příprava vstupních dat. Z dostupných zdrojů byla získána výšková data (digitální model terénu) ve formátu ESR GRID. Tato data byla přepracována pro využití v projektu Poohří.

J. Pacina (⊠)

B. Malá · Z. Capeková

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".

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

Ústav nových technologií a aplikované informatiky, Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, Technická univerzita v Liberci, Studentská 2, 461 17 Liberec 1, Česká republika

e-maily: zuzana.capekova@tul.cz $\,\cdot\,$ blanka.mala@tul.cz

## 1 Rešerše softwarových produktů umožňujících plně 3D interpolaci

Standardní nástroje GIS umožňují pouze tzv. 2.5D interpolaci (dvou a půl rozměrnou). Tento typ interpolace je daný tím, že výsledný interpolovaný povrch je popsán pomocí 2D matice (rastru), nebo případně pomocí TIN (triangulated irregular network). Tyto datové typy neumožňují uložení jednomu bodu o souřadnicích X, Y dvě hodnoty interpolovaného jevu (např. výšky Z). Vybrané softwarové produkty jsou, dle popisu v manuálových stránkách, schopné interpolovat data plně ve 3D – schopnost modelovat převisy, kupovité geologické vrstvy – oblasti, kde jsou jedné hodnotě souřadnic X, Y přiřazeny dvě (a více) hodnoty Z. Na základě informací dostupných na internetu byly vybrány následující produkty:

- EVS-PRO firma C-TECH,
- ROCKWORKS 2006 firma RockWare,
- VOXLER firma Golden Software,
- $-\,$  GRASS 6.3 šířen v rámci GNU licence.

#### 2 Implementace vlastního software pro tvorbu geometrie modelových sítí

Z výsledků testování dostupných komerčních i nekomerčních softwarových produktů pro tvorbu plně prostorových dat a z předchozího výzkumu ([1, 2, 3, 4] a [5]) vyplývá, že žádný z těchto programů neumožňuje automatickou tvorbu triangulované sítě, potřebné pro výstavbu geometrie modelových sítí dle našich požadavků. Je tedy nutné navrhnout a implementovat program, který je schopný ze vstupních bodů reprezentující geologické zlomy, rozhraní hornin, vrty aj. generovat síť, která je svými vlastnostmi vhodná pro další zpracování v programu GMSH. Aplikace vychází z faktu, že každá geologická vrstva je definována sítí pravidelných trojbokých hranolů (viz obr. 2.1), jejichž geometrie je popsána v souboru typu **geo**, což je formát vstupních dat do softwaru GMSH. Hierarchie formátu **geo** popisující trojboké hranoly je následující:

- každý trojboký hranol je definován body,
- body definují linii,
- linie definují plochy:

2 trojúhelníky (podstava),

- 3 obdélníky (plášť),
- plochy definují objemy (hranoly).

Pro implementaci algoritmu jsme volili prostředky tak, aby výsledná aplikace byla nezávislá na typu platformy. Byly využity možnosti databáze xml a programovacího jazyka XSL.

Na vstupu výstavby sítě je několik typů dat (body, linie), které reprezentují charakteristiky zpracovávané oblasti (geologické zlomy, rozhraní hornin, vrty, ...) – ukázka viz obr. 2.2(a). Tyto charakteristiky se následně převedou na body a celá oblast se doplní body generovanými v pravidelných intervalech. Na těchto bodech provedeme triangulaci a získáme body, linie a plochy trojúhelníků (viz obr. 2.2(b)). Do takto získaných dat je nutné uložit informaci o topologii (vztahy mezi body, liniemi a trojúhelníky), která je využita v aplikaci pro budování trojbokých hranolů.

Do aplikace vstupují následující informace:

– body svrchní a spodní části vrstvy – obsahují souřadnici X, Y, Z,



Obrázek 2.1 Geometrická definice trojbokého hranolu ve formátu geo.



**Obrázek 2.2** (a) testovací oblast – vstupní data; (b) trojúhelníková síť generovaná ze vstupních dat.

- body definující linie obsahují odkaz na identifikátor bodu definující souřadnice a identifikátor linie, kterou definují,
- linie definující trojúhelníky obsahují odkaz na identifikátor linie a identifikátor trojúhelníku, který definují.

Data (ve stanoveném formátu) se získají předzpracováním triangulovaných dat v prostředí GIS. Do aplikace se načítají soubory **csv** (textové soubory oddělené středníkem), které jsou exportované z atributových tabulek předzpracovaných dat. Algoritmus pro generování modelových sítí za pomoci trojbokých hranolů je následující:

- Data ze souborů csv jsou načtena do databáze xml. Tato databáze umožňuje rychlé a optimalizované vyhledávání.
- Algoritmus předpokládá, že uzly (vrcholy) trojúhelníků ve svrchní a spodní vrstvě mají identickou souřadnici X a Y.

- Výpis bodů definujících všechny linie v budované síti.
- Výpis všech linií definující plochy v budované síti.
- Výpis obdélníků, definující pláště trojbokých hranolů.
- Výpis trojúhelníků, definující podstavy trojbokých hranolů.
- Definice trojbokých hranolů, definovaných pláštěm a podstavou.

Výsledek je zapsán do souboru **geo**, který popisuje geometrii modelové sítě a který je nativní formát programu GMSH. Algoritmus je nyní testován na modelových datech z jiných oblastí, než je oblast Poohří. Pro testování byla použita data o různé struktuře:

- Data s rovnoměrným (pravidelným) rozložením vstupních bodů.
- Data s nepravidelnou strukturou zahrnuté geologické hrany, vodní toky, ...





**Obrázek 2.3** Detail (a) trojbokých hranolů; (b) sítě generované z nepravidelných vstupních bodů.

## 3 Příprava vstupních výškových dat

Pro zpracování výškové složky vstupních dat je zapotřebí obstarat digitální model terénu odpovídající kvality. Za tímto účelem byla provedena rešerše dostupných dat s důrazem na co nejnižší cenu. Byla zvolena data dostupná zdarma na internetu, na adrese http://www.arcdata.cz. Jedná se o data, která vznikla při misi raketoplánu Endeavour, při které byl pořízen model reliéfu celého světa.

Dle http://www.arcdata.cz maximální přesnost digitálního modelu terénu dosahuje 15 metrů v poloze a 12 metrů ve výšce. Data jsou k dispozici v rastrové podobě s prostorovým rozlišením 1 úhlová vteřina (cca 30 metrů na rovníku) pro území USA a 3 úhlové vteřiny (cca 90 metrů na rovníku) pro ostatní svět, což pro zeměpisnou šířku střední Evropy představuje přibližně 90 × 60 metrů.

S ohledem na rozlohu oblasti a způsob zpracování je dostupné prostorové rozlišení a přesnost dat plně dostačující. Data jsou distribuována v souřadnicovém systému WGS84 – veškerá data zpracovávaná v projektu Poohří budou v souřadnicovém systému JTSK, což je český národní souřadnicový systém, ve kterém jsou požadovány i výstupy z výstavby modelových sítí. Výškový rastr bylo tedy nutné transformovat ze souřadnicového systému WGS84 do souřadnicového systému JTSK. Transformace rastrových dat byla provedena v programu ARCGIS 9.2 pomocí funkce **Project**. Při transformaci rastrových dat dochází ke ztrátě informace obsažené ve zdrojových datech. Výsledná data mohou být zašuměná, potrhaná a mohou v nich vzniknout nespojitosti. Abychom odstranily tyto artefakty transformace, použijeme vyhlazovací filtr. Tento filtr ve transformovaných datech zahladí veškeré nespojitosti. Při vyhlazování opět dojde k určité ztrátě informace, vzhledem k přesnosti primárních vstupních dat je však tato degradace zanedbatelná. Na obr. 3.1(a) a obr. 3.1(b) jsou vstupní data v souřadnicovém systému WGS84 a JTSK.

## 4 Závěry plynoucí z přípravné fáze projektu Poohří

V rámci přípravné fáze byla provedena rešerše dostupných softwarových produktů a testována jejich aplikovatelnost na problém automatizované výstavby geometrických sítí. Závěry z testování jsou shrnuty v kapitole. Jediný produkt vybraný k dalšímu testování je GIS GRASS v.6.3.

Jelikož je pro další zpracování modelových sítí potřeba získat data ve formátu a topologii typu **geo** (nativní formát programu GMSH), bylo přistoupeno k vývoji vlastní aplikace pro převod dat do formátu **geo**. Aplikace pracuje s databází xml a využívá programovacího jazyka XSL. Data konvertuje do formátu **geo** na základě topologických vazeb připravených v GIS. Aplikace bude dále testována na modelových datech z jiných oblastí. Pro potřeby výstavby modelových sítí bylo nutné získat i výšková data s odpovídající přesností. Z dat dostupných na internetu byla vybrána výšková data dostupná z http://www.arcdata.cz. Jedná se o data s maximální přesností 15 metrů v poloze a 12 metrů ve výšce. Prostorové rozlišení dat je 90 × 60 metrů. Přesnost dat i jejich rozlišení je pro použití v projektu Poohří dostačující.

#### Reference

 B. Malá: Tvorba geoinformačního systému Melechov a předzpracovaní dat v GIS pro tvorbu sítě pro další modelování, 2007, http://www.geoinformatika.wz.cz.



<image>

Obrázek 3.1 Výškový rastr v souřadnicovém systému (a) WGS84; (b) JTSK.

#### 99

- B. Malá, Z. Capeková: Výstavba modelové sítě a její naplněni daty z GIS a stanoveni počátečních podmínek pro různé varianty migrace. Zpráva o stavu řešení, NTI, FM, TUL, 2008. 99
- B. Malá, Z. Capeková: Geoinformatické modelovaní a jeho přístupy v tvorbě mesh modelu územi. In. Geodny. Sborník výroční konference Česée geografické společnosti, TUL Liberec, 2008. 99
- B. Mala, J. Pacina: Výstavba modelových síti a automatizace v rámci tvorby modelových sítí. Projekt Poohří. Zpráva o stavu řešení, TUL, 2009. 99
- 5. J. Maryška, B. Mala: Výstavba modelové sítě a její naplněni hodnotami z GIS SURAO a stanoveni počátečních podmínek pro různé varianty migrace. Dílčí závěrečná zpráva. Projekt SURAO: Výzkum procesů pole vzdálených interakci HU vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů, TUL Liberec, 2008. 99



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

## Algoritmus pro redukci puklinové sítě v úloze 2D proudění

Petr Rálek

Abstrakt Obsahem příspěvku je popis vlastností algoritmu pro redukci dvourozměrné puklinové sítě. Problém vznikl jako součást řešení úlohy numerického modelování v puklinové síti s mechanickým zatížením v rámci projektu Decovalex-2011, Task C [3].

Modelovanou oblastí je čtverec o délce strany 20 m, na kterém je stochasticky generovaná puklinová síť (s parametry podle reálných měření). Data jsou zpracována kombinací softwaru GIS (postup popsán ve [4]) a vlastního C++ kódu. Výsledkem je geometrie a diskretizace puklinové sítě. Úloha proudění je řešena programem FLOW123D (vyvinut na TUL). Preprocessing i postprocessing využívají též programu GMSH.

Vzhledem k velké hustotě puklinové sítě vznikl požadavek na její redukci při přibližném zachování hydraulických vlastností tak, abychom na řidší síti mohli řešit sdruženou úlohu proudění – mechanika. To bylo motivací k vytvoření a implementaci redukčního algoritmu.

## 1 Úvod

Modelová úloha proudění v puklinovém prostředí s vlivem napětí v masivu vznikla jako součást projektu Decovalex-2011, Task C [3]. Jedná se o dvourozměrnou čtvercovou oblast s délkou strany 20 m. Puklinová síť je generovaná stochasticky, výsledkem je soubor koncových bodů puklin, jejich průsečíků a velikostí rozevření [1]. Postup získání těchto dat je popsán ve zprávě [4]. Data jsou posléze převedena na msh soubor (formát programu GMSH), který pak slouží společně s materiálovými parametry puklin jako vstup pro solver FLOW123D, který počítá vlastní úlohu proudění, ve které nás zajímají

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".

P. Rálek  $(\boxtimes)$ 

Ústav nových technologií a aplikované informatiky, Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, Technická univerzita v Liberci, Studentská 2, 461 17 Liberec 1, Česká republika e-mail: petr.ralek@tul.cz

toky přes hranice oblasti. Okrajové podmínky dvou typů úloh jsou znázorněny na obr. 1.1 vlevo a vpravo (pro podrobné zadání úlohy viz [3]). Součástí úlohy je započtení vlivu napětí v horninovém masivu na rozevření puklin (okrajové podmínky pro napětí jsou znázorněny na obr. 1.1 uprostřed). Mechanický model puklin (vzorce pro tuhost puklin, pevnostní kritéria) byl převzat z [2]. Vliv mechaniky je počítán diskrétně zvlášť pro každou puklinu a výsledkem jsou modifikované materiálové parametry pukliny, sloužící jako vstup pro řešení úlohy proudění.



**Obrázek 1.1** Okrajové podmínky pro proudění (vstupní tlaky) a pro mechaniku (napětí v masivu).

Původní idea byla počítat sdruženou úlohu proudění – mechanika a kvůli příliš velké hustotě puklinové sítě vznikl požadavek na její redukci při přibližném zachování hydraulických vlastností tak, abychom na řidší síti již mohli sdruženou úlohu řešit. Vliv mechaniky byl nakonec počítán diskrétně zvlášť pro každou puklinu, nikoli jako sdružená úloha, nicméně vzniklý reduktor sítě poskytuje zajímavé poznatky o vlastnostech puklinové sítě.



Obrázek 1.2 Zobrazení (v programu GMSH) původní puklinové sítě a vypočteného proudění.

## 2 Redukce puklinové sítě

Pro redukci puklinové sítě (tzn. snížení počtu puklin a jejich průsečíků – uzlů) lze použít několik postupů, od vynechání některých puklin přes vymazání slepých úseků

po různé stupně slučování blízkých průsečíků puklin. Dané procedury jsou popsány dále a lze je různě kombinovat. Výsledná podoba sítě si vyžádala některé další úpravy tak, aby vyhovovala vstupním požadavkům pro FLOW123D.

## Mazání malých puklin

U dostatečně malých puklin lze předpokládat, že jejich vliv na celkové proudění bude zanedbatelný či malý (rozevření puklin je úměrné jejich délce). V procesu mazání jsou pukliny kratší než zvolená délka (volitelný parametr) odstraněný. Pukliny, které mají jeden z konců na hranici oblasti, jsou z procesu mazání vyloučeny (kvůli zachování všech vstupních a výstupních toků). Podoba zbylé puklinové sítě se nemění. Ukázka redukované sítě je na obr. 2.1.

Na obr. 2.2 jsou znázorněny celkové toky částmi hranice oblasti (číslování stran oblasti dle obr. 1.2) pro různě velký parametr vymazání malých puklin. Pro mazání malých puklin až do velikosti 1 m se celkové toky částmi hranice měnily jen velmi málo. Po vymazání některých puklin zbývají reliktní uzly po jejich průsečících s jinými puklinami (obr. 2.1 uprostřed). Ty jsou nyní vymazány (vznikne jedna delší úsečka).



**Obrázek 2.1** Původní síť, síť po vymazání některých puklin, síť po následném odslepení a vymazání přebytečných vnitřních uzlů.

#### Odstranění slepých úseků puklin

Části puklin mezi posledním průsečíkem s jinou puklinou a koncem pukliny nemají vliv na ustálené proudění v puklinové síti. Odstraněním slepých úseků puklin (odslepením) lze snadno dosáhnout snížení počtu uzlů cca o polovinu (dle pozorování). Zbylá puklinová síť se nijak nemění. Slepé úseky (cesty, které končí v jednom slepém koncovém uzlu nějaké pukliny), jsou pro proudění nepodstatné, ale výrazně zjednoduší celou síť před dalšími procedurami.

Každý uzel má svou hodnost (počet puklin, které se v něm protínají). Při mazání puklin mohou uzly své hodnosti snižovat. Pokud má uzel hodnost 1, znamená to, že je slepý. Úsečky se slepým uzlem jsou odstraněny (viz obr. 2.1 vpravo).

#### Slučování uzlů

Cílem slučování blízkých uzlů je snížit celkový počet průsečíků puklin. Vzdálenost dvou uzlů, které lze sloučit, je volitelným parametrem. Slučují se vždy dva průsečíky ležící




**Obrázek 2.2** (a) toky částmi hranice oblasti v závislosti na stupni mazání puklin. (b) velikost úlohy pro různé stupně mazání puklin.

na jedné puklině. Zůstane zachována sousednost v puklinové síti a disjunktní větve zůstanou disjunktní.

Jedná se o nejsložitější část redukce. Výsledná podoba redukované sítě závisí na pořadí, ve kterém uzly slučujeme, a vyžaduje ještě další úpravy. Podrobnější popis jednotlivých kroků redukce je obsahem dalšího textu.

Významné pukliny (s délkou větší než volitelný parametr) procházejí tímto procesem beze změny. Jejich uzly se nesmějí hýbat. Také uzly, ležící na hranici, lze volitelně zachovat při slučování beze změny.

Prochází se puklina za puklinou a jejich úsečky – úsek pukliny mezi dvěma uzly. Pokud jsou si uzly blíže než volitelný parametr (**rozdíl**), a smí se s nimi hýbat, pak jsou sloučeny do jednoho uzlu se zprůměrovanými souřadnicemi. v případě, že se smí hýbat jen s jedním uzlem, je ten posunut do uzlu druhého (viz obr. 2.3). Každý průsečík se prochází v rámci jedné pukliny jen jednou. Proto konečná podoba sítě závisí na pořadí, ve kterém procházíme pukliny. v nynější podobě se tak děje podle číslování elementů (= úsečka mezi dvěma průsečíky) v původní diskretizaci.

Čím větší je parametr **rozdíl**, tím je větší deformace původní sítě, toky však jsou velmi podobné. Vzniká malý počet mnohonásobných průsečíků. Při nižší hodnotě parametru **rozdíl** dochází k rovnoměrnějšímu rozprostření úseček v ploše (viz obr. 3.1).



Obrázek 2.3 Ukázka slučování uzlů.

Slučováním uzlů lze zároveň také redukovat případy, kdy se např. tři pukliny protínají blízko sebe a vznikají velmi krátké elementy (např. situace na obr. 2.3 vlevo dole).

Slučování uzlů má pro vhodně zvolené významné pukliny a parametr **rozdíl** malý vliv na celkovou bilanci toků přes jednotlivé části hranice, lze však dosáhnout dalšího snížení velikosti úlohy (např. v síti s vynechanými puklinami kratšími než 1 m lze pro parametr slučování 0.4 metru na cca polovinu, viz obr. 2.4).



**Obrázek 2.4** Velikost úlohy pro různé stupně slučování uzlů (0.2–0.4 m), vymazány byly pukliny menší než 1 m.

Hraniční uzly přirozeně nejsou brány jako slepé, pokud cesta, která v nich začíná, vede dovnitř oblasti. Při slučování uzlů však dochází k případům, že vznikne úsek souběžný z hranicí. Vzhledem k zadávání okrajových podmínek pro program FLOW123D musejí být tyto úseky vymazány (viz obr. 2.5).

# Slučování souběžných puklin

Při procesu slučování uzlů může dojít k situaci, že např. posunutím jednoho uzlu do jiného vznikne "dvojitá" úsečka. Takovéto sloučení může být i vícenásobné. Stejně tak může dojít k překryvu úseček. Takovéto úseky musejí být sloučeny v jednu úsečku s příslušnými materiálovými parametry (viz obr. 2.6). Tloušťky se sečtou, vodivost se přepočte z vodivostí slučovaných úseček tak, aby byl zachován tok puklinou.



Obrázek 2.5 Vymazání úseček ležících na hranici (a odslepení).



**Obrázek 2.6** Vznik souběžných puklin a jejich sloučení (graficky znázorněno sčítání tlouštěk puklin).

# 3 Některé výsledky

Na obr. 3.1 jsou zobrazeny odlišné výsledky redukce pro různě robustní slučování blízkých uzlů. Na obr. 3.2 je znázorněná postupná redukce sítě od po odstranění slepých úseků, přes vymazání malých puklin po sloučení blízkých uzlů.



**Obrázek 3.1** Rozdíl ve výsledcích slučování uzlů – pro parametr rozdíl0.1 a 1 m (významné pukliny jsou delší než 2 m).

# 4 Závěr

Testovací úlohy ukázaly, že lze výrazným způsobem snížit velikost puklinové sítě, aniž to (pro vhodně zvolené parametry redukce) výrazně ovlivní výsledné proudění. Zvolit



**Obrázek 3.2** Shora, zleva: původní síť, odslepená síť, odslepená síť s vymazanými puklinami menšími než 1 m, tatáž síť při slučování uzlů s parametrem 0.5 m.

správně vyvážené parametry redukce není snadné a je třeba pokaždé testovat, nakolik změna sítě ovlivní výsledné toky hranicemi oblasti. v budoucnu se nabízí také úloha nalézt způsob, jak měnit materiálové parametry sítě (např. permeabilitu) tak, aby výsledné toky částmi hranice na redukované síti byly shodné (ve větší míře než nyní) s toky na síti neredukované.

# Reference

- A. Baghbanan, L. Jing: Hydraulic properties of fractured rock masses with correlated fracture, length and aperture, International journal of rock mechanics and mining sciences, 44(5), pp. 704–719 (2007). 104
- 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, 45(8), pp. 1320–1334 (2008). 105
- J. A. Hudson, I. Neretnieks, L. Jing: DECOVALEX-2011 project, Technical Definition of the 2-D BMT Problem for Task C, May 2008. 104, 105
- 4. B. Malá: Fracture net, Technical report TUL, June 2008. 104



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

# Model agregace železných nanočástic

Dana Rosická  $\,\cdot\,$  Jan Šembera

Abstrakt Nanočástice nulmocného železa (NZVI, z angl. nanoscale Zero-Valent Iron) jsou používány pro dekontaminaci podzemních půd a vod. Problémem sanačních zásahů s použitím NZVI je transport těchto částic. Dochází u nich k agregaci, částice se shlukují a tím se jejich transport porézním prostředím omezuje. V tomto příspěvku odvozujeme příčiny agregace NZVI a na základě těchto příčin sestavujeme matematický model míry agregace NZVI za daných podmínek. Míru agregace pak vyjadřuje takzvaný koeficient přestupu, který spolu s hustotou částic v roztoku určuje pravděpodobnost agregace dvou částic. Tento koeficient přestupu byl odvozen pro základní procesy, které nastávají při transportu částic porézním prostředím, a to pro sedimentaci, Brownův pohyb a rychlostní gradient kapaliny, která částici unáší (publikováno v [1]). V práci odvozujeme koeficient přestupu pro další faktor, který má nezanedbatelný vliv na agregaci železných nanočástic – elektrostatické síly mezi částicemi.

# 1 Úvod

Zabýváme se nanočásticemi železa, což jsou malé částice kulového tvaru, které mají průměr přibližně 50 nm a velký měrný povrch. Tyto částice se používají k sanaci podzemních půd a vod. Mohou na sebe sorbovat polutanty nebo změnit oxidační stav kontaminantu tak, že je pak méně mobilní nebo reaktivní. Nanočástice však v čase agregují. Vznikají stále větší částice a k rozpadu agregátů nedochází, což má za následek zhoršenou transportovatelnost částic porézním prostředím. Částice ulpívají na stěnách pórů a znemožňují průchod dalším částicím. Proto se snažíme zjistit příčiny

Tento projekt je realizován za podpory státních prostředků České republiky v rámci projektu VaV "Pokročilé sanační technologie a procesy" č. 1M0554 – program MŠMT "Výzkumná centra".

D. Rosická  $\cdot$  J. Šembera

Ústav nových technologií a aplikované informatiky, Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, Technická univerzita v Liberci, Studentská 2, 461 17 Liberec 1, Česká republika

e-maily: dana.rosicka@tul.cz · jan.sembera@tul.cz

agregace částic a dalších procesů způsobujících špatnou mobilitu částic. Vytváříme matematický model popisující míru agregace a tento model poté použijeme v programu pro výpočet transportu.

Počet zadržených částic v pórech závisí na míře agregace. Protože se snažíme simulovat transport částic, potřebujeme tuto míru agregace odhadnout. K tomu nám slouží koeficienty přestupu, které vyjadřují pravděpodobnost kolize mezi dvěma agregáty (resp. částicemi) způsobenou třemi základními procesy, které nastávají během transportu částic ve vodě. Tyto procesy jsou Brownův pohyb, sedimentace a unášení částic kapalinou. Koeficienty přestupu byly publikovány v práci [1]. Jejich odvození pak bylo provedeno v [5] a [7]. V této práci je ukázáno rozšíření koeficientů přestupu o vliv elektrostatických sil mezi částicemi.

Abychom odvozené koeficienty byli schopni použít pro simulaci transportu, musíme jednotlivé agregáty chápat jako látky různé velikosti s různou rychlostí transportu. To znamená, že program pro výpočet transportu by musel počítat reakce mezi miliony látek, což je nereálné. Proto jsme navrhli systém klastrování, který je popsán např. v [6], a upravili jsme koeficienty přestupu pro jednotlivé klastry [4]. Díky tomuto systému řešič počítá reakce pouze mezi jednotlivými klastry.

#### 2 Agregace nanočástic

Nanočástice železa agregují snadno. Pokud se dvě částice dostanou k sobě na dostatečně malou vzdálenost, zagregují. Tato vzdálenost je rovna součtu poloměrů obou agregujících částic. Nanočástice jsou schopny vytvořit agregát až do velikosti  $5 \,\mu$ m.



Obrázek 2.1 Ilustrativní fotografie agregátů nanoželeza [2].

Rychlost agregace a počet vytvořených agregátů jsou reprezentovány mírou agregace, kterou jsme odvodili pomocí rovnováhy sil mezi částicemi. Pohyb částic ve vodě je způsoben především tepelnou fluktuací, sedimentací a unášením v kapalině. V případě nanočástic železa se navíc na jejich povrchu ustaví v elektrolytu povrchový náboj, který by mohl ovlivnit výslednou míru agregace. Proto jsme vytvořili model agregace pro všechny čtyři výše zmíněné procesy. Odvození jsme provedli na základě koeficientů přestupu  $\beta$  [m<sup>3</sup>s<sup>-1</sup>], které byly publikovány v práci [1].

V práci používáme pojem "částice i", který značí agregát vytvořený z i elementárních nanočástic. Pravděpodobnost vytvoření agregátu z částice i a částice j závisí na četnostech  $n_i, n_j$ částicia částicja na koeficientu přestupu  $\beta_{ij}$ . Tento koeficient je pak dán součtem koeficientů přestupu pro sedimentaci  $\tilde{\beta}_{ij}^{3el}$ , rychlostní gradient  $\tilde{\beta}_{ij}^{2el}$ a Brownův pohyb $\tilde{\beta}_{ij}^{1el}$ :

$$P_{ij} = \beta_{ij} \, n_i \, n_j \,, \tag{2.1}$$

$$\beta_{ij} = \tilde{\beta}_{ij}^{3el} + \tilde{\beta}_{ij}^{2el} + \tilde{\beta}_{ij}^{1el} \,. \tag{2.2}$$

Označení jsou stejná jako v práci [1], horní index <sup>el</sup> pak značí zahrnutí elektrostatických sil způsobených elektrickou vrstvou na povrchu částic do již publikovaných koeficientů přestupu. Ve zbytku práce předpokládáme stejnou polaritu povrchového náboje částic, což je častější případ.

#### 2.1 Sedimentace

Koeficient přestupu pro sedimentaci byl odvozen z rovnováhy sil, do které jsme přidali Coulombův zákon (2.3). V této práci prezentujeme odvození pouze v 1D, protože



Obrázek 2.2 Rovnováha sil dvou částic během sedimentace.

odvození ve 2D je mnohem komplikovanější, ale rozdíl ve výsledku je zanedbatelný. Coulombův zákon určuje sílu

$$F_c = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Q_i Q_j}{R^2}, \qquad (2.3)$$

kde  $Q_i$  je povrchový náboj,  $\varepsilon_0$  je permitivita vakua a R je součet poloměrů částic i a j. Rovnováha sil má tento tvar (viz obr. 2.2):

$$F_{grav} = F_c + F_{fric} + F_{buo} \,, \tag{2.4}$$

kde  $F_{grav}$  je gravitační síla,  $F_{buo}$  je vztlaková síla,  $F_{fric}$  je odporová síla a  $F_c$  je Coulombova síla. Po vyjádření částí rovnic (2.4) na základě Coulombova zákona, Stokesova zákona a Archimédova principu, můžeme rovnováhu sil zapsat následujícím způsobem

$$\varrho_p V_i g = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Q_i Q_j}{R^2} + 6\pi\eta r_i v_i + \varrho V_i g. \qquad (2.5)$$

Zde  $\eta$  je viskozita kapaliny,  $r_i$  je poloměr částice i ( $r_i = d_i/2$ ),  $v_i$  je rychlost částice i,  $\rho$  je hustota kapaliny,  $\rho_p$  je hustota agregujících částic,  $V_i$  je objem částice i a g je gravitační zrychlení.

