

České vysoké učení technické v Praze

Fakulta stavební, Katedra mechaniky

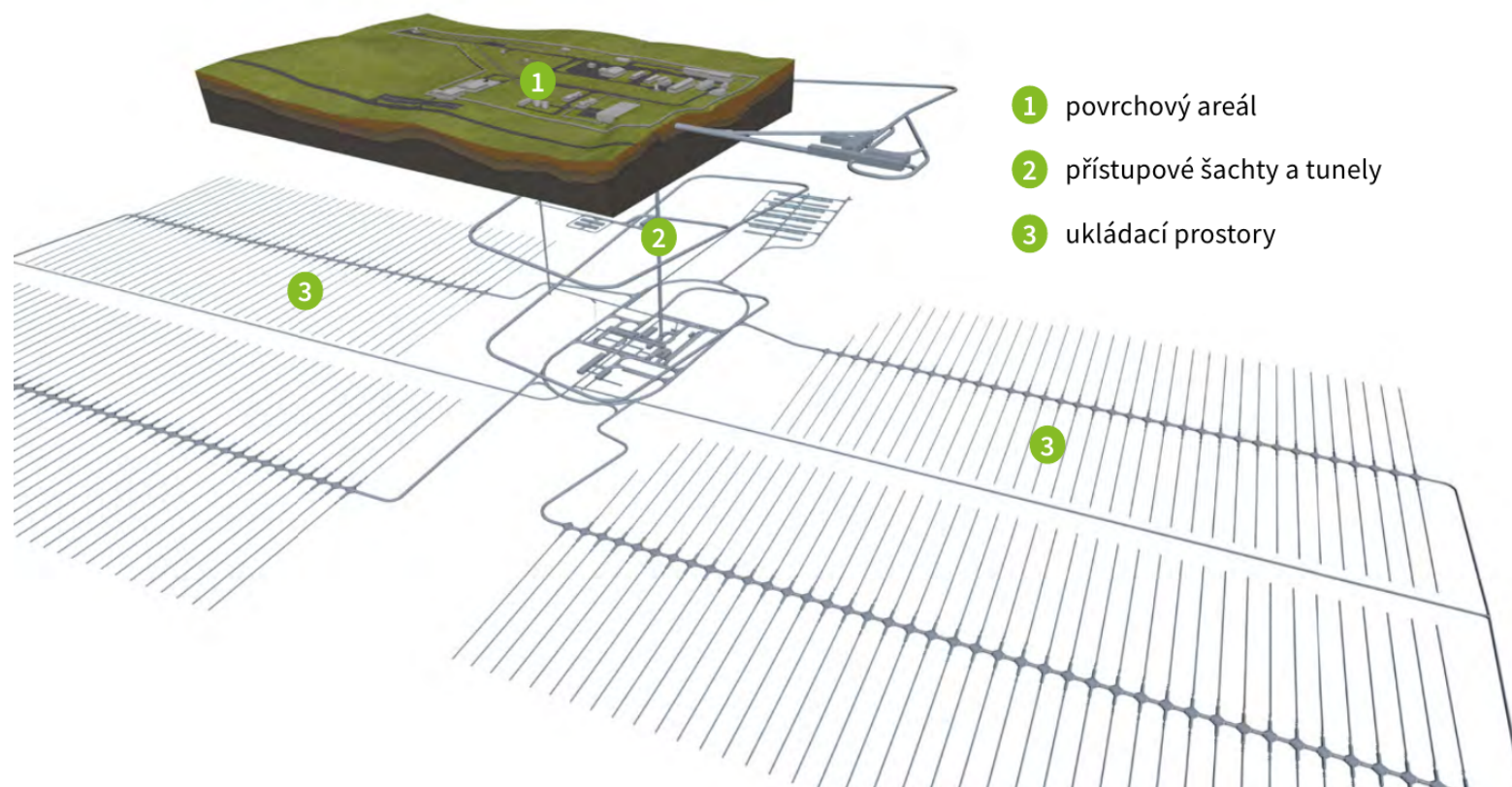
# Numerické modelování úložišť jaderného odpadu

Jaroslav Kruis, Tomáš Krejčí, Tomáš Koudelka

## Osnova

- Hlubinné úložiště
- Vybrané požadavky
- Vedení tepla
- Přehled potřebných numerických simulací
- Ukázky simulací
- Závěr

## Hlubinné úložiště



## Bentonit

- je schopný přijímat velké množství vody
- přitom bobtná, stává se tvárným a plastickým
- při vysychání se opět smršťuje
- Ca-bentonity, pohlty vodu v objemu 200-300% hmotnosti
- Na-bentonity, pohlty vodu v objemu 600-700% hmotnosti
- mají velký vnitřní povrch
- nastávají u nich velké objemové změny

## Vybrané požadavky a příslušné simulace

- stabilita zavážecích chodeb (elasto-plastická simulace, využití mechaniky poškození)
- nejvyšší povolená teplota (vedení tepla)
- inženýrské bariéry (termo-hydro-mechanická simulace)

## Vedení tepla

plošná hustota toku tepla  $\mathbf{q}$  (J/m<sup>2</sup>/s)

hustota tepla  $h$  (J/m<sup>3</sup>)

hustota zdroje tepla  $s$  (J/m<sup>3</sup>/s)

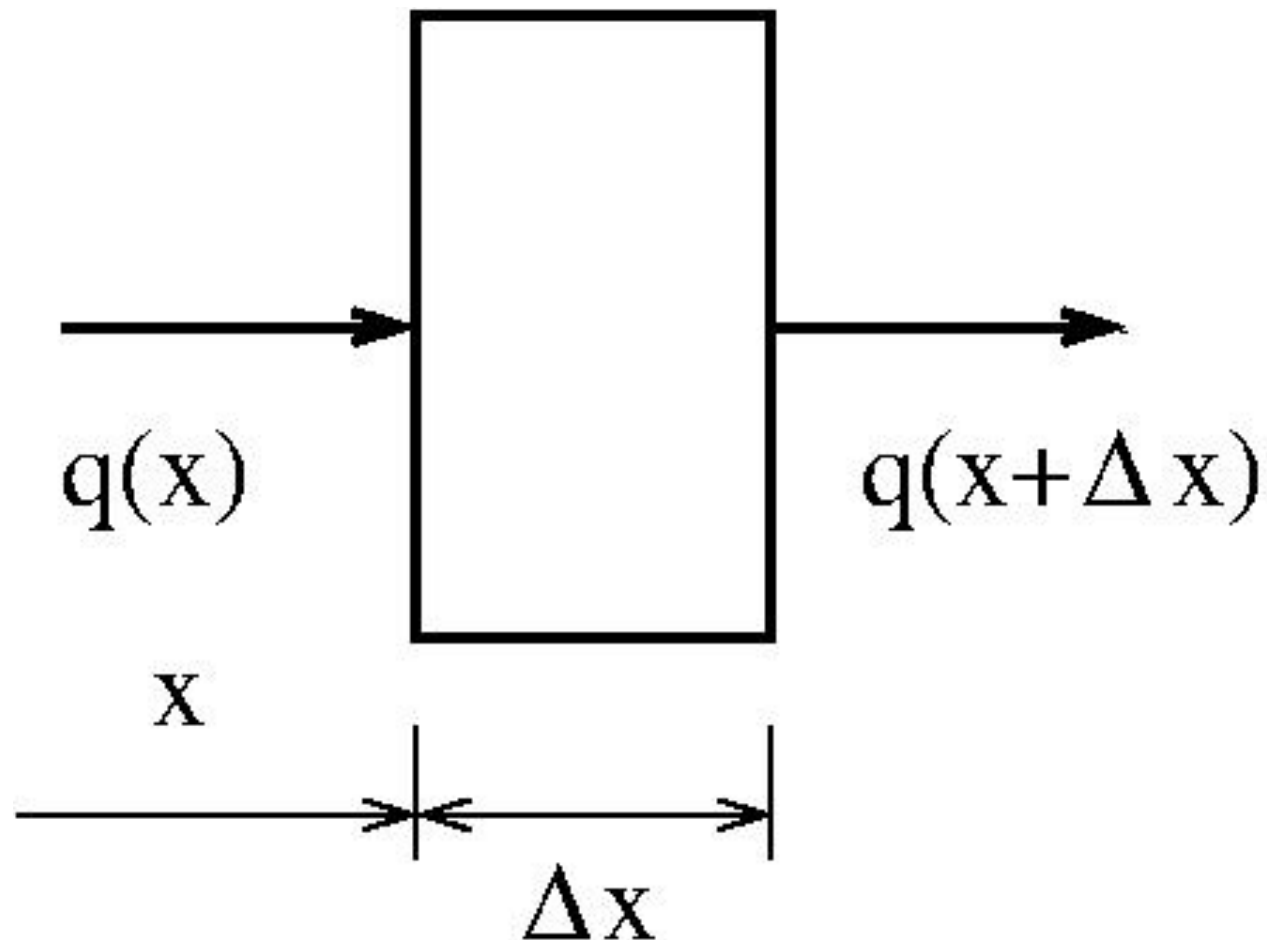
teplota  $T$  (K, °C)

