

高放废物深地质处置场近场 剂量场—温度场—水势场—应力场的耦合计算

沈珍瑶^{1,3} 杨志峰¹ 李国鼎² 李书绅³

(1. 北京师范大学环境科学研究所, 环境模拟与污染控制国家重点联合实验室, 北京 100875; 2. 清华大学环境科学与工程系, 北京 100084; 3. 中国辐射防护研究院, 太原 030006)

摘要: 回顾了高放废物处置概况, 给出了剂量场—温度场—水势场—应力场耦合研究的意义, 探讨了剂量场计算公式与热—湿—力耦合方程及其求解, 最后指出了这一领域的若干优先研究方向。

关键词: 高放废物处置; 剂量场; 温度场; 水势场; 应力场; 耦合计算。

中图分类号: X592

文献标识码: A

文章编号: 1000-2383(2000)05-0514-04

作者简介: 沈珍瑶, 男, 副研究员, 1967 年生, 1991 年毕业于中国地质大学水文系, 获硕士学位, 1998 年毕业于清华大学环境科学与工程系, 获博士学位, 主要从事水环境、水资源、核环境及三废治理等研究工作。

0 引言

高放废物的深地质处置是废物地质处置领域最具科学意义与实际价值的前沿课题。关于高放废物深地质处置的概念模型, 已有众多文献介绍^[1,2], 本文不再过多涉及, 但为了便于下文描述, 仍简要介绍处置单元的结构: 在地下 200~1 500 m 的处置库中, 固化体位于处置单元中心, 其外面为包装容器, 包装容器外为缓冲材料, 缓冲材料外为处置介质(即基岩), 这些介质共同构成了多重屏障的隔离体系。

在高放废物深地质处置的研究中, 人们发现了一些新的研究热点, 其中之一是有关耦合问题的研究, 即所谓的与高放废物深地质处置有关的耦合过程。目前人们所探讨的涉及温度场(T)、应力场(M)、水势场(H)与化学场(C)的耦合作用, 由于考虑此 4 个因素的完全耦合极为复杂, 人们倾向于对其进行割裂, 分别研究 THM, HC 及 HT 的耦合作用, 本文探讨 THM 耦合。

1 剂量场—温度场—水势场—应力场耦合研究的意义及结构

高放废物处置库热—湿—力(THM)三因素耦合关系如图 1 所示^[1]。由图可知, 热—湿—力三因素相互耦合, 不能割裂开来进行讨论。

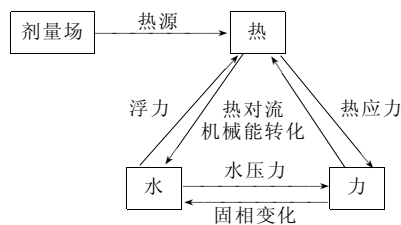


图 1 热—湿—力与剂量场耦合

Fig. 1 Sketch of thermo-hydro-mechanical-dose coupling

考虑到目前有关耦合作用的研究一般只涉及两个因素, 因此开展三因素及多因素耦合作用的研究无论对耦合研究本身还是对高放废物处置的深入了解都具有重大理论与现实意义。在进一步的讨论中, 发现高放废物处置库的热源实际上来自固化体内所含放射性核素的衰变热, 因此需研究固化体内及其周围介质场内的辐射剂量场, 这也正是本文进行的

工作.图 1 中我们在正常热—湿—力三因素相互耦合的基础上叠加了剂量场的作用,构成了剂量场—温度场—水势场—应力场的耦合图.注意到热—湿—力三因素耦合是一种双向耦合(two ways couple),而剂量场仅与温度场有关,且是一种单向耦合(one way couple).

考虑到耦合性质的差异,下文分别介绍剂量场计算公式与热—湿—力耦合方程.

2 剂量场计算公式

由于剂量场计算与高放废物中所含核素种类及其活度有关,且由于衰变,核素的活度也是随时间变化,因此先介绍活度计算问题.

2.1 放射性活度计算公式

高放废物中含有裂变产物和活化产物及 4 个衰变系列的有关核素,其活度计算公式有所差异,介绍如下:

(1)裂变产物和活化产物的活度计算公式

$$A(t)=A_0\exp[-\lambda t-(365\text{ RS}/W_0)(t/t_f)].$$

式中: $A(t)$ 为封库后 t 时刻裂变产物或活化产物的活度, Bq ; A_0 为封库时裂变产物或活化产物的活度, Bq ; λ 为核素的衰变常数, a^{-1} ; R 为浸出率常数, $\text{kg}\cdot\text{cm}^{-2}\cdot\text{d}^{-1}$; S 为固化体的浸出块面积, cm^2 ; W_0 为固化体内废物总质量, kg ; t 为封库后的时间, a ; t_f 为开始浸出的时间, a .

