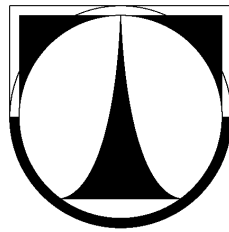


TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

FAKULTA MECHATRONIKY A MEZIOBOROVÝCH INŽENÝRSKÝCH STUDIÍ



STAVBA MODELŮ
PRO ŘEŠENÍ SPECIÁLNÍCH ÚLOH

Ing. Dalibor Frydrych, Ph.D.

HABILITAČNÍ PRÁCE

LIBEREC, ŘÍJEN 2007

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

FAKULTA MECHATRONIKY A MEZIOBOROVÝCH INŽENÝRSKÝCH STUDIÍ

OBOR: PŘÍRODOVĚDNÉ INŽENÝRSTVÍ

NÁZEV:

STAVBA MODELŮ
PRO ŘEŠENÍ SPECIÁLNÍCH ÚLOH

Ing. Dalibor Frydrych, Ph.D.

ROZSAH PRÁCE A PŘÍLOH

POČET STRAN TEXTU:	83
POČET STRAN PŘÍLOH:	29
POČET OBRÁZKŮ:	58

MÍSTOPŘÍSEŽNÉ PROHLÁŠENÍ:

Místopřísežně prohlašuji, že jsem habilitační práci vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury.

V LIBERCI DNE 1.10.2007

.....
Ing. Dalibor Frydrych, Ph.D.

Obsah

Obsah	iv
Úvod	1
1 Modely vlnovcových pneumatických pružin	4
1.1 Podmínky vzniku modelů	4
1.2 Základní rovnice	6
1.2.1 Teorie vícevlňných vlnovcových pružin	7
1.2.2 Model č.1 - maximalizace objemu	8
1.2.3 Modelu č.2 - kruhový oblouk	10
1.3 Implementace modelu	17
1.4 Výsledky	21
2 Model filtračního proudění podzemní vody a transportu rozpuštěných látek	24
2.1 Podmínky vzniku modelu	24
2.2 Základní rovnice	26
2.2.1 Obecné vztahy	26
2.2.2 Vztahy použité v modelu - proudění	29
2.2.3 Vztahy použité v modelu - transport látek	34
2.2.4 Matematický model	36
2.3 Implementace modelu	39
2.3.1 Datové struktury	39
2.3.2 Použité algoritmy	42
2.3.3 Okrajové podmínky - filtrační proudění	45
2.4 Výsledky	47
2.4.1 Popis situace	48
2.4.2 Popis modelované úlohy	50
2.4.3 Popis modelové sítě	50
2.4.4 Okrajové podmínky	51
2.4.5 Počáteční podmínky	52
2.4.6 Hydraulické vodivosti	52
2.4.7 Rozbor výsledků	53

3	Model procesů v bentonitu	54
3.1	Podmínky vzniku modelů	54
3.2	Základní rovnice	59
3.3	Implementace modelu	60
3.3.1	Základní části modelu	63
3.4	Výsledky	72
3.4.1	Experiment BenchMark 1.3	72
3.4.2	Vyhodnocení výsledků	77
3.5	Další vývoj	79
	Závěr	81
	Literatura	84
A	Obrazové přílohy	96
A.1	Modely vlnovcových pneumatických pružin	96
A.2	Model filtračního proudění podzemní vody a transportu rozpuštěných látek	99
A.3	Model procesů v bentonitu	108
B	Řídící soubor Projektu <i>ISERIT</i>	119
B.1	Sekce <i>Úloha</i>	120
B.2	Sekce <i>Síť</i>	120
B.3	Sekce <i>Scénář</i>	120
B.4	Sekce <i>Seznam okrajových podmínek</i>	122
B.5	Sekce <i>Materiál</i>	123
B.6	Sekce <i>Materiálové parametry</i>	124
B.7	Sekce <i>Výstup</i>	126
B.8	Sekce <i>Různé</i>	127

Seznam obrázků

1.1	Konstrukce vlnovcové pružiny - řez osou rotace; Ω_1 -dolní příruba; Ω_2 -horní příruba; k -křivka volné části meridiánu (stěny) pneumatické pružiny; R_e -poloměr efektivní plochy; P , Q -koncové body meridiánu; T_1 , T_2 -body dotyku; M , N -fiktivní bod uvolnění	6
1.2	Třívltná pneumatická pružina	7
1.3	Algoritmus iterací; k -křivka volné části meridiánu (stěny) pneumatické pružiny; P , Q -koncové body meridiánu; T_1 , T_2 -body dotyku; v_1 -délka hranice Γ_1 mezi body Q a T_1 ; v_2 -délka hranice Γ_2 mezi body P a T_2	10
1.4	Volná část vlny; Ω_1 -dolní příruba; Ω_2 -horní příruba; P , Q -koncové body meridiánu; T_1 , T_2 -body dotyku; v_1 -délka hranice Γ_1 mezi body Q a T_1 ; v_2 -délka hranice Γ_2 mezi body P a T_2 ; x_1 , x_2 -vektory souřadnic dotykových bodů T_1 a T_2 ; n_1 , n_2 -jednotkové vektory vnějších normál hranic Γ_1 a Γ_2 oblastí Ω_1 a Ω_2 v dotykových bodech T_1 a T_2 ; φ_1 , φ_2 -úhly jednotkových vektorů n_1 a n_2 ; R -poloměr kruhového oblouku	11
1.5	Vlna s omezením zdola; g_D -délka kontaktu s limitující plochou; Ω_1 -dolní příruba; Ω_2 -horní příruba; P , Q -koncové body meridiánu; T_1 , T_2 -body dotyku; v_1 -délka hranice Γ_1 mezi body Q a T_1 ; v_2 -délka hranice Γ_2 mezi body P a T_2 ; x_1 , x_2 -vektory souřadnic dotykových bodů T_1 a T_2 ; n_1 , n_2 -jednotkové vektory vnějších normál hranic Γ_1 a Γ_2 oblastí Ω_1 a Ω_2 v dotykových bodech T_1 a T_2 ; φ_1 , φ_2 -úhly jednotkových vektorů n_1 a n_2 ; R -poloměr kruhového oblouku	13
1.6	Vlna s omezením shora; g_H -délka kontaktu s limitující plochou; Ω_1 -dolní příruba; Ω_2 -horní příruba; P , Q -koncové body meridiánu; T_1 , T_2 -body dotyku; v_1 -délka hranice Γ_1 mezi body Q a T_1 ; v_2 -délka hranice Γ_2 mezi body P a T_2 ; x_1 , x_2 -vektory souřadnic dotykových bodů T_1 a T_2 ; n_1 , n_2 -jednotkové vektory vnějších normál hranic Γ_1 a Γ_2 oblastí Ω_1 a Ω_2 v dotykových bodech T_1 a T_2 ; R -poloměr kruhového oblouku	14

1.7	Dvojité omezení vlny; g -délka kontaktu sousedních vln; Ω_1 -dolní příruba; Ω_2 -horní příruba; P , Q -koncové body meridiánu; T_1 , T_2 -body dotyku; v_1 -délka hranice Γ_1 mezi body Q a T_1 ; v_2 -délka hranice Γ_2 mezi body P a T_2 ; x_1 , x_2 -vektory souřadnic dotykových bodů T_1 a T_2 ; n_1 , n_2 -jednotkové vektory vnějších normál hranic Γ_1 a Γ_2 oblastí Ω_1 a Ω_2 v dotykových bodech T_1 a T_2 ; R -poloměr kruhového oblouku	15
1.8	Mechanika kordových vláken	16
1.9	Applet - pružina VD 120-07 - panel vstupních dat	18
1.10	Applet - pružina VD 120-07 - panel protokolu o běhu modelu	19
1.11	Applet - pružina VD 120-07 - panel grafů geometrických charakteristik	21
1.12	Applet - pružina VD 120-07 - panel zobrazení tvaru pružiny	22
2.1	Křivky retenčního stupně nasycenosti pro různé parametry van Genuchtenovy funkce	28
2.2	Křivky retenční kapacity pro různé parametry van Genuchtenovy funkce	29
2.3	Obecné křivky relativní hydraulické vodivosti pro nasycenou i nenasyčenou zónu	30
2.4	Obecné křivky specifické hydraulické kapacity (retenční kapacity a specifické storativity) pro nasycenou i nenasyčenou zónu	31
2.5	Obecné křivky stupně nasycení pro nasycenou i nenasyčenou zónu	31
2.6	Prizmatický prvek s vertikálními bočními stěnami a různým sklonem podstav	37
2.7	Degenerované tvary prizmatického prvku	37
2.8	Struktura globální soustavy MH modelu	38
2.9	Entity a vazby mezi entitami modelové sítě	39
2.10	Struktura Elm	41
2.11	Algoritmus výpočtu neustáleného proudění s volnou hladinou	43
2.12	Algoritmus výpočtu transportu rozpuštěných látek v ustáleném režimu proudění	44
2.13	Řez sítí s vyklíňujícími vrstvami	45
2.14	Řez zájmovou oblastí úlohy zatopení dolu Hamr I	49
2.15	Poloha sítě v zájmové oblasti úlohy zatopení dolu Hamr I	51
3.1	Ilustrační schéma dlouhodobého úložiště radioaktivních odpadů; zelená barva - přístupový tunel, modrá barva - servisní tunely, růžová barva - ukládací tunely, červená barva - ukládací kobky, oranžová barva - větrací šachty	55
3.2	Detail ukládací kobky s bentonitovým ložem	56

3.3	Vazby mezi jednotlivými procesy probíhajícími v bentonitovém lůžku	56
3.4	Struktura globální soustavy TH úlohy	61
3.5	Diagram tříd Metodiky DF^2EM ; zde uvedený obrázek je pouze ilustrační. Ve větším provedení je uveden v příloze A.3 na stránce 109	64
3.6	Schéma stávající organizace výpočtu	71
3.7	Schéma konstrukce experimentální aparatury. (<i>Schéma je otočeno o 90°. Ve skutečnosti je aparatura umístěna vertikálně</i>)	73
3.8	Síť modelu experimentální aparatury	74
3.9	Vývoj teploty v měřicích bodech	77
3.10	Profil obsahu vody v koncovém čase	78
3.11	Schéma ideální organizace výpočtu	79
A.1	Statická charakteristika vlnocové pneumatické pružiny VJ 80-07; výchozí průměr kordové konfekce $D_{cord} = 100mm$; výchozí úhel sklonu kordové konfekce $\beta = 0^\circ, 10^\circ, 20^\circ, 25^\circ, 30^\circ$	97
A.2	Statická charakteristika vlnocové pneumatické pružiny VJ 205-50; výchozí průměr kordové konfekce $D_{cord} = 280mm$; výchozí úhel sklonu kordové konfekce $\beta = 0^\circ, 10^\circ, 20^\circ, 25^\circ, 30^\circ$	98
A.3	Mapa zájmové oblasti úlohy zatopení dolu Hamr I s naznačeným obrysem modelové sítě a vyznačenými oblastmi DCHT (fialová barva) a dolového pole HDHI (oranžová barva)	100
A.4	Hydrologická situace v čase $t = 0$ v zájmové oblasti úlohy zatopení dolu Hamr I	101
A.5	Hodnoty hydraulické vodivosti K_x v úloze zatopení dolu Hamr I 102	
A.6	Počáteční rozložení koncentrace TDS v úloze zatopení dolu Hamr I	103
A.7	Časový vývoj koncentrace TDS a poloha hladiny podzemní vody v úloze zatopení dolu Hamr I (časy $t = 100, 200, 300$ dní) 104	
A.8	Časový vývoj koncentrace TDS a poloha hladiny podzemní vody v úloze zatopení dolu Hamr I (časy $t = 400, 500, 600$ dní) 105	
A.9	Časový vývoj koncentrace TDS a poloha hladiny podzemní vody v úloze zatopení dolu Hamr I (časy $t = 700, 800, 960$ dní) 106	
A.10	Časový vývoj koncentrace TDS a poloha hladiny podzemní vody v úloze zatopení dolu Hamr I (časy $t = 1480, 2080, 2560$ dní) 107	
A.11	Diagram tříd Metodiky DF^2EM	109
A.12	Časový vývoj teploty T [$^\circ C$] v modelové úloze experimentu <i>BenchMark 1.3</i> (časy $t = 0, 0.35, 1, 2.8$ hodin)	110
A.13	Časový vývoj teploty T [$^\circ C$] v modelové úloze experimentu <i>BenchMark 1.3</i> (časy $t = 10, 64, 100, 134$ hodin)	111
A.14	Časový vývoj teploty T [$^\circ C$] v modelové úloze experimentu <i>BenchMark 1.3</i> (časy $t = 168, 170, 172, 174$ hodin)	112

A.15	Časový vývoj vlhkosti ve vzduchu C_a [g m^{-3}] v modelové úloze experimentu <i>BenchMark 1.3</i> (časy $t = 0, 0.35, 1, 2.8$ hodin)	113
A.16	Časový vývoj vlhkosti ve vzduchu C_a [g m^{-3}] v modelové úloze experimentu <i>BenchMark 1.3</i> (časy $t = 10, 64, 100, 134$ hodin)	114
A.17	Časový vývoj vlhkosti ve vzduchu C_a [g m^{-3}] v modelové úloze experimentu <i>BenchMark 1.3</i> (časy $t = 168, 170, 172, 174$ hodin)	115
A.18	Časový vývoj vlhkosti v bentonitu C_b [kg m^{-3}] v modelové úloze experimentu <i>BenchMark 1.3</i> (časy $t = 0, 0.35, 1, 2.8$ hodin)	116
A.19	Časový vývoj vlhkosti v bentonitu C_b [kg m^{-3}] v modelové úloze experimentu <i>BenchMark 1.3</i> (čase $t = 10, 64, 100, 134$ hodin)	117
A.20	Časový vývoj vlhkosti v bentonitu C_b [kg m^{-3}] v modelové úloze experimentu <i>BenchMark 1.3</i> (čase $t = 168, 170, 172, 174$ hodin)	118

Seznam použitých symbolů

Modely vlnovcových pneumatických pružin

F	nosnost pružiny	[N]
F_i	nosnost i -tého vlnovce pružiny	[N]
H	výška pružiny	[m]
H_i	výška i -tého vlnovce pružiny	[m]
$\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2$	jednotkové vektory vnějších normál k hranicím Γ_1, Γ_2 v dotykových bodech T_1, T_2	[1]
p	tlak v pružině	[Pa]
p_i	tlak v i -tém vlnovci pružiny	[Pa]
S	efektivní plocha pružiny	[m ²]
S_i	efektivní plocha i -tého vlnovce pružiny	[m ²]
T_1, T_2	body dotyku	-
U	ukazatel efektivní plochy pružiny	[m]
V	objem pružiny	[m ³]
$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$	vektory souřadnic dotykových bodů T_1, T_2	[m]
φ_1, φ_2	úhly jednotkových vektorů $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2$	[rad]
Ω_1, Ω_2	oblasti popisující dolní/horní přírubu	-
Γ_1, Γ_2	hranice oblastí Ω_1, Ω_2	-

Model filtračního proudění podzemní vody a transportu rozpuštěných látek

b	mocnost	[m]
c_i	koncentrace i -té látky	[kg m ⁻³]
C	specifická hydraulická kapacita	[m ⁻¹]
$d \Gamma$	diferenciál plochy	-
$d \Omega$	diferenciál objemu	-
g	tíhové zrychlení	[m s ⁻²]
h	tlaková výška	[m]
H	piezometrická výška	[m]
K	tenzor hydraulické vodivosti	[m den ⁻¹]
m_i	hmotnost i -té látky	[kg]
n	pórovitost	[1]
\mathbf{n}	jednotkový vektor vnější normály	[1]
N_v	počet vrstev sítě	[1]
p	tlak	[Pa]
\mathbf{q}	vektor objemového toku	[m ³ den ⁻¹]
Q	hustota zdrojů	[m ³ den ⁻¹]
S	stupeň nasycení	[1]
t	čas	[den]
$\mathbf{x} = \{x, y, z\}$	prostorová souřadnice	[m]
Γ	hranice oblasti Ω	-
Ω	prostorová oblast	-

Model procesů v bentonitu

C_a	koncentrace vlhkosti ve vzduchu	[kg m ⁻³]
C_a^{100}	koncentrace vlhkosti nasyceného vzduchu	[kg m ⁻³]
C_b	koncentrace vlhkosti v pevné fázi	[kg m ⁻³]
c_v	tepelná kapacita	[J kg ⁻¹ °C ⁻¹]
D_a	difúzní koeficient vodních par ve vzduchu	[m ² s ⁻¹]
T	teplota	[°C]
χ	výparné/kondenzační teplo	[J kg ⁻¹]
ϵ	porozita	[1]
φ	inverzní soprční křivka	[1]
γ	koeficient rychlosti výměny	[kg m ⁻³ s ⁻¹]
λ	součinitel tepelné vodivosti	[W m ⁻¹ s ⁻¹]
τ	tortuozita	[1]

Použité zkratky

DCHT	Důl CH emické T ěžby
GEAM	G eologie- E kologie-ur A n Morava
HDHI	H lubinný D ůl H amr I
MAPE	MA gnézium PE rchlorát
MKP	Metoda K onečných P rvků
OKP	OK rajové P odmínky
o.z.	O dštěpný Z ávod
s.p.	S tátní P odnik
SLR	S oustava L ineárních R ovnic
SURAO	S práva Ú ložišť RA dioaktivních O dpadů
TÚU	T echnická Ú pravna U ranu
VJP	V yhořelé J aderné P alivo
CIEMAT	C entro de I nvestigaciones E nergéticas, M edio A mbientales y T e- cnológicas - Centrum výzkumů energetiky, životního prostředí a te- chologií
DF ² EM	D evelopers F ab F inite E lements M ethod - vývojářsky přívětivá metoda konečných prvků
EBS	E ngineered B arrier S ystem - systém inženýrských barier
EDZ	E xcavated D isturbed (D amaged) Z one - ražbou narušená (poško- zená) oblast
FEBEX	F ull-scale E ngineered B arriers EX periment - experiment na sys- tému inženýrských barier ve skutečné velikosti
GUI	G raphical U ser I nteface - grafické uživatelské rozhraní
HRL	H ard R ock L aboratory - laboratoř ve skále
MH	M ixed- H ybrid - smíšená-hybridní formulace
MPI	M essage P assing I nterface - rozhraní pro posílání zpráv
TDS	T otal D issolved S olids - suma všech rozpuštěných látek
THMC	T hermo- H ydro- M echanical- C hemical - teplo-voda-mechanika- chemie
UML	U nified M odeling L anguage - jednotný jazyk pro modelování
UPC	U niversitat P olitecnica de C atalunya - Katalánská technická uni- verzita
Parser (eng.)	Lexikální analyzátor

Úvod

Již prehistorický člověk byl nucen poznávat své okolí. Od míry znalostí okolí a schopnosti předvídat budoucí děje se odvíjela jeho schopnost přežít. Prehistorický člověk měl jediný nástroj při svém rozhodování, a to osobní zkušenost. Pokrok znamenala možnost sdílení osobních zkušeností skupinou několika jedinců - vznik komunikačního prostředku, řeči. Dalším logickým krokem byl vznik písma, jako prostředku pro sdílení a zejména uchování zkušeností. Vznik peněz pak přinesl potřebu zápisu a řešení jednoduchých úloh - matematiku. Požadavky na stále dokonalejší popis všech možných oblastí okolního světa, dané rozvojem průmyslu, způsobily rozvoj fyziky, chemie, biologie. Tím byl dán základ pro tvorbu modelů, komplexního nástroje pro získávání nových informací o okolním světě. Uživatelé těchto modelů pak mohli na základě informací získaných pomocí modelů činit zásadní rozhodnutí s mnohem nižší mírou nejistoty.

Prudký rozvoj výpočetní techniky umožnil nebyvalý rozmach modelování. Dnes běžné a cenově dostupné počítače disponují dostatečným výpočetním výkonem, aby na nich mohly být provozovány velice náročné modely. Tato skutečnost mnohdy způsobuje, že modely jsou používány bez potřebných znalostí a dochází tak ke špatné interpretaci výsledků modelu - ke špatnému rozhodnutí.

Model si můžeme představit jako křišťálovou kouli, přes níž nahlédneme na zkoumaný děj z různých úhlů. Na základě těchto náhledů pak činíme rozhodnutí. Používat k rozhodnutím křišťálovou kouli se může jevit jako bláhové. Ale používání modelu, bez znalosti jakou úlohu řeší a jak model pracuje, je stejně bláhové. Model má několik vrstev a každá vrstva způsobuje jisté zkreslení (chybu). Ten, kdo model používá, musí být schopen říci, zda je obraz podaný modelem dostatečně věrný, zda výsledky vypočtené modelem dostatečně přesně vystihují skutečné řešení. Je proto nutné při využívání modelů postupovat obezřetně a důkladně se s modelem seznámit. Seznámit se s teorií a předpoklady, pro které je použití daného modelu vhodné.

Obecně lze říci, že nezáleží na tom jaké děje studujeme, proces modelování, proces tvorby a používání modelů, je vždy stejný. Pro zkoumaný děj sestavíme rovnice, které daný děj popisují. Mohutný nástroj používaný k popisu přírodních procesů, dnes považovaný za standardní, je diferenciální počet. K získaným diferenciálním rovnicím přiřadíme oblast, na které

budeme danou úlohu řešit, doplníme okrajové, příp. počáteční podmínky, a zvolíme matematický aparát pro jejich řešení. Metody pro řešení diferenciálních rovnic lze rozdělit do dvou skupin. V první jsou analytické metody, které hledají přesné řešení. Tyto metody vyžadují dobré znalosti a kreativní přístup při procesu výpočtu. Druhá skupina jsou metody numerické, které hledají pouze přibližné řešení. Postup řešení numerických metod lze dobře a jednoznačně popsat. Takto popsaný postup pak lze nechat zpracovat počítačem. Dnes jsou velice rozšířené metody konečných diferencí, konečných prvků (MKP), konečných objemů. Poněkud méně rozšířená je metoda hraničních prvků.

Sestavení základních rovnic popisujících jednotlivé děje se věnuje velká pozornost. Tvoří základ výuky technických škol a začíná již na průmyslových školách. Matematický aparát je komplikovanější, výuka začíná až na univerzitách a také se těší velké pozornosti. Tomu, jak je sestaven numerický model (počítačový program), jaké jsou datové struktury a vnitřní organizace výpočtu, jak je napsán počítačový kód, se již věnuje minimální pozornost. Tento stav má několik příčin.

Každý logicky uvažující člověk je schopen sestavit jednoduchý, fungující počítačový program. Pokud takový program má řádově stovky řádků, je vše snadné. Komplikace přicházejí při cca tisíci řádcích programu. Program se komplikuje a stává se nepřehledným. Standardní program pro řešení jednoduché modelové úlohy, např. vedení tepla, postavený na metodě konečných prvků má délku cca 10 000 programových řádků. Velice záleží na univerzálnosti a modifikovatelnosti modelu. Faktem je, že většina kódu zajišťuje pomocné operace pro komunikaci výpočetního jádra s okolím. Na začátku výpočtu tyto operace zajišťují čtení a přípravu vstupních dat pro výpočet, na závěr realizují uložení výsledků ve formě vhodné pro prezentaci. Samotné jádro MKP lze zredukovat na cca 150 programových řádků. Z toho je 100 řádků vlastní MKP a 50 řádků zajišťuje vyřešení soustavy lineárních rovnic.

Těžko popsitelná a organizovatelná je tvorba modelů (programů) v prostředí, kde dochází ke změnám na základní, fyzikální úrovni modelu. I malá změna rovnic, doplnění členu, který byl na počátku vývoje považován za nevýznamný, může znamenat velkou změnu ve zdrojovém kódu. Jako vhodná ilustrace se jeví přirovnání stavby programu ke stavbě domu. Na počátku zvolíme velikost a účel domu - fyzikální model. Pro daný návrh přizpůsobíme vnitřní řešení domu, sílu stěn, umístění dveří - matematický model. Pak dům postavíme, napíšeme programový kód - numerický model, program. Výsledek je při pečlivé práci jistě skvělý, dům splňuje naše požadavky, model řeší požadovaný typ úloh. Až do doby, než nastane potřeba úprav. Provádět drobné úpravy, měnit umístění dveří, instalovat etážové topení, měnit malé kousky kódu, přidávat vstupy a výstupy v jiných formátech, je vcelku snadné. Ale posouvat nosné zdi, přidávat další patra, rozšířit fyzikální model o další veličinu, měnit základní datové struktury, je již značně komplikované.

Při rozsáhlejších úpravách je mnohdy efektivnější a rychlejší, začít stavět na zelené louce, začít tvorbu programu znovu od začátku.

Když je s tvorbou programů realizujících numerické modely tolik práce, proč je vytvářet? Nelze je někde již sehnat hotové? Bez velké námahy lze nalézt široké spektrum modelů pro všechny běžné přírodní procesy. Od jednoduchých modelů, které lze získat zadarmo, až po komplexní, sofistikované, ale bohužel také drahé systémy. Výhodou drahých systémů je profesionální provedení. Jejich součástí je podrobná dokumentace jednotlivých řešených úloh a množství testovacích a výukových úloh. Nevýhodou těchto systémů je minimální možnost modifikace. Zdrojové kódy jsou střezným know-how firmy, která daný model vyvíjí. O změny a úpravy modelu lze firmu požádat, ale tento proces je zdoluhavý a nejistý. Další vývoj a změny v modelu musí být ekonomicky podloženy. To znamená, že o vylepšený model musí mít zájem širší obec uživatelů. Speciální typy úloh, pro omezený okruh uživatelů, nejsou finančně zajímavým trhem. Tyto oblasti pak jsou doménou modelů z (povětšinou) akademického prostředí. Takové modely jsou nezřídka dostupné včetně zdrojových kódů, ale jejich kvalita je značně rozdílná.

Vývoj modelů je náročný a drahý. Ale má i své kladné stránky. Přináší podrobné porozumění řešeného problému, a nalezení mnohdy netušených souvislostí. Tyto zkušenosti jsou k nezaplacení. Akademický pracovník, který tyto zkušenosti získá, je pak schopen problémy podat z více pohledů, oživit výklad o příklady z praxe. Předání takto získaných zkušeností je o to intenzivnější, pokud jsou do vývoje modelů zapojeni i studenti.

Tato práce uzavírá dvacetileté období, během něhož autor vytvořil velké množství menších, ale i rozsáhlých počítačových programů pro modelování přírodních procesů a technických úloh. Za svého působení na Katedře částí strojů a mechanismů Fakulty strojní Vysoké školy strojní a textilní v Liberci pracoval na modelech řešících úlohy elasticity těles pomocí primární formulace metody konečných prvků. Práce ve zdravotní pojišťovně ho přivedla do světa finančních modelů. Největší výzvou a zdrojem zkušeností bylo zaměstnání v s.p. DIAMO ve Stráži pod Ralskem v Oddělení matematického modelování. Pro splnění náročných požadavků kladených na sanaci následků chemické těžby, zde vytvořil unikátní systém modelů založených na metodě konečných prvků a metodě konečných objemů. V posledních letech pracoval na Katedře modelování procesů. Mezi nejrozsáhlejší práce se řadí modely současného prostupu tepla a vlhkosti porézními materiály. S poznatky získanými při vývoji těchto modelů a s výsledky získanými pomocí svých modelů se zúčastnil řady konferencí. Získané zkušenosti přenesl do výuky předmětu „Stavba a řešení modelů“.

Modely uvedené v práci pokrývají poměrně širokou oblast. Každý model je prezentován pouze v míře nezbytně nutné. Jsou zmíněny zvláště speciální požadavky kladené na model a způsob jejich vyřešení.

Kapitola 1

Modely vlnovcových pneumatických pružin

1.1 Podmínky vzniku modelů

Na moderní stroje a zařízení je kladeno velké množství požadavků. Jedním z požadavků je minimální zatížení okolí hlukem a vibracemi. Velkou roli ve snižování produkce hluku a vibrací mají pružící a vibroizolační prvky. Mezi moderní pružící a vibroizolační prvky patří pneumatické pružiny. Mají jednoduchou konstrukci a dlouhou životnost. Jejich velkou výhodou je možnost změny nosnosti změnou tlaku vzduchu uvnitř pružiny. Nosnost pneumatických pružin závisí také na osově deformaci pružiny a tvaru použitých přírub. Aktivní využití těchto vlastností je nutné pro jejich optimální využití v konstrukci. Konstruktor pak může optimálně navrhnout systém odpružení a vibroizolace, jehož je pneumatická pružina součástí. Pneumatické pružiny lze podle konstrukce rozdělit do několika skupin. Modely zde popsané se zaměřily na vlnovcové pneumatické pružiny, jejichž konstrukce je z hlediska modelování nejzajímavější.

Pro návrh systému odpružení je nutné znát geometrické charakteristiky. To jsou: objem, efektivní plocha a ukazatel efektivní plochy. K získání geometrických charakteristik by bylo možné použít model řešící úlohu elasticity, založený na metodě konečných prvků. Použití takového modelu je ale náročné jak po teoretické (vyžaduje velkou míru znalostí), tak i po praktické stránce (vyžaduje dlouhý čas na přípravu modelu i na vlastní řešení). Výsledkem pak jsou deformace a napětí v pryžo-kordové stěně pružiny. Geometrické charakteristiky jsou jen okrajovou záležitostí. Pevnost pryžo-kordové stěny pružiny je však tak vysoká, že není nutné se jí zabývat. Proto je použití modelů elasticity pro výpočet geometrických charakteristik pneumatických pružin neefektivní. Níže popsané modely slouží pro rychlý výpočet geometrických charakteristik pneumatických vlnovcových pružin. Zadání parametrů pružiny je přizpůsobeno konstrukční praxi. Tím je minimalizován čas

nutný k zadání parametrů pružiny. Samotný výpočet geometrických charakteristik pak trvá pouze několik sekund. Konstruktor tak může interaktivně zkoušet různé varianty konstrukce a rychle nalézt tu, která je pro něj nejvhodnější.

Dále popsané modely vychází ze zjednodušujícího předpokladu, že veškerá energie akumulovaná v pneumatické vlnovcové pružině je při jejím stlačení absorbována ve vzduchu, uzavřeném v pružině pryžo-kordovou stěnou. Vliv pryžo-kordové stěny je zanedbán. Stěna je považována za dokonale tuhou pro síly působící v ploše stěny a dokonale poddajná pro ohybové momenty. Modely hledají tvar volných úseků meridiánu vlnovce v závislosti na deformaci pružiny. S ohledem na malou délku volných úseků vlnovce a vysokou tuhost kordové výztuže je při řešení vliv velikosti přetlaku vzduchu uvnitř pružiny zanedbán.

Tyto modely byly vyvinuty v rámci výzkumného záměru MSM 24210001 „*Modelová a experimentální optimalizace pružících a vazebních prvků a vliv jejich tvarování na přenos vibrací*“ v sekci „*Vibroizolace dynamického objektu s minimalizací nepříznivého účinku na obsluhu a okolní prostředí*“ a dále navazujícího výzkumného záměru MSM 4674788501 „*Optimalizace vlastností strojů v interakci s pracovními procesy a člověkem*“ v sekci „*Modelová a experimentální optimalizace pružících a vazebních prvků a vliv jejich tvarování na přenos vibrací*“.

Autorův podíl na projektu

S možností řešení statických charakteristik vlnovcových pneumatických pružin pomocí grafických metod přišel Prof. Ing. Oldřich Krejčíř [38]. V té době šlo čistě o grafické postupy bez podpory výpočetní techniky. Zapojením výpočetní techniky do tohoto procesu byl pověřen Doc. Ludvík Prášil, CSc, který přizval ke spolupráci Doc. Vladimíra Kracíka, CSc. První pokus o implementaci byl proveden v roce 1986 na střediskovém počítači *EC 1033* [53]. Autorem programového kódu byla Ing. Dagmar Zikešová. Programovacím jazykem byl *Fortran 4*.

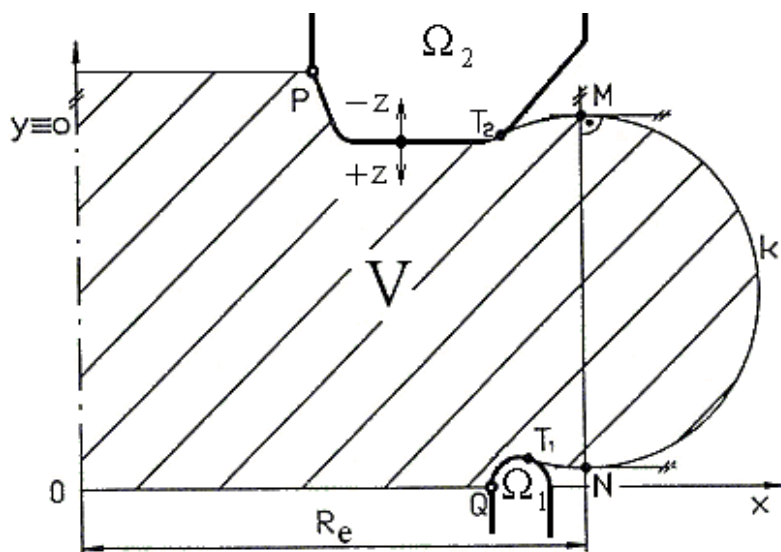
Autor se zapojil do výzkumu v roce 1990 [80]. Příchod osobních počítačů třídy PC zcela změnil přístup k stavbě modelů. Autor celý model znovu implementoval v jazyce *C* a doplnil o jednoduché grafické rozhraní pro prezentaci výsledků. Stagnace a částečný rozpad průmyslu po roce 1990 způsobil, že nemělo smysl pokračovat v dalším výzkumu.

Výzkum byl znovu otevřen v roce 2004 v rámci výzkumného záměru. Od té doby se autor na výzkumu podílí podstatným dílem. Došlo k rozšíření teoretických základů do logicky uceleného celku. Čistě autorovým dílem je nová implementace, která byla postavena na objektovém základě a využila možností moderních programových nástrojů. Nedílnou součástí projektu je i prezentace dosažených výsledků na mezinárodních konferencích. Významným dílem se podílel na tvorbě příspěvků na konference [103], [102] a [101],

kteřé osobně prezentoval. Autor měl dále podstatný podíl na článcích uveřejněných v mezinárodních, recenzovaných časopisech [79] a [76].

1.2 Základní rovnice

Přerušením křivky volné části meridiánu pneumatické pružiny k v bodech M a N , budou v těchto bodech působit pouze radiální síly. Tím by veškerá axiální síla pružiny byla dána působením vzduchu na plochy vymezené kružnicemi vzniklými rotací těchto bodů kolem osy y .



Obrázek 1.1: Konstrukce vlnovcové pružiny - řez osou rotace; Ω_1 -dolní příruba; Ω_2 -horní příruba; k -křivka volné části meridiánu (stěny) pneumatické pružiny; R_e -poloměr efektivní plochy; P , Q -koncové body meridiánu; T_1 , T_2 -body dotyku; M , N -fiktivní bod uvolnění

Tato plocha se nazývá „efektivní plocha“ [38] a je dána vztahem

$$S(z) = \pi R_e^2(z) \quad , \quad (1.1)$$

kde $R_e(z)$ je radius bodů uvolnění M nebo N . Použitím principu virtuálních prací, bude pro výpočet efektivní plochy získán jiný vztah

$$S(z) = -\frac{dV(z)}{dz} \quad , \quad (1.2)$$

kde $V(z)$ je vnitřní objem pneumatické pružiny. Posledním důležitým parametrem pneumatické pružiny je „ukazatel efektivní plochy“

$$U(z) = \frac{dS(z)}{dz} \quad . \quad (1.3)$$

1.2.1 Teorie vícevlenných vlnovcových pružin



Obrázek 1.2: Třívlnná pneumatická pružina

Požadavek zvýšení zdvihu, při zachování dané efektivní plochy (nosnosti) je řešen sériovým řazením vlnovců.

Jednotlivé vlnovce jsou od sebe odděleny oddělovacími kroužky. Oddělovací kroužky mají většinou kruhový průřez. Při velkém stlačení pružiny ale může docházet k dotyku sousedních vlnovců. Za jistých provozních podmínek (vysoké teploty pryže) dochází při kontaktu ke slepování. Při následném oddalování vln pak dochází k vytrhávání částic pryže a tím k rychlejšímu opotřebení a ztrátě užitných vlastností pružiny. Trendem poslední doby jsou kroužky, které zabraňují kontaktu sousedních vlnovců.

Obecná pneumatická vlnovcová pružina je složena z n -vlnovců viz obrázek 1.2. Jednotlivé vlnovce jsou vzájemně propojeny, takže platí

$$p = p_i \quad i = 1, 2, \dots, n \quad ,$$

kde p je tlak v pružině, p_i je tlak v i -tém vlnovci a n je počet vlnovců tvořících pružinu.

Pro sériové řazení vlnovců pak ze zákona akce a reakce musí platit

$$F = F_i = pS_i \quad i = 1, 2, \dots, n \quad ,$$

kde F je nosnost pružiny, F_i je nosnost i -tého vlnovce a S_i je efektivní plocha i -tého vlnovce.

Z výše uvedených vztahů vyplývá, že všechny vlnovce tvořící vícevltnou pružinu, musí mít v rovnovážném stavu stejné efektivní plochy.

$$S_i = S(z) \quad i = 1, 2, \dots, n \quad , \quad (1.4)$$

kde $S(z)$ je efektivní plocha pneumatické pružiny pro dané stlačení/roztažení z .

Toho je dosaženo změnou výšky H_i jednotlivých vlnovců při splnění podmínky, že celková výška pružiny je dána součtem výšek jednotlivých vlnovců,

$$H = \sum_{i=1}^n H_i \quad i = 1, 2, \dots, n \quad , \quad (1.5)$$

kde H je celková výška pružiny, H_i je výška i -tého vlnovce.

1.2.2 Model č.1 - maximalizace objemu

Tento model hledá takový tvar volné části meridiánu pružiny, který maximalizuje vnitřní objem pružiny V . Objem pružiny V je dán rotací plochy vymezené meridiánem kolem osy rotace o . Při uvažované dokonalé tuhosti stěny (nedochází k jejímu prodlužování vlivem sil v ní působících), je délka meridiánu pružiny L (suma délky meridiánu od bodu P do bodu T_2 , délka volné části meridiánu, označme jako křivku k a délka meridiánu od bodu Q do bodu T_1) konstantní a nezávisí na stlačení pružiny ani na jejím vnitřním tlaku.

Křivku k volné části meridiánu můžeme zapsat parametricky pomocí rovnic

$$x = x(s) \quad , \quad y = y(s) \quad , \quad (1.6)$$

kde platí

$$dx^2 + dy^2 = ds^2 \quad , \quad (1.7)$$

a pak můžeme vztah dále upravit na

$$(x')^2 + (y')^2 = 1 \quad . \quad (1.8)$$

Vnitřní objem vlnovcové pneumatické pružiny je pak dán

$$V = \int_0^L xy dx = \int_0^L xx' y ds \quad . \quad (1.9)$$

Koncové body meridiánu P a Q mají souřadnice $P = [x(0), y(0)]$, $Q = [x(L), y(L)]$. Úlohou pak je nalezení souřadnic bodu meridiánu $x(s)$ a $y(s)$, které maximalizují rovnici (1.9) a splňují okrajové podmínky

$$[x(s), y(s)] \notin \Omega_1 \cup \Omega_2 \quad , \quad (1.10)$$

$$[x(s), y(s)] \in \Gamma_1 \Rightarrow [x'(s), y'(s)] \cdot \vec{n}_{\Gamma_1} = 0 \quad , \quad (1.11)$$

$$[x(s), y(s)] \in \Gamma_2 \Rightarrow [x'(s), y'(s)] \cdot \vec{n}_{\Gamma_2} = 0 \quad , \quad (1.12)$$

kde Ω_1 a Ω_2 jsou oblasti popisující dolní a horní přírubu pružiny, Γ_1 a Γ_2 jsou hranice oblastí Ω_1 a Ω_2 .

Úlohu nalezení maximálního objemu V , lze převést s využitím metody Lagrangeových multiplikátorů na nalezení maxima funkcionálu

$$\Phi = \int_0^L xx' y ds + \int_0^L \lambda [x'(s)^2 + y'(s)^2 - 1] ds \quad , \quad (1.13)$$

kde $x(s)$, $y(s)$ a $\lambda(s)$ jsou neznámé funkce parametru s .

K nalezení maxima funkcionálu (1.13) bude použito následujících variací funkcionálu, které se musí rovnat nule

$$x'y - (xy)' - 2(\lambda x')' = 0 \quad , \quad (1.14)$$

$$xx' - 2(\lambda y)' = 0 \quad . \quad (1.15)$$

Tyto rovnice spolu s podmínkami (1.8), (1.10), (1.11) a (1.12) představují soustavu diferenciálních rovnic pro neznámé $x(s)$, $y(s)$ a $\lambda(s)$. Eliminací $\lambda(s)$ z rovnic (1.14) a (1.15), získáme systém diferenciálních rovnic 2. řádu,

$$x'' = \frac{-2xy'^2}{x^2 - C}, \quad y'' = \frac{2xx'y}{x^2 - C} \quad . \quad (1.16)$$

Místo volitelného parametru C je vhodné zavést křivost ρ . Z elementární diferenciální geometrie vyplývá

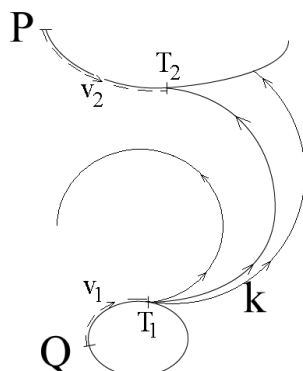
$$x''^2 + y''^2 = \rho^2 \quad , \quad (1.17)$$

pak lze z rovnic (1.16) a (1.17) vyjádřit ρ a rovnici (1.16) upravit na tvar

$$\rho = \frac{2xy'^2}{x^2 - C} \quad , \quad x'' = -\rho y' \quad , \quad y'' = \rho x' \quad . \quad (1.18)$$

Jednoduchou úpravou pak lze získat soustavu diferenciálních rovnic 1. řádu

$$\begin{aligned} x' &= x_1 \quad , \\ y' &= y_1 \quad , \\ x_1' &= -\rho y_1 \quad , \\ y_1' &= \rho x_1 \quad , \\ \rho' &= \rho \frac{x_1}{x} \quad . \end{aligned} \quad (1.19)$$



Obrázek 1.3: Algoritmus iterací; k -křivka volné části meridiánu (stěny) pneumatické pružiny; P , Q -koncové body meridiánu; T_1 , T_2 -body dotyku; v_1 -délka hranice Γ_1 mezi body Q a T_1 ; v_2 -délka hranice Γ_2 mezi body P a T_2

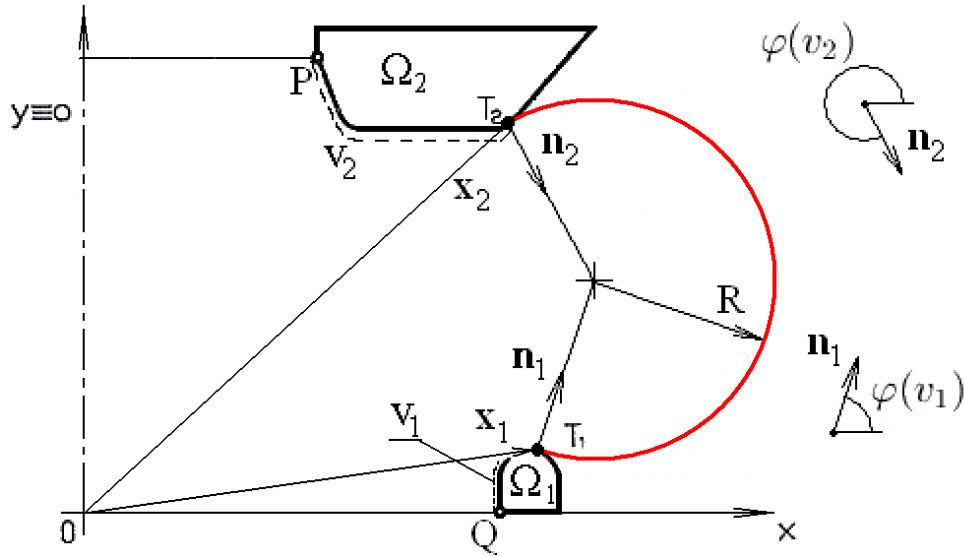
Implementace modelu č.1 Soustava diferenciálních rovnic (1.19) je řešena čtyřbodovou metodou Runge-Kutta. Algoritmus řešící tento model tvoří dva vnořené iterační cykly. Vnější iterační cyklus hledá takový bod T_1 , pro který bude mít meridián pružiny požadovanou délku L . Vnitřní iterační cyklus hledá křivku volné části meridiánu, která splňuje okrajové podmínky (1.10), (1.11) a (1.12) změnami výchozí křivosti ρ_0 v bodě T_1 .

Iterační postup hledání křivky volné části meridiánu, viz obr.1.3, nebyl příliš efektivní [76], [101], [103]. Výpočet tak trval velmi dlouhou dobu. Jeho použití pro vícevlonné vlnovcové pneumatické pružiny bylo prakticky nepoužitelné. Tento model ale přinesl následující zásadní poznatky pro formulaci nového modelu. Pokud bude křivost dána jako konstantní $\rho = konst$, pak první čtyři rovnice v soustavě (1.19) jsou diferenciální rovnice kružnice o poloměru $r = \frac{1}{\rho}$. Z páté rovnice v soustavě (1.19) plyne, že pro velká x , tzn. ve velké vzdálenosti od osy o platí $\rho' \approx 0$ a tedy $\rho = konst$. To znamená, že pro $x \rightarrow \infty$ konverguje tvar křivky k ke kružnici. Tato vlastnost dala vzniknout alternativnímu modelu.

1.2.3 Modelu č.2 - kruhový oblouk

Tento model uvažuje při výpočtu geometrických charakteristik vlnovcových pneumatických pružin křivku volné části meridiánu jako část kruhového oblouku.

Volná vlna Model volné vlny je založen na předpokladu, že volná část meridiánu, křivka k je kruhový oblouk. Oprávněnost tohoto zjednodušujícího předpokladu je potvrzena v [78], srovnáním s křivkou maximálního objemu.



Obrázek 1.4: Volná část vlny; Ω_1 -dolní příruba; Ω_2 -horní příruba; P , Q -koncové body meridiánu; T_1 , T_2 -body dotyku; v_1 -délka hranice Γ_1 mezi body Q a T_1 ; v_2 -délka hranice Γ_2 mezi body P a T_2 x_1 , x_2 -vektory souřadnic dotykových bodů T_1 a T_2 ; n_1 , n_2 -jednotkové vektory vnějších normál hranic Γ_1 a Γ_2 oblastí Ω_1 a Ω_2 v dotykových bodech T_1 a T_2 ; φ_1 , φ_2 -úhly jednotkových vektorů n_1 a n_2 ; R -poloměr kruhového oblouku

Pro tento předpoklad lze úlohu popsat následujícími třemi rovnicemi

$$f_1 \equiv v_1 + v_2 + R(\varphi_2(v_2) - \varphi_1(v_1)) - L = 0, \quad (1.20)$$

$$\mathbf{f}_{2,3} = \begin{bmatrix} f_2 \\ f_3 \end{bmatrix} \equiv (\mathbf{x}_1(v_1) + R \mathbf{n}_1(v_1)) - (\mathbf{x}_2(v_2) + R \mathbf{n}_2(v_2)) = \mathbf{0},$$

kde v_1 je délka části meridiánu, které leží na hranici Γ_1 oblasti Ω_1 mezi body Q a T_1 , v_2 je délka části meridiánu, které leží na hranici Γ_2 oblasti Ω_2 mezi body P a T_2 , R je poloměr vlny, φ_1 , φ_2 jsou úhly vektorů \mathbf{n}_1 , \mathbf{n}_2 viz obrázek 1.4.

