



核废料地质处置近场热—水—应力—迁移耦合二维有限元分析

张玉军

(中国科学院武汉岩土力学研究所, 湖北 武汉 430071)

摘要: 引入渗透迁移方程, 将所开发的饱和—非饱和孔隙介质中热—水—应力耦合弹塑性模型及其二维有限元程序进行了扩展和改进, 使之可以同步地对温度场、渗流场、应力场和放射性核素浓度场的变化进行解析。然后针对一个假想的核废料处置库算例, 考察了在热—水—应力—迁移耦合作用条件下近场温度、孔隙水压力及放射性核素浓度的分布及变化。

关键词: 放射性核素; 浓度; 热—水—应力—迁移耦合; 二维有限元分析

中图分类号: TV131

文献标识码: A

文章编号: 1000-4548(2007)10-1553-05

作者简介: 张玉军(1956-), 男, 工学博士, 研究员, 主要从事岩石力学与工程方面的研究工作。E-mail: yjzhang@whrsm.ac.cn。

2D FEM analysis for coupled thermo-hydro-mechanical-migratory process in near field of geological disposal of nuclear waste

ZHANG Yu-jun

(Institute of Rock and Soil Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Wuhan 430071, China)

Abstract: The elastoplastic model and the relative 2D FEM code were extended and improved to analyze coupled thermo-hydro-mechanical process in saturated-unsaturated porous media through introducing the percolation and migration equation, so that the code could be used for solving the temperature field, flow field, stress field and nuclide concentration field at the same time. Then through a computation example of an assumed nuclear waste repository the distribution and variation of temperature, pore pressure and nuclide concentration in the near field were investigated under the condition of thermo-hydro-mechanical-migratory coupling.

Key words: radioactive nuclide; concentration; thermo-hydro-mechanical-migratory coupling; 2D FEM analysis

0 引言

装有高放射性核废料的不锈钢容器被埋入地下约500~1000 m深的坑道内后, 就形成了由里向外由玻璃固化体、包装容器、缓冲层及岩体组成的四重屏障, 它们起着阻滞放射性核素外泄及迁移的作用。然而经过漫长的年代后, 地下水还是将渗透通过缓冲层而抵达包装容器。在一个非常复杂的物理、化学及力学环境中, 包装容器最终会破损, 使得放射性核素随地下水流动扩散到周围岩体中, 乃至进入生物圈, 对人类环境造成严重影响。对此应该进行认真研究。一般而言, 地下水中物质运动的解析模型可用渗透迁移方程来描述。在渗透迁移方程中, 包含了渗透与扩散两个性质相异的项。当地下水的流速较低时扩散起支配作用, 其方程表现出强抛物线性质, 而地下水的流速较

高时渗透成了控制因素, 其方程具有强双曲线特征。由此可知, 要确定地下水中放射性核素的浓度, 就必须知道地下水的流速。然而, 在高放射性核废料地质处置的热—水—应力耦合过程中, 地下水的流速与温度场和应力场有密切的关系, 但是目前人们在地下水中放射性核素迁移的研究中还很少涉及温度场和应力场的影响^[1-2]。针对这一问题, 笔者首先引入渗透迁移方程, 将所开发的饱和—非饱和孔隙介质中热—水—应力耦合弹塑性模型进行了扩展^[3], 使之能同时表现放射性核素的迁移, 并对相应的二维有限元程序作了改进, 从而可以同步地对温度场、渗流场、应力场和

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(50578171); 国家自然科学基金重点资助项目(50239070)

收稿日期: 2006-09-27

放射性核素浓度的变化进行解析。然后针对一个假想的核废料处置库算例,考察了于一个较短时期内在热—水—应力—迁移耦合作用条件下近场温度场、孔隙水压力场及放射性核素浓度的分布及变化,并得出相应的认识。

1 热—水—应力—迁移耦合模型

该模型适用的介质为各向同性、均质连续且处于饱和-非饱和状态并有膨胀力的孔隙介质。根据有关的理论^[4-8],笔者已推得了热—水—应力耦合分析的控制方程^[3]。现增加考虑缓冲层中温度梯度水分扩散、水蒸汽扩散对水连续性及能量守恒的影响,对所建立模型作了进一步完善。对于热—水—应力—迁移耦合分析中所使用的改进后及引入的各控制方程列举如下。

