

Technická univerzita v Liberci

Fakulta mechatroniky, informatiky a
mezioborových studií

Studijní program: B2612 – Elektrotechnika a informatika

Studijní obor: 2612R011 – Elektronické informační a řídicí systémy

**Kalibrace parametrů modelu sdruženého
transportu tepla a vlhkosti**

**Parameter calibration of coupled heat and
moisture transport model**

Bakalářská práce

Autor: David Haken

Vedoucí: doc. Ing. Milan Hokr, Ph.D.

Konzultant: doc. Ing. Dalibor Frydrych, Ph.D.

V Liberci 26. 5. 2009

Prohlášení

Byl(a) jsem seznámen(a) s tím, že na mou bakalářskou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 o právu autorském, zejména § 60 (školní dílo).

Beru na vědomí, že TUL má právo na uzavření licenční smlouvy o užití mé bakalářské práce a prohlašuji, že **s o u h l a s í m** s případným užitím mé bakalářské práce (prodej, zapůjčení apod.).

Jsem si vědom(a) toho, že užít své bakalářské práce či poskytnout licenci k jejímu využití mohu jen se souhlasem TUL, která má právo ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, vynaložených univerzitou na vytvoření díla (až do jejich skutečné výše).

Bakalářskou práci jsem vypracoval(a) samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím bakalářské práce a konzultantem.

Datum

Podpis

Poděkování

Rád bych touto cestou poděkoval vedoucímu bakalářské práce Panu doc. Ing. Milanu Hokrovi, Ph.D. za všechny konzultace, nápady a připomínky k této práci a za jeho velkou trpělivost. Dále bych rád poděkoval mému konzultantovi Panu doc. Ing. Daliboru Frydrychovi, Ph.D. za technickou podporu s programem ISERIT a jeho rychlé vyřešení nastalých problémů.

V neposlední řadě patří poděkování rodičům za důvěru, možnost studovat na Technické univerzitě v Liberci a mým přátelům za podporu při tvorbě této práce.

Abstrakt

Smyslem této bakalářské práce je pokračování v předešlých modelech jevů probíhajících v hlubinném úložišti. Převodším se jedná o kalibraci parametrů transportu tepla a vlhkosti v daném modelu, který je řešen v numerickém simulačním programu ISERIT. Optimalizace parametrů je řešena kalibračním programem UCODE. V této práci jsou kalibrace prováděny na dvou modelech. První model je brán ve 2D ploše a druhý model ve 3D prostoru. Model ve 3D je následně doplněn o další parametry. Výsledky kalibrací 3D modelu jsou porovnány se 2D. Výsledky ukazují, že při konstantní měrné tepelné kapacitě bentonitu a součiniteli tepelné vodivosti, vstupní data obsahují málo informací. Kalibrace nelineárních parametrů měla velký vliv na chování modelu.

Klíčová slova: ISERIT, UCODE, hlubinné úložiště, vedení tepla, vedení vlhkosti

Abstarct

The purpose of this bachelor work is a continuing in in previous models of processes in deep geological repository. Above all it is about a parameter calibration of heat and moisture transport model which is solved in a numerical simulator programmer ISERIT. An optimization of a parameter is solved by a calibration programmer UCODE. In this work calibrations are done in two models. The first on is in 2D area and the second in 3D space. The model in 3D area has got another parameters. The results of calibrations in 3D model are compared with the model in 2D. The results are showing that in the constant specific heat capacity of bentonit and factor of heat conductivity the enters data are including a little information's. The calibrations of nonlinear parameters have had a big effect on behavior of a model.

Keywords: ISERIT, UCODE, deep geological repository, heat transport, humidity transport

Obsah:

	<i>Seznam použitých symbolů</i>	8
	Úvod	10
1	Seznámení s problémem.....	11
1.1	Hlubinné úložiště	12
1.2	Bentonit	14
1.2.1	Historie.....	14
1.2.2	Rozdělení	15
1.2.3	Využití	15
1.2.4	Produkce ve světě a v České Republice.....	16
1.3	Rovnice vedení tepla a difuze vodní páry	16
2	Simulační program ISERIT	18
2.1	Program	18
2.2	Okrajové podmínky	18
2.3	Materiálové parametry.....	19
3	Kalibrační program UCODE.....	20
4	Řešení úlohy TH zatěžování s řízenou teplotou.....	23
4.1	Popis experimentu	23
4.2	Popis 2D modelu	26
4.3	Výběr hodnot pro kalibraci.....	27
4.4	Výsledky kalibrací 2D modelu	28
4.4.1	Kalibrace konstantních parametrů	28
4.4.2	Kalibrace nelineárních parametrů	30
4.5	Popis 3D modelu	34
4.6	Porovnání 2D a 3D modelu	35
4.7	Výsledky kalibrací 3D modelu	37
5	Závěr.....	40

<i>Seznam použité literatury</i>	41
--	----

Seznam obrázků

Obrázek 1:Úložné obalové soubory (kontejnery).....	12
Obrázek 2: Schéma předpokládaného řešení hlubinného úložiště v ČR.....	14
Obrázek 3:Vývojový diagram výpočtu UCODE.....	20
Obrázek 4: Nákres experimentální komory experimentu.....	24
Obrázek 5: aproximace experimentu ve 2D modelu	27
Obrázek 6: porovnání součinitelů tepelné vodivosti z kalibrovaných hodnot a z hodnot experimentu.....	33
Obrázek 7:Porovnání difúzního koeficientu vodních par před a po kalibraci.....	33
Obrázek 8: aproximace experimentu ve 3D modelu	34
Obrázek 9: Porovnání teplot ve 2D a 3D modelu.....	35
Obrázek 11:porovnání vlhkostí ve 2D a 3D modelu	36
Obrázek 12:porovnání profilů vlhkosti 2D a 3D.....	36
Obrázek 13:Porovnání původního koeficientu tepelné vodivosti s nakalibrovaným 3D a s nakalibrovaným 2D.....	39
Obrázek 14: Porovnání původního koeficient vodních par s nakalibrovanými pro jednotlivé teploty.....	39

Seznam tabulek

Tabulka 1: Harmonogram prací podle koncepce.....	13
Tabulka 2: materiálové parametry v programu	19
Tabulka 3: senzory teploty	25
Tabulka 4: senzory relativní vlhkosti	25
Tabulka 5: senzory tlaku v pórech.....	26
Tabulka 6: senzory radiálního osového napětí	26
Tabulka 7: kalibrace difúzního koeficientu vodních par	29
Tabulka 8:Průběh kalibrace γ	29
Tabulka 9: Kalibrace nelineárních parametrů	32
Tabulka 10:Kalibrace provedené na 3D modelu	38

Seznam použitých symbolů:

C_a^{100}	koncentrace vlhkosti pro 100% relativní vlhkost vzduchu
C_a	koncentrace vlhkosti ve vzduchu
C_b	koncentrace vlhkosti v pevné fázi
C_v	měrná tepelná kapacita bentonitu
D_a	difuzní koeficient vodních par
T	teplota
t	čas
γ	koeficient rychlosti výměny vody mezi vzduchem a pevnou fází
ε	pórovitost
λ	součinitel tepelné vodivosti
τ	efektivní tortuozita
$\varphi(C_b)$	inverzní funkce k sorpční křivce
χ	latentní teplo sorpce
RH	relativní vlhkost – odpovídá $\varphi(C_b)$
TH	tepelné a hydratační
A_1	minimální vodivost
A_2	maximální vodivost
x_0	poloha přechodové části křivky
dx	strmost přechodové části křivky
S_r	saturation
D_1	limitní relativní difuzivita
D_2	limitní relativní difuzivita

- D_{ref} původní difuzní koeficient
- D_T koeficient změny teploty
- CNT Newtonova okrajová podmínka
- PNT Newtonova okrajová podmínka

Úvod

Jak všichni víme, rozvojem technologií vzniká poměrně mnoho radioaktivního odpadu a to nejen v oblasti energetiky a dalších průmyslových odvětví, ale například i v oblasti zdravotnictví. V současné době běží několik projektů, jak tento radioaktivní odpad dále využít. I přesto zde bude množství odpadů, které budou muset být dlouhodobě izolovány. Za nejreálnější variantu izolace vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů považuje koncepce jejich uložení v hlubinném úložišti. Tato úložiště budou vybudována v horninovém masivu a obklopena izolačními materiály. Hornina je heterogenní směs tvořená různými minerály, někdy i organickými složkami, vulkanickým sklem nebo kombinací těchto složek. Přírodním materiálem, který brání průniku radioaktivních látek, je bentonit. Bentonit je hornina vznikající zvětráváním mateční horniny. Je charakteristická vysokým obsahem jílových nerostů.

Kvůli zjištění vedení tepla a vlhkosti v izolačních materiálech (bentonitu) hlubinného úložiště byly vytvořeny modely, které popisují danou problematiku a dovolují hledat nejlepší parametry pro dlouhodobé zachování původních vlastností.

Teoretická část této práce se zabývá popisem problematiky (hlubinné úložiště, bentonit, základní principy a vztahy), popisem numerického simulačního programu ISERIT a kalibračního programu UCODE.

V experimentu provedeném v CEA (označen THM 1.1 v projektu Task Force on Engineered barrier system[8]) se řeší úloha tepelného a hydratačního (TH) zatěžování s řízenou teplotou. V této práci se navazuje na již existující modely a provádějí se jejich optimalizaci. Dále se pracuje s 3D modelem, který se víc přibližuje skutečnosti a tudíž má větší vypovídací hodnotu.

Cílem práce je sledování chování modelu při změnách jednotlivých parametrů a jejich kalibrace. Realizací 3D modelu se jednak zpřesňují dosažené výsledky a navíc je možné doplnit úlohu o další faktory, které mohou negativně působit na vlastnosti výplňových a tlumících materiálů bránících úniku radioaktivních látek.

1 Seznámení s problémem

Výzkum problematiky ukládání vysoce radioaktivního odpadu do podzemních úložišť začal prakticky již v roce 1958, kdy na konferenci o mírovém využití jaderné energie v Ženevě byly formulovány základní cesty jak radioaktivní odpady zneškodnit.

Po celém světě postupně vznikala specializovaná pracoviště, která soustřeďovala odborníky mnoha vědních oborů. Přestože výzkum probíhá posledních 20 let na celém světě velice intenzivně, nelze říci, že je vše uspokojivě vyřešeno.

Řešení problematiky ukládání radioaktivních odpadů vyžaduje z inženýrského hlediska zcela netradiční přístup. Jedinou je vyvolána multidisciplinarností řešení problematiky a především požadavkem na extrémně dlouhou bezpečnou funkci navržené konstrukce překrytí. Zatímco se životnost speciálních inženýrských konstrukcí navržených do extrémních podmínek pohybuje řádově v desítkách let, vyžadovaná životnost, nebo spíše bezpečná funkce úložiště, se pohybuje v řádech stovek let, u hlubinného úložiště dokonce v řádu tisíců až stotisíců let. Splnění požadavku na extrémně dlouhou bezpečnou funkci úložiště vyžaduje při řešení problematiky ukládání radioaktivních odpadů využití všech dostupných metodik a nástrojů. Je nutné v plné míře využít laboratorní zkoušky a měření, polní zkoušky a experimenty, fyzikální a matematické modelování, velmi důležité je studium přírodních analogů.

Při experimentálních pracích, vzhledem k požadavku na časovou platnost výsledků, je nutné využít netradiční přístupy, které umožní extrapolovat výsledky krátkodobých testů a experimentů (v trvání v řádu maximálně několika let) na dlouhodobou platnost (v řádu několika set let až tisíců let). Testy a experimenty jsou proto prováděny při extrémním zatížení, za podmínek kumulace vnějších vlivů, je aplikováno cyklické (opakované) zatížení, rychlé změny zatížení a vnějších podmínek apod. Na věrohodnosti a vypovídací schopnosti získaných výsledků všech experimentálních prací, jakožto zdroji vstupních parametrů pro matematické modely, závisí i výstižnost těchto matematických modelů.