Fourierův zákon

$$\mathbf{q} = -\mathbf{k}\nabla T$$

$$\begin{pmatrix} q_x \\ q_y \\ q_z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{yx} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{zx} & k_{zy} & k_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial T}{\partial x} \\ \frac{\partial T}{\partial y} \\ \frac{\partial T}{\partial z} \end{pmatrix}$$
$$\mathbf{k} = \begin{pmatrix} k_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & k_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & k_{zz} \end{pmatrix} \quad \mathbf{k} = \begin{pmatrix} k & 0 & 0 \\ 0 & k & 0 \\ 0 & 0 & k \end{pmatrix}$$

## Vedení tepla v jedné dimenzi



## Stacionární stav

Taylorův rozvoj

$$q_x(x + \Delta x) = q_x(x) + \frac{dq_x(x)}{dx} \Delta x + \dots$$

bilanční rovnice

$$q_x(x)S_x \Delta t + s(x)S_x \Delta x \Delta t = q_x(x + \Delta x)S_x \Delta t$$

$$s(x) = \frac{dq_x(x)}{dx} = -k_x \frac{d^2T(x)}{dx^2}$$

## Nestacionární stav

Taylorův rozvoj

$$q_x(x + \Delta x, t) = q_x(x, t) + \frac{\partial q_x(x, t)}{\partial x} \Delta x + \dots$$

$$h(x, t + \Delta t) = h(x, t) + \frac{\partial h(x, t)}{\partial t} \Delta t + \dots$$

bilanční rovnice

$$h\Delta V + q_x(x)S_x\Delta t + s(x)S_x\Delta x\Delta t = h(t + \Delta t)\Delta V + q_x(x + \Delta x)S_x\Delta t$$

$$s = \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial q_x}{\partial x}$$

$$s = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} - k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

## Nestacionární stav ve 3D

$$s = \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z}$$

$$s = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} - k_x \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - k_y \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} - k_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

parabolická parciální diferenciální rovnice

## Okrajové podmínky

oblast  $\Omega$  má hranici  $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_C \cup \Gamma_R$

Dirichletova okrajová podmínka (předepsaná funkční hodnota)

$$\forall \mathbf{x} \in \Gamma_D : T(\mathbf{x}, t) = \hat{T}(\mathbf{x}, t)$$

Neumannova okrajová podmínka (předepsaný tok tepla)

$$\forall \mathbf{x} \in \Gamma_N : q_n(\mathbf{x}, t) = \mathbf{q}^T \mathbf{n} = \hat{q}_n(\mathbf{x}, t)$$

Newtonova-Cauchyova okrajová podmínka (přestup tepla)

$$\forall \mathbf{x} \in \Gamma_C : q_n(\mathbf{x}, t) = \mathbf{q}^T \mathbf{n} = \kappa(T(\mathbf{x}, t) - T_E(\mathbf{x}, t))$$

radiační okrajová podmínka

$$\forall \mathbf{x} \in \Gamma_R : q_n(\mathbf{x}, t) = \mathbf{q}^T \mathbf{n} = \varepsilon \sigma ((T(\mathbf{x}, t))^4 - (T_\infty(\mathbf{x}, t))^4)$$

$\varepsilon$  je pohltivost povrchu,

$\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2/\text{K}^4$  je Stefanova-Boltzmannova konstanta

Počáteční podmínka

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega : T(\mathbf{x}, 0) = \tilde{T}(\mathbf{x})$$

## Řešení rovnice vedení tepla

- analytické řešení (pro jednoduché tvary řešených oblastí a homogenní materiály)
- metoda sítí
- metoda konečných prvků
- metoda hraničních prvků (problém s fundamentálním řešením)

## Metoda konečných prvků

aproximace funkcí

$$\tilde{T} = \mathbf{N}^{[d]} \mathbf{d} ,$$

$$\hat{T} = \mathbf{N}^{[e]} \mathbf{e} ,$$

$$\phi = \mathbf{N}^{[\phi]} \phi ,$$

$$s = \mathbf{N}^{[s]} \mathbf{s} ,$$

$$q = \mathbf{N}^{[q]} \mathbf{q} ,$$

$$T_E = \mathbf{N}^{[u]} \mathbf{u} ,$$

matice a vektory

$$\mathbf{K}^{[T]} = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} d\Omega$$

$$\mathbf{K}^{[\Gamma]} = \int_{\Gamma_C} \mathbf{N}^T \kappa \mathbf{N} d\Gamma$$

$$\mathbf{C} = \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \rho c \mathbf{N} d\Omega$$

$$\mathbf{f}^{[N]} = \int_{\Gamma_N} \mathbf{N}^T \mathbf{N} d\Gamma \mathbf{q}$$

$$\mathbf{f}^{[C]} = \int_{\Gamma_t} \mathbf{N}^T \kappa \mathbf{N} d\Gamma \mathbf{u}$$

$$\mathbf{f}^{[s]} = \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{N} d\Omega \mathbf{s}$$

soustava obyčejných diferenciálních rovnic

$$\left( \mathbf{K}^{[T]} + \mathbf{K}^{[\Gamma]} \right) \mathbf{d} + \mathbf{C} \dot{\mathbf{d}} = \mathbf{f}^{[s]} - \left( \mathbf{K}^{[T]} + \mathbf{K}^{[\Gamma]} \right) \mathbf{e} - \\ - \mathbf{C} \dot{\mathbf{e}} - \mathbf{f}^{[N]} + \mathbf{f}^{[C]} .$$