Soustava tří nelineárních rovnic (1.20) o třech neznámých v_1 , v_2 a R je numericky řešena pomocí Newtonovy metody. Úloha konverguje velice rychle a dostatečně přesné řešení je ve většině případů nalezeno po 3 až 15 iteracích.

Porovnání výsledků modelů č.1 a č.2 Při ověřování, zda modely dávají podobné výsledky, došlo k zajímavému zjištění. Hodnota efektivní plochy vypočtená vztahy (1.1) a (1.2) pro model hledající křivku maximálního vnitřního objemu shodná. Tato skutečnost sloužila k ověření, že nalezená křivka

skutečně ohraničuje maximální objem. U modelu nahrazující volnou část meridiánu kruhovým obloukem však vztah (1.1) dává výrazně odlišné výsledky. Objem vypočtený oběma modely je téměř shodný. Objem vypočtený modelem č.2 je menší o cca 0.1%, ale má stejný průběh. Efektivní plocha vypočtená vztahem (1.2) pak dává stejné výsledky (bylo dosaženo limitu strojové přesnosti). Tento poznatek byl publikován v [79] a [80]. Další vývoj byl tedy zaměřen na model č.2 s tím, že hodnota efektivní plochy je počítána vztahem (1.2).

Další vývoj modelu č.2 Model založený na náhradě volné části meridiánu vlnovce kruhovým obloukem lze úspěšně dále rozvíjet. Zejména o problematiku kontaktu sousedních vln. Pro případ kontaktu sousedních vln u vícevlenných vlnovcových pružin byl model č.2 rozšířen o všechny možné situace omezení tvaru vlnovce.

Model přistupuje k n -vlenným vlnovcovým pružinám jako k n jednovlenným sériově spojeným pružinám. V každém výpočetním kroku jsou iteračně hledány výšky jednotlivých vlnovců H_i tak, aby byla splněna rovnice (1.4) a podmínka vycházející z rovnice (1.5)

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

Tak je zajištěna plná obecnost numerického modelu a je tedy možné řešit pneumatické pružiny s libovolným počtem vln. Model dokáže vypočítat geometrické charakteristiky i pro vícevlenné pružiny, kdy každá vlna má odlišné parametry.

Omezení vlny zdola Pro tento případ budeme předpokládat, že poloměr kruhového oblouku je shodný jak pro vnitřní, tak i pro vnější část volné části meridiánu. Oprávněnost tohoto předpokladu je ověřena v [53].

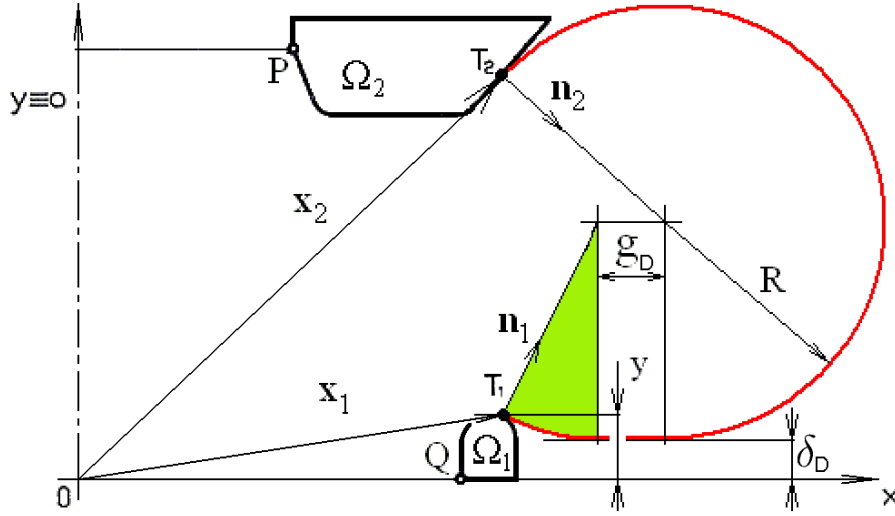
Soustavu rovnic (1.20) rozšíříme o proměnnou g_D viz obrázek 1.5.

$$f_1 \equiv v_1 + v_2 + R(\varphi_2(v_2) - \varphi_1(v_1)) + g_D - L = 0 \quad , \quad (1.21)$$

$$\mathbf{f}_{2,3} = \begin{bmatrix} f_2 \\ f_3 \end{bmatrix} \equiv \left(\mathbf{x}_1(v_1) + R \mathbf{n}_1(v_1) + \begin{bmatrix} g_D \\ 0 \end{bmatrix} \right) - \left(\mathbf{x}_2(v_2) + R \mathbf{n}_2(v_2) \right) = \mathbf{0} \quad .$$

Soustava tří rovnic tak obsahuje čtyři neznámé - v_1 , v_2 , R a g_D - a má tedy nekonečně mnoho řešení. Pro danou konfiguraci však hodnota poloměru R je jednoznačně definována proměnnou v_1 , poloměr je tedy funkcí proměnné $R(v_1)$ viz zelená výseč na obrázku 1.5.

$$R(v_1) = \frac{(y_{T_1} - \delta_D)}{1 - \sin\varphi_1(v_1)} \quad . \quad (1.22)$$



Obrázek 1.5: Vlna s omezením zdola; g_D -délka kontaktu s limitující plochou; Ω_1 -dolní příruba; Ω_2 -horní příruba; P, Q -koncové body meridiánu; T_1, T_2 -body dotyku; v_1 -délka hranice Γ_1 mezi body Q a T_1 ; v_2 -délka hranice Γ_2 mezi body P a T_2 x_1, x_2 -vektory souřadnic dotykových bodů T_1 a T_2 ; n_1, n_2 -jednotkové vektory vnějších normál hranic Γ_1 a Γ_2 oblastí Ω_1 a Ω_2 v dotykových bodech T_1 a T_2 ; φ_1, φ_2 -úhly jednotkových vektorů n_1 a n_2 ; R -poloměr kruhového oblouku

První rovnici ze soustavy (1.21) pak lze upravit na tvar, kde se proměnná g_D stává funkcí proměnných v_1 a v_2

$$g_D(v_1, v_2) = L - \left[v_1 + v_2 + R(v_1) \left(\varphi_2(v_2) - \varphi_1(v_1) \right) \right] , \quad (1.23)$$

a lze ji dosadit do zbývajících dvou rovnic. Řád soustavy tak poklesne o jeden stupeň. Soustavu zbylých dvou rovnic z (1.21) o dvou neznámých v_1 a v_2 , lze opět řešit pomocí Newtonovy metody.

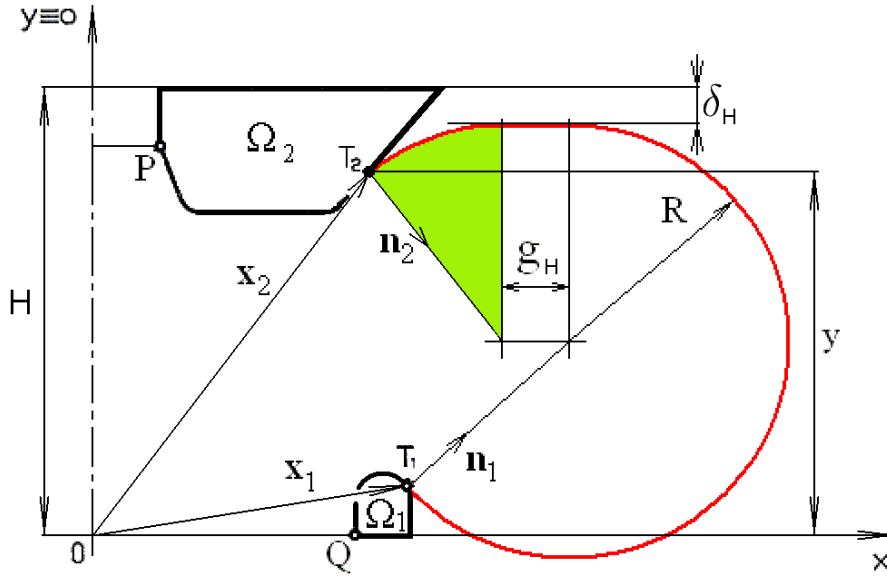
Omezení vlny shora Při odvozování základních vztahů pro tento případ bude postupováno podobně jako v úloze *omezení zdola* viz kapitola 1.2.3.

Soustavu rovnic (1.20) rozšíříme o proměnnou g_H viz obrázek 1.6.

$$f_1 \equiv v_1 + v_2 + R \left(\varphi_2(v_2) - \varphi_1(v_1) \right) + g_H - L = 0 , \quad (1.24)$$

$$\mathbf{f}_{2,3} = \begin{bmatrix} f_2 \\ f_3 \end{bmatrix} \equiv \left(\mathbf{x}_1(v_1) + R \mathbf{n}_1(v_1) \right) - \left(\mathbf{x}_2(v_2) + R \mathbf{n}_2(v_2) + \begin{bmatrix} g_H \\ 0 \end{bmatrix} \right) = \mathbf{0} .$$

Soustava tří rovnic tak obsahuje čtyři neznámé - v_1, v_2, R a g_H - a má tedy nekonečně mnoho řešení. Pro danou konfiguraci však hodnota polo-



Obrázek 1.6: Vlna s omezením shora; g_H -délka kontaktu s limitující plochou; Ω_1 -dolní příruba; Ω_2 -horní příruba; P , Q -koncové body meridiánu; T_1 , T_2 -body dotyku; v_1 -délka hranice Γ_1 mezi body Q a T_1 ; v_2 -délka hranice Γ_2 mezi body P a T_2 ; x_1 , x_2 -vektory souřadnic dotykových bodů T_1 a T_2 ; n_1 , n_2 -jednotkové vektory vnějších normál hranic Γ_1 a Γ_2 oblastí Ω_1 a Ω_2 v dotykových bodech T_1 a T_2 ; R -poloměr kruhového oblouku

měru R je jednoznačně definována proměnnou v_2 , poloměr je tedy funkcí proměnné $R(v_2)$ viz zelená výseč na obrázku 1.6.

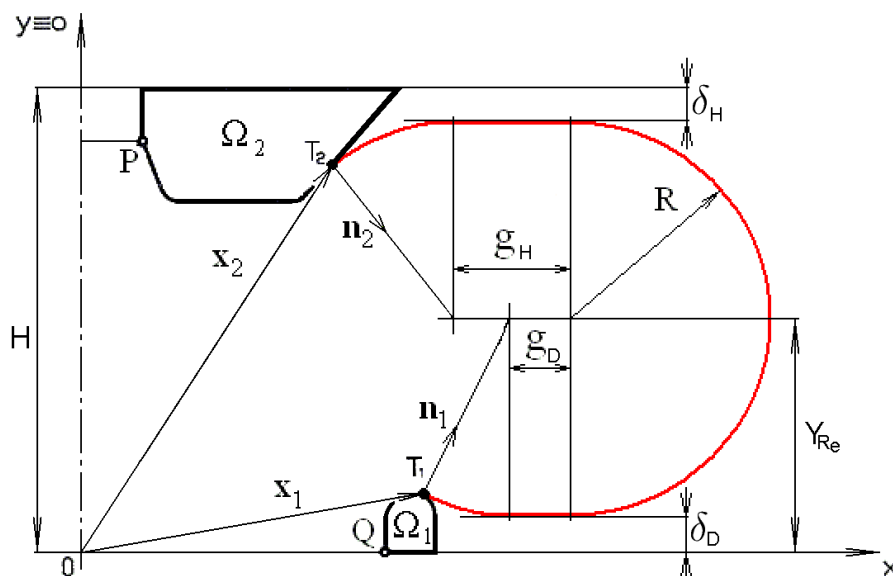
$$R(v_2) = \frac{(H - y_{T_2} - \delta_H)}{1 + \sin\varphi_2(v_2)} . \quad (1.25)$$

První rovnici soustavy (1.24) lze upravit na tvar, kdy se proměnná g_H stává funkcí proměnných v_1 a v_2 .

$$g_H(v_1, v_2) = L - \left[v_1 + v_2 + R(v_2) \left(\varphi_2(v_2) - \varphi_1(v_1) \right) \right] , \quad (1.26)$$

a lze ji dosadit do zbývajících dvou rovnic. Řád soustavy tak poklesne o jeden stupeň. Soustavu zbylých dvou rovnic z (1.24) o dvou neznámých v_1 a v_2 , lze opět řešit pomocí Newtonovy metody.

Dvojité omezení vlny V případě, že bude uvažováno jak omezení shora, tak omezení zdola, se případ z matematického hlediska zjednoduší, přesto, že vzroste počet proměnných viz obrázek 1.7.



Obrázek 1.7: Dvojité omezení vlny; g -délka kontaktu sousedních vln; Ω_1 -dolní příruba; Ω_2 -horní příruba; P, Q -koncové body meridiánu; T_1, T_2 -body dotyku; v_1 -délka hranice Γ_1 mezi body Q a T_1 ; v_2 -délka hranice Γ_2 mezi body P a T_2 ; x_1, x_2 -vektory souřadnic dotykových bodů T_1 a T_2 ; n_1, n_2 -jednotkové vektory vnějších normál hranic Γ_1 a Γ_2 oblastí Ω_1 a Ω_2 v dotykových bodech T_1 a T_2 ; R -poloměr kruhového oblouku

Vzhledem k tomu, že v tomto případě vnější volná část vlny spojuje hranice limitující velikost vlny, je poloměr vlny dán vztahem

$$R = \frac{H - \delta_D - \delta_H}{2} \quad , \quad (1.27)$$

a výška středu tohoto poloměru je

$$Y_{Re} = R + \delta_D \quad . \quad (1.28)$$

Znalostí R a Y_{Re} je možné úlohu rozdělit na tři nezávislé úlohy

- nalezení proměnné v_1 (poloha kontaktního bodu T_1) tak, aby byla splněna rovnice

$$f_1 \equiv x_{1,y}(v_1) + R n_{1,y}(v_1) - Y_{Re} = 0 \quad . \quad (1.29)$$

Tuto rovnici lze opět řešit pomocí Newtonovy metody.

- nalezení proměnné v_2 (poloha kontaktního bodu T_2) je obdobné jako pro proměnnou v_1 . Hledáme řešení rovnice

$$f_2 \equiv x_{2,y}(v_2) + R n_{2,y}(v_2) - Y_{Re} = 0 \quad . \quad (1.30)$$

Tuto rovnici lze opět řešit pomocí Newtonovy metody.

- nalezení proměnných g_H a g_D . Pro nalezení dvou proměnných jsou potřeba dvě rovnice. První vychází z prvních rovnic v (1.21) a (1.24)

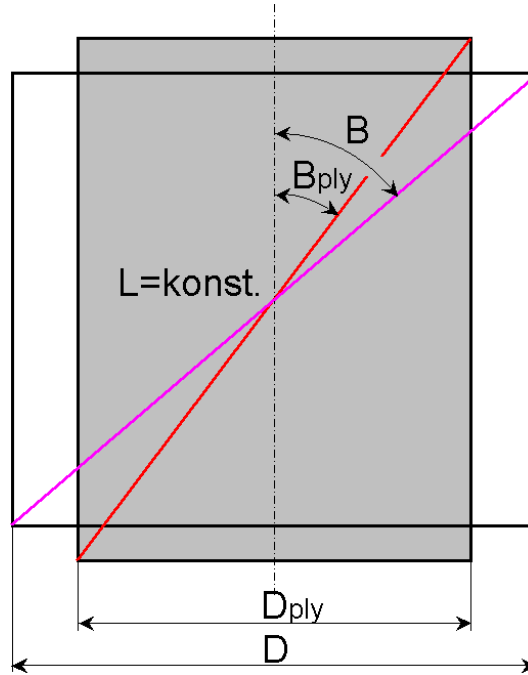
$$\left[v_1 + v_2 + R(\varphi_2(v_2) - \varphi_1(v_1)) + g_H + g_D \right] - L = 0 \quad , \quad (1.31)$$

druhá z druhých rovnic v (1.21) a (1.24)

$$x_{1,x} + R n_{1,x} + g_D = x_{2,x} + R n_{2,x} + g_H \quad . \quad (1.32)$$

Tyto rovnice lze snadno vyřešit analyticky a lze tak přímo získat hodnoty proměnných g_H a g_D .

Mechanika kordových vláken Změna tvaru pružiny způsobuje změnu sklonu kordových vláken, viz obrázek 1.8. Tato skutečnost byla potvrzena provedenými experimenty.



Obrázek 1.8: Mechanika kordových vláken

Efektivní plocha ale není příliš citlivá na malé změny tvaru pružiny. Tento předpoklad byl využit při odvození modelu z kapitoly 1.2.3 a byl potvrzen v [79] a [80]. Je tedy možné provést zjednodušení a zanedbat síly nutné k přetvarování.

Mechanismus změny úhlu křížení kordových vláken lze popsat rovnicí

$$\sin\beta = \sin\beta_{ply} \frac{D}{D_{ply}} \quad , \quad (1.33)$$

kde β je úhel sklonu kordových vláken v daném místě pružiny o průměru D , β_{ply} je počáteční úhel sklonu kordových vláken (konfekce) při počátečním průměru D_{ply} .

Výše popsaný výpočetní algoritmus je tedy upraven tak, aby zohlednil vlastnosti dané rovnicí (1.33). Pomocí rovnice (1.33) je vypočtena, pro výchozí (statickou) výšku pružiny, délka kordových vláken

$$L_{K_0} = \int_{PQ} \left[\frac{ds}{\cos\beta(\beta_0, D_0, D)} \right]_{Meridian} . \quad (1.34)$$

Pro jednotlivé kroky zdvihu (stlačení/roztážení) pružiny z , je pak délka kordových vláken L_K dána integrálem

$$L_K = \int_{PQ} \left[\frac{ds}{\cos\beta(\beta_0, D_0, D)} \right]_{Meridian} . \quad (1.35)$$

Integrály (1.34) a (1.35) není možné řešit analyticky a proto jsou řešeny numericky.

První rovnice v soustavách (1.20), (1.21) a (1.24) a v rovnici (1.31) jsou pak nahrazeny rovnicí

$$f_1 \equiv L_K - L_{K_0} = 0 \quad , \quad (1.36)$$

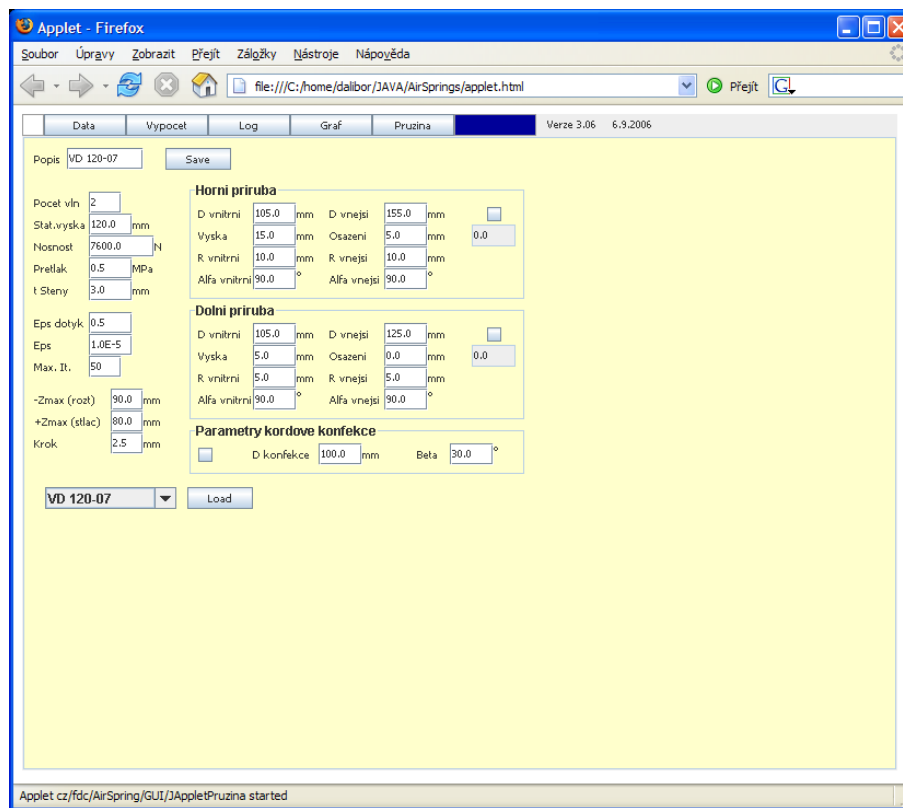
kde L_{K_0} je délka kordových vláken pružiny ve statické výšce a L_K je délka kordových vláken pružiny v dané výšce - pro dané roztážení/stlačení z .

1.3 Implementace modelu

Při implementaci tohoto modelu byla velká pozornost věnována způsobu, jakým bude model zpřístupněn uživatelům.

U rozsáhlých modelů je běžné, že pracují v dávkovém režimu. Uživatel své požadavky, vstupní data, zadává do souborů, nejčastěji textových. Často k vytváření vstupních souborů, vstupních dat modelu slouží pomocné programy. Souhrnně se těmto přípravným pracem říká preprocessing. Připravená vstupní data jsou poté zpracována modelem. Tento krok se nazývá processing. Výsledky, které model vypočetl, jsou uloženy opět do souborů. Jejich následná prezentace a vyhodnocování se nazývá postprocessing. Tento postup je vhodný pro rozsáhlé modely, jejichž čas potřebný k vypočtení řešení je dlouhý.

Tento model je relativně jednoduchý a čas potřebný k vyřešení úlohy se pohybuje v řádu desetin sekund. Nutnost volání různých programů pro zadání vstupních dat a pro prezentaci výsledků by výrazným způsobem snížilo užitnou hodnotu modelu. Proto byl model vybaven grafickým uživatelským rozhraním. Doplněním modelu o grafické uživatelské rozhraní je jeho používání zpřístupněno běžným uživatelům, umožňuje jim vstup za použití

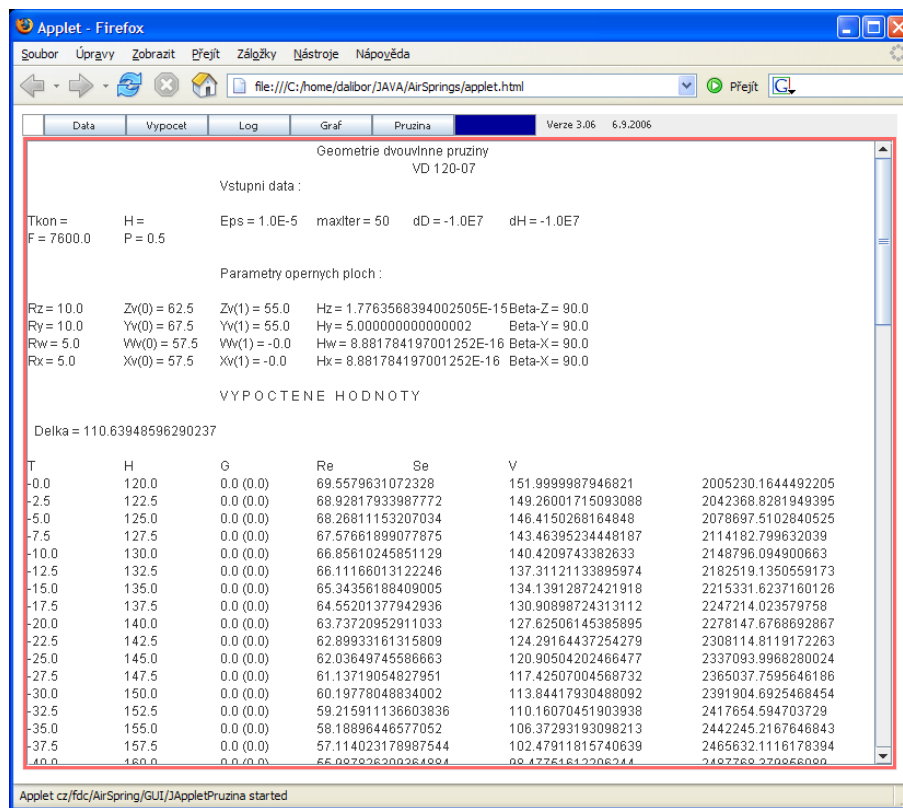


Obrázek 1.9: Applet - pružina VD 120-07 - panel vstupních dat

termínů jim blízkých a poskytuje tak výrazně vyšší komfort při práci s modelem.

Tvorba programů pro externí použití a jejich používání externími uživateli sebou nese problémy s distribucí modelu, jeho oprav a vylepšení. Velice zajímavá se z tohoto hlediska jeví technologie appletů, programů, které lze zařadit jako prvky webových stránek. Distribuce nového modelu nebo opravené verze se redukuje na uložení příslušného programu na jediné místo, na příslušný server zajišťující dostupnost daných webovských stránek. Tento způsob distribuce je zajímavý i pro uživatele. Součástí všech dnes provozovaných operačních systémů je program pro prezentaci webových stránek. Téměř všechny dnes provozované programy pro prezentaci webových stránek, podporují práci s applety. Uživatel tedy nemusí podstupovat proces instalace dalšího programu na svůj počítač a sledovat dostupnost nových verzí a provádět jejich instalaci.

Proto byl jako jazyk pro implementaci zvolen jazyk Java. To znamenalo použít při stavbě modelu objektově orientovaný návrh. Oba modely, model hledající křivku maximálního objemu i model používající náhradní



Obrázek 1.10: Applet - pružina VD 120-07 - panel protokolu o běhu modelu

kruhový oblouk, byly úspěšně implementovány pro jednovlhnou pneumatickou pružinu. Po prokázání shodných výsledků obou modelů [78] byl další vývoj modelu maximalizujícího objem pneumatické pružiny ukončen. Další vývoj byl zaměřen na model pracující s kruhovým obloukem.

Základním krokem bylo rozdělení projektu do dvou balíčků (package).

Matematický balíček obsahuje rozhraní a třídy řešící matematickou část modelu. Rozhraní definují základní podoby tříd. Třídy realizují jednotlivé konstrukční prvky pneumatické pružiny a obsahují metody vlastního výpočetního jádra modelu. Aby bylo možné používat tento balíček samostatně v dávkovém režimu práce, byly vytvořeny třídy potřebné pro vstup/výstup dat z/do souborů.

Objektový přístup k matematické části modelu přinesl zjednodušení a zpřehlednění zdrojového kódu. Jako vhodný příklad lze uvést realizaci funkcí $\mathbf{x}_1(v_1)$, $\mathbf{x}_2(v_2)$, $\mathbf{n}_1(v_1)$, $\mathbf{n}_2(v_2)$, $\varphi_1(v_1)$ a $\varphi_2(v_2)$, které popisují tvar příslušných přírub. Výpočet jejich funkčních hodnot a hodnot jejich derivací pro hledané v_1 a v_2 potřebných pro použití Newtonovy metody je

realizován jako volání příslušné metody konkrétní třídy. V případě dalšího vývoje, například výrazné změny tvaru příruby, stačí vytvořit třídu, která bude implementovat dané funkce pro daný tvar příruby. S využitím dědičnosti a polymorfizmu pak nebude nutné rozsáhle zasahovat do původního modelu. Stačí změna pouhých dvou řádků, pro každou přírubu jeden.

Grafický balíček obsahuje třídy řešící zpřístupnění matematické části modelu pomocí grafického uživatelského rozhraní.

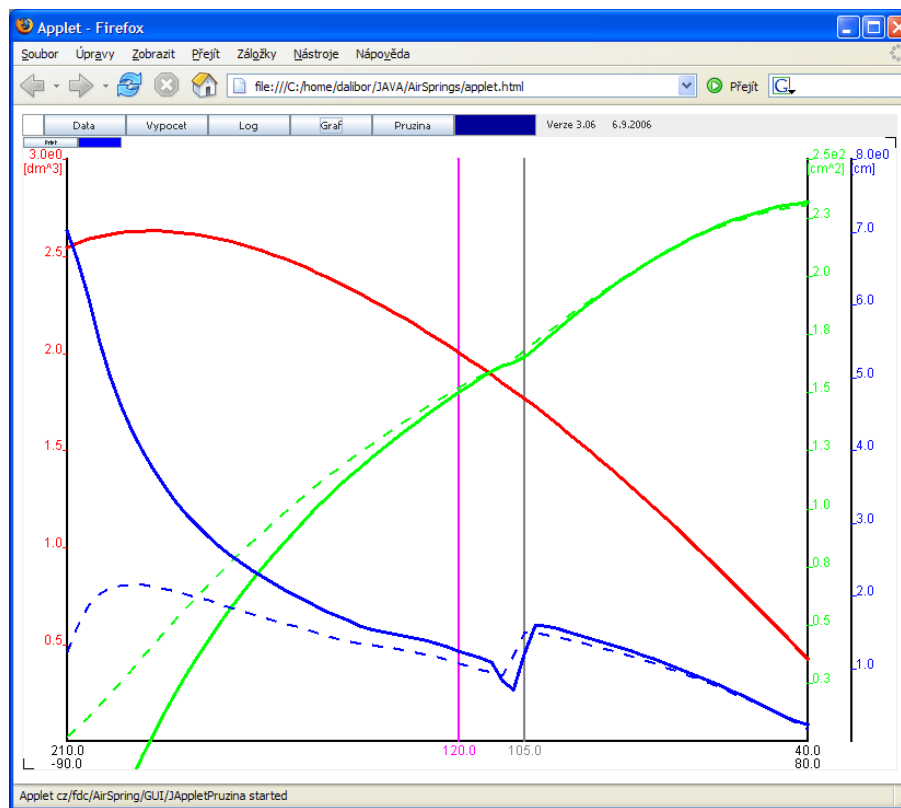
Použití technologie appletů ovlivnilo návrh grafického uživatelského rozhraní. Applety neumožňují použít rámů (frame). To způsobilo, že není možné použít pro řízení programu *popup* menu, typické pro *okenní* systémy.

Bylo zvoleno alternativní řešení s použitím panelů. Pro ovládání bylo vytvořeno vlastní menu. Menu je tvořeno pěti tlačítky s označeními **Data**, **Výpočet**, **Log**, **Graf** a **Pružina**. Stiskem příslušného tlačítka se zobrazí příslušný panel. Tlačítko **Výpočet** pak spustí vlastní výpočet. Průběh výpočtu je monitorován a je zobrazována informace o postupu výpočtu. Po ukončení výpočtu dojde automaticky k přepnutí na panel zobrazující protokol o běhu programu. Výpočet bez zohlednění mechaniky kordu trvá řádově desetiný sekundy. Se zohledněním mechaniky kordu je potřebný čas v řádu sekund.

Na obrázku 1.9 je ukázka struktury panelu **Data**, který slouží pro zadání vstupních dat. Obsahuje všechny parametry, které jsou nutné pro jednoznačné zadání pneumatické vlnovcové pružiny. Na obrázku 1.10 je ukázka panelu **Log** s textovým protokolem o výpočtu. V tomto protokolu jsou na začátku pro kontrolu uvedena vstupní data. Dále pak všechna podstatná data, která byla vypočtena za běhu programu. Závěrečnou, ale podstatnou část, tvoří tabulka geometrických charakteristik. Tyto charakteristiky je možné kopírováním textu přenést a dále zpracovat, např. v tabulkovém procesoru. Pro zrychlení a zefektivnění práce s modelem bylo grafické rozhraní rozšířeno o panely pro přímou interpretaci vypočtených výsledků.

Na obrázcích 1.11 a 1.12 jsou ukázky panelů realizujících grafickou interpretaci vypočtených výsledků. Na obrázku 1.11 je panel s grafem geometrických charakteristik pneumatické vlnovcové pružiny. Graf je ve formě, která je obvyklá v technické literatuře zabývající se geometrickými charakteristikami pneumatických pružin. Na obrázku 1.12 je panel schématicky zobrazující podobu pružiny (polohu přírub a tvar volné části vlnovce pro zadanou výšku). Tento panel je interaktivní. Posunem myši při stisknutém levém tlačítku myši se mění výška zobrazované pružiny. Na obrázku 1.12 jsou pro ilustraci zobrazeny čtyři výšky současně.

Možnost sledovat práci jednotlivých částí pružiny umožňuje konstruktérovi lépe pochopit vnitřní zákonitosti a využít je pro optimalizaci návrhu.



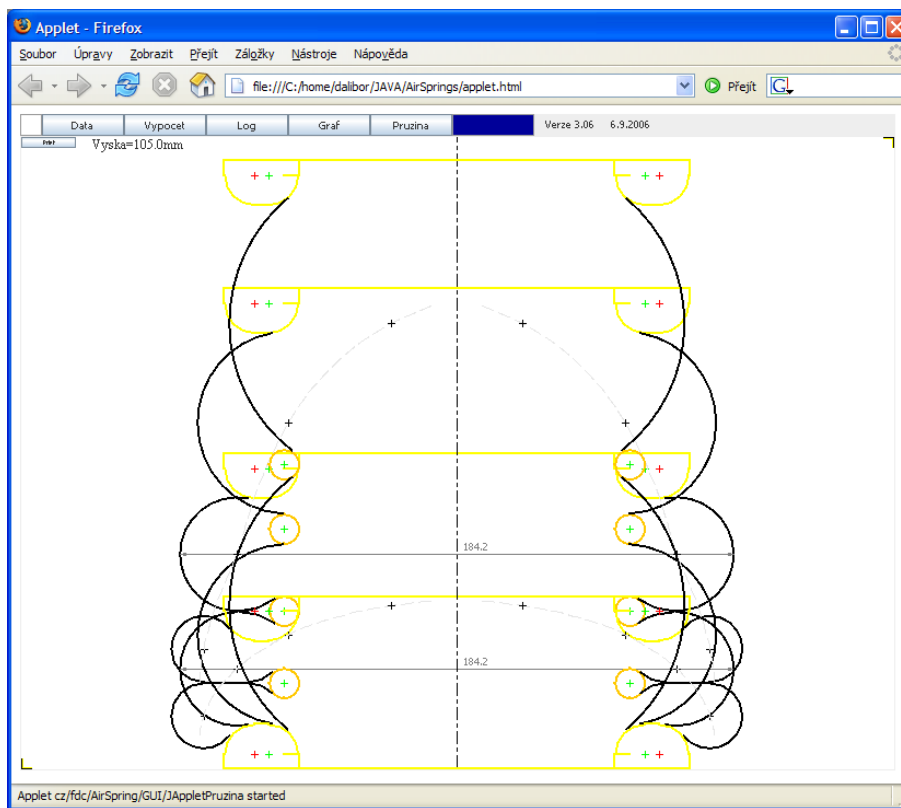
Obrázek 1.11: Applet - pružina VD 120-07 - panel grafů geometrických charakteristik

1.4 Výsledky

V rámci tohoto projektu byly vypracovány dva typy modelů, dvě varianty řešení:

- Pružný měch zaujímá v rovnovážné poloze tvar, při kterém je tlaková energie stlačeného vzduchu minimální a tedy objem vzduch uvnitř pružiny je maximální. Nevýhodou tohoto modelu je značná výpočetní časová náročnost.
- Skutečný tvar meridiánu pružného měchu v rovnovážné poloze je ve volných úsecích nahrazen kruhovými oblouky.

Výpočty provedené těmito modely prokázaly, že oba teoretické přístupy dávají velice podobné výsledky. Model nahrazující volné úseky kruhovými oblouky se ukázal velice perspektivní díky své vysoké rychlosti a byl doplněn o problematiku kontaktu sousedních vln a zohlednění mechaniky kordu. Pro



Obrázek 1.12: Applet - průžina VD 120-07 - panel zobrazení tvaru průžiny

snadné používání byl doplněn o grafické uživatelské rozhraní. Toto rozhraní zpřístupňuje používání modelu běžným uživatelům.

Při zadávání vstupních parametrů pneumatické vlnovcové průžiny je možné volitelně zadávat i parametry kordové konfekce; tj. výchozí průměr kordové konfekce a výchozí úhel sklonu kordové konfekce.

Výsledky vypočtené modelem se zohledněním mechaniky kordových vláken jsou v obrazové příloze na obrázcích A.1 a A.2. V grafech jsou zobrazeny křivky statických charakteristik (objemu, efektivní plochy a ukazatele efektivní plochy) pro různé výchozí sklony kordových vláken. To umožňuje určit a porovnat vliv mechaniky kordu na statické charakteristiky. Extrémní a prakticky nerealizovatelný výchozí sklon $\beta = 0^\circ$ byl realizován pouze pro ověření úspěšnosti implementace. Výsledky s tímto úhlem sklonu musí odpovídat výsledkům modelu bez zohlednění mechaniky kordu. Pro nenulový výchozí sklon kordových vláken dochází k odchylkám statických charakteristik. Výsledky vypočtené modelem prokázaly, že mechanika kordových vláken má na statické charakteristiky jistý vliv. K nejvýraznějším odchylkám dochází zejména při roztahování průžiny. Zde je nutné zmínit fakt, že model

umožňuje roztažení, které je již prakticky nerealizovatelné. Při velkých roztaženích dochází k vytrhávání pryžového vlnovce příruby.

Model je schopen úspěšně podporovat konstrukci vlnovcových pneumatických pružin. Jeho možnosti však jsou mnohem větší. Po drobných úpravách by byl vhodný i pro návrh pneumatických pružin, u kterých je možné přijmout obdobné předpoklady, na kterých je tento matematický model založen. Např. pružin membránových, diferenčních a kombinovaných (kombinace vakové pružiny s vnější bandáží s pružinou membránovou nebo s pružinou vlnovcovou), u kterých jsou profily opěrných ploch pístů, bandáží, resp. rozpěrných kroužků, mnohem složitější.

Kapitola 2

Model filtračního proudění podzemní vody a transportu rozpuštěných látek

2.1 Podmínky vzniku modelu

Sanace následků těžby uranu v České republice představovala a stále představuje velice komplikovaný úkol. Současnou správu zasažených lokalit zajišťuje státní podnik DIAMO Stráž pod Ralskem. Mezi všeobecně známé patří lokality odkališť o.z. TÚU ve Stráži pod Ralskem, odkaliště o.z. GEAM Dolní Rožínka, soustava odkališť o.z. MAPE Mydlovary. Asi největší pozornost byla věnována uranovému ložisku ve Stráži pod Ralskem. Byl zde vybudován důl Hamr I [88], kde se uranová ruda těžila klasickým hornickým způsobem a zároveň byl v těsné blízkosti provozován důl chemické těžby.

Nejkomplikovanější situace byla na dolu chemické těžby ve Stráži pod Ralskem. Během třiceti let provozu dolu chemické těžby bylo do podzemí vtlačeno 4,1 milionu tun H_2SO_4 , 315 tisíc tun HNO_3 , 112 tisíc tun NH_3 , 26 tisíc tun HF , a 1 400 tun HCl . Procesem podzemního loužení bylo získáno 15 tisíc tun uranu. Následky tohoto technologického procesu byly následující. V cenomanské zvodni se nacházelo 180 milionů m^3 kontaminovaných vod na ploše asi 24 km^2 . V turonské zvodni, která je mimo jiné významnou zásobárnou pitné vody, se nacházelo 80 milionů m^3 kontaminovaných vod na ploše 7,5 km^2 .

Cílem sanace na této lokalitě bylo a stále je (ukončení sanace se předpokládá až kolem roku 2030) snížit koncentraci kontaminantů v cenomanských a turonských vodách na ekologicky rozumnou úroveň, při ekonomicky rozumných nákladech. Ekologická úroveň je taková, která zaručí použitelnost pitných vod čerpaných v Mimoní a dalších místech. Případné ovlivnění čerpaných pitných vod musí být řešitelné běžnými postupy používanými ve vodárenství na úpravu vody. Ekonomická úroveň zohledňuje objem finančních

prostředků, kterou bude celý proces sanace vyžadovat. Využit počítačové modely pro splnění náročných ekologických limitů sanace a pro co nejlepší naplánování jednotlivých kroků, tedy minimalizaci ceny sanace, je zcela logickým a společensky žadáným postupem.

Vzhledem k značným rozměrům kontaminované oblasti, nebývalému množství kontaminovaných látek a dlouhým časovým úsekům (až tisíce let), které bylo nutné řešit, byl velký problém s nalezením modelu (programu), který by byl schopen takové úlohy vyřešit. Velký důraz byl kladen na tzv. bilancování látek. Model musel umožnit sledování množství látek v dané oblasti. To například umožní analyzovat množství látek v turonské a cenomanské zvodni. Sledování množství látek, které přestoupily danou hranici, pak umožní analyzovat množství látek, které přestoupily z cenomanské do turonské zvodně, které unikly do povrchových toků, které zasáhnou zdroje pitné vody. Byl proto vyvinut a používán počítačový model filtračního proudění podzemní vody a transportu rozpuštěných látek unikátních vlastností [81].

V podstatě se jedná o modely dva. Model filtračního proudění podzemní vody [90], [85], [83] a model transportu látek v této vodě rozpuštěných [84], [82]. Při sestavování těchto modelů se postupovalo „od konce“. Nejprve se stanovily vlastnosti, které má splňovat model transportu. Poté, podle požadavků modelu transportu, byl sestaven model filtračního proudění.

Model transportu byl založen na jednoduchém předpokladu. Oblast řešení byla diskretizována sítí, složenou z prvků. Koncentrace rozpuštěných látek je po celém objemu každého prvku konstantní. Výpočet množství látek buď v celé oblasti nebo na daných podoblastech, je pak snadnou záležitostí. K transportu látek rozpuštěných ve vodě mezi jednotlivými prvky dochází přes stěny, kterými prvky spolu sousedí. Model transportu v podstatě představuje soustavu spojených nádob. Každá nádoba má daný objem vody a koncentraci látek ve vodě rozpuštěných. Jsou-li známy toky mezi jednotlivými propojenými nádobami, přetoky přes jednotlivé stěny, lze úlohu řešit jednoduchým upwind schématem.

Jednoduchost transportního modelu způsobuje komplikace při stavbě modelu filtračního proudění. Model filtračního proudění musí řešit výšku hladiny v jednotlivých prvcích a přetoky jednotlivými stěnami. Tyto parametry poskytuje např. smíšená hybridní (Mixed-Hybrid MH) formulace metody konečných prvků. MH formulací se podrobně zabývá [33]. Je ale uvažována pouze pro nasycenou oblast a pouze pro základní tvary prvků. Bylo proto nutné problematiku rozšířit o speciální typ prvku, prizmatický pětistěn. Tento typ prvků je velice vhodný pro použití při modelování hydrogeologických úloh.

Dalším problémem, který bylo nutné při stavbě modelu filtračního proudění vyřešit, bylo hledání volné hladiny a zohlednění nenasycené (vadózní zóny). Pro řešení úloh sanace odkališť, kde nenasycená zóna tvoří podstatnou část řešené oblasti, byl zvolen přístup sloučení těchto oblastí [3].

Autorův podíl na projektu

Projekt lze rozdělit do tří oblastí; teoretické, implementační a aplikační. Autor se aktivně podílel na všech těchto oblastech.

V teoretické části dlouhá léta spolupracoval s Prof. Dr. Ing. Jiřím Maryškou, CSc. [92], [91], [112], [118] při hledání cesty pro řešení úloh filtračního proudění podzemní vody s volnou hladinou. Teoretické práce byly podporovány grantem GAČR 205/96/0921 „*Matematické modely proudění podzemních vod a transportu látek pro účely sanace následků těžby uranu v severních Čechách*“ jehož nositelem byl Prof. Maryška. Autor se na grantu podílel jako spoluřešitel odpovědný za implementaci a aplikační ověření nových teoretických postupů.

Implementační činnost je zcela autorovým dílem. Během vývoje vytvořil řadu různě rozsáhlých modelů, které sloužily k otestování vlastností zvolených teoretických postupů. Tyto práce vyvrcholily vytvořením tří verzí modelu filtračního proudění podzemní vody [90], [85], [83] a dvou verzí modelu transportu látek [84], [82]. Práci na těchto modelech autor ukončil a dosažené výsledky shrnul v [81].

Autor se významnou mírou podílel na řešení modelových úloh sanačních prací v lokalitách pod správou s.p. DIAMO Stráž pod Ralskem [87], [86], [88], [89]. Na těchto úlohách se podíleli spolupracovníci z odboru sanačních prací Ing. Jiří Charvát, Ing. Jiří Mužák, Ph.D., RNDr. Jan Novák, Ph.D., Eva Pisková, Mgr. Radim Smetana a Ing. Vladimír Wasserbauer, CSc. Použití modelu pro řešení reálných úloh autorovi umožnilo dokonalé otestování a získání poznatků pro další vývoj.

Nedílnou součástí projektu byla i prezentace dosažených výsledků na zejména mezinárodních konferencích. Podílel se na tvorbě příspěvků na konferencích [119], [115], [116], [114], [117], [118], [111], [112], [113], [107], [108], [109], [110], [105], [106], [104]. Významnou část těchto příspěvků osobně prezentoval.

Pro řešení rozsáhlých, indefinitních soustav lineárních rovnic bylo využíváno řešičů vyvinutých Prof. Ing. Miroslavem Tůmou, CSc. a Doc. Dr. Ing. Miroslavem Rozložníkem [44], [45], [46].

2.2 Základní rovnice

2.2.1 Obecné vztahy

V modelu byly zavedeny následující zjednodušující předpoklady. Hustota vody je konstantní, tj. nezávislá na tlaku, ale ani na koncentraci rozpuštěných látek. Pro běžné hodnoty koncentrací látek rozpuštěných ve vodě a hodnoty toků generovaných tlakovými silami je totiž vliv změny koncentrace velice malý. Podobně zanedbatelný vliv má i změna hustoty v závislosti na změně tlaku.

Proudění v nasyceném pórovitém prostředí

Proudění v nasyceném pórovitém prostředí je dáno pouze tlakovými a gravitačními silami. Jeho hodnota závisí na vlastnostech prostředí.

Darcyho zákon Tuto závislost popisuje Darcyho zákon

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K}_s (\nabla h + \nabla z) \quad , \quad (2.1)$$

kde \mathbf{q} je tok, \mathbf{K}_s je tenzor vodivosti nasyceného pórovitého prostředí, h je tlaková výška a z je poloha v gravitačním poli.

Rovnice kontinuity

Druhou důležitou rovnicí, která popisuje proudění v nasyceném pórovitém prostředí, je rovnice kontinuity

$$C(h) \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = Q \quad , \quad (2.2)$$

kde t je čas a Q je hustota vnitřních zdrojů. $C(h)$ je specifická storativita nasyceného prostředí. Předpokládáme, že specifická storativita je závislá na tlakové výšce h .

Specifickou storativitou je nahrazeno několik dílčích jevů, jako je stlačitelnost vody a stlačitelnost pórovitého prostředí (horninové matrice). Další důležitou veličinou je stupeň nasycení $S(h)$ definovaný jako poměr mezi objemem vody a celkovým objemem resp. pórovým objemem

$$S(h) = \frac{V_v}{nV} = \frac{V_v}{V_p} \quad , \quad (2.3)$$

kde V_v je objem vody (měřený ovšem za atmosférického tlaku $p = p_a$), V je objem, n je pórovitost a V_p je pórový objem.