Koeficient přestupu je roven toku menších částic, které jsou ve sledované oblasti kolem větší částice. Bez újmy na obecnosti můžeme předpokládat, že částice i je větší částice a částice j je menší. Sledovaná oblast je koule s poloměrem rovným součtu poloměrů sledovaných částic  $R = r_i + r_j$ . Z toho vyplývá, že koeficient přestupu je roven ploše řezu sledované oblasti  $S = \pi R^2$  násobené rozdílem rychlostí mezi sledovanými částicemi  $\Delta v = v_i - v_j$ :

$$\beta_{ij}^{3el} = S \,\triangle v \,. \tag{2.6}$$

Z(2.5)

$$v_i = V_i g \left( \varrho_p - \varrho \right) \frac{1}{3 \pi \eta \, d_i} - \frac{1}{4 \pi \, \varepsilon_0} \, \frac{Q_i \, Q_j}{R^2 \, 6 \, \pi \, \eta \, r_i} \,. \tag{2.7}$$

Poté z (2.6) a (2.7)

$$\beta_{ij}^{3el} = \frac{\pi g}{72\eta} \left( \varrho_p - \varrho \right) \left( d_i + d_j \right)^2 \left| d_i^2 - d_j^2 \right| - \frac{\pi d_i^2 d_j^2 \sigma_i \sigma_j}{12\eta\varepsilon_0} \left| \frac{1}{d_i} - \frac{1}{d_j} \right| \,, \tag{2.8}$$

Kde  $\sigma_i$  a  $\sigma_j$  vyjadřuje povrchový náboj částice i a částice j.  $\beta_{ij}^{3el}$  je koeficient přestupu se zahrnutím vlivu elektrostatických sil mezi částicemi pro sedimentaci. Pravděpodobnost agregace klesá kvadraticky s rostoucím povrchovým nábojem. Jestliže výraz, který redukuje koeficient přestupu, je větší než původní koeficient přestupu bez vlivu elektrostatických sil, pravděpodobnost kolize mezi částicemi i a j je rovna nule. Z toho důvodu

$$\tilde{\beta}_{ij}^{3el} = \max\{0, \, \beta_{ij}^{3el}\}\,.$$
(2.9)

#### 2.2 Rychlostní gradient

Opět odvodíme koeficient přestupu pro rychlostní gradient s vlivem elektrostatických sil z rovnováhy sil. Odvození je předvedeno opět pro případ 1D.



Obrázek 2.3 Rovnováha sil dvou částic pro proudící kapalinu.

Rovnováha odporové sily  $F_{fric}$  a Coulombovy síly  $F_c$  je v tomto případě

$$F_{fric} + F_c = 0, (2.10)$$

kde

$$F_{fric} = 3\pi \eta d_i (v_i - v_{i,water}), \qquad (2.11)$$

a  $F_c$  je stejná jako (2.3).

Pro odvození koeficientu přestupu pro rychlostní gradient je opět nezbytné vyjádřit rozdíl mezi rychlostmi částic i a j. Z (2.3), (2.10) a (2.11)

$$v_i = v_{i,water} - \frac{1}{12\pi^2 \eta \varepsilon_0 d_i} \frac{Q_i Q_j}{R^2}, \qquad (2.12)$$

$$v_j = v_{j,water} - \frac{1}{12\pi^2 \eta \varepsilon_0 d_j} \frac{Q_i Q_j}{R^2}, \qquad (2.13)$$

$$\Delta v = \frac{\partial v}{\partial n} z - \frac{Q_i Q_j}{12\pi^2 \eta \varepsilon_0 R^2} \left| \frac{1}{d_i} + \frac{1}{d_j} \right|, \qquad (2.14)$$

kde  $v_{i,water}$  a  $v_{j,water}$  značí rychlosti kapaliny v místech unášení částic *i* a *j*,  $\frac{\partial v}{\partial n}$  značí derivaci rychlostního pole kapaliny ve směru normály ke směru středního toku a *z* značí vzdálenost částic ve směru normály ke směru středního toku (viz obr. 2.3).

Koeficient přestupu  $\beta_{ij}^{2el}$  je dán tokem menších částic okolo větší částice. To můžeme vyjádřit jako integrál rozdílu rychlostí částic  $\Delta v$  přes polovinu povrchu sledované oblasti, což je koule o poloměru  $R = r_i + r_j$  okolo větší částice. Koeficient přestupu je tedy roven integrálu rozdílu rychlostí přes plochu S sledované oblasti:

$$\beta_{ij}^{2el} = \int_{S} \triangle v dS = 2 \left( \int_{0}^{R} \frac{\partial v}{\partial n} z 2\sqrt{R^{2} - z^{2}} dz - \int_{0}^{R} \frac{Q_{i}Q_{j}}{12\pi^{2}\eta\varepsilon_{0}R^{2}} \left| \frac{1}{d_{i}} + \frac{1}{d_{j}} \right| 2\sqrt{R^{2} - z^{2}} dz \right).$$
(2.15)

Koeficient přestupu pro rychlostní gradient  $G=\frac{\partial v}{\partial n}$  se zahrnutím vlivu elektrostatických sil mát tento tvar

$$\beta_{ij}^{2el} = \frac{1}{6} G(d_i + d_j)^3 - \frac{\pi d_i^2 d_j^2 \sigma_i \sigma_j}{12\eta\varepsilon_0} \left| \frac{1}{d_i} + \frac{1}{d_j} \right|.$$
(2.16)

Pravděpodobnost agregace klesá kvadraticky se vzrůstajícím povrchovým nábojem. Jestliže výraz, který redukuje koeficient přestupu, je větší než původní koeficient přestupu bez vlivu elektrostatických sil, pravděpodobnost kolize mezi částicemi i a j je rovna nule. Proto opět

$$\tilde{\beta}_{ij}^{2el} = \max\{0, \, \beta_{ij}^{2el}\}\,. \tag{2.17}$$

#### 2.3 Brownův pohyb

Brownova difuze je oscilace částic závislá na teplotě. Odvození koeficientu přestupu pro Brownovu difuzi provedeme na základě advekčně-difuzní rovnice

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{v}n) - \nabla \cdot (D\vec{\nabla}n) = 0, \qquad (2.18)$$

kdeD je difuzní ko<br/>eficient, v je rychlost transportu <br/>an je koncentrace transportovaného materiálu. Na základě Einsteina je difuzní ko<br/>eficient roven

$$D = \frac{k_B T}{f}, \qquad (2.19)$$

kde  $k_B$  je Boltzmanova konstanta, T je teplota a f je koeficient tření [5]. Označíme hustotu advekčního toku  $\vec{j}_{adv}$  a hustotu difuzního toku  $\vec{j}_{dif}$ :

$$\vec{j}_{adv} = \vec{v}n\,,\tag{2.20}$$

$$\vec{j}_{dif} = D\vec{\nabla}n\,.\tag{2.21}$$

Pro výpočet rychlosti částice způsobené Brownovým pohybem můžeme vyjádřit hustotu difuzního toku jako ekvivalentní hustotu advekčního toku způsobenou teoretickou Brownovou rychlostí  $v_B$  následovně

$$\vec{j}_{adv} = \vec{v}_B n = \vec{j}_{dif} = D\vec{\nabla}n.$$
(2.22)

Pro kulovou sledovanou oblast je

$$v_B = \frac{|\vec{j}_{dif}|}{n} = D \frac{\partial n}{\partial r} \frac{1}{n}.$$
 (2.23)

Nyní vyjádříme rovnováhu sil z odporové síly  $F_{fric}$  a z Coulombovy síly  $F_c$ :

$$0 = F_{fric} + F_c \,. \tag{2.24}$$

Odporovou sílu můžeme vyjádřit jako třecí koeficient vynásobený relativní rychlostí, tedy rozdílem mezi rychlostí částice  $v_i$  a střední rychlostí reprezentovanou teoretickou Brownovou rychlostí  $v_{B,i}$ :

$$0 = (v_i - v_{B,i})f + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Q_i Q_j}{R^2}.$$
 (2.25)

Odtud rychlost částice i je

$$v_i = v_{B,i} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Q_i Q_j}{R^2 f}, \qquad (2.26)$$

a hustota toku částicije

$$j_i = v_i n_i = D \frac{\partial n_i}{\partial r} - \frac{F_c}{f} n_i .$$
(2.27)

Poté tok částic i je

$$J_i = \int_S j_i dS \,, \tag{2.28}$$

kde S je řez sledovanou oblastí ve směru normály k Brownově toku. Změna počtu  $M_i$  částic *i* ve sledované oblasti je dána tokem těchto částic povrchem sledované oblasti v čase (0, t):

$$M_i = \int_0^t J_i d\tau = 4\pi R^2 \left( D \int_0^t \frac{\partial n_i}{\partial r} d\tau - \frac{F_c}{f} \int_0^t n_i d\tau \right).$$
(2.29)

Na povrchu sledované oblasti

$$M_i = 4\pi R D n_i \left( t + \frac{2R\sqrt{t}}{\sqrt{D\pi}} \right) - 4\pi R^2 \frac{F_c}{f} n_i t \,. \tag{2.30}$$

Za podmínky  $t \gg \frac{R^2}{D},$  pravděpodobnost nevytvoření agregátu je rovna

$$U = e^{-4\pi R n_i n_j \left(D - R \frac{F_c}{f}\right)t} . \tag{2.31}$$

Následně pravděpodobnost agregace je

$$W = 1 - U = 1 - e^{-wt} \approx wt, \qquad (2.32)$$

kde

$$w = 4\pi R \left( D - R \frac{F_c}{f} \right) n_i n_j \tag{2.33}$$

značí frekvenci kolize mezi částicem<br/>iiaj.Zde

$$f = 3\pi\eta (d_i + d_j) \,. \tag{2.34}$$

Po vyjádření difuzního koeficientu (2.19), koeficientu tření (2.34) a Coulombovy síly (2.3), výsledný koeficient přestupu se zahrnutím vlivu elektrostatických sil pro Brownův pohyb může být vyjádřen následujícím způsobem

$$\beta_{ij}^{1el} = \frac{2k_B T}{3\eta} \frac{(d_i + d_j)^2}{d_i d_j} - \frac{\pi d_i^2 d_j^2 \sigma_i \sigma_j}{3\eta \varepsilon_0 (d_i + d_j)}, \qquad (2.35)$$

$$\tilde{\beta}_{ij}^{1el} = \max(0, \beta_{ij}^{1el}).$$
(2.36)

Pravděpodobnost kolize částice klesá kvadraticky s rostoucím povrchovým nábojem částic.

Nyní je pravděpodobnost kolize mezi částicemi i a j určena hustotou těchto částic a součtem koeficientů přestupu (z (2.1) a (2.2)).

$$P_{ij} = \left(\tilde{\beta}_{ij}^{3el} + \tilde{\beta}_{ij}^{2el} + \tilde{\beta}_{ij}^{1el}\right) n_i n_j \,. \tag{2.37}$$

# 3 Závěr

Vyvinuli jsme teoretický model agregace elektricky nabitých částic nanoželeza během jejich transportu porézním prostředím, což nám umožní simulovat transport a agregaci těchto částic s použitím odvozených parametrů. Bude tedy možné simulovat procesy, které nastávají během sanačního zásahu nanočásticemi nulmocného železa.

Odvozené parametry určují míru agregace. Ukazuje se, že míru agregace ovlivňuje zásadním způsobem také vliv magnetických sil mezi částicemi železa. Tento vliv spolu s vlivem koroze částic v budoucnu taktéž zahrneme do modelu agregace částic. Budeme tedy schopni odhadnout distribuci velikostí částic a také schopnost částic transportovat se porézním prostředím.

# Reference

- J. Buffle, H. Van Leeuweh (Eds.): Environmental Particles, Lewis publishers, Vol. 2, pp. 353–360, New York, 1993. 111, 112, 113
- M. Černík: Použití nanočástic elementárního železa pro redukce kontaminantů in-situ. Habilitační práce, Fakulta mechatroniky a mezioborových inženýrských studií, Technická univerzita v Liberci, 2006. 112
- D. Pelikánová: Model agregace nanočástic. Diplomová práce, Technická univerzita v Liberci, 2008.

- 4. D. Rosická, J. Šembera: Mathematical model of aggregation of nanoscale particles with surface charge, submitted, 2009. 112
- M. Smoluchowski: Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen, Zeitschrift f. physik. Chemie, XCII, pp. 129–168, Krakow (1916). 112, 116
- Y. Tambour, J. H. Seinfeld: Sectional representations for simulating aerosol dynamics, Journal of Colloid and interface science, Vol. 76, Nº 2, pp. 541–556 (1980). 112
- B. Thomas, R. Camp: Velocity gradients and internal work in fluid motion, Journal of the Boston society of civil engineers, Vol. 30, № 4, pp. 219–237 (1943). 112



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

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

Lenka Rukavičková

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 včetně predikce případného transportu kontaminantů je součástí bezpečnostní analýzy úložišť. 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 detailní data z výzkumných lokalit melechovský masiv na Českomoravské vrchovině a Potůčky-Podlesí v Krušných horách a dále regionální data z hydrogeologické databáze Geofondu. Hydraulická vodivost se u granitů pohybuje v širokém rozpětí 8 řádů od  $10^{-12}$  po  $10^{-5}$  m  $\cdot$  s<sup>-1</sup>. Od spodních částí granitových těles se výrazně odděluje zóna připovrchového rozvolnění puklin s hydraulickou vodivostí v řádu  $10^{-8}$  m  $\cdot$  s<sup>-1</sup> a vyšší. Tato zóna sahá u většiny granitových těles do hloubky 100–120 m. 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.

# 1 Úvod

Horniny granitových masivů jsou pro svou stabilitu a relativní homogenitu považovány za vhodné prostředí pro situování skládek a úložišť různých typů odpadů včetně

L. Rukavičková (⊠)

Česká geologická služba, Geologická 6, 152 00 Praha 5, Česká republika

Tento výzkum byl realizován za podpory státních prostředků České republiky v rámci projektu VaV "Pokročilé sanační technologie a procesy" č. 1M0554 – program MŠMT "Výzkumná centra"

a v rámci projektu "Výzkum procesů pole vzdálených interakcí HÚ vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů" financovaném Správou úložišť radioaktivních odpadů.

e-mail: lenka.rukavickova@geology.cz

hlubinného úložiště vysoce aktivních odpadů (HÚ VAO). Podzemní voda je hlavním transportním médiem kontaminace z prostoru úložiště do biosféry. Jednou z nejdůležitějších bezpečnostních funkcí geosféry jako hostitelského prostředí proto jsou příznivé hydrogeologické podmínky, zejména nízká hydraulická vodivost (propustnost) hornin. Matematický model simulující proudění podzemních vod a transport kontaminantů při různých výpočtových scénářích je v současné době běžnou součástí projektové přípravy a bezpečnostních analýz úložišť, skládek i zásobníků energetických surovin. Vypovídací schopnost a kvalita simulace závisí na vstupních geologických datech. V rámci projektu Správy úložišť radioaktivních odpadů "Výzkum procesů pole vzdálených interakcí HÚ vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů" byla zhodnocena dostupná data o hydraulických vlastnostech puklinového prostředí granitů. Následně byly sestaveny expertní odhady hydraulických parametrů v různých hloubkových intervalech pro účely matematického modelování HÚ VAO v granitech Českého masivu [6]. Při hodnocení hydraulických vlastností jsme vycházeli ze tří základních datových zdrojů:

- a. z terénního měření ve vrtech na výzkumných lokalitách,
- b. z regionálních dat z databáze ČGS-Geofondu,
- c. ze zahraniční literatury.

# 2 Terénní měření ve vrtech na výzkumných lokalitách

Detailní data o hydraulických vlastnostech granitů a jejich rozložení v prostoru jsou v současné době pro území České republiky k dispozici pouze ze dvou výzkumných lokalit. Jedná se o melechovský masiv na Českomoravské vrchovině a Potůčky-Podlesí v Krušných horách. Na těchto lokalitách byly zkoumány celkem tři typy granitů do hloubky 200–350 m. Základem hydrogeologického výzkumu ve vrtech jsou hydrodynamické zkoušky (HZ). Při HZ sledujeme reakci na dynamický impuls (snížení, zvýšení hladiny) vyvolaný ve vrtu. Hydraulické vlastnosti hornin se v puklinovém prostředí mění na malé vzdálenosti i o několik řádů a průměrná hodnota hydraulické vodivosti pro celý vrt je použitelná jen pro regionální modely. HZ je proto nutné realizovat etážově, na úsecích vrtů izolovaných pomoci dvojice pakrů. Kompletní testovací soustava pro etážovou HZ (obr. 2.1) zahrnuje dvojici pakrů umístěných na testovacím soutyčí, tlakové snímače, čerpadla, automatický průtokový i objemový odečet spotřeb a datovou jednotku. K prostorové identifikaci preferenčních cest proudění podzemní vody slouží interferenční zkoušky mezi vrty. Při tomto typu HZ je zaznamenávána reakce na impuls v testovaném vrtu ve vrtech sousedních. Je možné sledovat tlakovou odezvu pomocí multipakrového systému nebo příchod stopovací látky například pomocí karotážního měření (geofyzikální měření ve vrtech). Multipakrový systém je sada pakrů izolujících od sebe hlavní propustné puklinové systémy a tlakových snímačů osazených v jednotlivých izolovaných úsecích.

Výsledkem specializovaného hydrogeologického výzkumu ve vrtech jsou například hloubkové profily hydraulické vodivosti v granitovém masivu, fyzikální vlastnosti neporušeného horninového prostředí i vodivých prvků (poruchové zóny, otevřené pukliny) a identifikace vodivých prvků v prostoru. K syntéze hydraulických vlastností granitů jsme použili data z vrtů testovaných v celém profilu se srovnatelnou délkou etáže (cca 6 m). Jednalo se o tři typy granitů – melechovský, lipnický a podleský. Pro tyto granity jsou dostupné profily hydraulické vodivosti do hloubky 200–300 m. Statistické zhodnocení dat z výzkumných lokalit ukázalo znatelný pokles hydraulické vodivosti



**Obrázek 2.1** Schéma testovací sestavy pro etážovou HZ (A); schéma interferenční HZ s multipakrovým systémem (B).

s hloubkou a vysokou heterogenitu prostředí zejména v intervalu 50–150 m pod terénem. Hydraulická vodivost se u granitů obecně pohybuje v širokém rozpětí 8 řádů od  $10^{-12}$  po  $10^{-5}$  m  $\cdot$  s<sup>-1</sup>. Od spodních částí granitových těles se výrazně odděluje zóna připovrchového rozvolnění puklin, v rámci které se hydraulická vodivost mění s hloubkou jen minimálně. Tato zóna s hydraulickou vodivostí v řádu  $10^{-8}$  m  $\cdot$  s<sup>-1</sup> a vyšší sahá u většiny granitových těles do hloubky 100–120 m, u granitu melechovského do hloubky 140–150 m. V hloubkách do 200 m převládá hydraulická vodivost v řádu  $10^{-9}$  m  $\cdot$  s<sup>-1</sup>, hlouběji pak v řádu  $10^{-10}$  m  $\cdot$  s<sup>-1</sup>. Hydraulická vodivost významných puklin a poruchových zón je obvykle o jeden až dva, výjimečně o tři řády vyšší ve srovnání s okolním horninovým prostředím.

# 3 Regionální data z databáze ČGS-Geofondu

Pro statistické zhodnocení hydraulických vlastností granitů v regionálním měřítku byl proveden výběr archivních hydrogeologických vrtů z databáze ČGS-Geofondu. Vybrány byly hydrogeologické vrty vyhloubené v oblastech s výskytem granitoidů, jejichž hloubka je vyšší než 30 metrů. Celkem bylo vybráno 380 objektů s daty z hydrodynamických zkoušek. Hloubkový dosah archivních vrtů je malý, 50 % z hodnocených vrtů dosahovalo hloubky do 50 m a jen 5 % vrtů bylo hlubších než 100 m. Databáze zahrnuje převážně data z čerpacích zkoušek prováděných za účelem ověření vydatnosti vodního zdroje. Výsledkem jsou často pouze hodnoty čerpaných množství vody při konkrétních sníženích hladiny podzemní vody v hydrogeologickém vrtu či studni. Pro získání srovnatelných hydraulických parametrů pro regionální vyhodnocení jsme použili výpočet koeficientu hydraulické vodivosti na základě přibližného (srovnávacího) logaritmického

parametru – indexu propustnosti (hydraulické vodivosti) Z. Způsob výpočtu z a následného přibližného stanovení koeficientu hydraulické vodivosti byl v různých verzích publikován Jetelem [2, 3]. Výsledné průměrné hodnoty koeficientu hydraulické vodivosti k spadají do řádu  $10^{-6} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  ( $\log_{10}(k)$  v rozmezí -5 až -6), u hlubších vrtů pak na hranici řádu  $10^{-7} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  (tab. 3.1). U jednotlivých vrtů se setkáváme s hodnotami k pohybujícím se v rozsahu 7 řádů od  $10^{-9}$  do  $10^{-4} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ . 80 % hodnot k spadá do řádu  $10^{-6}$  a  $10^{-7} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ .

**Tabulka 3.1** Statistická zhodnocení koeficientu hydraulické vodivosti  $k \text{ (m} \cdot \text{s}^{-1})$  na základě regionálních dat z hydrogeologické databáze Geofondu, hodnoty v log<sub>10</sub>(k).

	celá sada	$<50~{\rm m}$	$> 50 {\rm ~m}$
geometrický průměr	-5.81	-5.61	-6.02
medián	-5.78	-5.61	-5.91
maximum	-3.42	-3.42	-4.26
minimum	-8.54	-7.85	-8.54
směrodatná odchylka	0.73	0.66	0.74
rozptyl	0.53	0.44	0.55
počet vrtů	380	191	189

Součástí výzkumu bylo také hodnocení závislosti hydraulické vodivosti na dalších parametrech granitů jako je zrnitost granitu, textura granitu, typ granitoidu, morfologická pozice vrtu a regionální pozice. Členění atributů (vlastností) granitů bylo převzato z geodatabáze geologických map v měřítku 1:50000. Z výsledků hodnocení vyplývá, že hydraulická vodivost roste se zvětšující se velikostí zrn granitů, více propustné jsou tedy i porfyrické typy granitů. Vyšší hydraulickou vodivost mají křemenné varianty granitoidů, které jsou více náchylné ke křehkému porušení. Z regionálního hlediska nebyly zaznamenány výrazné rozdíly v hydraulické vodivosti mezi jednotlivými plutony. Vyšší hydraulickou vodivost mají durbachity třebíčského a jihlavského plutonu a naopak nižší hodnoty byly zaznamenány u železnohorského plutonu (obr. 3.1). Vliv morfologické pozice na hydraulické vlastnosti není u hodnocených granitů výrazný.

## 4 Zahraniční literatura

Jak už jsme uvedli výše, v současné době jsou pro Český masiv k dispozici data o hydraulických vlastnostech granitů pouze do hloubky 100 m u regionálního pokrytí a do hloubek 200–300 m na výzkumných lokalitách. Pokud chceme získat podklady například pro simulaci proudění podzemních vod v okolí hlubinného úložiště vysoce aktivních odpadů, v hloubkách stovek metrů, je nutné se zaměřit na studium zahraniční literatury. Řada dat o hydraulických vlastnostech granitů je publikována v odborných článcích a zejména v technických zprávách organizací zabývajících se problematikou hlubinného ukládání radioaktivních odpadů (např. SKB, AECL, Posiva aj.). Kvalita a rozsah dat v jednotlivých zdrojích je velmi různorodá. Práce zahrnují detailní data z jednoho konkrétního vrtu, často pouze v grafické formě, i statistické zhodnocení dat z několika desítek vrtů. Jindy se jedná o data z podzemní laboratoře nebo informace získané při hloubení tunelu. Měřítko měření (délka testovaných či hodnocených intervalů) se pohybuje od desítek centimetrů (testy na jednotlivých puklinách) po hloubkové intervaly s krokem několika set metrů. Liší se také metodika hydrodynamického testování. Publikované hodnoty hydraulických parametrů byly stanoveny nejčastěji na



**Obrázek 3.1** Histogramy hodnot koeficientu hydraulické vodivosti pro hlavní granitové plutony v Českém masivu.

základě vodních tlakových zkoušek, měření s různými typy průtokoměrů a čerpacích zkoušek. Data ze zahraničních lokalit proto nelze jednotně statisticky zpracovat, protože se v převážné většině jedná o neporovnatelné hodnoty. Poskytují ale cenný podklad pro odborný odhad rozsahu hydraulických parametrů granitů pro horninovou doménu i puklinové zóny v různých hloubkových úrovních.

# 5 Srovnání jednotlivých přístupů

Srovnáme-li výsledné průměrné hodnoty hydraulické vodivosti z terénních měření na výzkumných lokalitách a z regionálního hodnocení archivních dat je zřejmé, že je mezi nimi více než řádový rozdíl. Hodnoty z regionálního hodnocení jsou výrazně větší. Například pro hloubkový interval do 50 m je průměrná hodnota hydraulické vodivosti z etážových zkoušek  $7.1 \times 10^{-8} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  a výsledkem vyhodnocení dat z archivních vrtů je hodnota  $2.5 \times 10^{-6} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  (obr. 5.1, tab. 5.1). Rozdíl hodnot se blíží dvěma řádům.

Tento fakt je z velké části způsoben rozdílným měřítkem měření, tedy velikostí testovaného úseku horninového prostředí, který byl 30 m (průměrná hodnota) u archivních vrtů s hloubkou do 50 m a 6 m ve vrtech z výzkumných lokalit. Hydraulická vodivost roste se zvětšujícím se měřítkem měření, což je jev známý z literatury [1, 7]. Hydraulické testy regionálního měřítka realizované na otevřených vrtech s délkou testovaného úseku desítky až stovky metrů mají zpravidla delší dobu trvání (dny, desítky dnů) a zahrnují tak velký objem hornin. Je tedy větší pravděpodobnost, že zastihnou preferenční cesty proudění podzemních vod, jako jsou propojené tektonické zóny [5]. Řada autorů se věnovala grafickému znázornění závislosti hodnot hydraulické vodivosti na měřítku výzkumu a následnému odvození empirických vzorců. Pro granity Českého masivu není pro podobné hodnocení dostatek dat. Při hodnocení míry vlivu měřítka při zpracování našich datových souborů jsme využili vzorce Rhéna et al. [4], který na



**Obrázek 5.1** Četnost výskytu hodnot koeficientu hydraulické vodivosti v jednotlivých řádech: u vrtů s hloubkou do 50 m z databáze ČGS-Geofondu (A); z etážových HZ v intervalu 0–50 m na výzkumných lokalitách (B); červeně jsou vyznačeny průměrné hodnoty.

základě hodnot zjištěných v krystalických horninách v podzemní laboratoři Äspö ve Švédsku sestavil lineární vztah mezi průměrnou hydraulickou vodivostí a délkou testovaného intervalu:  $\log_{10}(K_{gu}) = \log_{10}(K_{gm}) + 0.782(\log_{10}(L_u) - \log_{10}(L_m))$ . Kde  $K_g$  je geometrický průměr hydraulické vodivosti  $[m \cdot s^{-1}]$ , L je měřítko délky [m] a indexy ma u jsou změřené, respektive přepočtené hodnoty. Vztah je platný pro délková měřítka v rozsahu 3–300 m (délky testovaných intervalů v Äspö). Dosadíme-li do uvedeného vztahu průměrnou hodnotu hydraulické vodivosti pro 6 m úseky na výzkumných lokalitách ( $7.1 \times 10^{-8} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ ) a přepočteme ji na měřítko 30 m tedy na průměrnou délku testovaného úseku v archivních vrtech, získáme hodnotu hydraulické vodivosti  $2.7 \times 10^{-7} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  (tab. 5.1). I po zahrnutí vlivu měřítka měření je rozdíl jednoho řádu mezi průměrnými hodnotami hydraulické vodivosti granitů získaných z regionálního hodnocení a hodnotami z detailního terénního měření. Tento rozdíl je podle našeho názoru způsoben:

- účelovým umístěním archivních hydrogeologických vrtů,
- rozdílnou metodikou testování a vyhodnocení dat.

Hydrogeologické vrty evidované v archivu ČGS-Geofondu jsou v naprosté většině vrty hloubené za účelem zásobování obyvatelstva podzemní vodou. Jsou tedy primárně situovány do míst s předpokládanou vyšší propustností hornin, tedy do míst, kde je možné předpokládat vyšší využitelnou vydatnost vrtu. V případě granitových masivů se jedná o místa s vyšší mírou tektonického porušení a místa přirozené drenáže podzemních vod. Pokud je vrt z vodárenského hlediska negativní, přítok podzemní vody do vrtu je velmi malý, vrt obvykle není dále hydraulicky testován. Data z hydrogeologických vrtů, které zastihly prostředí s nízkou hydraulickou vodivostí, tedy často v databázi ČGS-Geofondu chybí. Hydraulická vodivost určená na základě regionálních dat z Geofondu je nadhodnocená. Protože na těchto datech jsou založeny veškeré regionální studie a hydrogeologické mapy, je nutné při matematickém modelování i dalších navazujících aplikacích brát v úvahu, že reálné hodnoty hydraulické vodivosti mohou být až o řád nižší.