zobecněné lichoběžníkové pravidlo

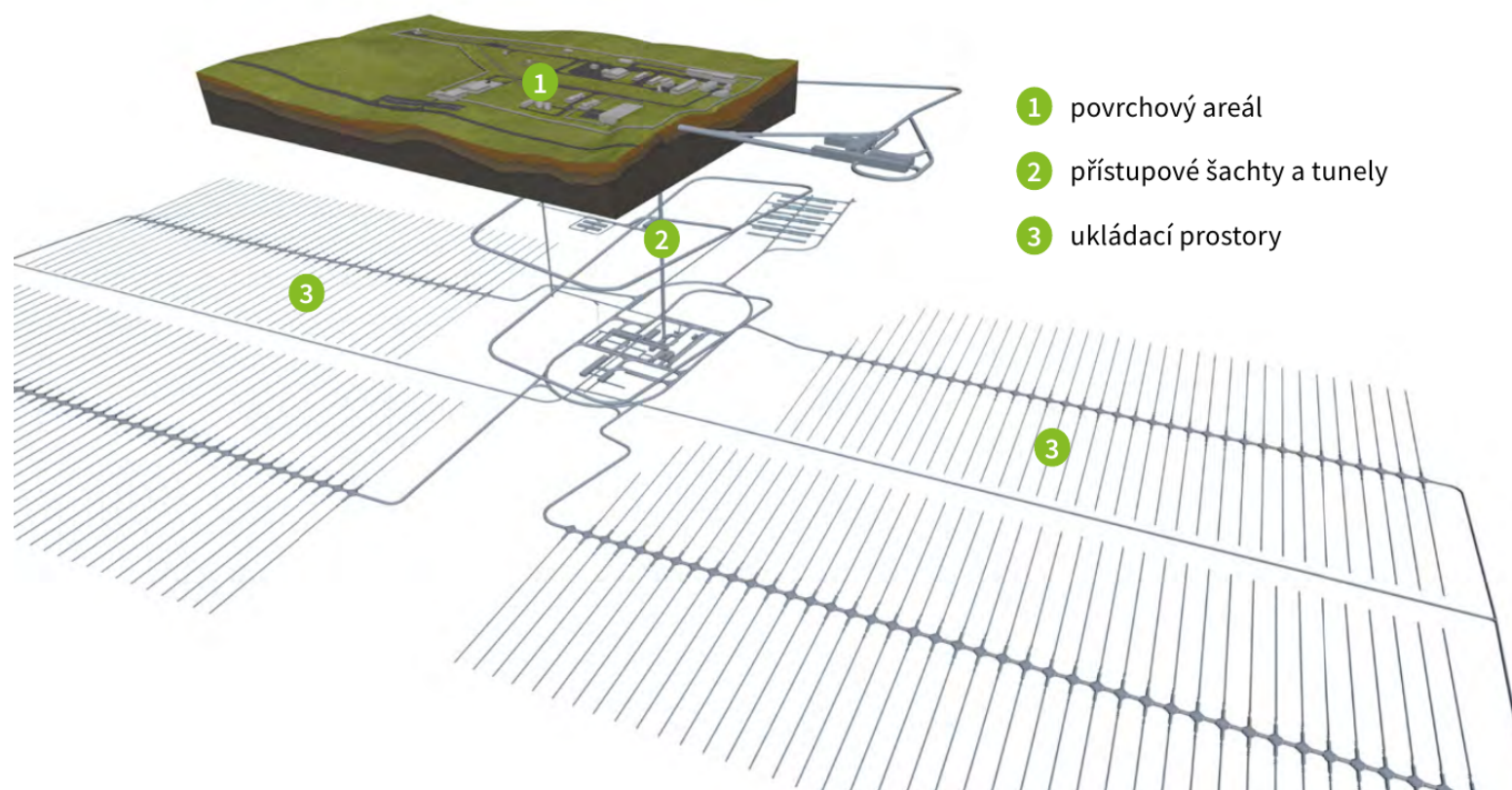
$$\mathbf{d}_{i+1} = \mathbf{d}_i + \Delta t \mathbf{v}_{i+\alpha} ,$$

$$\mathbf{v}_{i+\alpha} = (1 - \alpha) \mathbf{v}_i + \alpha \mathbf{v}_{i+1} .$$

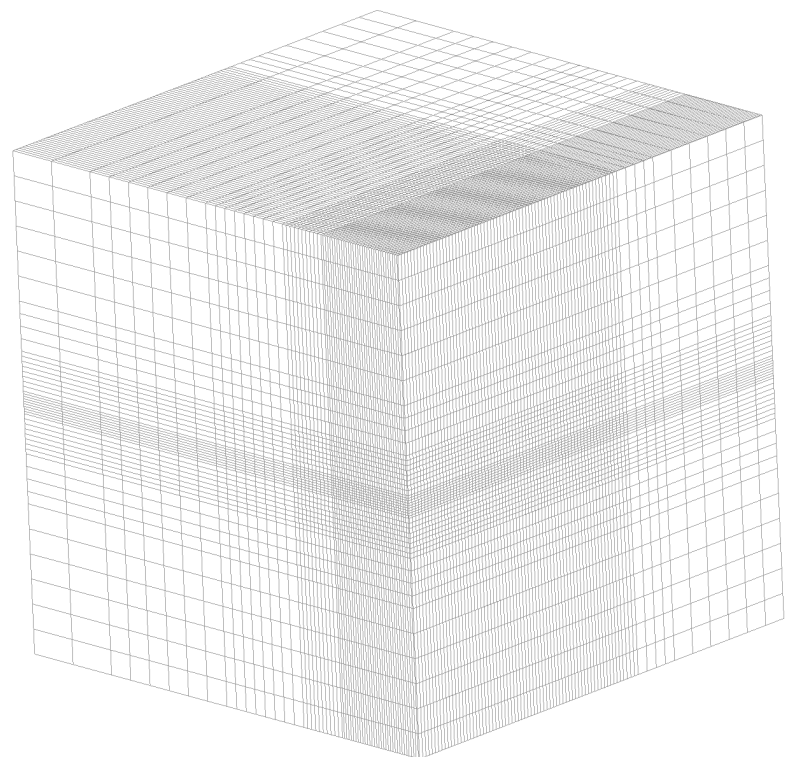
soustava algebraických rovnic

$$\left( \mathbf{C} + \Delta t \alpha \mathbf{K} \right) \mathbf{v}_{i+1} = \mathbf{f}_{i+1} - \mathbf{K} \left( \mathbf{d}_i + \Delta t (1 - \alpha) \mathbf{v}_i \right) .$$

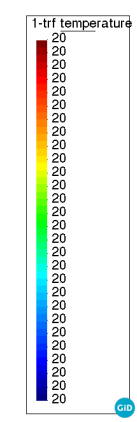
## Ukázky simulací



### Model celého úložiště

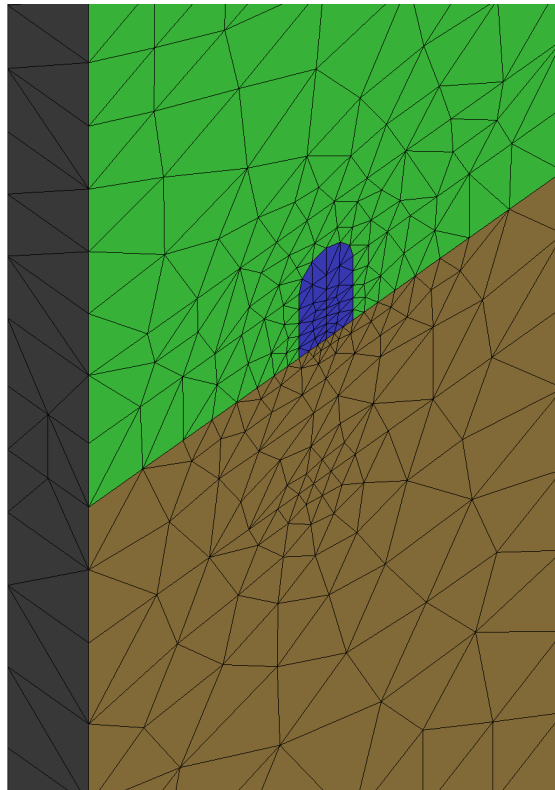


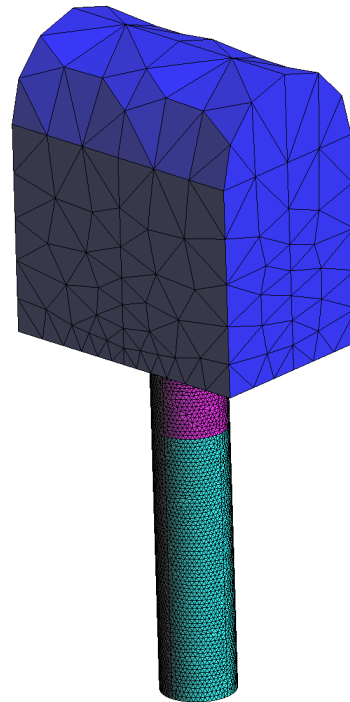
step 0  
Contour Fill of 1-trf temperature.