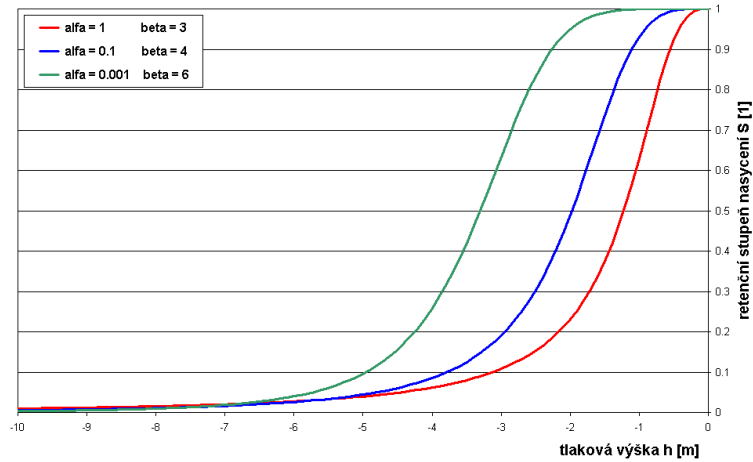
Mezi stupněm nasycení a specifickou storativitou platí následující vztah

$$C(h) = \frac{\partial S(h)}{\partial h} \quad . \quad (2.4)$$

V popisovaném modelu je specifická storativita uvažována jako obecná funkce tlakové výšky. Vzhledem k problémům s její identifikací je pro běžné rozsahy hydraulických výšek uvažována jako konstantní funkce.

Proudění v nenasyčeném pórovitém prostředí

Proudění v nenasyčeném pórovitém prostředí je dáno pouze kapilárními tlakovými a gravitačními silami.



Obrázek 2.1: Křivky retenčního stupně nasycení pro různé parametry van Genuchtenovy funkce

Darcy-Buckinghamův zákon Je popsáno obdobou Darcyho zákona, známou jako Darcy-Buckinghamův zákon

$$\mathbf{q} = -K_r(h_k) \mathbf{K}_s (\nabla h_k + \nabla z) \quad , \quad (2.5)$$

kde $K_r(h_k)$ je bezrozměrná relativní hydraulická vodivost nenasyčeného pórovitého prostředí, a h_k je kapilární tlaková výška. Kapilární tlaková výška h_k je rozdíl mezi výškou, kam voda vystoupá v kapiláře a výškou rozhraní mezi vodou a vzduchem. Platí jednoduchá závislost

$$h_k = -h \quad . \quad (2.6)$$

V nenasyčeném pórovitém prostředí je kapilární tlaková výška až na znaménko rovna tlakové výšce. Pro usnadnění pozdějšího sloučení vztahů pro nasycenou a nenasyčenou oblast bude dále uvažována pouze tlaková výška h .

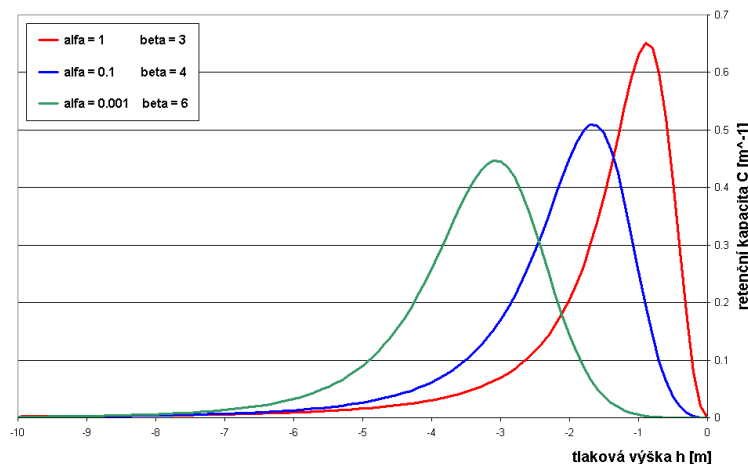
Irmayův vztah Pro vyjádření průběhu relativní hydraulické vodivosti odvozovaného z retenční křivky byl z několika možných vztahů vybrán vztah Irmayův

$$K_r(h) = S^3(h) \quad , \quad (2.7)$$

kde $S(h)$ je retenční stupeň nasycení pórovitého prostředí.

Retenční křivka Jako nejvhodnější popis retenční křivky byla zvolena van Genuchtenova aproximační funkce [3], viz obr. 2.1, která má následující tvar

$$S_r(h) = \frac{1}{(1 + \alpha |h|^\beta)^{\frac{\beta-1}{\beta}}} \quad , \quad (2.8)$$



Obrázek 2.2: Křivky retenční kapacity pro různé parametry van Genuchtenovy funkce

kde α a β jsou parametry určující danou retenční křivku.

S úspěchem byla využita velmi dobrá vlastnost van Genuchtenovy funkce (2.8). Závislosti retenčního stupně nasycení S_r a tlakové kapilární výšky h je spojitá, esovitě prohnutá viz obr. 2.1. Díky dvěma parametrům je velmi flexibilní a dobře se s ní prokládají naměřené hodnoty. Automaticky splňuje okrajové podmínky, tj. pro $h = 0$ je nasycenost $S_r = 1$ a pro $h \rightarrow -\infty$ je nasycenost $S_r \rightarrow 0$. Navíc i její první derivace

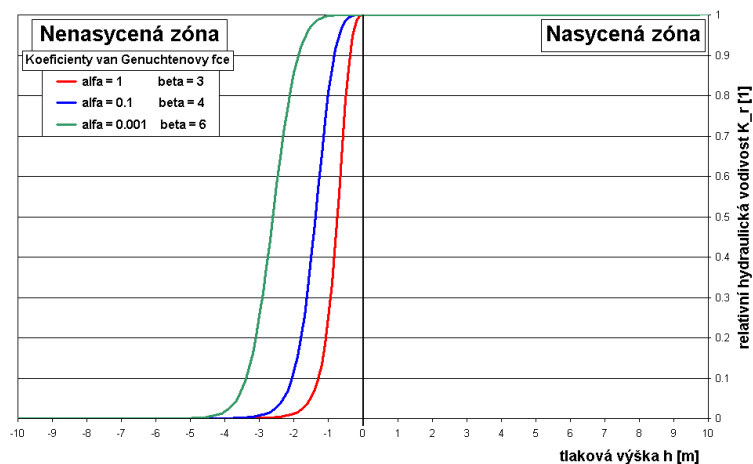
$$C_r(h) = \frac{\partial S_r(h)}{\partial h} \quad , \quad (2.9)$$

viz obr. 2.2, křivka retenční kapacity C_r , je spojitá a její okrajové podmínky pro $h \rightarrow 0$ a pro $h \rightarrow -\infty$ jsou splněny a platí $C_r \rightarrow 0$.

Zde je vhodné drobné pozastavení. Na retenční stupeň nasycení S_r nenasyčeného pórovitého prostředí můžeme s jistým nadhledem pohlížet stejně jako na stupeň nasycení S nasyceného pórovitého prostředí. Podobně je to i s retenční kapacitou C_r a specifickou storativitou C . Byť se jedná o zcela jiný vnitřní mechanismus, vnější projev je shodný. Vždy se jedná o množství vody v určitém objemu (resp. pórovém objemu), příp. o změnu tohoto objemu v závislosti na změně tlakové výšky.

2.2.2 Vztahy použité v modelu - proudění

Nyní jsou odvozeny rovnice popisující filtrační proudění pro obě zóny. Jejich sloučením byla získána univerzální rovnice pro popis proudění v pórovitém prostředí. Dále už nebude rozlišováno mezi označením stupně nasycení S v nasycené zóně a stupněm retenční nasycenosti S_r v zóně nenasyčené a bude



Obrázek 2.3: Obecné křivky relativní hydraulické vodivosti pro nasycenou i nenasycenou zónu

používán souhrnný název stupeň nasycení s označením S . Stejně tak nebude rozlišován rozdíl mezi specifickou storativitou C v nasycené zóně a retenční kapacitou C_r v zóně nenasycené a bude používán souhrnný název specifická hydraulická kapacita s označením C . Tím byla získána kompaktní formule popisující proudění v pórovitém prostředí.

Darcy-Buckinghamova rovnice je univerzálně použitelná pro obě zóny

$$\mathbf{q} = -K_r(h) \mathbf{K}_s (\nabla h + \nabla z) \quad . \quad (2.10)$$

Hodnota relativní hydraulické vodivosti K_r bude v nenasycené zóně určena pomocí van Genuchtenova a Irmayova vztahu a v nasycené zóně bude platit $K_r = 1$, viz obr. 2.3.

Rovnice kontinuity

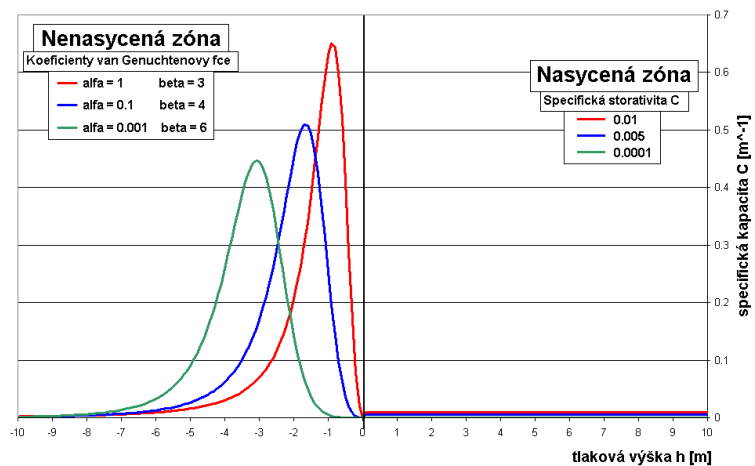
$$C(h) \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = Q \quad , \quad (2.11)$$

postihuje akumulaci vody, viz graf 2.4, a má opět univerzální použitelnost. Pro úplnost zbývá uvést ještě graf stupně nasycení viz obr. 2.5.

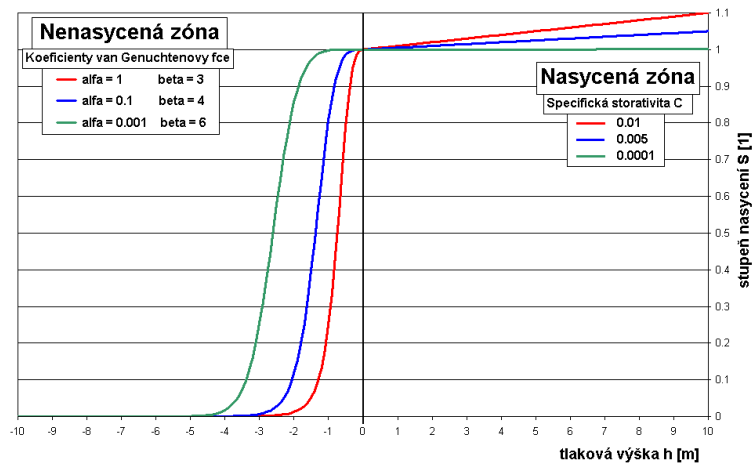
Okrajové podmínky

Pro jednoznačnou řešitelnost úlohy je nutné doplnit okrajové podmínky.

Dirichletova okrajová podmínka Na hranici Γ_D oblasti Ω známe hodnotu tlakové výšky (lze ji určit z piezometrické výšky). Tato okrajová podmínka bývá označována jako okrajová podmínka prvního druhu nebo také



Obrázek 2.4: Obecné křivky specifické hydraulické kapacity (retenční kapacity a specifické storativity) pro nasycenou i nenasycenou zónu



Obrázek 2.5: Obecné křivky stupně nasycení pro nasycenou i nenasycenou zónu

Dirichletova okrajová podmínka

$$h(\mathbf{x}, t) = h_D(\mathbf{x}, t) \quad , \quad \text{pro } \mathbf{x} \in \Gamma_D \quad , \quad (2.12)$$

kde h_D jsou známé hodnoty tlakových výšek na zvolené hranici Γ_D .

Neumannova okrajová podmínka Na hranici Γ_N oblasti Ω známe množství odtékající nebo přitékající vody (čerpané množství ze studny, dešťová dotace). Tato okrajová podmínka druhého druhu nebo také Neumannova okrajová podmínka má tvar

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}(\mathbf{x}, t) = q_N(\mathbf{x}, t) \quad , \quad \text{pro } \mathbf{x} \in \Gamma_N \quad , \quad (2.13)$$

kde q_N jsou známé hodnoty toků na zvolené hranici Γ_N , \mathbf{n} je jednotková vnější normála této části hranice (jde tedy o tok kolmý k hranici).

Nejčastější použití je na vnější nepropustné části hranice (homogenní okrajová podmínka), kde

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad , \quad \text{pro } \mathbf{x} \in \Gamma_{N0} \quad , \quad (2.14)$$

kde Γ_{H0} je část hranice s homogenní okrajovou podmínkou.

Newtonova okrajová podmínka Na hranici Γ_W oblasti Ω je známa hodnota tlakové výšky (hloubka ve vodních nádržích) a koeficient přestupu (dna vodních nádrží a odkališť bývají v různě silné vrstvě zakolmatována). Pak bude použita tzv. smíšenou okrajovou podmínku. Obvykle bývá nazývána jako okrajová podmínka třetího druhu nebo také Newtonova okrajová podmínka

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}(\mathbf{x}, t) = \sigma (h(\mathbf{x}, t) - h_W(\mathbf{x}, t)) \quad , \quad \text{pro } \mathbf{x} \in \Gamma_W \quad , \quad (2.15)$$

kde \mathbf{q} výsledný přetok přes hranici Γ_W , σ je koeficient přestupu této hranice, h jsou hledané hodnoty tlakových výšek na hranici Γ_W a h_W jsou známé hodnoty tlakových výšek na hranici Γ_W .

Tato okrajová podmínka má nejobecnější uplatnění. Volbou koeficientu σ blížící se nule, jde o Neumannovu homogenní okrajovou podmínku. Pokud bude zvolen koeficient $\sigma \rightarrow \infty$, přechází Newtonova okrajová podmínka na Dirichletovu okrajovou podmínku. Pro $\sigma \in (0, \infty)$ pak průtok hranicí lineárně závisí na tlakovém spádu na této hranici.

Počáteční podmínky

Při řešení úlohy neustáleného proudění, je nutné znát výchozí stav úlohy, počáteční podmínky.

V nasycené zóně představuje počáteční podmínka hodnotu tlakové výšky

$$h(\mathbf{x}, 0) = h_0(\mathbf{x}) \quad , \quad (2.16)$$

kde $h_0(\mathbf{x})$ je pole tlakových výšek v čase $t = 0$ pro celou řešenou oblast.

Pro nenasyčenou zónu představuje počáteční podmínka hodnotu nasycení

$$S(\mathbf{x}, 0) = S_0(\mathbf{x}) \quad , \quad (2.17)$$

kde $S_0(\mathbf{x})$ je pole nasycení v čase $t = 0$ pro celou řešenou oblast.

Počáteční podmínky je možné sestavit na základě měření nebo častěji řešením jiné úlohy proudění. Většinou je znám výchozí ustálený stav, odpovídající daným okrajovým podmínkám, předcházejícím neustálený vývoj. Změnou okrajových podmínek pak dojde k neustálenému proudění. Tento děj trvá tak dlouho, dokud nedojde k ustavení nového ustáleného stavu.

Bilance objemu vody

U hydrologických modelů je obvykle vyžadována jedna velice důležitá vlastnost.

Udržovat bilanci objemu vody a to jak na celé oblasti řešení Ω , tak i na daných, libovolně zvolených podoblastech. Bude požadováno splnění dodatečných rovnic.

Na oblasti Ω s hranicí Γ musí platit

$$\frac{dV_{\Omega}}{dt} + Q_{\Gamma} = Q_Q \quad , \quad (2.18)$$

kde V_{Ω} je okamžitý objem vody v oblasti Ω . Ten je dán vztahem

$$V_{\Omega} = \int_{\Omega} n S d\Omega \quad , \quad (2.19)$$

kde n je pórovitost a S je stupeň nasycení.

Q_{Γ} je celková bilance (výtok mínus přítok) vody přes hranici Γ , kde

$$Q_{\Gamma} = \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} d\Gamma \quad . \quad (2.20)$$

Zde \mathbf{q} je tok na hranici Γ .

Q_Q je celkové množství vody dodané vnitřními zdroji Q na oblasti Ω

$$Q_Q = \int_{\Omega} Q d\Omega \quad . \quad (2.21)$$

Zde Q je hustota vnitřních zdrojů (vtlačecích vrtů) nebo hustota vnitřních propadů (studen) na oblasti Ω .

Pokud rovnici (2.18) integrujeme přes časový interval $\langle 0, T \rangle$ dané úlohy, dostaneme bilanční rovnici vody za zvolené časové období

$$V_{\Omega}(T) - V_{\Omega}(0) + V_{\Gamma} = V_Q \quad , \quad (2.22)$$

kde $V_\Omega(T)$ je objem vody v oblasti Ω na konci časového intervalu (v čase T), $V_\Omega(0)$ je objem vody v oblasti Ω na začátku časového intervalu (v čase 0), V_Γ a V_Q jsou dány následujícími vztahy

$$V_\Gamma = \int_0^T Q_\Gamma dt \quad , \quad V_Q = \int_0^T Q_Q dt \quad . \quad (2.23)$$

Analogicky můžeme celkem snadno sestavit větší úlohu skládající se z několika takovýchto oblastí

$$\Omega^* = \sum_{i=0}^N \Omega_i \quad , \quad (2.24)$$

nebo naopak rozdělení oblasti Ω na několik podoblastí

$$\Omega = \sum_{i=0}^N \omega_i \quad , \quad (2.25)$$

a budeme požadovat splnění těchto rovnic na každé z podoblastí. Pokud bude bilance objemu vody splněna na jednotlivých podoblastech, bude splněna i na celé oblasti (pozor, toto neplatí obráceně - pokud je bilance splněna na celé oblasti, neznamená to, že ji splňují i jednotlivé podoblasti).

2.2.3 Vztahy použité v modelu - transport látek

Vzhledem k relativně vysokým rychlostem filtračního proudění podzemní vody byla úloha transportu zredukována na vliv advekce. Řídící rovnice transportu pak má následující jednoduchý tvar

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot (c_i \mathbf{q}) = 0 \quad , \quad (2.26)$$

kde c_i je koncentrace i -té rozpuštěné látky, t je čas a \mathbf{q} je tok.

Okrajové podmínky

Stejně jako v případě úlohy proudění i při úloze transportu je nezbytné definovat okrajové a počáteční podmínky úlohy.

Dirichletova okrajová podmínka Na hranici Γ_D oblasti Ω známe hodnotu koncentrace ve vodě rozpuštěných látek

$$c_i(\mathbf{x}, t) = c_{iD}(\mathbf{x}, t) \quad , \quad \text{pro } \mathbf{x} \in \Gamma_D \quad , \quad (2.27)$$

kde c_{iD} jsou známé hodnoty koncentrace i -té látky rozpuštěné ve vodě, přítomné na zvolené hranici Γ_D . Obvykle jde o tu část hranice Γ_D , kde dochází ke vstupu vody do modelu, tj. kde platí $\mathbf{n} \cdot \mathbf{q} < 0$.

Omezením rozsahu úlohy pouze na advekční člen je Dirichletova okrajová podmínka jedinou okrajovou podmínkou použitelnou v transportní úloze.

Určení hodnot okrajových podmínek je u transportních úloh relativně snadné. Určení koncentrací rozpuštěných látek v povrchové vodě (potoky, řeky, jezera, odkaliště) je rutinní operací pro chemickou laboratoř.

Počáteční podmínky

Pro úlohu transportu je počáteční podmínkou koncentrace i -té látky v oblasti Ω na začátku zájmového období, tj. v čase $t = 0$.

$$c_i(\mathbf{x}, 0) = c_{i_0}(\mathbf{x}) \quad , \quad (2.28)$$

kde $c_{i_0}(\mathbf{x})$ je koncentrace i -té látky v čase $t = 0$ na oblasti Ω .

Určení počátečních podmínek je poměrně komplikovaný proces. Chemický rozbor vody v kontrolních vrtech je pouze lokální informací. V případě, kdy je vrt otevřen ve větším rozsahu, dochází navíc ke znehodnocení výsledků tím, že složení vody ve vrtu je jistým průměrem složení vod z vrstev, ve kterých je vrt otevřen. Jednotlivé vrstvy však mohou mít velmi odlišné složení.

Velice časté je získání počátečních podmínek z jiného modelu sestaveného k tomuto účelu. Např. při modelování variant sanačních zásahů na odkalištích, se nejdříve vypočte úloha modelující provoz odkaliště od jeho založení (koncentrace látek v odkalištní vodě je po celou dobu provozu odkaliště monitorována a je v této úloze použita jako okrajová podmínka). Tím se vypočte rozložení rozpuštěných látek v podzemí, počáteční podmínky pro vlastní sanační model.

Podobná transformace výsledků z jednoho modelu do druhého byla využita v této kapitole viz kapitola 2.4.2.

Bilance hmotnosti rozpuštěné látky

Velice důležitou vlastností požadovanou po tomto modelu je schopnost udržovat bilanci hmotnosti rozpuštěných látek, a to jak na celé oblasti řešení Ω , tak i na zvolených podoblastech.

Řídící rovnice transportu (2.26) splňuje tzv. lokální bilanci hmotnosti rozpuštěných látek pro libovolný, zvolený objem pórovitého prostředí. Budou tedy nutné zavést dodatečné rovnice, jejichž splnění bude požadováno. Nejprve budou odvozeny tyto rovnice pro celou oblast Ω .

Na oblasti Ω s hranicí Γ musí platit bilanční rovnice

$$\frac{dM_{i\Omega}}{dt} + \mathfrak{M}_{i\Gamma} = \mathfrak{M}_{iQ} \quad , \quad (2.29)$$

kde $M_{i\Omega}$ je okamžitá hmotnost i -té látky v oblasti Ω a je dána

$$M_{i\Omega} = \int_{\Omega} c_i d\Omega \quad . \quad (2.30)$$

$\mathfrak{M}_{i\Gamma}$ je celkový výtok (výtok mínus přítok) i -té látky přes hranici Γ , kde

$$\mathfrak{M}_{i\Gamma} = \int_{\Gamma} \mathbf{n} \mathbf{q} c_i d\Gamma \quad , \quad (2.31)$$

kde \mathbf{q} je specifický průtok na hranici Γ .

\mathfrak{M}_{iQ} je celkový přírůstek hmotnosti i -té látky vnitřními zdroji Q na oblasti Ω , pro kterou platí

$$\mathfrak{M}_{iQ} = \int_{\Gamma_Q} Q c_i d\Omega \quad , \quad (2.32)$$

kde Q jsou vnitřní zdroje (vtlačecí vrty) nebo propady (čerpací vrty, studny) na oblasti Ω .

Integrací rovnice (2.29) přes časový interval $\langle 0, T \rangle$ bude získána bilanční rovnice hmotnosti i -té látky pro zvolený časový interval

$$M_{i\Omega}(T) - M_{i\Omega}(0) + M_{i\Gamma} = M_{iQ} \quad , \quad (2.33)$$

kde $M_{i\Omega}(T)$ je hmotnost i -té látky v oblasti Ω na konci časového intervalu (v čase T), $M_{i\Omega}(0)$ je hmotnost i -té látky v oblasti Ω na začátku časového intervalu (v čase 0), $M_{i\Gamma}$ a M_{iQ} jsou dány následujícími vztahy

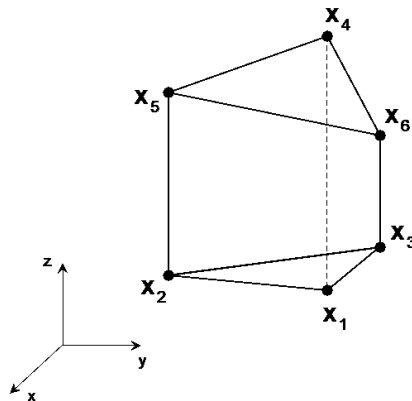
$$M_{i\Gamma} = \int_0^T \mathfrak{M}_{i\Gamma} dt \quad , \quad M_{iQ} = \int_0^T \mathfrak{M}_{iQ} dt \quad . \quad (2.34)$$

2.2.4 Matematický model

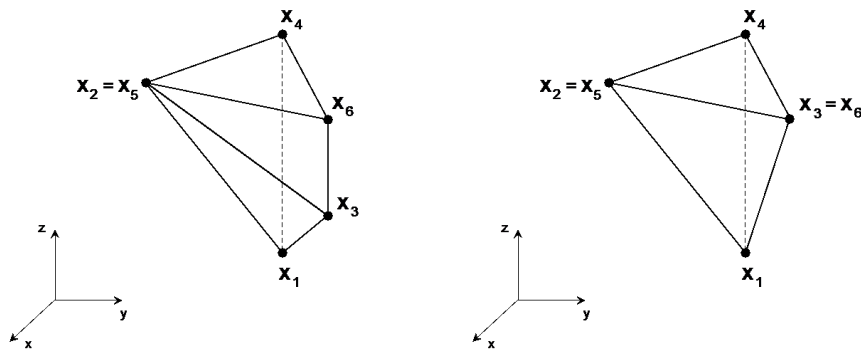
Oblast je diskretizována prizmatickými prvky s vertikálními bočními stěnami a různým sklonem podstav [43]. Jako doplňkové byly zvoleny prvky tvaru čtyřbokého jehlanu a čtyřstěnu. Takové prvky jsou označovány jako „degenerované“. Vznikly splnutím dvou, resp. čtyř, nad sebou ležících uzlů základního prizmatického prvku viz obr. 2.6 a 2.7. Tyto doplňkové prvky jsou nutné pro aproximaci vyklínování geologických vrstev.

Matematický model proudění

V předešlé části této kapitoly byly sestaveny rovnice proudění v pórovitém prostředí (2.10) a (2.11). Dále byly definovány rovnice okrajových podmínek (2.12), (2.13) a (2.15) a rovnice počátečních podmínek (2.16) a (2.17). Mezi požadované vlastnosti modelu patří splnění bilančních rovnic a to jak na celé oblasti Ω tak i na jednotlivých prvcích diskretizace. Tento požadavek splňuje smíšená-hybridní (dále jen MH, mixed-hybrid) formulace MKP [6], [34], [57]. MH formulace MKP řeší rovnice proudění v pórovitém prostředí odděleně (2.10) a (2.11). V těchto rovnicích pak vystupují jako neznámé tlaková výška h , a tok \mathbf{q} .



Obrázek 2.6: Prizmatický prvek s vertikálními bočními stěnami a různým sklonem podstav

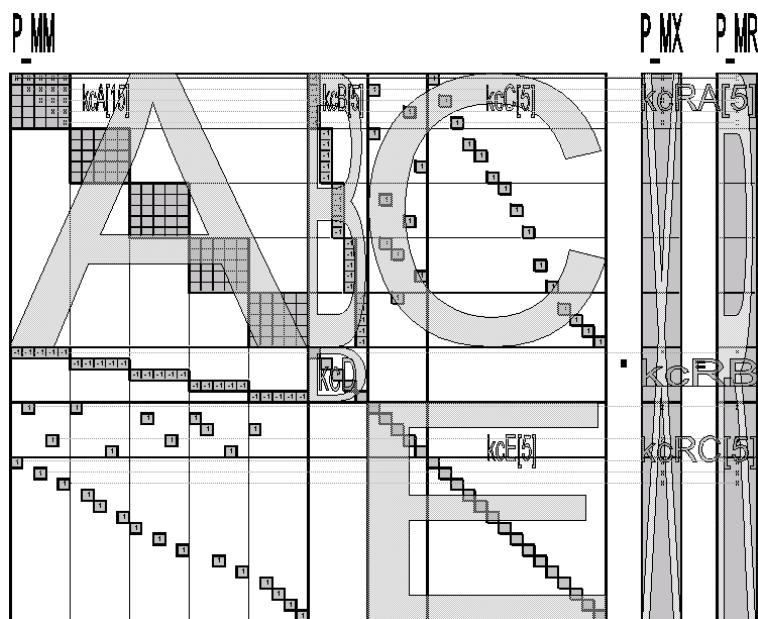


Obrázek 2.7: Degenerované tvary prizmatického prvku

MH formulace MKP vede na řešení symetrických, indefinitních soustav. Tyto soustavy jsou velice řídké, špatně podmíněné, strukturované a mají nulový diagonální blok, viz obr. 2.8. Metody řešení systémů rovnic je disciplína velice rozsáhlá, intenzivně studovaná a velmi náročná.

K řešení je možné použít několika různých metod, případně jejich kombinací. Efektivita, rychlost a přesnost těchto metod je závislá na typu a rozsahu řešené úlohy. Za základní je možno považovat metodu sdružených gradientů pro řešení systému Schurova doplněku se symetrickou pozitivně definitní (SPD) maticí. Další možností je uvažovat lineární systém jako celek a použít metodu MINRES.

Metody řešení těchto soustav dnes prožívají intenzivní vývoj [2], [44], [45], [46]. Při práci na modelu popisovaném v této práci, se s výhodou využívá, že úloha řešení lineárních rovnic má jednoduché a jasně definovatelné



Obrázek 2.8: Struktura globální soustavy MH modelu

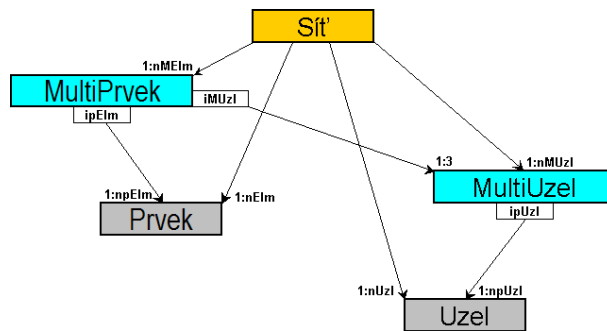
rozhraní. Model se soustředí pouze na úlohu proudění. Proveďte sestavení soustavy lineárních rovnic a poté přes dané rozhraní zavolá modul pro jejich řešení. Po ukončení běhu řešiče se řešení přenesou zpět a interpretuje se do příslušných datových struktur. Moduly pro řešení systémů rovnic byly vyvinuty skupinou pod vedením Prof. Ing. Miroslava Tůmy, CSc. a pro účely řešení soustav rovnic generovaných tímto modelem byly bez jakékoliv změny převzaty.

Matematický model transportu

Řešení rovnice (2.26) je zredukováno na jednoduché upwind schéma

$$c_{i,n}^e = \frac{S_{n-1}^e}{S_n^e} c_{i,n-1}^e - \frac{\tau}{V^e n^e S_n^e} \sum_{s=1}^5 c_{i,n-1}^{e,s} q_n^{e,s} \quad , \quad (2.35)$$

kde $c_{i,n}^e$ je koncentrace i -té látky e -tého prvku v n -tém kroku, S_{n-1}^e je stupeň nasycení e -tého prvku v $(n-1)$ -ním kroku, S_n^e je stupeň nasycení e -tého prvku v n -tém kroku, $c_{i,n-1}^e$ je koncentrace i -té látky e -tého prvku v $(n-1)$ -ním kroku, τ je časový krok, V^e je objem e -tého prvku n^e je porozita e -tého prvku, $c_{i,n-1}^{e,s}$ je koncentrace i -té látky vtékající/odtékající s -tou stěnou e -tého prvku, a $q_n^{e,s}$ je tok s -tou stěnou e -tého prvku. Implementace je podrobněji popsána v kapitole 2.3.2.



Obrázek 2.9: Entity a vazby mezi entitami modelové sítě

2.3 Implementace modelu

Numerický model se skládá z datových struktur a algoritmů pracujících nad těmito datovými strukturami. Vhodně navržené datové struktury zvyšují přehlednost zdrojového kódu, zrychlují programátorskou práci, snižují výskyt programátorských chyb a zrychlují jejich hledání, usnadňují další vývoj a rozšiřování programového kódu, numerického modelu. Pro modely tohoto typu jsou datové struktury v jistém smyslu prvotní, algoritmy se mohou během vývoje modelů dosti podstatně měnit a vyvíjet.

Implementace modelu a volba vhodného programovacího jazyku pro tento model byla ovlivněna několika kritérii. Nejdůležitějším kritériem při implementaci tohoto modelu byla rychlost běhu programu. Dalšími kritérii pak byly: možnost přímé práce s pamětí a přenositelnost na počítače pracující pod operačním systémem UNIX. Proto byl pro implementaci zvolen jazyk C v normě ANSI.

2.3.1 Datové struktury

Diskretizací oblasti Ω je získána modelová síť. Tu lze rozložit na základní datové struktury viz obr. 2.9.

Pro oblasti, se kterými bude model pracovat, je charakteristické, že jsou tvořeny převážně sedimentovanými (u hrází odkališť navezenými) vrstvami. Hranice jednotlivých vrstev jsou téměř rovnoběžné a vrstvy samy jsou téměř vodorovné. Plošné rozměry oblastí jsou řádově stovky metrů až desítky kilometrů a výrazně převyšují vertikální rozměr oblastí, který bývá v metrech maximálně v desítkách metrů).

Je tedy vhodné, při návrhu datových struktur, vycházet z vrstevnaté struktury oblasti a k diskretizaci zvolit pětistěnný prizmatický prvek se třemi svislými bočními stěnami a různoběžnými podstavami.

Trojúhelníkový půdorys prvků má velké výhody při tvorbě modelové sítě

- snadno aproximují libovolný tvar modelované oblasti,

- umožňují snadné zhušťování modelové sítě v oblastech, kde je třeba dosáhnout větší přesnosti řešení,
- lze zajistit korektnost takovéto sítě (na rozdíl například od čtyřúhelníků), z hlediska použití MKP.

Vrstevnatá struktura sítě usnadňuje tvorbu prostorově uspořádané sítě, rozhraní mezi jednotlivými geologickými vrstvami, s odlišnými geologickými vlastnostmi, jsou zdokumentovány (např. geologickým průzkumem) a vlastnosti těchto vrstev jsou na jistých oblastech velmi podobné.

Je tedy vhodné zavést dvě skupiny entit, které budou vyjadřovat plošný (např. vrt je v této interpretaci bod) a prostorový (např. vrt je v této interpretaci úsečka) charakter modelové sítě. Plošné (půdorysné) entity označíme jako multiprvěk (struktura `MElm`) a multiuzel (struktura `MUzl`). Prostorové entity označíme jako prvek (struktura `Elm`) a uzel (struktura `Uzl`). Vazby mezi jednotlivými strukturami jsou na obr. 2.9. Pro kompaktnější a přehlednější uložení struktur do paměti počítače se uzly, resp. prvky, ukládají po příslušných multiuzlech, resp. multiprvcích, od referenčního (nejnižšího) rozhraní (tento postup je převzat z geologie - sedimentované vrstvy se také vytvářely směrem vzhůru).

Struktura Elm

Struktura popisující prvek, viz obr. 2.10, je v modelech založených na MH formulaci MKP stěžejní strukturou. Položka `int imelm` identifikuje, do kterého multiprvku daný prvek patří, položka `float koef []` odkazuje na pole koeficientů (hydraulické propustnosti K_x , K_y , K_z , pórovitost atd.). Položky `int kcXX` identifikují místa, která přísluší danému prvku v matici soustavy lineárních rovnic viz obr. 2.8 a následující odstavec. Význam ostatních položek je zřejmý z jejich označení a popisu v ukázce zdrojového kódu.

Struktura Soustava

Ukládání matice charakterizující soustavu lineárních rovnic viz obr. 2.8 v plném tvaru, jako dvourozměrné pole, by bylo značně neefektivní. Nárůst nároku na paměť by při tomto uložení vzrůstal s druhou mocninou počtu rovnic. Matice je symetrická, stačí tedy ukládat pouze její horní trojúhelníkovou část. Maximální počet nenulových prvků na jednom řádku je 7. Průměrný počet nenulových prvků na jednom řádku je pro rozsáhlejší úlohy cca. 3 – 4. Pro uložení byl proto zvolen zhuštěný formát (CSR - Compressed Sparse by Row - zhuštěné uložení po řádcích). Tento formát pracuje pouze s nenulovými prvky. Jednotlivé nenulové prvky matice jsou pak uloženy za sebou v jednorozměrném poli. Na obr. 2.8 jsou vyznačeny šedými čtverečky. To vyžaduje speciální aritmetiku pro správný a rychlý přístup k těmto prvkům. Jako nejefektivnější se ukázala technika kódových čísel.

```

struct S_elm
{
    int      imelm;          /* interni cislo Multiprvku */
/*-----*/
    float    *koef;         /* koeficienty */
/*-----*/
    int      kcA[ 15 ];     /* kod. cis. A */
    int      kcB[ 5 ];      /* kod. cis. B */
    int      kcC[ 5 ];      /* kod. cis. C */
    int      kcD;           /* kod. cis. D */
    int      kcE[ 5 ];      /* kod. cis. E */
    int      kcRA[ 5 ];     /* kod. cis. do vektoru A */
    int      kcRB;          /* kod. cis. do vektoru B */
    int      kcRC[ 5 ];     /* kod. cis. do vektoru C */
/*-----*/
    double   lokal[ 15 ];   /* prvky lokalni matice A */
/*-----*/
    double   t_vyskaT;      /* tlakova vyska v T prvku */
    double   stntlkv[ 5 ];  /* tlakova vyska v T steny */
    double   stntok[ 5 ];   /* prutok stenou */
/*-----*/
    double   objem;         /* objem PRVKU */
    double   porobjm;       /* porovy objem PRVKU */
    double   objem_vody;    /* objem vody v PRVKU */
/*-----*/
    . . .
};

```

Obrázek 2.10: Struktura Elm

Po načtení datových struktur viz kapitola 2.3.1 se sestaví „vektor sousednosti“ viz následující odstavec. S jeho pomocí se sestaví struktura soustavy lineárních rovnic a nastaví příslušná kódová čísla u prvků. Tyto operace se provádějí pouze na začátku běhu programu. Nebylo uvažováno, že bude docházet ke změnám struktury sítě, adaptivní dělení prvků.

Vektor sousednosti

Vzhledem k tomu, že MH formulace zohledňuje vazby mezi stěnami jednotlivých prvků, bylo nutné s těmito vazbami efektivně a rychle pracovat. Jako nejlepší řešení se ukázal „vektor sousednosti“. Vektor sousednosti je jednorozměrné pole proměnné typu `int []`. S výhodou je zde využito omezení definovaného v základních podmínkách pro vznik modelu. Tím, že byl zvolen jediný typ prvku, prizmatický pětistěn, je problém velmi zredukován. Délka vektoru sousednosti je $5 * \text{početPrvků}$, kde *početPrvků* je počet prvků v síti. Prvky jsou uloženy v poli. Na každý prvek se lze odkázat ukazatelem

pomocí příslušného indexu prvku, zkráceně ip . Každý prvek má stěny očíslovány. První číslování je tzv. lokální - dolní stěna 0, horní stěna 1, boční stěny podle numerizace uzlů mají čísla 2, 3 a 4. Toto číslování je označováno jako „interní index stěny“, zkráceně iis . Jsou-li prvky brány postupně jak jsou uloženy v poli a jsou-li postupně číslovány jejich stěny, vzniká tzv. globální očíslování. Toto číslování je označováno jako „index stěny“, zkráceně is . Pro výše uvedené indexy pak platí, při použití jediného typu prvku, prizmatického pětistěnu, následující aritmetika

$$is = 5 * ip + iis \quad ,$$

a naopak

$$\begin{aligned} ip &= is / 5 \quad , \\ iis &= is \% 5 \quad , \end{aligned}$$

kde $\%$ označuje modulo, zbytek po celočíselném dělení.

Jednotlivé prvky vektoru sousednosti pak obsahují index stěny is svého souseda. Jedná-li se o stěnu vnější, je $is = -1$. V případě, že se jedná o prvek jehož mocnost je nulová, viz dále o vrstevnaté struktuře, je $is = -2$.

K sestavení vektoru sousednosti je použito pouze „hrubé síly“. Pro jednotlivé prvky se prochází jejich stěny a hledají se stěna, kterou definují stejné uzly.

S pomocí vektoru sousednosti je již sestavení struktury soustavy lineárních rovnic jednoduché a rychlé.

2.3.2 Použité algoritmy

Nyní jsou definovány základní datové struktury. V krátkosti budou zmíněny i základní algoritmy. Nejčastější chybou, s níž se lze při řešení úloh setkat, jsou chyby v datových souborech. Je proto užitečné realizovat čtení a formální kontrolu všech datových souborů ihned na počátku výpočtu viz obr. 2.11 a 2.12. Z obrázku je patrná sdílitelná použitelnost základních bloků modelu proudění a transportu.

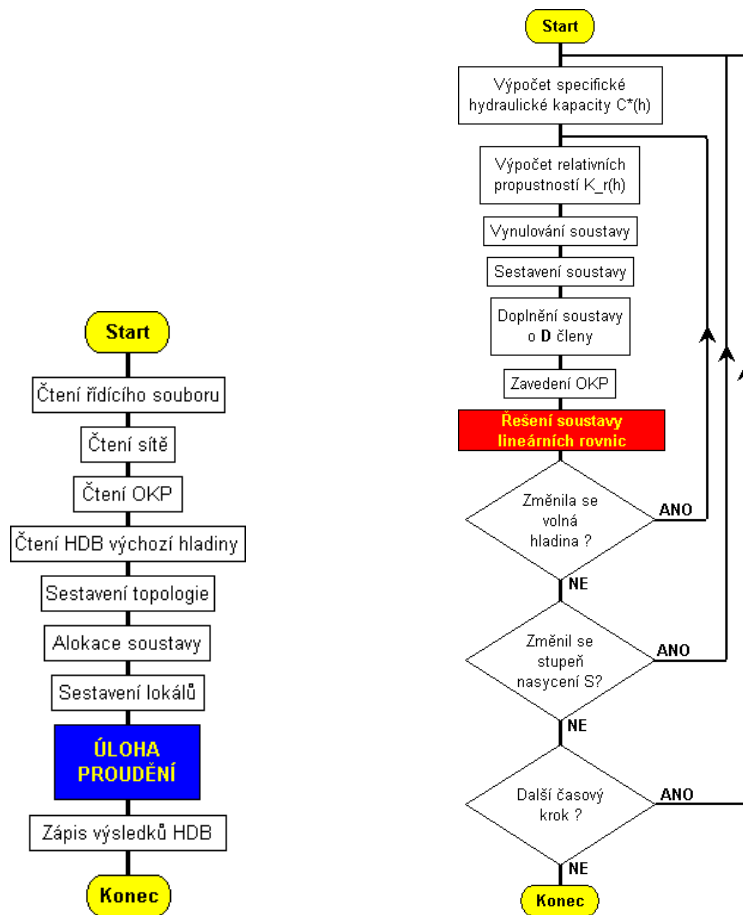
Filtrační proudění

Algoritmus filtračního proudění je schématicky znázorněn na obr. 2.11. Na obrázku vlevo jsou zmíněny jednotlivé pomocné funkce, čtení vstupních dat a výstup výstupních dat.

Obrázek vpravo znázorňuje vlastní výpočetní jádro. Řešení se skládá ze tří vnořených iteračních cyklů.

Ve vnitřním cyklu jsou hledány hodnoty relativních hydraulických vodivostí $K_r(h)$. Interpolací hodnot mezi sousedními prvky se určuje poloha volné hladiny. Cyklus se ukončuje v okamžiku, kdy je splněna podmínka

$$\max_e \{ |h_n^e - h_{n-1}^e| \} < \epsilon_h \quad , \quad (2.36)$$



Obrázek 2.11: Algoritmus výpočtu neustáleného proudění s volnou hladinou

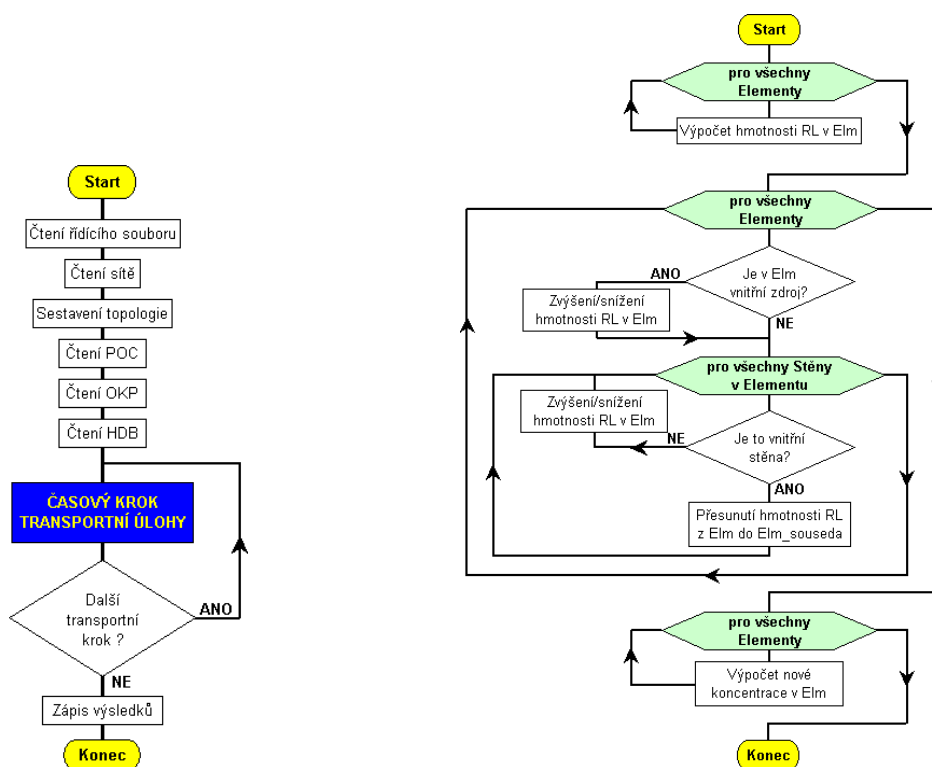
kde h_n^e je tlaková výška e -tého prvku v n -tém kroku, h_{n-1}^e je tlaková výška e -tého prvku v $n - 1$ -tém kroku, ϵ_h je požadovaná přesnost nalezení tlakové výšky. V reálných úlohách jsou běžně používané hodnoty ϵ_h v řádu centimetrů až decimetrů.

V prostředním cyklu jsou hledány hodnoty specifické hydraulické kapacity $C(h)$. Cyklus se ukončuje v okamžiku, kdy je splněna podmínka

$$\max_e \{|S_n^e - S_{n-1}^e|\} < \epsilon_S \quad , \quad (2.37)$$

kde S_n^e je stupeň nasycení e -tého prvku v n -tém kroku, S_{n-1}^e je stupeň nasycení e -tého prvku v $n - 1$ -tém kroku, ϵ_S je požadovaná přesnost nalezení stupně nasycení v jednotlivých prvcích.

Vnější cyklus zajišťuje postupné řešení jednotlivých časových kroků.



Obrázek 2.12: Algoritmus výpočtu transportu rozpuštěných látek v ustáleném režimu proudění

Transport látek

Algoritmus transportu látek je schématicky znázorněn na obr. 2.12. Na obrázku vlevo jsou zmíněny jednotlivé pomocné funkce, čtení vstupních dat a výstup výstupních dat.

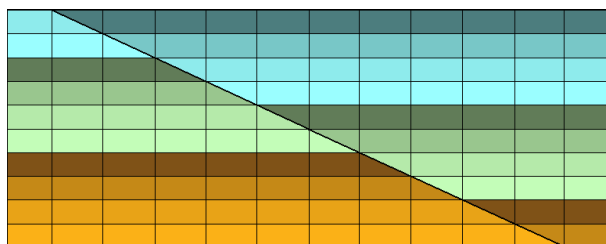
Obrázek vpravo znázorňuje vlastní výpočetní jádro (jeden transportní krok). Realizuje řešení rovnice (2.35). Řešení se skládá ze tří etap.

V první se ze známého objemu vody v prvku a koncentrace ve vodě rozpuštěné látky v n -tém časovém kroku vypočte hmotnost látky v daném prvku.