1.1 应力平衡方程

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \delta \varepsilon^T \mathbf{D}_T \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} d\Omega - \int_{\Omega} \delta \varepsilon^T \mathbf{m} [s_w \gamma_w \frac{\partial h}{\partial t} + \\ & (h-z) \gamma_w^2 D_s \frac{\partial h}{\partial t}] d\Omega + \int_{\Omega} \delta \varepsilon^T \mathbf{D}_T \mathbf{m} A \frac{\partial h}{\partial t} \frac{1}{3} d\Omega + \\ & \int_{\Omega} \delta \varepsilon^T \mathbf{D}_T \frac{\mathbf{m}}{3k_s} [s_w \gamma_w \frac{\partial h}{\partial t} + (h-z) \gamma_w^2 D_s \frac{\partial h}{\partial t}] d\Omega - \\ & \int_{\Omega} \delta \varepsilon^T \mathbf{D}_T \mathbf{m} \frac{\beta_s}{3} \frac{\partial T}{\partial t} d\Omega - \frac{\partial f}{\partial t} = 0 \end{aligned} \quad (1)$$

式中, $\mathbf{D}_T$ 为切线弹塑性模量矩阵; $d\varepsilon$ 为总应变增量; $\mathbf{m}$ 为法向应力单位列阵; s_w 为饱和度; γ_w 为水的容重; h 为全水头; z 为位置水头; $D_s = \partial s_w / \partial p_w$ 为湿气容量 (moisture capacity); p_w 为孔隙水压力; $A = k s_w^{k-1} / (k_s \phi) \cdot F_{w \max} d\theta / d\psi$ 为膨胀力计算项; k 为经验常数; K_e 为孔隙介质的体积模量; ϕ 为孔隙度; $F_{w \max}$ 为最大膨胀应力,其由试验确定; θ 为体积含水率; $\psi = h - z$; K_s 为固相的压缩模量; β_s 为固相的热膨胀系数; dT 为温度增量; df 为外荷载增量。

1.2 水连续性方程

根据质量守恒原理,在 dt 时段内流入某一物体的水量应等于其内部储水量的增加。经过一系列的推导,可得出水的连续性方程为

$$\begin{aligned} & -\nabla^T \left\{ \frac{\mathbf{K} \mathbf{r}_w}{\mu_w} \nabla h \right\} + s_w \left(\mathbf{m}^T - \frac{\mathbf{m}^T \mathbf{D}_T}{3k_s} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \\ & \gamma_w \left\{ D_s \phi + \frac{\varphi s_w}{k_w} + s_w \left(\frac{1-\phi}{k_s} - \frac{1}{(3k_s)^2} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{m} \right) [s_w + \right. \\ & (h-z) \gamma_w D_s] \frac{\partial h}{\partial t} - \{ \phi s_w \beta_w + s_w [(1-\phi) \beta_s - \\ & \left. \frac{\mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{m}}{3k_s} \frac{\beta_s}{3}] \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla^T \mathbf{D}_T \nabla T = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

式中 $\mathbf{K}$ 为固有渗透系数矩阵; $\mathbf{r}_w$ 为比渗透系数矩阵,其是 s_w 的函数; μ_w 为水的黏滞系数; k_w 为水的

压缩模量; β_w 为水的热膨胀系数; D_t 为温度梯度水分扩散系数。

1.3 能量守恒方程

根据能量守恒原理,在 dt 时段内流入某一物体的热量应等于其内能的增加。经过推导可得出能量守恒方程为

$$\begin{aligned} & -\nabla^T \lambda \nabla T + \phi s_w \rho_w C_w (\nabla^T T) \mathbf{V}^a + [(1-\phi) C_s T \frac{\rho_s}{K_s} + \\ & \phi C_w T \frac{\rho_w}{K_w}] (s_w + D_s \gamma_w (h-z)) \gamma_w \frac{\partial h}{\partial t} - \\ & \{ (1-\phi) C_s T \rho_s \beta_s + \phi C_w T \rho_w \beta_w - [(1-\phi) \rho_s C_s + \\ & \phi \rho_w C_w] \} \frac{\partial T}{\partial t} + L \nabla^T \{ D_{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial \psi} \nabla (h-z) \} = 0 \end{aligned} \quad (3)$$