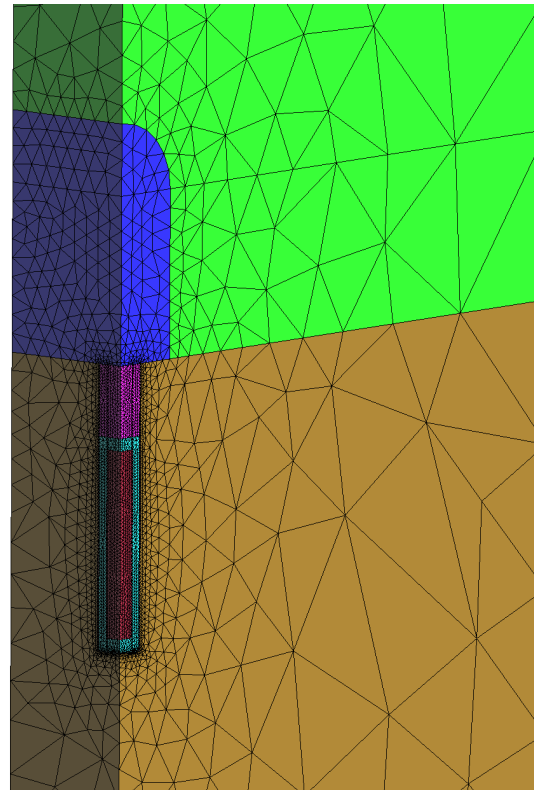
## Model jednoho ukládacího souboru





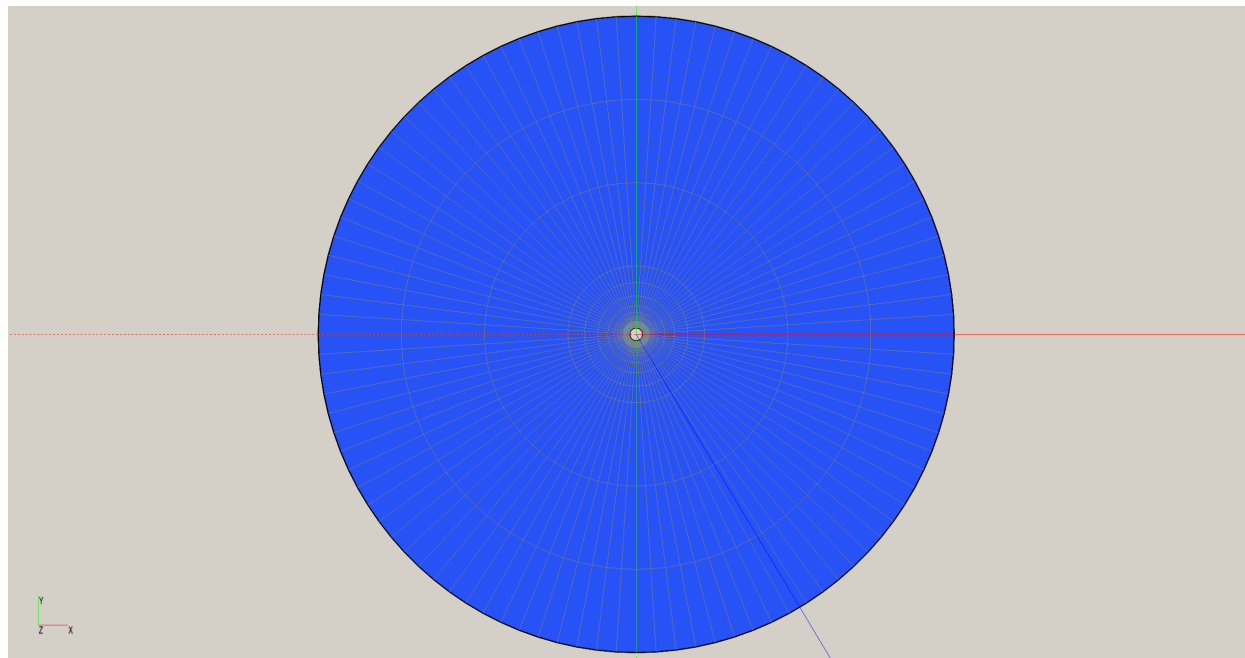


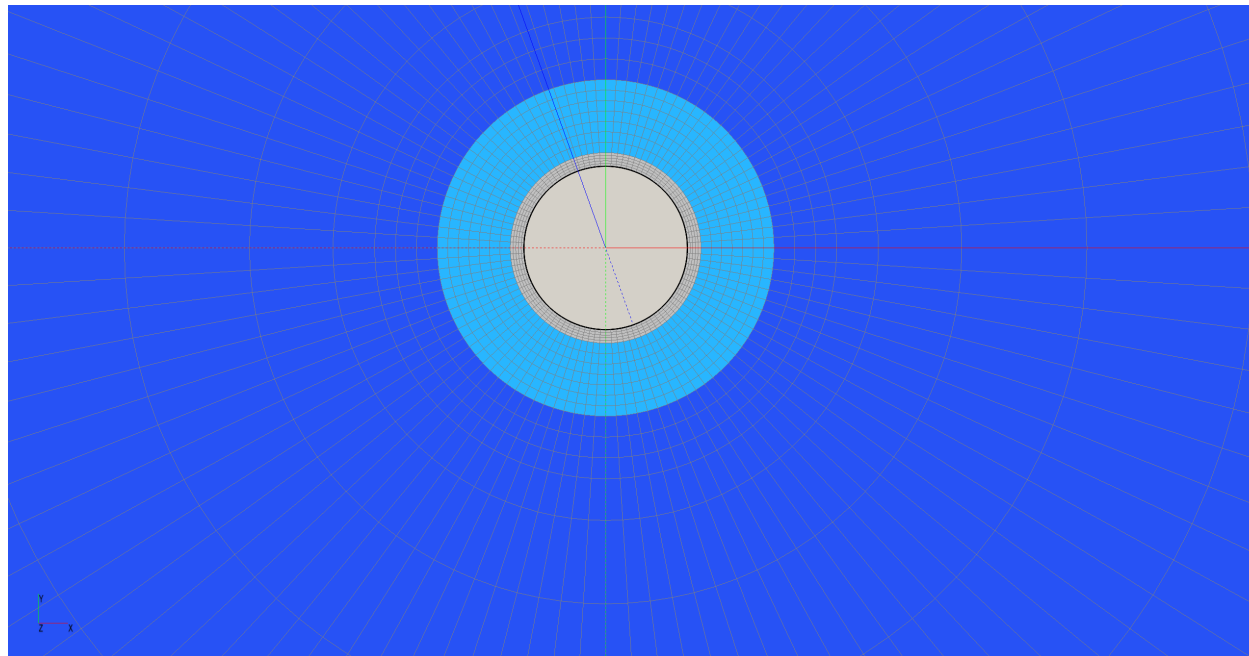
GID



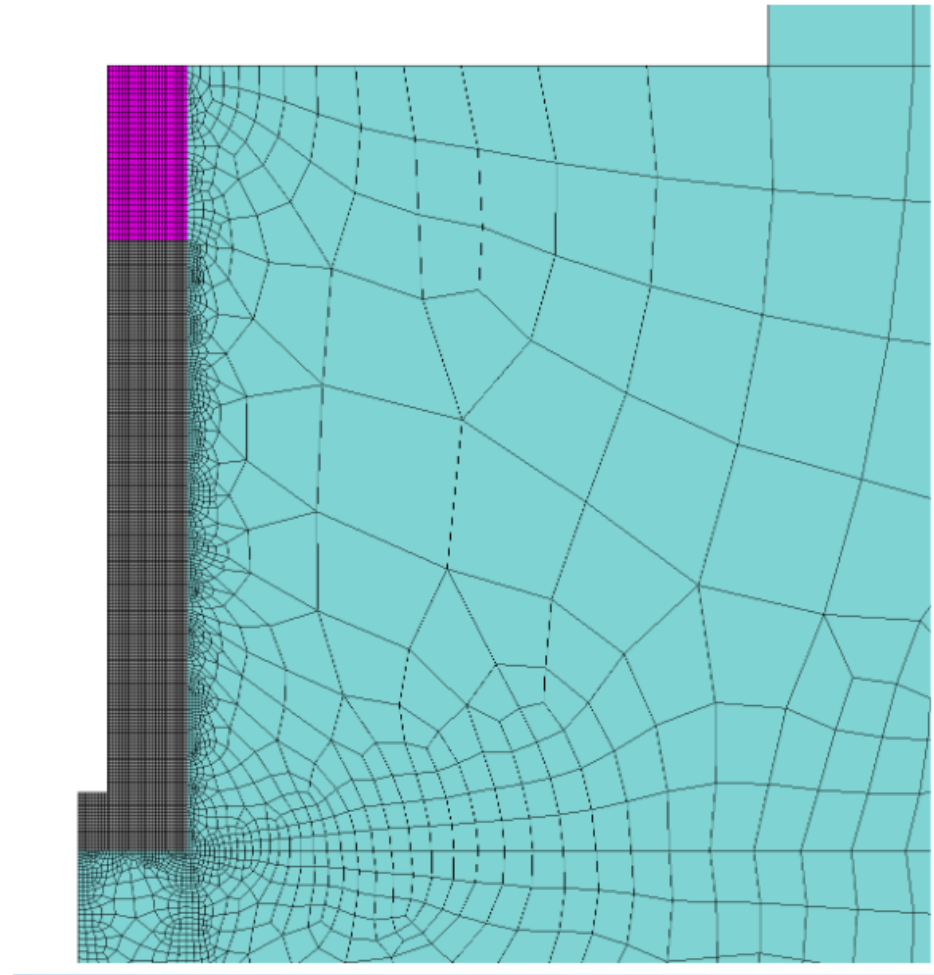
GID

## Model výřezu jednotkové tloušťky

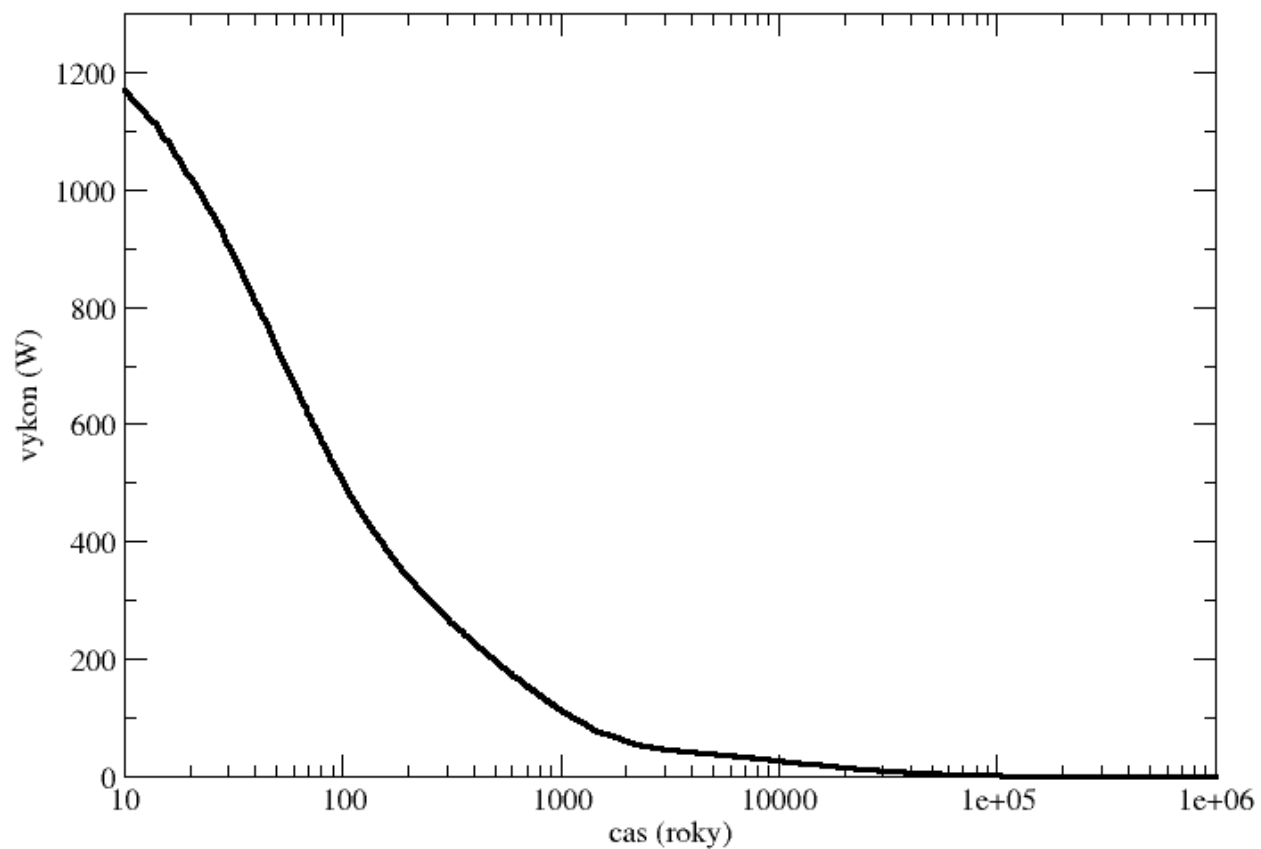




## Osově souměrný model jednoho UOS



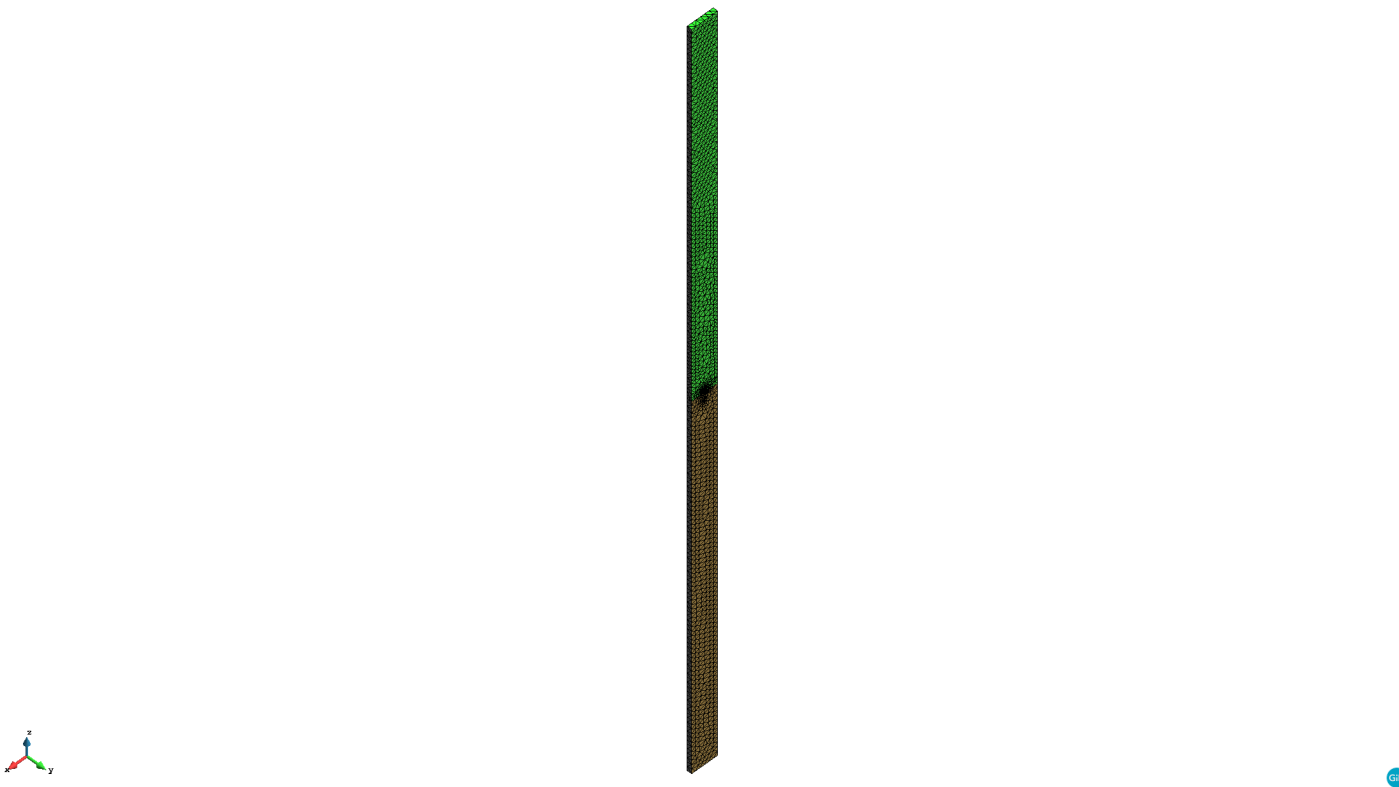
## Vykon UOS

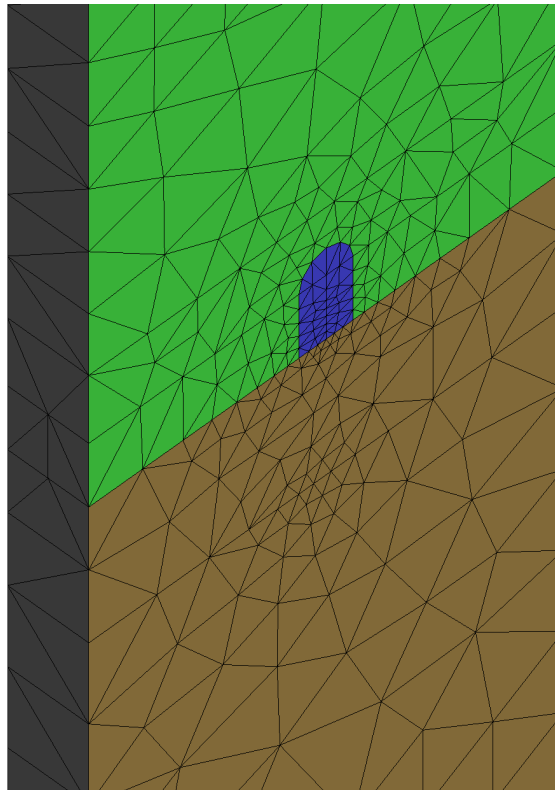