Ve druhé etapě se postupně prochází všechny prvky a jejich stěny. Z toku danou stěnou se z příslušné koncentrace rozpuštěných látek vypočte hmotnost těchto látek, která je do prvku přinesena proudící vodou nebo je z něj naopak proudící vodou odnesena.

Ve třetí se zpětně ze známé $(n + 1)$ -ní hmotnosti látky a objemu vody v prvku vypočte $(n + 1)$ -ní koncentrace ve vodě rozpuštěné látky.

Vlastní implementace se pak skládá z jedné strany zdrojového textu výpočetního jádra modelu a několika stovek dalších stran zdrojových textů,



Obrázek 2.13: Řez sítě s vyklíňujícími vrstvami

kteří zajišťují pomocné funkce.

Vrstevnatá struktura Důležitá vlastnost modelu je jeho schopnost zohlednit vrstevnatou strukturu řešené oblasti. Výhody tohoto uspořádání se projeví snadnou tvorbou sítě, při sestavování vnitřního obrazu topologie sítě v modelu a při následném zobrazení a analýzách výsledků.

Zohlednění vrstevnaté struktury v modelu má však své problémy. Jednotlivé vrstvy nemusí být vyvinuté na celé ploše modelu viz obr 2.13. Dochází k vymizení vrstvy vyklíněním. Tato situace se v reálných úlohách někdy řeší tak, že se mocnost vrstvy ponechá na jisté minimální hodnotě. Topologie sítě a výsledná soustava rovnic tak zůstane stejná jako v případě nevyklínění dané vrstvy. Zploštělé prvky však výrazně zhoršují podmíněnost soustavy lineárních rovnic (nezřídka ji učiní zcela neřešitelnou).

Tento model se s touto situací vyrovnává zcela jiným způsobem. Využívá degenerovaných prvků viz obr 2.6 a 2.7. Nevyvinuté prvky, prvky v místě kde vrstva má nulovou mocnost, jsou rozpoznány v okamžiku sestavování topologie sítě. Ve struktuře topologie sítě jsou vynechány a prvky s nimi sousedící přes horní a dolní stěnu jsou vzájemně propojeny. Dále jsou vynechány jim odpovídající neznámé ze soustavy lineárních rovnic, což představuje snížení rozsahu soustavy o pět řádků na každý vyklíněný prvek. Tím je zajištěna řešitelnost této soustavy. Nepřímo se tak i zlepšuje podmíněnost soustavy a tedy i rychlost konvergence při použití iteračních metod pro jejich řešení.

2.3.3 Okrajové podmínky - filtrační proudění

Jednou z oblastí, která názorně ukazuje rozdíl mezi matematickou částí modelu a jeho částí implementační je práce s okrajovými podmínkami (OKP). Matematický model filtračního proudění má definovány tři typy OKP, viz rovnice (2.12), (2.13) a (2.15). Při používání modelu by však OKP měly respektovat realitu. Proto byly zavedeny OKP s tímto označením a funkcí.

Okraj modelu - známá hladina Na řešené oblasti bývá množství monitorovacích vrtů a úroveň hladiny v těchto vrtech bývá pravidelně měřena,

je tedy známá. Je důležité věnovat pozornost skutečnosti, jaká hodnota je měřena a zajistit správnou interpretaci v modelu. Může jít o hloubku vodní hladiny pod povrchem, výšku hladiny nad bází vrtu nebo o nadmořskou výšku hladiny. Vlastní okrajová podmínka pak může být interpretována jako Dirichletova OKP (2.12) nebo Newtonova OKP (2.15). Vhodnější je použít Newtonovu OKP s vhodně zvolenou hodnotou koeficientu σ . Používání Dirichletovy OKP může způsobit problémy. Dirichletova OKP může být „nerealistická“. Tím je míněno to, že dosažení požadované výšky, aplikací Dirichletovy OKP způsobí v daném místě tok (vtlačení/čerpání vody). I malé změny hodnoty okrajové podmínky (tlakové výšky) mohou způsobit velké (prakticky nemožné - „nerealistické“) změny toku. Vzhledem k tomu, že se zde pracuje s naměřenými hodnotami, které mohou být (a také jsou) zatíženy značnou chybou, je vhodnější používat Newtonovu OKP.

Okraj modelu - nepropustná stěna Spodní okraj zájmových oblastí obvykle končí na skalnatém podloží - kristaliniku. Tato okrajová podmínka je pak interpretována jako Neumannova OKP (2.13), kde tok $q = 0$.

Čerpání/vtláčení Tato okrajová podmínka je interpretována jako Neumannova OKP (2.13). Je důležité věnovat pozornost skutečnosti, že hodnoty čerpání bývají v různých jednotkách ($[m^3 \text{ den}^{-1}]$, $[\text{litr min}^{-1}]$).

Děšť Tato OKP je velice důležitá u modelů zabývajících se oblastmi, jejichž horní plocha je totožná se zemským povrchem. Hodnota dešťových srážek se udává v milimetrech. Pro aplikaci v modelu je nutné ji násobit příslušnou plochou. Pro ilustraci 1 mm srážek znamená, že na každý metr čtverečný povrchu, spadne jeden litr dešťové vody. Velkou pozornost je nutné věnovat skutečnosti, že ne všechny deště pronikne do podzemí. Část se odpaří a část oteče po povrchu. Skutečné množství, které ovlivní podzemní vody a mělo by být zohledněno v modelu, bývá kolem 30% hodnoty dešťových srážek.

Při aplikaci OKP typu „děšť“ je nutné zohlednit fakt, že neprší na oblasti, kde se nacházejí povrchová jezera, prameniště a stružky. Respektive, prší na hladinu a ta ovlivňuje řešenou oblast jiným způsobem. Tato skutečnost musí být zajištěna samotným modelem, vhodnou hierarchií zadávání OKP.

Jezero Tato OKP představuje oblast, kde se na povrchu nachází jezero (řeka, rybník, laguna odkaliště). Nejčastěji se zadává nadmořská výška hladiny. Model při aplikaci této OKP vypočte tlak působící na dno v daném místě, a zohlední, zda se pod dnem jezera nachází nasycená nebo nenasycená zóna. Typicky dna odkališť bývají zakolmatována kaly ukládanými do odkaliště a hladina podzemní vody pod odkalištěm zdaleka nedosahuje ke dnu

odkaliště. Okrajová podmínka „jezero“ je interpretována Newtonovou OKP (2.15) v situaci, kdy se pod dnem jezera nachází nasycená zóna. Míra zakolmatování dna pak určuje hodnotu koeficientu σ . V situaci, kdy se pod dnem jezera nachází nenasyčená zóna je okrajová podmínka „jezero“ je interpretována Neumannovou OKP (2.13). Tok q je pak daný hloubkou (tlakem) v daném místě jezera a mírou zakolmatování dna, hodnotu koeficientu σ .

Prameniště Tato okrajová podmínka je aktuální opět u úloh zabývajících se oblastmi, jejichž horní plocha je totožná se zemským povrchem. V průběhu výpočtu může dojít k tomu, že hladina vystoupá nad povrch. V takovém případě model přidá do daného místa Dirichletovu OKP (2.12) s hodnotou tlakové výšky $h_D = 0$. V tomto případě použití Dirichletovy OKP nevádí. Tok, který zavedení této OKP způsobí, udává vydatnost prameniště. V případě, že je hodnota toku záporná (představuje vtlačení do oblasti) je nutné tuto OKP odpojit.

Překop/stružka Tato okrajová podmínka je variací OKP „prameniště“, ale pro místa „uvnitř“ řešené oblasti. Na rozdíl od OKP „prameniště“, kde o umístění rozhodoval model automaticky, zde musí být definována místa, kde tato OKP působí. Podle potřeby je možné aplikovat buď Dirichletovu OKP (2.12) s hodnotou tlakové výšky $h_D = 0$ (výška hladiny v odvodňovacích stružkách bývá pouze několik cm a lze ji proto zanedbat), případně jako Neumannovu OKP (2.13) (čerpání z odvodňovacích překopů je realizováno čerpadly s daným výkonem).

Použití okrajových podmínek je řízeno modelem. Výpočet daného kroku je ukončen až v situaci, kdy nedochází ke změnám v OKP. Mnohdy, zejména při výpočtech rozsáhlých oblastí, dochází k vzájemnému ovlivňování jednotlivých OKP a k cyklickému zapínání a vypínání OKP. V takovém případě je nutné analyzovat nastalou situaci a podle potřeby modifikovat soubor okrajových podmínek.

2.4 Výsledky

Výše popsaným modelem bylo vyřešeno několik desítek úloh na lokalitách ve správě s.p. DIAMO. Mezi všeobecně známé patří lokality odkališť o.z. TÚU ve Stráži pod Ralskem, odkaliště o.z. GEAM v Dolní Rožínce, soustavy odkališť o.z. MAPE v Mydlovarech. Pro posuzování vlivu dolu chemické těžby (DCHT) ve Stráži pod Ralskem a nalezení efektivního postupu jeho sanace byla vytvořena řada různě rozsáhlých a různě podrobných modelových sítí popisujících dané lokality.

Jednou z neobtížnějších pak byla úloha zatopení dolu Hamr I (HDHI) [88]. Rozsah řešeného problému a náročnost jeho řešení si zaslouží podrobnější

popis. Lze tak získat dokonalou představu o málo prezentované oblasti - příprava úlohy (práce se vstupními daty). Přitom právě preciznost s jakou je úloha připravena ovlivňuje přesnost dosažených výsledků.

2.4.1 Popis situace

Uranové ložisko Stráž bylo objeveno při plošném geologickém průzkumu v šedesátých letech 20. století. Přes nízkou kovnatost byl na ložisku otevřen HDHI. Těžba probíhala klasickým hornickým způsobem. Uranová ruda je uložena ve zvodnělých, pískovcových, sedimentovaných vrstvách, na plošně rozsáhlém území. To znamenalo odvodnění rozsáhlé oblasti.

Zvodnělé pórovité prostředí, nízká kovnatost a příznivá geologická skladba na ložisku Stráž viz obr. 2.14,¹ vedly v roce 1967 k pokusu chemického loužení. Pokus byl úspěšný, a tak v roce 1971 došlo na ložisku Stráž také ke zřízení dolu chemické těžby (DCHT).

Došlo tak ke světově unikátní situaci, kdy spolu těsně (vzdálenost asi 2 km) sousedily dvě zcela odlišné technologie dobývání.

- Hornická těžba vyžaduje suché prostředí. Hladina podzemní vody byla na celé ploše dolového pole snížena zhruba o 150 m.
- Chemické loužení vyžaduje udržování hladiny podzemní vody na úrovni terénu. Čerpání technologického roztoku z větší hloubky by snížilo jinak vysoce ekonomickou efektivitu těžby.

Poloha jednotlivých dolů je znázorněna na mapě [35] viz obr. A.3 v příloze na straně 100. Oblast DCHT je v jihozápadním rohu (fialová oblast). Dolové pole HDHI je ve středu mapy (oranžová oblast).

Intenzivním čerpáním v dolovém poli HDHI byl vytvořen rozsáhlý depresní kužel, který ovlivnil hladinu podzemní vody do vzdálenosti několika kilometrů. Snižoval i hladinu na DCHT a způsoboval i posun technologického roztoku směrem k dolovému poli HDHI.

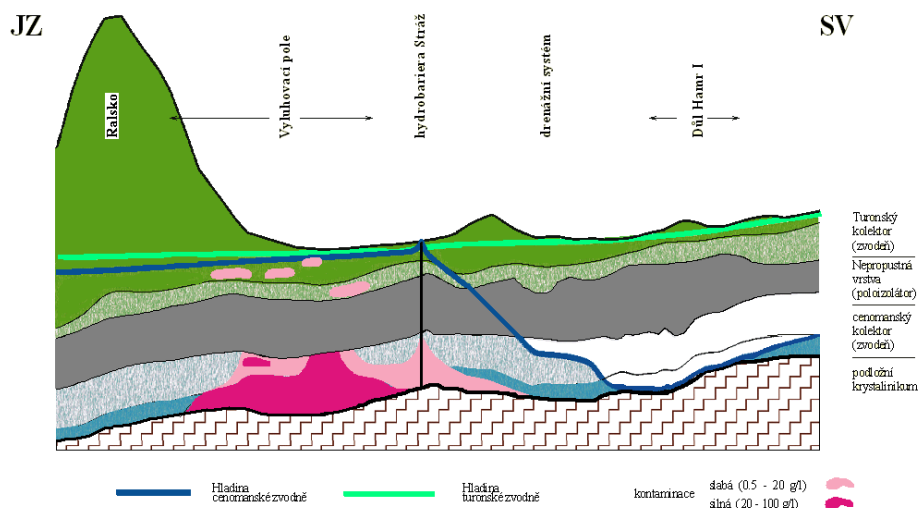
K zabránění dalšího posunu technologických roztoků a zajištění optimálních provozních podmínek na DCHT byla vytvořena linie hydrobariéry Stráž. Pro zajištění optimálních provozních podmínek v dolovém poli HDHI

¹Na obr. 2.14 je kompletní řez geologickým prostředím na ložisku Stráž se dvěma kolektory.

- Turonský, který je shora omezen tvarem volné hladiny, je přirozenou zásobárnou pitné vody. Zdola je omezen spodnoturonskými, nepropustnými, jílovitými vrstvami.
- Cenomanský, který před započítím důlní činnosti byl tlakovou zvodní, je shora omezen spodnoturonskými vrstvami a zdola nepropustným skalnatým podložím, kristalinikem. Voda v tomto kolektoru je kontaminována uranem a jinými toxickými kovy a není tedy pitná.

V dalším textu již budeme pracovat pouze s cenomanským kolektorem.

Schematický řez těžební oblastí



Obrázek 2.14: Řez zájmovou oblastí úlohy zatopení dolu Hamr I

byl vytvořen drenážní systém. Poloha obou systémů a hydrologická situace, kterou ustavil jejich dlouhodobý provoz je na obr. A.4 v příloze na straně 101.

Mezi hydrobariérou Stráž a drenážním systémem, které tvoří hydraulický dipól dochází k cirkulaci vody o objemu $15 - 18 \text{ m}^3 \text{ min}^{-1}$. Z dolového pole je čerpáno kolem $10 \text{ m}^3 \text{ min}^{-1}$ vody, která je po dekontaminaci vypouštěna do vodoteče. Tato činnost s rostoucí cenou elektrické energie nepříznivě ovlivňovala ekonomickou efektivnost hornické těžby na HDHI.

Roku 1988 bylo rozhodnuto o ukončení těžby na HDHI a byly zahájeny sanační práce. Aby nedocházelo k propadům, byly vydobyté prostory zakládány vápno-cementovou závázkou. Po ukončení těchto sanačních prací bylo možné ihned ukončit vtlačení do hydrobariéry a čerpání z drenážního systému a dolového pole HDHI.

Svahy depresního kužele, vytvořeného čerpáním z drenážního systému a dolového pole HDHI, ale mají různý sklon. To patrně způsobí zaplavení založených prostor silnými kyselými roztoky z DCHT, případně slabými kyselými roztoky, tzv. rozptylovými roztoky. Jde o roztoky z prostoru mezi hydrobariérou Stráž a drenážním systémem, které tam pronikly před vybudováním těchto systémů nebo průnikem („proskokem“) hydrobariérou. Tyto roztoky mohou způsobit degradaci vápno-cementové závázky a způsobit tak

propady, kterým jsme se právě závazkou snažili zabránit.

Bylo vypracováno několik různých scénářů, jak provozovat hydrobariéru, drenážní systém a čerpání z dolového pole tak, aby se těmto nepříjemným důsledkům zabránilo.

2.4.2 Popis modelované úlohy

Modelovaná úloha, která je zde prezentována, je ověřením jednoho z možných scénářů. Tento scénář předpokládal ukončení čerpání z dolového pole a drenážního systému, při provozu hydrobariery s výkonem sníženým na 60%.

Výsledkem modelování byly koncentrace roztoků a množství rozpuštěných látek, které vstoupily do založeného dolového pole. Hodnoty těchto koncentrací pak byly posouzeny příslušnými odborníky a stanoven možný vliv těchto roztoků na základku.

Hydrologicky ovlivněná oblast byla velmi rozsáhlá. Volné svahy depresního kužele dosahovaly až do vzdálenosti několika kilometrů. Na druhé straně bylo nutné získat velice detailní informace o koncentracích a složení roztoků, které vstoupily v dolovém poli HDHI. Rozsah modelu byl tedy jistým kompromisem, jako u většiny praktických úloh modelování, mezi rozsahem a podrobností.

Regionální model

Pro výpočty situace v celé oblasti v rozsahu Ještědský hřeben - Osečná - Hamr - Stráž pod Ralskem - Mimoň - Doksy byl vyvinut tzv. regionální model. Jednalo se o model založený na primární formulaci MKP a poskytoval informace o úrovni hladiny podzemní vody. Tento model ovlivnil volbu minimální oblasti a vypočítal okrajové podmínky pro popisovaný model zatápění HDHI.

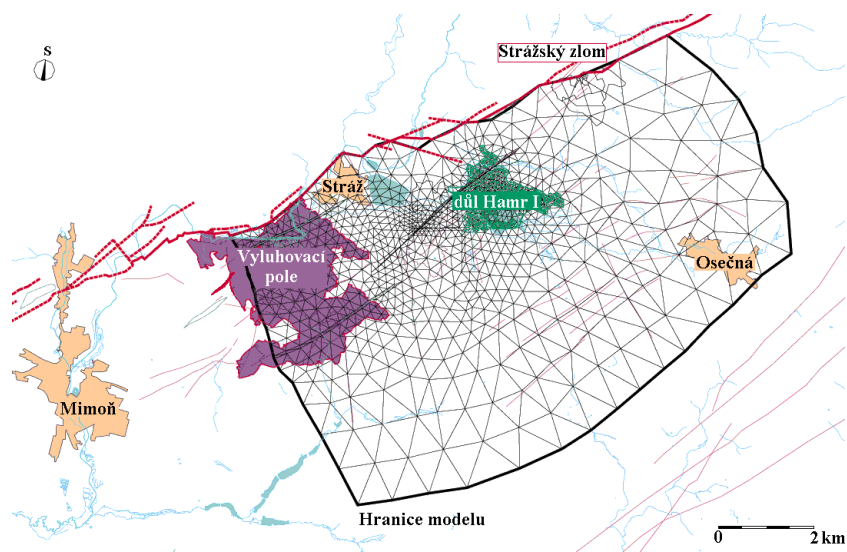
Sanační model

Tento model se detailně zabýval prostorem DCHT a řešil různé varianty sanačních prací po uzavření dolu DCHT. Prostor mezi hydrobariérou Stráž a drenážním systémem byl pouze okrajovou částí tohoto modelu, ale poskytl dostatečné informace o této oblasti. Ověření správnosti těchto dat bylo použito chemických rozborů vod čerpaných z drenážního systému HDHI.

2.4.3 Popis modelové sítě

Síť modelu viz obr. 2.15 měla následující parametry:

- rozloha 120 km^2 , $b_p = 75 \text{ m}$, $N_v = 12$ - kde b_p je průměrná mocnost a N_v je počet vrstev



Obrázek 2.15: Poloha sítě v zájmové oblasti úlohy zatopení dolu Hamr I

- 975 multiuzlů, 12432 uzlů,
- 1883 multiprvků, 21966 prvků,
- 52537 vnitřních stěn, 4756 vnějších stěn,
- délky hran nejmenšího trojúhelníku 76 m, 79 m, 44 m
- délky hran největšího trojúhelníku 1041 m, 1031 m, 1204 m
- řešení úlohy povede na 189089 rovnic s 628409 nenulovými prvky

2.4.4 Okrajové podmínky

Severní hranice modelové sítě byla tvořena linií Strážského zlomu. Tato hranice modelu byla zadána jako nepropustná (Neumannova homogenní okrajová podmínka $q = 0$). Západní hranice modelu protínala vyluhovací pole tak, aby v modelu byla zohledněna rozhodující část rozpuštěných látek, které se v prostoru vyluhovacích nacházely. Jižní a východní hranice byla zvolena tak, aby její vliv na sledovanou oblast (oblast mezi hydrobariérou a dolovým polem) byl minimální.

Vertikální členění modelové sítě respektovalo hlavní stratigrafická rozhraní. Báze modelu kopírovala reliéf nepropustného podloží, tvořeného krystalinikem. Strop zájmové oblasti tvořilo rozhraní cenomanské zvodně a vrstev spodního turonu, jejichž propustnost pro danou úlohu byla zadána jako nulová.

V modelu byly piezometrické výšky aplikovány pouze Dirichletovou okrajovou podmínkou. Hodnoty výšek byly převzaty z regionálního modelu.

Jako první krok byla vypočtena úloha ustáleného proudění, při které byly funkční jak překopy, tak i odvodňování dolového pole. Tato úloha reprezentovala výchozí stav a byla jí zároveň provedena kalibrace modelu. Jak objemy vtláčené do bariéry, tak objemy čerpané z překopů a dolového pole se velice dobře shodovaly s reálně naměřenými hodnotami.

Druhý krok, resp. sled následných kroků již byly řešeny jako úloha neustáleného proudění. Ze zadání okrajových podmínek bylo odstraněno čerpání z překopů a dolového pole. Tím došlo ke stoupání hladiny a postupu rozpuštěných látek do dolového pole.

Úroveň hladiny byla pro ověření správnosti porovnávána s regionálním modelem. Byť se jedná o dva odlišné modely bylo dosaženo velmi slušné shody (cca. decimetry).

2.4.5 Počáteční podmínky

Ke stanovení počátečních podmínek úlohy transportu byl využit tzv. sanační model. Při výpočtech pro zprávu [88] bylo k transportu použito 8 rozpuštěných látek. Pro prezentaci je nejvhodnější použít sumu všech rozpuštěných látek (TDS).

2.4.6 Hydraulické vodivosti

Oblast modelu měla poměrně komplikovanou geologickou strukturu.

Nejnižší ležící vrstvy byly velmi málo propustné, hodnoty hydraulické vodivosti ve směru os x a y se pohybovaly v setinách metru za den.

Největší hodnotu hydraulické vodivosti mělo souvrství rozpadavých pískovců. Z výsledků mnoha čerpacích zkoušek, jejichž výsledky převážně charakterizují parametry této vrstvy, bylo určeno počáteční rozložení hydraulické vodivosti. Hodnoty pak byly v 80. a 90. letech postupně upřesňovány při kalibraci modelů proudění a transportu látek a byly poměrně dobře známy. Hodnoty hydraulické vodivosti v souvrství rozpadavých pískovců byly zadány v rozmezí $1,5 - 10 \text{ m den}^{-1}$.

Hydraulická vodivost ve vrstvě fukoidových pískovců byla zadána konstantní v celé vrstvě. Důvodem takovéto interpretace byl nedostatek podrobných údajů. Běžné hodnoty hydraulické vodivosti ve fukoidových pískovcích se pohybovaly v řádu $10^{-1} \text{ m den}^{-1}$.

Komplikovanost geologické situace nejlépe vystihuje obr. A.5. V půdorysu je zobrazena jedna z vrstev dobře propustných rozpadavých pískovců. Jsou v ní však jasně patrné málo propustné geologické poruchy. Například neovulkanitové žíly, dvě v prostoru DCHT a jedna v prostoru dolového pole HDHI. Řez A - A' pak dokumentuje složité vertikální členění.

2.4.7 Rozbor výsledků

Z předcházejícího textu je patrné, že vlastní výpočet předcházely poměrně rozsáhlé přípravné práce, zpracování a vyhodnocení dat a informací o řešené oblasti. Mezi přípravné práce je také nutné započítat vývoj, implementaci a ověření modelu. Vlastní výpočet je v projektu takového rozsahu završením několikaměsíční práce. Samotný finální výpočet pak trval v porovnání s přípravnými pracemi pouhých 200 hodin strojového času na počítači s procesorem Dual Pentium Pro 200 MHz s 256 MB RAM.

Časový interval úlohy byl rozdělen na 118 časových kroků. Na počátku, při rychlých změnách poměrů, při rychlém stoupaní hladiny, byl časový krok zvolen 10 dní. S postupným snižováním rychlosti stoupaní hladiny byl časový krok prodlužován až na 60 dní. Výpočet byl ukončen v čase 2560 dní, kdy se již tvar, v tom čase již napjaté hladiny, výrazně nemění. Hladina mj. dosáhla úrovně hladiny změřené před započítáním veškeré důlní činnosti.

Výsledky modelování tvaru hladiny a transportu látek jsou uvedeny na obr. A.6 až obr. A.10, v obrazové příloze na stranách 103 až 107.

V prvním roce po ukončení čerpání z drenážního systému a dolového pole HDHI mají dominantní úlohu při zaplňování jihozápadní části depresního kužele rozptylové roztoky. Hladina podzemní vody v dolovém poli (v tomto čase volná hladina) stoupá. Její postup je zapříčiněn přítokem rozptylových roztoků vlivem strmého svahu depresního kužele ve směru k hydrobariéře. To zřetelně dokumentují řezy pro příslušné časy viz obr. A.7. Za první rok postoupí čelo rozptylových roztoků v některých částech dolového pole až o 600 m.

V dalších 2 – 3 letech postup těchto roztoků ještě pomalu pokračuje, viz obr. A.8 a obr. A.9, ale na konci tohoto období se roztoky již téměř zastaví zhruba ve vzdálenosti 800 m. Již od počátku tohoto období pozorujeme oddělení volné hladiny od čela rozptylových roztoků. Je to dáno vyrovnaním svahů depresního kužele a tedy výraznějším přítokem „čistě“ vody z ostatních směrů (S-V-J). Nejnižší místo depresního kužele se tak posouvá směrem k východu.

Po více jak 7 letech zaujme (již napjatá) hladina podzemní vody tvar viz obr. A.10, v obrazové příloze na straně 107, který odpovídá přirozenému směru proudění, tedy směru od Ještědského hřebene. Tento přirozený proud unáší všechny rozpuštěné látky směrem ven z dolového pole ve směru k hydrobariéře.

Kapitola 3

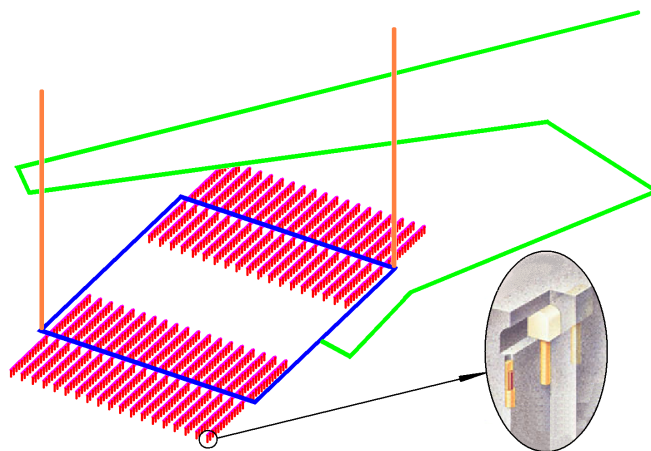
Model procesů v bentonitu

3.1 Podmínky vzniku modelů

Jaderná energie je v současnosti patrně jediným zdrojem, který je schopen pokrýt rychle rostoucí světovou spotřebu energie. Její výraznější rozvoj brzdí zejména problematika nakládání s radioaktivními odpady. Typicky s vyhořelým jaderným palivem (VJP). Jednou cestou je jejich přepracování ve specializovaném závodě (např. AREVA NC na mysu La Hague ve Francii nebo Sellafield Ltd. v Seascale ve Velké Británii). Tím se podstatně zvýší využití energie paliva (VJP stále obsahuje cca 95% štěpitelných látek). Tento postup je však velice technologicky náročný a v případě nedodržení přesných postupů (selhání člověka – Tokaimura, Japonsko), případně závadě na technice (selhání techniky), hrozí ekologická havárie. V současné době je přepracování VJP velice ekonomicky náročné. Druhou cestou je bezpečné, dlouhodobé uložení VJP až do doby, kdy míra lidského poznání a pokrok technologií dosáhnou úrovně potřebné k jejich ekonomickému a bezpečnému využití. Dnešní výzkumy jsou tedy směřovány k nalezení vědomostí a na jejich základě vytvoření postupů, které zajistí trvalé a bezpečné uložení VJP. Úložiště tedy musí být navrženo tak, aby zajistilo bezpečné uložení až do doby, než uložené materiály přestanou být nebezpečné pro okolní životní prostředí. To znamená na dobu cca 100 000 let.

V současné době se v celém světě uvažuje o uzavření VJP do speciálních kontejnerů, které se uloží v hlubinném úložišti. Konstrukce úložiště je na obrázku 3.1. Umístění úložiště hluboko pod povrch má více důvodů. Hlavním důvodem je dlouhodobá geologická stabilita hlubinného úložiště, kterou zajistí kvalitní geologický průzkum a výběr vhodné lokality. Zajištění bezpečnosti uloženého materiálu před vstupem nepovolaných osob (nebezpečí zneužití teroristy) je také jedním z podstatných důvodů. Relativně nevýznamným důvodem je snížení ionizujícího záření.

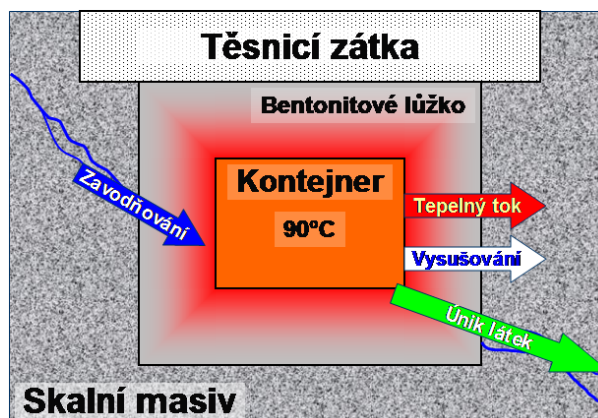
Základní myšlenkou hlubinných úložišť je snaha o dokonalé využití kombinace přírodních a inženýrských bariér. Jednou z možných konstrukcí je



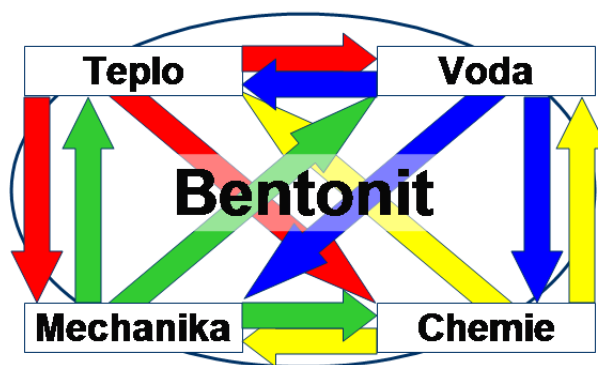
Obrázek 3.1: Ilustrační schéma dlouhodobého úložiště radioaktivních odpadů; zelená barva - přístupový tunel, modrá barva - servisní tunely, růžová barva - ukládací tunely, červená barva - ukládací kobky, oranžová barva - větrací šachty

uložení kontejnerů do skalního masivu. Nejmocnější přírodní bariéru zde tvoří horninový masiv, dlouhodobě splňující požadavky na stabilitu. Velký problém však představuje přítomnost podzemní vody. Dlouhodobým působením může rozrušit všechny inženýrské bariéry, následně vynést uložené nebezpečné látky mimo prostor úložiště a tím ohrozit životní prostředí. Pro minimalizaci přímého vlivu podzemní vody na kontejnery a minimalizaci poškození kontejnerů při horotvorných procesech ve skalnatém masivu, budou kontejnery uloženy do speciálního lůžka, viz obr 3.2. Problematika konstrukce lůžka pro uložení kontejnerů s VJP spadá do výzkumných aktivit označovaných jako „blízká pole“ (near-field). Problematika migrace látek vynesných podzemní vodou z prostoru úložiště spadá do výzkumných aktivit označovaných jako „vzdálená pole“ (far-field).

Jako velice perspektivní materiál pro uložení kontejnerů s VJP se jeví materiál s názvem *bentonit*. Bentonit velice výrazným způsobem zpomaluje průnik podzemní vody ze skalnatého masivu a oddaluje tak kontakt kontejneru s podzemní vodou. Jedná se o jílovitý materiál, který lze po vysušení rozemlít na jemný prášek. Pouhým lisováním ho lze ztuhnout a vytvářet tak z něho pevné bloky - cihly. Použití větších bloků bentonitu usnadňuje a zrychluje práci při ukládání jednotlivých kontejnerů. Při znovu zvlhčování se vysušený bentonit stává plastický, nabývá opět svoji jílovitou formu. Izoluje tak kontejner od drobných deformací skalnatého masivu při horotvorných procesech. Dále při procesu zvlhčování bentonitu dochází k jeho bobtnání. Bobtnání spolu s plastifikací způsobuje vtlačování plastifikovaného bentonitu do puklin v skalním masivu a dochází tak k jejich utěšňo-



Obrázek 3.2: Detail ukládací kobky s bentonitovým ložem



Obrázek 3.3: Vazby mezi jednotlivými procesy probíhajícími v bentonitovém lůžku

vání. Tento proces je z pohledu funkce bezpečnosti kontejneru pozitivní, minimalizuje další pronikání podzemní vody do bentonitového lůžka a ke kontejneru. Spadá do výzkumů zabývajících se tzv. „samohojením“ puklin (self-healing of fractures) [70]. Bentonit také vykazuje velice dobré sorpční vlastnosti.

Znovu zvlhčování (působením vodních par), nasákání (působením kapalné vody) vysušeného bentonitu a další zpětné vysušování vlivem tepla generovaným VJP v kontejneru jsou velice složité jevy, při nichž dochází k hydraulickým, mechanickým, tepelným a chemickým procesům (THMC), viz obr 3.3. Tyto procesy jsou vzájemně provázané řadou vazeb, materiálových parametrů, rovnic. Mnohé tyto vazby jsou silně nelineární a mnoho z nich dosud není probádáno na dostatečné úrovni [1], [23], [25]. Řešení reálných úloh problematiky THMC v plné šíři, se všemi vazbami, je proto

v současné době nemožné.

Problematika THMC se proto rozděluje na menší části. Úloha vedení tepla a hydratace, bobtnání a hydratace, chemie, atd. Vědecké týmy řeší jednotlivé části různými postupy. Vzájemná spolupráce a výměna získaných informací mezi jednotlivými výzkumnými subjekty přispívá k rychlejšímu postupu prací, procesu poznání. Experimentátoři připravují a realizují experimenty, které využijí odborníci zabývající se základním výzkumem. Odborníci zabývající se základním výzkumem hledají rovnice, které popisují dané procesy a děje. Experimenty jsou také využity k přesnější kvantifikaci parametrů vystupujících v rovnicích. Výše získané poznatky pak umožňují odborníkům, zabývajícím se modelováním, stavbu modelů a ověření jejich výsledků s provedenými experimenty. Vzhledem k tomu, že se jedná o celosvětový problém, pracují na této problematice vědecké týmy z celého světa. Dále prezentovaný model byl vyvinut pod záštitou mezinárodního projektu Task Force on Engineered Barrier System (dále jen Projekt **EBS**).

Mnoho jednotlivců i týmů používá k řešení této problematiky modelových systémů, se kterými pracují uživatelským způsobem. Jsou tak odkázáni na možnosti tohoto systému. V případě, že v daném modelovém systému chybí potřebné vlastnosti, další výzkum je značně problematický. Tato úzce specializovaná problematika je z autorova pohledu typickou oblastí, kde má smysl vybudovat vlastní modelový systém (v mnoha případech jsou výzkumné týmy úzce propojeny s týmy, zabývajících se vývojem modelů). Jedním ze základních požadavků kladených na modelový systém je jeho snadná modifikovatelnost, která zajistí jeho rychlé úpravy a rozšiřování. Tento postup umožní zohlednění dalších dílčích procesů, rozšíření systému řešených rovnic.

Vstupem do Projektu **EBS** se zúročily autorovy zkušenosti jak z prací na modelech filtračního proudění podzemní vody [90], [85], [83], [81], tak z prací na modelech prostupu tepla a vlhkosti textilními materiály [100], [99], [98], [97]. Z rozsáhlé problematiky THMC byly práce zaměřeny na výstavbu a otestování modelu pro řešení úloh TH - transport tepla a vlhkosti.

Často se TH úloha řeší jako dvě „samostatné“ úlohy, transport vlhkosti a vedení tepla. Vazba mezi těmito úlohami je pouze na úrovni vzájemného ovlivňování koeficientů. Pro transport vlhkosti v porézním prostředí se uvažuje kapalná a plynná fáze (vodní pára). Vázaná voda se uvažuje explicitně, přestože hraje právě pro bentonit (na rozdíl od běžných porézních materiálů) dominantní roli. Sací vlastnost a „afinita“ bentonitu k vodě je vyjádřena retenční křivkou, která je pro tento případ extrapolována z kapilárního režimu, pro režim řízený sorpcí (pomocí Kelvinova vztahu mezi sacím tlakem a relativní vlhkostí v plynné fázi). Při tomto popisu však nelze adekvátně interpretovat rozdíly mezi množstvím vody vyjádřeným saturací a množstvím vody vyjádřeným hmotnostním zlomkem. Komplikovaná je i realizace transportu vody generovaného teplotním spádem, vysušováním. Toto bylo prokázáno výpočty na modelech realizujících experimenty *BenchMark 1.1*

[64] a *BenchMark 1.2* [65], kdy počáteční část experimentu probíhala bez přítomnosti kapalné vody. Počáteční část experimentu bez přítomnosti kapalné vody však trvala poměrně krátkou dobu a odchylkám, které modely v tomto časovém intervalu vykazovaly, nebylo možné určit jednoznačnou příčinu. Pro podrobnější prozkoumání tohoto děje byl definován a proveden experiment *BenchMark 1.3* [66], který řeší úlohu tepelné zátěže bez hydratace na dostatečně dlouhém časovém intervalu.

Model popsany dále v této kapitole má všechny předpoklady úspěšně vyřešit modelovou úlohu experimentu *BenchMark 1.3*. Řeší provázanou úlohu transportu tepla a vlhkosti, přičemž voda je distribuována mezi dvě fáze, vodní pára v pórech mezi zrnky bentonitu a voda vázaná v zrnech bentonitu (pevná fáze), s nerovnovážnou interakcí mezi oběma fázemi a souvisejícím latentním teplem [28], [29]. Vhodnost tohoto postupu prokazuje model s označením VIPER, založený na podobném principu. Vývoj modelu VIPER probíhá pod vedením Prof. Kröhna [39], [40].

Lze očekávat, že model popsany v této kapitole nebude příliš úspěšný, při modelování experimentů *BenchMark 1.1* a *BenchMark 1.2*, ve kterých se vyskytuje voda v kapalné fázi. Zohlednění tohoto a dalších dějů je plánováno pro budoucí vývoj modelu.

Postupný vývoj modelu, přidávání dalších dějů, by nemělo znamenat nový vývoj programového kódu - novou implementaci. Bylo by vhodné využít moderní metody programování např. objektové programování [19], [14], [12], [8] a v co největší míře zajistit znovupoužitelnost již napsaných programových kódů.

Autorův podíl na projektu

Projekt lze rozdělit do tří oblastí; teoretické, implementační a aplikační. Autor se aktivně podílel na všech těchto oblastech.

Teoretická část vychází z prací zabývajících se úlohami vedení tepla a vlhkosti v textilních materiálech řešených v rámci Výzkuného centra „Textil“ dokumentovaných výzkumnými zprávami [100], [99], [98], [97]. Na projektu spolupracovali Prof. Dr. Ing. Jiří Maryška, CSc., Prof. Ing. Luboš Hes, DrSc., Ing. Petr Rálek, PhD., Ing. Jan Šembera, Ph.D. a Ing. Josef Novák, Ph.D. Získané zkušenosti byly přeneseny do problematiky modelování procesů v bentonitu a umožnily tak rychlejší postup. Na teoretické části zohledňující procesy v bentonitu pracoval autor společně s Doc. Ing. Milanem Hokrem, Ph.D.

Implementační činnost je z převážné většiny autorovým dílem. Jednotlivým prvkem celého modelu je autorem vytvořená „Metodika implementace metody konečných prvků DF^2EM “ [96]. Metodika DF^2EM umožnila efektivní zapojení studentů Lukáše Vodnárka, Jana Lisala, Jana Edera, Petra Švuba a Martina Kopečka. Studenti řešili dílčí implementační úlohy v rámci svých bakalářských a diplomových prací [71], [41], [18], [63], [37]. Při im-

plementaci kódu „parseru funkcí“ byly použity upravené zdrojové kódy, jejichž autor je Leigh Brookshaw [7]. Při implementaci kódu pro řešení soustav lineárních rovnic byly použity upravené zdrojové kódy Prof. Timothy A. Davise [9], [10], [11]. Dále byla v oblasti lineární algebry využita podpora Prof. Ing. Miroslava Tůmy, CSc. a Doc. Dr. Ing. Miroslava Rozložníka.

Autor se významnou mírou podílel i na aplikační části projektu. Je spoluřešitelem zakázky SURAO č. 2006/033/SKo v rámci Projektu **EBS** „Provedení modelových výpočtů v rámci projektu EBS a účast při jeho hodnocení“ jejímž řešitelem je RNDr. Jiří Slovák. Prof. Dr. Ing. Jiří Maryška, CSc. a RNDr. Jiří Slovák zajišťovali manažerskou část projektu. Vlastní výpočty realizoval autor společně s Doc. Ing. Milanem Hokrem, Ph.D. Ing. Jan Šembera, Ph.D. se projektu účastnil jako konzultant. Postup prací na této zakázce dokumentují výzkumné zprávy [95], [94], [93].

Nedílnou součástí projektu byla i prezentace dosažených výsledků na mezinárodních konferencích. Autor se výrazným podílem podílel na tvorbě příspěvků na konferencích [121], [122], [120]. Všechny tyto příspěvky osobně prezentoval.

3.2 Základní rovnice

Provázaný děj neustáleného vedení tepla, difuze vodních par a nerovnovážné interakce mezi vodními parami a vodou sorbovanou v bentonitu je obecně popsán soustavou tří diferenciálních rovnic.

$$\begin{aligned} c_v(T, C_a, C_b) \frac{\partial T}{\partial t} - \chi(T, C_a, C_b) \frac{\partial C_b}{\partial t} &= \nabla \cdot (\lambda(T, C_a, C_b) \nabla T) \quad , \\ \epsilon \frac{\partial C_a}{\partial t} + (1 - \epsilon) \frac{\partial C_b}{\partial t} &= \nabla \cdot \left(\frac{\epsilon}{\tau} D_a(T, C_a, C_b) \nabla C_a \right) \quad , \\ \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial C_b}{\partial t} &= \left(\frac{C_a}{C_a^{100}(T)} - \varphi(T, C_a, C_b) \right) \gamma(T, C_a, C_b) \quad , \end{aligned} \quad (3.1)$$

kde hledané neznámé jsou T teplota, C_a koncentrace vlhkosti ve vzduchu mezi bentonitovými zrnky, a C_b koncentrace vlhkosti v zrnech bentonitu. Oblast řešení je označena Ω s hranicí Γ . Úloha je definována na prostorové proměnné $\mathbf{x} = \{x, y, z\}$. Dále pak t je čas, $c_v(T, C_a, C_b)$ je tepelná kapacita, $\chi(T, C_a, C_b)$ je výparné/kondenzační teplo, $\lambda(T, C_a, C_b)$ je součinitel tepelné vodivosti, ϵ je porozita, τ je tortuozita, $D_a(T, C_a, C_b)$ je difúzní koeficient vodních par ve vzduchu, $C_a^{100}(T)$ je koncentrace vlhkosti nasyceného vzduchu v pórech, $\varphi(T, C_a, C_b)$ je inverzní sorpční křivka, a $\gamma = \gamma(T, C_a, C_b)$ je koeficient rychlosti výměny vody mezi vzduchem a bentonitem. Funkce C_a^{100} , φ , c_v , λ , χ , D_a a γ musí být kladné a omezené.

Řešení úlohy popsané soustavou diferenciálních rovnic (3.1) bude hledáno na oblasti Ω s hranicí Γ . Soustava diferenciálních rovnic (3.1) je doplněna okrajovými podmínkami. V modelu jsou uvažovány tři standardní

typy okrajových podmínek. Pro tento účel je uvažováno rozdělení hranice Γ na tři disjunktní části $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$.

Dirichletova okrajová podmínka definuje teplotu $T_D(t)$, resp. koncentraci vlhkosti $C_D^a(t)$ na hranici Γ_1

$$\begin{aligned} T(\mathbf{x}, t) &= T_D(t) \\ C_a(\mathbf{x}, t) &= C_D^a(t) \end{aligned} \quad \mathbf{x} \in \Gamma_1 \quad . \quad (3.2)$$

Neumannova okrajová podmínka definuje tepelný tok $q_T(t)$, resp. tok vlhkosti $q_{C_a}(t)$ přes hranici Γ_2

$$\begin{aligned} \lambda \nabla T(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} &= q_T(t) \\ D_a \nabla C_a(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} &= q_{C_a}(t) \end{aligned} \quad \mathbf{x} \in \Gamma_2 \quad , \quad (3.3)$$

kde \mathbf{n} je vnější normála hranice Γ_2 .

Newtonova okrajová podmínka definuje tepelný tok generovaný teplotním spádem $T - T_W(t)$, resp. tok vlhkosti generovaný spádem koncentrace vlhkosti $C_a - C_W^a(t)$ na hranici Γ_3

$$\begin{aligned} \lambda \nabla T \cdot \mathbf{n} + \sigma_T(t)(T - T_W(t)) &= 0 & \sigma_T(t) > 0 \\ D_a \nabla C_a \cdot \mathbf{n} + \sigma_{C_a}(t)(C_a - C_W^a(t)) &= 0 & \sigma_{C_a}(t) > 0 \end{aligned} \quad \mathbf{x} \in \Gamma_3 \quad . \quad (3.4)$$

Počáteční podmínky jsou definovány obecnými funkcemi na oblasti Ω

$$\begin{aligned} T(\mathbf{x}, 0) &= T_o(\mathbf{x}) \\ C_a(\mathbf{x}, 0) &= C_o^a(\mathbf{x}) \\ C_b(\mathbf{x}, 0) &= C_o^f(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad , \quad (3.5)$$

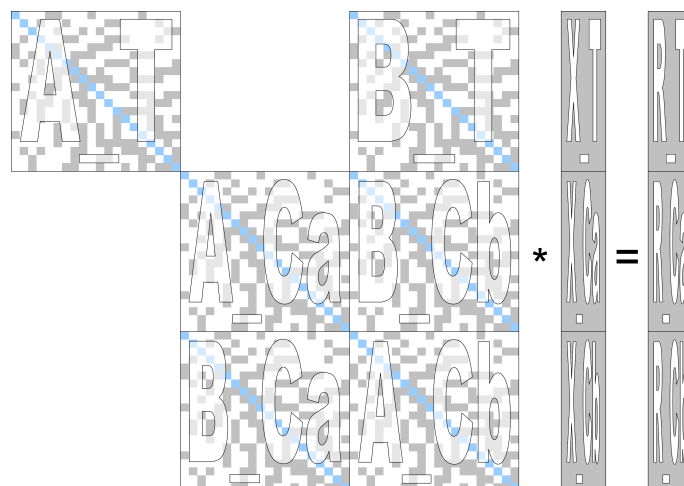
kteří jsou buď známé (například konstantní) nebo jsou získány výpočtem úlohy ustáleného děje.