## 6 Závěr

V rámci přípravy vstupních geologických dat pro matematický model proudění podzemních vod v okolí HÚ VAO byla zpracována data z různých datových zdrojů. Vyhod**Tabulka 5.1** Srovnání průměrných hodnot koeficientu hydraulické vodivosti k  $[m \cdot s^{-1}]$  z regionálního hodnocení a z detailního terénního měření, přepočet měřítka podle Rhéna et al. [4].

	změřené hodnoty	přepočet měřítka
archivní vrty testované v celé délce $L=30~{\rm m}$	$2.5  imes 10^{-6}$	$2.7  imes 10^{-7}$
etážové testy na výzkumných lokalitách $L = 6$ m	$7.1  imes 10^{-8}$	

nocení přineslo cenné poznatky o hydraulických vlastnostech granitů v Českém masivu a jejich závislosti na vlastnostech hornin a jejich morfologické i regionální pozici. Hydrogeologický výzkum ve vrtech na výzkumných lokalitách poskytuje přesná, kvalitní data zahrnující informace o hydraulických vlastnostech vodivých prvků i neporušeného horninového prostředí a prostorovou identifikaci vodivých prvků. Jeho nevýhodou jsou vysoké finanční náklady a technická obtížnost. Výhodou archivních dat z databáze ČGS-Geofondu je regionální pokrytí zahrnující různé typy granitů a velký datový soubor. Nevýhodou je u těchto dat je zkreslení výsledků situováním do vodárensky perspektivních míst, nepřesnost dat, pouze průměrné hodnoty pro celý vrt a malý hloubkový dosah. Je třeba si uvědomit, že téměř všechny dostupné údaje o hydraulických vlastnostech granitů na území České republiky jsou z připovrchové zóny rozvolnění puklin (hloubky 100–200 m). Aplikace dat z větších hloubek ze zahraničních lokalit na Český masiv je velmi problematická, jedná se data z rozdílných regionálních a tektonických pozic lišící se metodikou testování, měřítkem měření i mírou detailu informace. Pro skutečně kvalitní stanovení hydraulických vlastností v hloubce úložiště je nezbytné vyhloubení vrtů do hloubky 800–1000 m a provedení komplexního hydrogeologického výzkumu v nich.

# Reference

- 1. C. Clauser: Permeability of crystalline rocks. EOS 73 (1992), pp. 233-238. 123
- J. Jetel: Určování hydraulických parametrů hornin hydrodynamickými zkouškami ve vrtech, Knihovna ÚÚG Praha 58, 1982. 122
- J. Jetel: Utilizing data on specific capacities of wells and water-injection rates in regional assessment of permeability and transmissivity, Slovak Geol. Magaz. 1 (1995), pp. 7–18. 122
- 4. I. Rhén, G. Gustafson, R. Stanfors, P. Wikberg: Äspö HRL–Geoscientific evaluation 1997/5. Models based on site characterization 1986–1995, SKB report № TR 97-06 Stockholm 1997. 123, 125
- 5. C. W. Rovey: Assessing flow systems in carbonate aquifers using scale effects in hydraulic conductivity, Environ. Geol. 24 (1994), pp. 244–253. 123
- 6. L. Rukavičková, T. Pačes, J. Holeček: Expertní odhad hydraulických a hydrochemických parametrů. Dílčí závěrečná zpráva projektu "Výzkum procesů pole vzdálených interakcí HÚ vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů", SÚRAO Praha, 2009. 120
- D. Schulze-Makuch, D. A. Carlson, D. S. Cherkauer, P. Malik: Scale Dependency of Hydraulic Conductivity in Heterogeneous Media, Ground Water 37/6 (1999), pp. 904–919. 123



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

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

Karel Segeth

Abstract Adaptive finite element methods belong to very important numerical procedures for solving ordinary as well as partial differential equations arising from various engineering applications. The analytical 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 as well as 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, two error estimation approaches to the stationary convection-diffusion-reaction equation, and error estimates for the stationary incompressible Navier-Stokes equations are considered. We compare the advantages and drawbacks of analytical and computational a posteriori error estimators concerned.

# 1 Introduction

On the way to efficient finite element computation, the principal means is automatic h-version, p-version, and, in particular, hp-version strategies of the method. The hp-methodology was first proposed in [12] and further developed in many publications, let us mention at least [6]. The adaptivity is guided by a robust error indicator and based

K. Segeth (⊠) Technical University of Liberec, Studentská 2, 461 17 Liberec 1, Czech Republic

e-mail: karel.segeth@tul.cz

This research was realized under the state subsidy of the Czech Republic within the research and development project "Advanced Remediation Technologies and Processes Center" 1M0554–Programme of Reserch Centers supported by Ministry of Education.

on automatic construction of a next optimal mesh through local mesh refinement and, moreover, also the increase of the approximating polynomial degree.

Computational mathematics has always been connected with some error estimation procedures. The reason is that not only the approximate result is of importance, but also the error of this computed result, i.e. some norm of the difference between the exact and approximate solution. Naturally, we can get only some estimates of the error. First results consisted in a priori error estimates usually containing some unknown constants depending on the properties of the unknown exact solution of the problem or its data.

Obtaining efficient and computable a posteriori error estimates is not easy. Analytical ones need not be the most reliable. Moreover, the local nature of the estimates is preferred as it provides for the local mesh refinement or local approximating polynomial degree increase that result in minimum time requirements of the computation.

The *effectivity index* of an a posteriori error estimator is the ratio of some norm of the error estimate and the exact error. Often the effectivity index tends to 1 as the discretization parameter goes to zero (or the degree of the approximating polynomial grows, or both). This means that the error estimate is reliable in the *asymptotic* sense but the behavior of the estimate in the preasymptotic range of the error is naturally much more important for practical computation.

Recently, a posteriori error estimates are often based on reference solutions, i.e. very accurate approximations of the exact solution on coarse grids based, e.g., on sophisticated postprocessing techniques or obtained in some other "inexpensive" way. We are going to mention also goal-oriented adaptive finite element methods in conclusion.

A posteriori error estimation techniques are applied to many differential problems of numerical analysis. Let us mention a linear second order elliptic equation, quasilinear second order elliptic equation, incompressible Navier-Stokes equations, equations of linearized elasticity, biharmonic equation, convection-diffusion-reaction equation, or nonlinear parabolic equation. We are concerned only with some classes of rather simple differential problems in this contribution. We pay most attention to linear second order elliptic equations. Using the results published, we are interested in comparison of advantages and drawbacks of classical a posteriori error estimates and computational ones.

Nevertheless, the scope of a posteriori error estimates is much wider. It also comprises estimates for nonlinear hyperbolic conservation laws, further fluid dynamics models, Maxwell equations, a wide variety of civil engineering problems (not only elasticity ones), discontinuous coefficient problems, and, in particular, coupled problems. Time dependent models and discontinuous finite elements are of particular importance, too.

There are several classes of local a posteriori error estimators based on different approaches and their names slightly vary in the literature. Let us name residual estimators: explicit, implicit (based on the solution of local problems), and hierarchic (multilevel) estimators, further also recovery based estimators (based on the averaging of gradient), and some other. A weighted (complementary) energy norm global a posteriori estimator is presented in Sect. 3.1.

We show several error estimation procedures for some particular both simple and more complicated partial differential problems. Some error estimators for the second order Poisson equation with Dirichlet and Neumann boundary conditions, two error estimation approaches to the stationary convection-diffusion-reaction equation, and error estimates for the stationary incompressible Navier-Stokes equations are considered in the paper. We mention also the hp-finite element method and show the algorithm of obtaining the reference solution. We compare the advantages and drawbacks of analytical and computational a posteriori error estimators concerned.

#### 2 Poisson equation

Let us consider the Poisson equation with Dirichlet and Neumann boundary conditions

$$-\bigtriangleup u = f \quad \text{in} \quad \varOmega \,, \tag{2.1}$$

where  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  is a connected bounded polygonal domain with boundary  $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ ,  $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$ , with the boundary conditions

$$u = 0 \quad \text{on} \quad \Gamma_D \,, \tag{2.2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial n} = g \quad \text{on} \quad \Gamma_N \,.$$
 (2.3)

We assume that  $\Gamma_D$  is closed relatively to  $\Gamma$  and has a positive length, and that f and g are square integrable functions on  $\Omega$  and  $\Gamma_N$ , respectively.

The equation (2.1) can be considered in a more general form

$$-\nabla(a\nabla u) + bu = f \quad \text{in} \quad \Omega \,,$$

where a is a positive scalar function or a positive definite matrix and b a nonnegative function.

To continue, we set

$$X = \{ \varphi \mid \varphi \in H^1(\Omega), \ \varphi = 0 \text{ on } \Gamma_D \}$$

The weak solution  $u \in X$  of the above second order problem is defined by the identity

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v = \int_{\Omega} fv + \int_{\Gamma_N} gv \tag{2.4}$$

to be satisfied by all test functions  $v \in X$ . It is well-known that the problem (2.4) has a unique solution (see, e.g., [5]).

Let  $\mathcal{T}_h, h > 0$ , be a family of regular triangulations of the domain  $\Omega$  (see, e.g., [1, 4]).

Now, denote by  $X_h$  the space of all continuous piecewise linear finite element functions corresponding to  $\mathcal{T}_h$  and vanishing on  $\Gamma_D$ . We then look for the *approximate finite element solution*  $u_h \in X_h$  such that it satisfies the identity

$$\int_{\Omega} \nabla u_h \cdot \nabla v_h = \int_{\Omega} f v_h + \int_{\Gamma_N} g v_h , \qquad v_h \in X_h , \qquad (2.5)$$

corresponding to the identity (2.4). It is well-known that the problem (2.5) has a unique solution (see, e.g., [5]).

**Remark 2.1** For the sake of simplicity, we restrict ourselves in this section to linear finite elements. The results, however, could be generalized to higher order finite elements. Moreover, we assume that all the integrals in the equations (2.4) and (2.5) are evaluated exactly.

The standard notation C(S) is used for the space of all functions continuous on the set S. We denote by  $h_T$  the diameter of the triangle  $T \in \mathcal{T}_h$  and by  $\mathcal{E}(T)$  the set of all its edges. We further put  $\mathcal{E}_h = \bigcup_{T \in \mathcal{T}_h} \mathcal{E}(T)$  and denote by  $h_E$  the length of the edge  $E \in \mathcal{E}_h$ . We further put  $\rho_T$  equal to the diameter of the largest ball inscribed into T. Finally, we split  $\mathcal{E}_h$  in the form

$$\mathcal{E}_h = \mathcal{E}_{h,\Omega} \cup \mathcal{E}_{h,D} \cup \mathcal{E}_{h,N}$$

with

$$\mathcal{E}_{h,\Omega} = \{ E \in \mathcal{E}_h \mid E \subset \Omega \},\$$
$$\mathcal{E}_{h,D} = \{ E \in \mathcal{E}_h \mid E \subset \Gamma_D \},\qquad \mathcal{E}_{h,N} = \{ E \in \mathcal{E}_h \mid E \subset \Gamma_N \}.$$

For  $T \in \mathcal{T}_h$ ,  $E \in \mathcal{E}_h$  we define

$$\omega_T = \bigcup_{\mathcal{E}(T) \cap \mathcal{E}(T') \neq \emptyset} T', \qquad \omega_E = \bigcup_{E \in \mathcal{E}(T')} T'.$$

The integral average of f over a triangle T is denoted by  $f_T$  and the average of g over an edge E by  $g_E$ . The norms  $\|\cdot\|_{0;T}$  and  $\|\cdot\|_{0;E}$  are the  $L_2$ -norms restricted to T or E, etc.

We show, as examples, only two estimators from the above mentioned classes.

#### 2.1 Explicit residual error estimator

Let u and  $u_h$  be the solutions of the problems (2.4) and (2.5). They satisfy the identity

$$\int_{\Omega} \nabla (u - u_h) \cdot \nabla v = \int_{\Omega} fv + \int_{\Gamma_N} gv + \int_{\Omega} \nabla u_h \cdot \nabla v \tag{2.6}$$

for all  $v \in X$  [1]. The right-hand part of the equation (2.6) implicitly defines the *residual* of  $u_h$  as an element of the space dual to X.

With every edge  $E \in \mathcal{E}_h$  we associate a unit vector  $n_E$  such that  $n_E$  is orthogonal to E and equals the unit outer normal to  $\Gamma$  if  $E \subset \Gamma$ . Given any  $E \in \mathcal{E}_{h,\Omega}$  and any  $\psi \in L_2(\omega_E)$  with  $\psi|_{T'} \in C(T')$  for all  $T' \subset \omega_E$ , we denote by  $[\psi]_E$  the jump of  $\psi$ across E in the direction  $n_E$ ,

$$[\psi]_E(x) = \lim_{t \to 0+} \psi(x + tn_E) - \lim_{t \to 0+} \psi(x - tn_E) \quad \text{ for all } \quad x \in E \,.$$

We introduce the *explicit residual a posteriori error estimator*  $\eta_{\mathbf{R},T}$  on the triangle T by

$$\eta_{\mathrm{R},T} = \left(h_T^2 \|f_T\|_{0;T}^2 + \frac{1}{2} \sum_{E \in \mathcal{E}(T) \cap \mathcal{E}_{h,\Omega}} h_E \|[n_E \cdot \nabla u_h]_E\|_{0;E}^2 + \sum_{E \in \mathcal{E}(T) \cap \mathcal{E}_{h,N}} h_E \|g_E - n_E \cdot \nabla u_h\|_{0;E}^2\right)^{1/2}$$

and present its properties proven in [21].

**Remark 2.2** Notice that the error estimator  $\eta_{\mathbf{R},T}$  consists of three parts. The first one is connected with the residual of the "strong" solution and the rest is formed by "boundary terms". The second part of the estimator expresses the fact that  $u_h \notin H^2(\Omega)$ , i.e., that  $\nabla u_h$  may have jumps across triangle edges. The last part expresses that  $u_h$  may not satisfy the Neumann boundary condition exactly.

Further error estimators we present in what follows are often similar in their nature.

**Theorem 2.1** Let u and  $u_h$  be solutions of the problems (2.4) and (2.5). Then there are positive constants  $\underline{c}_R$ ,  $\overline{c}_R$  that depend only on the smallest angle in the triangulation such that the estimates

$$\|u - u_h\|_1 \le \overline{c}_{\mathrm{R}} \left( \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \eta_{\mathrm{R},T}^2 + \sum_{T \in \mathcal{T}_h} h_T^2 \|f - f_T\|_{0;T}^2 + \sum_{E \in \mathcal{E}_{h,N}} h_E \|g - g_E\|_{0;E}^2 \right)^{1/2}$$

and

$$\begin{aligned} \eta_{\mathrm{R},T} &\leq \underline{c}_{\mathrm{R}} \left( \|u - u_{h}\|_{1;\omega_{T}}^{2} \\ &+ \sum_{T' \subset \omega_{T}} h_{T'}^{2} \|f - f_{T'}\|_{0;T'}^{2} + \sum_{E \in \mathcal{E}(T) \cap \mathcal{E}_{h,N}} h_{E} \|g - g_{E}\|_{0;E}^{2} \right)^{1/2} \end{aligned}$$

hold for all  $T \in \mathcal{T}_h$ .

For proof, see, e.g., [21].

**Remark 2.3** Notice that the error estimator  $\eta_{\mathrm{R},T}$  really provides, like many other estimators, a two-sided estimate of the error and that its nature is local. The constants  $\underline{c}_{\mathrm{R}}$ ,  $\overline{c}_{\mathrm{R}}$  cannot be calculated, in general. Their values depend, e.g., on constants characterizing interpolation properties of piecewise polynomials etc.

The error estimator  $\eta_{R,T}$  was first proposed and analyzed for the problem (2.1), (2.2), (2.3) in one dimension by Babuška and Rheinboldt in [2, 3]. It was generalized to mixed finite element approximations of the Stokes and Navier-Stokes equations in [19, 20].

The results of Theorem 2.1 carry over to higher order finite element discretizations. The modifications necessary are described in [21] Remark 3.9.

# 2.2 Hierarchic basis error estimator

Let the finite element space  $W_h$  corresponds to  $\mathcal{T}_h, X_h \subset W_h \subset X$ . Define the function  $\varphi_E \in W_h \cap C(\omega_E)$  on each edge  $E \in \mathcal{E}_{h,\Omega} \cup \mathcal{E}_{h,N}$ , where  $\omega_E = \bigcup_{E \in \mathcal{E}(T')} T'$ ,

$$0 \leq \varphi_E \leq 1, \qquad \varPhi_1 h_E \leq \int_E \varphi_E, \qquad \|\varphi_E\|_{1;\omega_E} \leq \varPhi_2 h_E^{-1} \|\varphi_E\|_{0;\omega_E}$$

with some positive constants  $\Phi_1$  and  $\Phi_2$ .

We introduce the *hierarchic basis error estimator* (residual of  $u_h$ ) with respect to  $\varphi_E$ ,  $E \in \mathcal{E}_{h,\Omega} \cup \mathcal{E}_{h,N}$  [21] by

$$\eta_{\mathrm{H},E} = r_E = \int_{\varOmega} f \varphi_E + \int_{\varGamma_N} g \varphi_E + \int_{\varOmega} \nabla u_h \cdot \nabla \varphi_E \,.$$

**Remark 2.4** The hierarchic basis error estimators bound the error  $u - u_h$  by evaluating the residual of  $u_h$  with respect to certain basis functions of another finite element space  $W_h$  that either consists of higher order polynomials or corresponds to a refinement of  $\mathcal{T}_h$ .

**Theorem 2.2** Let u and  $u_h$  be the solutions of the problems (2.4), (2.5), respectively. Then there are positive constants  $\underline{c}_{\mathrm{H}}$ ,  $\overline{c}_{\mathrm{H}}$  such that for all  $E \in \mathcal{E}_{h,\Omega} \cup \mathcal{E}_{h,N}$  the following estimates hold.

$$\|u - u_h\|_1 \le \overline{c}_{\mathrm{H}} \left( \sum_{E \in \mathcal{E}_{h,\Omega} \cup \mathcal{E}_{h,N}} \eta_{\mathrm{H},E}^2 + \sum_{T \in \mathcal{T}_h} h_T^2 \|f\|_{0;T}^2 + \sum_{E \in \mathcal{E}_{h,N}} h_E \|g - g_E\|_{0;E}^2 \right)^{1/2},$$
$$|\eta_{\mathrm{H},E}| \le \underline{c}_{\mathrm{H}} \|u - u_h\|_{1;\omega_E}.$$

For proof, see, e.g., [21].

**Remark 2.5** An estimate similar to that of Theorem 2.2 can be obtained also for the hierarchic basis error estimator  $\eta_{H,T}$  defined on the individual triangles [21].

**Remark 2.6** Notice that the inequalities of Theorem 2.2 provide a two-sided estimate of the error. The exact values of the constants  $\underline{c}_{\rm H}$ ,  $\overline{c}_{\rm H}$  are not known. They, in general, depend on the constants  $\Phi_1$  and  $\Phi_2$  unknown in practice. Nevertheless, there exist error estimates for the problem (2.1) to (2.3) free or almost free of unknown constants (see, e.g., [18]).

#### 3 Stationary convection-diffusion-reaction equation

3.1 Weighted energy norm global error estimation

We consider the stationary convection-diffusion-reaction problem [8]

$$-\varepsilon \Delta u + b \cdot \nabla u + ru = f \quad \text{in} \quad \Omega,$$
$$u = 0 \quad \text{on} \quad \Gamma, \qquad (3.1)$$

where u is a scalar function to be found,  $\varepsilon$  a positive constant diffusion coefficient,  $b \in [W^{1,\infty}(\Omega)]^n$  a velocity vector field,  $r \in L_{\infty}(\Omega)$  a reaction rate, f a source term. Further,  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ,  $n \ge 1$ , is a bounded domain with Lipschitz continuous boundary  $\Gamma$ . We introduce a bilinear form a and a functional F,

$$\begin{split} a(v,w) &= \int_{\Omega} \varepsilon \nabla v \cdot \nabla w + \int_{\Omega} b \cdot \nabla v w + \int_{\Omega} r v w \,, \qquad F(w) = \int_{\Omega} f w \,, \\ v,w \in H_0^1(\Omega) \,, \end{split}$$

and say that the function  $u \in H^1_0(\Omega)$  is the *weak solution* of the problem if the identity

$$a(u,w) = F(w)$$

is satisfied for all test functions  $w \in H_0^1(\Omega)$ . The weak solution exists and is unique if the condition

$$\widetilde{r}(x) = r(x) - \frac{1}{2}\nabla b(x) \ge 0$$

holds almost everywhere in  $\Omega$ .

Any function  $\bar{u} \in H_0^1(\Omega)$  can be considered to be the *approximate solution* (the way it has been computed or guessed is not of interest). Let us denote the error of the approximate solution by  $e = u - \bar{u}$  and introduce the global weighted energy norm

$$|||w|||_{\lambda,\mu}^2 = \lambda \int_{\varOmega} |\nabla w|^2 + \mu \int_{\varOmega} \tilde{r} w^2 \,, \qquad w \in H^1_0(\varOmega) \,,$$

where  $\lambda$  and  $\mu$  are nonnegative numbers, and  $|\cdot|$  the Euclidean norm of vector. Notice that, in particular,  $a(e, e) = |||e|||_{\varepsilon,1}^2$ .

We define the global error estimator

$$\begin{split} \eta_{\alpha,\beta}(\gamma, y, v, \bar{u}) &= \frac{1}{2\alpha} \Bigg( (1+\gamma) \|y - \varepsilon \nabla \bar{u} + \varepsilon \nabla v\|_0^2 \\ &+ \left( 1 + \frac{1}{\gamma} \right) C_{\Omega}^2 \|f - b \cdot \nabla \bar{u} - r\bar{u} + \nabla y - rv - b \cdot \nabla v\|_0^2 \Bigg) \\ &+ \int_{\Omega} (\varepsilon \nabla v \cdot \nabla \bar{u} + (b \cdot \nabla \bar{u})v + rv\bar{u} - fv) + \beta \|v \sqrt{\tilde{r}}\|_0^2, \end{split}$$

where  $\alpha, \beta$ , and  $\gamma$  are arbitrary positive numbers,  $y \in H(\text{div}, \Omega)$  is an arbitrary vectorvalued function,  $v, \bar{u} \in H_0^1(\Omega)$  are arbitrary functions, and  $C_{\Omega}$  is the constant from the Friedrichs-Poincaré inequality

$$\|w\|_0 \le C_\Omega \|\nabla w\|_0$$

valid for all functions  $w \in H_0^1(\Omega)$  [8].

**Theorem 3.1** Let  $\alpha$  and  $\beta$  be fixed real numbers such that  $2\varepsilon \geq \alpha > 0, \beta \geq 1$ . Then

$$|||e|||_{\lambda,\mu} \le \eta_{\alpha,\beta}(\gamma, y, v, \bar{u}), \qquad (3.2)$$

where  $\lambda = \varepsilon - \frac{1}{2}\alpha$ ,  $\mu = 1 - 1/\beta$ , and  $\gamma$ , y and v are arbitrary quantities.

For proof, see [8].

**Remark 3.1** The estimate (3.2) can be optimized if we choose proper parameters  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , y, and v. For example, putting

$$y = \varepsilon \nabla u$$
,  $v = u - \bar{u}$ 

yields

$$|||e|||_{\nu,\rho}^2 \le \eta_{\alpha,\beta}(\gamma,\varepsilon\nabla u, u-\bar{u},\bar{u}) \le |||e|||_{\sigma,\tau}^2,$$

where  $\nu = \varepsilon - \frac{1}{2}\alpha$ ,  $\rho = 1 - 1/\beta$ ,  $\sigma = 2(1 + \gamma)\varepsilon^2/\alpha - \varepsilon$ , and  $\tau = \beta - 1$ .

**Remark 3.2** There is a realiable estimate for the constant  $C_{\Omega}$  [9],

$$C_{\Omega} \le \left(\pi \sqrt{\frac{1}{a_1^2} + \dots + \frac{1}{a_n^2}}\right)^{-1},$$

if the domain  $\Omega$  is enclosed in a rectangular box of dimensions  $a_1, \ldots, a_n$ .

# 3.2 Centered mixed finite element error estimation

Let us pose the problem (3.1) in a slightly different formulation [22],

$$-\nabla(S\nabla u) + \nabla(ub) + ru = f \quad \text{in} \quad \Omega,$$
  
$$u = 0 \quad \text{on} \quad \Gamma, \qquad (3.3)$$

where u is a scalar function to be found, S an inhomogeneous anisotropic diffusiondispersion tensor (a nonconstant full matrix), b a dominating velocity vector field, ra reaction rate, f a source term,  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ , n = 2, 3, a polygonal (polyhedral) domain, and  $\Gamma$  its boundary.

First, a basic triangulation  $\tilde{\mathcal{T}}_h$  of  $\Omega$  such that the data of the problem (3.3) is smooth enough on  $\tilde{\mathcal{T}}_h$  is introduced in [22]. In particular, we assume that r is piecewise constant on  $\tilde{\mathcal{T}}_h$ , b is piecewise linear, and f is piecewise polynomial there. Let us also assume that  $S|_T$  is a constant, symmetric, and uniformly positive definite tensor such that

$$c_{S,T}v \cdot v \le S|_T v \cdot v \le C_{S,T}v \cdot v$$

holds for all  $v \in \mathbb{R}^n$  and all  $T \in \widetilde{\mathcal{T}}_h$ , where  $c_{S,T}$  and  $C_{S,T}$  are positive constants.

Further assumptions on the data are stated in [22]. We construct all triangulations  $\mathcal{T}_h$  as refinements of  $\widetilde{\mathcal{T}}_h$ .

We put

$$c_T = \frac{1}{2}\nabla b|_T + r|_T$$

for all  $T \in \widetilde{\mathcal{T}}_h$  since  $\nabla b$  as well as r are constant on each  $T \in \mathcal{T}_h$ . Therefore,  $c_T$  is a constant on any grid element (but may depend on b and r).

Let  $T \in \mathcal{T}_h$  and  $\varphi \in H^1(T)$ . We then assume the Poincaré inequality in the form

$$\left\|\varphi - \varphi_T\right\|_{0;T}^2 \le C_{\mathrm{P},n} h_T^2 \left\|\nabla\varphi\right\|_{0;T}^2,$$

where  $\varphi_T$  is the mean of  $\varphi$  over T. For a simplex T, it has been shown that  $C_{P,n} = n/\pi$ , see [11].

Now the weak solution u and, with the help of the centered mixed finite element scheme, also the approximate solution  $\bar{u}$  and the averaged approximate solution  $\tilde{u}$  are defined in [22].

For  $T \in \mathcal{T}_h$  we introduce the quantity  $m_T$ ,

$$m_T^2 = \min\{C_{\mathrm{P},n}h_T^2/c_{S,T}, 1/c_T\}.$$

Then we can define [22] the residual a posteriori error estimator

$$\eta_{\mathrm{M},T} = m_T \| f + \nabla (S \nabla \widetilde{u}_h) - \nabla (\widetilde{u}_h b) - r \widetilde{u}_h \|_{0;T}.$$

Further, putting  $v_h$  equal to the difference of  $\tilde{u}_h$  and the modified Oswald interpolation of  $\tilde{u}_h$  [22], we introduce the nonconformity a posteriori error estimator  $\eta_{\text{NC},T}$  by

$$\eta_{\mathrm{NC},T}^2 = \int_T S \nabla v_h \cdot \nabla v_h + c_T \|v_h\|_{0,T}^2$$

and the convection a posteriori error estimator

$$\eta_{\mathrm{C},T} = \min\left\{\frac{\|\nabla(v_h b) - \frac{1}{2}v_h \nabla b\|_{0;T}}{\sqrt{c_T}}, \left(\frac{C_{\mathrm{P},n}h_T^2 \|\nabla v_h \cdot b\|_{0;T}^2}{c_{S,T}} + \frac{9\|v_h \nabla b\|_{0;T}^2}{4c_T}\right)^{1/2}\right\}.$$

The following theorem then holds.

**Theorem 3.2** Let u be the weak solution of the problem (3.3) and let  $\tilde{u}$  be the postprocessed solution of the centered mixed finite element scheme. Then

$$\left(\sum_{T\in\mathcal{T}_{h}}\int_{T}S\nabla(u-\tilde{u})\cdot\nabla(u-\tilde{u})+c_{T}\|u-\tilde{u}\|_{0,T}^{2}\right)^{1/2}$$
$$\leq \left(\sum_{T\in\mathcal{T}_{h}}\eta_{\mathrm{NC},T}^{2}\right)^{1/2}+\left(\sum_{T\in\mathcal{T}_{h}}(\eta_{\mathrm{M},T}+\eta_{\mathrm{C},T})^{2}\right)^{1/2}.$$

For proof, see [22].

# 4 Stationary incompressible Navier-Stokes equations

Consider the elliptic system of stationary incompressible Navier-Stokes equations [21]

$$-\nu \Delta u + (u \cdot \nabla)u + \nabla p = f \quad \text{in} \quad \Omega \subset \mathbb{R}^n,$$
  

$$\nabla u = 0 \quad \text{in} \quad \Omega,$$
  

$$u = 0 \quad \text{on} \quad \Gamma,$$
(4.1)

where u and f are vector-valued functions, u is the velocity, p the pressure, and  $\nu > 0$  the constant viscosity of the fluid.