式中 C_w , C_s 分别是水及岩土介质的比热; $\rho_w C_w$, $\rho_s C_s$ 分别是水及岩土介质的热容量; λ 为岩土介质的导热系数矩阵; $\mathbf{V}^a$ 为水流的表现速度; L 是水蒸汽的潜热; D_{θ} 为水蒸汽扩散系数。

1.4 渗透迁移方程

根据参考文献[9],有渗透迁移方程如下:

$$\begin{aligned} R \theta \rho \frac{\partial c}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta \rho \mathbf{D}_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j}) - \theta \rho \mathbf{V}_i \frac{\partial c}{\partial x_i} - \\ & R \theta \rho \lambda c - Q_c \end{aligned} \quad (4)$$

式中 $R = V / V^* = (1 + \rho_d K_d / \theta)$, 其为阻滞系数; V 为地下水流表现速度; V^* 为放射性核素输运速度; ρ_d 为岩土介质的干密度; K_d 为对饱和土的分配系数; θ 为体积含水量; ρ 为流体密度; $\mathbf{D}_{ij}$ 为扩散张量; c 为溶质浓度; $\mathbf{V}_i$ 为地下水表现流速矢量; λ 为衰减常数, Q_c 为源汇项。

而扩散张量可表示为

$$\mathbf{D}_{ij} = \alpha_T |V| \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) V_i V_j / |V| + \alpha_m \tau \delta_{ij} \quad (5)$$

式中, α_T 为横向弥散度; α_L 为纵向弥散度; $|V|$ 为表现流速的绝对值; α_m 为分子扩散系数; τ 为曲折率; δ_{ij} 为克罗内克符号。

2 有限元格式的建立

2.1 空间域离散

使用 Galerkin 方法,对前述的四个控制方程进行空间域离散,整理可得

$$\left. \begin{aligned} & \mathbf{K} \frac{d\bar{\mathbf{u}}}{dt} + \mathbf{C} \frac{d\bar{\mathbf{h}}}{dt} + \mathbf{I} \frac{d\bar{\mathbf{T}}}{dt} = \mathbf{d\bar{f}} \\ & \mathbf{E} \frac{d\bar{\mathbf{u}}}{dt} + \mathbf{F} \bar{\mathbf{h}} + \mathbf{G} \frac{d\bar{\mathbf{h}}}{dt} + \mathbf{M} \bar{\mathbf{T}} + \mathbf{L} \frac{d\bar{\mathbf{T}}}{dt} = \hat{\mathbf{f}} \\ & \mathbf{P} \frac{d\bar{\mathbf{h}}}{dt} + \mathbf{Q} \bar{\mathbf{T}} + \mathbf{J} \bar{\mathbf{h}} + \mathbf{R} \frac{d\bar{\mathbf{T}}}{dt} = \mathbf{X} \\ & \mathbf{W} \bar{\mathbf{c}} + \mathbf{Z} \frac{d\bar{\mathbf{c}}}{dt} = \mathbf{Y} \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

式中,新增加的矩阵系数项为 W 和 Z ,其余矩阵系数项可参见文献[3]。

2.2 时间域离散

可将式(6)变为如下迭代求解方程

$$\begin{bmatrix} K & C & I & 0 \\ E & G+\alpha F\Delta t_k & L+\alpha M\Delta t_k & 0 \\ 0 & P+\alpha J\Delta t_k & R+\alpha Q\Delta t_k & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Z+\alpha W\Delta t_k \end{bmatrix}_{k,\alpha} \begin{Bmatrix} \bar{u} \\ \bar{h} \\ \bar{T} \\ \bar{c} \end{Bmatrix}_{t_k+\Delta t_k} = \begin{bmatrix} K & C & I & 0 \\ E & G-(1-\alpha)F\Delta t_k & L-(1-\alpha)M\Delta t_k & 0 \\ 0 & P-(1-\alpha)J\Delta t_k & R-(1-\alpha)Q\Delta t_k & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Z-(1-\alpha)W\Delta t_k \end{bmatrix}_{k,\alpha} \begin{Bmatrix} \bar{u} \\ \bar{h} \\ \bar{T} \\ \bar{c} \end{Bmatrix}_{t_k} + \begin{Bmatrix} \frac{\partial f}{\partial t} \\ \hat{f} \\ X \\ Y \end{Bmatrix}_{k,\alpha} \Delta t_k \tag{7}$$