Aplikace metody konečných prvků pro řešení soustavy rovnic (3.1) s okrajovými podmínkami (3.2), (3.3), (3.4) a počátečními podmínkami (3.5) byla podrobně popsána v řadě výzkumných zpráv. Mezi nejvýznamnější patří výzkumné zprávy vypracované v rámci Projektu **EBS** [95], [94] a [93].

Výsledkem aplikace metody konečných prvků je soustava lineárních rovnic (SLR). Matice SLR vytvářená tímto modelem je nesymetrická, řídká a má blokovou strukturu, viz obr. 3.4 [67].

3.3 Implementace modelu

Při implementaci tohoto modelu bylo použito poněkud odlišné kritérium, než u předchozích dvou modelů. Jako kritérium byl zvolen „čas nutný pro získání výsledků“. V tomto případě však nejde „pouze“ o čas vlastního běhu programu, ale celkový čas od definování problému po získání výsledků. Tedy včetně vývoje modelu. Pokud je model stavěn pro co nejvyšší výpočetní



Obrázek 3.4: Struktura globální soustavy TH úloh

rychlost, obsahuje řadu speciálních postupů a zjednodušení - optimalizací, jejichž další použitelnost je velice problematická. Tuto skutečnost charakterizuje známý citát Prof. Donalda Knutha:

„We should forget about small efficiencies, say about 97% of the time: Premature optimization is the root of all evil.“

Pro daný konkrétní případ sice přináší speciální postupy a zjednodušení rychlejší postup vývojových prací a rychlejší vykonávání programového kódu, ale výrazně prodlužují vývojové práce v případě, kdy dojde k zásadnější změně. Každá modifikace modelu začíná s minimálními podklady, téměř jako nový model. Tato situace je však při stavbě vědecko-technických modelů velice častá.

Řešením snadného a rychlého vývoje modelů je nalezení obecných postupů. Na základě těchto postupů pak lze definovat obecně použitelný modelový systém. Obecné postupy však bývají velice komplikované a v programech, které je realizují, je nutné ošetřit všechny eventuality. To vyžaduje velké množství rutinní práce, která ale přesto vyžaduje soustředění a přesnost. Proto se od počátku stavby obecně použitelného modelového systému předpokládalo zapojení studentů do vývoje. Studenti představují při dobrém vedení velký potenciál kvalitní vědecké práce. Využití tohoto potenciálu závisí na vhodném rozčlenění problému na menší a jednodušší, pro studenty zvládnutelné části. Jako ideální programátorský nástroj, který umožňuje takovéto členění je objektové programování. Podle schopností studentů a jejich dosaženého vzdělání jim je přidělován příslušný prostor pro realizaci. Na bakalářském stupni studia mohou studenti pracovat na úrovni jednotlivých tříd, vytvářet vlastní metody a rozšiřovat datové prvky daných tříd. Na magisterském stupni studia mohou studenti pracovat na úrovni

návrhu tříd, vytvářet vlastní třídy (nejčastěji děděním od dodaných základních tříd), realizujících potřebnou část modelu. Na doktorandském stupni studia již studenti mohou pracovat na úrovni vlastních programových projektů. Na druhou stranu, začlenění studentů do prací na větších projektech, vede k jejich lepší stimulaci a větší zodpovědnosti. Týmová práce, nutnost komunikovat a přizpůsobovat se okolí je velice cennou zkušeností. Zapojení studentů do vývoje přineslo základní požadavky na programátorský jazyk. Mělo by jít o jazyk robustní, konzistentní s dokonale ošetřenými chybovými stavy.

Prezentace výsledků ve vhodné grafické formě je velice názorná a tedy efektivní. Pro speciální případy zobrazení výsledků však mnohdy neexistuje příslušný nástroj. Pak nezbyvá, než-li takový nástroj realizovat vlastními silami. Je jedním z požadavků na programovací jazyk tedy bude i dostupnost a snadná použitelnost grafických knihoven.

Dalšími požadavky pak budou: možnost využití paralelismu, schopnost snadné práce s počítačovými sítěmi a umožnění výpočtů na počítačových clusterech.

Posledním požadavkem je co nejlepší zázemí programovacího jazyka. Tím je myšlena snadná dostupnost a úplnost dokumentace programovacího jazyka, možnost získání názorných výukových materiálů, možnost získávání informací pomocí diskusních fór atd.

Výše uvedené požadavky vedly k rozhodnutí, implementovat modelový systém v jazyku JAVA.

Tato volba ale má dvě nevýhody:

- První nevýhodou je o něco nižší rychlost vykonávaného kódu oproti jazykům C/C++ nebo Fortran. S úspěchem zde lze využít obecně akceptované tvrzení, že program stráví 90% času vykonáváním 10% programového kódu. Pro modely založené na metodě konečných prvků představuje oněch 10% programového kódu řešení soustav lineárních rovnic - SLR. V reálných úlohách (které vedou na rozsáhlé a špatně podmíněné SLR) je tento poměr dokonce ještě výraznější. Při řešení reálné úlohy popsané v kapitole 2.4, bylo prováděno časové profilování. Bylo zjištěno, že celkový čas spotřebovaný na řešení SLR představoval 95% z celkového času.

Pro tento projekt z toho plyne, že bude vhodné umožnit ponechání kódu realizující řešení SLR mimo tento projekt. Vzhledem k obsáhlosti a vysoké specifičnosti problematiky řešení SLR je takový postup velice vhodný. Podrobněji je tento problém popsán v kapitole 3.2.

Další skutečností eliminující tuto nevýhodu je, že rozvoj jazyka JAVA přináší stále větší rychlost vykonávaného kódu. Velkým skokem bylo zavedení nové generace JAVA HotSpot klientů, založených na technologii JIT (Just In Time).

- Druhou nevýhodou jsou nepříliš rozsáhlé knihovny pro vědecké výpočty. Tato nevýhoda je způsobena relativní novostí jazyka JAVA a počítačnickou nedůvěrou vědecké obce. Přesto se lze setkat se stále širším používáním tohoto perspektivního jazyka. Velkým problémem je zde změna z „myšlení v algoritmech“ na „myšlení v objektech“. Velkou roli zde hraje příchod nových mladých pracovníků, kteří již mají zažitý objektový přístup, do vědeckých týmů. To lze dokumentovat například projekty JMP [27], JAMA [30], MatrixMarket [5], JLaPack [13].

Objektový návrh vychází z postupů publikovaných v [16], [17], [48], [51], [52], [56]. Cenné zkušenosti byly získány studiem projektů zabývajících se implementací metody konečných prvků [31], [58], [36], [69], [50]. Získané zkušenosti byly dále rozvinuty do ještě větší obecnosti a širší použitelnosti. Vznikl tak základ obecného popisu výpočtu, založeného na metodě konečných prvků. Tento obecný popis standardizuje jednotlivé kroky při stavbě nového modelu a lze ho označit za metodický postup. Bylo mu proto dáno jméno „Metodika DF²EM“ (Developers Fab Finite Elements Method). Pro umožnění využití Metodiky DF²EM i zahraničními pracovníky je vývoj, názvy jednotlivých částí (třídy, metody a proměnné) a dokumentace, v anglickém jazyce. Pro zajištění jazykové jednotnosti této práce, jsou v této práci pro nejdůležitější části (tříd a metod) použity jejich české překlady.

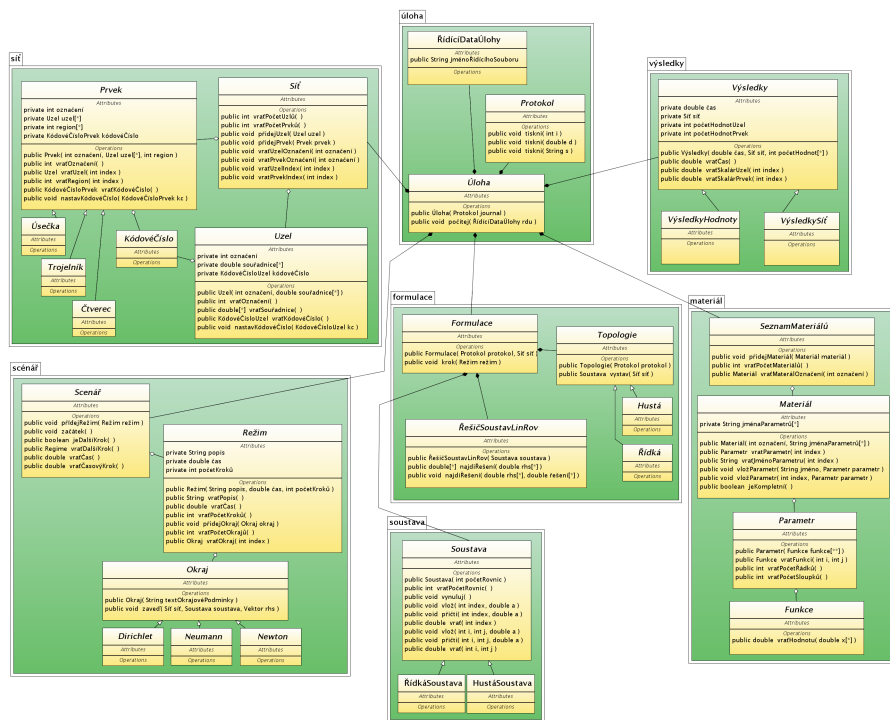
Zapojení více pracovníků - studentů, do vývoje modelu sebou přineslo nutnost efektivně předcházet konfliktům vyplývajícím z práce více pracovníků na stejném projektu a rychle řešit případné konflikty při sdílení výsledků jejich práce, sdílení zdrojových kódů. Teoretická část, definování standardů společné práce vychází z [47]. Pro praktickou realizaci, správu zdrojových textů, byl zvolen program *Subversion* [68]. Program *Subversion* pracuje na moderním principu „Okopíruj-Uprav-Slouči“ („Copy-Modify-Merge“) a umožňuje tak spolupráci více pracovníků s minimálním vzájemným omezením.

Velice silným nástrojem, který poskytuje jazyk JAVA, je technologie dynamického nahrávání tříd [49]. Metodika DF²EM definuje pouze obecné vlastnosti tříd - abstraktní třídy. Navazující projekty pak děděním definují potomky daných abstraktních tříd. Tyto podděděné třídy jsou uloženy mimo prostor Metodiky DF²EM a jsou nahrávány až při běhu programu. Tento postup výrazně omezuje možnost zavlečení chyby. Základ je pevně definován, důkladně otestován a nedochází k jeho změnám.

S výhodou jsou při implementaci použity standardy „extrémního programování“ [4].

3.3.1 Základní části modelu

Základem, na kterém byl vystavěn model procesů v bentonitu, je Metodika DF²EM. V této metodice jsou definovány základní třídy, jejich vlastnosti



Obrázek 3.5: Diagram tříd Metodiky DF^2EM ; zde uvedený obrázek je pouze ilustrační. Ve větším provedení je uveden v příloze A.3 na stránce 109

a vazby mezi těmito základními třídami. Třídy jsou definovány zcela obecně a umožňují snadnou implementaci modelu založeného na libovolné formulaci metody konečných prvků. Metodika DF^2EM vychází ze zásad datového modelování [62]. Sjednocuje přístup při stavbě modelů vytvořených autorem této práce s jinými modely, založenými na bázi metody konečných prvků. Za „klasické“ modely založené na metodě konečných prvků lze považovat zejména modely týmu Prof. Zienkiewicze [72], [73], [74].

Metodika DF^2EM

Metodika DF^2EM je rozčleněna¹ do 21 balíčků, v nichž je celkem uloženo 109 tříd. Balíčky soustřeďují třídy, které jsou navzájem úzce svázané, viz obrázek 3.5. Celá Metodika DF^2EM je velice rozsáhlá s množstvím vazeb a vykreslení kompletního diagramu tříd UML [60] by bylo značně nepřehledné. Proto byly na obrázku 3.5 (nebo ve větším měřítku v příloze A.3 na stránce 109) vykresleny pouze nejdůležitější balíčky, třídy a vazby realizující základní funkce modelu.

¹Aktuální stav ze dne 28.8.2007

Metodika DF²EM dále obsahuje základní nástroje, třídy realizující vstup dat, čtení řídicího souboru, čtení souborů sítí v různých formátech a další universálně použitelné nástroje.

Balíček úloha obsahuje nejvyšší třídu zastřešující celý projekt, třídu *Úloha*. Třída *Úloha* je složena ze tří rozsáhlých vstupních struktur (tříd *Síť*, *Scénář* a *Materiál*), jedné výstupní struktury (třída *Výsledky*) a třídy *Formulace* realizující konkrétní výpočet danou formulací MKP.

Balíček *úloha* obsahuje třídy, realizující základní pomocné funkce. Třída *Protokol* zajišťuje průběžný výstup informací o běhu programu. Třída *ŘídícíDataÚlohy* zajišťuje práci se vstupními řídicími daty. V současné době je podporován pouze jeden mechanismus vstupu řídicích dat, čtením ze souboru. Velice vhodným formátem pro práci se vstupními řídicími daty je formát *XML*. Zajišťuje plnou obecnost zadaných dat a jejich logické členění. Popis struktury souboru vstupních řídicích dat ve formátu *XML* je uveden v příloze B.

Balíček síť obsahuje veškeré třídy, realizující diskretizaci řešené oblasti - síť. Třída *Síť* zajišťuje veškerou práci se sítí. Do sítě lze vkládat nové uzly a prvky, vyhledávat uzly a prvky podle požadovaných kritérií a získávat k nim přístup.

Od konkrétního způsobu uložení uzlů a prvků v paměti je uživatel odstíněn. V současné době jsou realizovány dva způsoby uložení uzlů a prvků v paměti; v poli a pomocí generických datových typů. Síť ukládající uzly a prvky do pole je výrazně rychlejší, ale jsou programátorsky náročnější a zdrojový kód je tak hůře čitelný. Generické datové typy jsou pomalejší, ale zdrojové kódy jsou velice krátké a tím i přehledné. Generické datové typy jsou relativně novou technologií a stále dochází k jejich vývoji. Velice slibně se jeví možnost indexování, která by měla zrychlit jejich práci.

Balíček *síť* dále obsahuje databázi typů prvků, třídy *Úsečka*, *Trojúhelník*, atd. Všechny tyto třídy mají společného předka, třídu *Prvek*

Třída *KódovéČíslo* představuje vazbu spojující uzly a prvky se soustavou lineárních rovnic (SLR). Princip této vazby je podrobněji popsán dále, v balíčku *formulace*.

Balíček scénář - při řešení úloh neustálených dějů, popisuje působící okrajové podmínky „výpočetní scénář“, třída *Scénář*. Výpočetní scénář je seznam jednotlivých režimů, třída *Režim*. Režimem je myšlen stav, kdy na řešené oblasti působí během daného časového intervalu neměnné okrajové podmínky, třída *Okraj*. Režim je seznam těchto okrajových podmínek. Časový interval režimu se dělí, pro dosažení lepší časové aproximace, do několika výpočetních kroků.

Úlohy ustálených dějů jsou podmnožinou úloh neustálených dějů. Výpočetní scénář je pro tento typ úloh tvořen pouze jediným režimem. Výpočetní scénář úlohy ustáleného děje obsahuje jediný režim, který je rozdělen na nula výpočetních kroků. Časový interval režimu je pak zadán nulový.

Třída `Okraj` je pouze abstraktní třída. Okrajové podmínky různých modelů jsou velice různorodé. Jediným jednotícím prvkem je metoda `void zaved(Sít sít, Soustava soustava, Vektor rhs)` a konstruktor `Okraj(String text_okrajové_podmínky)`. S úspěchem je zde využita technologie dynamického nahrávání tříd. Třída je nahrána do paměti a jejímu konstruktoru je předán textový řetězec, definující danou okrajovou podmínku. Zadání okrajové podmínky textovým řetězcem je zcela obecné. Jedině konkrétní okrajová podmínka je schopna správně identifikovat a interpretovat zadanou okrajovou podmínku.

Balíček materiál - obecné zadání materiálových vlastností různých typů úloh byl poměrně komplikovaný problém. O to komplikovanější, že jedním ze základních požadavků bylo, mít možnost měnit materiálové vlastnosti v průběhu výpočtu. Materiálové vlastnosti mohou být proměnné v čase nebo záviset na řešených proměnných.

Nejvyšší třídou je třída `SeznamMateriálů`. Tato třída zajišťuje organizační práci s jednotlivými materiály. Ve většině řešených úloh má více prvků shodné materiálové vlastnosti. Shodné materiálové vlastnosti jsou uloženy v instancích třídy `Materiál`.

Třída `Materiál` obsahuje seznam materiálových parametrů a zajišťuje práci s nimi. Materiálové parametry realizuje třída `Parametr`. Počet materiálových parametrů, instancí třídy `Parametr`, není limitován. Materiálový parametr pak může být skalár (např. isotropní materiál), vektor (např. ortotropní materiál), matice (např. anisotropní materiál). Jednotlivé prvky materiálového parametru jsou zadány jako funkce, třída `Funkce`.

Třída `Funkce` je zadána pouze jako abstraktní třída s abstraktní metodou `double vratHodnotu(double[] pole_proměnných)`. Třídy, vytvořené děděním od třídy `Funkce`, musí tuto metodu překrýt, implementovat výpočet funkční hodnoty. Dále musí implementovat konstruktor `KonkrétníFunkce(String tvar_konkrétní_funkce)`. Textový tvar zadávané funkce zajišťuje plnou obecnost. Nejjednodušší potomek třídy `Funkce` je třída `KonstantníFunkce`.

Konstruktor `KonstantníFunkce(String hodnota_konstantní_funkce)` převede vstupující textový řetězec na číslo ve formátu `double` a metoda `double vratHodnotu(double[] pole_proměnných)` pak toto číslo vrací. Převod z textového řetězce se provádí pouze jednou, v konstruktoru. Volání metody `vratHodnotu` tedy má minimální časové nároky.

Nejkomplikovanější potomek třídy `Funkce` je třída `ParserFunkce` (`Parser` (ang.) = lexikální analyzátor). Konstruktor `ParserFunkce(String`

`tvar_konkrétní_funkce`) zajišťuje pouze vstup a uložení textového řetězce zadané funkce do příslušné instance. Metoda `double vraťHodnotu(double[] pole_proměnných)` pak provede lexikální analýzu (lexikální analyzátor provádí převod čísel v textovém tvaru „1.25“= 1.25, „1.25E2“= 125, reaguje na základní matematické operace „+“=součet, „-“=rozdíl, „*“=součin, „/“=podíl, „^“=mocnina a obsahuje jednoduché funkce `COS()`, `SIN()`, `LOG()`, `LN()`, `EXP()`). Při výpočtu funkční hodnoty reaguje na textovým popisem zadané proměnné, jejichž hodnota je zadána v poli proměnných. Text popisu jednotlivých proměnných, a pořadí jejich umístění v poli proměnných `double[] pole_proměnných` se definuje děděním. (Projekt *ISERIT* pracuje se třemi proměnnými T - teplota, C_a - koncentrace vlhkosti ve vzduchu mezi zrny bentonitu a C_b - koncentrace vlhkosti v pevné fázi). Lexikální analýza umožňuje pracovat se zcela obecnými funkcemi. Je však časově náročnější. Je tedy nutné pečlivě zvažovat vhodnost její použití.

Vhodným kompromisem mezi třídami `KonstantníFunkce` a `ParserFunkce` je využití dědění od třídy `Funkce`. Potomci třídy `Funkce` pak mohou realizovat širokou škálu funkcí, které jsou implementovány ve zdrojovém kódu metody `double vraťHodnotu(double[] pole_proměnných)`. Příslušné konstanty těchto funkcí pak vstupují do konstruktoru ve formě textového řetězce a jsou odděleny např. mezerou. Konstruktor provede jejich převod z textového tvaru do příslušných proměnných instance dané třídy typu `double`. Tento mechanismus zajišťuje vysokou rychlost výpočtu a dostatečnou obecnost, vykoupenou nutností implementace další třídy.

Balíček výsledky - práci s výsledky lze rozdělit do dvou fází. První fáze představuje převod hodnot z vektoru řešení získaného řešením soustavy lineárních rovnic. Základem pro ukládání výstupních dat je abstraktní třída `Výsledky`. Jedna instance potomka třídy `Výsledky` uchovává jeden časový krok. Při výpočtech úloh neustálých dějů jsou reference na instance představující jednotlivé časové kroky uloženy do pole. Délka pole a počet zřízených instancí je dán výpočtním scénářem. Vzhledem k současným paměťovým kapacitám počítačů jsou všechna vypočtená data uchovávána v paměti typu RAM. K uložení těchto dat dochází až po jejich kompletní na konci výpočtu.

Třída `Výsledky` má v současné době dva potomky, `VýsledkyHodnoty` a `VýsledkySíť`.

Třída `VýsledkyHodnoty` zajišťuje pouze uložení hodnot, vypočtených v příslušných entitách diskretizované oblasti (uzly, stěny, prvky). Vazba mezi entitami sítě a uloženými výsledky je realizována přes příslušné indexy. Během výpočtu nesmí docházet ke změnám v síti. Nesmí docházet k přidávání a odebírání uzlů, k posunům uzlů, k přidávání a odebírání prvků.

Třída `VýsledkySíť` pak kromě hodnot obsahuje i souřadnice jednotlivých uzlů a charakteristiky jednotlivých prvků. Tato třída uchovává jak

výsledky tak i strukturu sítě.

Druhou fází práce s výsledky je postprocesingové zpracování. Zejména variantní a kalibrační výpočty sebou nesou potřebu stále se opakujícího vyhodnocování výsledků. Může se jednat výpočet hodnot v konkrétním bodě prostoru, v případě výpočtu na sítích různé hustoty. Umístění entity (uzlu, stěny, prvku) ve které je požadovaná veličina vypočtena do požadovaného bodu prostoru je jedním z řešení. Vnáší však do vytváření sítě další požadavky, které mohou být těžko splnitelné. Elegantnější řešení je interpolace s využitím aproximačních funkcí, které byly použity ve výpočtu metodou konečných prvků.

Základem tříd realizujících postprocesingové zpracování je abstraktní třída `Výstup`. Samotné uložení zpracovaných výsledků je implementováno v potomcích této třídy překrytím abstraktní metody `void ulož()`. Počet instancí tříd realizujících postprocesingové zpracování a výstup není limitován.

Balíček formulace obsahuje třídy realizující výpočet jednoho časového kroku konkrétní formulací MKP. Vzhledem k tomu, že SLR generované MKP jsou řídké, obsahuje třída `Formulace` přepínač umožňující práci se SLR uloženými v hustém (jako dvourozměrné pole `double[] []`) nebo řídkém formátu (ve formátu CRS - Compressed Row Storage nebo CCS - Compressed Column Storage). Mechanismus kódových čísel (třída `KódovéČíslo` z balíčku `sít`) umožňuje jednoduchý přechod mezi uložením SLR v hustém nebo řídkém formátu. Tato možnost se velmi osvědčila při vývoji a ladění. Při uložení SLR v hustém tvaru je implementace relativně jednoduchá. Lze tak snadno a rychle získat výsledky, které umožní ověřit správnost a částečně i vlastnosti nové formulace. Pro reálné úlohy, které zpravidla vedou na rozsáhlé systémy SLR je tento postup nepoužitelný. Výpočet struktury řídké SLR, nalezení počtu a polohy všech nenulových prvků, je pro některé formulace velice komplikovaný. Možnost porovnání SLR vytvořených v hustém formátu poskytuje cenné informace pro efektivní vyladění, nalezení programátorských chyb.

Vlastní řešení SLR je z modelu vyčleněno. Je to dáno tím, že řešení SLR představuje samostatnou, rozsáhlou a logicky vyčleněnou oblast a pro sdílení dat lze použít jednoduché rozhraní. Propojení mezi modelem a řešičem SLR je realizováno na několika úrovních.

Externí řešič - Model a řešič jsou dva nezávislé spustitelné programy. Po sestavení SLR ji model uloží do souboru. Následně vyvolá spustitelný soubor řešiče SLR, který si SLR načte z daného souboru. Řešič SLR vyřeší. Výsledky uloží opět do souboru a předá řízení zpět modelu.

Výhodou tohoto řešení je snadné provedení, kdy práce s textovými soubory je součástí snad každého programovacího jazyka. Dále je výhodou i snadná identifikace problému. Model a řešič jsou zcela nezá-

vislé a v případě problému lze snadno nalézt jeho příčinu. Nevýhodou je nižší rychlost běhu modelu. Každé vyvolání spustitelného souboru a neustálé alokování a uvolňování paměti při řešení rozsáhlých SLR spotřebovává značnou část strojového výkonu.

Speciální variantou je nahrazení komunikace přes soubor síťovou komunikací. Model a řešič jsou opět dva nezávislé spustitelné programy. Pracují na dvou počítačích propojených počítačovou sítí. Komunikace mezi modelem a řešičem probíhá přes síťové rozhraní (socket).

Výhoda síťové komunikace modelu s řešičem SLR je možnost sdílení výpočetního času superpočítačů, případně možnost využít počítačový cluster. Nevýhoda je nutnost použití programovacího jazyka, který podporuje práci se síťovým rozhraním.

Kód řešiče je přilinkován ke kódu modelu - Programový kód modelu a řešiče je slinkován do jediného spustitelného souboru. Model volá příslušný podprogram (proceduru, metodu) realizující řešení SLR.

Výhodou je maximální efektivnost při volání řešiče SLR a kompaktní provedení modelu. Nevýhodou je, že jak programový kód modelu tak řešiče musí být kompatibilní, je možné jejich slinkování. Tato schopnost závisí od výrobců programovacích jazyků. V případě problémů je řešení velice komplikované. Obtížně se identifikuje, zda za problémy stojí chyba v kódu modelu nebo v kódu řešiče nebo zda jde o skrytou nekompatibilitu mezi linkovanými kódy.

Vlastní implementace řešiče - Doposud byly uvažovány obecné řešiče SLR. Zajímavou alternativou k obecným řešičům soustav lineárních rovnic představují řešiče optimalizované speciálně pro daný typ úlohy [123], [124]. S úspěchem tak lze využít znalostí o struktuře SLR. Ve skutečnosti nejde o zcela nový řešič, ale o modifikaci obecného řešiče. Důsledky této optimalizace jsou uvedeny na začátku kapitoly 3.3.

Výhodou je vyšší rychlost řešiče a tedy i modelu. Nevýhodou vyšší pracnost při implementaci řešiče použitelného pouze pro daný typ SLR.

Projekt *MKP*

Projekt *MKP* je rozčleněn² do 31 balíčků, v nichž je celkem uloženo 96 tříd. Jsou v něm uloženy všechny doposud implementované formulace MKP (primární pro skalární veličinu, primární pro vektorovou veličinu, smíšená, smíšená hybridní, speciální variantu smíšené hybridní tzv. uzlo-stěnovou).

Je zde nutné zmínit, že tento projekt je „vývojový“. Slouží pro zjišťování specifík a společných rysů jednotlivých formulací z pohledu programového

²Aktuální stav ze dne 28.8.2007

zobecnění. Prozatím tak jsou jednotlivé formulace schopny pracovat s různou množinou prvků a aproximačních a testovacích funkcí nad těmito prvky. Například primární formulace pro skalární veličinu je implementována pro trojúhelníkové a čtyřúhelníkové prvky pro řešení dvoudimenzionálních úloh a čtyřstěnné prvky (tetrahedrony) pro řešení trojdimenzionálních úloh s lineárními aproximačními a testovacími funkcemi (Lagrangeovy prvky L^1). Pro trojúhelníkové prvky pro řešení dvoudimenzionálních úloh jsou k dispozici další typy aproximačních a testovacích funkcí (Lagrangeovy prvky L^2 , L^3 a Hermitovy prvky H^1).

Úspěšnost implementace je ověřována na jednoduchých oblastech (čtvercové, příp. obdélníkové s hrubým dělením) s jednoduchými okrajovými podmínkami. S postupem času bude přibývat projektů (jako Projekt *ISERIT*) využívajících zde implementované formulace. Náplní těchto projektů pak již bude pouze drobné přizpůsobení konkrétní úloze (doplnění konkrétních veličin v příslušných jednotkách) a provedení detailního otestování.

Projekt *FGX*

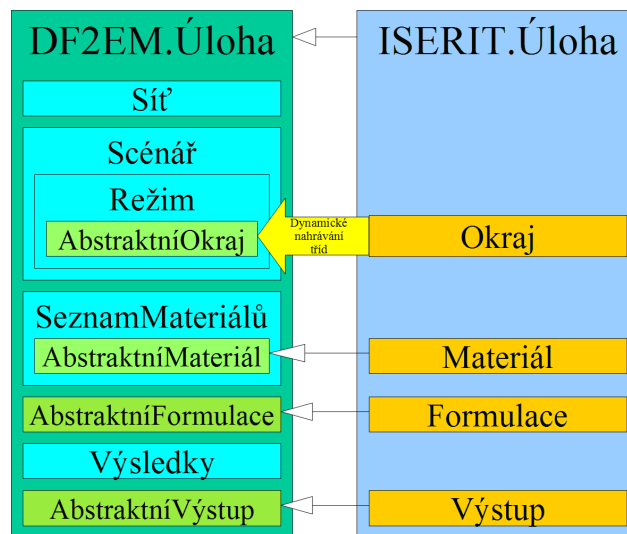
Projekt *FGX* realizuje grafickou prezentaci vypočtených výsledků. Je rozčleněn³ do 18 balíčků, v nichž je celkem uloženo 47 tříd. Cílem tohoto projektu není vytvářet systém pro zobrazování výsledků - grafický postprocesor. Takové (i velice dokonalé) systémy lze získat i zdarma. Velice propracované jsou například systémy *GMSH* [24] a *NetGen* [61]. Zajímavý je i projekt *Triangle* [59].

Projekt *FGX* má dva cíle:

- Prvním cílem je přímé propojení výpočetního jádra modelu s grafickým rozhraním. Přímé propojení výpočetního jádra modelu s grafickým rozhraním umožňuje průběžné zobrazování výsledků. Průběžné zobrazování výsledků je výhodné zejména při řešení časově závislých dějů. Výpočetní čas těchto úloh většinou velmi dlouhý. Často, zejména na počátku při definování úlohy, jsou vstupní data zadána neúplně (chybí část okrajových podmínek nebo byly okrajové podmínky špatně interpretovány) nebo dokonce zcela špatně (materiálové parametry byly zadány v jiných než očekávaných jednotkách). Výsledky pak jsou samozřejmě také špatné. To, že výsledky jsou špatné, lze většinou poznat již na první pohled.

Možnost průběžné kontroly výsledků umožní zastavit výpočet v okamžiku identifikace chyby. V případě, že je chyba ve výpočtu identifikována v počáteční fázi výpočtu lze ušetřit velkou část strojového času. Pokud by totiž výpočet nebyl zastaven a pokračoval by dále, další získané výsledky by byly také špatné a nebylo by je možné použít.

³Aktuální stav ze dne 28.8.2007



Obrázek 3.6: Schéma stávající organizace výpočtu

- Druhým cílem je možnost realizovat vhodné, drobné, grafické „úpravy“ výsledků. Jedná se o speciální postupy prezentace specifických výsledků, představující speciální grafické nástroje.

Při realizaci těchto „úprav“ je nutné postupovat velice obezřetně. Snadno může dojít k chybné interpretaci výsledků. Ideální je možnost interaktivní práce, kdy si uživatel vybírá konkrétní grafický nástroj a porovnáním zvažuje jeho vhodnost. Typickou ukázkou je autorem vedená diplomová práce postavená na Metodice DF^2EM a poté zařazená do Projektu FGX [71].

Projekt *ISERIT*

Vlastnímu modelu procesů v bentonitu bylo dáno jméno Projekt *ISERIT*. Využívá výše popsané Metodiky DF^2EM , Projektu *MKP* a Projektu *FGX*.

Projekt *ISERIT* je rozčleněn⁴ do 6 balíčků, v nichž je celkem uloženo 24 tříd. Z toho je ale 8 tříd realizujících implementaci okrajových podmínek a 4 třídy realizují výstup výsledků. Schéma organizace výpočtu a vzájemné vazby mezi Metodikou DF^2EM a Projektem *ISERIT* je na obrázku 3.6.

Nejrozsáhlejší (má nejvíce programových řádků) je třída *Formulace*. Je to částečně dáno tím, že nebyly použity žádné optimalizační postupy, ale jako hlavní kritérium byla zvolena přehlednost a logické řazení zdrojového kódu. Pro její velký rozsah byla logicky rozdělena do dvou částí - *Formulace* a *FormulaceJádro*. Třída *FormulaceJádro* je potomkem třídy *Formulace*

⁴Aktuální stav ze dne 28.8.2007

z Metodiky DF²EM. Třída `Formulace` je pak potomkem třídy `Formulace`.

Ve třídě `FormulaceJádro` jsou implementovány výpočty jednotlivých skalárních součinů (lokálních matic) a jejich umístování do příslušných bloků v globální matici. Implementace jednoho skalárního součinu je provedena jako jedna metoda. Třída `Formulace` pak při implementaci jednoho časového kroku zajistí sestavení celé globální matice pouze postupným zavoláním těchto metod. Takovéto členění usnadňuje ladění, hledání programátorské chyby, při ověřovacích výpočtech.

Nejvíce tříd odvozených od jednoho předka jsou třídy realizující okrajové podmínky. Třídy jsou odvozeny od třídy `Okraj` z Metodiky DF²EM.

Nejkratší implementaci (nejméně programových řádků) má třída `Materiál`. Je potomkem třídy `Materiál` z Metodiky DF²EM. Rozšiřuje tuto třídu pouze o seznam názvů materiálů, které jsou pak používány ve třídách `Formulace` a `FormulaceJádro`.

Úspěšná implementace Projektu *ISERIT* prokázala, že výstavba obecně použitelného modelového systému založeného na metodě konečných prvků je možná a poskytuje očekávané přínosy. Kódy implementované v rámci Projektu *ISERIT* řešily pouze úlohy specifické pro tento projekt. Vytvoření potřebných zdrojových kódů bylo rychlé a snadné.

3.4 Výsledky

Výše popsaným modelem, vytvořeným v rámci Projektu *ISERIT* již bylo řešeno několik úloh. Výsledky byly prezentovány formou příspěvků na konferencích [121], [122], [120] a v průběžných výzkumných zprávách [95], [94], [93].

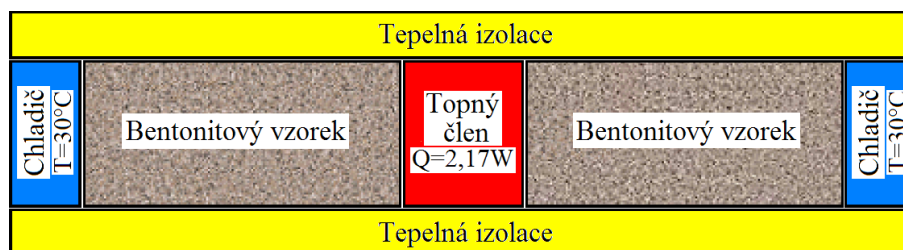
Jako úloha pro prezentaci vlastností Projektu *ISERIT* a postupu při sestavování modelu reálné úlohy byl vybrán experiment s označením *BenchMark 1.3* z Projektu **EBS**.

3.4.1 Experiment BenchMark 1.3

Kompletně celý experiment včetně výsledků experimentem získaných jsou popsány ve zprávě [66]. Experiment *BenchMark 1.3* byl navržen laboratoří Hard Rock Laboratory (HRL) ve švédském Äspö. Samotný experiment byl proveden španělskou laboratoří na Universitat Politecnica de Catalunya (UPC) v Barceloně.

Popis experimentu

Schéma konstrukce experimentální aparatury je na obrázku 3.7. Dva válcové vzorky lisovaného bentonitu s průměrem 38 mm a výškou 76 mm jsou vertikálně umístěny v experimentálním zařízení. Mezi vzorky je umístěn válcový topný člen s průměrem 38 mm a výškou 50 mm. Topný člen je vyroben



Obrázek 3.7: Schéma konstrukce experimentální aparatury. (Schéma je otočeno o 90° . Ve skutečnosti je aparatura umístěna vertikálně)

z mědi, ve které je umístěno 5 elektrických odporů. Odporů jsou připojeny na řízený zdroj elektrického napětí. Hodnota odporů a napětí na zdroji umožňují řídit výkon vyzářený odporů ve formě tepla v rozmezí 0 až 5 W. K volným postavám bentonitových vzorků jsou přiloženy chladiče. Chladiče jsou vyrobeny z nerezové oceli a řízeným průtokem chladicí kapaliny vnitřními kanálky je jejich teplota udržována na konstantní teplotě s přesností 0.5°C . Pro zajištění dobrého kontaktu mezi chladiči, bentonitovými vzorky a topným členem je celá soustava stlačována silou 70 až 75 N.

Sestava chladičů, bentonitových vzorků a topného členu je ovinuta tenkou latexovou membránou, pro zamezení úniku vody ve formě vodních par z bentonitových vzorků. Tato izolace zajišťuje, že ztráty vody jsou menší než 0.1 g den^{-1} . Dále je tato sestava umístěna do dutého polystyrénového válce. Tento polystyrénový válec minimalizuje tepelné ztráty z experimentálního zařízení.

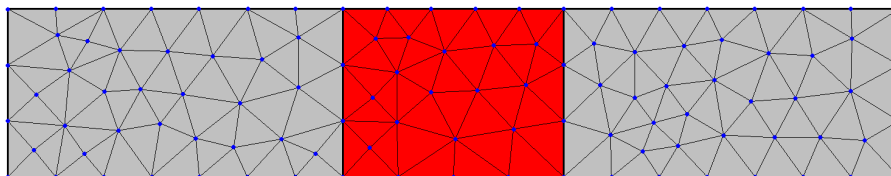
Bentonitové vzorky jsou vyrobeny z materiálu s označením FEBEX. Materiálové parametry tohoto materiálu jsou specifikovány ve zprávě [65]. Bentonitové vzorky jsou zhuštěny lisováním na hustotu 1630 kg m^{-3} za suchého stavu. Hmotnostní podíl vody ve vzorcích je 15.33 %.

Průběh experimentu

Počáteční teplota bentonitových vzorků byla 22°C . Po spuštění experimentu byl výkon topného členu udržován na konstantní úrovni 2.17 W. Teplota chladičů byla udržována na 30°C .

Experiment trval 168 hodin. Během experimentu byly průběžně měřeny a zaznamenávány pouze teploty v měřicích bodech. Ty byly umístěny v jednom vzorku ve vzdálenostech 0 mm (mezi topným členem a bentonitovým vzorkem), 20, 38, 60 a 76 mm (mezi bentonitovým vzorkem a chladičem) od topného členu. Ve druhém vzorku byl měřicí bod umístěn ve vzdálenosti 38 mm, tj. uprostřed mezi topným členem a chladičem. Tento měřicí bod sloužil pouze k ověření, že průběh změny teploty je u obou vzorků shodný.

Po této době byl topný člen vypnut a experimentální zařízení chladlo na



Obrázek 3.8: Síť modelu experimentální aparatury

teplotu chladičů, tj. 30°C. Chladnutí trvalo 6 hodin.

Poté bylo experimentální zařízení rozebráno, bentonitové vzorky rozřezány na šest částí a změřen jejich hmotnostní podíl vody.

Všechna naměřená data byla uložena do příslušných tabulek a byla publikována ve zprávě [66].

Model experimentu

Práce na modelu experimentu *BenchMark 1.3* měly následující postup: zvolení dimenze úlohy, vytvoření sítě z vhodných prvků diskretizujících řešenou oblast, sestavení výpočetního scénáře nastavení materiálových parametrů, vlastní výpočet, vyhodnocení výsledků.

Volba dimenze úlohy - vzhledem k tomu, že cílem experimentů realizovaných v rámci Projektu **EBS** je nalezení vhodného matematického popisu procesů probíhajících v bentonitu a určení příslušných materiálových parametrů, byl experiment *BenchMark 1.3* definován co nejjednodušeji. Tím, že jsou válcové vzorky zatěžovány v ose, je možné úlohu, při vhodné interpretaci tepelných ztrát pláštěm, považovat za jednodimenzionální (1-D).

Tato skutečnost poskytuje velkou volnost pro volbu dimenze řešené modelové úlohy. Po pečlivém zvážení všech faktů, byla úloha řešena jako dvoudimenzionální (2-D). Volba byla ovlivněna: zkušenostmi autora; poskytovanou podporou a propracovaností jednotlivých projektů *DF2EM*, *MKP*, *FGX* a *ISERIT*; a rozsáhlostí SLR na které úlohy jednotlivých dimenzí vedou.

Síť byla vytvořena pomocí systému *GMSH* [24]. Byla rozdělena do dvou oblastí, viz obr. 3.8 (barvy jsou pouze ilustrační). Dvě šedé oblasti představují bentonitové vzorky (vertikální rozměr šedé oblasti 38 mm odpovídá průměru a horizontální rozměr 76 mm odpovídá výšce vzorků). Červená oblast pak představuje topný člen (vertikální rozměr červené oblasti 38 mm odpovídá průměru a horizontální rozměr 50 mm odpovídá výšce topného členu).

Pro diskretizaci byly použity trojúhelníkové prvky s lineárními aproximačními a testovacími funkcemi. Fiktivní tloušťka byla u všech prvků za-

dána stejná, $s = 0.02985$ [m]. Fiktivní objem modelové (kvádrové) oblasti je shodný s objemem reálné (válcové) oblasti (bentonitových vzorků a topného členu).

Výpočetní scénář má následující průběh.

První režim byl použit pro vypočtení počátečních podmínek. Byl tedy řešen jako ustálená úloha. Proto byla nastavena doba trvání režimu na 0.0 hodin a bylo zadáno 0 výpočetních kroků. Teplota byla zadána Dirichletovou okrajovou podmínkou na celé hranici řešené oblasti (na obrysu sítě, viz obr. 3.8) konstantní $T = 20^\circ\text{C}$. Koncentrace vlhkosti ve vzduchu mezi bentonitovými zrnky byla zadána Dirichletovou okrajovou podmínkou na celé hranici řešené oblasti (na obrysu sítě, viz obr. 3.8) konstantní $C_a = 12.344 \cdot 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}$. Tato koncentrace vlhkosti ve vzduchu byla vypočtena z hmotnostního podílu vody ve vzorcích. První režim odpovídá situaci, kdy experimentální zařízení je dostatečně dlouho umístěno v laboratoři a jeho teplota, vlhkost vzduchu a bentonitových vzorků se ustálí na odpovídajících rovnovážných hodnotách.

Následující čtyři režimy byly řešeny jako neustálené úlohy a představují situaci po zapnutí topného členu a chladicího systému. Druhý režim trval 1.0 hodinu a byl rozdělen do 20 výpočetních kroků. Třetí režim trval 9.0 hodin a byl rozdělen do 20 výpočetních kroků. Čtvrtý režim trval 90.0 hodin a byl rozdělen do 20 výpočetních kroků. Pátý režim trval 68.0 hodin a byl rozdělen do 4 výpočetních kroků. Teplota byla zadána Newtonovou okrajovou podmínkou na bočních stěnách sítě, viz obr. 3.8, $T = 30^\circ\text{C}$ a $\sigma_T = 1$. σ_T je bezrozměrný koeficient, který charakterizuje kvalitu přestupu tepla mezi chladiči a bentonitovými vzorky. Závisí na více parametrech (přítlačná síla, drsnost povrchu chladičů, atd). Jeho hodnota proto byla stanovena kvalifikovaným odhadem. Předpokládá se, že elektrický výkon dodávaný do topného členu je beze zbytku převeden na teplo, které je rovnoměrně rozloženo po celém objemu topného členu. Tato skutečnost je zadána Neumannovou okrajovou podmínkou $Q = 2.17 \text{ W}$. Tepelné ztráty bočními stěnami bentonitových vzorků a topného členu jsou zadány Newtonovou okrajovou podmínkou na vodorovné stěny sítě, viz obr. 3.8, $T = 22^\circ\text{C}$ a $\sigma_T = 1.5 \cdot 10^{-2}$. Teplota T je zadána jako počáteční teplota. Předpokládá se, že se jedná o standardní teplotu laboratoře (tato informace není v technické dokumentaci experimentu *BenchMark 1.3* uvedena). σ_T je bezrozměrný koeficient, který charakterizuje kvalitu tepelné izolace. Závisí na více parametrech (kvalita kontaktu mezi bentonitovými vzorky a polystyrénovou izolací, tepelné vlastnosti polystyrénové izolace, atd). Jeho hodnota proto byla stanovena kvalifikovaným odhadem. Tok vlhkosti povrchem vzorků byl zadán Neumannovou okrajovou podmínkou $q_{C_a} = 0 \text{ kg m}^{-2}$ na celé hranici řešené oblasti (na obrysu sítě, viz obr. 3.8). Tato podmínka představuje dokonalé zaizolování oproti úniku vlhkosti z bentonitových vzorků.

Poslední, šestý režim představoval chladnutí experimentální aparatury a byl řešen jako neustálená úloha. Od předchozích čtyř režimů se lišil pouze absencí Neumannovy okrajové podmínky pro teplo, odpovídající vypnutí topného členu. Tento režim trval 6.0 hodin a byl rozdělen do 6 výpočetních kroků.

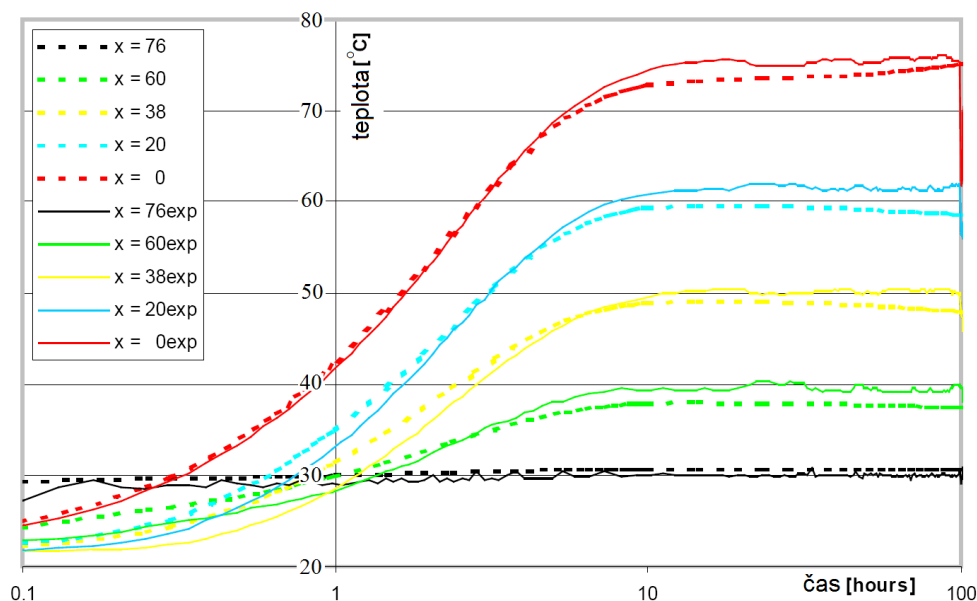
Materiálové parametry - v modelu byly zadány dva typy materiálů.