Hlavním zdrojem znalostí, které umožní bezpečný i ekonomický návrh konstrukce úložiště, musí být výsledky experimentálního výzkumu a následně výsledky získané matematickým modelováním s využitím reálných vstupních parametrů. [2]

1.1 Hlubinné úložiště

Cílem hlubinného ukládání vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů je zajistit trvalou izolaci uložených materiálů od životního prostředí bez úmyslu jejich vyjmutí. Princip hlubinného úložiště je založen na pasivní bezpečnosti (tj. bez dalšího dohledu člověka). Pro bezpečné uložení bude využito technických tak i přírodních bariér. Z přírodních bariér to bude horninový masiv, s dlouhodobou neporušeností, odolností vůči vnějším i vnitřním vlivům a řadou dalších chemických vlastností. V České Republice se bude nejspíše jednat o žulový masiv, podobně jako zkoumají vědci ve Švýcarsku a Kanadě.

Celý komplex hlubinného úložiště se bude skládat z nadzemní a podzemní části. Nadzemní část bude zpočátku sloužit jako technické zázemí (zásobování elektřinou, větrání, sklady) pro vybudování podzemní části. Poté bude její hlavní činností dohled na přeložení vyhořelého odpadu z transportních do úložných kontejnerů. Podzemní část se bude nacházet 500 – 1000 m pod zemským povrchem. Zde se bude nacházet systém šachet tunelů a chodeb sloužících k ukládání kontejnerů do svislých velkoprofilových vrtů nebo štol. Budou zde i sklady s drenážními a izolujícími materiály. Nejdůležitější inženýrské bariéry jsou úložné obalové soubory (dále kontejnery) a výplňové tlumící materiály, které utěsňují prostor mezi kontejnerem a šachtou v níž je umístěn.



Obrázek 1: Úložné obalové soubory (kontejnery) (převzato z [6])

Předpokládaná životnost kontejnerů v České Republice je 500 – 1000 let. Tato doba ovšem není dostatečná k redukci radioaktivního odpadu. Proto dalšímu úniku radioaktivní látky brání výplňový, jílový materiál (bentonit), který je schopen tyto látky zadržet desítky až tisíce let. S problematikou hlubinného úložiště se samozřejmě mluví také o bezpečnosti skladování. Není lepší příklad bezpečnosti než přímo z přírody. V blízkosti kanadského jezera Cigar Lake se před milionem a tři sta tisíci lety vytvořilo, v hloubce 430 m pod zemí, ložisko uranové rudy s 60 % uranu. Více než milion uranové rudy leží na žulovém masivu a je překryta 5 - 30 cm jílu. Do dneška nebyla naměřena žádná nebezpečná hodnota uranu ve vodě ani v jejím okolí.[6]

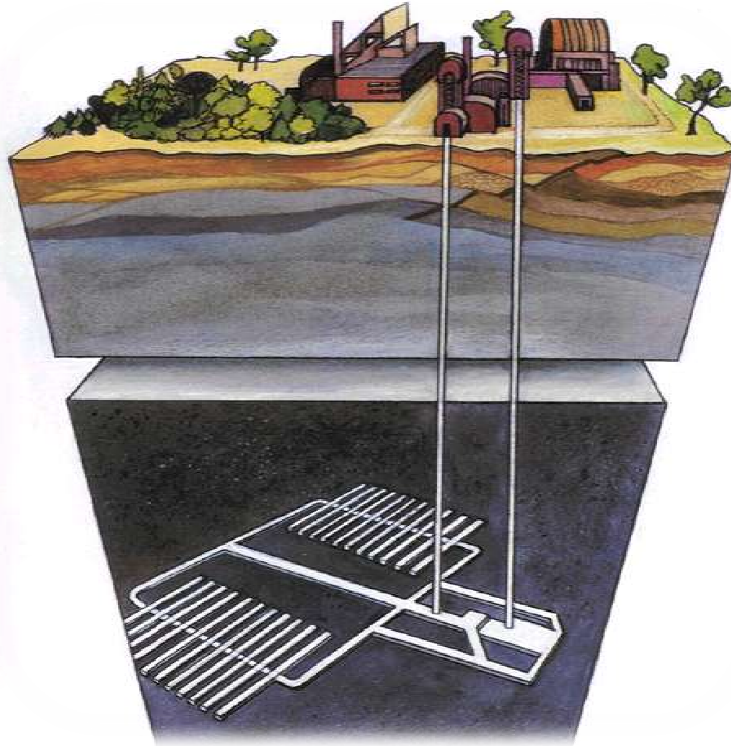
Vhodná lokalita pro vytvoření hlubinného úložiště se začala hledat na přelomu 80. a 90. let 20. století. Pro přípravu hlubinného úložiště přináší koncepce harmonogram prací, jehož zásadní milníky jsou uvedené v tabulce 1.

Tabulka 1: Harmonogram prací podle koncepce (převzato z [6])

Úkol	Rok
Na základě provedení příslušných geologických prací a vyhodnocení výsledků zařadit do územních plánů dvě lokality (hlavní a záložní) pro hlubinné úložiště	2015
Na základě provedení příslušných geologických prací a vyhodnocení výsledků doložit vhodnost jedné lokality pro umístění hlubinného úložiště	2025
Připravit veškerou projektovou a podpůrnou dokumentaci pro zahájení výstavby podzemní laboratoře a realizaci dlouhodobých experimentů pro doložení a potvrzení bezpečnosti hlubinného úložiště	2030
Zahájit provoz úložiště	2065

Český geologický ústav v roce 1991 doporučil 27 oblastí bez bližších kritérií, podle kterých byly vybírány. V roce 1994 navázal na tato doporučení Ústav jaderného výzkumu Rez a.s, který z daných vybral 13 vhodných oblastí k dalšímu zkoumání. V průběhu prací bylo podle komplexních kritérií dále doporučeno 8 lokalit. Správa úložišť radioaktivních odpadů (dále SÚRAO) nebyla se závěry spokojena a nechala si vytvořit analýzu území České republiky u nezávislé firmy. Výsledkem studie bylo vytipováno 11 lokalit, v nichž je hlubinné úložiště možné. SÚRAO v roce 1993 vybrala 6 lokalit pro zahájení etapy charakterizace, kde se zkoumala proveditelnost nadzemní části, včetně infrastruktury, ochrany prostředí, a dalších faktorů. V konečné fázi budou vybrány dvě lokality, na kterých bude

stavba hlubinného úložiště proveditelná. Z usnesení vlády z 2. června 2004 vyplývá, že bere na vědomí pozastavení geologických prací do roku 2009.[7]



Obrázek 2: Schéma předpokládaného řešení hlubinného úložiště v ČR (převzato z [6])

1.2 Bentonit

Bentonit je reziduální, nepřemístěná jílová hornina s mohutnou sorpční schopností, vysokou hodnotou výměny kationtů. Je to plastická hornina s vlastnostmi, které umožňují bobtnat. Nositeli těchto vlastností jsou jílové minerály, především montmorillonit, případně beidelit. Bentonity vznikly mechanickým a chemickým zvětráváním matečné horniny především sopečných tufů a tufitů. Chemické i minerální složení horniny je různorodé a závislé na vzniku ložiska.

1.2.1 Historie

První využití bentonitu je v 19. století, kdy byl ve Velké Británii použit pro odbarvování jedlých tuků a olejů. V roce 1881 byla nalezena ložiska v USA u Fort Bentonu, od té doby je používán termín bentonit. Poté byla ložiska objevována na dalších místech USA a i v Evropě.

Největší rozmach a využití bentonitu bylo od poloviny 20. století. Začíná se využívat v mnoha oborech. Například slévárenství, stavebnictví, keramickém, chemickém i potravinářském průmyslu, dokonce i při čištění vod. V současné době jsou světové zásoby bentonitu odhadovány na 1400 mil. Tun a počítá se s objevem dalších lokalit. V České Republice těžba bentonitu začala na v roce 1941 na Mostecku (ložisko Braňany). V roce 1953 byla spuštěna úpravna, která fungovala 16 let. Poté byla vybudována nová úpravna v Obrnicích a to z několika důvodů. Hlavními důvody byl velký rozvoj slévárenského průmyslu a otevření druhého ložiska Černý Vrch.

V dnešní době jsou obě ložiska vytěžena a nynější ložisko nedosahuje takové univerzálnosti jako předchozí. Úpravna v Obrnicích funguje stále, ale mnoho surovin se musí dovážet ze vzdálených oblastí.

1.2.2 Rozdělení

Bentonity lze zásadně rozdělit na:

- Silně bobtnavé Na-bentonity, tzv. bentonity wyomingského typu. Ložiska této suroviny se nacházejí především v USA, v ČR se ložiska sodných bentonitů nevyskytují.
- Méně bobtnavé draselné, vápenaté a hořečnaté bentonity případně jejich kombinace. Tyto bentonity se průmyslově obohacují sodíkem a dochází k tzv. aktivaci bobtnací schopnosti.

1.2.3 Využití

- Slévárenství – základní pojivo pro formovací směsi
- Stavebnictví – těsnění (skládek, tunelů, přehrad a jiných vodních děl, dále při zlepšování zemin injektáží a ochraně spodních vod), bentonit se také přidává jako přísada do betonů a omítek, při vrtných pracích se využívá tixotropních vlastností bentonitů pro vrtné výplachy
- Čištění odpadních vod – sorbent ropných nečistot
- Nátěrové hmoty – ztužovadlo
- Živočišná výroba – pojivo granulových krmiv
- Protipožární ochrana – zásypy lesních požárů
- Potravinářský průmysl čištění, odbarvování rostlinných a živočišných tuků

V České Republice se bentonit v omezené míře používá v potravinářském průmyslu a farmacii. Je to z důvodu obsahu železitých oxidů obsažených v českém bentonitu.

1.2.4 Produkce ve světě a v České Republice

Hlavním světovým producentem bentonitu jsou Spojené státy americké (cca 2 mil. tun ročně), které produkují nejkvalitnější bentonity na světě a disponují i značnými zásobami přírodních sodných bentonitů. Dalšími významnými producenty bentonitu jsou státy bývalého SSSR (kolem 1,7 mil tun/rok), zřejmě Čína (odhaduje se produkce kolem 1,5 mil. tun/rok), SRN (800 kt/rok), Řecko (600 kt/rok), Japonsko (570 kt/rok), následuje Itálie, Španělsko, Indie, Turecko a další země.

ČR vytěží ročně kolem 70 kt bentonitu, což činí přibližně 0,75 % světové produkce bentonitu. Producenty bentonitu v ČR jsou např. Keramost, a. s. (největší český producent bentonitů).[1]

1.3 Rovnice vedení tepla a difuze vodní páry

V hlubinném úložišti probíhá množství fyzikálních jevů. V modelu v této práci uvažujeme vedení tepla a transport vlhkosti. Předpokládáme, že teplo a vlhkost se šíří ve formě páry. Voda je v modelu distribuována mezi dvě fáze, vodní pára v pórech a voda vázaná v zrnech bentonitu, s nerovnovážnou výměnou mezi oběma fázemi a souvisejícím latentním teplem. Studovaný proces je popsán soustavou rovnic vedení tepla, difuze vodních par a nerovnovážné interakce mezi párou a sorbovanou vodou (pára a imobilní voda):

$$c_{V(T,C_a,C_b)} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(\lambda_{T,C_a,C_b} \nabla T) + \chi_{(T,C_a,C_b)} \frac{\partial C_b}{\partial t}$$

$$\varepsilon \frac{\partial C_a}{\partial T} + (1 - \varepsilon) \frac{\partial C_b}{\partial t} = \nabla(D_{a(T,C_a,C_b)} \frac{\varepsilon}{\tau} \nabla C_a$$

$$\frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial C_b}{\partial t} = \left(\frac{C_a}{C_a^{100}} - \varphi(C_b) \right) \gamma_{(T,C_a,C_b)}$$

kde výše použité symboly znamenají

T – teplota [K]

C_a – koncentrace vlhkosti ve vzduchu [kg/m^3]

C_b – koncentrace vlhkosti v bentonitu [kg/m^3]

t – čas [s]

c_v – objemová měrná tepelná kapacita bentonitu [$\text{J}/\text{m}^3/\text{K}$]

χ – latentní teplo sorpce [J/kg]

λ – součinitel tepelné vodivosti [W/m/K]

ε – pórovitost [1]

D_a – difuzní koeficient vodních par [m^2/s]

τ – efektivní tortuosita [1]

C_a^{100} – koncentrace vlhkosti pro 100% relativní vlhkost vzduchu [kg/m^3] (absolutní vlhkost sytých par)

$\varphi(C_b)$ – inverzní sorpční křivka (relativní vlhkost mezi 0 a 1)

γ – koeficient rychlosti výměny vody mezi vzduchem a pevnou fází [$\text{kg}/\text{m}^3/\text{s}$]

V modelu je použita řada obecných funkčních závislostí, z nichž ne všechny jsou běžně popisovány v literatuře. Pomocí automatických algoritmů pro kalibraci parametrů jsou zde zavedeny obecnější nastavení modelu.[4]

2 Simulační program ISERIT

2.1 Program

ISERIT je numerický simulační program psaný v jazyce Java a jeho specifickým rysem je například možnost zadat závislosti koeficientů přímo vzorcem v textovém tvaru. ISERIT počítá pomocí numerických metod soustavu parciálních diferenciálních rovnic. V této práci umožňuje řešit sdružené termo-hydraulické procesy probíhající v jednotlivých etapách stárnutí inženýrské bariéry.