3 算 例

如图 1 所示,有一个圆柱状核废料玻璃固化体被埋入地下 500 m 处,其周围充填有非饱和的缓冲材料。作为近似简化,认为这是一个平面应变问题。取计算域尺寸为水平向 4 m,垂直向 8 m,有 800 个单元,861 个节点。其顶面水头 100 m,岩体是饱和介质。经过一个长时期后,由于来自围岩中地下水的浸润,缓冲材料达到饱和,并且核废料包装容器被腐蚀损坏,开始以恒定的浓度及速率向近场泄漏放射性核素。以此时为计算起点,并假设域内温度为 20°C (均匀分布),玻璃固化体为源项,扩散强度为 $Q_c/\rho=7.0\times10^{-4}\text{ mol/m}^3\cdot\text{s}$ (ρ 为水的密度),并继续以 500 W 的功率散热。对于边界条件,计算域的上、下端面温度和水头固定,左、右侧面则是绝热与不透水。不考虑伴随开挖发生的围岩中应力重分布和水压变化,并取温度梯度水分扩散系数 D_l 和水蒸汽扩散系数 D_{0v} 均为 0 值。岩体、玻璃固化体及缓冲材料的主要物理力学参数见表 1。

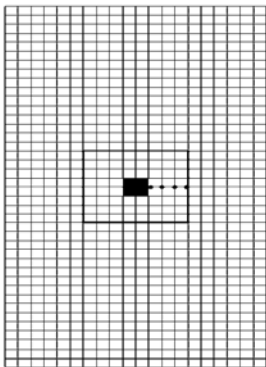


图 1 有限元网格(向右的点号依次为 432、433、434、435、436)
Fig. 1 FEM mesh (the point numbers are 432, 433, 434, 435 and 436 towards the right)

参考文献[9],假定与某种放射性核素的渗透迁移计算有关的参数如下

曲折率 $\tau=0.4$,纵向弥散度 $\alpha_L=1.0\text{ m}$,横向弥散度 $\alpha_T=\alpha_L/10$,分子扩散系数 $\alpha_m=20.0\times10^{-10}\text{ m}^2/\text{s}$,分配系数 $K_d=80.1\text{ mL/g}$ (缓冲材料)、 58.3 mL/g (岩体),衰减常数 $\lambda=\ln 2/T_{\text{half}}$,其中 T_{half} 是放射性核素的半衰期,依次取为 10, 100 和 1000 a。

计算所模拟的时间为 1150 d (假定玻璃固化体的发热功率不变)。所得主要结果如下

1000 d 时近场(缓冲层内)温度等值线见图 2,对应于图 1 中若干特征点终了时的温度值依次上升到 23.48°C (432 点)、23.37°C (433 点)、23.31°C (434 点)、23.28°C (435 点)和 23.28°C (436 点)。由于加热效应,使得近场的渗流场也发生一定的变化,相应的孔隙水压力等值线见图 3,若干特征点终了时其总水头值依次增加到 106.1 m (432 点)、105.3 m (433 点)、104.5 m (434 点)、103.4 m (435 点)和 103.2 m (436 点)。

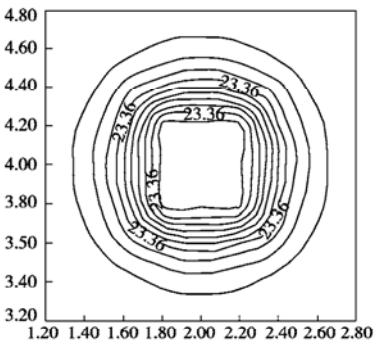


图 2 温度等值线 (1000 d)

Fig. 2 Temperature contours (1000 d)

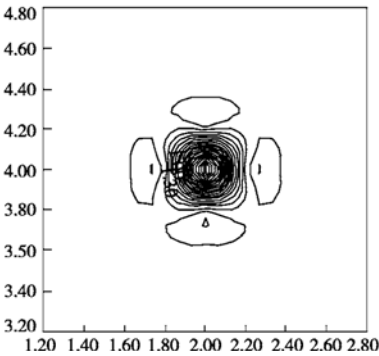


图 3 孔隙水压力等值线 (1000 d)

Fig. 3 Pore pressure contours (1000 d)

当衰减常数按放射性核素半衰期为 10 a 取值时,对应于图 1 中若干特征点的浓度—时间曲线见图 4。从中看到,由于核素半衰期较短,各点的核素浓度先是增加,但其速率随时间的推移而减小,到一定时间后核素浓度开始下降,如 432 点的核素浓度在 870 d