Pro oba vzorky byly zadány následující hodnoty materiálových parametrů, které odpovídají bentonitu s označením FEBEX [32]:

- $c_v = \frac{4200}{1630}Cb + (1,38T + 732,5)$ [$\text{J kg}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$]
- $\lambda = \left(\frac{0,57-1,28}{1+e^{\left(\frac{Cb}{350}\right)^{-0,65}} - 0,1} \right) + 1,28$ [$\text{W m}^{-1} \text{ s}^{-1}$]
- $\chi = 0$ [J kg^{-1}]
- $D_a = 1,4 \cdot 10^{-5}$ [$\text{m}^2 \text{ s}^{-1}$]
- $\gamma = 2,5 \cdot 10^{-3}$ [$\text{kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$]
- $\varphi = \frac{C_b}{350}$ [1]
- $\tau = 6$ [1]
- $\epsilon = 0,45$ [1]
- $\rho = 1630$ [kg m^{-3}]

Pro měděný topný člen byly zadány následující hodnoty materiálových parametrů:

- $c_v = 392,9$ [$\text{J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$]
- $\lambda = 385$ [$\text{W m}^{-1} \text{ s}^{-1}$]
- $\chi = 0$ [J kg^{-1}]
- $D_a = 0$ [$\text{m}^2 \text{ s}^{-1}$]
- $\gamma = 0$ [$\text{kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$]
- $\varphi = 0$ [1]
- $\tau = 1$ [1]
- $\epsilon = 0$ [1]
- $\rho = 8930$ [kg m^{-3}]

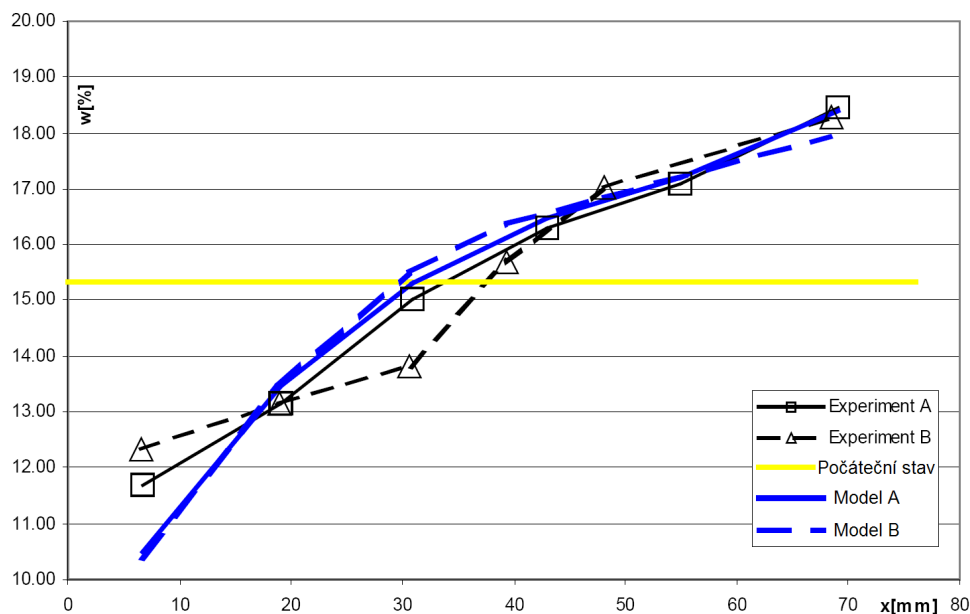


Obrázek 3.9: Vývoj teploty v měřicích bodech

3.4.2 Vyhodnocení výsledků

Vypočtené výsledky dosahují s experimentálně získanými daty dobrou shodu. Teploty jsou modelem počítány pro oba bentonitové vzorky. Teplota je počítána v bodech odpovídajících měřicím bodům. Měřicí body leží ve vzdálenostech 0, 20, 38, 60 a 76 mm od rozhraní mezi topným členem a příslušným bentonitovým vzorkem. S výhodou je využita symetrie úlohy. Jsou porovnávány teploty vypočtené pro oba bentonitové vzorky v bodech umístěných ve stejné vzdálenosti od topného členu. Teploty jsou u obou měřených vzorků shodné. Shodu vypočtených teplot s teplotami změřenými experimentálně lze posoudit na obr. 3.9.

Poněkud větší odchylku pak vykazují křivky profilů obsahu vody v koncovém čase, viz obr. 3.10. A to jak pro experimentálně získaná data, tak i pro data vypočtená modelem. Rozdíl u experimentálních dat lze patrně vysvětlit chybou měření, viz obr. 3.10 křivky s označením *Experiment A* a *Experiment B*. Rozdíl u vypočtených dat by mohl být způsoben chybou v modelu (chyba v použitých rovnicích popisující úlohu, chybná aplikace metody konečných prvků, chyba v programovém kódu). Pro ověření správnosti modelu, byl výpočet doplněn tzv. „bilanci hmoty“. Koncentrace vlhkosti ve vzduchu a v bentonitu byla integrována po celé řešené oblasti. Hodnota integrálu odpovídá hmotnosti vody obsažené v řešené oblasti. Tento výpočet byl proveden na začátku výpočetního scénáře (po prvním režimu, řešícím úlohu ustáleného děje) a na úplném konci výpočetního scénáře. Rozdíl mezi

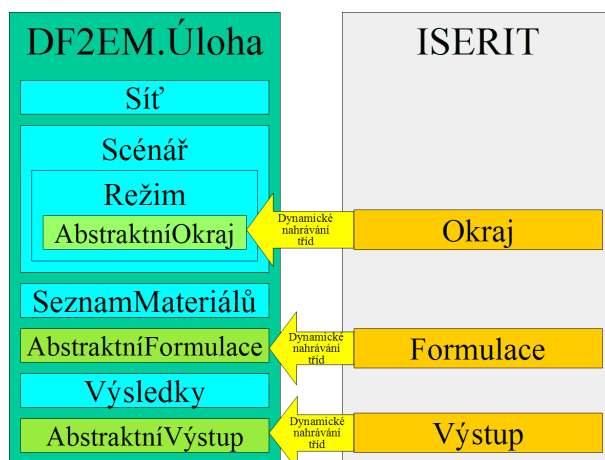


Obrázek 3.10: Profil obsahu vody v koncovém čase

oběmi hmotnostmi činil $1.58164 \cdot 10^{-5}$ %. Lze tedy předpokládat, že chyba v modelu není.

Skutečnost, která způsobila rozdíl vypočtených dat, byla příliš hrubá diskretizace řešené oblasti, viz obr. 3.8. Vliv hrubé diskretizace lze pozorovat na nesterých tvarech domén koncentrace vlhkosti (zejména vlhkosti v bentonitu C_b) bentonitových vzorků, které jsou vidět na obrázcích A.12 až A.20 v obrazové příloze, a pro symetrickou úlohu by tyto domény měly být také symetrické. Bylo vygenerováno několik sítí s vyšší hustotou diskretizace, oproti síti z obr. 3.8. Bylo tak dosaženo shody výsledků vypočtených pro oba bentonitové vzorky, za cenu delšího výpočetního času. Shody výsledků vypočtených pro oba bentonitové vzorky bylo také dosaženo úpravou sítě z obr. 3.8 tak, aby byla osově symetrická. Rychlost výpočtů pak byla shodná.

Patrně největší prostor pro získání ještě dokonalejší shody vypočtených dat s daty získanými experimentálně, je v nastavení materiálových parametrů. Bylo provedeno několik pokusů o zlepšení. Změny jednotlivých materiálových parametrů byly prozatím prováděny kvalifikovaným odhadem. Úspěšnost byla, vzhledem k provázanosti a různé citlivosti systému na jednotlivé parametry, poměrně malá. Pro dosažení lepší shody bude nutné použít sofistikovaného automatizovaného systému. Velice zajímavým se jeví program *UCODE* [54].



Obrázek 3.11: Schéma ideální organizace výpočtu

3.5 Další vývoj

Vývoj modelů popsaných v kapitole 1 (modely vlnovcových pneumatických pružin) a v kapitole 2 (model filtračního proudění podzemní vody a transportu rozpuštěných látek) dosáhl cílů, které bylo možné s daným popisem problému dosáhnout. Další rozvoj těchto modelů by vyžadoval odvození nového, rozšířeného matematicko-fyzikálního popisu. Vzhledem ke speciálním postupům a zjednodušením použitým při implementaci těchto modelů, by to v podstatě znamenalo zcela novou implementaci. Model popsaný v této kapitole (model procesů v bentonitu) však představuje výrazně odlišný způsob řešení.

V procesu implementace se velice osvědčila technologie, kterou poskytuje jazyk JAVA - dynamické nahrávání tříd. Tato technologie byla v současné fázi vývoje využita pouze při implementaci tříd okrajových podmínek. Bezchybná funkčnost této technologie a zkušenosti s jejím používáním budou efektivně použity i při implementaci jiných tříd (částí) modelu.

Nástrojem pro zvýšení produktivity při implementaci jsou „návrhové vzory“ (Design Patterns). Návrhové vzory jsou zajímavým prvkem, který bude ve větší míře využit při dalším rozvoji tohoto modelu. Návrhové vzory je možné charakterizovat jako standardizované postupy řešící konkrétní programátorský problém. Jejich použití zkracuje čas potřebný pro vývoj a minimalizuje nutnost hledání řešení a vývoje něčeho, co už bylo úspěšně vyřešeno a ověřeno. Klasické dílo zabývající se návrhovými vzory při tvorbě programů je [22]. Myšlenky publikované v této knize byly rozpracovány v [17] do podoby velice kvalitního výukového textu doplněného řadou názorných a funkčních zdrojových kódů. Problematikou vícenásobné použitelnosti již napsaných zdrojových kódů se zabývá [20].

Využitím návrhových vzorů a mnohem rozsáhlejšího využití technologie dynamického nahrávání tříd bude možné dosáhnout „ideální“ organizace výpočtu, viz obr. 3.11. Všechny projekty odvozované od Metodiky DF^2EM budou využívat pro výpočet instanci třídy $DF2EM$. Úloha. Tato instance realizuje veškeré společné operace: načtení řídicího souboru, souboru sítě, výpočetního scénáře a seznamu materiálů, řízení postupu výpočtu podle výpočetního scénáře a zapsání výsledků do příslušných výstupních souborů. S využitím dynamického nahrávání tříd pak budou „pouze“ nahrány příslušné třídy *Okraj*, *Formulace* a *Výstup*, realizující konkrétní chování daných částí programu. Dosažení tohoto cíle bude představovat výrazný zlom ve stavbě modelů založených na metodě konečných prvků.

Závěr

V práci jsou představeny tři modely, které dokumentují autorovu práci za posledních 10 let. Modely popsané v této práci vznikly ve své době, při dané úrovni techniky, za daných podmínek a s danou mírou znalostí. Ze současného pohledu se již mohou jevit jako překonané, ale v době svého vzniku a jejich nejintenzivnějšího používání představovaly světově ojedinělé systémy, vynikající unikátním přístupem k řešené problematice, vysokou rychlostí řešení, a schopností řešit velice rozsáhlé úlohy.

Každý z modelů, popsaný v této práci, řeší specifickou problematiku, pro kterou neexistuje uživatelsky použitelný model. Specifická problematika si vyžaduje stavbu speciálního modelu. Nutnost stavby nového, speciálního modelu je jediná, ale velice výrazná nevýhoda. Přínosy plynoucí ze stavby nového, speciálního modelu však tuto nevýhodu zcela eliminují.

Přínosy plynoucí ze stavby a řešení modelů lze rozdělit do tří hlavních oblastí:

- Aplikační - tato oblast je stěžejní pro všechny typy modelů a pokrývájí ji i uživatelsky používané modely. Model je nástrojem, prostředkem, pro řešení konkrétních úloh (získání požadovaných geometrických charakteristik pneumatické pružiny, ověření vhodnosti scénáře zatopení hlubinného dolu, řešení procesů probíhajících v bentonitovém loži). Použití modelu jako nástroje je z pohledu stavby modelu pouze „rutinní“ záležitostí.
- Vědecká - do této oblasti patří vše, co souvisí se stavbou modelu. Do této oblasti lze zařadit, výběr fyzikálního (závisí na řešené úloze) popisu, volba matematického aparátu použitého k řešení, interpretace výsledků, atd. Rozdělení aplikační a vědecké části není zcela ostré a dochází k jejich prolínání.
- Výuková - nedílnou součástí vědecké práce na akademické půdě je přenesení získaných poznatků do výuky. Může se jednat o drobnou úpravu vhodných předmětů zabývajících se touto problematikou a to buď formou přednášek nebo cvičení. Případně může jít o začlenění studentů do vědeckého týmu formou projektů, bakalářských, diplomových a disertačních prací. Rozsah řešené problematiky musí samozřejmě odpovídat dosaženému stupni vzdělání a schopnostem studenta.

Model vlnovcových pneumatických pružin popsáný v první kapitole patří do skupiny modelů, které byly vytvořeny pro rozšíření oblasti vědeckého poznání a přenášení získaných poznatků do praxe, k aplikačnímu použití. Úspěšnost tohoto procesu je dokumentována články v zahraničních recenzovaných časopisech [76] a [79], příspěvky na mezinárodních konferencích [103], [102], [101] a výzkumnými zprávami [78], [77], [75] dokumentujícími postup prací Výzkumného záměru VZ 1453 v rámci kterého je tato problematika zkoumána. Přístup k řešení problematice, výpočtům statických charakteristik vlnovcových pneumatických pružin, je veden snahou, získat model, který bude snadno ovladatelný a výsledky vypočte ve velice krátkém čase. Předpokládá se, že model bude využíván zejména při konstrukci složitějších strojních zařízení. Bude tedy používán strojními konstruktéry a musí respektovat specifika jejich přístupu k řešení problematice. Součástí modelu je tedy i uživatelské rozhraní, které zajišťuje snadné ovládání. Krátký čas pak znamená řádově desítky sekund. Výukový přínos tohoto modelu je minimální.

Model filtračního proudění podzemní vody a transportu rozpuštěných látek popsáný ve druhé kapitole je typickým představitelem modelů s maximálním aplikačním přínosem. Mezi nejobtížnější úlohy řešené tímto modelem patří výpočty transportu kontaminantů v prostoru soustavy odka-lišť chemické úpravy uranové rudy o.z. MAPE Mydlovary [87], chemické úpravy uranové rudy o.z. GEAM Rožná [86], chemické úpravy uranové rudy o.z. TÚU Stráž pod Ralskem [106], výpočet vývoje hladiny a transportu kontaminantů při zatopení dolu Hamr I [88]. Model poskytuje i přínosy vědecké, ale ty jsou prostředkem k dosažení cíle, stavby modelu. Vědecké přínosy jsou dokumentovány řadou příspěvků na mezinárodních vědeckých [119], [115], [116], [114], [117], [118], [111], [112], [113], [107], [108], [109], [110], [105], [106], [104]. Při stavbě modelu bylo vše podřízeno kritériu vysoké rychlosti řešení velice rozsáhlých úloh. Model, který je podřízen tomuto kritériu obsahuje řadu omezení (speciální aritmetika při práci se sítí, omezení na jediný typ prvku, atd.), které „limitují“ jeho vědecký přínos. Řešení rozsáhlých úloh je specifickou oblastí aplikované vědy. Výukový přínos tohoto modelu je minimální.

Zcela odlišný přístup od prvních dvou modelů je přijat u modelu procesů v bentonitu (pracovní názvem Projekt *ISERIT*), který je popsán ve třetí kapitole. U Projektu *ISERIT* byla upřednostněna oblast vědecká a výuková na úkor oblasti aplikační. Vzhledem k mnoha neznámým v relativně nové problematice, byla zvolena cesta co největší obecnosti. Jako základ Projektu *ISERIT* byla zvolena autorem vytvořená Metodika DF^2EM [96], která standardizuje stavbu modelů založených na metodě konečných prvků. I když je Metodika DF^2EM , a tedy i Projekt *ISERIT*, relativně nová, bylo již dosaženo vědeckých výsledků ve formě příspěvků na mezinárodních

konferencích [121], [122], [120]. Projekt *ISERIT* je využíván při řešení mezinárodního projektu *Task Force on Engineered Barrier System* [95], [94], [93].

Model procesů v bentonitu je složen ze čtyř částí. První částí je Metodika DF^2EM , která definuje základní třídy modelu. Druhá část má pracovní označení Projekt *MKP*. Obsahuje třídy realizující základní matematické operace metody konečných prvků (výpočet aproximačních a testovacích funkcí, výpočet skalárních součinů, atd.). Třetí část s pracovním označením Projekt *FGX* realizuje grafický výstup výsledků. Poslední čtvrtá část je vlastní Projekt *ISERIT*. Zvolený způsob stavby modelu je inspirován moderními postupy stavby rozsáhlých programových systémů. Velká váha je kladena na opětovné použití jednotlivých tříd, škálovatelnost a týmovou práci. Do týmové práce jsou zapojeni i studenti v rámci svých projektů a prací.

Zapojení studentů do procesu vývoje lze vhodně odměřovat, podle schopností studentů a jejich dosaženého vzdělání. Na bakalářském stupni studia studenti pracují na úrovni jednotlivých tříd, vytvářejí vlastní metody a rozšiřují datové prvky daných tříd. Na magisterském stupni studia studenti pracují na úrovni návrhu tříd, vytvářejí vlastní třídy (nejčastěji děděním od dodaných základních tříd), realizujících potřebnou část modelu. Na doktorandském stupni studia již studenti pracují na úrovni vlastních programových projektů. Realizují stavbu a řešení vlastních modelů podle zásad definovaných Metodikou DF^2EM .

Metodika DF^2EM stavby modelů založených na metodě konečných prvků, na jejímž základě je založen model procesů v bentonitu, v sobě obsahuje značný potenciál pro další vývoj. A to jak pro vědecké, tak i výukové využití. Doposud byly úspěšně obhájeny dvě diplomové práce [71], [41] (obě hodnoceny stupněm *výborně*), tři bakalářské práce [18], [63], [37] a další tři studenti pracují na dokončení svých bakalářských prací. Všechny tyto práce jsou postaveny na Metodice DF^2EM . V současné době pracuje na vlastním modelu, který rozšíří model procesů v bentonitu založený na zmíněné Metodice DF^2EM , student doktorandského studia.

Aplikační přínos tohoto modelu je poněkud omezen. Omezení je dáno vyloučením optimalizací, které by omezily obecný přístup k řešení, např. podpora pouze jednoho typu prvků, viz kapitola 2. Omezení aplikačního přínosu je do jisté míry dán i použitým programovacím jazykem. Výše zmíněná omezení se projevují vyšší časovou náročností prováděných výpočtů.

Modely popsané v této práci řeší problematiku, která není řešena nebo je její řešení při zadaných podmínkách nedostatečné, jinými modely. Popsané modely splnily všechny požadavky na ně kladené. Lze tedy tvrdit, že vývoj a stavba nových modelů má i v dnešní době svůj význam.

Literatura

- [1] ALONSO E.E., OLIVELLA S., ARNEDO D.: *Mechanisms of gas transport in clay barriers*, Journal of Iberian Geology 32 (2), 2006, pp. 175–196, ISSN 1698-6180
- [2] ARIOLI M., MARYŠKA J., ROZLOŽNÍK M., TŮMA M.: *Dual Variable Methods for Mixed-Hybrid Finite Element Approximation of the Potential Fluid Flow Problem in Porous Media*, Technical Report RAL-TR-2001-023, Rutherford Appleton Laboratory, 2001
- [3] BEAR J., VERRUIJT A.: *Modeling Groundwater Flow and Pollution*, D.Reidel Publishing Company, Dordrecht, Holland, 1987
- [4] BECK K.: *Extrémní programování*, Grada Publishing spol. s r.o., Praha, 2002, ISBN 80-247-0300-9
- [5] BOISVERT R., POZO R., REMINGTON K., BARRETT R., DONGARRA J.J.: *Matrix Market*, [online], [cit. 2007-09-29], URL: <http://math.nist.gov/MatrixMarket>
- [6] BREZZI F., FORTIN M.: *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*, Springer-Verlag, New York, USA, 1991
- [7] BROOKSHAW L.: *Java 2D Graph Package - Version 2.4* [online], [cit. 2007-08-28], URL: <http://www.sci.usq.edu.au/staff/leighb/graph>
- [8] CROSS J.T., MASTERS I., LEWIS R.W.: *Why you should consider object-oriented programming techniques for finite element methods*, Internatioanl Journal for a Heat and Fluid Flow, Vol. 9, No. 3, pp. 333–347, 1999
- [9] DAVIS T.A.: *User Guide for LDL, a concise sparse Cholesky package*, [online], [cit. 2007-08-27], URL: <http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/ldl/>
- [10] DAVIS T.A.: *Algorithm 849: a concise sparse cholesky factorization package*, ACM Trans. Math. Softw., 31(4): pp. 587-591, 2005

- [11] DAVIS T.A.: *CSparse: a Concise Sparse matrix package*, [online], [cit. 2007-08-27], URL: <http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/CSparse/>
- [12] DEVLOO P.R.B.: *An object oriented environment for scientific programming*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 150(14): pp. 133-153, 1997
- [13] DONGARRA J., SEYMOUR K.: *F2J*, [online], [cit. 2007-09-29], URL: <http://icl.cs.utk.edu/f2j/>
- [14] DOW J.O., DOW J.A.T.: *A Unified Approach to the Finite Element Method and Error Analysis Procedures*, 1st Edition, Academic Press, 2006
- [15] DULAR P., GEUZAINÉ CH.: *GetDP: a General Environment for the Treatment of Discrete Problems*, [online], [cit. 2007-08-10], URL: <http://geuz.org/getdp/>
- [16] ECKEL B.: *Thinking in Java*, 2nd Edition, Prentice Hall, 2000, nebo [online], [cit. 2007-08-31], URL: <http://www.mindviewinc.com/downloads/TIJ>
- [17] ECKEL B.: *Thinking in Patterns, Problem-Solving Techniques using Java*, [online], [cit. 2007-08-31], URL: <http://www.mindviewinc.com/downloads/TIPatterns-0.9.zip>
- [18] EDER J.: *Implementace tříd pro efektivní práci s polynomy v R^1 , R^2 , R^3* Bakalářská práce, FM TUL, 2007
- [19] EYHERAMENDY D., ZIMMERMANN Th.: *Objectoriented finite elements I. Theory and application of automatic programming*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 195(4), pp. 41-68, 1998
- [20] FOWLER M.: *Refactoring: Improving the Design of Existing Code*, Addison-Wesley, 1999
- [21] GABATIN C., BILLAUD P.: *Bentonite THM mock up experiments. Sensors data report. CEA*, Report NT-DPC/SCCME 05-300-A, 2005
- [22] GAMMA E., HELM R., JOHNSON R., VLISSIDES J.: *Design Patterns - Elements of Reusable Object-Oriented Software*, Addison-Wesley, 1995, ISBN 0-201-63361-2
- [23] GENS A., LEDESMA A., PUSCH R., BÖRGESSON L.: *THMC Processes in Engineered Barriers: The experience from Febex and Prototype Projects*, [online], [cit. 2007-08-14], URL: ftp://ftp.cordis.europa.eu/pub/fp6-euroatom/docs/euradwaste04pro_6-7-ledesma_en-2.pdf

- [24] GEUZAINÉ CH., REMACLE J.F.: *The Gmsh Reference Manual, for Gmsh 2.0*, [online], [cit. 2007-08-10], URL: <http://www.geuz.org/gmsh/>
- [25] GUIMARÃES L.N., GENS A., OLIVELLA S.: *Coupled Thermo-Hydro-Mechanical and Chemical Analysis of Expansive Clay Subjected to Heating and Hydration* Transport in Porous Media, Vol. 66, No. 3, pp. 341–372, ISSN 0169-3913
- [26] GUSTAFSON J.L.: *Reevaluating Amdahl's Law*, Communications of the ACM, 31(5), pp. 532–533, 1998
- [27] HEIMSUND B.O.: *JMP - A Sparse Matrix Library in Java*, [online], [cit. 2007-09-29], URL: <http://www.uib.no/People/nmabh/jmp/index2.html>
- [28] HENRY P.S.H.: *Diffusion in Absorbing Media*, Proceedings of the Royal Society of London, Mathematical and Physical Sciences, Vol. 171, No. 945, pp. 215–241, London, 1939
- [29] HENRY P.S.H.: *The Diffusion of Moisture and Heat Through Textiles*, Discus. Farad. Soc. 3, pp. 243–257, 1948
- [30] HICKLIN J., MOLÉR C., WEBB P., BOISVERT R.F., MILLER B., POZOZ R., REMINGTON K.: *JAMA: A Java Matrix Package*, [online], [cit. 2007-09-29], URL: <http://math.nist.gov/javanumerics/jama>
- [31] INRIA, SDTools: *OpenFEM - An Open-Source Finite Element Toolbox* [online], [cit. 2007-08-29], URL: <http://www-rocq.inria.fr/OpenFEM/>
- [32] JUSSILA P.: *Thermomechanical Model for Compacted Bentonite*, A paper presented in VIII Finnish Mechanics Days, Espoo, 12-13 June 2003, [online], [cit. 2007-08-10], URL: <http://www.csc.fi/elmer/papers/index.phtml>
- [33] KAASSCHIETER E.F.: *Preconditioned Conjugate Gradients and Mixed-Hybrid Finite Elements for the Solution of Potential Flow Problems*, Ph.D. Thesis, Delft University of Technology, 1990
- [34] KAASSCHIETER E.F., HUIJBEN A.J.M.: *Mixed-hybrid finite elements and streamline computation for the potential flow problem*, Report PN-90-02-A, TNO Institute of Applied Geoscience, Delft, 1990
- [35] Klub českých turistů: *Lužické Hory. Soubor Turistických Map 1:50000*, 2. vydání, 1997

- [36] KÖNIG O., WINTERMANTEL M., ZEHNDER N. et al.: *FELYX - Finite Element LibrarY eXperiment* [online], [cit. 2007-08-29], URL: <http://felyx.sourceforge.net/>
- [37] KOPEČEK M.: *Efektivní řešení problémů topologie diskretizovaných sítí* Bakalářská práce, FM TUL, 2007
- [38] KREJČÍŘ O.: *Pneumatická vibroizolace*, Doktorská disertační práce, VŠST Liberec, 1986
- [39] KRÖHN K.P.: *New evidence for the dominance of vapour diffusion during the re-saturation of compacted bentonite*, Engineering Geology 82, 2005, pp. 127-132
- [40] KRÖHN K.P.: *About the role of vapour transport during bentonite re-saturation*, GRS report No. 222, 2006
- [41] LISAL J.: *Vývoj konečně prvkového modelu elasticity s vlivem tepelné roztažnosti* Diplomová práce, FM TUL, 2007
- [42] MACKIE R.I.: *Objectoriented finite element programming The importance of data modelling*, Advances in Engineering Software, 32(911): pp. 775-782, 1999
- [43] MARYŠKA J.: *Modely neustáleného nenasyceného proudění řešené na pevné síti metodou konečných prvků*, Výzkumná zpráva 1998, TU Liberec, 1998
- [44] MARYŠKA J., ROZLOŽNÍK M., TŮMA M.: *The potential fluid flow problem and the convergence rate of the minimal residual method*, Numerical Linear Algebra Application, Vol. 3, pp. 525–542, 1996
- [45] MARYŠKA J., ROZLOŽNÍK M., TŮMA M.: *Solution of Augmented Systems from a Mixed-Hybrid Finite Element Discretization of the Potential Fluid Flow Problem: Asymptotic Rates of Convergence*, Proceedings of ALGORITMY'97, pp. 100–109, Slovak Technical University, Bratislava, 2000
- [46] MARYŠKA J., ROZLOŽNÍK M., TŮMA M.: *Schur Complement Reduction in the Mixed-Hybrid Approximation of Darcy's Law: Rounding Error Analysis*, Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol. 117, pp. 159-173, 2001
- [47] MCCARTHY J.: *Softwarové projekty*, Computer Press, Praha, 1999, ISBN 80-7226-164-0
- [48] MEYER B.: *ObjectOriented Software Construction*, 2nd Edition, Prentice-Hill, 1997

- [49] NEWARD T.: *Understanding Class.forName(): Loading Classes Dynamically from within Extensions*, JavaGeeks.com, 2001, [online], [cit. 2007-08-29], URL: <http://www.javageeks.com/Papers/ClassForName/ClassForName.pdf>
- [50] PATZÁK B., BITTNAR Z.: *Design of object oriented finite element code*, Advances in Engineering Software, Vol. 32, No. 10–11, pp. 759–767, 2001
- [51] PECINOVSKÝ R., VIRIUS M.: *Objektově orientované programování 1.*, Grada Publishing spol. s r.o., Praha, 1996, ISBN 80-7169-366-9
- [52] PECINOVSKÝ R., VIRIUS M.: *Objektově orientované programování 2.*, Grada Publishing spol. s r.o., Praha, 1996, ISBN 80-7169-366-9
- [53] PRÁŠIL L., KRACÍK V., ZIKEŠOVÁ D.: *K problému vyšetřování osových deformací vlnocových pneumatických pružin*, Interní výzkumná zpráva KST 86-12, Liberec, 1986
- [54] POETER E.P., HILL M.C., BANTA E.R., MEHL S., CHRISTENSEN S.: *UCODE_2005 and Six Other Computer Codes for Universal Sensitivity Analysis, Calibration, and Uncertainty Evaluation*, [online], [cit. 2007-08-31], URL: <http://water.usgs.gov/software/ucode.html>
- [55] The Quake Project, [online], [cit. 2007-08-10], URL: <http://www.cs.cmu.edu/quake/>
- [56] RACEK S.: *Objektově orientované programování v C++*, Nakladatelství KOPP, České Budějovice, 1994, ISBN 80-85828-20-0
- [57] RAVIART P.A., THOMAS J.M.: *A mixed finite element method for 2nd order elliptic problems*, Mathematical Aspects of Finite Element Methods, Lecture Notes in Mathematics 606, pp. 292-315, Springer-Verlag, Berlin, 1977
- [58] RENARD Y., POMMIER J.: *Genfem++* [online], [cit. 2007-08-29], URL: <http://home.gna.org/getfem/>
- [59] SHEWCHUK J.R.: *Triangle - A Two-Dimensional Quality Mesh Generator and Delaunay Triangulator* [online], [cit. 2007-08-10], URL: <http://www.cs.cmu.edu/quake/triangle.html>
- [60] SCHMULLER J.: *Myslíme v jazyku UML*, Grada Publishing spol. s r.o., Praha, 2001, ISBN 80-247-0029-8
- [61] SCHÖBERL J., GERSTMAYR H., GAISBAUER R.: *NETGEN - automatic mesh generator* [online], [cit. 2007-08-10], URL: <http://www.hpffem.jku.at/netgen/>

- [62] ŠEŠERA L., MIČOVSKÝ A., ČERVENĚ J.: *Datové modelování*, Grada Publishing, Praha, 2001, ISBN 80-247-0049-2
- [63] ŠVUB P. *Použití paralelismu a distribuovaného zpracování dat v praxi* Bakalářská práce, FM TUL, 2007
- [64] Task Force on Engineered Barrier System: *Specification Of Benchmark THM 1.1 - Bentonite THM Mock-Up experiments performed by CEA*, 2005
- [65] Task Force on Engineered Barrier System: *Specification Of Benchmark THM 1.2 - Infiltration tests under isothermal conditions and under thermal gradient performed by CIEMAT*, 2005
- [66] Task Force on Engineered Barrier System: *Specification Of Benchmark THM 1.3 - Heating Test With No Water Infiltration Performed By UPC*, 2006
- [67] TEBBENS J.D., TŮMA M.: *Preconditioner updates for solving sequences of large and sparse nonsymmetric linear systems*, SIAM 2006
- [68] Tigris.org: *Subversion - Open Source Software Engineering Tools*, [online], [cit. 2007-08-29], URL: <http://subversion.tigris.org/>
- [69] University of Heidelberg: *UG - A Flexible Software Toolbox for Solving Partial Differential Equations*, [online], [cit. 2007-08-29], URL: <http://sit.iwr.uni-heidelberg.de/ug/>
- [70] VILARRASA R.V.: *Numerical modelling of fluid flow and particle transport in a rough rock fracture during shear* UPC 2005, [online], [cit. 2007-09-25], URL: <https://upcommons.upc.edu/pfc/handle/2099.1/3267>
- [71] VODNÁREK L.: *Vizualizace proudnic v imperfektním rychlostním poli* Diplomová práce, FM TUL, 2005
- [72] ZIENKIEWICZ O.C., TAYLOR R.L.: *Finite Element Method (5th Edition) Volume 1 - The Basis*, Elsevier, 2000, ISBN 0-7506-5049-4
- [73] ZIENKIEWICZ O.C., TAYLOR R.L.: *Finite Element Method (5th Edition) Volume 2 - Solid Mechanics*, Elsevier, 2000, ISBN 0-7506-5055-9
- [74] ZIENKIEWICZ O.C., TAYLOR R.L.: *Finite Element Method (5th Edition) Volume 3 - Fluid Dynamics*, Elsevier, 2000, ISBN 0-7506-5050-8

AUTORSKÁ A SPOLUAUTORSKÁ LITERATURA

(Seskupeno podle řešené problematiky, seříděno sestupně podle data vzniku)

MODELY VLNOVCOVÝCH PNEUMATICKÝCH PRUŽIN

- [75] PRÁŠIL L., KRACÍK V., FRYDRYCH D.: *Vývoj modelů vlnovcových pneumatických pružin* Výzkumná zpráva k VZ 1453 za rok 2006, TU Liberec, 2006
- [76] FRYDRYCH D., PRÁŠIL L., KRACÍK V.: *Principle of shape modelling of bellows air springs*, WSEAS Transactions on Mathematics, pp. 1161-1168, Issue 11, Volume 5, 2006, ISSN 1109-2769
- [77] PRÁŠIL L., KRACÍK V., FRYDRYCH D.: *Vývoj modelů vlnovcových pneumatických pružin* Výzkumná zpráva k VZ 1453 za rok 2005, TU Liberec, 2005
- [78] PRÁŠIL L., KRACÍK V., FRYDRYCH D.: *Vývoj modelů vlnovcových pneumatických pružin* Výzkumná zpráva k VZ 1453 za rok 2004, TU Liberec, 2004
- [79] FRYDRYCH D., PRÁŠIL L., KRACÍK V.: *Numerical models of bellows air springs for calculation of geometrical characteristics*, *Hydraulika a Pneumatika*, ročník VI, 2 (17), pp. 29–31., 2004, ISSN 1335-5171
- [80] PRÁŠIL L., KRACÍK V., FRYDRYCH D.: *Statické charakteristiky pneumatických vlnovcových pružin při maximalizaci objemu*, Interní výzkumná zpráva KST 90-23, Liberec, 1990

MODEL FILTRAČNÍHO PROUDĚNÍ PODZEMNÍ VODY A TRANSPORTU ROZPUŠTĚNÝCH LÁTEK

- [81] FRYDRYCH D.: *Model transportu chemických látek v neustáleném režimu proudění*, *Doktorská disertační práce*, TU Liberec, 2002
- [82] FRYDRYCH D.: *GEN-TRAN 2.XX (model transportu látek v neustáleném režimu proudění) - uživatelská příručka*, Výzkumná zpráva VZ F008 / 2000, DIAMO, 2000
- [83] FRYDRYCH D.: *GEN-FLOW 4.XX (model neustáleného filtračního proudění ve zvodni s volnou hladinou) - uživatelská příručka*, Výzkumná zpráva VZ F007 / 2000, DIAMO, 2000
- [84] FRYDRYCH D.: *GEN-TRAN 1.XX (model transportu látek v ustáleném režimu proudění) - uživatelská příručka*, Výzkumná zpráva VZ F004 / 2000, DIAMO, 2000

- [85] FRYDRYCH D.: *GEN-FLOW 3.XX (model ustáleného filtračního proudění s volnou hladinou) - uživatelská příručka*, Výzkumná zpráva VZ F003 / 2000, DIAMO, 2000
- [86] NOVÁK J., FRYDRYCH D., CHARVÁT J., WASSERBAUER V.: *Vliv sanace odkališť o.z. GEAM na kvalitu podzemních vod*, (Podklady pro rizikovou analýzu), Výzkumná zpráva VZ 525 / 98, DIAMO, 1998
- [87] NOVÁK J., FRYDRYCH D., CHARVÁT J., PISOVÁ E., WASSERBAUER V.: *Hodnocení vývoje kontaminace v regionu odkališť CHÚ MAPE Mydlovary*, Výzkumná zpráva VZ 510 / 98, DIAMO, 1998
- [88] NOVÁK J., CHARVÁT J., FRYDRYCH D., WASSERBAUER V.: *Zatápění dolu Hamr I*, Výzkumná zpráva VZ 481 / 97, DIAMO, 1997
- [89] NOVÁK J., CHARVÁT J., MUŽÁK J., FRYDRYCH D.: *Charakterizace modelových prostředků pro proudění podzemní vody a transport kontaminantů v horninovém prostředí vyvinutých ve firmě DIAMO, s.p.* Výzkumná zpráva VZ 465 / 97, DIAMO, 1997
- [90] FRYDRYCH D.: *GEN-FLOW 2.XX (model ustáleného filtračního proudění s napjatou hladinou) - uživatelská příručka*, Výzkumná zpráva VZ F008 / 97, DIAMO, 1997
- [91] MARYŠKA J., FRYDRYCH D.: *Výpočet lokální matice skalárních součinů tvarových funkcí obecného prizmatického prvku*, Výzkumná zpráva VZ 68 / 92, DIAMO, 1992
- [92] MARYŠKA J., FRYDRYCH D.: *Užití prizmatických prvků při řešení variačních úloh v oblastech s vrstevnatou strukturou*, Výzkumná zpráva VZ 67 / 92, DIAMO, 1992

MODEL PROCESŮ V BENTONITU

- [93] SLOVÁK J., MARYŠKA J., HOKR M., FRYDRYCH D., ŠEMBERA J.: *Provedení modelových výpočtů v rámci projektu EBS a účast při jeho hodnocení*, Výzkumná zpráva č. 3 k zakázce 2006/033/SKo, FM TUL, 2007
- [94] SLOVÁK J., MARYŠKA J., HOKR M., FRYDRYCH D., ŠEMBERA J.: *Provedení modelových výpočtů v rámci projektu EBS a účast při jeho hodnocení*, Výzkumná zpráva č. 2 k zakázce 2006/033/SKo, FM TUL, 2006
- [95] SLOVÁK J., MARYŠKA J., HOKR M., FRYDRYCH D., ŠEMBERA J.: *Provedení modelových výpočtů v rámci projektu EBS a účast při jeho hodnocení*, Výzkumná zpráva č. 1 k zakázce 2006/033/SKo, FM TUL, 2006

- [96] FRYDRYCH D. a kol.: *DF²EM - Metodika implementace metody konečných prvků*, [online], [cit. 2007-08-10], URL: <http://acervus.kmo.tul.cz/DF2EM>
- [97] FRYDRYCH D., RÁLEK P., ŠEMBERA J., NOVÁK J.: *Matematické modelování nestacionárního přenosu tepla a vlhkosti textilií pomocí metody konečných prvků* Výzkumná zpráva pro Výzkumné centrum „Textil“ za rok 2004 sekce B a C, TU Liberec, 2004
- [98] FRYDRYCH D., RÁLEK P., ŠEMBERA J.: *Matematické modelování nestacionárního přenosu tepla a vlhkosti textilií pomocí metody konečných prvků* Výzkumná zpráva pro Výzkumné centrum „Textil“ za rok 2003 sekce B a C, TU Liberec, 2003
- [99] FRYDRYCH D., RÁLEK P.: *Matematické modelování nestacionárního přenosu tepla a vlhkosti v plošné textilii pomocí metody konečných prvků* Výzkumná zpráva pro Výzkumné centrum „Textil“ za rok 2002 sekce B a C, TU Liberec, 2002
- [100] FRYDRYCH D., HES L., MARYŠKA J.: *Matematické modelování nestacionárního přenosu tepla a vlhkosti v plošné textilii pomocí metody konečných prvků* Výzkumná zpráva pro Výzkumné centrum „Textil“ za rok 2001, TU Liberec, 2001

AUTORSKÉ A SPOLUAUTORSKÉ PŘÍSPĚVKY NA KONFERENCÍCH

(Seskupeno podle řešené problematiky, seříděno sestupně podle data vzniku)

MODELÝ VLNOVCOVÝCH PNEUMATICKÝCH PRUŽIN

- [101] PRÁŠIL L., KRACÍK V., FRYDRYCH D.: *Contact problem in shape modelling of Multi-Bellows Air Springs*, Proceedings of 6th WSEAS International Conference on Simulation, Modelling and Optimization (SMO'06), pp. 487-491, Lisabon, Portugalsko, 2006, ISBN 960-8457-53-X
- [102] PRÁŠIL L., KRACÍK V., FRYDRYCH D.: *Cord mechanics in Shape modelling of Bellows Air Springs*, Proceedings of SiMoNA'06, pp. 46–54, Liberec 2006, ISBN 80-7372-152-X
- [103] PRÁŠIL L., KRACÍK V., FRYDRYCH D.: *Shape modelling of Air Bellows Springs*, Proceedings of Algoritmy 2005, pp. 142–149, Podbanské, Slovenská republika, 2005, ISBN 80-227-2192-1

MODEL FILTRAČNÍHO PROUDĚNÍ PODZEMNÍ VODY A TRANSPORTU ROZPUŠTĚNÝCH LÁTEK

- [104] FRYDRYCH D., MARYŠKA J., MUŽÁK J.: *The Mathematical Modelling of the Transport of the Contaminants*, Proceedings of ECMS'2001 (Electronics, Control, Measurement and Signals), pp. 3–9, Toulouse, Francie, 2001, ISBN 80-7083-444-7
- [105] FRYDRYCH D., MARYŠKA J., MUŽÁK J., SEVERÝN O.: *Mathematical Modelling of a Uranium Mine Flooding*, Proceedings of Algoritmy 2000, pp. 110–119, Podbanske, Slovenská republika, 2000, ISBN 80-227-1391-0
- [106] FRYDRYCH D., NOVÁK J., MUŽÁK J., PISKOVÁ E., SMETANA R.: *Numerical Simulation of Control of Remediation of Uranium Deposit Stráž*, Proceedings of Algoritmy 2000, pp. 130–135, Podbanske, Slovenská republika, 2000, ISBN 80-227-1391-0
- [107] FRYDRYCH D.: *Mathematical Modelling of the Deep Mine Flooding Process*, Proceedings of ECMS'99 (Electronics, Control, Measurement and Signals), pp. 188–193, Liberec, 1999, ISBN 80-7083-339-4
- [108] MARYŠKA J., MUŽÁK J., FRYDRYCH D.: *The Modelling of the Transport of the Contaminants*, Matematická statistika a numerická matematika a ich aplikácie, Kocovce, Slovenská republika, 1999
- [109] FRYDRYCH D., MARYŠKA J., MUŽÁK J., SEVERÝN O.: *Modelling of Flooding Uranium Mine*, Proceedings of 3rd European Conference on Numerical Mathematics and Advanced Applications, Jyvvaskyla, Finsko, 1999
- [110] FRYDRYCH D.: *Model proudění a transportu chemikálií aplikovaný na problematiku zatápění dolu Hamr I*, Hornická Příbram ve vědě a technice, Příbram, 1999
- [111] FRYDRYCH D., MARYŠKA J., MUŽÁK J., SEVERÝN O.: *Application of mixed-hybrid model of porous media flow to the flooding uranium mine after closing mining activities*, Proceedings of ACO-MEN'98 (Advanced Computational Methods in Engineering), Gent, Belgie, 1998, ISBN 90-423-0055-8
- [112] MARYŠKA J., FRYDRYCH D.: *MH-model of Unsteady Porous Media Flow*, Dynamika Tekutin '98, Praha, 1998, ISBN 80-85918-45-5
- [113] MARYŠKA J., SEVERÝN O., FRYDRYCH D.: *Aplikace nenasyce-ného průsakového proudění na hráz odkaliště*, Dynamika Tekutin '98, Praha, 1998, ISBN 80-85918-45-5
- [114] FRYDRYCH D., MARYŠKA J., MUŽÁK J.: *Numerical Oscillations in the Mixed-Hybrid Model of the Contaminants Transport*, Proceedings of

4th International Conference on Mathematical and Numerical Aspects of Wave Propagation, SIAM, Golden, Colorado, USA, 1998

- [115] MARYŠKA J., FRYDRYCH D., WASSERBAUER V.: *Primal and M-H models of unsaturated porous media flow*, Proceedings of 17th Biennial Conference on Numerical Analysis, University of Dundee, Skotsko, UK, 1997
- [116] MUŽÁK J., FRYDRYCH D., MARYŠKA J.: *Mixed-hybrid model of unsteady free boundary porous media flow Fluid*, Proceedings of 17th Biennial Conference on Numerical Analysis, University of Dundee, Skotsko, UK, 1997
- [117] MARYŠKA J., FRYDRYCH D., MUŽÁK J.: *Mixed-hybrid Model of Unsteady Free Boundary Porous Media Fluid Flow*, Proceedings of Algoritmy'97, pp. 149–155, Zuberec, Slovenská republika, 1997
- [118] MARYŠKA J., FRYDRYCH D.: *Mixed-hybrid Model of Unsaturated Porous Media Fluid Flow*, Proceedings of ALGORITMY'97, pp. 161–166, Zuberec, Slovenská republika, 1997
- [119] FRYDRYCH D., MARYŠKA J., MUŽÁK J.: *Mixed FEM for unsteady free boundary porous media flow*, Proceedings of Conference on Computation of Free Boundaries and Optimal Shapes, Lamoura, Francie, 1996

MODEL PROCESŮ V BENTONITU

- [120] FRYDRYCH D., HOKR M.: *Modelling of experiment BenchMark 1.3*, Proceedings of 9th WSEAS International Conference on Mathematical and Computational Methods in Science and Engineering (MACMESE'07), St. Augustine, Trinidad, 2007, (*příspěvek akceptován k publikování*)
- [121] FRYDRYCH D., HOKR M.: *Modelling of coupled thermo-hydraulic processes in bentonite heating experiment*, Proceedings of SiMoNA 2006, pp. 123–131, Liberec, 2006, ISBN 80-7372-152-X
- [122] FRYDRYCH D.: *The Verification of Coupled Heat and Moisture Transfer FEM Model*, FEMTEX 2006, El Paso, Texas, USA, 2006
- [123] FRYDRYCH D., RÁLEK P., RŮŽIČKOVÁ D.: *Special aspects of the FEM solution of a coupled heat and moisture diffusion with sorption in nanofibers structures*, MAFELAP 2006, Uxbridge, Londýn, UK, 2006
- [124] FRYDRYCH D., RÁLEK P.: *Nanofiber textiles - problem of FEM modelling the coupled heat and moisture transfer*, Proceedings of 6th