Vstupní data modelu jsou rozdělena do čtyř typů souborů:

1. řídicí soubor celého výpočtu. Jsou v něm uloženy informace o umístění jednotlivých vstupních souborů.
2. geometrie a diskretizace oblasti – výpočetní síť
3. materiálové parametry diskretizované oblasti
4. „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. Každý krok tedy musí obsahovat informace o délce časového intervalu, počtu výpočetních kroků a obsahovat seznam okrajových podmínek.

Výsledky se ukládají do editorů různého typu. Většinou se jedná o textové soubory typu .txt nebo soubory typu .pos, ze kterých lze data jednoduše přenášet do jiných programů (např. tabulkový procesor, program GMSH).

2.2 Okrajové podmínky

Okrajové podmínky vyjadřují souvislosti modelu s okolím. Program umožňuje použití nadefinovaných Dirichletových, Neumannových a Newtonových okrajových podmínek pro uzel, úsečku a oblast. Okrajové podmínky jsou následující

- Pro uzel: Dirichletova okrajová podmínka vyjadřuje hodnotu potenciálu v tomto případě pro teplotu ($DirichletT$), Dirichletova okrajová podmínka pro vlhkost vzduchu ($DirichletCa$), Neumanova okrajová podmínka předepisuje tok v tomto případě pro teplotu ($NeumannT$), Neumanova okrajová podmínka pro vlhkost vzduchu $NeumannCa$, Newtonova okrajová podmínka je vyjadřuje rozdíl toků vně a uvnitř (v tomto případě se jedná o přestup tepla) ($NewtonT$) a přestup vlhkosti vzduchu ($NewtonCa$).

- Pro úsečku: Platí stejné vlastnosti, pouze jsou definovány pro úsečku tedy pro teplotu(DirichletT), vlhkost vzduchu(DirichletCa), pro teplotu(NewtonT) a vlhkost vzduchu(NewtonCa).
- Pro oblast: Platí stejné vlastnosti, pouze jsou definovány pro oblast tedy pro teplotu(NeumannT), pro teplotu(PlaneNewtonT), pro teplotu(CylinderNewtonT) [5]

2.3 Materiálové parametry

V programu vkládáme fyzikální parametry, které představují různé fyzikální veličiny, jak je vidět na následující tabulce.

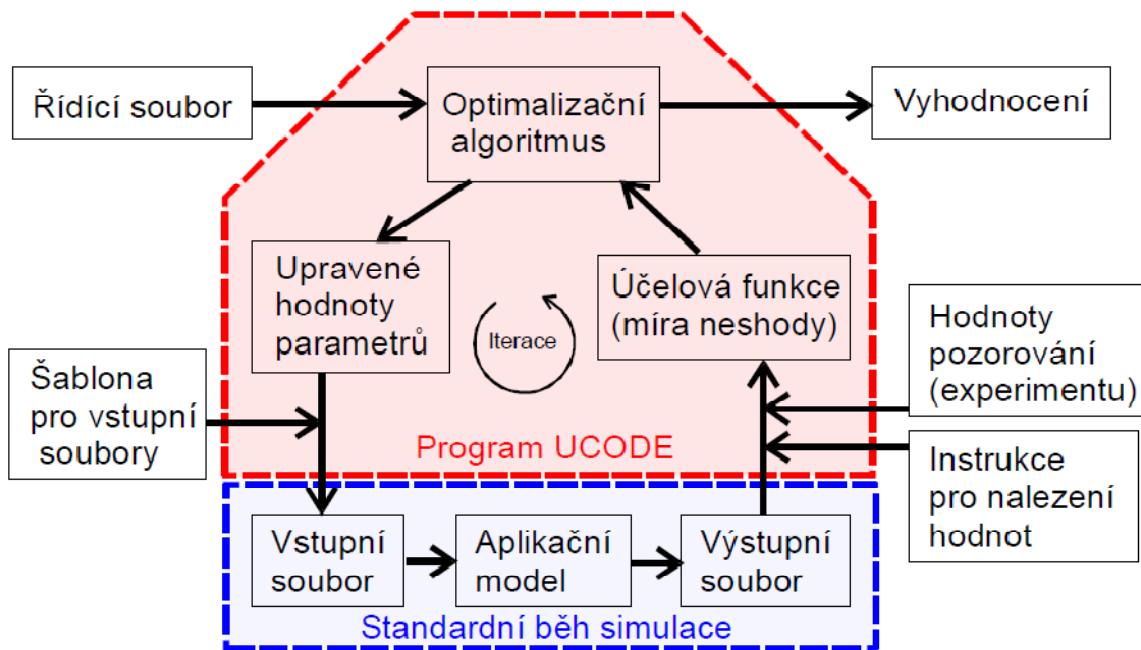
Tabulka 2: materiálové parametry v programu

Označení parametru v programu	Fyzikální veličina	Jednotka	Označení parametru v literatuře
Cv	měrná tepelná kapacita	J/kg/K	c_v
lambda	součinitel tepelné vodivosti	W/m/K	λ
Chi	latentní teplo sorpce	J/kg	χ
epsilon	pórovitost	1	ϵ
Da	difuzní koeficient vodních par ve vzduchu	m^2/s	D_a
Tau	efektivní tortuosita	1	τ
VarPhi	inverzní funkce k sorpční křivce	1	$\phi(C_b)$
Gamma	koeficient rychlosti výměny vody mezi vzduchem a pevnou fází	$kg/m^3/s$	γ
Rho	hustota	kg/m^3	ρ
Thickness	tloušťka	m	

3 Kalibrační program UCODE

Proces hledání hodnot parametrů, při nichž dochází k nejlepší shodě simulace s experimentem, je označován různě například kalibrace, optimalizace, inverzní programování. Klasické postupy jsou metodou „pokus-omyl“, obvykle založené na intuitivním odhadu fyzikální podstaty vlivu jednotlivých parametrů na výsledky modelu. Obecně se jedná o optimalizační úlohu - hledání hodnot parametrů modelu, pro něž je zvolená tzv. účelová funkce minimální. V některých případech nelze závislost účelové funkce na parametrech vyjádřit „vzorcem“; funkce je „generována“ z výsledků běhu simulačního modelu. Obecné optimalizační algoritmy lze pak aplikovat ve spojení s opakovaným spouštěním simulace – úpravou vstupních dat a čtením výstupních dat, dokud nedojde k nalezení minima.

Na uvedeném principu pracuje program UCODE, který obsahuje uživatelské rozhraní pro napojení na prakticky libovolný simulační program pracující na principu textových vstupních a výstupních souborů. Program byl vytvořen a je udržován americkou geologickou službou USGS. Vývojový diagram výpočtu je znázorněn na obrázku 3.



Obrázek 3: Vývojový diagram výpočtu UCODE (převzato z [3])

Význam jednotlivých kroků a datových souborů je následující:

- *Řídící soubor*: určuje, které parametry se budou kalibrovat, jejich počáteční odhady a limity, numerické parametry pro optimalizační algoritmus, odkazy na datové soubory a aplikační model
- *Optimalizační algoritmus*: jádro programu, na základě zjištěných rozdílů mezi modelem a experimentem stanovuje upravené hodnoty parametrů. Typicky je použita metoda gradientního typu, tj. z rozdílů výsledků při malé změně hodnot jednotlivých parametrů se odhadnou jejich citlivosti a příslušné parciální derivace a na jejich základě se provede „krok ve směru záporného gradientu účelové funkce“. Iterace se tedy skládá ze dvou částí – (1) určení citlivostí a gradientu a (2) úprava parametrů. Relativně málo citlivé parametry jsou přitom obtížně odhadnutelné a zároveň změna jejich hodnoty nemá významný vliv na hodnotu účelové funkce, proto se hodnota takových parametrů často fixuje a vynechávají se z dalšího postupu optimalizace.
- *Vyhodnocení*: nalezené optimální hodnoty parametrů, citlivosti, korelační matice a další statistické veličiny charakterizující kvalitu provedeného odhadu parametrů
- *Šablona pro vstupní soubory*: kopie vstupního souboru modelu, v níž jsou hodnoty odhadovaných parametrů nahrazeny substitučními řetězci, za něž program UCODE v každé iteraci dosadí aktuální hodnoty parametrů generované optimalizačním algoritmem.
- *Aplikační model*: simulační program ve stejné podobě, jak je používán pro běžné výpočty
- *Instrukce pro nalezení hodnot*: sada „příkazů“ popisujících, kde ve výstupních souborech simulace jsou zapsány hodnoty, které jsou protějškem hodnot experimentálního pozorování
- *Hodnoty pozorování (kalibrační data)*: sada dat získaných např. z experimentu, jež chceme pomocí simulace reprodukovat

- *Účelová funkce*: vhodně zvolená funkce reprezentující rozdíl mezi simulovanými a experimentálními hodnotami – je více možností, např. součet druhých mocnin rozdílů simulovaných a měřených hodnot (tj. reziduí), jednotlivým pozorováním lze stanovit různé váhy

Použitý optimalizační algoritmus hledá lokální minimum rezidua. Z toho plynou některá omezení, na která je třeba dávat pozor. Při zadání „nevhodného“ počátečního odhadu parametrů program může najít lokální minimum odlišné od globálního. Řešení lze pak často najít opakováním procesu kalibrace s různými počátečními hodnotami parametrů. Někdy také metoda nekonverguje, což může být způsobeno špatnou podmíněností úlohy. Důvody nekonvergence jsou především neexistencí minima, malá citlivost modelu na některé vstupní parametry nebo korelace některých parametrů. Nekonvergence resp. konvergence k nerealistickým hodnotám parametrů obvykle souvisí s tím, že uvažovaný model nepopisuje dostatečně dobře studovaný problém, případně dostupná měření nenesou dostatečnou informaci o hledaných parametrech.

Časová náročnost kalibrace závisí na časové náročnosti aplikačního modelu a počtu odhadovaných parametrů. V každém kroku je nutno určit citlivosti každého parametru, z čehož vyplývá, že model je spuštěn $(n+1)$ -krát, kde n je počet parametrů. Celkový počet spuštění modelu je pak $(n+1)$ krát počet iterací potřebných na nalezení optima. Metoda obvykle konverguje v $2n$ iteracích, v opačném případě je na základě analýzy generovaných statistik nutné zkontrolovat správnost modelu a kalibračních dat, přehodnotit parametrizaci modelu, zvolit jiné počáteční hodnoty apod. a provést příslušné změny řídicího souboru.[3]

4 Řešení úlohy TH zatěžování s řízenou teplotou

4.1 Popis experimentu

Ve dvou vertikálních sloupcích s lisovaným bentonitem MX-80 jsou provedeny experimenty. Každý sloupec má jiný počáteční objem vody.

Každý test se skládá ze dvou fází. V první fázi je zahříván jeden konec sloupce a druhý konec je udržován na konstantní teplotě 20°C. Teplota je zvyšována po krocích, dokud maximální požadovaná teplota na ohřívaném konci je 150 °C. Ve druhé fázi je po dosažení teplotní rovnováhy při maximální teplotě zahájena postupná hydratace vzorku, tj. otevřen přívod vody. Konstantní vodní tlak je aplikován na opačný konec, než na kterém je definována předepsaná teplota.