We put

$$M = \left\{ u \in \left[H^{1}(\Omega)\right]^{n} \mid u = 0 \text{ on } \Gamma \right\}, \qquad Q = \left\{ p \in L_{2}(\Omega) \mid \int_{\Omega} p = 0 \right\}$$

and define

$$X = Y = M \times Q,$$
  
$$\|\cdot, :\|_X = \|\cdot, :\|_Y = \left(\|\cdot\|_1^2 + \|\cdot\|_0^2\right)^{1/2},$$
  
$$\langle F([u, p]), [v, q] \rangle = \nu \int_{\Omega} \nabla u \nabla v + \int_{\Omega} (u \cdot \nabla) u \cdot v - \int_{\Omega} p \nabla v + \int_{\Omega} q \nabla u - \int_{\Omega} f \cdot v + \int_{\Omega}$$

where [u, p] and [v, q] are (n + 1)-component vector-valued functions. We then say that  $[u, p] \in X$  is the weak solution of the problem (4.1) if the identity

$$\langle F([u,p]), [v,q] \rangle = 0$$

is satisfied for all test functions  $[v, q] \in Y$ .

Let  $M_h \subset M$  and  $Q_h \subset Q$  be two finite element spaces corresponding to the triangulation  $\mathcal{T}_h$  consisting of affine equivalent elements in the sense of [5]. Let us put

$$X_{h} = Y_{h} = M_{h} \times Q_{h} ,$$

$$\langle F_{h}([u_{h}, p_{h}]), [v_{h}, q_{h}] \rangle = \langle F([u_{h}, p_{h}]), [v_{h}, q_{h}] \rangle$$

$$+ \delta \sum_{T \in \mathcal{T}_{h}} h_{T}^{2} \int_{T} (-\nu \Delta u_{h} + (u_{h} \cdot \nabla)u_{h} + \nabla p_{h} - f) \cdot ((u_{h} \cdot \nabla)v_{h} + \nabla q_{h})$$

$$+ \delta \sum_{E \in \mathcal{E}_{h,\Omega}} h_{E} \int_{E} [p_{h}]_{E} [q_{h}]_{E} + \alpha \delta \int_{\Omega} \nabla u_{h} \nabla v_{h} , \qquad (4.2)$$

where  $\alpha \geq 0$  and  $\delta \geq 0$  are stability parameters. If  $\alpha > 0$  and  $\delta > 0$  the above discretization is capable of stabilizing both the influence of the convection term and the divergence constraint without any conditions on the spaces  $M_h$  and  $Q_h$ , or the Péclet number  $h_T/\nu$  [16]. The case  $\alpha = \delta = 0$  corresponds to the standard mixed finite element discretization of the problem (4.1).

We say that  $[u_h, p_h] \in X_h$  is the approximate solution of the problem (4.1) if the identity

$$\langle F_h([u_h, p_h]), [v_h, q_h] \rangle = 0$$

holds for all  $[v_h, q_h] \in Y_h$ , where  $F_h$  is given by the equation (4.2).

Let us introduce the error estimator [21]

$$\eta_{T} = \left(h_{T}^{2} \| -\nu \bigtriangleup u_{h} + (u_{h} \cdot \nabla)u_{h} + \nabla p_{h} - \pi_{0,T}f \|_{0,T}^{2} + \sum_{E \in \mathcal{E}(T) \cap \mathcal{E}_{h,\Omega}} h_{E} \| [(\nabla u_{h})\nu n_{E} - p_{h}n_{E}]_{E} \|_{0,E}^{2} + \|\nabla u_{h}\|_{0,T}^{2} \right)^{1/2}, \quad (4.3)$$

where  $\Pi_k, k \ge 0$ , is the space of polynomials of degree at most k and  $\pi_{k,S}, S \in \mathcal{T}_h \cup \mathcal{E}_h$ , is the  $L_2$  projection of  $L_1(S)$  onto  $\Pi_{k|S}$ .

**Theorem 4.1** Let [u, p] be a regular weak solution of the problem (4.1), see [21], and let  $[u_h, p_h] \in X_h$  be its approximate solution. Then the following a posteriori estimates

hold.

$$(\|u - u_h\|_1^2 \|p - p_h\|_0^2)^{1/2} \le C_1 (1 + (1 + \alpha)\delta(1 + \|u_h\|_1)) \left(\sum_{T \in \mathcal{T}_h} \eta_T^2\right)^{1/2} + C_2 \left(\sum_{T \in \mathcal{T}_h} h_T^2 \|f - \pi_{0,T}f\|_{0;T}^2\right)^{1/2}, \eta_T \le C_3 (\|u - u_h\|_{1;\omega_T}^2 + \|p - p_h\|_{0;\omega_T}^2)^{1/2} + C_4 \left(\sum_{T' \subset \omega_T} h_{T'}^2 \|f - \pi_{0,T'}f\|_{0;T'}^2\right)^{1/2},$$

where  $\eta_T$  is given by (4.3) and the positive constants  $C_1, \ldots, C_4$  depend only on the polynomial degrees of the spaces  $M_h$  and  $Q_h$ , and on the ratio  $h_T/\rho_T$ .

For proof, see, e.g., [21].

**Remark 4.1** Theorem 4.1 can be extended to the case of the slip boundary condition as well as to non-Newtonian fluids [21].

#### 5 Adaptivity and related problems

Usually, the aim of adaptive computation is to minimize the energy norm of error of the approximate solution. The general experience shows that, among various adaptive strategies for finite elements, the best results can be achieved by the goal-oriented hp-adaptivity. Goal-oriented adaptivity is based on adaptation of the finite element mesh with the aim of improving the resolution of a specific quantity of interest (instead of minimizing the error of the approximation in some global norm). The quantities may be various functionals, say the integral average of the scalar solution in a selected subdomain  $\Omega_s \subset \Omega$ , integral average of a selected solution component in a subdomain  $\Omega_s \subset \Omega$ , or flux of the solution through the boundary of a subdomain  $\Omega_s \subset \Omega$ .

Let  $\mathcal{T}_{h,p}$  be a mesh characterized by maximum mesh size h and maximum piecewise polynomial degree p. The automatic hp-adaptivity can be shown in the following flowchart. Its aim is to provide an efficient computational error estimate or reference solution.

- a. Put k := 0 and consider an initial mesh  $\mathcal{T}_{\text{coarse}}^k = \mathcal{T}_{h,p}^k$ . b. Compute approximation  $u_{\text{coarse}}^k = u_{h,p}$  on the current mesh  $\mathcal{T}_{\text{coarse}}^k$ . c. Construct a uniformly refined mesh  $\mathcal{T}_{\text{fine}}^k = \mathcal{T}_{h/2,p+1}^k$ .
- d. Compute approximation  $u_{\text{fine}}^k = u_{h/2,p+1}$  on the fine mesh  $\mathcal{T}_{\text{fine}}^k$  and put  $u_{\text{ref}} = u_{\text{fine}}^k$ . (Two-grid method can be used.)
- e. Replace the exact solution u by the reference solution  $u_{\rm ref}$ .
- f. If the approximate discretization error lies within a given tolerance, stop.
- g. Minimize elementwise contributions to the error. (Determine elements of  $\mathcal{T}^k_{\text{coarse}}$ to be refined. Determine the way of refinement (h, p, or hp) individually using projection-based interpolation error [15]. Refine the elements chosen.)

- h. In this way, construct the new coarse mesh  $\mathcal{T}^{k+1}_{\text{coarse}} = \mathcal{T}^{k+1}_{h,p}$ .
- i. Put k := k + 1 and continue on the second row above marked by letter b.

Automatic hp-adaptivity belongs to the most advanced topics in the higher-order finite element technology and it is subject to active research. We refer to, e.g., [6, 7, 13, 15] and references therein.

# 6 Conclusion

We have met, in the individual sections of the paper, several analytical a posteriori error estimators whose quality and applicability are measured by inequalities, usually with some unknown constants or functions on the right-hand part. The estimators are computable from the approximate solution only and their computation is usually fast, but their quantitative properties cannot be easily assessed. We then are in a position similar to that with a priori estimators. We get a single number on each triangle to control the strategy of further computation. The use of a posteriori estimators mentioned can fit the h-adaptivity process. Moreover, most error estimators are constructed only for the lowest-order polynomial approximation.

We mentioned in the introduction that the best situation occurs if the estimator is asymptotically exact. However, the asymptotic exactness of estimator may be of little practical advantage. Fortunately enough, many asymptotically exact estimators behave on many classes of problems very properly: they give sharp estimates not only in the limit as  $h \rightarrow 0$ , but for particular finite h, too.

The automatic hp-adaptivity gives many h as well p possibilities for the next step of the solution process [6, 13]. A single number provided by the analytical a posteriori error estimator for each mesh element may not be enough information for the decision. This is the reason for using computational error estimates (reference solutions). Reference solutions provide more complex information on the behavior of the error. The computation of such a reference solution is undoubtedly time-consuming. We use reference solutions as means for obtaining universal and robust error estimators to guide the adaptive strategies.

Reference solutions have been a standard tool for adaptive computation in solving ODE's for many years. They are also often used in constructing multilevel solution procedures, e.g., in the multigrid method.

There are many other problems equipped with analytical a posteriori error estimators, see, e.g., [10, 14, 17, 22].

#### References

- M. Ainsworth, J. T. Oden: A Posteriori Error Estimation in Finite Element Analysis. John Wiley & Sons, New York, 2000. 128, 129
- I. Babuška, W. C. Rheinboldt: A posteriori error estimates for the finite element method. Internat. J. Numer. Methods Engrg. 12 (1978), pp. 1597–1615. 130
- I. Babuška, W. C. Rheinboldt: Error estimates for adaptive finite element computations. SIAM J. Numer. Anal. 15 (1978), pp. 736–754. 130
- I. Babuška, T. Strouboulis: The Finite Element Method and Its Reliability. Clarendon Press, Oxford, 2001. 128

- P. G. Ciarlet: The Finite Element Method for Elliptic Problems. North Holland, Amsterdam, 1978. 128, 135
- L. Demkowicz: Computing with hp-Adaptive Finite Elements. Vol. 1, 2. Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, FL, 2007, 2008. 126, 137
- L. Demkowicz, W. Rachowitz, P. Devloo: A fully automatic hp-adaptivity. J. Sci. Comput. 17 (2002), pp. 117–142. 137
- S. Korotov: Global a posteriori error estimates for convection-reaction-diffusion problems. Appl. Math. Model. 32 (2008), pp. 1579–1586. 131, 132
- S. G. Mikhlin: Constants in Some Inequalities of Analysis. John Wiley & Sons, Chichester, 1986. 133
- P. K. Moore: A posteriori error estimation with finite element semi- and fully discrete methods for nonlinear parabolic equations in one space dimension. SIAM J. Numer. Anal. 31 (1994), pp. 149–169. 137
- L. E. Payne, H. F. Weinberger: An optimal Poincaré inequality for convex domains. Arch. Ration. Mech. Anal. 5 (1960), pp. 286–292. 133
- W. Rachowicz, J. T. Oden, L. Demkowicz: Toward a universal hp-adaptive finite element strategy. Part 3. Design of hp meshes, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 77 (1989), pp. 181–212. 126
- C. Schwab: p- and hp-Finite Element Methods. Clarendon Press, Oxford, 1998. 137
- K. Segeth: A posteriori error estimation with the finite element method of lines for a nonlinear parabolic equation in one space dimension. Numer. Math. 83 (1999), pp. 455–475. 137
- P. Šolín, K. Segeth, I. Doležel: Higher-Order Finite Element Methods. Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, FL, 2004. 136, 137
- L. Tobiska, R. Verfürth: Analysis of a streamline diffusion finite element method for the Stokes and Navier-Stokes equations. SIAM J. Numer. Anal. 33 (1996), pp. 107–127. 135
- T. Vejchodský: Fully discrete error estimation by the method of lines for a nonlinear parabolic problem. Appl. Math. 48 (2003), pp. 129–151. 137
- T. Vejchodský: Guaranteed and locally computable a posteriori error estimate. IMA J. Numer. Anal. 26 (2006), pp. 525–540. 131
- R. Verfürth: A posteriori error estimators and adaptive mesh refinement for a mixed finite element discretization of the Navier-Stokes equations. In: Numerical Treatment of the Navier-Stokes Equations. Springer, Berlin, 1989, pp. 145–152. 130
- R. Verfürth: A posteriori error estimators for the Stokes equations. Numer. Math. 55 (1989), pp. 309–325. 130
- R. Verfürth: A Review of A Posteriori Error Estimation and Adaptive Mesh Refinement Techniques. John Wiley & Sons, Chichester, and B. G. Teubner, Stuttgart, 1996. 129, 130, 131, 134, 135, 136
- M. Vohralík: A posteriori error estimates for lowest-order mixed finite element discretizations of convection-diffusion-reaction equations. SIAM J. Numer. Anal. 45 (2007), pp. 1570–1599. 133, 134, 137



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

# Geoinformatické modelování v procesu výstavby modelových sítí

David Tomčík · Blanka Malá

Abstrakt Článek se zabývá problematikou výstavby modelových sítí od počátečních dat (např.: vrty, hranice lokality), až po modelovou geometrii a modelovou síť. Uvedeny jsou některé používané nástroje, metody a systémy, které mohou být využity při vytváření modelů a popsán je i současný stav řešení výstavby modelové sítě, který zahrnuje manuální převod z GIS do formátu geo. Dále je v článku popsán návrh automatizovaného řešení výstavby modelových sítí. Automatizované řešení realizuje výstavbu modelové geometrie na základě předzpracování dat v GIS a jejich automatizovaného převodu z GIS do formátu geo. Teoretické řešení práce obsahuje přehled použitých postupů a metod (Delaunayova triangulace, interpolace povrchu), které vedou k úspěšné výstavbě modelové sítě. Praktické řešení přesněji specifikuje požadavky na přípravu dat v GIS, tak aby byla akceptovatelná vytvořenou aplikací CONVERT2GEO, která automatizovaný převod uskutečňuje. Na závěr je v článku uvedeno zhodnocení a přínosy aplikace, která provádí automatizovaný převod dat z GIS do GMSH a návrhy na vylepšení této aplikace.

# 1 Úvod

Stává se samozřejmostí, že je snaha téměř vše automatizovat, především v oblasti výpočetní techniky. To platí i pro obor geoinformatického modelování za účelem simulace proudění podzemních vod v horninách. Pro potřeby modelování zájmových oblastí

D. Tomčík (⊠) · B. Malá

Ústav nových technologií a aplikované informatiky, Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, Technická univerzita v Liberci, Studentská 2, 461 17 Liberec 1, Česká republika e-mail: blanka.mala@tul.cz

D. Tomčík e-mail: david.tomcik@gmail.com

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".

je důležité umět automatizovaně vytvořit modelové sítě zájmových oblastí [3]. Snaha automatizovat výstavbu modelové sítě je především v případě, že je zájmová oblast rozlehlá, členitá nebo je potřeba zájmovou oblast modelovat příliš podrobně na to, aby bylo v lidských silách modelovou síť vytvořit manuálně.

#### 2 Výstavba modelové sítě

Tvorba modelové sítě zahrnuje předzpracování počátečních dat v GIS [2]. GIS je univerzální systém pro práci s daty a disponuje mnoha nástroji, které předzpracování usnadňují a automatizují (např. interpolace povrchu, Delaunayova triangulace). Jelikož by modelová síť měla být plnohodnotně prostorová, nelze ji vytvořit pouze za pomoci GIS, který pracuje v tzv. 2.5D prostoru (2.5D prostor je ve své podstatě 2D prostor s tím, že jednotlivá data nesou i svou výškovou hodnotu). Z tohoto důvodu bylo nutné použít i jiný software, který dokáže zobrazit model v 3D prostoru. Jedná se o software GMSH [1], který požadovaná kriteria splňuje a je šířen pod licencí GNU General Public License (GPL). Nyní nastává problém v převoditelnosti dat mezi GIS a GMSH. Tento problém lze řešit manuálním převodem dat, nebo lze vytvořit aplikaci, která tento převod uskuteční.

Manuální převod dat je způsob, který je nenáročný na strukturu a formát předzpracovaných dat v GIS a jejich umístění. Uživatel si data v GIS může uložit jakkoliv bude chtít, důležité je pro něj, aby se v těchto datech sám vyznal, nebo aby byl schopen strukturu popsat a vysvětlit pro někoho jiného. Bohužel tento způsob může být velice časově náročný a tím pádem i neefektivní, protože než se modelová síť manuálně vytvoří, může být zastaralá. Mezitím může být daná lokalita změněna nebo může dojít ke změnám v požadavcích modelu a to je pak nutné začít znovu od začátku. Z tohoto důvodu vznikla potřeba vytvořit nějaké automatizované řešení převodu dat z GIS do GMSH. Pro funkci automatizovaného převodu dat z GIS do GMSH byla vytvořena aplikace, která nese jméno CONVERT2GEO a která do procesu převodu dat vnesla požadovanou automatizaci. V aplikaci dochází ke zpracování předzpracovaných dat z GIS a vytvoření souboru typu **geo** a to vše v krátkém čase. Soubor typu **geo** je zdrojový soubor aplikace GMSH, ve kterém je popsána a uložena geometrie modelu, z této geometrie modelu lze v GMSH snadno vygenerovat modelovou síť.

Do aplikace CONVERT2GEO vstupují data, která byla předzpracována v GIS. V GIS jsou data uložena v relační databázi, kde každá relace představuje jednu vrstvu. Data vrstvy v GIS lze zobrazit a editovat v takzvané atributové tabulce (obr. 2.1), avšak fyzicky jsou data uložena ve formátu dbf. Právě soubor typu dbf je vstupní formát do aplikace CONVERT2GEO.

	Attrib	ibutes of usekD						
	FID	Shape *	ld	Vlastnosti	X	Y	Z	<b>A</b>
Þ	0	Point ZM	0	2	-687359,556476	-1101449,54714	34,57629	
	1	Point ZM	1	2	-687159,556476	-1101449,54714	34,771219	
	2	Point ZM	2	2	-686959,556476	-1101449,54714	34,980015	E
	3	Point ZM	3	2	-687259,556476	-1101249,54714	34,738877	
	4	Point ZM	4	2	-687059,556476	-1101249,54714	34,928427	
	5	Point ZM	5	2	-687359,556476	-1101049,54714	34,723056	
	6	Point 7M	6	2	_687159 556476	-1101049 54714	34 893309	1

Obrázek 2.1 Atributová tabulka v GIS.

Tato tabulka je však výsledek předzpracování dat v GIS. Dopracovat se k těmto datům znamená ovládat alespoň některé potřebné nástroje v GIS, které představují jen malý zlomek toho, co ve skutečnosti GIS umí. Postup předzpracování dat v GIS je následující. V potřebném rozsahu a rozlišení se vytvoří bodová vrstva kopírující tvar zájmové oblasti a její pukliny (obr. 2.2(a)). Bodová vrstva je vytvořena pouze jednou, ale pokud má modelová lokalita více hladin, je pro každou hladinu tato bodová vrstva zkopírována a jednotlivým bodům jsou přiřazeny informace o hloubce bodu.



Obrázek 2.2 (a) bodová vrstva sloužící pro popis hladin; (b) trojúhelníková vrstva.

Z bodové vrstvy se v GIS pomocí nástroje "Delaunayova triangulace" vytvoří trojúhelníková vrstva (obr. 2.2(b)), která slouží jako pomocná pro pozdější stavbu modelové geometrie zájmové oblasti.

Nezbytnou součástí předzpracování dat v GIS je interpolace hladiny geologické vrstvy, v případě více vrstev modelové lokality se provede interpolace hladiny pro každou vrstvu. Interpolovaný povrch je poté využit pro přiřazení výškové informace jednotlivým bodům té konkrétní hladiny, tzn. že každý bod v bodové vrstvě se stane tzv. 2.5D.

Potřebné výstupy z GIS jsou tedy soubory typu dbf, vrstev hladin horizontálního průběhu. Tyto soubory představující relace obsahující atributy jako např. identifikační čísla bodů a souřadnice X, Y, Z bodů. Počet hladin horizontálního průběhu může být libovolný, proto je libovolný i počet výstupních souborů představujících bodové vrstvy hladin. Dalším a posledním výstupním souborem z GIS typu dbf jsou data trojúhelníkové vrstvy. Tato vrstva je pouze jedna a při transformaci dat z GIS do GMSH slouží jako vzor pro sestavení trojúhelníků každé hladiny.

#### 2.1 Automatizovaný převod dat mezi GIS a GMSH

Automatizovat převod dat z GIS do GMSH znamenalo vytvořit software, který převod uskuteční. K tomuto účelu byla v programovacím jazyce JAVA vytvořena aplikace, která nese jméno CONVERT2GEO (obr. 2.3). Tato aplikace, jak již napovídá její název, převádí předzpracovaná data z GIS do formátu **geo**, ze kterého je dále možné v aplikaci GMSH automatizovaně vygenerovat požadovanou modelovou síť.

V prvním kroku CONVERT2GEO se zadávají vrstvy hladin horizontálního průběhu. Každá hladina nebo spíše soubor typu dbf, který hladinu představuje, je složen z několika atributů a tyto atributy musí být správně zvoleny napravo od seznamu hladin.

j Convertzgeo			
plikace Nastaveni			
1. Zadejte hladiny (v pořadí v ja	akém leží na sobě,	první bude ta	nejvyšší).
usek_HRT_C.dbf	Přidat	Id:	Id 👻
usek_HRT_D.dbf	Odebrat	Osa X:	X -
		Osa Y:	Y 🗸
		Osa Z:	Z 🗸
		Vlastnosti:	Vlastnosti 🗸
2. Zadejte plochy trojúhelníků j	po triangulaci.		
usek_sum.dbf	Procházet	Id:	FID_usek_t 👻
		1. bod:	1 •
		2. bod:	2 🔹
		3. bod:	3 🗸
		Vlastnosti:	
3. Výstupní soubor.			
C:\nový.geo			Procházet
Délka elementu sítě: 50 🚔			
Proved			Hotovo

Obrázek 2.3 Aplikace CONVERT2GEO.

Druhým krokem je zadání trojúhelníkové vrstvy, zde je opět potřeba správně zvolit atributy. Nakonec je zadána cesta a jméno výstupního souboru typu **geo** a délka elementu sítě, která určuje hustotu vygenerované modelové sítě.

Jak již bylo řečeno, výstupem aplikace CONVERT2GEO je soubor typu **geo**, tento formát slouží v aplikaci GMSH jako zdrojový soubor pro uložení nejen geometrie modelu, ale i vlastností elementů geometrie. Soubor **geo** je složen ze speciálních textových příkazů, které vypadají následovně.

Ze všeho nejdříve jsou vytvořeny body geometrie (obr. 2.4(a)), ty lze vytvořit příkazem:

$$Point(i) = {X, Y, Z};$$

Následně jsou body spojeny liniemi (obr. 2.4(b)), které jsou chápány jako orientované a jejichž směr určuje pořadí bodů vložených do příkazu:

Linie jsou spojeny tak, aby vytvořily smyčku, a tato smyčka představuje hranice plochy. Cyklus je vytvořen příkazem:

Důležité je v tomto případě dodržet pravidlo, které říká, že pokud si představíme smyčku jako orientovaný graf, tak do každého vrcholu musí právě jedna hrana vstupovat a právě jedna hrana musí z tohoto vrcholu vystupovat. Z cyklu lze pak jednoduše vytvořit plochu (obr. 2.4(c)). Plocha geometrie je vyznačena čárkovaně a je vytvořena příkazem:

```
Plane Surface(i+1) = {Line Loop(i)};
```
Do kompletní geometrie modelu zbývá jen doplnit objem geometrie (obr. 2.4(d)). Objem geometrie je vytvořen spojením všech ploch tvořících plášť objemu do jedné smyčky a z této smyčky lze jednoduše vytvořit objem geometrie. Objem je tedy vytvořen dvojicí příkazů:

Surface Loop(i) = {Plane Surface(j), Plane Surface(k), ...}; Volume(i+1) = {Surface Loop(i)};



Obrázek 2.4 Geometrie modelu (a) body; (b) linie; (c) plochy; (d) objem.

#### 2.2 Parametr hustoty modelové sítě

Parametr hustoty modelové sítě určuje délku elementu sítě a tím ovlivňuje hustotu výsledné modelové sítě. Tento parametr je vložen do zdrojového kódu souboru **geo** jako konstantní proměnná, která je vložena do příkazu **Point**. Platí zde nepřímá úměrnost, tzn. že čím je parametr hustoty menší, tím je modelová síť hustší. Příklad dvou modelových sítí s různými parametry hustoty a jejich rozdílnými hustotami je možné vidět na obrázcích (obr. 2.5(a) a obr. 2.5(b)).



**Obrázek 2.5** Modelová síť (a) parametr hustoty = 0.8; (b) parametr hustoty = 0.3.

# 3 Výsledná modelová síť

Z automatizovaně vytvořené geometrie uložené ve formátu geo lze nyní jednoduše vytvořit modelovou síť zájmové oblasti. Stačí soubor geo otevřít v aplikaci GMSH, kde se následně zobrazí vytvořená geometrie a jednoduše vygenerovat modelovou síť (obr. 3.1). Nástroj na generování modelové sítě má aplikace GMSH integrován a generování probíhá zcela automatizovaně, proto zde již není potřeba žádných podrobných znalostí aplikace GMSH.



Obrázek 3.1 Modelová síť v aplikaci GMSH.

# 4 Závěr

Automatizované řešení výstavby modelové sítě se ukázalo jako efektivní, protože převod dat z GIS do GMSH je proveden ve velmi krátkém čase za pomocí aplikace CON-VERT2GEO. Oproti manuálnímu převodu dat je zde několika hodinová až denní úspora času (v závislosti na podrobnosti a velikosti modelu). V případě potřeby změny některých částí modelu lze provedení těchto změn provést opět snadno a pohodlně v krátkém čase. Automatizací převodu dat z GIS do GMSH nedochází k chybám a překlepům, které mohly při manuálním převodu nastat vlivem lidského činitele. Dále je zde možnost aplikaci CONVERT2GEO využít na více projektech, což je do budoucna perspektivní. Avšak je potřeba říci, že aplikace zatím není zcela dokončená, je zde několik věcí, které by využitelnost aplikace opět o něco více zlepšily a to identifikace fyzikálních skupin v modelu a možnost, aby vertikální linie představující pukliny propojovaly i body, které neleží na stejných souřadnicích X a Y.

#### Reference

- 1. C. Geuzaine, J.-F. Remacle: GMSH: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities, http://geuz.org/gmsh. 140
- B. Malá: GIS řešení 2.5D modelové sítě lokality Melechov, http://www.geoinformatika.wz.cz. 140
- D. Tomčík: Geoinformatické modelování v procesu výstavby modelových sítí. Diplomová práce, Technická univerzita v Liberci, 2009. 140



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

# Metóda pohyblivých bodov pre úlohu transportu kontaminantu

Erika Trojáková

Abstrakt Čitateľa oboznamujeme s metódou využívajúcou pohyblivé body. Aplikujeme ju na rovnice transportu kontaminantu s adsorpsiou v neekvilibriu. Dvojdimenzionálny problém dvoch studní transformujeme bipolárnou transformáciou. Po transformácii riešime úlohu iba na prúdniciach, teda riešime veľa jednodimenzionálnych úloh.

Metódu aplikujeme aj na riešenie inverznej úlohy. Riešenie invernej úlohy vyžaduje viacnásobné riešenie priamej úlohy. Používame dobre známu a modernú metódu Levenberg-Marquardt.

# 1 Model dvoch studní

Známym modelom popisujúcim transport, adsorpciu a difúziu kontaminantu je model dvoch studní. Tento model vhodne popisuje reálnu situáciu. Mnohé detaily popisúce voľbu modelu môžeme nájsť v [1, 5]. Model má tvar

$$h_{\text{eff}}\left(C + \frac{\theta_e}{\theta_0}\psi_e(C)\right) + \operatorname{div}(h_{\text{eff}}vC) - \operatorname{div}(h_{\text{eff}}D\nabla C) + h_{\text{eff}}\frac{\theta_n}{\theta_0}\partial_t S = \frac{h_{\text{eff}}G}{\theta_0}, \quad (1.1)$$

$$\partial_t S = \kappa(\psi_n(C) - S), \qquad (1.2)$$

kde ${\cal G}$  je generátor kontaminantu v prostredí.

Model dvoch studní vieme transformovať na ohraničenú oblasť v rovine. V hore uvedenom systéme totiž oblasť, na ktorej sa transport kontaminantu odohráva, je ne-ohraničená. Vďaka tomu, že problém je symetrický vzhľadom na x-ovú os, môžeme riešenie hľadať iba v niektorej z dvoch polrovín určených touto osou. Veľmi podstatná pre doterajšiu prácu bola transformácia problému na obdĺžnikovú oblasť.