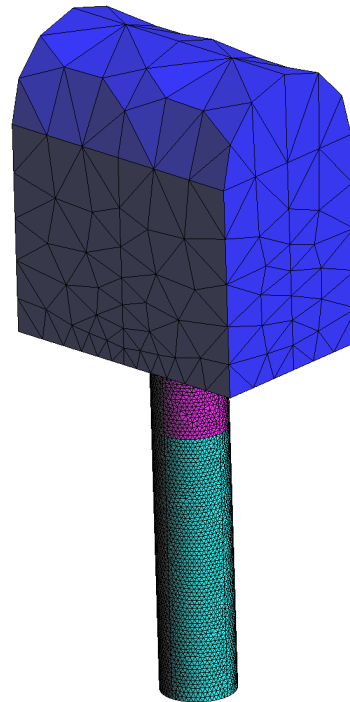
# Numerický model jednoho ukládacího obalového souboru UOS

- kvádr  $d \times 35 \times 1000$  m,  $d \in \langle 6; 20 \rangle$  m
- 70 073–150 654 uzlů
- 326 753–831 823 čtyřstěnných prvků s lineárními aproximačními funkcemi
- zobecněné lichoběžníkové pravidlo
- 33 722 časových přírůstků, koncový čas 10 000 let
- výpočetní čas 6 až 12 hodin (podle počtu neznámých)
- adiabatické svislé stěny