(2)铀、钍同位素, 锕系核素及其子体核素的活度计算公式

$$A_n(t)=\lambda_n\sum_{i=1}^n\left\{\left(\prod_{l=i}^{n-1}k_{l,l+1}\right)\cdot\sum_{j=i}^n\frac{A_i(0)\exp[-\lambda_jt-(365R_jS/W_0)(t/t_f)]}{\lambda_i\prod_{p=i,\text{ }p\neq j}(\lambda_p-\lambda_j)}\right\}.$$

式中: $A_n(t)$ 为封库后 t 时刻衰变链中第 n 个核素活度, Bq ; $A_i(0)$ 为封库时该链中第 i 个核素活度, Bq ; $\lambda_n, \lambda_i, \lambda_p, \lambda_j$ 为核素的衰变常数, a^{-1} ; $k_{l,l+1}$ 为该衰变链中第 l 个核素衰变成第 $l+1$ 个核素的分支比.

2.2 α, β 剂量场计算公式

α, β 粒子由于穿透性极差, 可以认为只局限于固化体内, 且可假定其处于辐射平衡, 则其计算公式为

$$D_{\alpha,\beta}(t)=5.76\times10^{-10}\sum_{j=1}^m(E_{\alpha,j}+E_{\beta,j})A_j(t).$$

式中: $D_{\alpha,\beta}(t)$ 为封库后 t 时刻固化体内 α, β 的辐射剂量率, $\text{Gy}\cdot\text{h}^{-1}$; m 为考虑的核素个数; $E_{\alpha,j}$ 为固化体内第 j 种核素每次衰变释放的 α 有效能量, MeV ; $E_{\beta,j}$ 为固化体内第 j 种核素每次衰变释放的 β 平均有效能量, MeV ; $A_j(t)$ 为封库后 t 时刻第 j 种核素的比活度, $\text{Bq}\cdot\text{kg}^{-1}$; 系数 5.76×10^{-10} 为 $\text{MeV}\cdot\text{Bq}\cdot\text{kg}^{-1}$ 转化为 $\text{Gy}\cdot\text{h}^{-1}$ 的转换系数.

2.3 γ 剂量场计算公式

γ 辐射剂量场的计算应考虑其在固化体内的自吸收、自散射及在包装容器、缓冲材料与处置介质中的衰减与散射, 其计算公式为

$$D_\gamma(r_0,z_0,t)=2\sum_{i=1}^m\sum_{j=1}^q\int_{-h_1/2}^{h_1/2}\text{d}z\int_0^{r_1}r\text{d}r\int_0^\pi F(i,j,r,\theta,z,r_0,z_0,t)\text{d}\theta.$$

式中: $D_\gamma(r_0,z_0,t)$ 为点 $P_0(r_0,z_0)$ 在封库后 t 时刻的吸收剂量率, $\text{Gy}\cdot\text{h}^{-1}$; i 为固化体内的第 i 种核素; j 为核素 i 之 γ 能谱的分组编号 (q 为分组数); h_1 为固化体之高度, m ; r_1 为固化体之半径, m . 其中

$$F(i,j,r,\theta,z,r_0,z_0,t)=f(i,j,k)\cdot$$

$$B\left\{\sum_{l=1}^k[\mu(i,j,l)\cdot r(l)]\right\}\cdot D(i,j,r,\theta,z,r_0,z_0,t),$$

上式中 $f(i,j,k)$ 为剂量单位换算因子, $\text{Gy}\cdot\text{R}^{-1}$;

$B\left\{\sum_{l=1}^k[\mu(i,j,l)\cdot r(l)]\right\}$ 为多层屏蔽 γ 通量累积因子, 无量纲; $D(i,j,r,\theta,z,r_0,z_0,t)$ 为废物固化体体元中核素 i 的第 j 组 γ 射线在计算点 $P_0(r_0,z_0)$ 处产生的照射量率, $\text{R}\cdot\text{h}^{-1}$. 上述三式的具体计算公式不再给出, 可参考文献[2].

有关核素基本性质参数及相关的其他参数可由参考文献[3~6]获得.