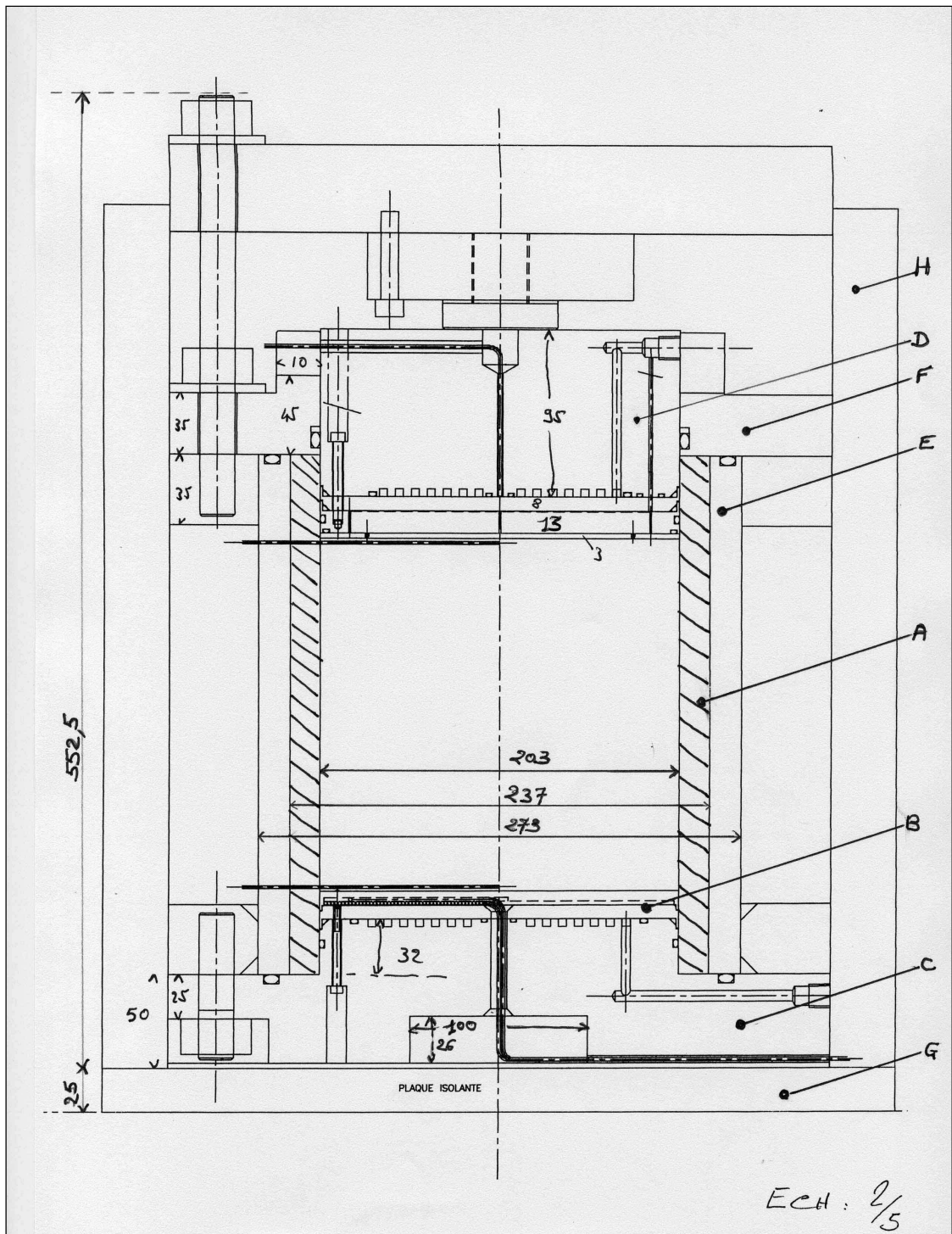
Během testu jsou měřeny následující parametry:

- teplota
- relativní vlhkost
- tlak v pórech
- osově napětí
- radiální osově napětí

Oba vzorky mají průměr podstavy a výšku sloupce 203 mm. Vzorky jsou testovány v přístrojové aparatuře, který je ukázán na obrázku 4. Vzorky jsou uzavřené v polytetrafluoretylenovém obalu.

Měřicí senzory, teploty, relativní vlhkosti, tlaku v pórech, radiálního osového napětí, jsou instalovány ve vertikální ose, jejich přesné umístění je popsáno v tabulce 3 – 6.

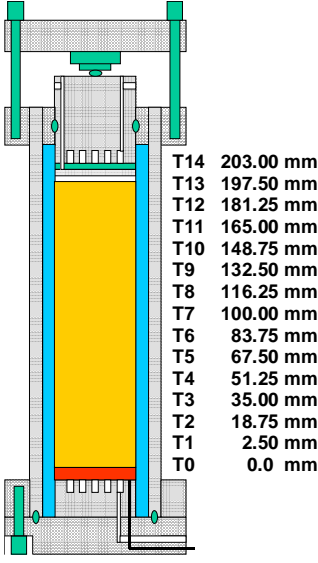
Pro experiment byl bentonitový vzorek v komoře 1 stabilizován v atmosféře s relativní vlhkostí 60% a vzorek ve druhé komoře stabilizován v atmosféře s relativní vlhkostí 90%. [8]



Obrázek 4: Nákres experimentální komory experimentu (převzato z [8])

Tabulka 3: senzory teploty (převzato z [8])

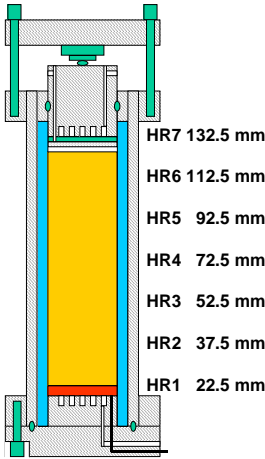
Sensor	Y (mm)
T 0	0
T 1	2.5
T 2	18.75
T 3	35.0
T 4	51.25
T 5	67.5
T 6	83.75
T 7	100
T 8	116.25
T 9	132.5
T 10	148.75
T 11	165
T 12	181.25
T 13	197.5
T 14	206*



*umístěn 3 mm v plátu z nerezové oceli

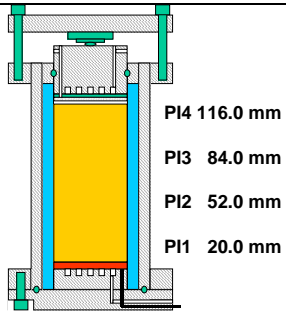
Tabulka 4: senzory relativní vlhkosti (převzato z [8])

Relative-humidity sensor	Temperature sensor	Y (mm)
HR1	HRT1	22.5
HR2	HRT2	37.5
HR3	HRT3	52.5
HR4	HRT4	72.5
HR5	HRT5	92.5
HR6	HRT6	112.5
HR7	HRT7	132.5



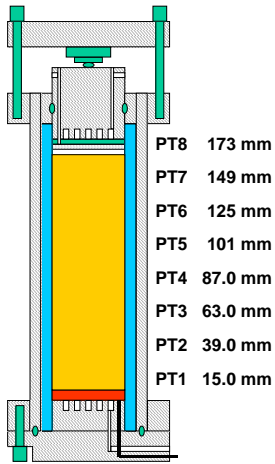
Tabulka 5: senzory tlaku v pórech (převzato z [8])

Sensor	Y (mm)
PI1	20.0
PI2	52.0
PI3	84.0
PI4	116.0



Tabulka 6: senzory radiálního osového napětí (převzato z [8])

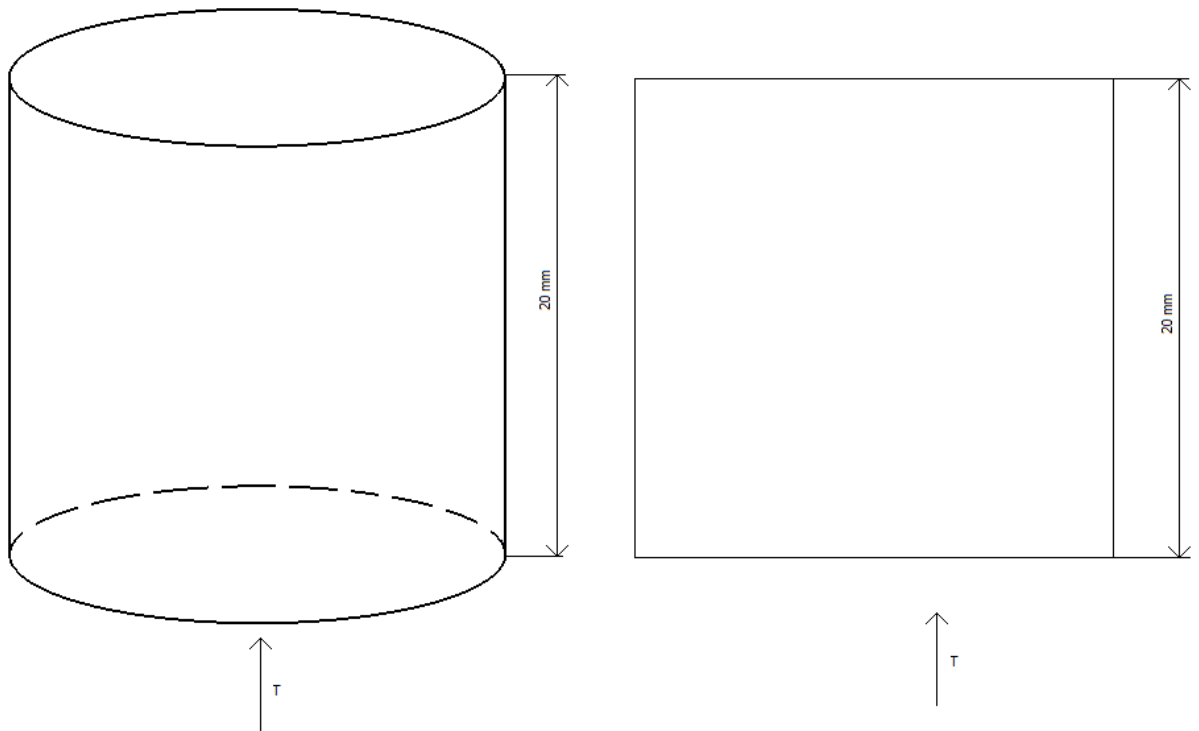
Sensor	Y (mm)
PT1	15.0
PT2	39.0
PT3	63.0
PT4	87.0
PT5	101.0
PT6	125.0
PT7	149.0
PT8	173.0



4.2 Popis 2D modelu

Tento model je aproximací experimentu, kde je válec zjednodušen na obdélník. Podstava a výška válce mají stejnou délku (zobrazeno na obrázku 5). Toto zjednodušení je možné, protože válec je osově symetrický. V modelu budeme moci pozorovat děje probíhající v ose řezu. Nemůžeme ovšem sledovat děje probíhající ve směru osy a bočními stěnami. Samozřejmě zjednodušením válce na čtverec se model oddálí od reality, ale ne natolik, aby byl nevěrohodný. Vliv na jednotlivé hrany obdélníku se budou lišit od vlivů působících na analogickou stěnu válce. Model je obdélník, s předepsanými okrajovými podmínkami a s geometrií zobrazenou na obrázku 5. Máme zadané materiálové parametry pro rovnici vedení tepla, rovnici vedení vlhkosti ve vzduchu a rovnici vedení vlhkosti v pevné fázi. Co se týče okrajových podmínek, máme zadanou Dirichletovu okrajovou podmínku, která vyjadřuje

hodnotu potenciálu, pro vlhkost vzduchu ve válci. Dále máme uvedeny Dirichletovi okrajové podmínky pro horní hranu a spodní hranu obdélníku.



Obrázek 5: aproximace experimentu ve 2D modelu

4.3 Výběr hodnot pro kalibraci

Pro kalibraci bylo nejprve nutné pomocí spočteného modelu vybrat tzv. pozorování. Pozorování jsou vhodné hodnoty v určitých bodech, které se budou porovnávat s daty z experimentu. Poté už můžeme zahájit kalibraci.