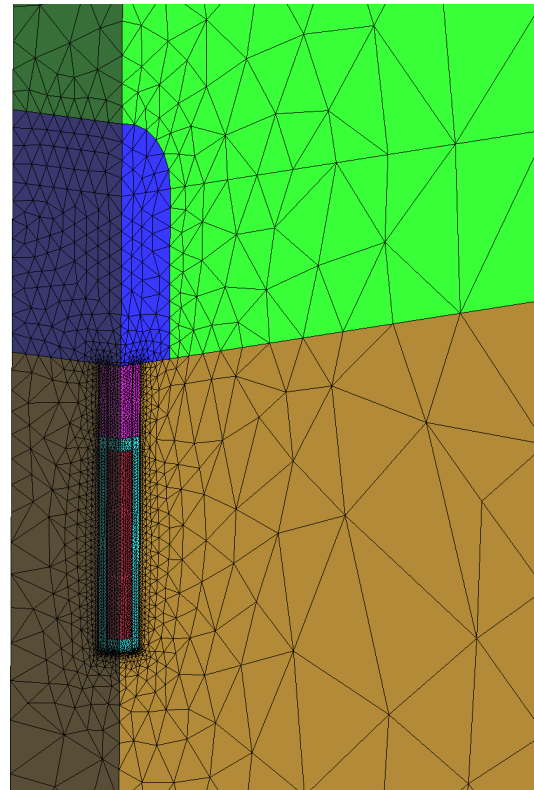
## Schéma řešené oblasti







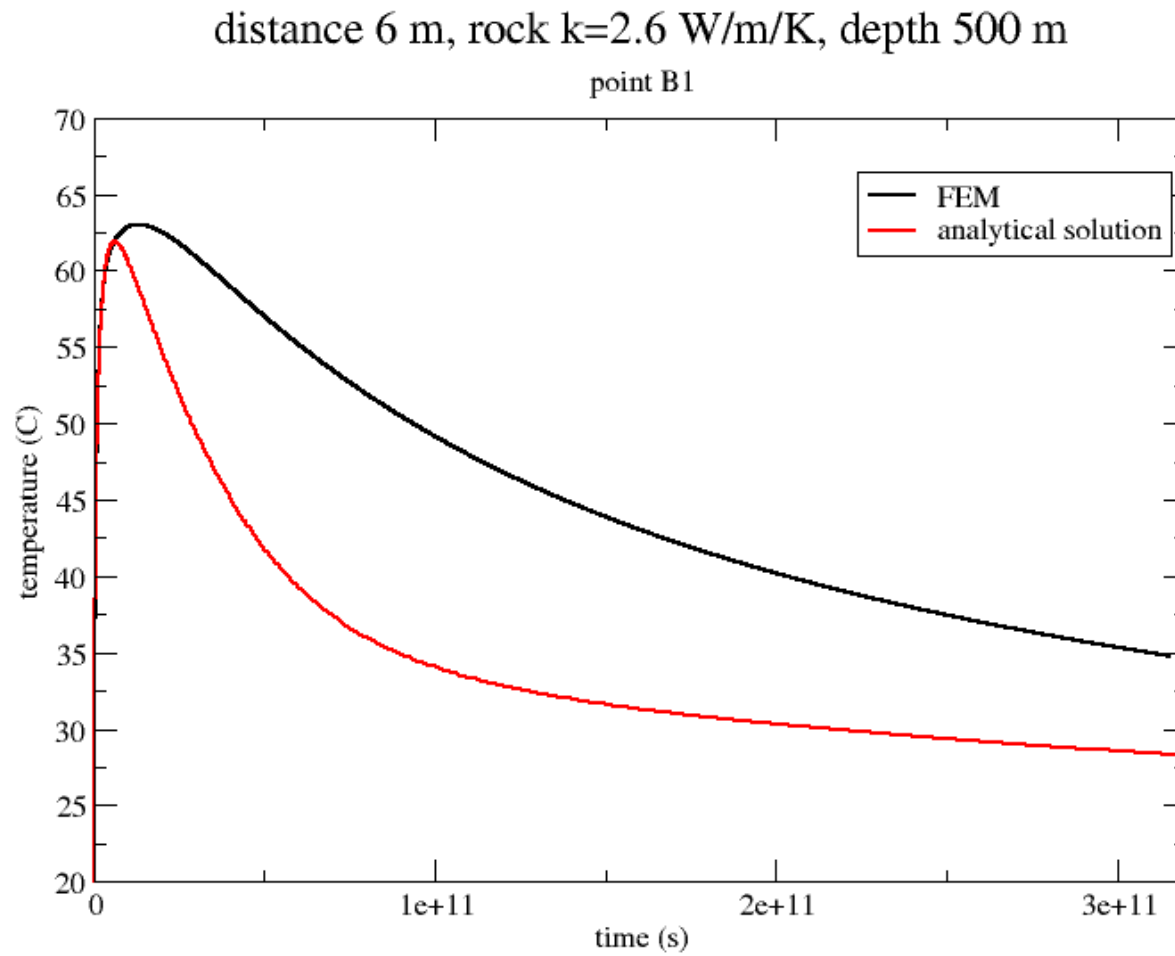
GID

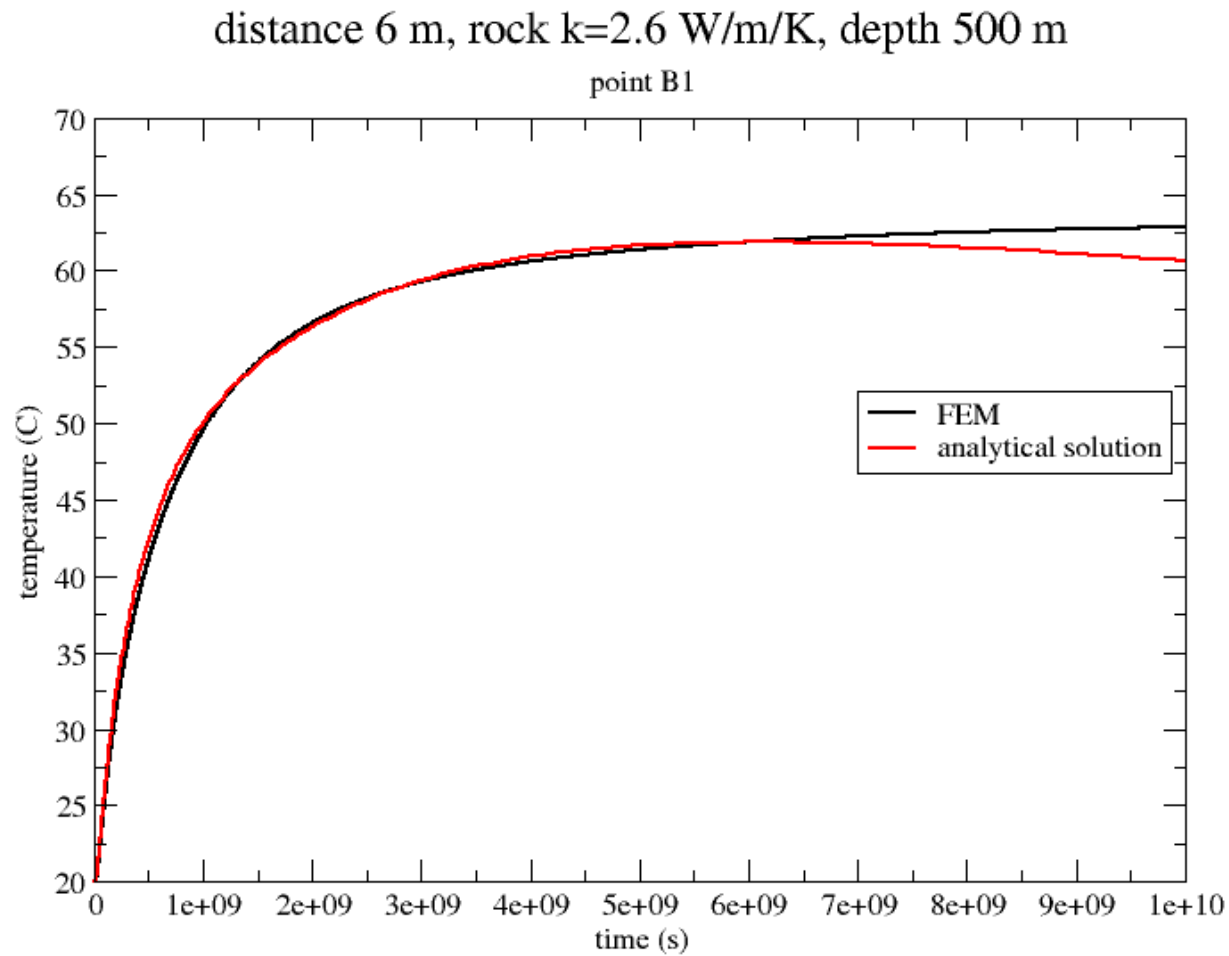


GID

## Porovnání MKP s analytickým řešením

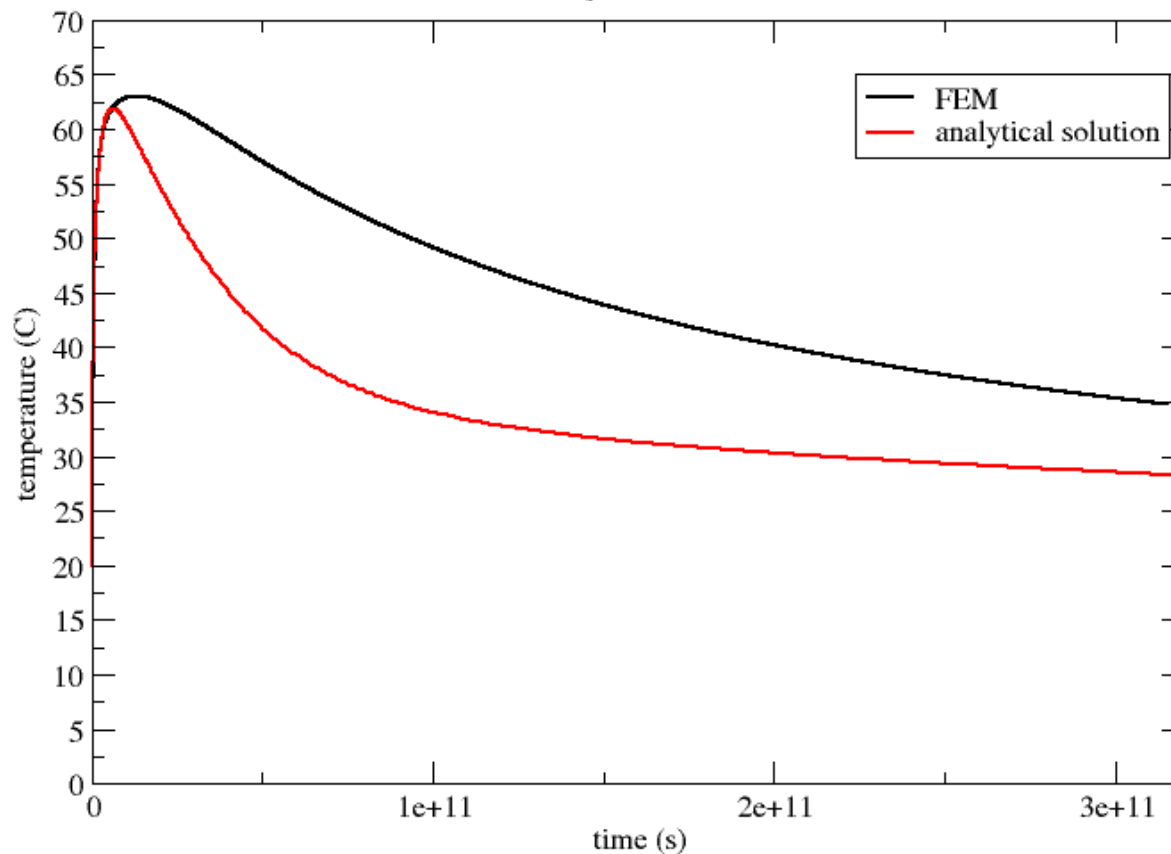
- bentonitu byly přiřazeny vlastnosti horniny
- hustota zdroje tepla v objemu  $d = 0,914$  m,  $v = 5,205$  m v MKP, liniový zdroj tepla v analytickém modelu
- materiálové parametry  $k_r = 2,6$  W/m/K,  $c_r = 770$  J/kg/K,  $\rho_r = 2700$  kg/m<sup>3</sup>