E. Trojáková (⊠)

Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Univerzita Komenského, Bratislava, Slovenská republika e-mail: erika.trojkova@fmph.uniba.sk Majme dve studne s polomermi  $r_1, r_2$  a umiestnené v bodoch (d, 0), (-d, 0) v neohraničenej rovine. Po použití vhodnej bipolárnej transformácie [3] danej vzťahmi

$$x = \frac{\delta}{2} \frac{\sinh v}{\cosh v - \cos u} , \qquad (1.3)$$

$$y = \frac{\delta}{2} \frac{\sin u}{\cosh v - \cos u} , \qquad (1.4)$$

$$\sqrt{r_1^2 + \frac{1}{4}\delta^2} + \sqrt{r_2^2 + \frac{1}{4}\delta^2} = 2d \tag{1.5}$$

sa úloha transformuje na obdĺžnikovú oblasť  $\Omega_r = (0, \pi) \times (v_1, v_2)$ . Pritom platí, že krivky s konštantnou hodnotou u alebo v sú kružnice s rôznymi polomermi v rovine (x, y). Konštantná hodnota u popisuje prúdnicu, konštantná hodnota v ekvipotenciálu. Hranice  $v_1, v_2$  sú určené vzťahmi:

$$\sinh v_1 = -\frac{\delta}{2r_1} \tag{1.6}$$

$$\sinh v_2 = -\frac{\delta}{2r_2} \tag{1.7}$$



Obrázek 1.1 Transport na ohraničenú oblasť.

Jednou z ďalších výhod tejto transformácie je to, že potenciál  $\Phi$  v novej oblasti závisí len od premennej v. Vďaka tomu môžeme popísať priebeh potenciálu na celej oblasti (charakterizovaný Laplaceovou rovnicou a okrajovými podmienkami) ako

$$\Phi(v) = Av + B, \tag{1.8}$$

kde konštanty A, B určíme z okrajových podmienok pre  $\Phi_1$ ,  $\Phi_2$  nameraných na studniach. Po transformácii dostávame v nových súradniciach u, v model (bez adsorpcie v ekvilibriu)

$$\partial_t C - F \partial_v C - g(\partial_u (a \partial_u C) + \partial_v (a \partial_v C)) + \frac{\theta_n}{\theta_0} \partial_t S = 0,$$
  
$$\partial_t S = \kappa(\psi_n(C) - S)$$

pre $(u,v)\in \varOmega_r,\,t>0,$ kde $g,\,F,\,a,\,b$  sú známe funkcie premenných  $u,\,v$ dané vzťahmi

$$g(u,v) = \frac{4(\cosh v - \cos u)^2}{\delta^3 \theta_0 h_{\text{eff}}}, \qquad F(u,v) = A\delta g$$
$$a(u,v) = D_0 \theta_0 h_{\text{eff}} \delta + 2A\alpha_T (\cosh v - \cos u),$$
$$b(u,v) = D_0 \theta_0 h_{\text{eff}} \delta + 2A\alpha_L (\cosh v - \cos u).$$

Okrajové podmienky na oblasti sú

$$C((u, v_2), t) = C_0(t), \qquad u \in \langle 0, \pi \rangle,$$
  
$$\partial_u C((0, v), t) = \partial_u C((\pi, v), t) = 0, \qquad v \in \langle v_1, v_2 \rangle,$$
  
$$\partial_v C((u, v_1), t) = 0, \qquad u \in \langle 0, \pi \rangle.$$

Model je doplnený počiatočnými podmienkami  $C((u, v), 0) = C_i(u, v), S((u, v), 0) = S_i(u, v).$ 

Označme  $y_i = C(x_i(t), t), w_i = S(x_i(t), t),$  kde  $x_i(t)$  označuje polohu uzla  $x_i$ v čase t. Po integrácii rovníc vo vhodných hraniciach a zvážení toho, že pohyblivé body sú závislé od času dostávame pre každý pohyblivý uzol  $x_i$  rovnicu tvaru:

$$(\dot{y}_{i} - \partial_{x}y_{i}(\dot{x}_{i})) = \frac{2}{\alpha_{i} + \alpha_{i+1}} g(x_{i}) \left( b_{i}^{-} \partial_{x}y_{i-1/2} - b_{i}^{+} \partial_{x}y_{i+1/2} + \delta A(y_{i-1/2} - y_{i-1/2}) \right) - \frac{\theta_{n}}{\theta_{0}} \kappa(\psi_{n}(y_{i}) - w_{i}), \qquad (1.9)$$

$$\dot{w}_i - \partial_x w_i(\dot{x}_i) = \kappa(\psi_n(y_i) - w_i).$$
(1.10)

#### 2 Pohyblivé body

Fixujme konkrétny čas t a v nasledujúcich vzťahoch vynechajme index t. Na určenie uzlov doplníme systém (1.9), (1.10) o N-1 diferenciálnych rovníc (poz. [2]). Pre každý z uzlov dodáme osobitnú diferenciálnu rovnicu. Pri vytváraní týchto diferenciálnych rovníc budeme pracovať s monitorovacou funkciou, ktorú v našom prípade volíme v tvare

$$m(x,C) = \sqrt{\gamma + \frac{1}{2}(\partial_x C)^2}$$
.

Pri výpočtoch použijeme diskrétnu aproximáciu monitorovacej funkcie. Približná hodnota monitorovacej funkcie m v uzle  $x_i$  je daná vzťahom

$$m_i = m(x_i, y_i) = \sqrt{\gamma + \frac{1}{2} \left(\frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}}\right)^2}, \qquad i = 1, \dots, N-1.$$

Pohyblivé body, v ktorých chceme nájsť riešenie, sú rozmiestnené na intervale konkrétnej pevnej dĺžky  $L = v_2 - v_1$ . Ak označíme  $\alpha_i = x_{i-1} - x_i$  pre  $i = 1, \ldots, N$ , tak zlomky  $n_i$  tvaru  $n_i = \frac{1}{\alpha_i}$  vyjadrujú istým spôsobom hustotu týchto bodov. Definujme nové hustoty  $\tilde{n}_i$  vzťahmi

$$\widetilde{n}_1 = n_1 - \mu (n_2 - n_1), \qquad (2.1)$$

$$\widetilde{n}_i = n_i - \mu (n_{i+1} + n_{i-1} - 2n_i), \quad \text{pre} \quad i = 2, \dots, N-1, \quad (2.2)$$

$$\widetilde{n}_N = n_N - \mu (n_{N-1} - n_N), \qquad (2.3)$$

kde $\mu$ je konštanta z intervalu  $(\frac{1}{2},\frac{2}{3}).$ Za predpokladu, že budeme voliť vektor $\widetilde{n}$ tak, aby platila rovnosť

$$\frac{\widetilde{n}_{i-1}}{m_{i-1}} = \frac{\widetilde{n}_i}{m_i}, \qquad i = 2, \dots, N, \qquad (2.4)$$

zabezpečíme, že delenie n vyhovujúce (2.2) bude spĺňať

$$\mu < \frac{n_{i-1}}{n_i} = \frac{\alpha_{i-1}}{\alpha_i} < \frac{1}{\mu}$$

To je presne podmienka lokálnej ohraničenosti siete. Kvôli hladkému priebehu delenia, pozmeníme  $\left(2.4\right)$ na tvar

$$\frac{\widetilde{n}_{i-1} + \tau \dot{\widetilde{n}}_{i-1}}{m_{i-1}} = \frac{\widetilde{n}_i + \tau \dot{\widetilde{n}}_i}{m_i}, \qquad (2.5)$$

kde $\tau$ je kladná konštanta. Rovnice (2.5) dodáme k systému (1.9), (1.10) a získavame mohutnejší systém diferenciálnych rovníc, ktorého riešenie hľadáme. Predtým však použijeme vzťahy medzi $n, \, \widetilde{n}, \, \alpha, \, \check{\rm c}$ ím systém prejde na ekvivalentný tvar. Potrebné vzťahy sú

$$\dot{\alpha}_i = \dot{x}_{i-1} - \dot{x}_i, \qquad \dot{n}_i = -\frac{\dot{\alpha}_i}{\alpha_i}.$$
(2.6)

Dosadením a úpravou dostávame rovnice

$$\tau \left[\frac{\mu}{m_{i}\alpha_{i-1}^{2}}\right] \dot{x}_{i-2} - \tau \left[\frac{\mu}{m_{i+1}\alpha_{i}^{2}} + \frac{1+2\mu}{m_{i}\alpha_{i}^{2}} + \frac{\mu}{m_{i}\alpha_{i-1}^{2}}\right] \dot{x}_{i-1} \\ + \tau \left[\frac{\mu}{m_{i+1}\alpha_{i}^{2}} + \frac{1+2\mu}{m_{i+1}\alpha_{i+1}^{2}} + \frac{1+2\mu}{m_{i}\alpha_{i}^{2}} + \frac{\mu}{m_{i}\alpha_{i+1}}\right] \dot{x}_{i} \\ - \tau \left[\frac{\mu}{m_{i+1}\alpha_{i+2}^{2}} + \frac{1+2\mu}{m_{i+1}\alpha_{i+1}^{2}} + \frac{\mu}{m_{i}\alpha_{i+1}^{2}}\right] \dot{x}_{i+1} + \tau \left[\frac{\mu}{m_{i+1}\alpha_{i}+2^{2}}\right] \dot{x}_{i+2} \\ = \frac{1}{m_{i+1}} \left[-\frac{\mu}{\alpha_{i+2}} + \frac{1+2\mu}{\alpha_{i+1}} - \frac{\mu}{\alpha_{i}}\right] - \frac{1}{m_{i}} \left[-\frac{\mu}{\alpha_{i+1}} + \frac{1+2\mu}{\alpha_{i}} - \frac{\mu}{\alpha_{i-1}}\right], \quad (2.7)$$

kde  $2 \leq i \leq N-2$ a $\dot{x}_0=0,$ <br/> $\dot{x}_N=0.$  Ešte doplňme rovnice pre uzol $x_1:$ 

$$\tau \left[ \frac{1+\mu}{m_1 \alpha_1^2} + \frac{1+2\mu}{m_2 \alpha_2^2} + \frac{\mu}{m_1 \alpha_2^2} + \frac{\mu}{m_2 \alpha_1^2} \right] \dot{x}_1 - \tau \left[ \frac{\mu}{m_1 \alpha_2^2} + \frac{1+2\mu}{m_2 \alpha_2^2} + \frac{\mu}{m_2 \alpha_3^2} \right] \dot{x}_2 + \tau \left[ \frac{\mu}{m_2 \alpha_3^2} \right] \dot{x}_3 = \frac{1}{m_2} \left[ -\frac{\mu}{\alpha_1} + \frac{1+2\mu}{\alpha_2} - \frac{\mu}{\alpha_3} \right] - \frac{1}{m_1} \left[ \frac{1+\mu}{\alpha_1} - \frac{\mu}{\alpha_2} \right].$$
(2.8)

a pre uzol  $x_{N-1}$ :

$$\tau \left[\frac{\mu}{m_{N-1}\alpha_{N-2}^{2}}\right] \dot{x}_{N-3} - \tau \left[\frac{\mu}{m_{N-1}\alpha_{N-2}^{2}} + \frac{1+2\mu}{m_{N}\alpha_{N-1}^{2}} + \frac{\mu}{m_{N}\alpha_{N-1}^{2}}\right] \dot{x}_{N-2} + \tau \left[\frac{1+2\mu}{m_{N-1}\alpha_{N-1}^{2}} + \frac{\mu}{m_{N}\alpha_{N-1}^{2}} + \frac{1+\mu}{m_{N}\alpha_{N}^{2}} + \frac{\mu}{m_{N-1}\alpha_{N}^{2}}\right] \dot{x}_{N-1} = \frac{1}{m_{N}} \left[\frac{1+\mu}{\alpha_{N}} - \frac{\mu}{\alpha_{N-1}}\right] - \frac{1}{m_{N-1}} \left[\frac{1+\mu}{\alpha_{N-1}} - \frac{\mu}{\alpha_{N}} - \frac{1+\mu}{\alpha_{N-2}}\right].$$
(2.9)

Systém (1.9), (1.10), (2.7)–(2.9) aproximuje daný ODE systém a pri označení z(t) = (y(t), w(t), x(t)) sa dá schematicky napísať v tvare

kde M je matica a vektor g je jednoznačne určený počiatočnými a okrajovými podmienkami. Vektor  $z_0$ , najmä jeho zložku  $x_0$ , volíme tak, aby zodpovedala myšlienke metódy pohyblivých bodov – teda v miestach veľkých zmien  $y_0$  volíme počiatočné rozloženie uzlov hustejšie. Okrem toho v praxi volíme niekoľko prvých zložiek vektora  $y_0$ kladných.

### 3 Numerické experimenty

V našom experimente berieme model transportu kontaminantu transformovaný na obdĺžnik v rovine, hodnoty potenciálov na hraniciach studní  $\Phi_1$ ,  $\Phi_2$  sú pevne dané, pričom  $\Phi_1 < \Phi_2$ . Takisto polomery  $r_1$ ,  $r_2$  studní a parameter d určujúci ich vzdialenosť sú dané. V neekvilibriu je adsorpcia  $\psi_n(C) = C$ . Okrajová podmienka  $C_0(t)$  na jednom okraji obdĺžnika je rovná 1. Na druhom okraji máme nulovú Neumanovu podmienku. Neohraničená oblasť sa transformovala na obdĺžnik  $(-5.3, 5.3) \times (0, \pi)$ . Úlohu sme riešili na stripe  $u = \pi$ . Výpočty sme realizovali vo softwary MATLAB 7.0, pričom sme používali ODE-solver ODE15s.



**Obrázek 3.1** Riešenie a pohyblivé body, T = 5.

#### 4 Inverzná úloha

Snažíme sa určiť parametre izoterm tak, aby riešenie úlohy pri určených parametroch zodpovedalo nameraným hodnotám. Predpokladali sme pritom, že nami namerané dáta sú hodnoty takzvanej breaktrough krivky, teda krivky, ktorá popisuje zmenu koncentrácie v čase v studni B. Na obrázku môžeme vidieť breaktrough krivky pre rôzne parametre a, b; Langmuir  $\psi(C) = \frac{aC}{1+bC}$ . Parametre hľadáme iteračne, pričom začneme počiatočným vektorom  $p_0$ . Zlepšenie tejto počiatočnej voľby realizujeme tak, že minimalizujeme problém najmenších štvorcov  $P(p, C_p) = \sum_{i=0}^{n} f_i(p)^2$ , kde  $f_i(p) = C_p(t_i) - C_M(t_i)$ . Používame pri tom Levenberg-Marquardt metódu. Označme f'(p)Jacobián funckie f. Potom  $p_{k+1} = p_k + d_k$ , kde  $d_k$  je riešením systému

$$(f'(p_k)^T f'(p_k) + \lambda_k I)d_k = -f'(p_k)f(p_k),$$

pričom od voľby parametru  $\lambda$  závisí, aká metóda je vlastne použitá. Ak je parameter  $\lambda$  nulový, tak sa jedná o Newton–Gauss metódu, ak je veľký, dostávame metódu najväčšieho spádu. Môžeme si všimnúť, že pri výpočte Jacobiánu ( $f'(p_k)$  počítame veľakrát



Obrázek 4.1 Breaktroughkrivka pre parametre (4,5), (5,5), (6,5).

priamu úlohu, takže čím rýchlejšiu metódu máme na riešenie priamej úlohy, tým máme väčšiu šancu nájsť presné riešenie inverznej úlohy.

Na záver uvádzame dva výsledky pri riešení inverznej úlohy:

"Nameraná" krivka  $C_M$  vypočítaná s parametrami (5, 7); počiatočná hodnota parametrov  $p_0 = (6, 6)$ ; Langmuirova izoterma:  $\psi(C) = \frac{aC}{1+bC}$ ; vektor  $p_5 = (5.0047, 7.0082)$ .

Iteration	Func. count	f(x)	Norm of steps
0	3	$1.11488 \times 10^{-4}$	
1	6	$3.89615 \times 10^{-6}$	1.91446
2	9	$3.71852  imes 10^{-7}$	0.20183
3	12	$1.31010 imes 10^{-8}$	0.926933
4	15	$3.75936  imes 10^{-9}$	0.0964689
5	18	$3.72659 \times 10^{-11}$	0.0974189

Tabulka 4.1 Riešenie inverznej úlohy, 50 stripov.

"Nameraná" krivka  $C_M$  vypočítaná s parametrami (1, 0.75); počiatočná hodnota parametrov  $p_0 = (1.2, 0.6)$ ; Freundlichova izoterma:  $\psi(C) = aC^p$ ; vektor  $p_9 = (0.94, 0.72)$ .

Iteration	Func. count	f(x)	Norm of steps
0	3	$9.15665 \times 10^{-9}$	
1	6	$9.15665 \times 10^{-9}$	0.538454
2	9	$7.25577 \times 10^{-9}$	0.134614
3	12	$4.72236 \times 10^{-9}$	0.269227
4	15	$2.28552 \times 10^{-9}$	0.312678
5	18	$1.6316 \times 10^{-9}$	0.158495
6	21	$1.6316 \times 10^{-9}$	0.113385
7	24	$1.6316 \times 10^{-9}$	0.0280174
8	27	$1.6316 \times 10^{-9}$	0.00700436
9	30	$1.6316 \times 10^{-9}$	0.00175109

Tabulka 4.2 Riešenie inverznej úlohy, 50 stripov.

### Reference

- D. Constales, J. Kačur, B. Malengie: A precise numerical scheme for contaminant transport in duall well flow. Water Resources Research, vol. 39, No 10, p. 1303, 2003. 145
- J. Kačur, B. Malengier, E. Trojáková: Numerical modelling of convection-diffusionadsorption problems in Convergences preserving D. Mathematical Modelling and Numerical Analysis.B. Malengier. On numerical methods for direct and inverse convection-diffusion problems. Ghent. 2006. 147
- E. H. Lockwood: Bipolar coordinates. Cambridge Univerzity Press. England. ch.25, pp. 186–190, 1967. 146
- 4. B. Malengier: On numerical methods for direct and inverse convection-diffusion problems. Ghent.
- 5. M. Remešíková: Numerical Solution of direct and inverse contaminant transport problems with adsorption. PhD. thesis. 2005. 145



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

# Reliability of numerical model of combined capillary barrier

Dagmar Trpkošová · Jiří Mls

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 course-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 [7]. 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.

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

D. Trpkošová (⊠) · J. Mls

D. Trpkošová e-mail: dagmartrpkosova@seznam.cz

This article is based upon work supported by the Grant Agency of the Czech Republic under grant Nº 205/09/1879

and by the Ministry of Education of the Czech Republic under grant № MSM0021620855.

The authors are also indebted to Prof. Dr. Stefan Wohnlich and Dipl.-Ing. Kathrin Bitomsky for providing of data and the undisturbed soil samples of the tested barriers and for personal communications.

Institute of Hydrogeology, Engineering Geology and Applied Geophysics, Faculty of Science, Charles University in Prague, Albertov 6, 128 43 Prague 2, Czech Republic e-mail: mls@natur.cuni.cz

#### 1 Introduction

A capillary barrier is a method of landfill closing consisting of the placing of a finegrained soil layer, the capillary layer (CL), over a coarse-grained soil layer, the capillary block (CB). Under conditions of sufficiently low pressure head, the hydraulic conductivity of the capillary layer is much higher than that of the capillary block. Water enters the barrier from above and occupies the capillary layer. The capillary barrier is inclined, which allows for water flow along the capillary layer rather than through it and into the capillary block. The design where the capillary layer lies in direct contact with the capillary block is denoted as simple capillary barrier in this article.

For covering landfills of municipal waste, the European regulations require that surface sealing for waste class II be made up of two independent components. In most cases, this is satisfied by the combination of an artificial and a mineral sealing. A combined capillary barrier is intended as an alternative to conventional combined sealing. There are several designs combining a capillary barrier and artificial sealing. The artificial sealing can be under or above the capillary barrier. TASi however recommends a design where the impermeable sheeting is located between the capillary layer and the capillary block. This acts as the best substitute for a conventional combined sealing (Sehrbrock [6]).

Recently, a set of laboratory experiments on combined capillary barriers have been carried out at Ruhr University Bochum. The methodological approach applied in the laboratory simulations and a detailed description of the settings of the experiments is provided by Wohnlich [12]. The latest data obtained are the subject of an article being prepared for publication by Prof. S. Wohnlich and Kathrin Bitomsky. A part of the obtained results is utilized in this report in order to check the agreement of laboratory measurements with the corresponding results of numerical modelling.

The aim of this report was to check the reliability of a numerical model of a capillary barrier based on hydraulic characteristics measured in samples of the applied materials.

# 2 The large scale tipping trough simulation

The scheme of the large scale tipping trough is shown in Fig. 2.1. The length of the trough was 6 m, the height 1 m and the width 0.6 m. The thicknesses of the capillary layer (CL) and the capillary block (CB) were 0.4 m and 0.2 m, respectively. The capillary block was divided by five insulating screens into six separate areas in the axial direction. These insulating screens made it possible to localise and measure the breakthrough discharge from the capillary layer into the capillary block. The height of the screens was 15 cm. The trough was, moreover, divided by an axially oriented insulating screen into two separate sections so that two sets of experiments using the full length of the tipping trough could be carried out simultaneously.

The inflow into the capillary layer was made by pumping water from a tank and using sprinklers made by Gardena Company. The sprinklers were placed on a horizontal plastic plate situated 20 cm above the upper end of the capillary layer. The runoff occurred through outlets in the lower part of the tipping trough. Twelve drain tubes drained away water from the capillary block; two did so from the capillary layer (Fig. 2.1). Drain tubes from the capillary layer and half of those from the capillary block conveyed the water through a tipping scale, where the amount of water was measured continuously and recorded every fifteen minutes. The remainder of the drain



Fig. 2.1 Geometry of the tipping trough (domain) and locations of different kinds of boundary conditions. The lengths are in centimetres. The solid line describes part of boundary  $\Gamma_1$ , the dashed line describes part of boundary  $\Gamma_2$ , and the rings describe parts of boundary  $\Gamma_3$ .

tubes led to a collective reservoir, where the water level was recorded at least twice per day. All the inflows and outflows were measured separately for each section of the trough over a period of 43 days.

#### 3 Physical characteristics of investigated materials

Several physical characteristics of the materials used during the laboratory experiments with capillary barriers were determined in Bochum (Wohnlich [12]).

Material CL (the capillary layer): is a product of the German company Tecklenborg. It is a heterogeneous material originating in a river bed from which the rough grains and calcareous layers have been removed. According to Powers' [5] classification, the sand belongs to the category 'rounded'; both the apices and edges of grains are well rounded. The grain size curve is shown in Fig. 3.1.

Material CB (the capillary block): is a product of the German company  $G^2$ . It is a homogeneous material of a grain size of from 2 mm to 8 mm. According to Powers' [5] classification it belongs to the category 'sub-rounded'; the apices of grains are well rounded, the edges are partly rounded. The grain size curve is shown in Fig. 3.1.

#### 4 Determination of hydraulic characteristics

Numerical modelling of water flow within a capillary barrier requires the solving of differential equations describing flow in variably saturated soils. In this study, the capacity form of the Richards equation was used for this purpose

$$C_w(h)\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( K(h)\frac{\partial h}{\partial x_i} + \delta_{i,3} K(h) \right), \tag{4.1}$$

where  $x_1$ ,  $x_2$ , and  $x_3$  are the space coordinates with the  $x_3$  axis oriented vertically upwards, t is time, h is pressure head,  $C_w(h)$  is water capacity, K is hydraulic conductivity, and  $\delta_{i,j}$  is the Kronecker delta. The summation rule is utilized.

In order to make use of equation (4.1), the hydraulic characteristics  $C_w(h)$  and K(h) have to be determined and to do so, the retention curve of the applied materials



Fig. 3.1 Grading curves of used materials CL and CB (results were taken from Wohnlich [12]).

must be defined. The van Genuchten [9] equation

$$\Theta(h) = \Theta_r + \frac{\Theta_s - \Theta_r}{(1 + (-\alpha h)^n)^m}$$
(4.2)

was used to define the retention curves of measured materials of the simulated capillary barrier, where h < 0,  $\theta$  is water content,  $\theta_r$  and  $\theta_s$  are its residual and the saturated values, respectively, and  $\alpha$ , m, and n are parameters:  $\alpha > 0$ , n > 1, and m = 1 - 1/n. The van Genuchten equation was chosen because it is commonly utilized for both numerical simulations and retention curve constructions. The statistical poresize distribution model (Mualem, [4]) was further chosen to define the unsaturated hydraulic conductivity K. Using equation (4.2) once more, it reads

$$K(h) = \frac{K_s}{\sqrt{(1 + (-\alpha h)^n)^m}} \left(1 - \left(\frac{(-\alpha h)^n}{1 + (-\alpha h)^n}\right)^m\right)^2,$$
(4.3)

where  $K_s$  is saturated hydraulic conductivity.

The last two equations reduce the problem to the determination of parameters  $\theta_r$ ,  $\theta_s$ , n,  $\alpha$ , and  $K_s$  of both materials of the simulated capillary barrier. The tension apparatus was chosen to measure the main drying and wetting branches of the retention curve of each sample. The design of the apparatus used was that of Havlíček and Myslivec [1] (Fig. 4.1). Retention data were measured on 100 cm<sup>3</sup> samples: four samples of the capillary layer and six samples of the capillary block. For each sample, both the main drying branch and the main wetting branch of the retention curves were measured.

The numerical code RETC (van Genuchten et al., [10]) was used to determine the parameters  $\theta_r$ ,  $\theta_s$ ,  $\alpha$ , and n (equation 4.2) for every sample and both main branches. The results are listed in Tab. 4.1. A more detailed description of the measurements and a discussion of obtained results are presented in Trpkošová and Mls [7].



Fig. 4.1 Apparatus made according to Havlíček and Myslivec [1].

The saturated hydraulic conductivity of the soils was measured by permeameter. Due to their grain size, the tested materials induce conditions for flow with Reynolds number close to the limit value of the range of the Darcy law validity. Hence, the measurements were carried out at low gradients of hydraulic head. The results of saturated hydraulic conductivity measurements are listed in Tab. 4.1.

Table 4.1 van Genuchten fitting parameters of examined materials.

	$\begin{array}{c} \theta_{S_{drain.}} \\ [-] \end{array}$	$\begin{array}{c} \theta_{S_{inf.}} \\ [-] \end{array}$	$\theta_r$ [-]	$\begin{array}{c} \alpha_{drain.} \\ [\mathrm{cm}^{-1}] \end{array}$	$n_{drain.}$ $[-]$	$\begin{array}{c} \alpha_{inf.} \\ [\mathrm{cm}^{-1}] \end{array}$	$n_{inf.}$ $[-]$	$\frac{K_s}{[\mathbf{m}\cdot\mathbf{s}^{-1}]}$
Material CL	0.35	0.31	0.04	0.03	7.39	0.04	5.24	$1.18 \times 10^{-4}$
Material CB	0.41	0.41	0.07	0.29	4.56	0.32	4.17	$2.25 \times 10^{-3}$

#### 5 Description of numerical simulations

The laboratory experiments in the tipping trough were carried out in order to study the behaviour and the efficiency of the combined capillary barrier. The aim of the study we present was to investigate the possibility of testing the hydraulic barrier by means of measurements of samples of capillary barrier materials and subsequent numerical modelling. Making use of material data presented in Table 4.1, the trough experiments were repeated numerically in order to check the agreement. Subsequently, the numerical modelling of the effect of sheeting-faults distribution of the studied combined capillary barrier was carried out, [8]. The simulated processes were formulated mathematically as two-dimensional initial boundary value problems with equation (4.1) for  $x \in \Omega$  and  $t \in (0, T)$ , where T denotes the period of simulation and the domain  $\Omega$  is defined as the projection of the trough into the vertical plane containing the axis of the trough. The program S2D\_DUAL [11] was chosen for the numerical solution of the problems. The program solves the Richards equation in two space dimensions using the finite element method.

Homogeneity of the materials and isotropy of the hydraulic characteristics within each layer were assumed. The hysteresis of the soil water retention curves was neglected and the main wetting branches were used. The finite element mesh was created using the GS v 01 code of the Menhart package [2]. For each simulation, a special mesh was generated reflecting the changes in boundary conditions due to different lengths and positions of the faults in the impermeable sheeting. The applied meshes had over 1780 nodes and over 3030 triangular elements. The distance between nodes was under 5 cm on average. The meshes were denser in regions of significant change of pressure head and along the capillary boundary, where the distance between nodes shrank down to 1 mm.

The initial condition. According to our knowledge of initial conditions of the tipping trough experiments, and according to known water retention curves of the barrier, the value -40 cm was prescribed as the initial value of pressure head.

The boundary conditions. Three different kinds of boundary conditions were prescribed at the boundary of the domain.

Let  $\Gamma_1$  denote the impervious part of the boundary.  $\Gamma_1$  consists of the insulating screens dividing the trough into sectors, catch area of drains, the undisturbed impervious sheeting, and, soil evaporation being neglected, of the nonirrigated upper surface of the capillary layer.

During the laboratory experiments, the total value of the imposed recharge, as a function of time, was known. The recharge was supposed to be uniformly distributed over the irrigated part of the capillary layer surface. Hence, the flux density r(t) ([r] = length/time) of the recharge was determined. If  $\Gamma_2$  denotes the irrigated part of the boundary, the general form of the Neumann boundary condition prescribed upon  $\Gamma_2$  simulates the recharge

$$K(h(x,t))\left(\frac{\partial h}{\partial x_i}(x,t)\ v_i(x) + v_3(x)\right) = r(t) \quad \text{on} \quad \Gamma_2, t > 0, \tag{5.1}$$

while the Neumann boundary condition with r = 0 imposed upon  $\Gamma_1$  models the above described impervious part of the boundary.