Pro kalibraci C_v a λ jsme využili pouze přechodovou křivku teploty. Pokud se podíváme na tuto přechodovou část, zjistíme, že data nejsou zaznamenána v dobrých pozicích. Díky tomu vzniká z této přechodové křivky schodiště. Vybrána byla všechna teplotní čidla (T0-14) přibližně ve čtvrtině této přechodové křivky teploty.

Pro kalibraci vlhkosti byla vybrána všechna čidla (RH1-RH7) v pěti časových okamžicích. Jelikož časové okamžiky modelu nebyly shodné s doporučenými časovými okamžiky ze zprávy [8] kapitola 3.2.1, musela být provedena interpolace dat vlhkosti. Vybrali jsme rovnoměrnou interpolaci z měřených dat. Samotná interpolace není nic jiného než vyřešení rovnice přímky. Obecně $y=k*x+q$, kde neznámé jsou k a q . Jelikož máme dvě okolní

hodnoty ve dvou okolních časech, vznikne nám soustava dvou rovnic o dvou neznámých, kterou není problém vyřešit. Po dosazení do obecného vztahu dostaneme pro konkrétní x (čas) interpolovanou hodnotu vlhkosti.

4.4 Výsledky kalibrací 2D modelu

Pro samotnou kalibraci modelu jsme využili kalibrační program UCODE, ve kterém pomocí textových editorů zadáváme parametry modelu, ale můžeme zde i definovat jaké parametry budou kalibrovány a jaké ne.

4.4.1 Kalibrace konstantních parametrů

Kalibrace měrné tepelné kapacity bentonitu a součinitele tepelné vodivosti se prováděla na přechodové části teploty. Zde je možné získat nějaká data, která mohou vést ke změnám vlastností modelu.

Při prováděných výpočtech se C_v dostávalo do hodnot řádu desetitisíců. Z hlediska fyzikálního významu je tato hodnota nereálná, protože měrná tepelná kapacita bentonitu se pohybuje v řádu tisíců (1500 – 2500). Z těchto faktorů vyplývá, že daný parametr nemá na model vliv jako závěr je možno říci, že data neobsahují dostatečné informace o experimentu.

Kalibrovat λ jako konstantní parametr nemá moc velký smysl. Na λ záleží pouze tepelný tok, který nemám měřený. Jednotlivé schody, na přechodové části, data o C_v a λ obsahují, ale intervaly jsou malé a navíc mají malou citlivost. Kalibrace byla prováděna při pevné hodnotě $C_v=2000$. Kalibroval se parametr λ s počáteční hodnotou 1.64. V prvních cyklech se parametr moc neměnil a neměnila se ani příliš shoda model-experiment. Po několika cyklech se shoda model-experiment, přeci jenom výrazně zlepšila, ale parametr $\lambda=0.8213 \cdot 10^{-1}$. Reálná hodnota tohoto parametru, se pohybuje zhruba mezi hodnotami 0.7 – 1.7 W/m/K. Z těchto skutečností lze vyvodit, že data neobsahují dostatečné informace k ovlivnění modelu.

Při kalibraci difúzního koeficientu vodních par a koeficientu rychlosti výměny vody mezi vzduchem a pevnou fází program UCODE přestával pracovat. Z tohoto důvodu jsme se rozhodli tyto parametry kalibrovat zvlášť.

Protože běh UCODE se zastavoval kvůli γ , rozhodli jsme se nejprve kalibrovat difúzní koeficient vodních par. Při hledání lokálního minima odchylky měření-model se

nakalibrované hodnoty D_a , pohybovaly mezi hodnotami $0.42 \cdot 10^{-5} - 0.44 \cdot 10^{-5}$ pro různé fixní hodnoty γ (tabulka 7). Proto sem se rozhodl pro další výpočty použít hodnotu $D_a = 0.43 \cdot 10^{-5}$.

Program UCODE během kalibrace γ přestával pracovat. K tomuto zastavení běhu programu docházelo z důvodu, že kalibrovaný parametr byl nulový a nebo se blížil nekonečnu. Z tohoto důvodu program UCODE nebyl schopen další krok spočítat. Proto jsme se rozhodli pečlivě sledovat při jaké hodnotě γ budeme schopni vypočítat další krok. Jelikož jsme v minulém kroku nakalibrovali D_a , zde jsme ho použili jako pevnou hodnotu a to $D_a = 0.43 \cdot 10^{-5}$. Po několika pozorováních jsme zjistili, že nejlepší hodnota, při které jsme schopni vypočítat další krok je 1.6. Tabulka 8 znázorňuje sledování chování γ .

Tabulka 7: kalibrace difúzního koeficientu vodních par

fixní	Cv	2000	2000	2000	2000
	γ	$0.9 \cdot 10^{-2}$	$0.9 \cdot 10^{-2}$	0.1	0.1
	λ	1.64	1.64	1.64	1.64
Počáteční hodnoty	D_a	$0.52 \cdot 10^{-5}$	$0.3 \cdot 10^{-6}$	$0.52 \cdot 10^{-5}$	$21.2 \cdot 10^{-6}$
Nakalibrované hodnoty	D_a	$0.4277 \cdot 10^{-5}$	$0.4272 \cdot 10^{-5}$	$0.4404 \cdot 10^{-5}$	$0.4406 \cdot 10^{-5}$
Původní residuum		$0.54669 \cdot 10^{11}$	$0.14198 \cdot 10^{12}$	$0.54669 \cdot 10^{11}$	$0.25637 \cdot 10^{12}$
Residuum po kalibraci		$0.53258 \cdot 10^{11}$	$0.54172 \cdot 10^{12}$	$0.53258 \cdot 10^{11}$	$0.53257 \cdot 10^{11}$

Tabulka 8: Průběh kalibrace γ

Číslo pokusu	γ	maxchange	výsledek	Původní residuum	Residuum po kalibraci
1	$0.9 e^{-2}$	1.0	Běh programu zastaven při 9 iteraci 1.152 \rightarrow 2.3	0.54172E+11	0.53221E+11
2	0.7	0.5	Běh programu zastaven při 4 iteraci 1.57 \rightarrow 2.3	0.53225E+11	0.53219E+11
3	0.7	0.2	Běh programu zastaven při 6 iteraci 1.4 \rightarrow 1.7	0.53225E+11	0.53220E+11
4	0.7	0.1	Běh programu zastaven při 11 iteraci 1.651 \rightarrow 1.816	0.53225E+11	0.53219E+11
5	1.5	0.05	Běh programu zastaven při 4 iteraci 1.654 \rightarrow 1.736	0.53220E+11	0.53219E+11
6	1.5	0.01	Běh programu zastaven při 12 iteraci 1.674 \rightarrow 1.69	0.53220E+11	0.53219E+11
7	1.5	0.005	Běh programu zastaven při 24 iteraci 1.682 \rightarrow 1.691	0.53220E+11	0.53219E+11
8	1.6	0.005	Běh programu zastaven při 12 iteraci 1.682 \rightarrow 1.69	0.53219E+11	0.53219E+11

4.4.2 Kalibrace nelineárních parametrů

V tuto chvíli jsme nahradili konstantní parametry za nelineární. V podstatě se jedná o funkční závislost jednotlivých parametrů na proměnných modelu

Tepelná kapacita bentonitu je závislá na obsahu vody (saturaci). Tuto závislost popisuje následující vztah:

$$\lambda(S_r) = \frac{A_1 - A_2}{1 + \exp\left(\frac{S_r - x_0}{dx}\right)} + A_2$$

kde jednotlivé empirické parametry znamenají (v hranaté závorce je uvedeno označení použité při kalibraci)

- A_1 [lam1] – minimální vodivost (pro saturaci blízkou nule, resp. minus nekonečnu)
- A_2 [lam2] – maximální vodivost (pro saturaci blízkou jedné, resp. plus nekonečnu)
- x_0 [mid] – poloha přechodové části křivky (saturace při níž je vodivost průměrem z A_1 a A_2)
- dx [slope] – parameter charakterizující strmost přechodové části křivky (čím menší tím strmější)
- S_r saturace $S_r = C_b/C_b(\varphi=1)$ (poměr k maximálnímu možnému obsahu vody)

Nelineární difuzní koeficient má následující závislost

$$D(C_b, T) = (D_{ref} + T * D_T) * \left(\frac{D_1 - D_2}{1 + \exp\left(\frac{\frac{C_b}{C_b^{max}} - x_0}{dx}\right)} + D_2 \right)$$

Kde jednotlivé empirické parametry znamenají (v hranaté závorce je uvedeno označení použité při kalibraci)

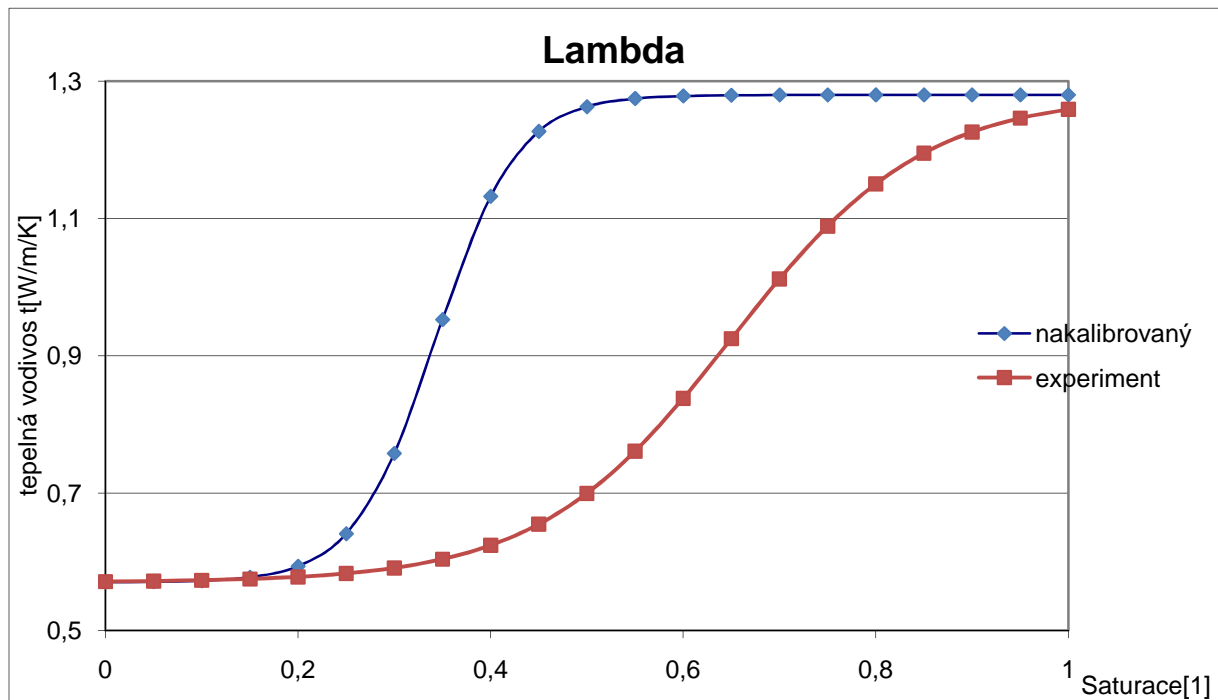
- D_1 [rdif1] – limitní relativní difuzivita (pro C_b blízké minus nekonečnu)
- D_2 [rdif2] – limitní relativní difuzivita (pro C_b blízké plus nekonečnu)
- x_0 [rdif_mid] – poloha přechodové části křivky (C_b/C_{bmax} při níž je jehnota průměrem z A_1 a A_2)
- dx [rdif_slp] – parameter charakterizující strmost přechodové části křivky
- D_{ref} [dif_ref] – regenerční hodnota difúzního koeficientu
- D_T [dif_T] – koeficient vyjadřující změnu vlivem teploty

Kalibrace nelineárních parametrů byla rozdělena do dvou částí. První část byla kalibrace nelineární tepelné vodivosti. Pevné parametry pro nelineární tepelnou vodivost byly měrná tepelná kapacita bentonitu ($C_v=2000$), difúzní koeficient vodních par ($Da=0.43 \cdot 10^{-5}$) a koeficient rychlosti výměny mezi vzduchem a pevnou fází ($\gamma=1.6$). V jednotlivých kalibracích byla vidět míra citlivosti daných parametrů na vlastnostech modelu. Většina kalibrací je věrohodná. Na kalibraci v pátém sloupci je třeba brát zřetel. Minimální a maximální vodivost je poměrně blízko u sebe s relativně malým koeficientem strmosti. Jedná se o nakalibrování hodnot podobným jako u konstantního parametru. Takovéto parametry mohou vést ke skreslení chování modelu. V prvním sloupci jsou nakalibrované hodnoty mimo rozsah. Nejlepší shoda mezi modelem a experimentem byla dosažena při pevných parametrech $A_1=0.57$, $A_2=1.28$ a kalibrovaných koeficientech mid a slope jak lze vidět v šestém sloupci tabulky 9. Na grafu tepelné vodivosti (obrázek 6) je vidět, že po kalibraci je závislost mnohem strmější a také, že přechod začíná dříve, než jak tomu bylo při původních parametrech. Z hlediska samotného modelu to znamená, že dané teploty bude dosaženo dříve s větším spádem.