表 1 岩体和加热器的物理力学参数

Table 1 Physical and mechanical parameters of rockmass and heater								
介质	重度 γ ($\text{kN} \cdot \text{m}^{-3}$)	孔隙率 ϕ	渗透系数 $k/(\text{m} \cdot \text{s}^{-1})$	弹性模量 E/MPa	泊松比 μ	比热 C ($\text{KJ} \cdot \text{kg}^{-1}$)	热膨胀系数 $\beta/$ ($1 \cdot \text{K}^{-1}$)	导热系数 λ ($\text{W} \cdot \text{mK}^{-1}$)
岩体	26.7	0.1	1.0×10^{-8}	3.7×10^3	0.23	1.0	8.8×10^{-5}	2.8
缓冲层	18.0	3	1.81×10^{-9}	1.3×10	0.4	0.34	9.3×10^{-5}	0.3
固化体	25.0	0.0	1.0×10^{-27}	5.3×10^3	0.21	0.7	1.5×10^{-6}	25.0

时达到最大值，为 0.182 mol/m^3 ，而到 1150 d 时下降为 0.181 mol/m^3 ；433 点的核素浓度在 100 d 时达到最大值，为 0.0161 mol/m^3 ，而到 310 d 时下降为 0.0 mol/m^3 。当衰减常数按放射性核素半衰期为 100 a 取值时，若干特征点的浓度—时间曲线见图 5。从中看到，由于核素半衰期较长，各点的核素浓度增加的速率随时间而减缓的程度较前一种情况要小，如 432 点的核素浓度在 1150 d 时仍在上升，其时达到 1.099 mol/m^3 ；433 点的核素浓度在 670 d 时达到最大值，为 0.120 mol/m^3 ，而到 1150 d 时下降为 0.081 mol/m^3 。当衰减常数按放射性核素半衰期为 1000 a 取值时，若干特征点的浓度—时间曲线见图 6。从中看到，由于核素半衰期更长，各点的核素浓度增加的速率随时间而减缓的程度较第二种情况还要小，如在 1150 d 时，432 点、433 点的核素浓度分别达到 1.686 、 0.2951 mol/m^3 ，且在所计算的时间内各点的核素浓度均是单

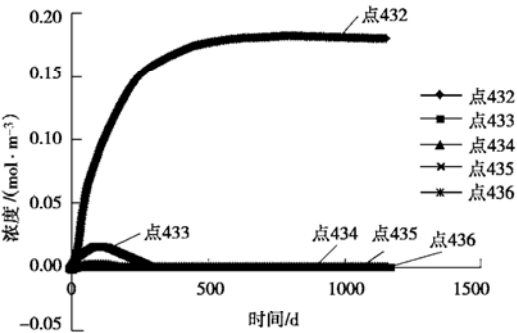


图 4 核素浓度—时间曲线（半衰期=10 a）

Fig. 4 Nuclide concentration—time curves (half life=10 years)

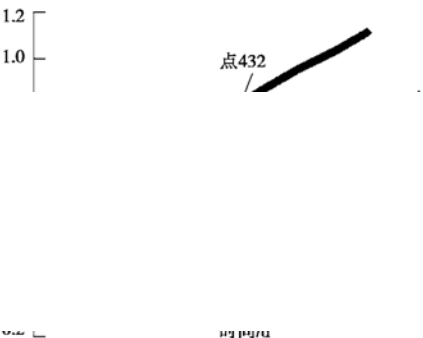


图 5 核素浓度—时间曲线（半衰期=100 a）

Fig. 5 Nuclide concentration—time curves(half life =100 years)

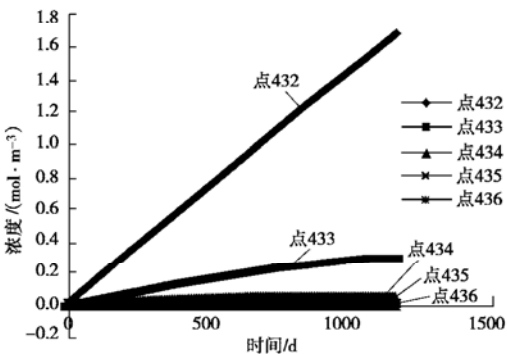


图 6 核素浓度—时间曲线（半衰期=1000 a）

Fig. 6 Nuclide concentration—time curves (half life =1000 years)