3 热—湿—力耦合计算方程

3.1 模型的适用范围

(1)介质是均质各向同性, 且为线性热弹性物质; (2)达西定律适用于介质中水的流动; (3)液相与固相间热迁移可以忽略; (4)富里哀定律适用于液相与固相之热量迁移; (5)水的密度变化依赖于温度与压力, 不考虑溶质变化影响; (6)太沙基有效应力原理适用饱和与非饱和介质.

下面导出三维情况下的耦合模型.

3.2 应力平衡方程

存在孔隙水压力情况下的应力平衡方程由 Bi-

ot^[7] 导出,其实质是结合应力平衡微分方程与太沙基有效应力原理,本文遵循土力学的一般做法,取压应力为正,则应力平衡方程为:

$$\sigma_{ij,j}-b_i=0.$$

式中:σ_{ij} 为应力张量;b_i 为体积力矢量.

Bishop 等^[8] 扩展太沙基(Terzaghi)有效应力原理至非饱和介质,则:

$$\sigma_{ij}=\sigma_{ij}'+\chi\rho g\varphi\delta_{ij}$$

其中,χ= { 1, 饱和带;
χ(Sr), 非饱和带.

式中:σ_{ij}' 为有效应力张量;φ 为测压水头,φ=h-z, 其中 h 为总水头,z 为位置水头;ρ 为水的密度;g 为重力加速度;χ 为与饱和度 Sr 有关的参数,需由实验室求得,在没有资料时可假定其值等于 Sr. 其中

$$\delta_{ij}=\begin{cases} 1, & \text{当 } i=j; \\ 0, & \text{当 } i\neq j. \end{cases}$$

物理方程(本构方程):介质为孔隙弹性情况下,可利用线性热应力理论,即杜阿梅尔—诺伊曼(Duhamel—Neuman)理论,并利用包含温度变化的广义虎克定律,则:

$$\delta_{ij}'=D_{ijkl}\epsilon_{ij}+\beta(T-T_0)\delta_{ij}.$$

式中:D_{ijkl} 为弹性常数,是四阶张量;ε_{ij} 为应变张量;β 为热应力系数,β=α_tE/(1-2ν),其中 α_t 为热膨胀系数,E 为介质杨氏弹性模量,ν 为泊松比;T 为温度;T₀ 为初始温度.

几何方程为:

$$\epsilon_{ij}=-\frac{1}{2}(\mu_{i,j}+\mu_{j,i}).$$

式中:μ_{i,j} 为位移矢量.

3.3 水迁移方程

地下水连续方程^[9] 为:

$$\frac{\partial(\rho\theta)}{\partial t}+\text{div}(\rho\mathbf{v})=0.$$

式中:θ 为含水率;v 为地下水流速矢量;ρ 为水密度,考虑水的压缩与膨胀,可表示为:

$$\rho=\rho_0[1-\beta_T(T-T_0)+\beta_p(p-p_0)].$$

其中:ρ₀ 为压力 p₀,温度 T₀ 时水的参考密度;β_T 为

等压水膨胀系数,β_T=-1/ρ ∂ρ/∂T |_{p 为常数};β_p 为等温水

压缩系数,β_p=-1/ρ ∂ρ/∂p |_{T 为常数};p 为水压力.

3.4 热迁移方程

不考虑蒸发与冷凝作用,且假定固相与液相间不存在热迁移,则热迁移方程^[10,11] 为:

$$\begin{aligned} &S\{nSr\rho C_{v_f}+(1-n)\rho_s C_{v_s}\}\frac{\partial T}{\partial t}+ \\ &\{nSr\rho C_{v_f}v_f+(1-n)\rho_s C_{v_s}v_s\}\cdot\nabla T= \\ &-\nabla\cdot\{nSrJ_f+(1-n)J_s\}- \\ &nSrT\left[\frac{\partial p}{\partial T}\right]_{\rho_f}\cdot\nabla\cdot v_f-(1-n)\beta T\frac{\partial\epsilon_s}{\partial t}. \end{aligned}$$

式中:n 为有效孔隙度;Sr 为饱和度;C_v 为比热,J 为传导产生的热通量,f 代表液相,s 表示固相;v_f 为液相流速;ε_s 为固相应变.

4 耦合方程的求解

上述相关方程中,剂量场可单独计算,其结果作为热源代入热—湿—力耦合方程的热迁移方程中.

热—湿—力耦合方程的求解采用加权剩余法中的伽辽金有限元法,利用等参四边形单元,由于耦合方程为非线性方程,在有限元方程求解时采用中间间隔向后差分方法结合预测—校正迭代解法,这两个方法结合被认为是解非线性耦合方程的最好方法^[12].方法的具体做法在此不再介绍,可参考文献[2].