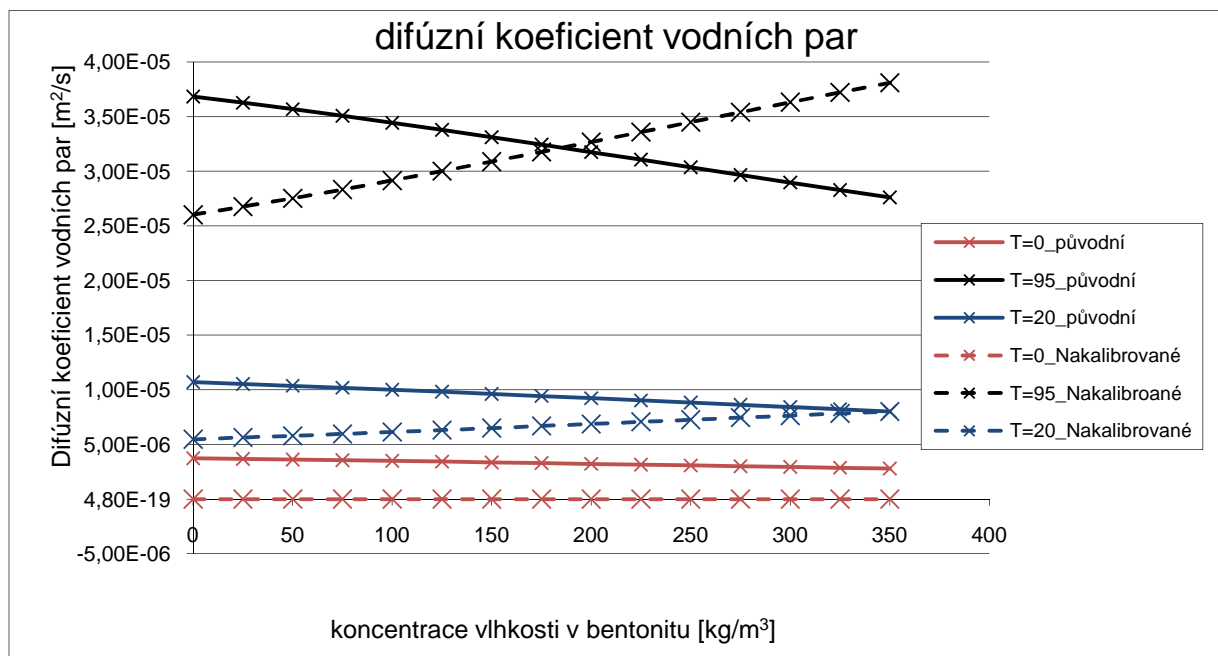
Ve druhé části jsme kalibrovali nelineární difúzní koeficient vodních par. Fixní parametry v této optimalizaci byly využity z nakalibrovaných parametrů nelineární tepelné vodivosti. Konkrétní hodnoty jednotlivých parametrů jsou zobrazeny v sedmém sloupci tabulky 9. Na obrázku 7 je graf difúzního koeficientu vodních par. Difúzní koeficient je parametr závislý na dvou proměnných. A to na vlhkosti bentonitu a na teplotě. Pro jasnější prezentaci výsledků jsme se rozhodli, že jeden parametr (teplotu) bude konstantní. Z níže uvedeného grafu lze vyčíst, větší míru shody model-experiment, když se zvyšující se vlhkostí bentonitu hodnota difúzního koeficientu vodních par stoupá.

Tabulka 9: Kalibrace nelineárních parametrů

	nelineární tepelná vodivost							Nelineární difúzní koeficient
fixní	Cv	2000	2000	2000	2000	2000	2000	2000
	Da	0.43*10 ⁻⁵	0.43*10 ⁻⁵	0.43*10 ⁻⁵	0.43*10 ⁻⁵	0.43*10 ⁻⁵	0.43*10⁻⁵	-----
	γ	1.6	1.6	1.6	1.6	1.6	1.6	1.6
	A1	-----	1.2	1.2	-----	-----	0.57	0.57
	A2	-----	2.8	-----	2.8	-----	1.28	1.28
	mid	0.65	-----	-----	-----	-----	-----	0.3434
	slope	0.1	-----	-----	-----	-----	-----	0.4249*10 ⁻¹
	rdif_mid	-----	-----	-----	-----	-----	-----	0.7
	rdif_slope	-----	-----	-----	-----	-----	-----	0.7
Kalibrované počáteční	A1	1.2	-----	-----	1.2	1.2	-----	-----
	A2	2.8	-----	2.8	-----	2.8	-----	-----
	mid	-----	0.65	0.65	0.65	0.65	0.65	-----
	slope	-----	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	-----
	dif_T	-----	-----	-----	-----	-----	-----	0.418*10 ⁻⁶
	dif_ref	-----	-----	-----	-----	-----	-----	0.4486*10 ⁻⁵
	D1	-----	-----	-----	-----	-----	-----	1
	D2	-----	-----	-----	-----	-----	-----	0.38
Nakalibrované hodnoty	A1	8.804	-----	-----	2.15	1.801	-----	-----
	A2	10.49	-----	1.5	-----	1.848	-----	-----
	mid	-----	0.3509	0.3982	0.3971	0.4184	0.3434	-----
	slope	-----	0.3551*10 ⁻¹	0.6702*10 ⁻³	0.5585*10 ⁻³	0.5498*10 ⁻²	0.4249*10⁻¹	-----
	dif_t	-----	-----	-----	-----	-----	-----	0.3985*10 ⁻⁶
	dif_ref	-----	-----	-----	-----	-----	-----	0.342*10 ⁻¹⁰
	D1	-----	-----	-----	-----	-----	-----	0.4212
	D2	-----	-----	-----	-----	-----	-----	1.316
Původní reziduum	0.41257*10¹⁰							0.12287*10 ¹²
Reziduum po kalibraci	0.30455*10 ⁹	0.24331*10 ⁹	0.24718*10 ⁹	0.26941*10 ⁹	0.46939*10 ⁹	0.24719*10⁹	0.12243*10 ¹²	



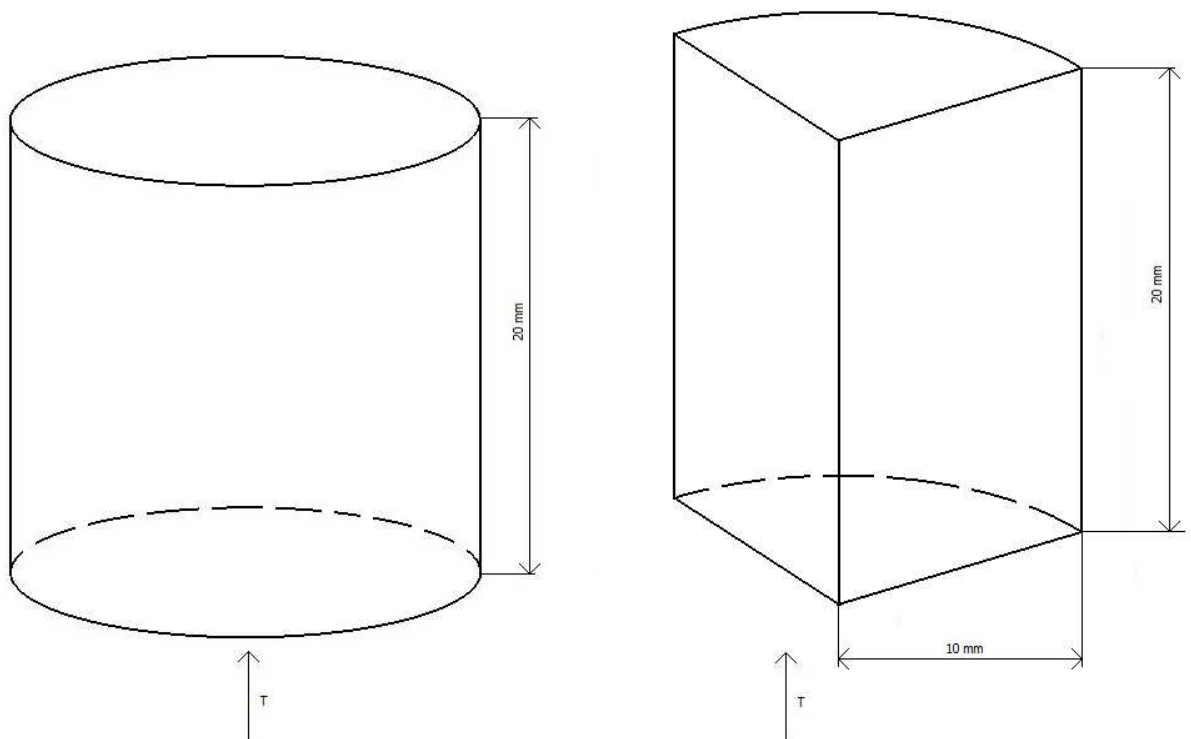
Obrázek 6: porovnání součinitelů tepelné vodivosti z kalibrovaných hodnot a z hodnot experimentu



Obrázek 7: Porovnání difúzního koeficientu vodních par před a po kalibraci

4.5 Popis 3D modelu

V tomto modelu jsme aproximovali válec na část válce (obrázek 8). Tato aproximace nám dovoluje sledování dalších parametrů. Konkrétně se zaměříme na odvod tepla (ztráty) boční stěnou (plášťem) válce. Tuto vlastnost bude zajišťovat Newtonova okrajová podmínka, která definuje na plášť válce danou hodnotu potenciálu a koeficientem přestupu (CylinderNewtonT). V kalibracích jsou používány dvě varianty 3D modelu. První varianta je bez bočního chlazení tj. CNT=0, kterou využíváme při ověření správného převodu do 3D prostoru. Druhá varianta modelu je s chlazením tj. CNT=1000. Druhá varianta je použita při kalibracích parametrů. Další okrajová podmínka je také Newtonova (PlaneNewtonT). Ta udává, jaký potenciál bude na celé ploše. Ostatní vstupní podmínky (data) a závislosti jsou stejné jako v minulé úloze.