The remaining parts of the boundary are composed of the segments, where the outflow from the capillary layer or the capillary block was enabled. These segments build free surface at the boundary of the layer and make the existence of the seepage face possible. Such segments serve as the capillary layer drainage, when the capillary barrier is utilized as a landfill closing. Let  $\Gamma_3$  denote this part of the boundary. No recharge is possible through  $\Gamma_3$  and discharge needs saturation at  $\Gamma_3$ . During the computation, these requirements were satisfied by prescribing the following combination of Dirichlet's and Neumann's conditions

$$\frac{\partial h}{\partial x_i}(x,t) v_i(x) + v_3(x) = 0 \quad \text{while} \quad h(x,t) < 0 \tag{5.2}$$

and

$$h(x,t) = 0 \quad \text{while} \quad \frac{\partial h}{\partial x_i} (x,t) v_i(x) + v_3(x) < 0$$
  
for 
$$(x,t) \in \Gamma_3 \times (0,T).$$
(5.3)

Figure 5.1 shows the location of the presented boundary conditions.



Fig. 5.1 Borders of the sheeting represent an inner boundary of the model, where Neumann's boundary condition of zero discharge applies. Thus the sheeting forms a sort of hole in the model area; it is not part of the model. Vertical hatch represents the material of the capillary layer, slanted hatch the material of the capillary block. Thick lines represent the boundary part  $\Gamma_1$ . The entire system is tilted in the model, data are in millimetres. The letter X represents the length of failure which depends on Simulation number.

Numerical revisiting of the laboratory experiments. Two different laboratory experiments testing a simple capillary barrier and the effect of holes in the impermeable sheeting of a combined capillary barrier were repeated numerically. The experiments differed firstly in the presence of the impermeable sheeting and secondly in volume of irrigation. The holes in the impervious interface should simulate the cracking or ripping of the artificial sheeting. The exact location of holes in the sheeting is shown in Fig. 5.2. Here, the described experiments and simulations are denoted as Simulation 1 (combined capillary barrier) and Simulation 2 (simple capillary barrier).



Fig. 5.2 Interface in individual simulations. The lengths are in centimetres. The solid lines mark the impermeable sheeting (inner boundary,  $\Gamma_1$ ); the voids in solid lines mark the ruptures (no boundary  $\Gamma_1$ ). In Simulation 3, the length of voids is 0.1 cm. The distance of the beginning of the first hole from the beginning of the barrier was 187 cm for all the simulations except Simulation 2, where it was 200 cm. The sloping lines represent the drainage channel where the boundary part  $\Gamma_3$  was imposed in Simulations 7–9. Group A was used for evaluation of the effect of rate of failure, Group B for relationship between locations of failure and drainage channel.

The two experiments were repeated by means of numerical modelling quite independently of the results of the tipping trough experiments. The comparison of the numerical results with the tipping trough measurements is presented and discussed below.

#### 6 Results and discussion

The parameters presented in Table 4.1 were used for numerical simulations of the barrier. The two solved problems were formulated in correspondence with two laboratory experiments carried out in the tipping trough. The results of the simulation are presented in Figs. 6.1 and 6.2 together with the rate of irrigation. As the laboratory measurements were known, it was possible to compare both sets of results. Figures 6.1 and 6.2 make this comparison visible.



Fig. 6.1 The comparison of model results with measured data (Simulation 1).

The numerical results are in good agreement with the corresponding laboratory measurements. The numerical simulation shows the higher sensitivity to change of computed outflow to changes of the infiltration rate than was found for the laboratory data. The differences at the beginning of simulations, particularly of Simulation 1, were caused by the applied initial conditions. A significant disagreement was found in the period from the 15th to the 27th day of Simulation 2. It should be noted that in this period, the laboratory data shows a higher discharge from the capillary layer than the infiltration.

In the numerical simulations, the main wetting branches of the retention curves were utilized (Table 4.1). This is in accordance with Morris, Stormont [3] and Trpkošová,



Fig. 6.2 The comparison of model results with measured data (Simulation 2).

Mls [7], where it is suggested, that the function of capillary barrier may be overestimated when using the drying branch of the retention curve.

The model parameters had not been calibrated to the trough results. The final agreement was achieved using parameters measured in the tension apparatus. The parameters are therefore independent of the given structure of the trough. This provides the option of using numerical model for investigations of the combined barrier behaviour. The obtained results show not only the mutual agreement between the tipping trough measurements and the numerical simulation but also the reliability of the applied hydraulic characteristics.

# 7 Conclusion

The possibility of using a numerical model as a tool for investigating the behaviour of a combined capillary barrier under variable conditions was studied.

Making use of laboratory results measured in tipping trough, it was possible to formulate the following important conclusion. In the case of soils usable for capillary barriers, the hydraulic characteristics determined by the method made according to Havlíček and Myslivec are applicable for numerical modelling with sufficient accuracy. This result suggests that the laboratory testing of a capillary barrier could be replaced by numerical modelling.

# References

- 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). 152, 155, 156
- 2. J. Mls: Description of the GS v 01 code (in Czech, unpublished), 2002. 157
- C. E. Morris, J. C. Stormont: Evaluation of numerical simulations of capillary barrier field tests, Geotechnical and Geological Engineering, pp. 201–213 (1998). 159
- 4. Y. Mualem: A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media, Water Resources Research, pp. 513–522 (1976). 155
- M. C. Powers: A new roundness scale for sedimentary particles, J. Sediment. Petrol., pp. 117–119 (1953). 154
- U. Sehrbrock: Verbundsysteme aus Kapillarsperre, Dichtungsbahnen und Geotextilien für die Oberflächenabdichtung von Deponien, 21. Fachtagung- Die sichere Deponie, Sicherung von Deponien und Altlasten mit Kunstoffen, Würzburg, 14 p., 2005. 153
- D. Trpkošová, J. Mls: Hydraulické charakteristiky kapilární bariéry ve vztahu k její účinnosti, Acta Hydrologica Slovaca, pp. 170–178 (2008). 152, 155, 160
- D. Trpkošová, J. Mls: The influence of artificial sealing on the capillary barrier's function, Waste Management, 2009. 156
- M. T. van Genuchten: A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils, Soil. Sci. Am. J., pp. 892–898 (1980). 155
- M. T. van Genuchten, F. J. Leij, S. R. Yates: The RETC code for quantifying the hydraulic functions of unsaturated soils, EPA, California, 1991. 155
- 11. T. Vogel: S2D program, CTU Prague, 1999. 157
- S. Wohnlich: Untersuchungsbericht-Dichtigkeitsnachweis der Kombikapillardichtung (KKD), in 3. Kipprinnenversuch, Bochum, 2006. 153, 154, 155



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

# Expertomica metabolomics profilling: Using probabilistic system approach to gather more information from LC-MS

Jan Urban · Jan Vaněk · Dalibor Štys

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.

# 1 Introduction

Liquid chromatography with mass spectrometry (LC-MS) detection is one of the major tools in proteomics and metabolomics. Metabolite transformation by protein enzymes and protein- and lipid-mediated signal transduction are elements of the pathways responsible for the non-linear dynamics of living cells. The goal of experiments in metabolomics and proteomics is to identify the molecule (or its fragment) and quantify its amount, at the best inside the cell or in a representative sample of the culture. In LC-MS the compounds are chromatographically separated on the basis of their physico-chemical interactions with the chromatographic column material in particular

J. Urban  $(\boxtimes) \cdot J$ . Vaněk  $\cdot D$ . Štys

e-mail: urban@greentech.cz

J. Vaněk e-mail: vanekyj@kky.zcu.cz

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

Institute of Physical Biology, University of South Bohemia, Zámek 136, 373 33 Nové Hrady, Czech Republic,

e-mail: stys@jcu.cz J. Urban

solvent system. All separated compounds come to the ion source and where they are ionized. Resulting ions are resolved by (various types) of interactions with electromagnetic field. The signal is then detected by detectors of various constructions. Naturally, the various technical setups give rise to various detailed relations between the nature of the analysed compound-analyte, ultimately its chemical structure, and the signal measured at the detector. Yet, the application of general systems theory enable to analyse this, in fact, whole class of experiments, in one natural generic way. The general stochastic systems theory (GSST) was introduced by Zampa (2004). Here we just briefly outline the major features. GSST characterizes system by a set of attributes A

$$A = \{a_i | i \in I\},\tag{1.1}$$

whose realizations are system variables

$$v_i \in V, \qquad i \in I. \tag{1.2}$$

System time is defined as ordered series of time instants

$$t_k \in T. \tag{1.3}$$

In contrast to the standard assumption of continuous time. We may then define causal relations where  $C_{i,j}$  is the complete and immediate cause for a trajectory element  $D_{i,j}$ and probabilities  $P_{i,j}$  for realization of this causal relation. System may also be split into elements

$$\pi_i = (T, V_i, C_i), \qquad (1.4)$$

which interact only by non-energetic, information, bonds

$$c_l(t_k) = (C_{k,l}, D_{k,l}). (1.5)$$

The whole system PCS then may be described by

$$PSC = (\Pi, C, P). \tag{1.6}$$

Where  $\Pi$  is the set of all elements, C is the set of all information bonds and P is the set of all probabilities. In this paper we describe how we utilized this theoretical framework for detailed analysis of the LC-MS experiment and how this approach helped to improve the experiment diagnostics.

#### 2 Results: Analysis of the LC-MS experiment

#### 2.1 Operational definitions and implementation

The experiment on determination of protein or metabolite concentration in the sample consist in most cases of steps: 1) of sample collection, 2) set of physico-chemical and mechanical operation such as filtration, extraction etc., 3) chemical or biochemical operations such as chemical modification or enzyme cleavage, 4) separation of chemical entities by chromatography, various electrochemical methods etc. and detection. In this article we discuss the information content of LC-MS measurement which combines chromatographic separation and detection of the compound identity and quantity. Various experimental protocols were developed to retrieve quantitatively proteins and diverse metabolite classes from different kind of samples. It remains clear that there is no

general relationship between the *attribute protein* or *metabolite* concentration with the meaning, for example, average concentration in the cell interior and *variable* measured by, let us say, LC-MS. Further in the text we shall concentrate on the measurement of the variable denoted protein or metabolite concentration by LC-MS.

In LC-MS the compounds are chromatographically separated on the basis of their physico-chemical interactions with the chromatographic column material in particular solvent system. All separated compounds come to the ion source and where they are ionized. Resulting ions are resolved by (various types) of interactions with electromagnetic field. The signal is then detected by detectors of various constructions. Naturally, the various technical setups give rise to various detailed relations between the nature of the analysed compound–analyte, ultimately its chemical structure, and the signal measured at the detector. Yet, the application of general systems theory enable to analyse this, in fact, whole class of experiments, in one natural generic way.

The LC-MS experimentalist naturally divides the source of measured signal into three origins, *sub-systems*, namely signal S (of the compound), random R and systematic noise Q. Individual signals in the MS spectrum occur at discrete m/z values separated by large areas containing only random noise. Clearly, the three types of signal origin are seen and for total signal intensity y(t,m) at particular time t and m/zm value we may write

$$y(t,m) = s(t,m) + r(t,m) + q(t,m), \qquad (2.1)$$

where s(t, m) is the contribution of the analyte signal, r(t, m) is the contribution of the random noise and q(t, m) is the contribution of the systematic noise. Values of y(t, m)are determined with certain precision at certain value of m determined with certain resolution and at certain time instant t. The delay between the time instants is generally uneven and the integration time preceeding the time instant t arbitrarily chosen. For each of the types of contributions we may propose probabilistic rules how to distinguish them from each other.

Analyte signal should behave as peak, it means that it should rise at certain  $t_k, m_l$ point and should not drop to zero at any  $t_{k+i}, m_l$  for certain period of time  $\langle t_k; t_{k+n} \rangle$ . Random noise should have (certain) noise distribution and systematic noise should not drop to zero for, in principle, any time between its first occurrence until the end of the experiment. Systematic noise forms ridges, deviations from the random noise distribution at certain m value at most of the time instants in the measurement.

#### 2.2 Random noise

The above mentioned definitions may be transformed into algorithmised rules. The simplest is the definitions of random noise R. The fact that the measurement contains sometimes 98% of the noise allows comparison of the signal to standard noise distribution function. The distribution of random noise in the m/r is highly uneven and depend namely on the tuning of the detector. In certain types of experiments, namely so-called high resolution experiments with large number of signals, one must also consider local precision in signal intensity y(t,m) and m/z detection which are not independent. This is now under consideration.

#### 2.3 Systematic noise

In a strict sense of the world, systematic noise is a sum of all contributions originating from the experimental procedure. In practice we observe ridges, series of subsequent y(t,m) which exceed the noise value at most of the time instants, and compounds which are present both in the empty run and in the experiment containing the analyte. The former case, ridges, will be discussed here and are, for the purpose of this analysis, forming the systematic noise sub-system  $Q_{ridge}$ . The later case, contaminant compounds  $Q_{comp}$ , are analysed in the same way as the analyte and are removed in the final stage of the analysis by removing them from the analyte signal S.

The sub-system  $Q_{ridge}$  splits into elementary sub-systems  $Q_{ridge,1}, Q_{ridge,2}, \ldots, Q_{ridge,i}$ , where *i* is the number of detected ridges. Appropriate setup of rules for peak definition is based on separation of time instants  $t_i \in T$  and on the appropriate integration time, let us denote it  $\theta_i \in \Theta$ . The ridge is defined as probability that at most time  $t_i \in T$  instants and at small m/z interval  $\langle m_i; m_i + \varsigma \rangle$  there is significant deviation from the probability that y(t,m) = r(t,m). The Value of  $\varsigma$  is generally given by instrument precision which may either be pre-defined, or calculated from the experimental data. The later is the problem per se and will be discussed separately, so far it is not implemented in the EMP software.

#### 2.4 The analyte

The analyte sub-system S splits into signals of individual compounds  $S_1, S_2, \ldots, S_n$ , where n is number of compounds which are composed of peaks  $S_{1,1}, \ldots, S_{1,k_1}, \ldots, S_{n,1}, \ldots, S_{n,k_n}$ . First we define peak  $S_{i,j_i}$ . Appropriate setup of rules for peak definition is again based on separation of time instants  $t_i \in T$  and on the appropriate integration time, let us denote it  $\theta_i \in \Theta$ . In our experience, there are many widespread experiments such a MS<sup>2</sup> in which the interval between  $t_i$  is not even. The integration time  $\sigma_i$  has so far been always identical within on experiment and is thus not considered. Precise definition of peaks is then that it is a series of y(t,m) which in certain interval  $\langle m_{k_{i,j}}; m_{l_{i,j}} \rangle$  deviates from the random noise distribution at the time interval  $\langle t_{r_{i,j}}; t_{m_{i,j}} \rangle$  for more that given number of time instants.

The m/z interval  $\langle m_{k_{i,j}}; m_{l_{i,j}} \rangle$  is ultimately defined by measured precision of the m/z value estimation. Exact discussion of this feature and its possible implementation will be given in a forthcoming paper and has not yet been implemented in the EMP software.

Length of the time interval  $\langle t_{r_{i,j}}; t_{m_{i,j}} \rangle$  is treated in two ways. First, we must estimate separately each of the peaks  $S_{i,j_i}$ . In the existent implementation the minimal number of consequent time instants at the interval  $\langle t_{r_{i,j}}; t_{m_{i,j}} \rangle$  is which do not fit the signal rule is given by certain (small) number, i.e. 3. But it may also calculated from experimental data from which the sensitivity for given instrument and experiment may be estimated. This is at the moment not implemented into the EMP software and will be discussed in detail elsewhere. The length of  $\langle t_{r_{i,j}}; t_{m_{i,j}} \rangle$  is estimated experimentally, it is the set of consequent time instants fulfilling the peak rule. The difference between the peak  $S_{i,j_i}$  and ridge  $Q_l$  deserves special discussion which is beyond the scope of this article. However, the implementation in the EMP software at the moment seems to be highly robust and allows proper identification of peaks with probability less than 20%. The whole calculation is probabilistic, so we may also estimate probability  $p_{i,j_i}$  that a given peak is a peak. So the elementary sub-system is described by triple

$$S_{i,j_i} = (\langle t_{r_{i,j}}; t_{m_{i,j}} \rangle, \langle m_{k_{i,j}}; m_{l_{i,j}} \rangle, p_{i,j_i}).$$
(2.2)

Found peaks may be composed into the compound. We start with peak with longest time interval  $\tau = \max(t_{m_{i,j}} - t_{r_{i,j}})$  and set  $\langle t_{r_{i,1}}; t_{m_{i,1}} \rangle$ . In the next step we search for all peaks whose time intervals are fulfilling the rule

$$\langle t_{r_{i,j\neq 1}} \ge t_{r_{i,j}}; t_{m_{i,j\neq 1}} \le t_{m_{i,j}} \rangle.$$
 (2.3)

By this we obtain sub system

$$S_1 = (S_{1,1}, S_{1,2}, \dots, S_{1,b_1}), \qquad (2.4)$$

where  $b_i$  is the maximal number of sub-systems fulfilling the rule (2.3) for given *i*. Next we take the peak with longest time interval from those not fulfilling the rule (2.3) and obtain the sub-system  $S_2 = (S_{2,1}, S_{2,2}, \ldots, S_{2,b_2})$  and so forth until there is no peak left. By this we get number of compounds  $n = \max(i)$  and number of peaks for each compound  $b_i$ . The later defines for each compound the set

$$M_{i} = (\langle m_{k_{i,1}}; m_{l_{i,1}} \rangle, \langle m_{k_{i,2}}; m_{l_{i,2}} \rangle, \dots, \langle m_{k_{i,b_{i}}}; m_{l_{i,b_{i}}} \rangle).$$
(2.5)

We may also define probability for each compound, for practical reasons (and for example) to be equivalent to probability of its most probable peak. We may write

$$S_{i} = (\langle t_{r_{i,1}}; t_{m_{i,1}} \rangle, M_{i}, \max(p_{i,j_{i}})).$$
(2.6)

In reality, the ordering of compounds is presented differently, usually the compound number 1 is the compound with lowest  $t_{r_{i,1}}$  or that with lowest-or highest  $\max(p_{i,j_i})$ .

Here also comes the subtraction of the second part of systematic noise,  $Q_{comp}$ . The blank or empty run, experiment not containing any analyte, is analysed in the same way as full experiment. Sub system  $Q_{comp}$  then, similarly as S, may be described as

$$Q_{comp} = (Q_{comp1}, Q_{comp2}, \dots, Q_{compw}), \qquad (2.7)$$

where w is number of compounds detected in the blank measurement. Again, each

$$Q_{compz} = (Q_{compz,1}, Q_{compz,2}, \dots, Q_{compz,\zeta}), \qquad (2.8)$$

where  $\zeta$  is number of peaks found in the compound  $Q_{compz}$ . We may then define probability that

$$p_{i,compz} = p(S_i = Q_{compz}), \qquad (2.9)$$

as a function

$$p_{i,compz} = f(\langle t_{r_{i,1}}; t_{m_{i,1}} \rangle, M_i, \langle t_{r_{compz,1}}; t_{compz_{i,1}} \rangle), \qquad (2.10)$$

which completes the discussion.

#### 2.5 Implementation

The discussions, despite to its theoretical extensiveness, is only an outline of a highly complex problem. The implementation in EMP program represents perhaps one possible, but sufficiently general and stable solution for whole range of concrete experiments. After adoption of the non-standard point of view of the stochastic systems theory, results of the analysis represents very practical and rich source of information which significantly simplifies the analysis.

Based on definitions we may set probabilistic rules using which we may for each point (t, m) determine probability that the value y(t, m) is signal of the analyte

$$s(t,m): p_s(t,m) = p(y(t,m) \in S),$$
 (2.11)

similarly we may define

$$p_r(t,m) = p(y(t,m) \in R),$$
 (2.12)

and

$$p_q(t,m) = p(y(t,m) \in Q).$$
 (2.13)

For the purpose of the "real life" analysis we instead of value estimation of analyte signal, intensity s(t,m) which is misleading, we introduce probability factor pr(t,m) that the measurement data output y(t,m) is analyte intensity s(t,m):

$$pr(t,m) = p[y(t,m) = s(t,m)|\lambda q,\lambda r], \qquad (2.14)$$

where  $\lambda q$  and  $\lambda r$  are estimated characteristic of mapping q(t,m) and mapping r(t,m)respectively. It should be noted here that up to 98% of measured information is random noise. The probability factor pr(t,m) means probability that analyte with molecular mass m in retention time t has intensity y(t,m). Probability pr(t,m) is multiplication of two independent probabilities. The first one is probability  $p'_r(t,m)$  that measurement data output y(t,m) is not produced by random noise r(t,m):

$$p'_{r}(t,m) = p[y(t,m) = s(t,m) + q(t,m)|\lambda r].$$
(2.15)

The second probability is probability  $p'_q(t,m)$  that measurement data output y(t,m) is not produced by systematic noise q(t,m):

$$p'_{q}(t,m) = p[y(t,m) = s(t,m) + r(t,m)|\lambda q]$$
(2.16)

and the final probability pr(t,m) is

$$pr(t,m) = p'_r(t,m)p'_a(t,m).$$
(2.17)

Using probability factor pr(t,m) which can be evaluated precisely with well noise characteristics, the error ratio can be tuned directly for any task. Subsequent filtration and/or analyzing steps can utilise this probability in their outputs via probability theory formulas. Details of the procedure are again implemented in Expertomica metabolite profiling program. The sub-systems affect each other, namely the random noise increases and systematic noise decreases when signal of the analyte is present. The implementation into software tool has hit the capacity of standard programming tools such as MATLAB. The introduction of high performance computing is a must.

#### 2.6 Analysis of available information content of the LC-MS experiment

There are numerous features which may be extracted from the data. We demonstrate two features which are in close connection to the theoretical analysis. Obviously there is no relation between the reliability of the signal and its intensity. But, manual finding of the "best" spectrum is still the main way by which LC-MS operators analyze their results. Some of the signals in these spectra may be attributed to adducts, fragmenst isotope satellites and other features which are observed in ms spectra. In most spectra we, however, observe other peaks. In other similar examples were found signal which could not be explained by any known chemical rules. Sometimes similar signals occurred in several subsequently eluted compounds. Most probably a compound was eluted from the column which represents additional source of systematic noise Q not implemented in current algorithms. From the theoretical point of view, the signal intensity of the analyte is the dominating factor determining the exact shape of peaks and levels of random and systematic noises. We believe that sum of analyte signal intensity and average random noise distributions will be sufficient as complete and immediate cause C(t) to allow prediction of the value of sub-systems R and  $Q_{ridge}$  at any time instants t. The length of the system trajectory needed for determination of the complete and immediate cause is one time instant.

For prediction of behavior of peaks one has to consider, in fact all peaks and their position in the preceeding chromatogram (and in a sense also of the subsequent ones). Quite likely, however, the contribution of compounds with distant chemical properties (eluting at higly different retention times) will be lower. Compounds not arriving to the detector simultaenously will not affect the ionization property, electromagnetic separation or detector behavior. In any case, for each of the sub-systems  $S_{i,j_i}$  and  $Q_{compz,j_{compz}}$  the complete and immediate cause should be sought separately. We may find that in the LC-MS dataset the information collected at the whole trajectory preceeding the particular time instant does not contain complete information to allow construction of the complete immediate cause C(t,m) predicting the probability of assignment of the signal y(t,m) to signal of the analyte signal s(t,m) or signal  $q(t,m|q \in Q_{compz,j_{compz}})$ . This feature requires additional extensive discussion.

#### 2.7 Software tool

We developed a software tool with simple Graphical User Interface in MATLAB 7.7.0 (R2008b) for loading the measurements and/or blank (if available for discarding peaks presented in blank) and estimate the noise PDFs. Since there are no user-defined parameters or controls to play, the program runs completely automatically. It reads the results of the measurement and the results of the empty run. You specify the confidence level (probability) with which you want to detect peaks, and the program derives the peaks. The results are shown either as standard graphs table of compounds, peaks and their probabilities–possibly as a 3D diagram. These results are highly encouraging, exceeding the ability of the operator who performed the manual interpretation. The software is still being continuously adapted to different types of data and instruments. The presented method is based on a physical model of what happens within the LC-MS instrument, and is therefore superior to other existing methods usually based on general heuristic rules. The software may be used for multiple purposes: for expert data

assessment, automated generation of the compound databases, performance analysis of the instrument, for validity assessment of biological models etc.



Fig. 2.1 Original measurement (left), and filtered (right).

# References

- 1. J. Urban, J. Vaněk: Expertomica Metabolite Profiling, software, http://sourceforge.net/projects/expertomica-eda. 162
- J. Urban: Expertomica metabolomics profiling: Using probabilistic system approach to gather more information from LC-MS, slides, SiMoNA 2009 workshop, http://flow.kmo.tul.cz/~simona/2009/prednasky/3\_St\_0925\_Jan\_Urban.ppt.



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

# Entropy fluxes in cell culture and its paralell implementation on GPU

Jan Urban · Jan Vaněk · Dalibor Štys

Abstract This document presents a novel method of entropy fluxes as the evaluation of changes between images based on Shannon's entropy [11]. The method is developed specially for microscopy images captured in phase-contrast mode [13]. 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.

# 1 Introduction

In physical chemistry, Gibbs (1876) [4] or Helmholtz (1882) [6] energy (later free energy) is the potential that characterizes the thermodynamic equilibrium. After recognition of quantum mechanics, this potential has been identified by maximum Boltzmann (or Gibbs) entropy (Boltzmann 1896) [1], which is the true beginning of statistical physics. This was eventually generalized as Maximum entropy principle (Jaynes 1957) [10] who proposed identification of Gibbs-Boltzmann entropy and statistical entropy.

J. Urban · J. Vaněk (⊠) · D. Štys

Institute of Physical Biology, University of South Bohemia, Zámek 136, 373 33 Nové Hrady, Czech Republic, e-mail: stys@jcu.cz

J. Urban e-mail: urban@greentech.cz

J. Vaněk e-mail: vanekyj@kky.zcu.cz

This work was supported by grant HCTFOOD A/CZ0046/1/0008 of EEA funds and GAJU grant  $091/2008/{\rm P}$  of Grant agency of South Bohemia.

In experimental practice of chemistry–and in Physical chemistry textbooks–the free energy is often approximated by logarithm of concentration. This approximation–from experimental chemist point of view–comes from ideal gas equation and brings about endless problems in any system obeying generals state equations. For this reason, activity and activity coefficient were introduced. In the field of statistical thermodynamics the use of Gibbs-Boltzmann-Shannon entropy is based on several assumptions on equality of probability distribution of individual states and is not general. Details of mathematical approaches and terminology should be sought in Renyi [10], Havrda and Charvat [5], Tsallis [12] and Jizba and Arimitsu [8]. Discussion of the equivalency of the experimentally measured data and underlying principles of statistical physics/information theory is very lively.

In experimental practice of biology, but also meteorology, economy etc., we deal with time development of asymptotically stable objects. We build models of dynamic behavior of these objects. In biology the models are based on multitude of observation from biochemistry and molecular biology. The metabolic and signal pathways substantiate the non-linear dynamic processes [9] which are responsible for asymptotic stability of biological systems.

Metabolic pathways are often constructed from biochemical data in which some standard enzyme reaction mechanism is assumed. Knowledge of signal pathways is based on molecular biology data which are often relatively non-quantitative and sometimes fuzzy due to existence of conflicting processes. These models aim to explain molecular data but do not aim to implicate any information about cellular, multicellular or sub-cellular structures. These spatial objects, non-stable pathways (apart from fundamental pathways such as energetic metabolism) are the essence of biology, the elementary asymptotically stable objects to be studied.

Equilibrium objects closest to biological structures are lipid vesicles. The cellular membranes and intracellular structures are traditionally expected to be "complex lipid vesicles" in which lateral domains are formed by "immiscible" mixtures of lipids and proteins eventually forming complicated structures which are observed by the microscope. However, formation of complicated three-dimensional structures of various shapes was also obtained using a relatively simple pseudo-chemical agent-based non-equilibrium model [2]. Not surprisingly, these structures are formed under the conditions of maximization of Renyi entropy [3].

After all, various intracellular pathways and formation of three-dimensional structures should be two faces of the same process. In analogy to equilibrium thermodynamics we may say that pathways are analogues to concentrations while the spatial objects are analogues to phases. Phase equilibrium is the most typical case for equilibrium based on Gibbs energy identity in each of the components.

In this article we deal mainly with information content of data obtained from experiments relevant to systems biology. These are various -omic data of which most relevant are metabolomic and proteomic sets and cell biology-time-lapse experiments. For metabolomics and proteomics the most specific, comprehensive and in the same time reasonably quantitative, datasets are obtained by liquid chromatography combined with mass spectrometry. The time lapse microscopy has got major branches in fluorescence microscopy which intents to follow a singular process in the cell (intracellular biochemistry) and contrast enhancement based observation of cell fates [15, 16].

In this article we summarise results of the objective analysis of critical steps in both above mentioned types of experiments and propose generic approach and presents a novel method of entropy fluxes as the evaluation of changes between images based on entropy contribution [13]. The method is developed a specially for microscopy images captured in phase-contrast mode. 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.

#### 2 Human cell monolayer

Monolayer of human cells-often vaguely referred as tissue culture-is the simplest approximation to model of an organ from which the cells originate. From a small number of cells the culture is allowed to develop into monolayer and this process is observed under the microscope by a series of camera shots, confocal microscope fluorescence readouts etc. We discuss results of time-lapse microscopy in which phase-contrast images [15, 16] of tissue culture are recorded by camera at certain time instants.