调增加。由上述现象可知，如果被地质处置的核废料发生外泄，对于其中的短半衰期放射性核素，地下水溶液中的核素浓度会较快地减弱，以至达到对生物圈无害的程度；而对于半衰期很长的放射性核素，地下水溶液中的核素浓度会长时间保持在较高的水平上，从而可能危及人类环境。

4 结 语

从前述的分析可以看到，对放射性核素在岩土介质中的迁移起引发作用的是地下水对流、分子扩散和机械弥散（表征参量为流速、扩散系数（张量）），而起阻碍作用的是吸附滞留和核素衰变（表征参量为阻滞系数和衰减常数）。其中对流、扩散和阻滞等作用与地下水的运动有密切的联系。在核废料地质处置的特殊条件下，地下水运动又与岩土体应力场和温度场相互影响、共同作用。为了精确地模拟放射性核素迁移就必须将温度场、渗流场、应力场和核素浓度场耦合分析。为此作者从建立和引入应力平衡方程、水连续性方程、能量守恒方程、溶质迁移方程和弹性矩阵

祭丁近场（缓冲材料中）孔隙水压力、温度及不同半衰期核素浓度的分布及随时间的变化。计算结果显示：在其它条件相同时，地下水溶液中的短半衰期放射性核素在迁移过程中其浓度会较快地减弱，而对于半衰

期较长的放射性核素,在迁移过程中其浓度会长时间保持在高的水平上,这在定性上与实际情况相符,故初步地验证了本程序的正确性。

参考文献:

- [1] 刘德军, 范显华, 等. ^{99}Tc 在模拟地质条件下的迁移行为研究概况[J]. 核科学与工程, 2004, **24**(1): 6 - 11. (LIU De-jun, FAN Xian-hua, et al. Survey of ^{99}Tc migrating action in simulated geological conditions[J]. Chinese Journal of Nuclear Science and Engineering, 2004, **24**(1): 6 - 11. (in Chinese))
- [2] 姚 军, 苏锡光, 龙会遵, 范显华. ^{237}Np 在膨润土中表观扩散系数的测定[J]. 核化学与放射化学, 2003, **25**(4): 190 - 203. (YAO Jun, SU Xi-guang, LONG Hui-zun, FAN Xian-hua. Determination of diffusion coefficients of ^{237}Np in bentonite[J]. Journal of Nuclear and Radiochemistry, 2003, **25**(4): 190 - 203. (in Chinese))
- [3] 张玉军. 饱和—非饱和介质热—水—应力耦合二维有限元程序分析[J]. 安全与环境学报, 2005, **5**(5): 50 - 55. (ZHANG Yu-jun. 2D FEM analysis for coupled thermo-hydro-mechanical processes in saturated-unsaturated media[J]. Journal of Safety and Environment, 2005, **5**(5): 50 - 55. (in Chinese))
- [4] LEIWS R W, SCHREFLER B A. The finite element method in the deformation and consolidation of porous media[M]. New York: John Wiley, 1987.
- [5] CHIJIMATSU M, KURIKAMI H, ITO A, et al. Subtask BMT1-B: implication of THM coupling on the near-field of a nuclear waste repository in a homogeneous rock mass[R]. DECOVALES III-Task3-Bench Mark Test 1(BMT1)- 2002: 1 - 43. Hazama Corporation, Japan.
- [6] CHIJIMATSU M, FUJITA T, KOBAYASHI A, et al. Experiment and validation of numerical simulation of coupled thermal, hydraulic and mechanical behavior in engineering buffer material[J]. Int J for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, 2000, **24**(4): 403 - 424.
- [7] CHIJIMATSU M, FUJITA T, SUGITA Y, et al. Field experiment, results and THM behavior in the Kamishi Mine experiment[J]. Int J of Rock Mechanics and Mining Sciences, 2001, **38**(1): 79 - 94.
- [8] 操上广志. 地盘における热水应力连成现象のモデル化に関する研究[D]. 京都: 京都大学, 2003. (KURIKAMI Hiroshi, Study on modeling for coupled thermo-hydro-mechanical phenomena in rock mass[D]. Kyoto: Kyoto University, 2003. (in Japanese))
- [9] NISHIGAKI Makoto. Density dependent transport analysis saturateds-unsaturated porous media - 3 dimensional eulerian lagrangian method[R]. Okayama University, 2001.