5 若干优先关注的领域

上述我们给出了适合饱和与非饱和介质的剂量场—温度场—水势场—应力场耦合模型,并对其求解进行了简要的阐述,考虑到问题的实际,提出如下应优先关注的领域:(1)本文考虑的模型适合非膨胀的孔隙介质,而实际上由于处置库中的缓冲材料甚至回填材料以膨润土为基材,膨润土存在遇水膨胀失水龟裂现象,因此不可避免要考虑膨润土的吸水膨胀问题,需将此现象结合到模型中;(2)由于温度变化的影响,水的蒸发—凝结实际上也应考虑;同时应考虑包气带存在的水气二相流问题;(3)需考虑远场裂隙介质的耦合问题,只有将近场孔隙介质与远场裂隙介质的耦合问题结合起来,才能进行较为切合实际的预测;(4)应力—应变本构方程目前用的是弹性方程,此对于固化体、包装容器及硬质处置介质是合适的,但对于缓冲材料及软质处置介质可能不

合适,故需根据实验结果给出切合实际介质的应力—应变本构方程;(5)应加强基础理论的研究,如非饱和情况下有效应力原理的适用性,水在膨润土中渗流的达西定律的适用性等等;(6)需在实验室切实模拟因素间相互作用问题,如温度与孔隙率的变化对渗透系数的影响,温度、含水率及孔隙率的变化对导热系数与比热的影响,温度与含水率的变化对力学参数的影响等等;(7)在可能的将来,叠加化学场的影响。

参考文献:

[1] 沈珍瑶,李国鼎,李书绅. 缓冲层热—湿—力耦合作用研究简介[J]. 地质科技情报,1997, 16(2): 79~83.

[2] 沈珍瑶. 高放废物处置库近场高压实缓冲材料热—湿—力耦合过程研究[D]. 北京:清华大学环境科学与工程系,1998.

[3] 刘运祚. 常用放射性核素衰变纲图[M]. 北京:原子能出版社,1982.

[4] 中国计量测试学会,电离辐射专业委员会. 辐射剂量学常用数据[M]. 北京:中国计量出版社,1987.

[5] IAEA. Engineering compendium on radiation shielding

[M]. Berlin: Springer-Verlag, 1968.

[6] Gusev N G, Dmitriev P P. Quantum radiation of radioactive nuclides [M]. Oxford: Pergamon, 1979.

[7] Biot M A. General theory of three-dimensional consolidation [J]. J Appl Phys, 1941, 12(155): 155~164.

[8] Bishop A W, Blight G E. Some aspects of effective stress in saturated and unsaturated soils [J]. Geotechnique, 1963, 13(3): 177~197.

[9] Bear J. 多孔介质流体动力学[M]. 李竞生,陈崇希,译. 北京:中国建筑工业出版社,1983.

[10] Bear J, Corapcioglu M Y. A mathematical model for consolidation in a thermoelastic aquifer due to hot injection or pumping [J]. Water Resour Res, 1981, 17(3): 723~736.

[11] Fanst C R, Mercer J W. Geothermal reservoir simulation 1: mathematical models for liquid- and vapor-dominated hydro-thermal systems [J]. Water Resour Res, 1979, 15(1): 23~30.

[12] Thomas H R, King S D. Coupled temperature/capillary potential variations in unsaturated soil [J]. ASCE J Eng Mech, 1991, 117(11): 2475~2491.

COUPLED CALCULATION OF DOSE FIELD-TEMPERATURE FIELD-HYDRO-POTENTIAL FIELD-STRESS FIELD NEAR HLW DEEP GEOLOGICAL DISPOSAL REPOSITORY

Shen Zhenyao^{1,3} Yang Zhifeng¹ Li Guoding² Li Shushen³

(1. *Institute of Environmental Science, Beijing Normal University, Beijing 100875, China*; 2. *Department of Environmental Science and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China*; 3. *China Institute of Radiation Protection, Taiyuan 030006, China*)

Abstract: Deep geological disposal of high-level radioactive waste (HLW) is introduced briefly in this paper. It is very important to research into the coupled calculation of the dose field-temperature field-hydro-potential field-stress field associated with HLW disposal. The equations, which are used to calculate the dose rate and THM coupled process are provided and the solutions to these equations are discussed. Finally, several aspects in this area are suggested for further research.

Key words: HLW disposal; dose field; temperature field; hydro-potential field; stress field; coupled calculation.