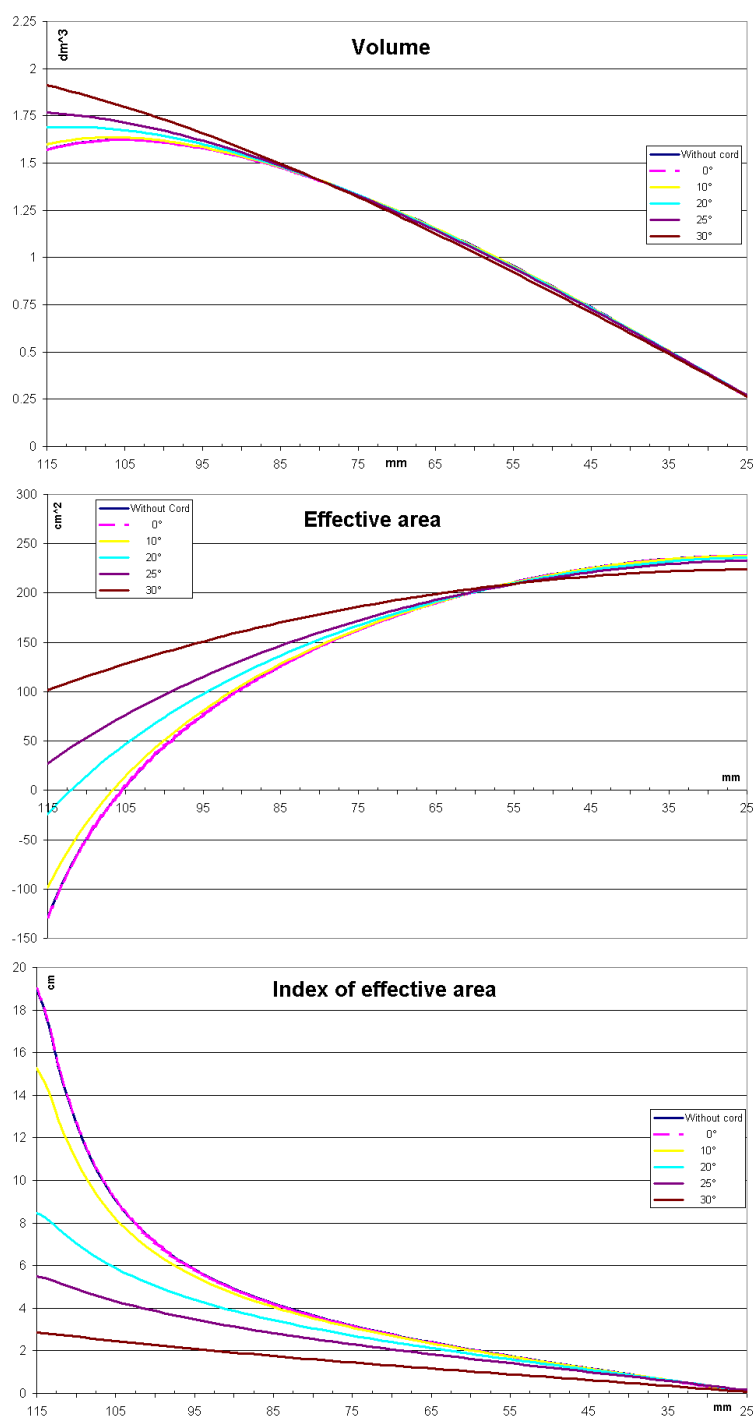
WSEAS International Conference on Simulation, Modelling and Optimization (SMO'06), pp. 305–309, Lisabon, Portugalsko, 2006

- [125] FRYDRYCH D., RÁLEK P.: *The Solution of Coupled Heat and Moisture Diffusion with Sorption for Textiles*, Proceedings of Algoritmy 2005, pp. 53–64, Podbanske, Slovenská republika, 2005, ISBN 80-227-2192-1
- [126] RŮŽIČKOVÁ D., FRYDRYCH D., RÁLEK P.: *A Heat and Moisture Diffusion Transfer Through Textiles - modelling vs. measurement*, Proceedings of ECMS'2005 (Electronics, Control, Measurement and Signals), Toulouse, Francie, 2005
- [127] FRYDRYCH D., RÁLEK P.: *The Solution of Coupled Heat and Moisture Diffusion with Sorption for Fabrics by the FEM*, Proceedings of STRUTEX 2004 11th International Conference, ISBN 80-7083-891-4 Liberec, 2004
- [128] FRYDRYCH D., RÁLEK P.: *A Numerical Model of Heat and Moisture Transfer with Sorption in Porous Clothing Assemblies*, Proceedings of SiMoNA'2003 (Simulation, Modelling and Numerical Analyses), Liberec, 2003, ISBN 80-7083-774-8
- [129] FRYDRYCH D., RÁLEK P.: *A numerical model for solution of coupled heat and moisture diffusion transfer with sorption through porous fabric*, Proceedings of ECMS'2003 (Electronics, Control, Measurement and Signals), Liberec, 2003, ISBN 80-7083-708-X

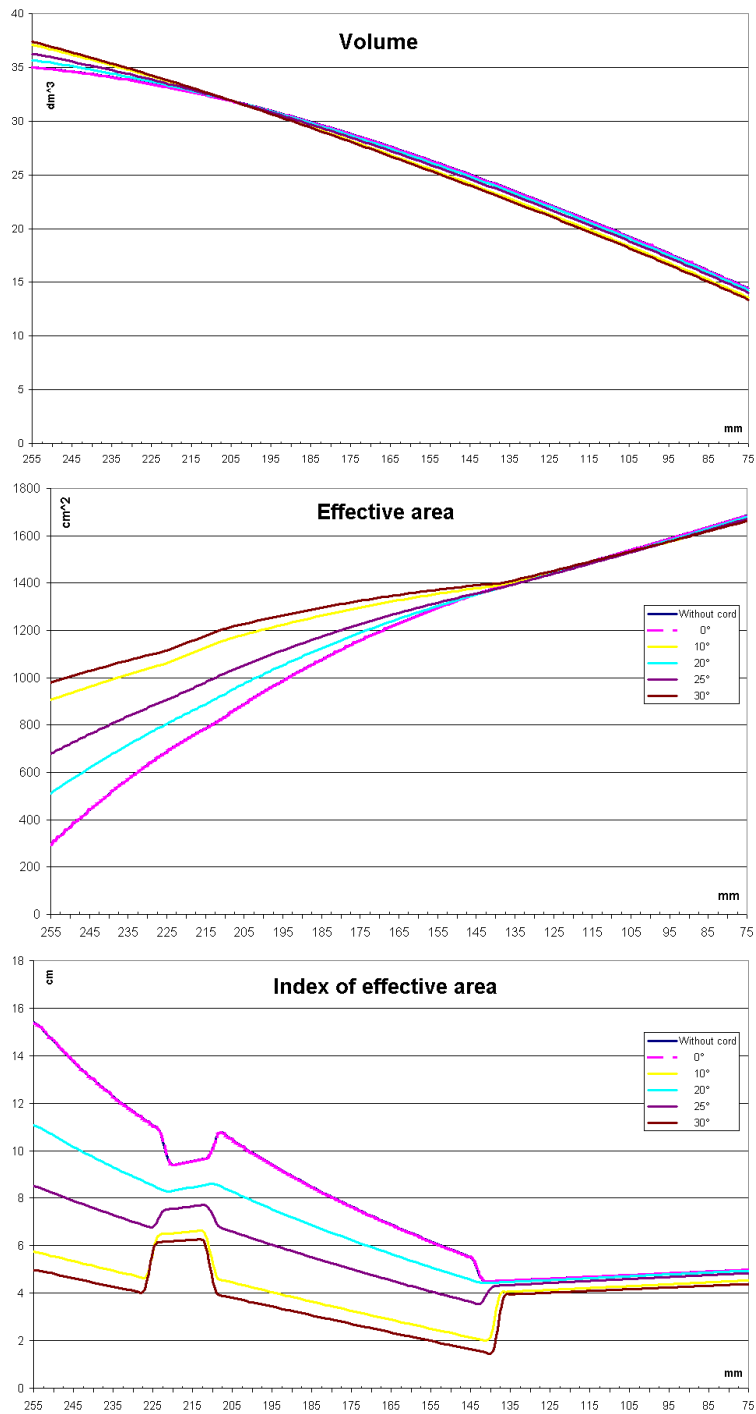
Příloha A

Obrazové přílohy

A.1 Modely vlnovcových pneumatických pružin

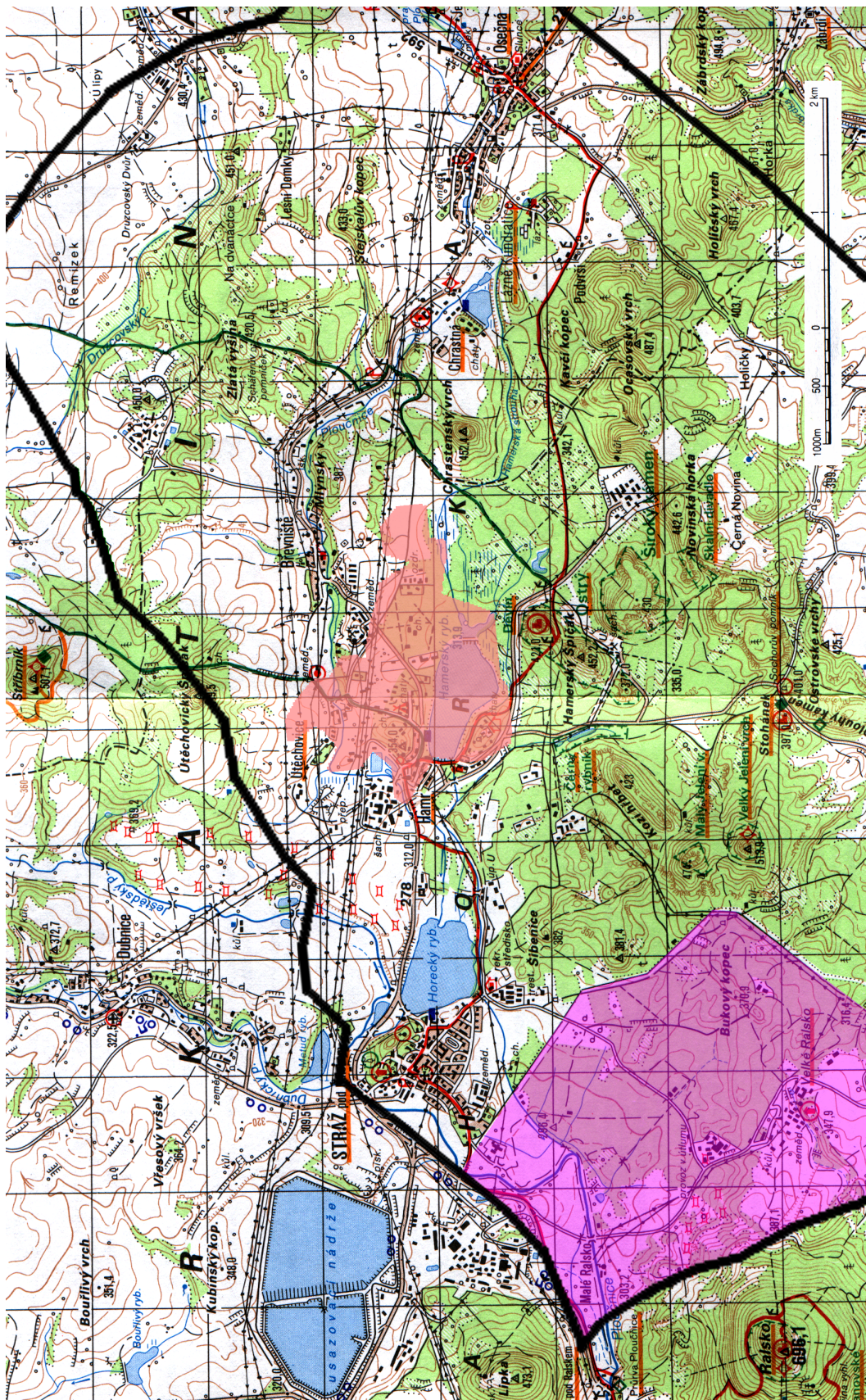


Obrázek A.1: Statická charakteristika vlnovcové pneumatické pružiny VJ 80-07; výchozí průměr kordové konfekce $D_{cord} = 100mm$; výchozí úhel sklonu kordové konfekce $\beta = 0^\circ, 10^\circ, 20^\circ, 25^\circ, 30^\circ$

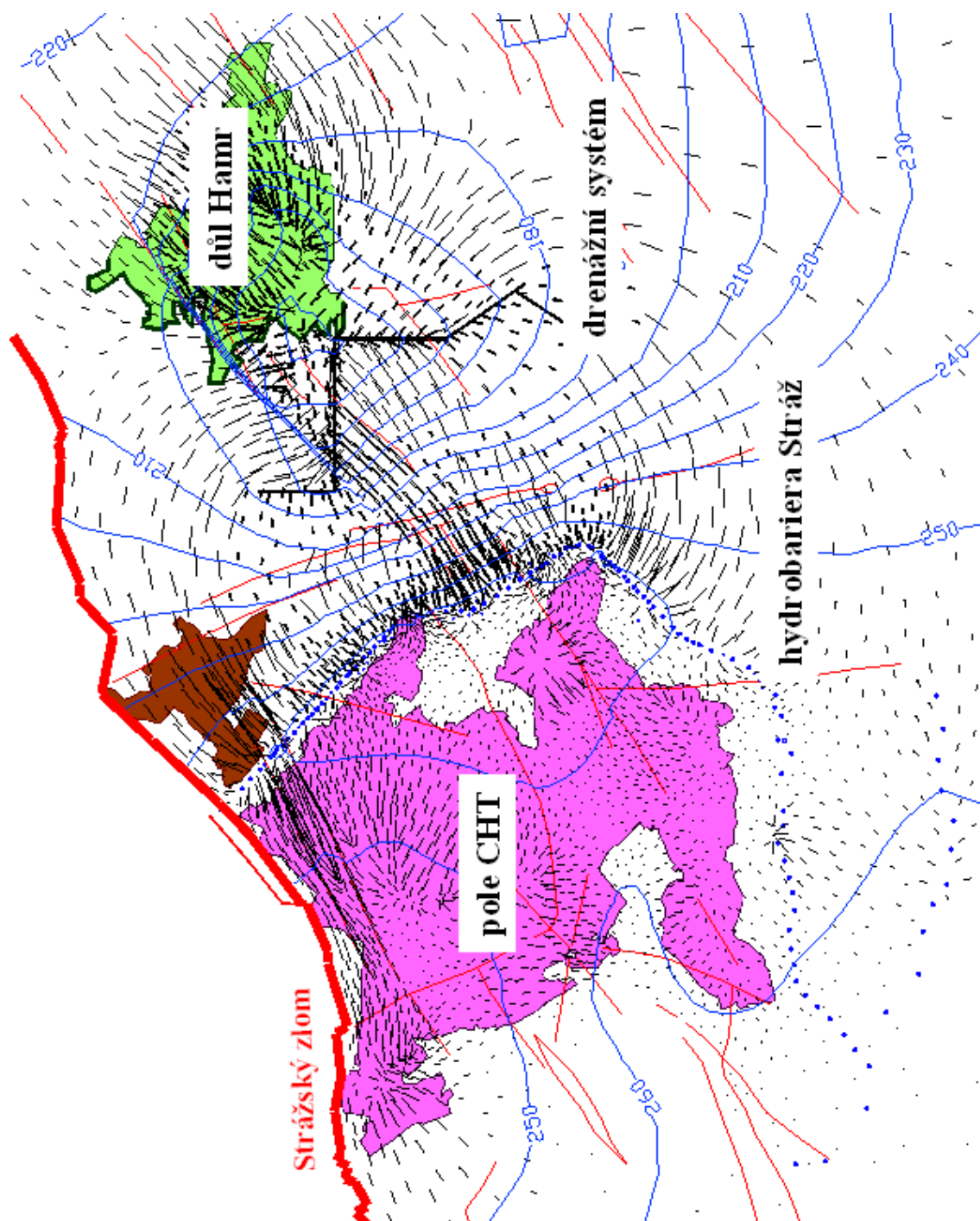


Obrázek A.2: Statická charakteristika vlnovcové pneumatické pružiny VJ 205-50; výchozí průměr kordové konfekce $D_{cord} = 280mm$; výchozí úhel sklonu kordové konfekce $\beta = 0^\circ, 10^\circ, 20^\circ, 25^\circ, 30^\circ$

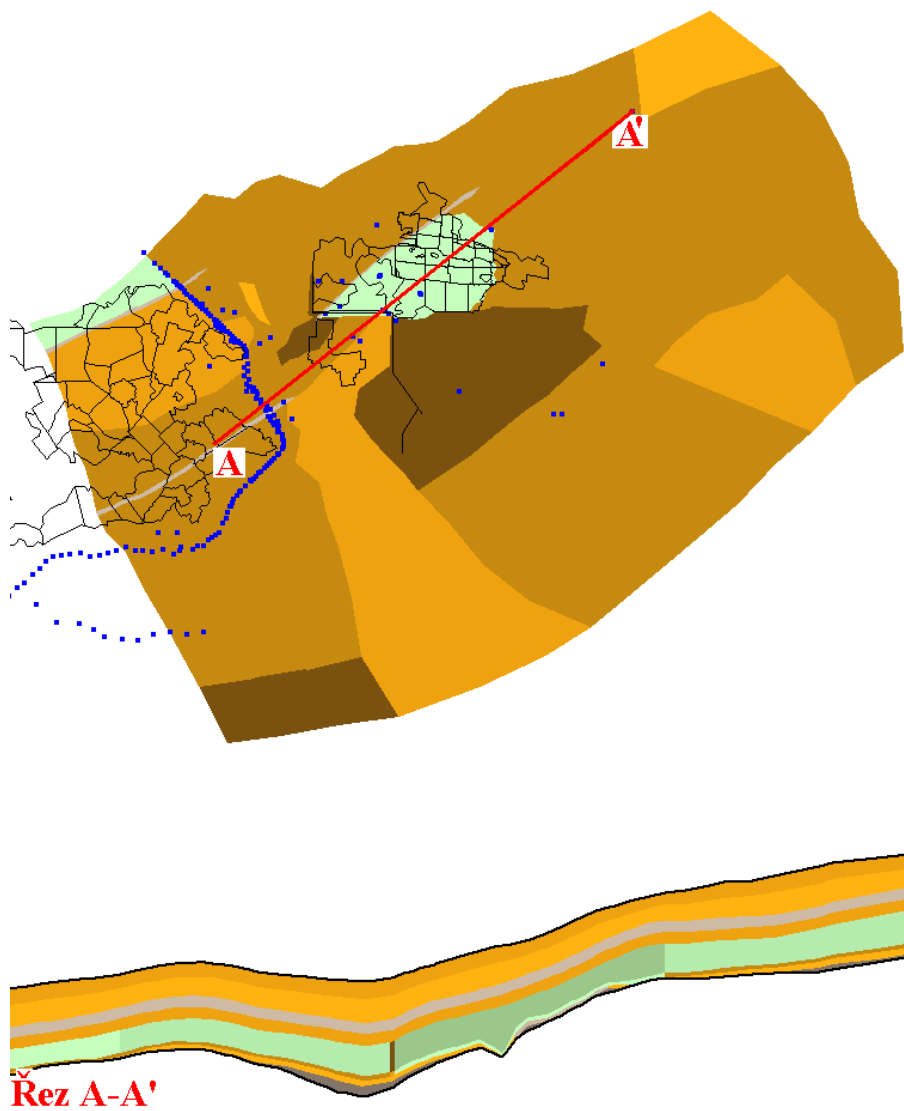
A.2 Model filtračního proudění podzemní vody a transportu rozpuštěných látek



Obrázek A.3: Mapa zájmové oblasti úlohy zatopení dolu Hamr I s naznačeným obrysem modelové sítě a vyznačenými oblastmi DCHT (fialová barva) a dolového pole HDHI (oranžová barva)

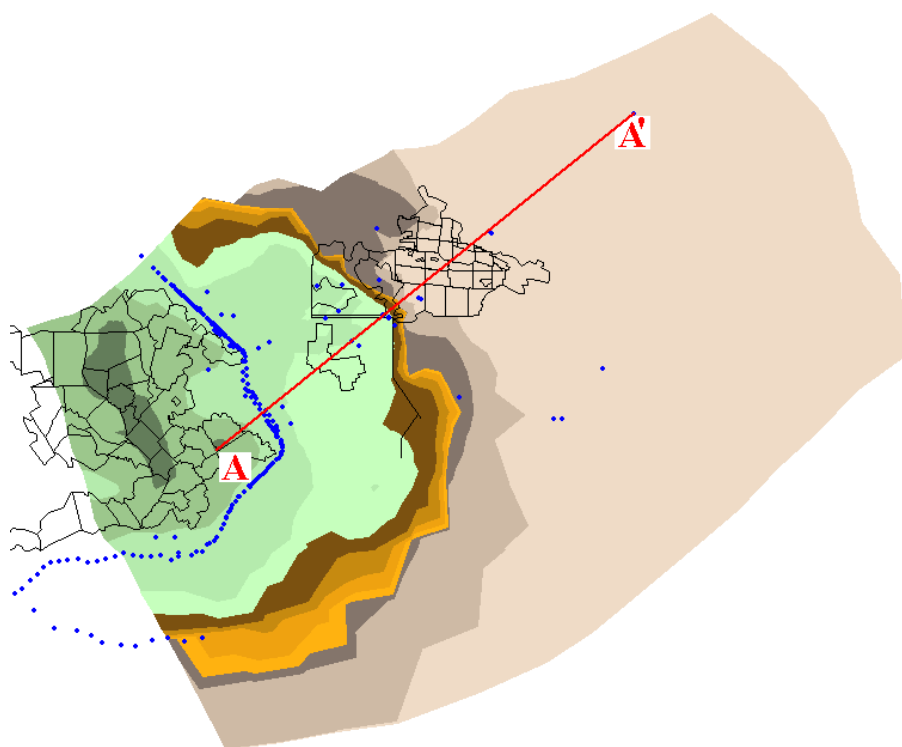


Obrázek A.4: Hydrologická situace v čase $t = 0$ v zájmové oblasti úlohy zatopení dolu Hamr I

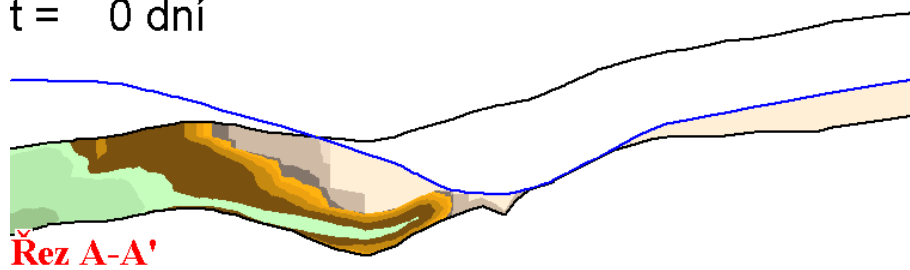


Legenda	Hodnoty hydraulické vodivosti K_x [m den ¹]	
Převýšení řezu 10x	< 0,01	1 - 2
hladina podzemní vody	0,01 - 0,05	2 - 3
hranice modelu	0,05 - 0,1	3 - 5
	0,1 - 0,5	5 - 10
	0,5 - 1	10 <

Obrázek A.5: Hodnoty hydraulické vodivosti K_x v úloze zatopení dolu Hamr I



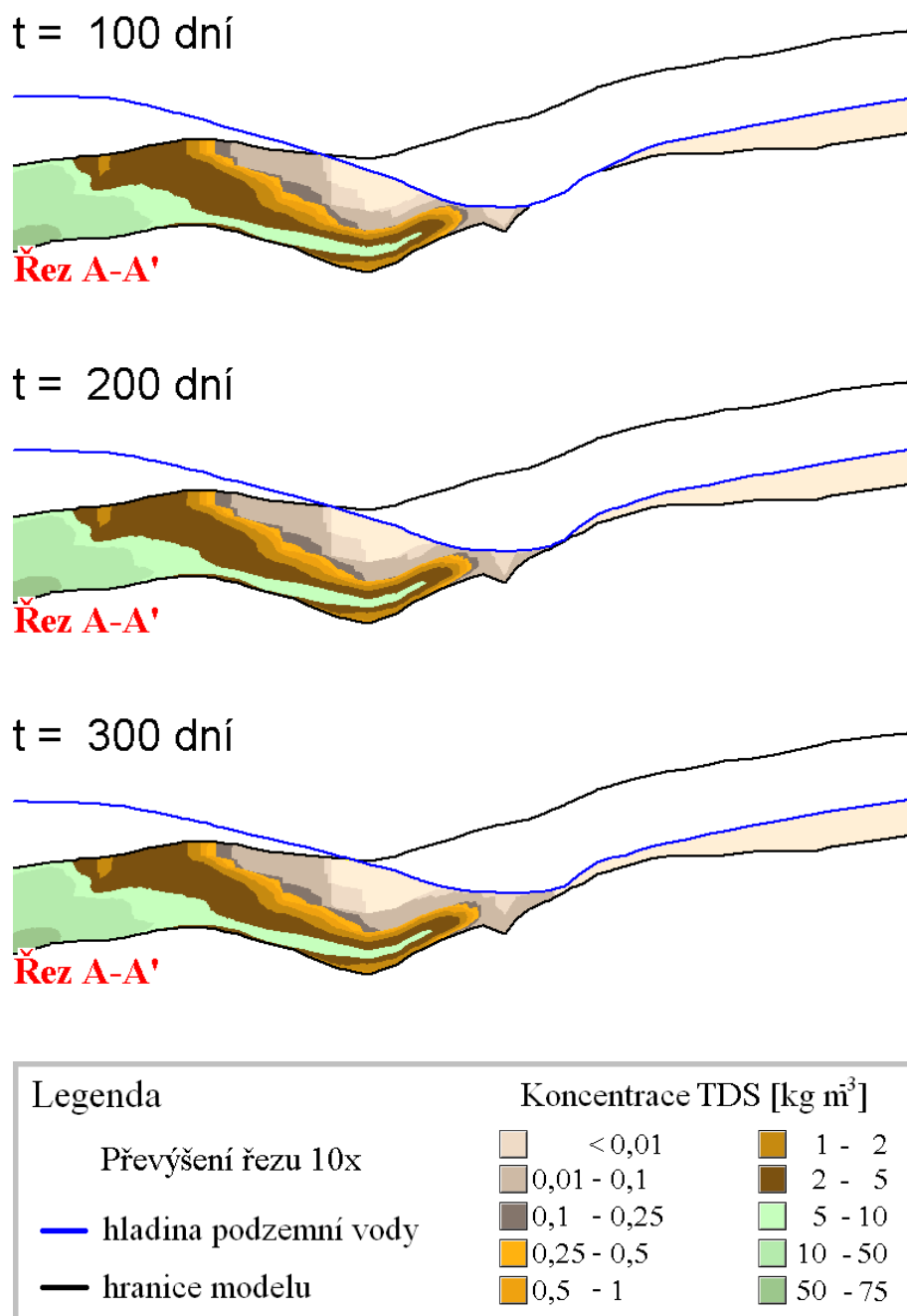
t = 0 dní



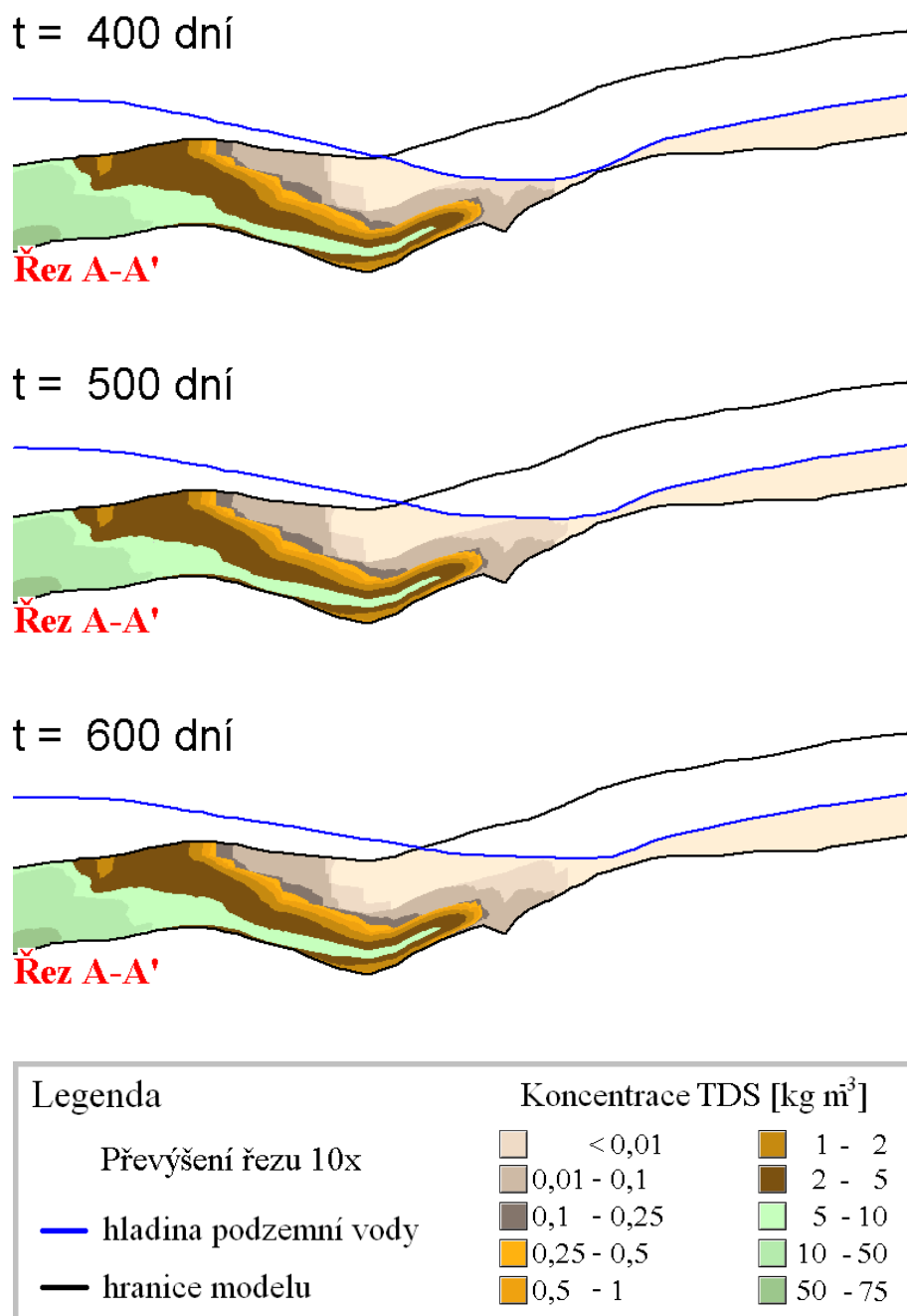
Řez A-A'

Legenda	Koncentrace TDS [kg m^3]	
Převýšení řezu 10x	< 0,01	1 - 2
hladina podzemní vody	0,01 - 0,1	2 - 5
hranice modelu	0,1 - 0,25	5 - 10
	0,25 - 0,5	10 - 50
	0,5 - 1	50 - 75

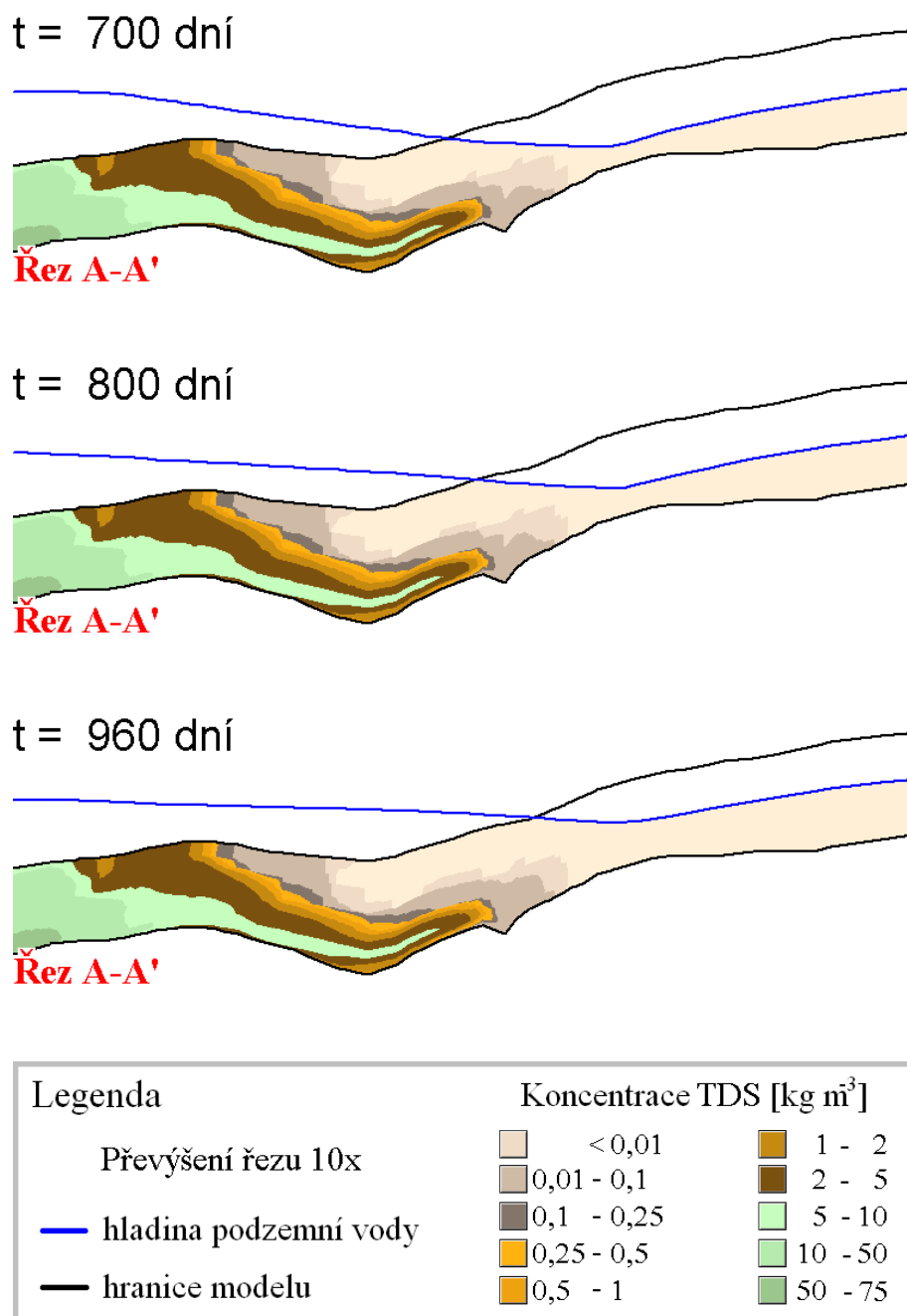
Obrázek A.6: Počáteční rozložení koncentrace TDS v úloze zatopení dolu Hamr I



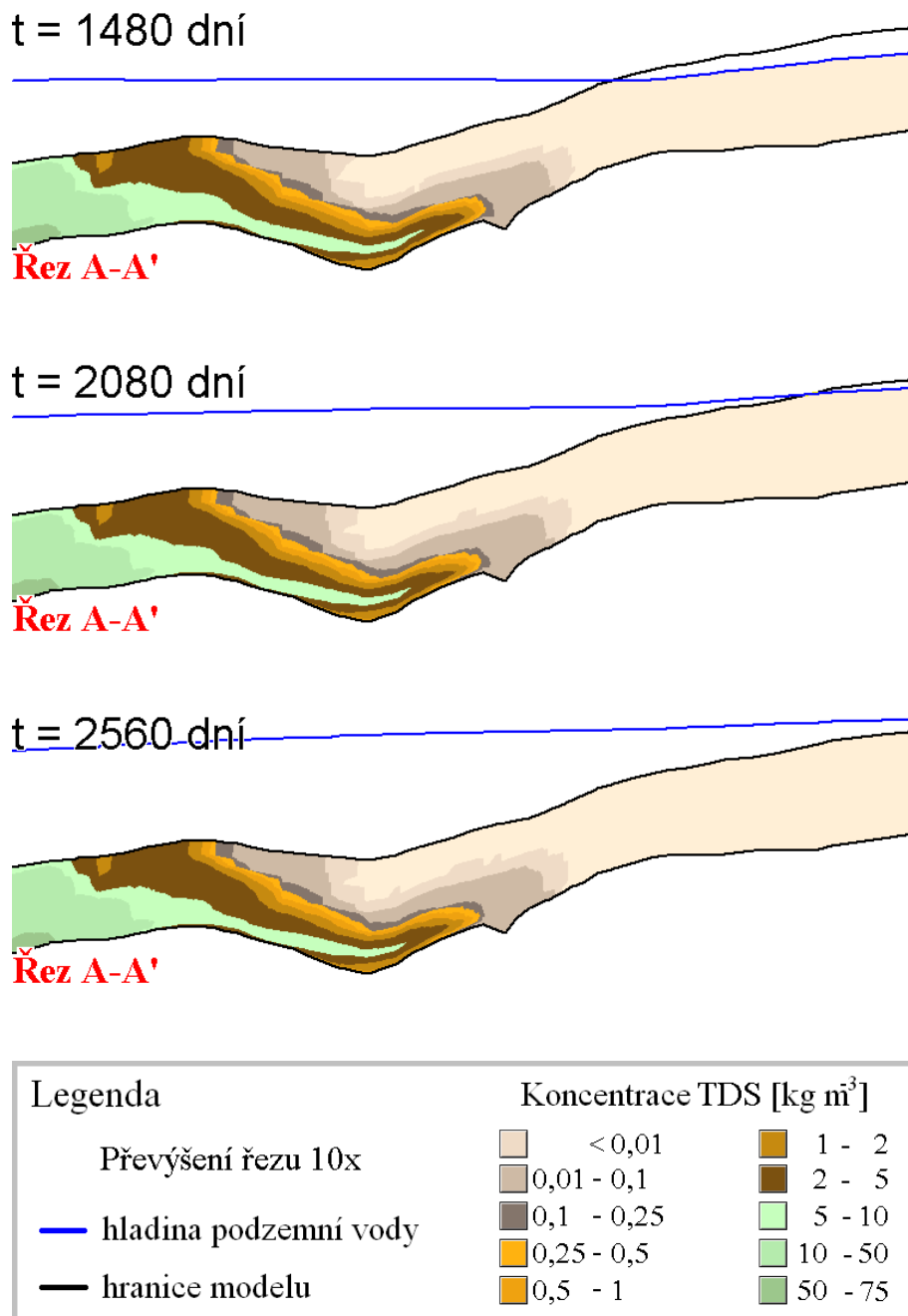
Obrázek A.7: Časový vývoj koncentrace TDS a poloha hladiny podzemní vody v úloze zatopení dolu Hamr I (časy $t = 100, 200, 300$ dní)



Obrázek A.8: Časový vývoj koncentrace TDS a poloha hladiny podzemní vody v úloze zatopení dolu Hamr I (časy $t = 400, 500, 600$ dní)

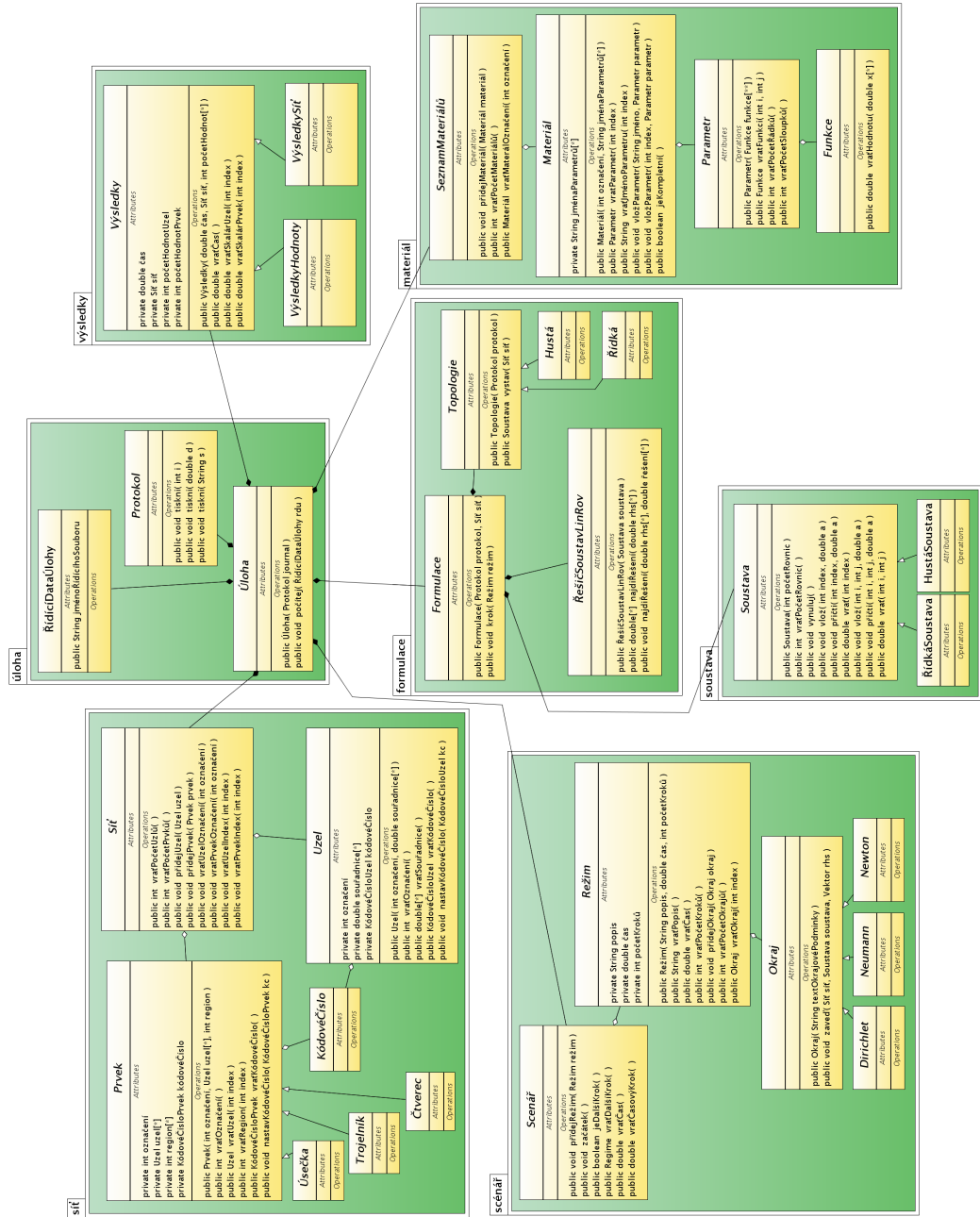


Obrázek A.9: Časový vývoj koncentrace TDS a poloha hladiny podzemní vody v úloze zatopení dolu Hamr I (časy $t = 700, 800, 960$ dní)

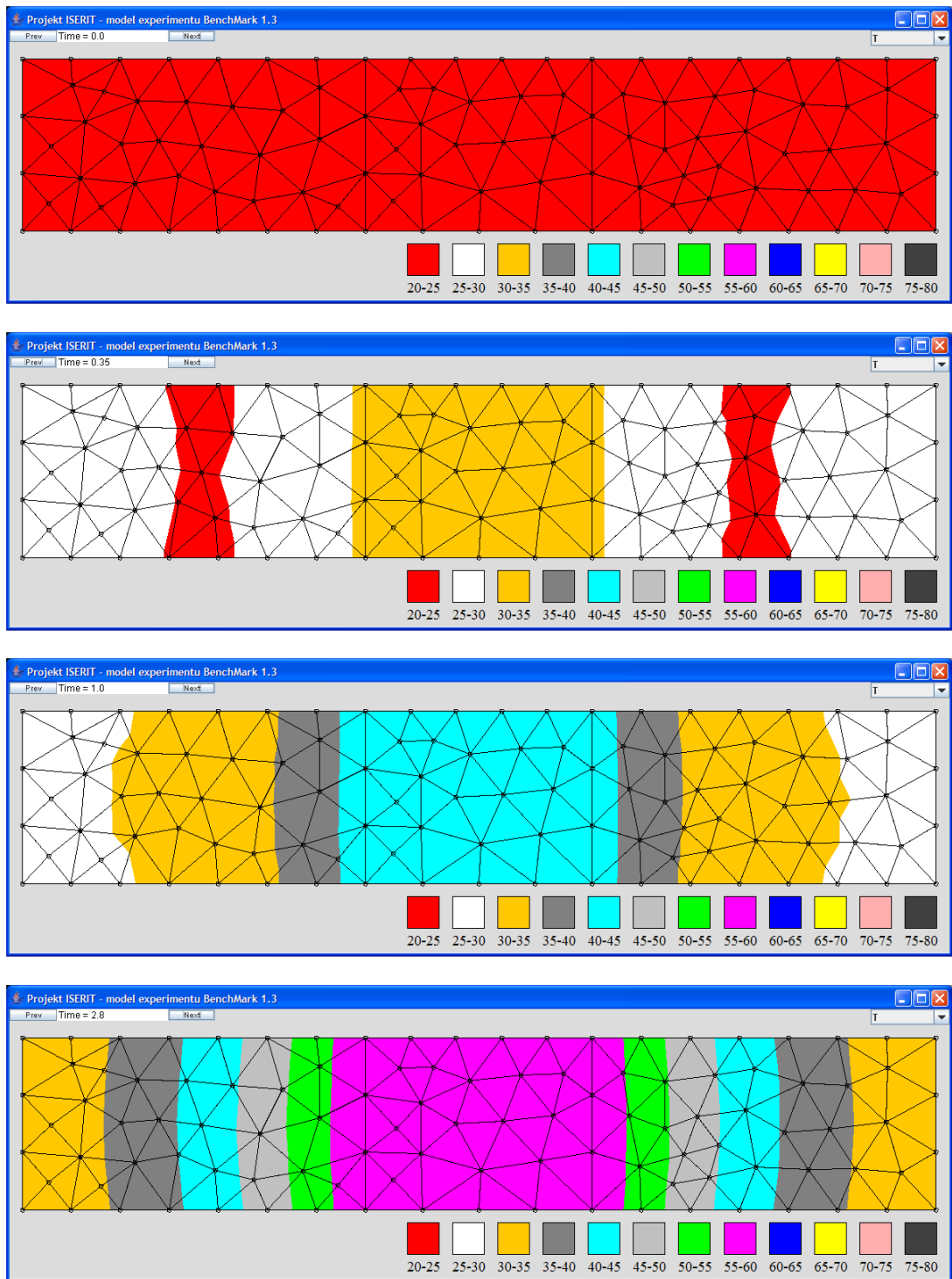


Obrázek A.10: Časový vývoj koncentrace TDS a poloha hladiny podzemní vody v úloze zatopení dolu Hamr I (časy $t = 1480, 2080, 2560$ dní)