As argued in the introduction, it is rather probable that the structures observe din microscope their shape and size are the representative parameter characterizing cell behavior. In another words, it is probably the shape and size of the cell compartment which defines the state. Unfortunately, the automated detection tools are capable to detect only simplest cell shapes, work robust in unicellular microorganism like yeast. Complex cell shapes of human tissue cultures represent incomparably more complicated problem. Some of the shapes have names assigned in biological terminology, they may be classified as phenomenological attributes and variables  $a_{f,I}$  resp.  $v_{f,I}$ . The analysis of these complex samples thus relies in most cases on work of human operator.

The simplest, and most obvious, trajectory, is the cell cycle, which may be characterized by time between cell divisions. Many other features may be observed but are not recorded. The phenomenological analysis give conclusion that there is much more information in the dataset than skilled operator may register. There is clear need for automated tools. For the analysis of experiment may be naturally used the generalized stochastic systems theory developed for cybernetic purposes by Zampa (2004) [17]. There is apparently no more instructive model for the probabilistic causal system in the nature than cell monolayer. The universum of the system is formed by cells, information bonds are various forms of intracellular communication, i.e. information exchange in direct contact, information send by communication metabolites and other forms of medium-range communication such as pseudopodia in HeLa cell cultures.

#### 2.1 Probabilities and entropy calculation

In practice of the biological experiments we would to gain adequate information, to be able to define objectively the cell state and predict its behavior. In the most striking example of medicine this is exact definition of objective diagnosis. To achieve this we need a criterion how to infer the trajectory elements, trajectories and their probabilities from a real experiment. In Cybulski et al. 2006 it was shown, that in a pseudo-chemical process, the stability of structures was achieved under the criterion of maximization of Renyi entropy flux. Stability of biological structures also means maximal generalized entropy flux in the system. And this is reflected in our experimental results. We propose that steady behavior (i.e. increase or decrease) of Renyi entropy as the rule which allows us to infer causal relations in the system from observed data.

A real problem is that ergodicity assumption is (most probably) not satisfied. This is not a problem for stochastic systems theory but it may be problem if we want to use inferred probabilities for entropy calculation and draw generalized conclusions. The assumption that the underlying process in biology is a continuous chaotic attractor justifies the use of the recipe proposed by Vattay [14]. The derivation is based on the fact that trajectories in the dynamical system may be characterized by a set of symbolic sequences indicating the asymptotically stable regions of the state space which are visited in the particular trajectory. These symbols define the generating Markov partition. Each causal relation, i.e each of the observed tuples of complete immediate cause and its consequence, is classifyable cells state and candidate for asymptotically stable state in the cell chaotic attractor trajectory and (b) probabilities of transitions between individual state constitute symbolic trajectory to which probability may be attributed. Thus event does have its precise meaning in the nonlinear dynamic theory terminology. In practice of the experiment we usually do not have ultimate criterion for construction of trajectories whose probabilities we search. We stop the analysis when we are not able to dissect the state trajectory any further. We identify observed probabilities transfer of the system from one identifiable state to the next one

$$P_{i,j} \in P$$

with probabilities for the generating set. The above mentioned analysis thus gives us complete apparatus for definition of state changes–or, in our terminology, event, probability  $P_l$  given by

$$P_l = \prod_{i=0}^m P_{l,i}$$

From which we may directly derive any form of entropy, for example the Shannon entropy

$$S = \sum_{1}^{n} P_l \ln P_l$$

where n is number of distinct events.

The assumption is that there is a steady behavior of the flux of appropriate information entropy. But it is computationally extremely intensive in itself and, mainly, highly dependent on proper experiment technical analysis.

#### 3 Entropy flux

In the image analysis, we are able to measure the information as Shannon's entropy where instead of unknown probability distribution is used normalised histogram function H(v). Therefore, probability  $p_v$  of event v means amount of pixels in the image (or selected part of the image) with intensity value assigned to the event v. This amount is divided by the total amount of pixel in the image (or selected part of the image) to fulfil the condition  $\sum p_v = 1$ .

In the pixel contribution to the information content [13] is computed individual Shannon's entropy for each pixel f(i, j) in the image. Cross of the whole row i and whole column j in the image, where the current pixel position is located, was chosen as part of the image. But, there should be any type and size of selected part for pixel contribution computation, depended somehow on the objects in the image(s). The value of pixel f(i, j) is counted only once.

During evaluation of pixel contribution is counted difference between entropy of selected part with current pixel and entropy of the same selected part without current pixel. Resulted value is the measure of current pixel contribution to the entropy of selected part of image. The histogram function for the cross with centre pixel is

$$H(\nu)_{(i,j)} = H(\nu)_i + H(\nu)_j h(\nu)_{(i,j)}.$$

And the histogram function without the center pixel is

$$H(\nu)_{(i,j)} = H(\nu)_i + H(\nu)_j 2h(\nu)_{(i,j)}$$

where  $H(\nu)_i$  and  $H(\nu)_i$  are precomputed histograms of row i and column j, respectively.

For computation of changes between two images, we propose computation of two entropy values, based on entropy contribution evaluation [13]. Entropy flux on the current pixel position (i, j) is the difference between entropy of selected part with current pixel and entropy of the same selected part where current pixel value f(i, j, t)is replaced by value in the next image f(i, j, t + 1). It computes, how important was the change of this pixel for the selected part of the image. The entropy flux we define as

$$EF_{i,j} = \left(-\sum_{v} \left\lceil h_v \log_2 h_v \right\rceil\right) - \left(-\sum_{w} \left\lceil h_w \log_2 h_w \right\rceil\right), \tag{3.1}$$

where the first part means the entropy with current pixel and the second part means the entropy where the center pixel was replaced by value from the next image.

#### 4 Results

Evaluation of equation (3.1) for every pixel in the image will produce the 3D map of entropy fluxes, where positive values mean information transferred from the position (with these positive values) in the image and negative values mean information transferred to the position. The sum of negative and positive values is not necessary zero, because of cell growth, move out of focus, discrete time of image capturing or noise.

Produced 3D map should be normalized to grayscale image, where the previous zero level is approximately in the middle of gray range (see Fig. 4.1). Output image represents entropy flux for each pixels between two images. The entropy flows from the light pixels to the the darks and nothing changed on the gray pixels (mostly background).

For better visualization should be image also shown in false colors with morphological reconstruction [16]. This method comes from simple idea to examine one pixel importance, but it is very useful to locate the area of image(s) where 'something' happened.

Entropy fluxes computed for large set of images may select (with chosen threshold) the subset of images worth for further analysis, especially in biological microphotography (thousand of images per one experiment). Disadvantage of the approach lies only in extremely huge amount of computation. It requires histogram functions for each row and each column, and two sums of logarithms for each pixel. Fortunately, the calculations are semi-independent.

# 5 Optimisation of implementation on GPU

The algorithm described above gives a very good results but its time-consumption is huge. Computation of a series of logarithms for all combinations of rows and columns is the main cause. Some much faster implementation was needed for practical usability of our algorithm. With the increasing programmability of commodity graphics processing units (GPUs), these chips are capable of performing more than the specific graphics computations for which they were designed. In our task–entropy flux calculation–the data parallelisation is strait-forward as well as in other image processing tasks where pixels can be evaluated independently. If the histograms for all rows and all columns are precomputed, the algorithm for single pixel is following:

- Load and add the histograms of row i and column j.
- Normalise histogram.
- Compute entropy value with current pixel.
- Load pixel values from the current as well as the next-image pixel.
- Subtract the current pixel values and add the next-image pixel values from the histogram.
- Compute entropy value with next-image pixel.
- Store the resulted entropy difference into device memory.

Before entropy computation itself, the histograms are pre-computed. Each pixel of the image represents one block of the grid. In each grid 128 threads are executed. The histogram vectors are 256 long, therefore the entropy intra-sum-values are computed in two steps. The sum itself is calculated in semi-parallel manner in seven steps. The optimization of implementation in CUDA is not trivial but the performance could be highly affected by non-optimal implementation.

Times of processing 2Mpix and 6Mpix images and cumulative speed-ups for all implementations are shown in Table 1. All tests were done on computer with INTEL CORE2DUO 2.4GHz CPU and NVIDIA GEFORCE 9800GTX+ GPU. CPU times assume single-core versions. The total speed-up of the processing is about  $3600 \times$  with this configuration. So what used to take hours before, now cause come in matter of seconds.



Fig. 4.1 Entropy flux on cell small motion.



Fig. 4.2 Entropy flux in false colours, red for entropy decrease, green for entropy increase, blue for no change.

### 6 Conclusion

Useful extension of pixel contribution based on Shannon's entropy was described for purpose of human cell monolayer state description. Our approach of entropy fluxes allows to identify the location in the image set with relevant changes of information content. Used equation is very simple, but computational time for each pixel is timeconsuming. The refore, we propose to using parallelisation on graphics cards. Finally, optimization of the algorithm was described and enormous speed-up was achieved. The alghorithm should be used for other images with objects on moreless simple background.

#### References

- 1. L. Boltzmann: Vorlesungen über Gastheorie, 2. Volumes, Leipzig 1895/98. 170
- O. Cybulski, R. Holyst: Three-dimensional space partition based on the first Laplacian eigenvalues in cells, Physical Rev. E., 77, 05601 (2008). 171
- O. Cybulski, D. Matysiak, V. Babin and R. Holyst: Pattern formation in nonextensive thermodynamics: Selection criterion based on the Renyi entropy production, J. Chem. Phys., 122, 174105 (2008). 171
- W. Gibbs: On the Equilibrium of Heterogeneous Substances, Transactions of the Connecticut Academy, III. pp. 108–248, Oct., 1875-May, 1876, and pp. 343–524, May, 1877-July, 1878. 170
- J. Havrda, P. Charvát: Quantification method of classification processes: Concept of structural a-entropy, Kybernetica, 1 (1967) 30–35. 171
- 6. H. V. Helmholtz: Wissenschaftliche Abhandlungen, Vol. I. Leipzig, 1882. 170
- E. T. Jaynes: Information The ory and Statistical Mechanics, Physical Review, Volume 106, 4 (May 1957), pp. 620–630.
- P. Jizba, T. Arimitsu: The world according to Renyi: The rmodynamics of multifractal systems, Ann. Phys., 312 (2004), pp. 17–59. 171
- 9. K. Kaneko: Life: An Introduction to Complex Systems Biology, Springer, 2006. 171
- A. Rényi: On measures of information and entropy, Proceedings of the 4th Berkeley Symposium on Mathematics, Statistics and Probability (1960) pp. 547–561. 170, 171

- C. E. Shannon: A mathematical theory of communication, Bell System Technical Journal, vol. 27, pp.379–423 and 623–656, July and October, 1948. 170
- C. Tsallis: Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics, Journal of Statistical Physics, vol. 52 (1988), pp. 479–487. 171
- J. Urban, J. Vanek, D. Stys: Preprocessing of microscopy images via Shannon's entropy, Pattern Recognition and Information Processing, Minsk, Belarus, 2009. 170, 172, 173, 174
- G. Vattay: The rmodynamic formalism in. P. Cvitannovič, R. Artuso, R. Mainieri, G. Tanner and G. Vattay, Chaos: Classical and Quantum, Niels Bohr Institute, Copenhagen, 2008, http://chaosbook.org/version12. 173
- F. Zernike: Phase-contrast a new method for microscopic observation of transparent objects, Part I., Physica: 9 (1942) pp. 686–698. 171, 172
- F. Zernike: Phase-contrast, a new method for microscopic observation of transparent objects, Part II., Physica: 9 (1942) pp. 974–986. 171, 172, 174
- P. Žampa: The principle and the law of causality in a new approach to system theory, Cybernetics and Systems, Vienna: Austrian Society for Cybernetics Studies, pp. 3–8, 2004. 172



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

# Metody a nástroje hodnocení vlivu inženýrských bariér na vzdálené interakce v prostředí hlubinného úložiště

Michal Vaněček · Martin Milický · Jiří Záruba

Abstrakt 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 geologicalprospecting 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.

M. Vaněček

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

M. Milický ProGeo, s. r. o., Tiché údolí 113, 252 63 Roztoky u Prahy, Česká republika

J. Záruba ARCADIS Geotechnika, Geologická 988, 152 00 Praha 5, Česká republika

D. Trpkošová (⊠) e-mail: dtrpkosova@isatech.cz

Práce byla podpořena Ministerstvem průmyslu a obchodu České Republiky v rámci projektu 1H-PK/31.
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.

# 1 Úvod

Procesy proudění podzemní vody a transportu kontaminantů podzemní vodou v prostředí krystalinických horninových formací se svým charakterem výrazně odlišují od procesů probíhajících v prostorech sedimentárních pánví. Horninové prostředí hydrogeologických masivů se z hlediska proudění a transportu projevuje jako silně heterogenní a anisotropní. Znalosti, prostředky a metodické postupy pro řešení hydrogeologické problematiky prostředí puklinových formací dosud nejsou na úrovni analytických nástrojů běžně užívaných pro hydrogeologické interpretace v prostředí s průlinovou propustností.

Téma projektu vyplývá ze společenské potřeby řešení bezpečného a dlouhodobého uložení radioaktivního odpadu v horninovém prostředí. Hydrogeologický masiv splňuje velmi dobře nároky na bezpečnost zásobníků plynu, paliv a současně i úložišť odpadů včetně vysoce aktivního vyhořelého jaderného paliva. Právě generelně nízká propustnost masivů je ideální vlastností pro jejich budování. Významným limitujícím faktorem v tomto směru je tektonické porušení hornin masivů, které představuje hlavní rizikový faktor pro realizaci takových úložišť. Jedním z analytických nástrojů pro syntetické hodnocení hydrogeologických vlastností puklinových sítí a zón je matematické modelování.

Pro potřeby popisu vlastností puklinového prostředí a možnosti predikce vývoje hydraulických procesů bylo nutné vyvinout aplikace a postupy postavené na odlišném základě, než tomu je v prostředí s dominantní průlinovou porozitou. Jedním z hlavních cílů tohoto projektu je najít a optimalizovat pracovní postup pro modelové simulace puklinového prostředí a ověřit schopnost predikovat vliv aplikovaných inženýrských bariér na migrační parametry zvodnělých puklinových systémů nesedimentárních hornin pomocí numerického modelování. Předložený příspěvek se zabývá definováním matematického modelu prostředí s vyvinutým rozsáhlým puklinovým systémem.

# 2 Popis lokality

Na základě geologického a strukturně-geologického mapování byl vymezen zájmový polygon v žulovém lomu v katastru obce Panské Dubénky. Obec Panské Dubénky

leží v jihozápadní části okresu Jihlava, v kraji Vysočina. Zájmové území je budováno středně zrnitým dvojslídným granitem s proměnlivým obsahem vyrostlic živců. Do vybraného polygonu o rozměrech cca  $10 \times 10$  m byla situována většina terénních zkoušek.

#### 3 Geometrický model puklinové sítě

První údaje o rozpukanosti horninového prostředí v lomu na lokalitě Panské Dubénky poskytla geofyzikální měření. Geofyzikální měření provedená mělkou seismikou a geofyzikálním radarem identifikovala dvě hlavní zóny zeslabení v hloubkách cca 4 a 8 metrů pod povrchem s vertikálním posunem na jedné vertikální tektonické linii.

V průběhu přípravných terénních prací bylo provedeno strukturně-geologické mapování tektonických linií na celé lomové stěně těžebny [3]. V doméně modelového polygonu byly detekovány čtyři soubory extenzních puklin, jeden subhorizontální, jeden ukloněný a dva subvertikální. Pro sestavení geometrického modelu puklinové sítě v zájmovém polygonu bylo nezbytné provést další zaměření významných konkrétních tektonických linií patrných na povrchu vymezeného území. Kromě téměř horizontálních puklin bylo na obnaženém povrchu terénu možné bezpečně identifikovat 8 tektonických subvertikálních linií. Z analogie puklin stejných směrů a sklonů na lomové stěně ve vyšších i nižších etážích lomu bylo možné vytvořit předpoklad, že tyto pukliny procházení celou mocností horninového bloku vymezeného hloubkovým dosahem vrtů. Tyto pukliny byly při sestavení geometrického modelu využity pro rozdělení sítě subhorizontálních puklin do jednotlivých bloků.

V rámci terénních prací bylo v zájmovém polygonu odvrtáno 14 vrtů s hloubkami 2.9 až 8.55 m. Dva vrty byly odvrtány rotačně příklepovým systémem bez stativu a zbylých dvanáct rotačním vrtáním na jádro. Průměr vrtání byl stanoven na hodnotu 76 mm tak, aby bylo možné vrty instrumentovat měřícími sondami při hydraulických a migračních testech. Jedna z analýz zájmového puklinového prostoru je založena na popisu vrtných jader. Tyto jádra dávají určitou představu o lokalizaci puklinových ploch v jednotlivých vrtech a jejich případné výplni.

Za účelem měření rozevřenosti puklin byla jedna ze speciálně zkonstruovaných kamer doplněna zrcadlovým hranolem, který umožňuje kontrastní pohled na stěnu vrtu. Jelikož pohled je vždy ze stejné vzdálenosti je možné změřit relativně přesně rozevřenost pukliny a dále sledovat případné výrony hydrooxidů železa (limonitu) a ve vzácnějších případech i minerální výplň.

Provedené terénní testy, měření a pozorování poskytly dostatečné množství vstupních informací pro sestavení podrobného diskrétního geometrického modelu deterministických puklin v testovaném polygonu. Výsledný geometrický model je tvořen 12 subhorizontálními (mírně ukloněnými) a 10 subvertikalními a ukloněnými plochami (obr. 3.1). V geometrickém modelu jsou jednotlivé pukliny interpretovány jako obecné plochy. Při dalším zpracování problematiky do formy hydrogeologických modelů bude nezbytné tuto síť dále upravit.

# 4 Hydrogeologický model

V geometrickém modelu mají všechny pukliny konstantní hydraulické rozevření, pro jeho převedení na model hydrogeologický je nutné vhodně doplnit hydraulické a transportní parametry k jednotlivým puklinám.



Obrázek 3.1 Geometrický model diskrétní puklinové sítě.

# 4.1 Plochy porušení v aplikaci NAPSAC

Jako program pro numerické modelování byl zvolen program NAPSAC. NAPSAC je sofistikovaná modelová aplikace, která je speciálně navržena pro řešení proudění a transportu v diskrétních puklinových sítích.

Program NAPSAC umožňuje zadávat hydraulicky vodivé plochy do simulace dvěma způsoby. Prvním z nich je možnost zadávání obecných ploch, které jsou zadávány pomocí sjednocení určitého počtu rovinných ploch trojúhelníkového tvaru. To umožňuje věrnou simulaci puklin, ale naráží se na omezení daná složitějším výpočetním aparátem. Proto byl použit druhý způsob, který vyžaduje větší konceptualizaci problému, ale je efektivnější. V tomto případě se zadávají diskrétní puklinové plochy pomocí čtvercových nebo obdélníkových obecně orientovaných rovin. Nevýhodou této metody je její menší přesnost ve smyslu striktního dodržení lokalizace průsečíku puklinové sítě s vrty. Předpokládá se ale, že nepřesnost tohoto typu má malý vliv na přesnost výsledků hydrogeologického modelu.

# 4.2 Principy proudění v puklinovém prostředí

Proudění nestlačitelné Newtonovské kapaliny v puklině je popsáno nelineárními Navier-Stokesovými rovnicemi. Navier-Stokesovy rovnice lze v karteziánském souřadnicovém systému zapsat

$$\rho\left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + \sum_{j=1}^3 u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right) = \frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} + f_i , \qquad (4.1)$$

kde  $i = 1, 2, 3, \rho$  je hustota kapaliny,  $u = (u_1, u_2, u_3)$  je vektor rychlosti proudění, t je čas, p je tlak,  $\mu$  je první koeficient viskozity a f je hustota objemových sil. Řešit tuto

rovnici ve složité geometrii puklin se ukázalo jako prakticky nemožné, a proto je třeba ji pro praktické použití zjednodušit. Výsledkem tohoto zjednodušení je takzvaný Poiseuilleův vzorec, který charakterizuje specifický průtok puklinou, což znamená průtok příčkou pukliny kolmou ke směru proudění v puklině. Tento vzorec je často označován jako kubický zákon a lze jej zapsat

$$q = \frac{d^3}{12\mu} \left( \nabla p + \rho g \nabla z \right) \,, \tag{4.2}$$

kde d je rozevření pukliny (délka příčky, přes kterou se počítá průtok),  $\mu$  je dynamická viskozita tekutiny, p je tlak tekutiny uvnitř pukliny,  $\rho$  je hustota proudící tekutiny, g je gravitační zrychlení a z je svisle vzhůru orientovaná souřadnice. Tato rovnice se řeší v kombinaci s rovnicí kontinuity, kterou lze v případě nestlačitelné kapaliny napsat jako

$$\nabla \cdot q = 0. \tag{4.3}$$

Rovnice vzniklá kombinací předešlých rovnic (4.2) a (4.3) představuje základní řídící rovnici pro proudění v prostředí puklin a lze ji napsat ve tvaru

$$-\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{d^3}{12\mu} \left( \frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho g \frac{\partial z}{\partial x_i} \right) \right) = 0.$$
(4.4)

Numerické řešení hydrodynamických procesů v programech vycházejících z konceptu diskrétní puklinové sítě (např. program NAPSAC) je založeno na předpokladu, že veškeré proudění se odehrává v puklinové síti. Pórové prostředí horniny není v tomto případě uvažováno.

#### 4.3 Koncepční model

#### Definování modelové oblasti

V případě terénních prací je testovaná oblast vymezena pomocí polygonu. Všechna měření (s výjimkou úvodních popisných prací) byla soustředěna do prostoru tohoto polygonu. Na základě výsledků hydraulických testů na dvojicích vrtů je možné se domnívat, že omezení obsahu modelu na zkoumaný polygon a jeho bezprostřední okolí (cca 3–4 m za hranici polygonu) je dostatečné.

Limitujícím faktorem pro možnost potenciálního rozšíření modelové domény je nedostatek dat týkajících se vnějších (povrch) a hlavně vnitřních (puklinová síť) geometrických parametrů. Vzhledem k nedostatku údajů o puklinové síti nad hladinou podzemní vody a pod úrovní hloubkového dosahu vrtů byla modelová doména vertikálně omezena na 13 m (v rozsahu 87–100 m v relativním výškovém souřadnicovém systému). Plošně byla modelová oblast rozšířena tak, aby bylo možné zadat okrajové podmínky v hydrogeologickém modelu v dostatečné vzdálenosti od krajních testovaných vrtů v polygonu. Plošný rozsah má modelová doména 22 × 22 m a vymezený polygon je v jejím středu. Finální modelová oblast má tedy tvar jednoduchého kvádru se čtvercovou podstavou.

# Okrajové podmínky

Vzhledem k malému rozsahu testovacího polygonu vymezeného v zájmovém území bylo možné na základě výsledků terénních prací dobře popsat puklinovou síť. Stanovení okrajových podmínek pro malou oblast, která je součástí většího celku, je však poměrně problematické. Nebylo možné provést žádný test, který by pomohl specifikovat okrajové podmínky na hranicích testovacího polygonu, nebo kterým by bylo možné stanovit vodní bilanci zájmové domény. Hlavním vodítkem pro stanovení okrajových podmínek byly jednak měřené hladiny ve vrtech v přirozeném režimu a jednak časový průběh hladin podzemní vody v jednotlivých vrtech při čerpací zkoušce. Z těchto měření bylo možné do určité míry stanovit, přibližnou úroveň hladiny podzemní vody na jednotlivých částech hranice modelové oblasti, při zjednodušujícím předpokladu, že úroveň hydraulické výšky je stejná v celém vertikálním profilu určitého úseku hranice polygonu.

Na vertikální hranice modelové domény byla aplikována Neumanova okrajová podmínka konstantního průtoku. Tato okrajová podmínka zajišťuje přítok podzemní vody do modelové domény. Jedná se o určité zjednodušení problematiky, protože nelze předpokládat, že by přítok přes hranici zůstával po celou dobu hydraulických zkoušek zcela konstantní. Vzhledem k tomu, že čerpané a vtláčené množství při provádění C-H testů (kapitola 4.4.) nebylo příliš vysoké, lze však předpokládat, že změna průtoku přes hranice oblasti nebyla příliš významná. Míra velikosti přítoku přes jednotlivé části hranice modelové oblasti byla stanovena s respektováním úrovně hladiny podzemní vody ve vrtech v přirozeném režimu proudění.

Odtok podzemní vody z modelové domény je zajištěn Dirichletovou okrajovou podmínku konstantní tlakové výšky umístěnou na pozici vrtu č. 7 (přibližně střed polygonu, obr. 5.1), kde je zjištěna trvale nejnižší hladina podzemní vody v testovacím polygonu. Přítoky přes jednotlivé části hranice modelu byly kalibrovány tak, aby hladiny v ostatních vrtech v simulaci co nejlépe odpovídaly měřeným hodnotám hladiny podzemní vody.

Při modelové simulaci v programu NAPSAC jsou vrty simulovány pomocí inženýrských objektů typu studna. Modelové souřadnice vrtů jsou zadány na základě geode-



Obrázek 4.1 Schéma instrumentace C-H testů.

tických měření a hloubka vrtů podle údajů získaných při jejich realizaci.

Okrajové podmínky [2] byly nastaveny stejně pro všechny simulace C-H testů. V případě dalších simulací, jako je simulace přirozeného režimu nebo simulace čerpací zkoušky, je třeba na základě výsledků kalibrace hydraulického rozevření puklinové sítě stanovit nové okrajové podmínky odpovídající danému hydraulickému stavu systému.

Stanovení okrajových podmínek touto metodou je zatížené chybou, která byla způsobena neznalostí hydraulického rozevření jednotlivých puklin v této fázi sestavení hydrogeologického modelu. Rozevření všech subhorizontálních puklin modelu bylo nastaveno na konstantní hodnotu 1 mm a u subvertikálních byla nastavena hodnota rozevření 0.5 mm. Kalibrované hodnoty rozevření při simulaci C-H testů jsou tedy vztaženy k těmto okrajovým podmínkám. Okrajové podmínky stanovené na hranici modelové domény mají ale menší vliv na výsledky simulací, než okrajové podmínky dané instrumentací jednotlivých testů. Stanovené velikosti přítoků do modelové oblasti tedy nemusí zcela odpovídat realitě, jsou ale dostačující pro další kalibraci puklinové sítě podle výsledků C-H testů.

#### 4.4 Cross-hole testy

Velmi důležité informace o geometrii a hydraulických a transportních vlastnostech puklinové sítě v zájmovém polygonu byly poskytnuty při testech na dvojicích vrtů [1, 2]. Tyto testy označované jako cross-hole testy (C-H testy) byly provedeny při umělém konstantním hydraulickém gradientu. Vzhledem k relativně velkému průtoku vody puklinami při umělém gradientu bylo třeba zvolit instrumentaci testu tak, aby bylo možné využívat podzemní vodu čerpanou přímo z analyzovaného puklinového systému. Schéma a instrumentace C-H testu s částečně uzavřeným oběhem podzemní vody, obturátorem a detekčními kamerami je uvedeno na obr. 4.1.

Při C-H testech bylo nejprve zahájeno čerpání podzemní vody z pozorovacího vrtu a její současné vtláčení do úseku vymezeného obturátorem v injekčním vrtu. Po ustálení hladiny podzemní vody v obou objektech (které bylo ověřeno pomocí instalovaných tlakových čidel) byl do injektované vody vstříknut omezený objem stopovače (Na-fluorescein). Vymývání barviva v injekčním vrtu bylo sledováno a zaznamenáváno pomocí kamery pracující v UV spektru světla. Zároveň bylo prováděno sledování a záznam signálu tří kamer instalovaných v čerpacím vrtu. Tyto kamery zaznamenaly lokalizaci a okamžik přítoku stopovače do pozorovacího vrtu. Tak bylo možné identifikovat hydraulické propojení testované dvojice vrtů konkrétní puklinou v podmínkách stacionárního režimu proudění. Díky kalibraci kamer vzhledem ke koncentraci barviva je navíc možné do určité míry bilančně analyzovat získanou průnikovou křivku.

#### 4.5 Kalibrace puklinové sítě

Pro kalibraci parametrů puklinové sítě byly využity výsledky C-H testů jednotlivých dvojic vrtů. Vzhledem k rozsahu puklinové sítě, jejímu propojení a charakteru výsledků testů nebylo možné kalibrovat celou puklinovou síň najednou v jednom kroku. Proto byla zvolena metoda, kdy byly postupně laděny parametry určité části sítě (jednot-livé pukliny, jejich dvojice, nebo trojice) na základě výsledků konkrétního C-H testu v kontextu celé puklinové sítě bez ohledu na parametry puklin mimo vymezenou část. Protože hydraulické parametry puklinové sítě mimo vymezenou oblast značně ovlivňují hydraulické a transportní procesy v aktuálně laděné oblasti, je třeba proces kalibrace

v každé dílčí části sítě několikrát opakovat v závislosti na změnách parametrů v ostatních částech domény kalibrovaných postupně a na základě výsledků ostatních C-H testů. Schéma postupu kalibrace sítě je uvedeno na obr. 4.2.



Obrázek 4.2 Schéma postupu kalibrace puklinové sítě.