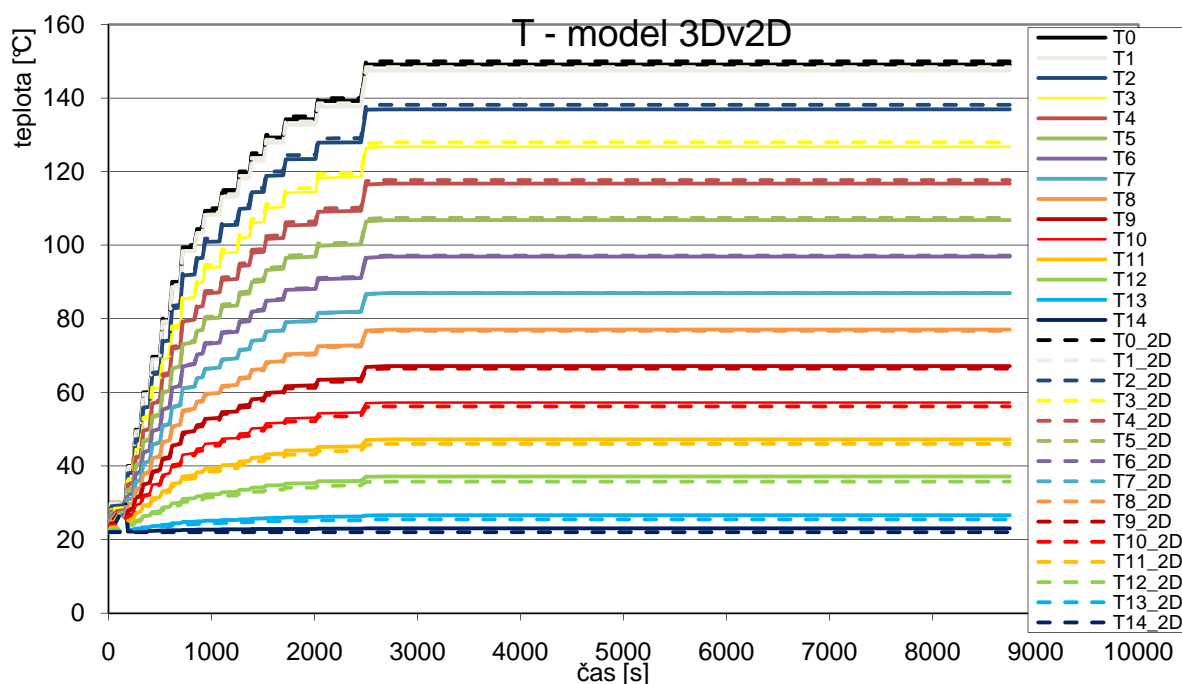


Obrázek 8: aproximace experimentu ve 3D modelu

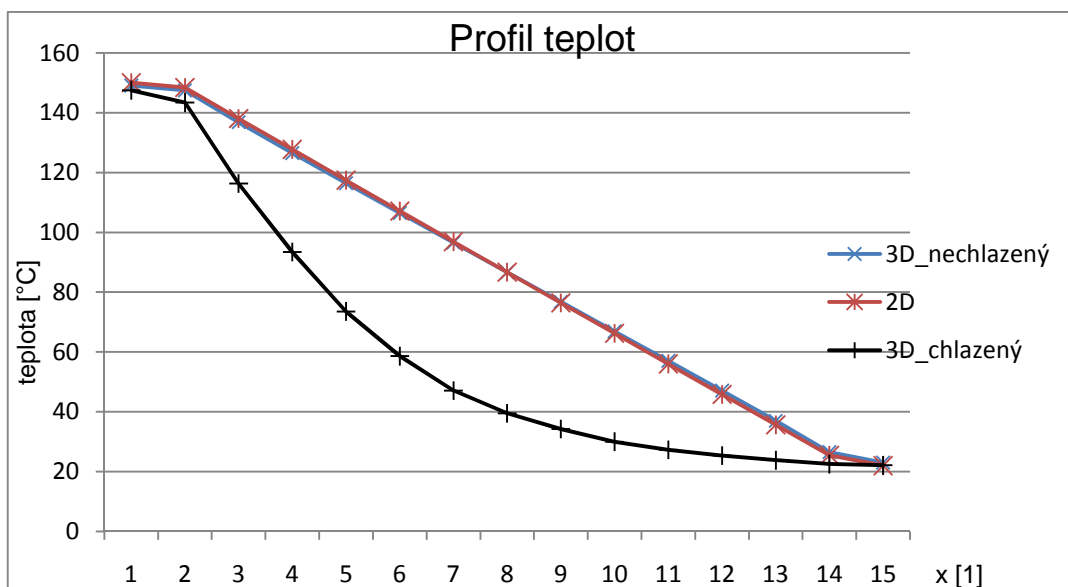
Výběr hodnot pro kalibraci jsou samozřejmě stejné, abychom mohli porovnat výsledky ze 2D a 3D modelu.

4.6 Porovnání 2D a 3D modelu

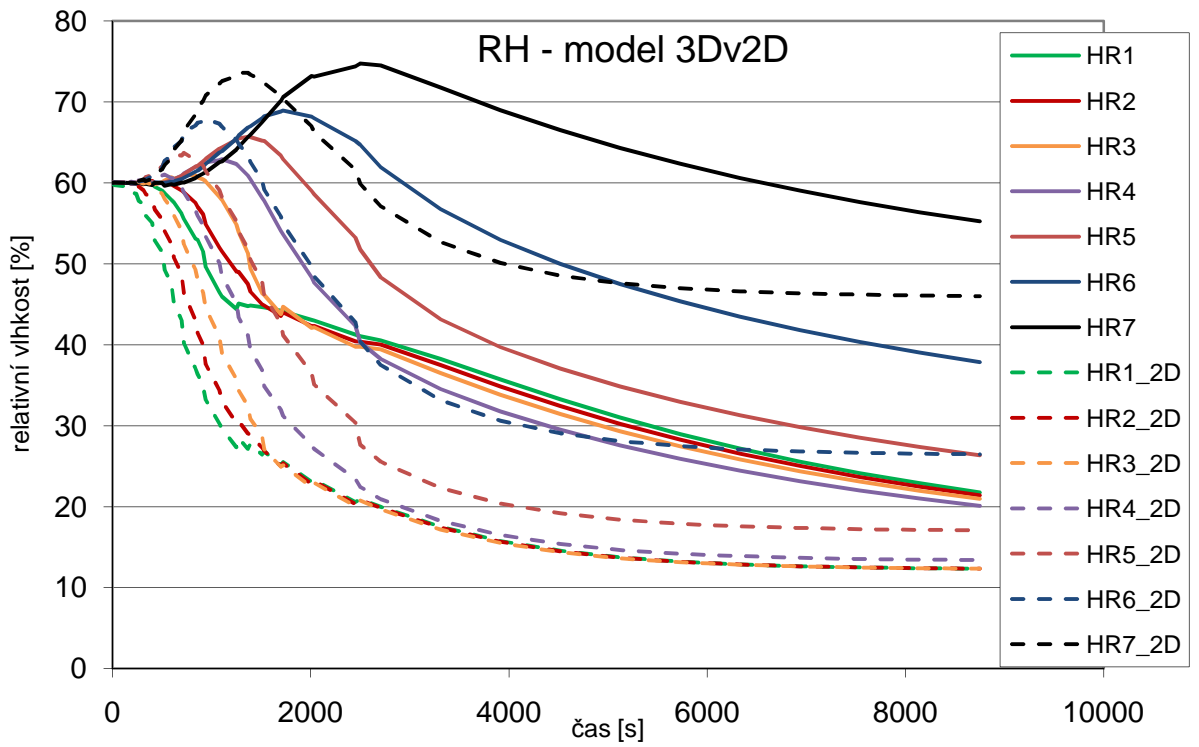
Po vytvoření 3D modelu bylo potřeba ověřit správnost modelu. Bez zavedení bočních ztrát by se měl model chovat stejně jako ve 2D úloze. V příloženém grafu (obrázek 9) je vidět, že se oba modely téměř shodují. Z grafu profilů je vidět, že 3D profil není lineární, z toho také vyplývá, že nejsou jednotlivé průběhy u sebe.



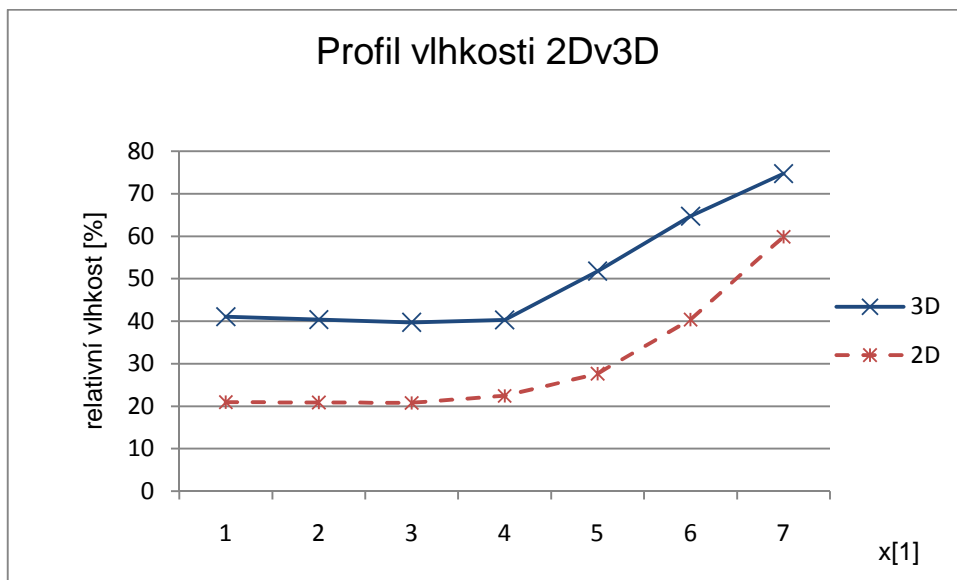
Obrázek 9: Porovnání teplot ve 2D a 3D modelu



Obrázek 10: Porovnání profilů teplot 2D modelu, 3D modelu nechlazeného a 3D modelu s chlazením



Obrázek 11: porovnání vlhkostí ve 2D a 3D modelu



Obrázek 12: porovnání profilů vlhkosti 2D a 3D

4.7 Výsledky kalibrací 3D modelu

Následující kalibrace navazují pouze na dobré výsledky ze 2D úlohy. Nejprve jsme začali s kalibrací koeficientu u okrajové podmínky CylinderNewtonT (v programu jako CNT). Kalibrace tohoto parametru byla provedena při konstantních materiálových parametrech a na celém přechodovém jevu teploty. Jako pevné počáteční podmínky jsme zvolili PlaneNewtonT (PNT=1), měrná tepelná kapacita bentonitu ($C_v=2000$), součinitel tepelné vodivosti ($\lambda=1.64$), difúzní koeficient vodních par ($Da=0.43 \cdot 10^{-5}$) a koeficient rychlosti výměny vody mezi vzduchem a pevnou fází ($\gamma=1.6$). Počáteční hodnota koeficientu okrajové podmínky je 1000. Tato hodnota odpovídá velkému bočnímu chlazení. Z kalibrace koeficientu okrajové podmínky, který zde vyjadřuje míru odvodu tepla (ztráty), můžeme vyvodit závěr, že model bez bočního (s malým) chlazením má mnohem lepší vlastnosti než model s (mnohem větším) bočním chlazením.

Další kalibrací byl konstantní difúzní koeficient vodních par. Ještě před samotnou kalibrací tohoto koeficientu jsme se rozhodli ověřit zda koeficient rychlosti výměny vody mezi vzduchem a pevnou fází má stále stejné vlastnosti jako u 2D. Po opětovném pozorování jsme dospěli k závěru, že vlastnosti tohoto koeficientu se nezměnili, a proto zůstala hodnota $\gamma=1.6$. Po tomto ověření jsme se pustili do kalibrace samotného difúzního koeficientu. Další parametry, které jsme kalibrovali, byly nelineární tepelná vodivost a nelineární difúzní koeficient vodních par.