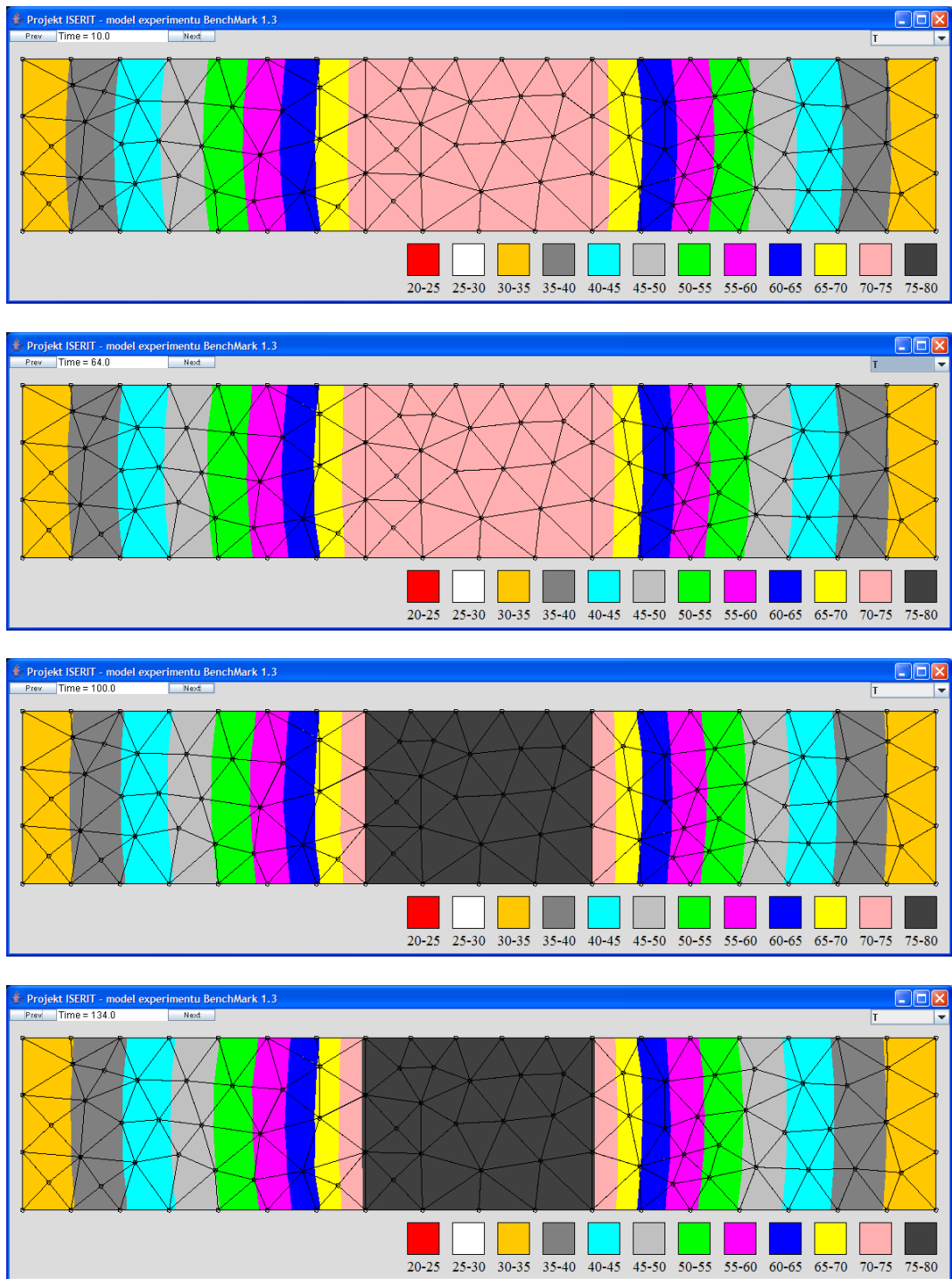
A.3 Model procesů v bentonitu



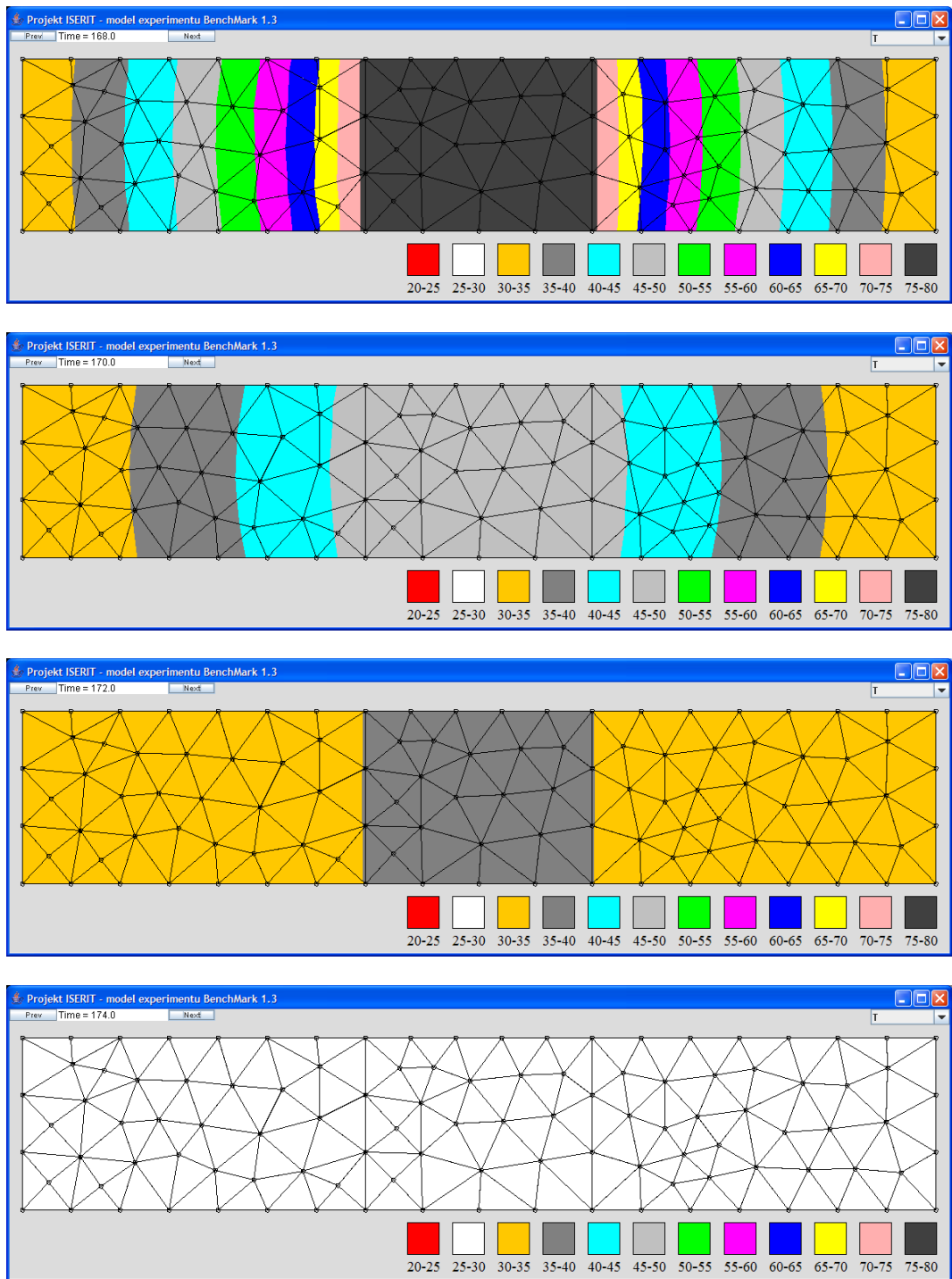
Obrázek A.11: Diagram tříd Metodiky DF^2EM



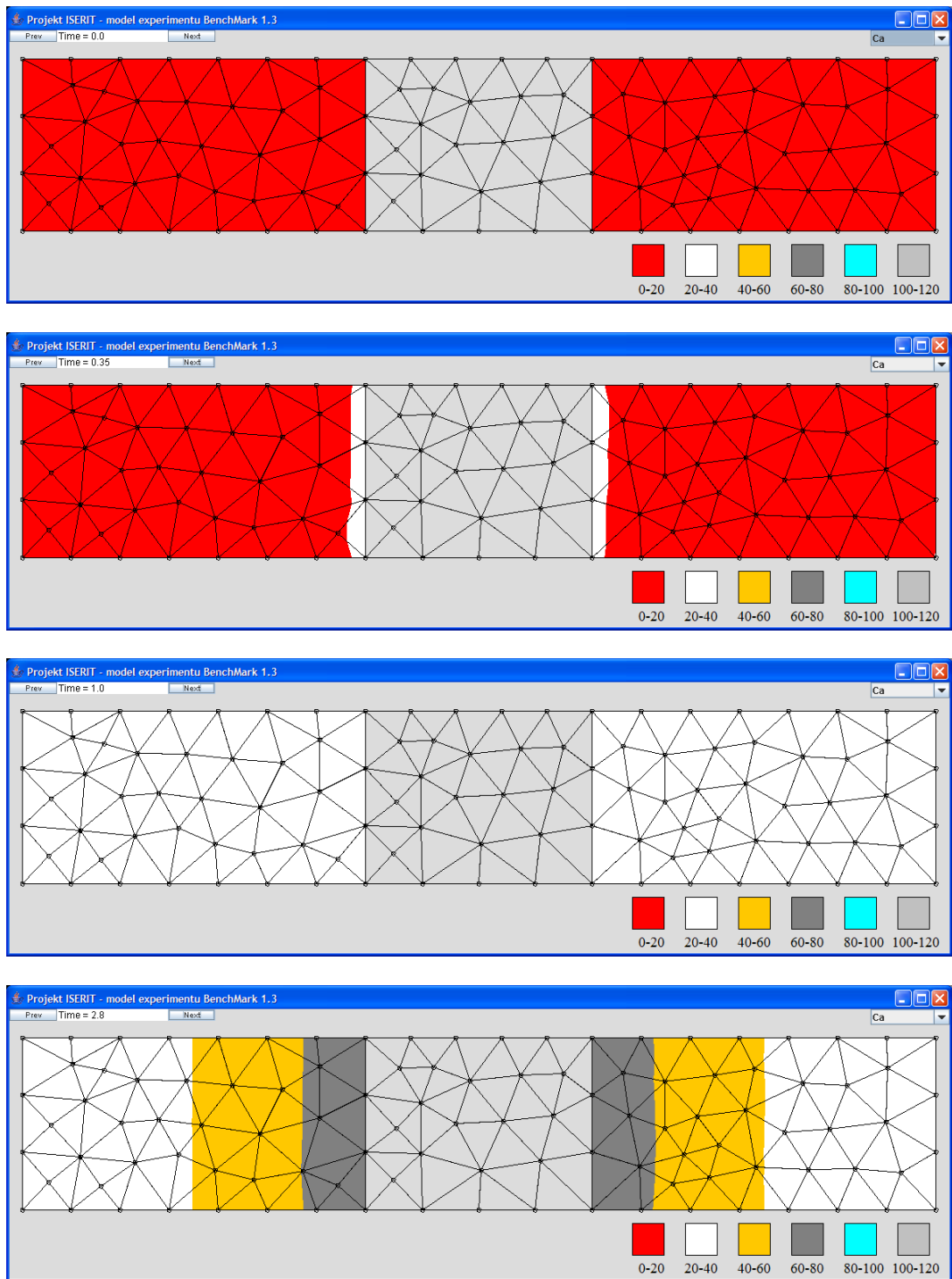
Obrázek A.12: Časový vývoj teploty T [°C] v modelové úloze experimentu *BenchMark 1.3* (časy $t = 0, 0.35, 1, 2.8$ hodin)



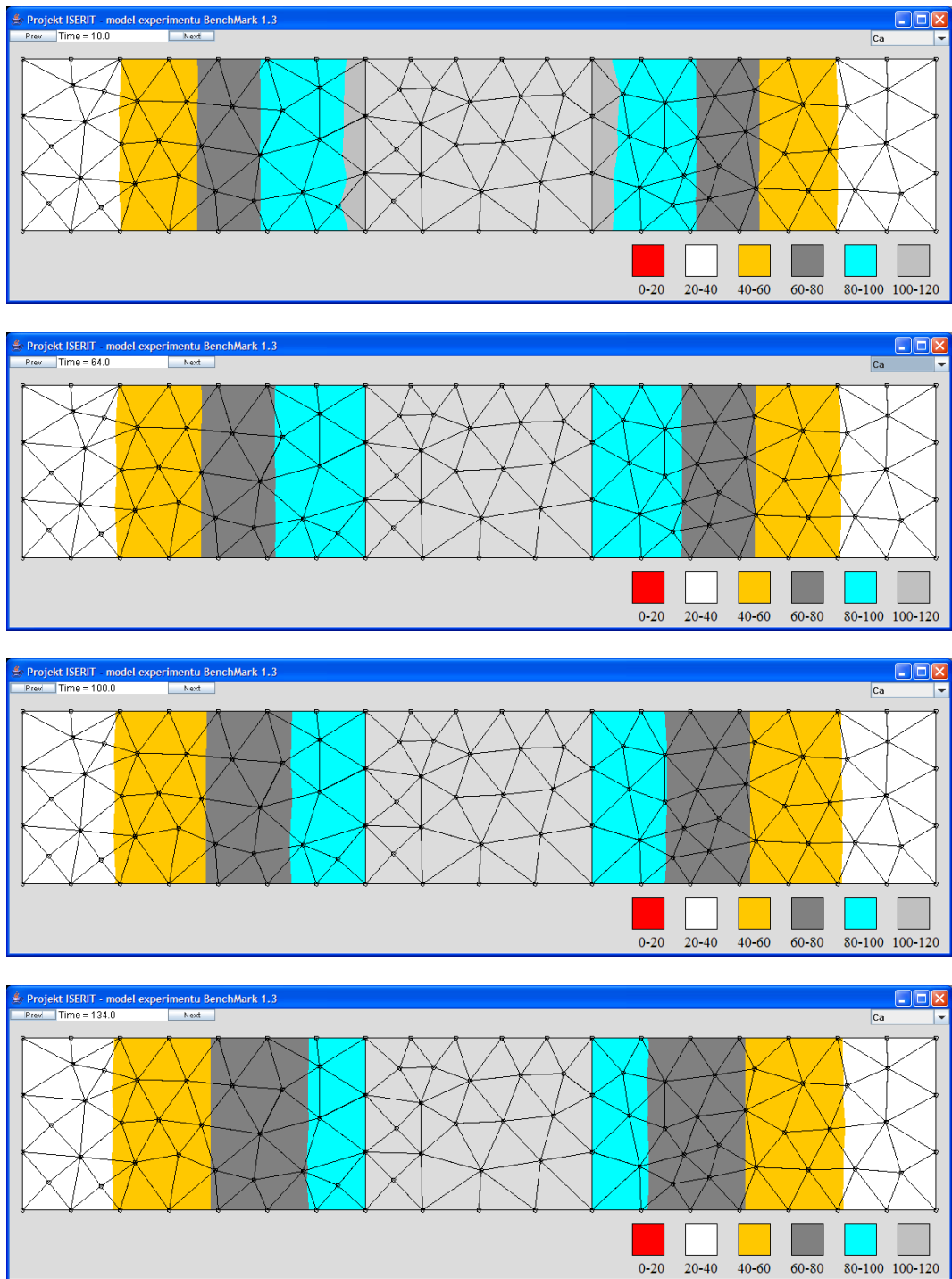
Obrázek A.13: Časový vývoj teploty T [°C] v modelové úloze experimentu *BenchMark 1.3* (časy $t = 10, 64, 100, 134$ hodin)



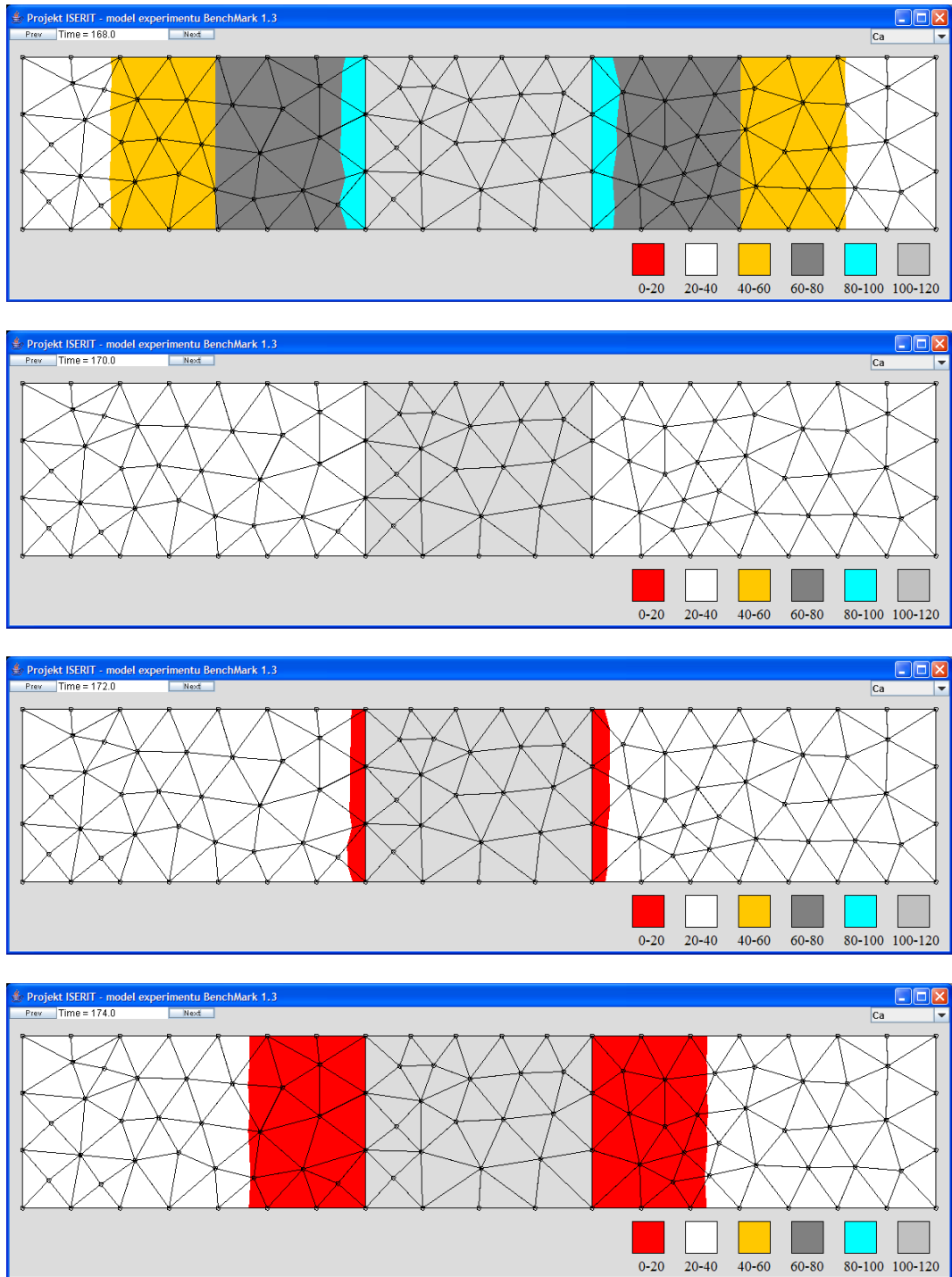
Obrázek A.14: Časový vývoj teploty T [°C] v modelové úloze experimentu *BenchMark 1.3* (časy $t = 168, 170, 172, 174$ hodin)



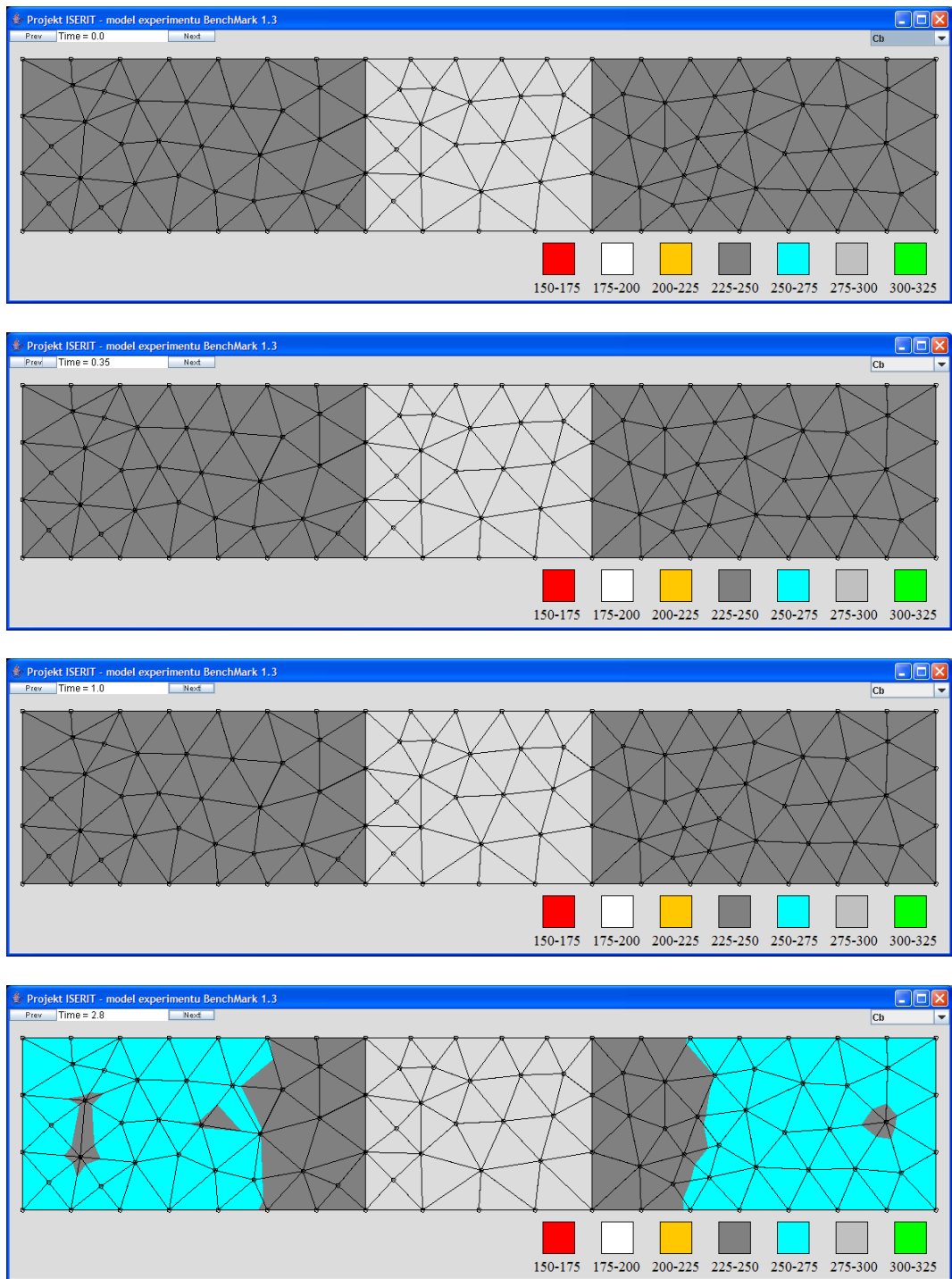
Obrázek A.15: Časový vývoj vlhkosti ve vzduchu C_a [g m^{-3}] v modelové úloze experimentu *BenchMark 1.3* (časy $t = 0, 0.35, 1, 2.8$ hodin)



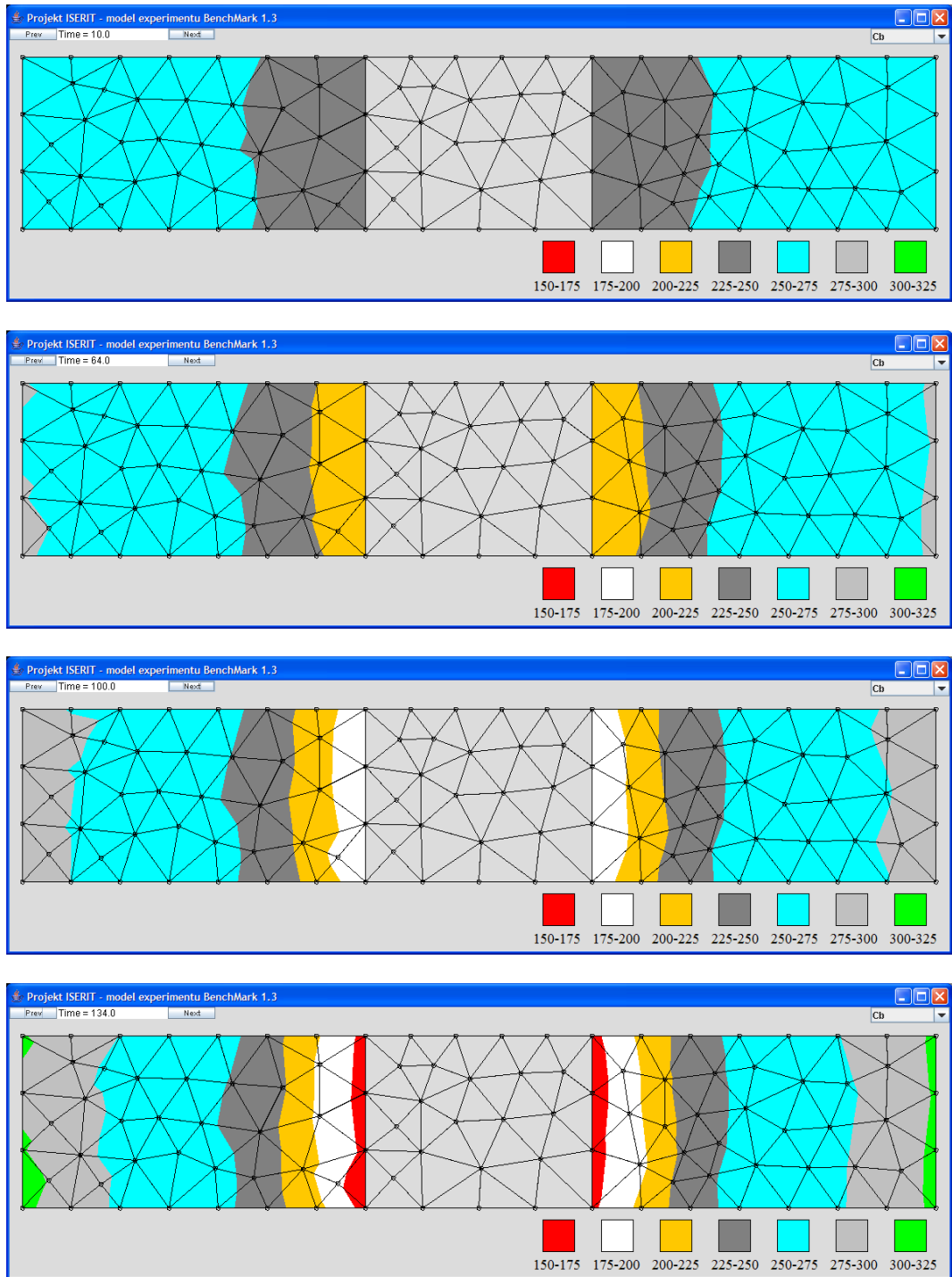
Obrázek A.16: Časový vývoj vlhkosti ve vzduchu C_a [g m^{-3}] v modelové úloze experimentu *BenchMark 1.3* (časy $t = 10, 64, 100, 134$ hodin)



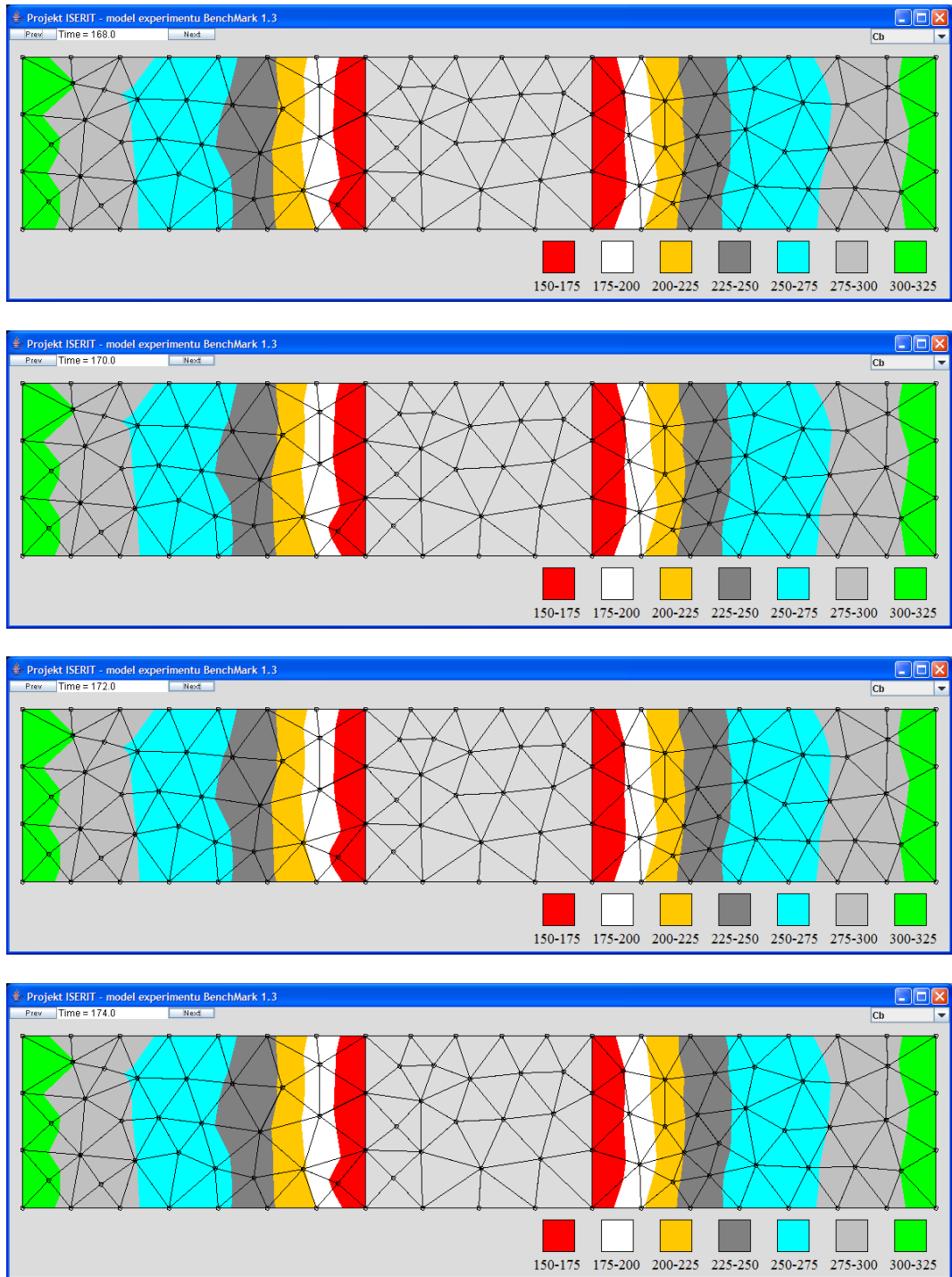
Obrázek A.17: Časový vývoj vlhkosti ve vzduchu C_a [g m^{-3}] v modelové úloze experimentu *BenchMark 1.3* (časy $t = 168, 170, 172, 174$ hodin)



Obrázek A.18: Časový vývoj vlhkosti v bentonitu C_b [kg m^{-3}] v modelové úloze experimentu *BenchMark 1.3* (časy $t = 0, 0.35, 1, 2.8$ hodin)



Obrázek A.19: Časový vývoj vlhkosti v bentonitu C_b [kg m^{-3}] v modelové úloze experimentu *BenchMark 1.3* (čase $t = 10, 64, 100, 134$ hodin)



Obrázek A.20: Časový vývoj vlhkosti v bentonitu C_b [kg m^{-3}] v modelové úloze experimentu *BenchMark 1.3* (čase $t = 168, 170, 172, 174$ hodin)

Příloha B

Řídící soubor Projektu *ISERIT*

Veškerá vstupní nastavení Projektu *ISERIT* jsou uložena v textovém souboru formátu *XML*. Přípona souboru byla zvolena tak, aby nekolidovala s jinými příponami, používanými nejrozšířenějšími programy. Byla zvolena přípona **.tskb**.

Soubor se dělí na logické celky - sekce. Jednotlivé sekce jsou uvozeny formátovacími značkami, se zažitým označením **tag**. Většina dnešních programovacích jazyků již obsahuje knihovny pro práci se soubory ve formátu *XML*. Pro snadnou vizuální kontrolu, dokumentaci, zálohování v tištěné formě, případně prezentaci vstupních dat uložených v souboru, je možné využít zobrazení souborů typu *XML*. K tomu lze využít širokou škálu programů. Mezi nejrozšířenější programy patří většina prohlížečů webovských stránek, např. Internet Explorer, Netscape, FireFox, Opera a další.

Struktura souboru **.tskb** je následující.

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<?xml-stylesheet href="task.css" type="text/css"?>
```

Prvních dva řádky jsou vyhrazeny pro hlavičku. První řádek hlavičky udává verzi souboru *XML* a použité kódování. Druhý řádek pak specifikuje umístění a typ formátovacího souboru, pro prohlížeč použitý k prezentování uložených dat.

Za hlavičkou může již být na libovolném místě umístěn komentářový řádek.

```
<!-- - - - - - Komentář - - - - - -->
```

Komentářový řádek je v dalším zpracování ignorován, model i prohlížeče ho ignorují. Slouží k popisu a případně zprehlednění při přímé práci uživatele se souborem. Například v textovém editoru. Počet komentářových řádků není omezen.

B.1 Sekce *Úloha*

Na nejvyšší úrovni se nachází tag *Task* (Úloha).

```
<Task version="1.0">
  <Title>BenchMark 1.3</Title>
  <SubTitle>Specification of Benchmark THM 1.3</SubTitle>
  <Description>Heating test with ... </Description>
  ...
</Task>
```

Title zde je uložen titulek, který je vypisován do hlavičky protokolu o běhu programu. Atribut *version* definuje verzi řídicího souboru **.tskb**.

SubTitle zde je uložen pomocný titulek, který je využíván při zobrazení vstupního souboru ve webovém prohlížeči.

Description zde je uložen popis řešené úlohy. Je opět využíván při zobrazení vstupního souboru ve webovém prohlížeči.

B.2 Sekce *Síť*

Pro diskretizaci řešené oblasti lze použít širokou škálu nástrojů, např. [15], [59], [61]. Pro akademické použití je pravděpodobně nejvhodnější systém **GMSH** [24]. Umožňuje parametrické zadání tvaru řešené oblasti, je schopen generovat prvky mnoha typů a pracovat s oblastmi různých dimenzí (1D, 2D a 3D).

```
<Mesh>
  <Title>Mesh</Title>
  <FileName>BM1.3.msh</FileName>
</Mesh>
```

Title je pomocná položka a slouží pro zobrazení ve webovém prohlížeči.

FileName definuje jméno souboru sítě.

B.3 Sekce *Scénář*

Při řešení úloh neustálených dějů, popisuje působící okrajové podmínky výpočetní scénář. Výpočetní scénář je tvořen seznamem jednotlivých režimů. Režimem je myšlen stav, kdy na řešené oblasti působí během určitého časového intervalu stejné okrajové podmínky. Tento interval lze rozdělit do několika výpočetních kroků.

Úlohy ustálených dějů jsou podmnožinou úloh neustálených dějů. Výpočetní scénář je pro tento typ úloh tvořen pouze jediným režimem. Pro jednoznačnou identifikaci, že má být řešena úloha ustáleného děje je režim rozdělen na nula výpočetních kroků. Čas režimu je také zadán jako nulový.

Sekce definující výpočetní scénář má následující strukturu:

```
<Scenario>
  <Title>Scenario</Title>
  <FileName>BM1.3.scn</FileName>
  <RegimeList>
    <Regime>
      <Title>Steady Init regime</Title>
      <FileName>BM1.3_0.rgm</FileName>
      <Time>0.0</Time>
      <NumSteps>0</NumSteps>
      <BoundaryList>
        ...
      </BoundaryList>
    </Regime>
    ...
  </RegimeList>
</Scenario>
```

Scenario specifikuje sekci, která definuje výpočetní scénář.

Scenario-Title je pomocná položka a slouží pro zobrazení ve webovém prohlížeči.

Scenario-FileName udává jméno souboru s výpočetním scénářem. Pokud je toto jméno zadáno, čte se výpočetní scénář z příslušného souboru. Zbytek této sekce (*Scenario*) je ignorován.

Tímto vydělením lze snadno realizovat „variantní“ výpočty. Na jedné síti s neměnnými materiálovými parametry je řešeno více výpočetních scénářů. Například pro stanovení kritického scénáře, vývoje, který bude maximalizovat, příp. minimalizovat sledované výstupní veličiny.

Regime-Title textový popis daného režimu. Nemá vliv na chování modelu. Slouží pouze k dokumentačním účelům. Používá se například při kontrolním výpisu výpočetního scénáře.

Regime-FileName udává jméno souboru s režimem okrajových podmínek. Pokud je toto jméno zadáno, čte se režim okrajových podmínek z příslušného souboru. Zbytek této sekce (*Regime*) je ignorován.

Time definuje časový interval trvání daného režimu.

NumSteps definuje počet výpočetních kroků daného režimu.

BoundaryList specifikuje sekci - seznam okrajových podmínek.

... zde jsou umístěny sekce definující příslušné okrajové podmínky, viz dále.

B.4 Sekce *Seznam okrajových podmínek*

```
<Boundary>
  <Class>cz.tul.iserit.scenario.boundary.LineDirichletT</Class>
  <Value>0.202 0.0    0.202 0.038    22.0</Value>
</Boundary>
<Boundary>
  <Class>cz.tul.iserit.scenario.boundary.AreaNeumannT</Class>
  <Value>0.076 0.0    0.126 0.038    2.17</Value>
</Boundary>
```

Boundary specifikuje sekci, která definuje jednu okrajovou podmínku.

Class specifikuje typ okrajové podmínky. Typ jednotlivých okrajových podmínek začíná specifikací balíčku, ve kterém je uložena třída, realizující danou okrajovou podmínku. To umožňuje kompaktní označování typů okrajových podmínek, při zachování velmi vysoké obecnosti a otevřenosti. Otevřeností je míněna možnost, kdy je do modelu možné vkládat vlastní třídy, v tomto případě třídy realizující požadovaný speciální typ okrajové podmínky. Standardní umístění okrajových podmínek pro tento model je v balíčku *cz.tul.iserit.scenario.boundary*. Název vlastní okrajové podmínky je shodný s běžně užívanou terminologií (Dirichlet, Neumann, Newton). Název je doplněn o označení veličiny, kterou daná okrajová podmínka definuje (T, Ca). Pro složitější okrajové podmínky (podmínky zadávané na linii nebo ploše) je tato specifikace uvedena před názvem okrajové podmínky (Line, Area).

Nejjednodušší je zadání okrajové podmínky do konkrétního uzlu. Tag **Value** má následující strukturu:

Označení_uzlu Požadovaná_hodnota [Koeficient_sigma]

Koeficient *Koeficient_sigma* je zadán v pro Newtonovu okrajovou podmínku. Jedná se o následující okrajové podmínky.

- *cz.tul.iserit.scenario.boundary.DirichletT*
- *cz.tul.iserit.scenario.boundary.DirichletCa*
- *cz.tul.iserit.scenario.boundary.NeumannT*
- *cz.tul.iserit.scenario.boundary.NeumannCa*
- *cz.tul.iserit.scenario.boundary.NewtonT*
- *cz.tul.iserit.scenario.boundary.NewtonCa*

Vyšší komfort při práci s okrajovými podmínkami poskytuje možnost zadání okrajové podmínky na zadané úsečce. Tag **Value** má následující strukturu:

X_0 Y_0 X_1 Y_1 Požadovaná_hodnota [Koeficient_sigma]

X_0 a Y_0 jsou souřadnice výchozího bodu a X_1 a Y_1 jsou souřadnice koncového bodu. Koeficient *Koeficient_sigma* je zadán v pro Newtonovu okrajovou podmínku. Jedná se o následující okrajové podmínky.

- `cz.tul.iserit.scenario.boundary.LineDirichletT`
- `cz.tul.iserit.scenario.boundary.LineDirichletCa`
- `cz.tul.iserit.scenario.boundary.LineNewtonT`
- `cz.tul.iserit.scenario.boundary.LineNewtonCa`

Jako zatím nejsložitější byla implementována okrajová podmínka představující tepelný výkon dodávaný na danou oblast. Model rozpočte požadovaný výkon do uzlů, ležících v dané oblasti podle velikosti okolí daných uzlů. Tím je zajištěno, že se celkový dodávaný výkon rovnoměrně rozloží po celé ploše oblasti. Tag **Value** má následující strukturu:

```
X_0  Y_0  X_1  Y_1  Požadovaná_hodnota
```

X_0 a Y_0 jsou souřadnice levého dolního a X_1 a Y_1 jsou souřadnice pravého horního rohu obdélníkové oblasti, na které je zadán dodávaný výkon. Prozatím se jedná pouze o jedinou okrajovou podmínku.

- `cz.tul.iserit.scenario.boundary.AreaNeumannT`

Okrajových podmínek lze samozřejmě možné definovat mnohem více, ale implementace probíhá postupně a okrajové podmínky jsou průběžně doplňovány podle potřeby.

B.5 Sekce *Material*

Teoreticky je možné definovat odlišné materiálové vlastnosti pro každý prvek sítě. Při řešení reálných úloh buď nelze a nebo nemá takto detailní přístup smysl. V prvním případě chybí dostatečně detailní a přesné informace o materiálových vlastnostech řešené oblasti (typicky hydrologické modely z kapitoly 2). Druhý případ představují například úlohy pevnostních výpočtů ocelových konstrukcí, kdy jsou materiálové vlastnosti pro celou řešenou oblast stejné a dobře známé.

Sekce definující materiálové vlastnosti má následující strukturu:

```
<MaterialManager>
<Title>Material Manager Section</Title>
<FileName>BM1.3.mtr</FileName>
<Material>
<Label>1001</Label>
<Description>Bentonit</Description>
...
</Material>
<Material>
<Label>1002</Label>
<Description>Copper heater</Description>
...
</Material>
...
</MaterialManager>
```

MaterialManager specifikuje sekci s definicemi materiálových vlastností.

Title je pomocná položka a slouží pro zobrazení ve webovém prohlížeči.

FileName udává jméno souboru s materiálovými vlastnostmi. Pokud je toto jméno zadáno, čtou se materiálové vlastnosti z příslušného souboru. Zbytek této sekce, všechny podsekce (*Material*), je ignorován.

Tímto vydělením lze snadno realizovat „variantní“ výpočty. Na jedné síti s neměnným výpočtním scénářem je řešeno více nastavení materiálových parametrů. Například při kalibraci modelu.

Material definuje vlastní materiálová data jednoho typu materiálu.

Label definuje index pro daný materiál. Index materiálu musí být unikátní, zajišťuje jednoznačné přiřazení materiálu k indexu fyzického regionu. Index fyzického regionu je definován pro jednotlivé prvky sítě.

Description je pomocná položka a slouží pro textový popis daného materiálu. Jedná se o dokumentační položku, která nemá na běh programu žádný vliv.

... zde jsou umístěny sekce popisující jednotlivé materiálové parametry.

B.6 Sekce *Materiálové parametry*

Pro každý materiál je možné zadat několik materiálových parametrů.

```
<Parameter type="s">
  <Name>Cv</Name>
  <Unit>[J kg-1 K-1]</Unit>
  <Item>
    <Class>cz.tul.iserit.material.ConstantFunction</Class>
    <Value>2000.0</Value>
  </Item>
</Parameter>
<Parameter type="m" height="2" width="2">
  <Name>lambda</Name>
  <Unit>[W m-1 s-1]</Unit>
  <Item i="0" j="0">
    <Class>cz.tul.iserit.material.ConstantFunction</Class>
    <Value>1.64</Value>
  </Item>
  <Item i="1" j="1">
    <Class>cz.tul.iserit.material.ConstantFunction</Class>
    <Value>1.64</Value>
  </Item>
  <Item i="0" j="1">
    <Class>cz.tul.iserit.material.ConstantFunction</Class>
    <Value>0.0</Value>
  </Item>
  <Item i="1" j="0">
    <Class>cz.tul.iserit.material.ConstantFunction</Class>
    <Value>0.0</Value>
  </Item>
</Parameter>
```



```

</Item>
</Parameter>
<Parameter type="s">
  <Name>VarPhi</Name>
  <Unit>[1]</Unit>
  <Item>
    <Class>cz.tul.iserit.material.parser.MaterialFunction</Class>
    <Value>Cb / 350</Value>
  </Item>
</Parameter>

```

Parameter definuje sekci popisující jeden materiálový parametr.

type atribut definující typ materiálového parametru. Jedná se o zkratku

- s - parametr je skalár.
- v - parametr je vektor.
- m - parametr je matice.

height atribut definující pro typ **m** počet řádků.

width atribut definující pro typy **v** a **m** počet sloupků.

Name jméno parametru materiálu. Model (Projekt *ISERIT*) reaguje na tyto názvy parametrů:

- lambda - součinitel tepelné vodivosti
- Cv - objemová měrná tepelná kapacita
- Chi - latentní teplo sorpce
- epsilon - pórovitost
- Da - difusní koeficient vodních par ve vzduchu
- Tau - efektivní tortuosita
- VarPhi - inverzní sorpční funkce
- Gamma - koeficient rychlosti výměny vody mezi vzduchem a bentonitem
- Rho - hustota
- Thickness - tloušťka

Unit jednotka daného parametru materiálu. V současné době má pouze dokumentační charakter.

Item definuje jednu položku z materiálového parametru.

i atribut definující pro typ **m** index řádku, kde $i \in \langle 0, height - 1 \rangle$.

j atribut definující pro typy **v** a **m** index sloupku, kde $j \in \langle 0, width - 1 \rangle$.

Class třída realizující interpretaci funkce dané položky materiálového parametru. V současné době jsou dostupné dvě třídy pro zadání materiálových funkcí.

cz.tul.iserit.material.ConstantFunction realizuje konstantní funkci. Konstantní parametry jsou zadány konstantou zapsanou ve formě textového řetězce. Textový řetězec v tomto případě musí mít číselný formát. V řetězci je povolen jeden výskyt písmene e (ve většině programovacích jazyků standardně užívaného k definování řádu mocniny deseti), např. $2.5e-3$ představuje $2.5 \cdot 10^{-3}$.

cz.tul.iserit.material.parser.MaterialFunction poskytuje uživateli modelu velký prostor definování materiálových funkcí. Lze do ní zapsat funkci v textovém tvaru, model provede její interpretaci a vypočte její funkční hodnotu pro dané nezávisle proměnné. Ve funkcích používaných v tomto modelu, jsou nezávisle proměnné T , Ca a Cb . Funkce může mít například textový tvar:

$$(1.0/(Ca + 5)) + 2 * EXP(Cb/350) + 3.25e - 3 * T^2$$

což představuje funkci

$$\frac{1}{Ca + 5} + 2 \cdot e^{\frac{Cb}{350}} + 3,25 \cdot 10^{-3} \cdot T^2$$

Value obsahuje textový tvar funkce.

B.7 Sekce *Výstup*

Tato sekce slouží pro řízení speciálních případů dodatečného zpracování (postprocessing) výsledků. Každý jednotlivý případ je řešen jednou třídou. Třída může obsahovat potřebné informace pro dodatečného zpracování výsledků. V případě, že lze postprocessingového zpracování zobecnit, je zvolen obecný mechanismus předání potřebných informací třídě. Třídě je předána reference na příslušnou sekci a třída sama provede čtení požadovaných informací.

```
<ResultsManager>
  <Result>
    <Class>cz.tul.iserit.results.BM13T</Class>
    <Title>Temperature in the measurement points</Title>
    <FileName>BM13-Temperature.txt</FileName>
    ...
  </Result>
</ResultsManager>
```

ResultsManager specifikuje sekci s definicemi vlastních tříd pro postprocessingové zpracování výsledků.

Result definuje jeden typ postprocesingového zpracování výsledků.

Class udává jméno třídy realizující dané postprocesingové zpracování výsledků.

Title je pomocná položka a slouží pro zobrazení ve webovém prohlížeči.

FileName udává jméno výstupního souboru.

... další sekce jsou závislé na konkrétní třídě, která realizuje dané postprocesingové zpracování výsledků.

B.8 Sekce *Různé*

Tato sekce sdružuje jednotlivé parametry bez logické návaznosti na ostatní součásti.

```
<Misc>
  <Batch autorun="yes"/>
  <Frame open="yes" />
</Misc>
```

Batch specifikuje, zda má model pracovat v dávkovém režimu. V případě, že ano, model začne ihned zpracovávat úlohu. V opačném případě bude spuštěno grafické uživatelské rozhraní, které umožní uživatelsky příjemnou editaci vstupních dat. Spuštění vlastního modelu se pak provede z tohoto rozhraní. Toto rozhraní je zatím ve vývoji v nefunkčním stavu.

Frame specifikuje, zda má být během běhu programu otevřeno grafické okno, které bude zobrazovat vypočtené výsledky. Tato vlastnost je užitečná při déle trvajících výpočtech. Umožňuje průběžnou kontrolu výsledků, zda se v nich nevyskytuje fatální chyba.