Kalibrace modelu pomocí tohoto cyklického způsobu je založena na předpokladu, že se rozdíl hodnoty kalibrovaného parametru současného a předchozího kalibračního kroku pro jednotlivé dílčí oblasti neustále snižuje. Po určitém počtu kalibračních kroků je změna kalibrovaného parametru dostatečně malá, aby mohl být proces označený za "zkonvergovaný". Podmínkou bylo zachování stejných okrajových podmínek pro všechny kalibrační kroky. V případě kalibrace modelu testovací domény pomocí výsledků C-H testů byla puklinová síť rozdělena do 18 podoblastí. K naladění hydraulických parametrů sítě bylo nezbytné provést 5 kalibračních kroků. Pro kalibraci hydraulického modelu bylo tedy třeba provést 90 dílčích simulací.

Při kalibraci modelové sítě byla na základě výsledku testů laděna hodnota středního hydraulického rozevření (nebyly data pro představu o variabilitě rozevření) každé z puklin zadaných do modelu. Každá puklina byla pro potřebu lepší stability a vyšší přesnosti výpočtu diskretizována na určitý počet nižších puklinových ploch s rozměrem  $0.5 \times 0.5$  m.

Střední hodnota hydraulického rozevření pukliny byla kalibrována na základě porovnávání modelového a měřeného průtoku při ustáleném režimu proudění (konstantní hydraulický gradient při konkrétním C-H testu). Dalším kalibračním parametrem, který byl brán v úvahu, byl čas průtoku stopovače mezi testovanými vrty. Porovnání měřeného a modelového průnikového času stopovače však bylo (vzhledem k výše uvedeným nedostatkům řešení transportu při použité koncepci) využito spíše jako pomocného parametru, který doplňoval a ověřoval kalibraci rozevření podle průtoků. Při kalibraci byly dále sledovány trajektorie částic, především místo jejich odtoku okrajovou podmínkou (průsečík pukliny a čerpaného vrtu), které bylo porovnáváno s výsledky barvících pokusů při C-H testech (detekce stopovače kamerou v puklině čerpaného vrtu).

Pro kalibrace puklinové sítě bylo použito osmnáct C-H testů, čtyři C-H testy byly použity pro její verifikaci. Na následujícím příkladu je ukázána shoda mezi měřeným a modelovaným stavem mezi vrty 5 a 12 (tab. 4.1).

Při tomto testu je předpokládána vzájemná hydraulická komunikace vrtů 12 a 5 v rámci jedné subhorizontální pukliny. Kalibrací numerického modelu na průtok měřený při hydrodynamickém testu byla stanovena hodnota hydraulického rozevření pukliny 0.84 mm. Rozdíl hladin mezi vtláčecím a čerpaným vrtem byl 0.15 m. Simulovaný průnik stopovače kalibrovanou puklinou s konstantním rozevřením odpovídá měřeným hodnotám.

**Tabulka 4.1** Přehled C-H testu 23 – výsledná kalibrovaná hodnota hydraulického rozevření a porovnání měřených a kalibrovaných hodnot průtoku a průnikové doby stopovače.

C-H test		23
Z vrtu (pukliny) – do vrtu (pukliny)	12 (90.74) - 5 (91.01)	
Kalibrovaná hodnota rozevření	0.84	
Průtok [l/s]	Kalibrace	0.0558
	Hydrodynamický test	0.0558
Čas průtoku stopovače do pukliny	Kalibrace	0.3
[min]	C-H test	0.28

#### 5 Výsledky a diskuze

Opakovanými simulacemi C-H testů bylo stanoveno rozevření jednotlivých puklin modelové sítě, které se podílí, podle přijaté předpokládané koncepce proudění podzemní vody v puklinové síti zájmového území, na vedení vody a transportu stopovače mezi testovanými dvojicemi vrtů [2]. Součástí simulované puklinové sítě je několik puklin, které se patrně významnějším způsobem nepodílí na proudění vody a transportu indikačního barviva v rámci provedených C-H testů. Tento předpoklad je založen na dominantním uplatnění nejkratší transportní dráhy mezi puklinovými průsečíky ve vrtech, mezi kterými byla zjištěna konektivita. Takový předpoklad je v rámci dostupných dat a přijaté konceptualizace řešeného problému přijatelný. Rozevření těchto puklin proto nebylo možné kalibrovat pomocí výsledků C-H testů. Těmto puklinám byly přiřazeny hodnoty hydraulického rozevření tak, aby odpovídaly celkové koncepci řešení (subhorizontální pukliny mají generelně větší rozevření než pukliny vertikální a ukloněné) a aby přítomnost těchto puklin výrazně neovlivňovala výsledky simulací jednotlivých C-H testů při zachování jejich potenciální hydraulické a transportní funkce.

Při převedení geometrického modelu na model hydrogeologický bylo třeba zvýšit počet subhorizontálních puklin z původních 12 na 20. Některé pukliny z geometrického modelu byly rozděleny při převedení obecných ploch na roviny a další pukliny musely být rozděleny a upraveny během kalibrace hydrogeologického modelu při simulacích jednotlivých C-H testů. Počet subvertikálních puklinových ploch v hydrogeologickém modelu zůstal stejný jako v modelu geometrickém, tzn. 10 puklin. Pukliny označené

jako V2a, V2b a V2c byly v hydrogeologickém modelu nejprve simulovány jako jedna puklina, ale v průběhu kalibrace bylo nezbytné tuto puklinu rozdělit na tři části s různými hydraulickými vlastnostmi (obr. 5.1).



**Obrázek 5.1** Vertikální a ukloněné pukliny v hydrogeologickém modelu v programu NA-PSAC.

# 6 Závěr

Sestavený geometrický model reprezentuje s jistou mírou generalizace reálnou puklinovou síť v zájmovém území a stupeň dosažené věrnosti považujeme za velmi dobrý. Realizace a základní vyhodnocení C-H testů umožnilo analyzovat konektivitu vrtů v zájmovém území. Provedení těchto testů umožnilo, spolu s analýzou směrů a sklonů puklinových ploch v zájmové oblasti, sestavení deterministické puklinové sítě tak, aby v co nevětší míře odpovídala reálné puklinové síti.

Výsledný hydrogeologický model bude použit pro jeden z hlavních cílů projektu, kterým je ověření schopnosti predikovat vliv aplikovaných inženýrských bariér na migrační parametry zvodnělých puklinových systémů nesedimentárních hornin pomocí numerického modelování.

# Reference

- 1. P. Nakládal: Panské Dubénky Měření průběhu a hydrodynamických parametrů puklinového prostředí. Praha, 2008. 184
- M. Polák, M. Milický, L. Gvoždík, J. Uhlík, O. Zeman, M. Chaloupková, J. Baier, M. Šouta, M. Vaněček: Kalibrace analogického modelu testovací lokality – Kalibrace hydraulického modelu puklinové sítě zájmové lokality. Dílčí zpráva. Progeo, Roztoky, 2008. 184, 186
- 3. M. Vaněček, M. Vaněček jr., K. Verner, J. Žák: Metody a nástroje hodnocení vlivu inženýrských bariér na vzdálené interakce v prostředí hlubinného úložiště. Etapa 2. Charakteristika geologických poměrů výzkumného pracoviště in-situ v žulovém lomu v Panských Dubenkách. Dílčí zpráva. Geoterm, Praha, 2005. 180



Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, TUL

# Použití analýzy hlavních komponent pro redukci dimenze reakčně-transportního modelu

Lukáš Zedek  $\cdot$  Jan Šembera

Abstrakt Tento článek se zabývá netradičním použitím v řadě oborů hojně používané analýzy hlavních komponent (PCA – Principal Component Analysis). PCA jsme využili pro redukci dimenze problému modelování reakčního transportu znečištění podzemní vodou. Tento příspěvek popisuje nejprve vektorovou interpretaci výsledků chemických analýz. Následuje popis postupu analýzy hlavních komponent a jejích možných modifikací. V poslední kapitole je popsána průmyslová aplikace popsaného použití analýzy hlavních komponent.

# 1 Úvod

Předmětem našeho zájmu je počítačová simulace reakčně-transportních jevů souvisejících s kontaminací půdy a podzemní vody chemikáliemi. Jedním z největších problémů, které se týkají simulace podzemního proudění, je její výpočetní a z toho plynoucí časová náročnost. Efektivita výpočtů může být zvýšena například využitím vhodných výpočetních algoritmů, vhodně zvolených numerických metod nebo zjednodušením matematického popisu problému. Tento příspěvek popisuje možnost zrychlení transportní části simulace prostřednictvím takového zjednodušení modelu, které zohlední požadavky pro reakční část modelu.

Čas výpočtu transportní části úlohy záleží na množství sledovaných chemických látek znečišťujících podzemní vodu. Pokud trvá výpočet příliš dlouho, jednou z možností jak čas výpočtu zkrátit je redukce dimenze modelovaného problému, tj. v našem případě např. snížení počtu sledovaných chemických látek. Protože při transportu

Tento projekt je realizován za podpory státních prostředků České republiky v rámci projektu VaV "Pokročilé sanační technologie a procesy" č. 1M0554 – program MŠMT "Výzkumná centra".

L. Zedek  $(\boxtimes) \cdot J$ . Šembera

Ústav nových technologií a aplikované informatiky, Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií, Technická univerzita v Liberci, Studentská 2, 461 17 Liberec 1, Česká republika

e-maily: jan.sembera@tul.cz · lukas.zedek@tul.cz

chemických látek podzemní vodou může docházet k chemickým reakcím, je důležité provádět redukci s ohledem na reakční část modelu.

Standardně používaný postup spočívá v rozřazení složek rozotku do dvou skupin. První ze skupin nese označení primární složky a druhá potom složky marginální. Látky v první skupině mají řídící vliv na průběh chemických reakcí, zatímco látky ze skupiny druhé mají na výsledek reakcí vliv pouze zanedbatelný. Třídění látek do obou zmíněných skupin musí provádět chemik, který je dobře obeznámen s hydrogeochemickou situací na modelem popisované lokalitě. Z důvodu různé míry vlivu primárních a marginálních látek na průběh reakcí je výpočet modelu s redukovanou dimenzí prováděný pouze s primárními látkami. Koncentrace marginálních látek mohou být vypočteny z výsledků zmíněným postupem zjednodušeného modelu. V případě, že vybrané marginální látky nejsou nebezpečné nebo modeláře prostě nezajímají, potom není nutné jejich koncentrace zpětně dopočítávat a informace o nich nemusí být vůbec uchovávána.

V [5] jsme navrhli odlišný postup zjednodušení transportní části problému. Tento postup vychází z odlišného pohledu na věc. Provedli jsme redukci dimenze problému založenou na postupu z lineární algebry. První výhodou této metody redukce dimenze problému je možnost minimalizovat ztrátu informace redukcí vyvolanou. Druhá výhoda spočívá v tom, že chemik, který u dříve představeného postupu musel dohlížet na celý proces simulace, od určení primárních chemikálií po verifikaci výsledků, je třeba právě a jenom v závěrečné fázi modelování, tj. vyhodnocení a ověření výsledků. Nevýhodou navrženého postupu je požadavek na velké množství analyzovaných dat, která musí navíc splňovat níže zmíněné požadavky.

Klíčová myšlenka navrženého postupu je popsána v kap. 2. Důležité informace pro chemickou interpretaci výsledků obsahuje druhá část kap. 4. Kapitola 5 představuje ukázku průmyslového použití navrženého postupu.

#### 2 Myšlenka redukce dimenze

Chemické analýzy ze sledované lokality mohou být popsány prostřednictvím vektorů jejichž dimenze odpovídá počtu sledovaných chemikálií. Počet chemikálií označme n. j-tá složka vektoru má význam koncentrace j-té chemické látky obsažené v analyzovaném roztoku. Všechny vektory popisující analyzované roztoky mají výhradně nezáporné složky a leží v n-rozměrném prostoru  $\mathbf{R}^{n}$  určeném standardní ortonormální bází  $\mathbf{B}$ .

Při popisu roztoků koncentracemi v nich rozpuštěných látek je k uložení informace o každé analýze třeba n reálných čísel. Na roztok se je však možné podívat jako na směs několika jiných tzv. bázových roztoků. Redukci je potom možno vnímat jako nalezení r (r < n) takových bázových roztoků (reprezentovaných lineárně nezávislými vektory) jejichž směsi (lineární kombinace vektorů s nezápornými koeficienty) dovolí s přijatelnou přesností aproximovat koncentrace v analyzovaných roztocích. Obrázek 2.1 ilustruje rozdíly v představených způsobech popisu a tím redukci dimenze problému ze n = 6 na r = 3.

Zmíněný způsob redukce dimenze může být uskutečněn transformací vektorů do *r*-rozměrného podprostoru původního prostoru  $\mathbf{R}^n$ . Pro určení *r*-rozměrného podprostoru je třeba určit jeho bázi  $\mathbf{V}_r$ :

$$\mathbf{V}_{r} = \begin{bmatrix} v_{1,1} \cdots v_{1,r} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{n,1} \cdots v_{n,r} \end{bmatrix}, \qquad n > r.$$



Obrázek 2.1 Dva rozdílné způsoby popisu roztoku

#### 3 Definice problému

Pro další popis a použití popisované metody předpokládáme, že jsou k dispozici výsledky chemických analýz podzemní vody ze zkoumané lokality. Zpracovávané výsledky takovýchto analýz by měly tvořit reprezentativní statistický vzorek chemického složení roztoků odebraných v různých časech a na různých místech lokality. Z výsledků analýz je sestavena takzvaná matice zdrojových dat (3.1). Matice zdrojových dat je tvořena sloupcovými vektory, jejichž složky jsou výsledky chemických analýz podzemní vody (tj. koncentrace rozpuštěných látek). Každý řádek matice zdrojových dat tak odpovídá koncentracím jedné sledované složky vodného roztoku. Dále předpokládejme, že anylýz bylo provedeno m a počet analyzovaných látek je n;

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \operatorname{vrt}_{1} & \operatorname{vrt}_{2} & \dots & \operatorname{vrt}_{m-1} & \operatorname{vrt}_{m} & \operatorname{vrty} \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & & \downarrow & & & & & & \\ c_{1,1} & c_{1,2} & \cdots & c_{1,m-1} & c_{1,m} \\ c_{2,1} & c_{2,2} & \cdots & c_{2,m-1} & c_{2,m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ c_{n-1,1} & c_{n-1,2} & \cdots & c_{n-1,m-1} & c_{n-1,m} \\ c_{n,1} & c_{n,2} & \cdots & c_{n,m-1} & c_{n,m} & & & & & & \\ \end{array} \begin{vmatrix} & & & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & & \\$$

Důležitým požadavkem pro úspěšnou a smyslupnou aplikaci analýzy hlavních komponent je silná lineární korelace jednotlivých složek vektorů chemických analýz. Silná lineární korelace se projevuje například při zobrazení dat v grafu jejich rozložením v okolí přímky. Rozložení dat v blízkosti přímky nám umožňuje redukovat dimenzi ortogonálním promítnutím dat na tuto přímku. Při silné lineární korelaci dat vyvolá zmíněná projekce relativně malou ztrátu informace. K nalezení přímky, na kterou se mají data projektovat, je možné využít např. úplnou metodu nejmenších čtverců.

Opakované použití úplné metody nejmenších čtverců není jedinou možností, jak redukovat dimenzi problému z n na r. Přednáška dr. Zbyňka Koldovského, která popisovala metody analýzy silně korelovaných dat, nás přivela na možnost využití jiného postupu dávajícího stejné výsledky jako opakované použití úplné metody nejmenších čtverců následované projekcí dat na nalezenou přímku. Oním jiným postupem je analýza hlavních komponent.

## 4 Analýza hlavních komponent a její modifikace

Analýza hlavních komponent (Principal Component Analysis – PCA) je takovou metodou pro redukci dimenze dat, která zachová maximální možnou míru informace [2]. Metoda analýzy hlavních komponent je založena na transformaci vektorů do nově nalezené ortonormální souřadné soustavy. Nově nalezené bázové vektory jsou uspořádány do matice v pořadí, které odpovídá míře informace nesené do jejich směrů provedenými průměty. První z vektorů má tak směr, který maximalizuje informaci získatelnou z jednorozměrného průmětu a poslední z bázových vektorů má směr, který minimalizuje informaci nesenou průměty do tohoto směru.

Standardní postup analýzy hlavních komponent (viz např. [3, 1]) použitý na data uspořádaná do matice zdrojových dat **A** vypadá následovně:

a. Prvním krokem je spočtení vektoru průměrných koncentrací  $\bar{\mathbf{x}} = (\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_n)^T$ ,  $\bar{x}_j = \frac{1}{m} \sum_{l=1}^m c_{l,j}$  a jeho následné odečtení od každého z vektorů chemických analýz  $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} - \bar{\mathbf{x}} \mathbf{1}^T$ , kde  $\mathbf{1} = (1, \dots, 1)^T$ .

**Poznámka 4.1** První krok přesouvá počátek souřadné soustavy o vektor průměrných koncentrací. Odečtení průměrů vede k potřebě hledání optimálního lineárního podprostoru, do kterého budou centrovaná data promítána. Optimální vektorový podprostor pro centrovaná data odpovídá optimálnímu afinnímu podprostoru pro data necentrovaná. V našem postupu jsme odečítali od vektorů analýz i jiné vektory než vektor průměrných koncentrací  $\bar{\mathbf{x}}$ . Transformace odečítaného vektoru není zatížena chybou. Pokud tedy záleží na zachování přesného popisu určitého roztoku je možné odečíst od ostatních dat vektor odpovídající jeho analýze. Například pro vymezení kontaminované oblasti je vhodné odečíst vektor odpovídající složení nekontaminované podzemní vody. Zachování informace o zvoleném roztoku vyvolá pokles přesnosti aproximace ostatních analyzovaných dat v porovnání s přesností aproximace s předcházejícím odečtením vektoru průměrů.

- b. Následuje výpočet kovarianční matice  $\mathbf{K} = \frac{1}{m-1} \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{A}}^T$ .
- c. Pokračuje se výpočtem vlastních čísel a vlastních vektorů kovarianční matice **K**. Vlastní vektory jsou uspořádány do matice v pořadí odpovídajícím pořadí velikostí jim příslušejících vlastních čísel od největšího k nejmenšímu. Seřazené vlastní vektory matice **K** tvoří matici, která bude dále značena  $\mathbf{V} \in \mathbf{R}^{n \times n}$ .

**Poznámka 4.2** K nalezení vlastních čísel a vlastních vektorů může být využit například standardní QR-algoritmus. Matice **K** je symetrická a pozitivně semidefinitní, všechna její vlastní čísla jsou nezáporná a jim příslušející vlastní vektory jsou ortonormální (tj. mají délku rovnu jedné a jsou na sebe navzájem kolmé). Je-li  $\lambda$  vlastní číslo matice **K** a **w** odpovídající vlastní vektor, potom  $\|\tilde{\mathbf{A}}^T \mathbf{w}\|^2 = \mathbf{w}^T \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{A}}^T \mathbf{w} = (m-1) \mathbf{w}^T \mathbf{K} \mathbf{w} = (m-1) \lambda \|\mathbf{w}\|^2$ . Vlastní vektory matice **K** se nazývají hlavní komponenty.

d. Z prvních r hlavních komponent je sestavena tzv. transformační matice  $\mathbf{V}_r \in \mathbf{R}^{n \times r}$ . Matici  $\mathbf{V}_r$  představuje prvních r sloupců matice **V**. Redukce dat do podprostoru generovaného vektory v matici  $\mathbf{V}_r$  vypadá následovně

$$\tilde{\mathbf{A}}_r = \mathbf{V}_r^T \tilde{\mathbf{A}}$$
.

**Poznámka 4.3** Tento krok analýzy hlavních komponent (transformace dat) způsobuje chybu.

- e. Po redukci je možno centrovaná data rekonstruovat  $\tilde{\mathbf{A}}^e = \mathbf{V}_r \tilde{\mathbf{A}}_r$ , vyhodnotit chybu a rozhodnout zda je míra redukce únosná.  $\tilde{\mathbf{A}}^e$  je matice rekonstruovaných, centrovaných dat zatížených chybou.
- f. Následující vzorec ukazuje rekonstrukci původních dat  $\mathbf{A}^e = \tilde{\mathbf{A}}^e + \bar{\mathbf{x}} \mathbf{1}^T$ .

**Poznámka 4.4** Pokud byl za  $\bar{\mathbf{x}}$  zvolený vektor průměrů složek sloupců matice  $\mathbf{A}$ , pak matice  $\mathbf{A}^e$  obsahuje původní data ortogonálně projektovaná do takového afinního vektorového prostoru s dimenzí r, který je optimální ve smyslu minimalizace projekcí vyvolané chyby  $E_r^2$  (4.1).

Definujme matici chyb následujícím způsobem:

$$\mathbf{E} = \mathbf{A} - \mathbf{A}^{e} = \begin{bmatrix} c_{1,1} - c_{1,1}^{e} \cdots c_{1,m} - c_{1,m}^{e} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n,1} - c_{n,1}^{e} \cdots c_{n,m} - c_{n,m}^{e} \end{bmatrix}.$$

Definování matice chyb **E** umožňuje vypočítat celou řadu zajímavých charakteristik. Může to být například průměrná chyba aproximace *i*-té složky vektorů analýz, medián z chyb aproximací *i*-té složky nebo to mohou být maximální chyby aproximace *i*-tých složek analýz. Stejné druhy chyb je možno vyhodnotit pro analýzy namísto složek (chemických látek). Výpočtem chyb pro analýzy se dají identifikovat např. oblasti s "jinými vlastnostmi". Celková chyba projekce  $(E_r)$  je definována jako odmocnina z

$$E_r^2 = \sum_{i=1}^m \|\mathbf{x}_i - \pi(\mathbf{V}_r)\mathbf{x}_i\|^2, \qquad (4.1)$$

kde  $\mathbf{x}_i$  je *i*-tý sloupec matice zdrojových dat  $\mathbf{A}$  a  $\pi(\mathbf{V}_r)\mathbf{x}_i$  je ortogonální projekce vektoru  $\mathbf{x}_i$  do *r*-dimenzionálního podprostoru generovaného bází  $\mathbf{V}_r$ .

Vyhodnocujeme také ztrátu informace  $p_r = \frac{E_r}{E_0}$ , kde  $E_0$  je maximální chyba, kterou může redukce vyvolat, tj. odmocnina ze součtu kvadrátů délek vektorů obsažených v matici zdrojových dat **A**.

Tabulka 4.1 ukazuje chyby vyvolané transformacemi 22-ti rozměrných dat do podprostorů různých dimenzí. Zpracovávaná data byla představována 90-ti chemickými analýzami, které byly částí z výsledků získaných během 5-ti let na lokalitě kde se dříve těžil uran. Za  $\bar{\mathbf{x}}$  jsme zvolili nulový vektor a PCA tak pomohla nalézt optimální lineární podprostor. Zpracovaná data jsou zřetelně silně korelována. Redukce dimenze z 22 na 3 způsobila chybu menší než 1 %.

Dříve zmíněné bázové vektory obsažené v matici  $\mathbf{V}_r$  mají spíše statistický než chemický význam. Pouze první z vektorů v bázi  $\mathbf{V}_r$  může představovat určitý roztok. Pokud budeme interpretovatelnost vektorů jako roztoků požadovat od všech bázových vektorů, nezbude než najít jinou bázi optimálního podprostoru. Vektory této báze nemusí být nutně ortogonální, ale musí splňovat následující požadavky:

- mohou mít výhradně nezáporné složky;
- aproximace koncentrací projektovaných do optimálního podprostoru musí být vyjádřitelné jako konvexní lineární kombinace zvolených bázových vektorů.

První požadavek umožňuje prohlásit vektor za algebraický popis roztoku. Druhý z požadavků nám dává možnost prohlásit všechny roztoky za směsi roztoků bázových. Jeden z postupů jak najít bázi vyhovující stanoveným požadavkům je uvedený v [5].

r	21	 4	3	2	1	0
$E_r^2$	$1.35 \times 10^{-1}$	 $1.22{ imes}10^{7}$	$3.02 \times 10^{7}$	$4.22 \times 10^{8}$	$9.04 \times 10^{8}$	$6.25 \times 10^{11}$
$E_r$	$3.67 \times 10^{-1}$	 $3.49{ imes}10^{3}$	$5.50{ imes}10^3$	$2.05{ imes}10^4$	$3.01 \times 10^4$	$7.90 \times 10^{5}$
$p_r$	0.00%	 0.44%	0.70%	2.60%	3.81%	100%

**Tabulka 4.1** Chyby  $E_r^2$ ,  $E_r$  a  $p_r$  vyvolané redukcí dimenze z 22 na r.

### 5 Průmyslové použití představeného postupu

Představený postup aplikace analýzy hlavních komponent byl použit Ing. Vladimírem Wasserbauerem, CSc. ze státního podniku DIAMO pro popis rozšíření kontaminace podzemní vody na lokalitě blízké Stráži pod Ralskem (viz [4]). Grafický výstup modelu ing. Wasserbauera ukazuje obr. 5.1.

Obrázky ukazují výsledek využití transformace 22-tirozměrných vektorů analýz do trojrozměrného afinního podprostoru kde odečítaným vektorem  $\bar{\mathbf{x}}$  a tedy jedním z vektorů bázových je cenomanská voda (zde označená "Basis 0"). Další dva bázové roztoky ("Basis 1" a "Basis 2") byly zvoleny shodné s během těžby do podzemí vtláčenými roztoky technologickými. Poslední z bázových roztoků ("Basis 3") byl vybrán uměle tak, aby splňoval na bázový vektor stanovené požadavky. Uměle zvolený vektor odpovídá popisu výsledku reakce mezi prvními dvěma technologickými roztoky.

Všechny obrázky popisují stejnou oblast a ukazují izolinie koeficientů příslušejících jednotlivým bázovým vektorům (roztokům). Součet všech koeficientů pro každý vektor analýz je 1. Obrázek 5.1(a) ukazuje rozšíření cenomanské vody. Obrázek 5.1(b) popisuje rozšíření prvního techonologického roztoku vtláčeného do podzemí během těžby uranu, obr. 5.1(c) odráží rozšíření druhého technologického roztoku a konečně obr. 5.1(d) může být vnímán jako popis rozšíření produktu chemické reakce mezi technologickými roztoky.

# 6 Závěr

Navrhli jsme postup zjednodušení transportní části reakčně-transportního modelu pro případ, kdy máme k dispozici dostatečný počet analýz podzemní vody ze zkoumané lokality. Navržený postup je založený na redukci dimenze algebraického popisu problému. Využili jsme analýzu hlavních komponent jako nástroj pro nalezení optimálního podprostoru pro redukci. Zároveň jsme identifikovali obtíže s interpretací výsledků pro chemiky. Navržený postup byl úspěšně průmyslově aplikován.

Představený postup by měl poskytovat dobré výsledky pro krátkodobé předpovědi a pomalu probíhající chemické reakce. Pro dlouhodobější předpovědi nemusí navržený postup v obecném případě dostačovat. Rozšíření navrženého postupu tak, aby byl použitelný pro dlouhodobé predikce, bude předmětem dalšího výzkumu.

#### Reference

- 1. J. E. Jackcson: User's Guide to Principal Components, Willey, New York, 1991. 192
- M. Meloun, J. Militký: Kompendium statistického zpracování dat, Academia, Praha, 2006. 191



**Obrázek 5.1** Rozšíření roztoků: (a) cenomanská voda; (b) technologický roztok 1; (c) technologický roztok 2; (d) produkt reakce mezi 1 a 2.

- L. I. Smith: A tutorial on Principal Components Analysis, Student tutorial, University of Otago, Dunedin, New Zealand, 2002, http://www.cs.otago.ac.nz/cosc453/student\_tutorials/principal\_components.pdf. 192
- 4. V. Wasserbauer: Zpráva pro výzkumné centrum ARTEC, Liberec, 2008. 194
- L. Zedek: Určení kritérií k optimalizaci báze, pro snížení dimenze problému modelování transportu mnohasložkových vodných roztoků. Diplomová práce, Technická univerzita v Liberec, 2008. 190, 193

![](_page_200_Picture_0.jpeg)

v Liberci

Technická univerzita

![](_page_200_Picture_2.jpeg)

Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií

Ústav nových technologií a aplikované informatiky

![](_page_200_Picture_5.jpeg)

![](_page_200_Picture_6.jpeg)

Výzkumné centrum ARTEC: Pokročilé sanační technologie a procesy Texty neprošly redakční úpravou ani jazykovou korekturou, za faktickou i jazykovou správnost odpovídají autoři jednotlivých příspěvků.

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

Editoři Milan Hokr, Martin Plešinger, Jan Šembera.

Odborná recenze Milan Hokr, Jan Šembera. Vydala Technická univerzita v Liberci, Studentská 2/1402, 461 17 Liberec 1, © v roce 2009, schváleno rektorátem TUL dne 16. 11. 2009 čj. RE 105/09 vydání první, neprodejné, náklad 65 výtisků, číslo publikace 55-105-09, Tribun EU, s. r. o.,  $\operatorname{tisk}$ Gorkého 41, 602 00 Brno.

Obálku navrhl a graficky upravil, grafická úprava textů 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  $\mathcal{AMS}$ —IATEX  $2\varepsilon$ .

ISBN 978-80-7372-543-3