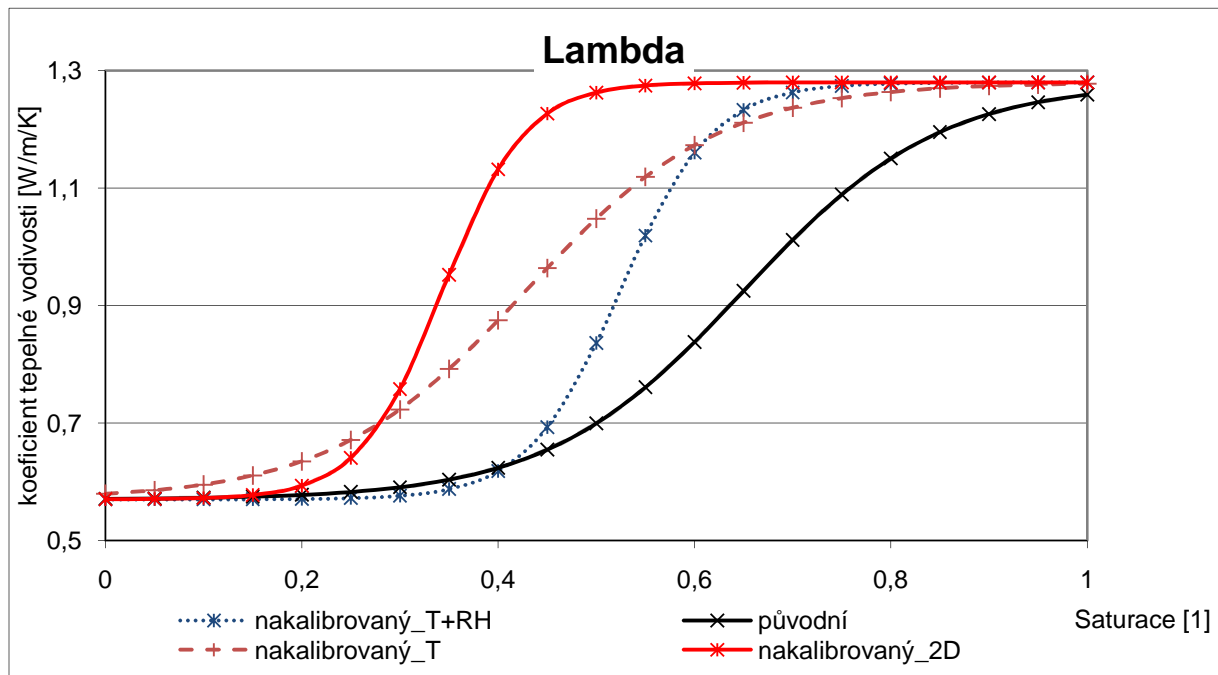
Dále jsme kalibrovali nelineární tepelnou vodivost. Jako fixní parametry pro tuto optimalizaci jsme využili nakalibrované parametry z kalibrace nelineární tepelné vodivosti z teploty. Na obrázku 13 je porovnání jednotlivých kalibrací nelineární tepelné vodivosti. Jak vidíme, po provedení kalibrace z teploty došlo pouze k tomu, že střed přechodu se posunul blíže k nule. Strmost přechodu je téměř stejná. Kalibrace provedená na teplotě i vlhkosti vyšli mnohem lépe. Přechod je téměř v polovině, což není zas tak důležité, ale jak vidíme, strmost přechodu je výrazně vyšší. Z porovnání nakalibrovaných koeficientů 2D a 3D je vidět, že strmost přechodu je téměř stejná. V čem se hlavně liší, je hodnota středu přechodu.

U kalibrace nelineárního difúzního koeficientu vodních par byly použity jako fixní parametry nakalibrované hodnoty z nelineární tepelné vodivosti. Použité hodnoty fixních a kalibrovaných parametrů jsou v tabulce 10. Opět pro přehlednou prezentaci výsledků jsme jeden závislý parametr (teplotu) dali konstantní. Na obrázku 14 vidíme porovnání kalibrací

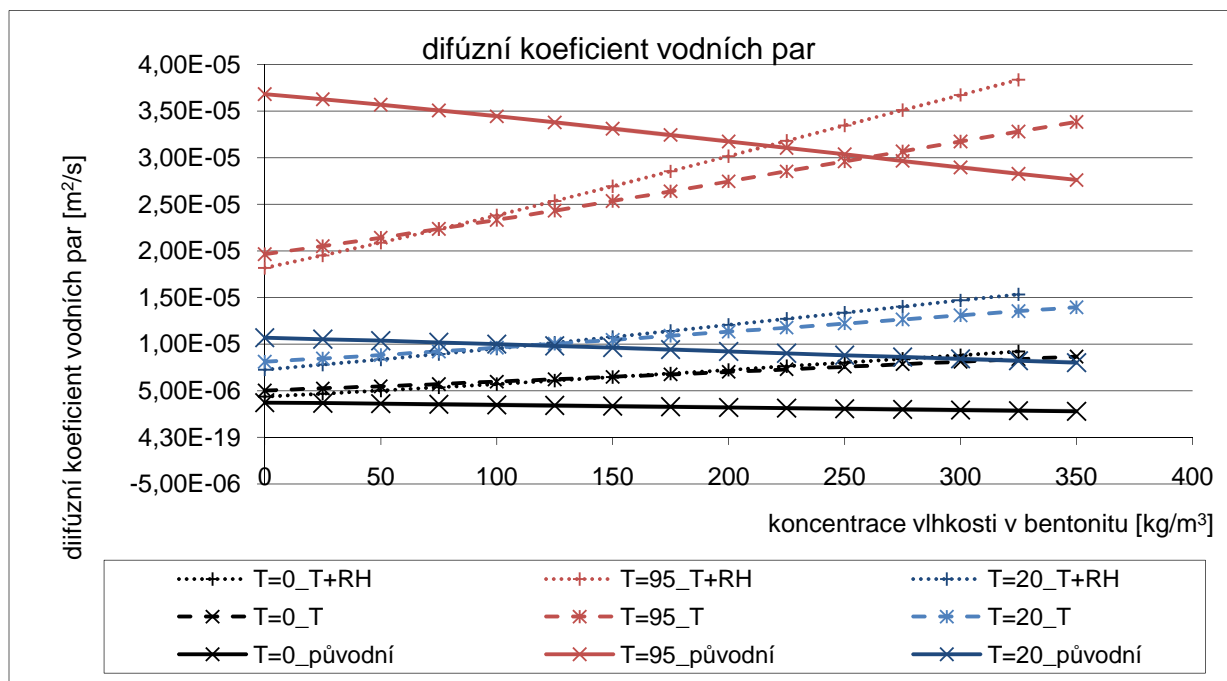
difúzního koeficientu vodních par. V tabulce 10 jsou vypsány jednotlivé kalibrace, které jsme na 3D modelu provedli.

Tabulka 10: Kalibrace provedené na 3D modelu

		Okrajová podmínka	konstantní difúzní koeficient vodních par	nelineární tepelná vodivost z teploty	nelineární tepelná vodivost z teploty i vlhkosti	nelineární difúzní koeficient vodních par z teploty	nelineární difúzní koeficient vodních par z teploty i vlhkosti
Fixní hodnoty	PNT	1	1	1	1	1	1
	Cv	2000	2000	2000	2000	2000	2000
	λ	1.64	1.64	-----	-----	-----	-----
	γ	1.6	1.6	1.6	1.6	1.6	1.6
	Da	$0.43 \cdot 10^{-5}$	-----	-----	$0.577 \cdot 10^{-5}$	-----	-----
	A1	-----	-----	0.57	0.57	0.57	0.57
	A2	-----	-----	1.28	1.28	1.28	1.28
	mid	-----	-----	-----	-----	0.4282	0.4282
	slope	-----	-----	-----	-----	$0.9927 \cdot 10^{-1}$	$0.9927 \cdot 10^{-1}$
	rdif_mid	-----	-----	-----	-----	0.7	0.7
rdif_slope	-----	-----	-----	-----	0.7	0.7	
Kalibrované počáteční hodnoty	CNT	1000	1000	1000	1000	1000	1000
	Da	-----	$0.43 \cdot 10^{-5}$	-----	-----	-----	-----
	mid	-----	-----	0.65	0.4282	-----	-----
	slope	-----	-----	0.1	$0.9927 \cdot 10^{-1}$	-----	-----
	dif_T	-----	-----	-----	-----	$4.18 \cdot 10^{-7}$	$0.3042 \cdot 10^{-6}$
	dif_ref	-----	-----	-----	-----	$4.48 \cdot 10^{-6}$	$0.9947 \cdot 10^{-5}$
	D1	-----	-----	-----	-----	1	0.2239
D2	-----	-----	-----	-----	0.38	1.299	
Nakalibrované hodnoty	CNT	$0.2739 \cdot 10^{-1}$	$0.6808 \cdot 10^{-1}$	$0.7145 \cdot 10^{-5}$	$0.1490 \cdot 10^{-4}$	1.322	7.812
	Da	-----	$0.577 \cdot 10^{-5}$	-----	-----	-----	-----
	mid	-----	-----	0.4282	0.5242	-----	-----
	slope	-----	-----	$0.9927 \cdot 10^{-1}$	$0.4749 \cdot 10^{-1}$	-----	-----
	dif_T	-----	-----	-----	-----	$0.3042 \cdot 10^{-6}$	$0.3633 \cdot 10^{-6}$
	dif_ref	-----	-----	-----	-----	$0.9947 \cdot 10^{-5}$	$0.109 \cdot 10^{-4}$
	D1	-----	-----	-----	-----	0.2239	$0.1731 \cdot 10^{-1}$
D2	-----	-----	-----	-----	1.299	1.441	
Původní reziduum		$0.71117 \cdot 10^{11}$	$0.92133 \cdot 10^{11}$	$0.7573 \cdot 10^{11}$	$0.7573 \cdot 10^{11}$	$0.1522 \cdot 10^{12}$	$0.23827 \cdot 10^{12}$
Reziduum po kalibraci		$0.60833 \cdot 10^9$	$0.51582 \cdot 10^{11}$	$0.17253 \cdot 10^{10}$	$0.47436 \cdot 10^{11}$	$0.12656 \cdot 10^{12}$	$0.23109 \cdot 10^{12}$



Obrázek 13: Porovnání původního koeficientu tepelné vodivosti s nakalibrováním 3D a s nakalibrováním 2D



Obrázek 14: Porovnání původního koeficient vodních par s nakalibrováním pro jednotlivé teploty

5 Závěr

Cílem této práce byla kalibrace parametrů 2D modelu a jejich vliv na vlastnosti modelu. Dále bylo úkolem tuto úlohu převést do 3D prostoru, nakalibrovat parametry modelu a porovnat výsledky kalibrací 2D a 3D modelu. Jelikož je programové prostředí ISERIT stále ve vývoji, nastaly občas menší problémy, které jsme brzy vyřešili.

Převést 2D úlohu na 3D se povedlo velice dobře, jak je vidět na porovnání obou úloh. Při kalibracích některých parametrů jsme zjistili, že na vlastnosti modelu nemají moc velký vliv. Porovnáním nakalibrovaných parametrů 2D modelu, 3D modelu s původními je vidět jak se zlepšila shoda model-meření.

V další fázi bude nutné zjistit, jak se chová model s přítokem vody.

Seznam použité literatury:

- [1] České vysoké učení technické, fakulta stavební, centrum experimentální geodetiky(CEG). Bentonit. URL:< http://ceg.fsv.cvut.cz/CZ/ceg-uvod/03_bentonit.htm>
- [2] České vysoké učení technické, fakulta stavební, centrum experimentální geodetiky(CEG). Úvod. URL:< http://ceg.fsv.cvut.cz/CZ/ceg-uvod/01_uvod.htm>
- [3] Hokr Milan. Provedení modelových výpočtů v rámci projektu EBS a účast při jeho hodnocení: Průběžná zpráva – výstup č.4<EBS_SURAO_DZ4_071211.pdf>
- [4] Hokr Milan, Fryfrych Dalibor. ISERIT: Uživatelská příručka. 2008 <Iserit_User.pdf>
- [5] Poeter Eileen P., Mary C. Hill, Edward R. Banta, Steffen Mehl, and Steen Christensen. UCODE_2005 and Six Other Computer Codes for Universal Sensitivity Analysis, Calibration, and Uncertainty Evaluation. 01/2008 < UCODE_2005_Manual_USGS-TM6-A11_updated-2008-01-09.pdf >
- [6] Správa úložišť radioaktivních odpadů. Hlubinné úložiště URL:< <http://www.surao.cz/>>
- [7] Woller F. Zkrácená závěrečná zpráva sdružení GEOBARIÉRA. 02/2006. URL:< http://proe.cz/cd_surao/>,<geobariera_zkracena_verze_woller_060518.pdf>
- [8] Task Force on Engineered Barrier System (EBS) TASK 1. SPECIFICATION OF BENCHMARK THM 1.1: BENTONITE THM MOCK-UP EXPERIMENTS PERFORMED BY CEA . 04/2005 < THM Benchmark 1 1.doc >