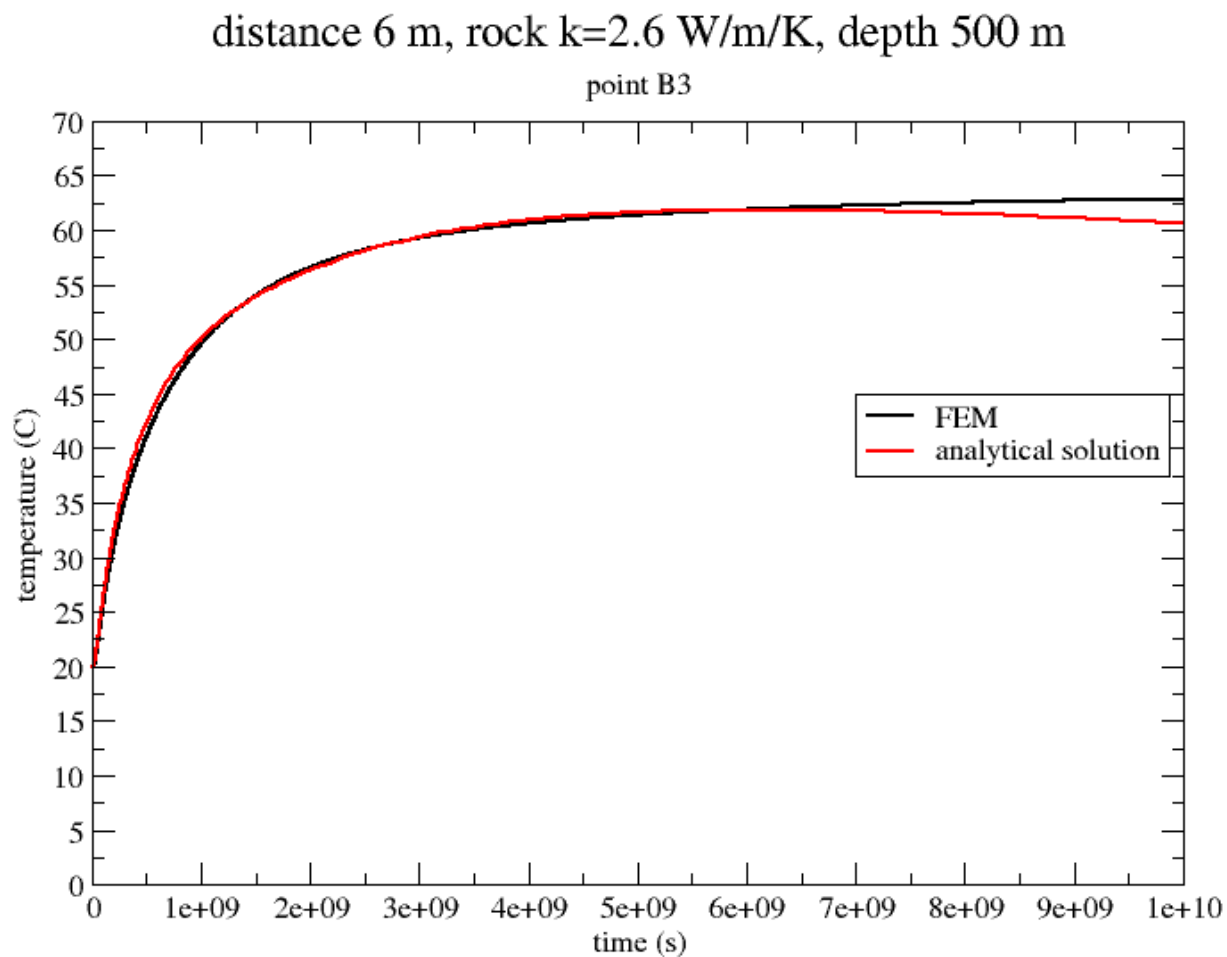




distance 6 m, rock  $k=2.6$  W/m/K, depth 500 m

point B3



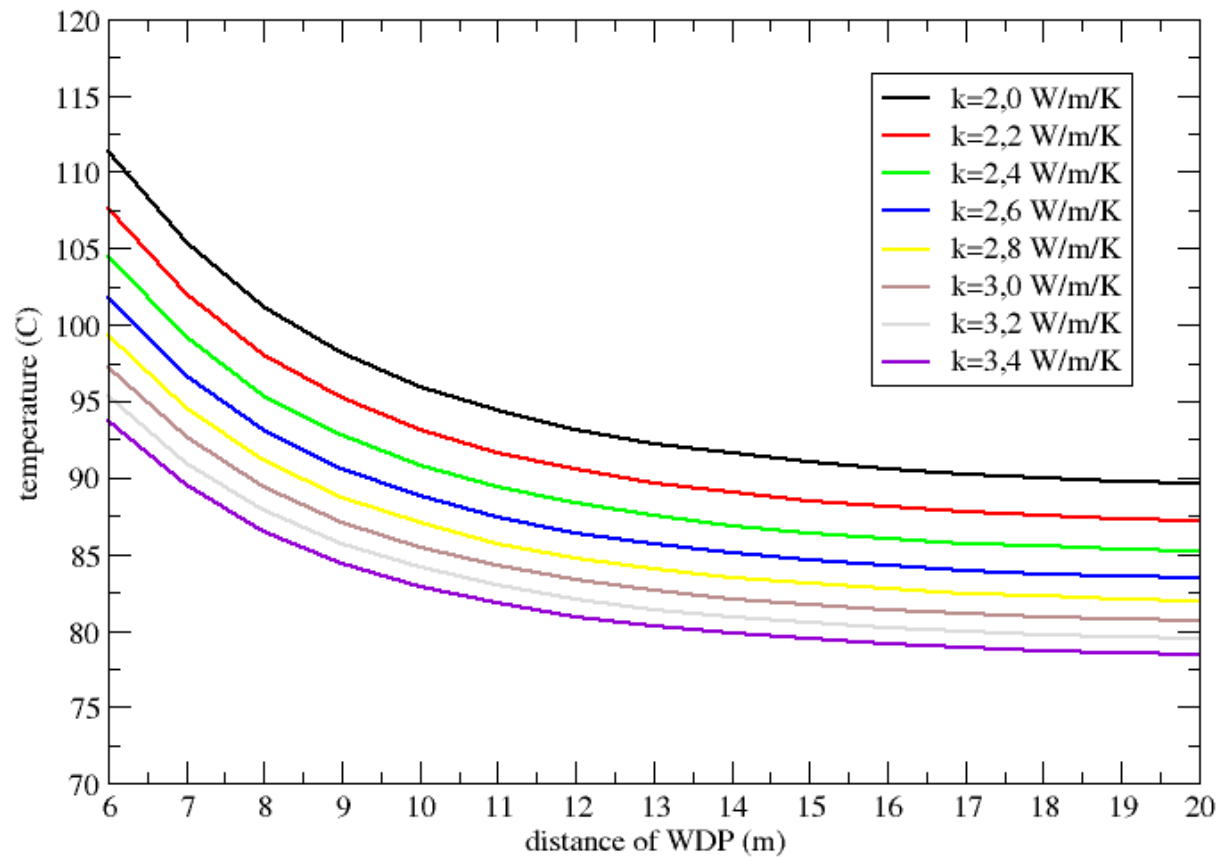


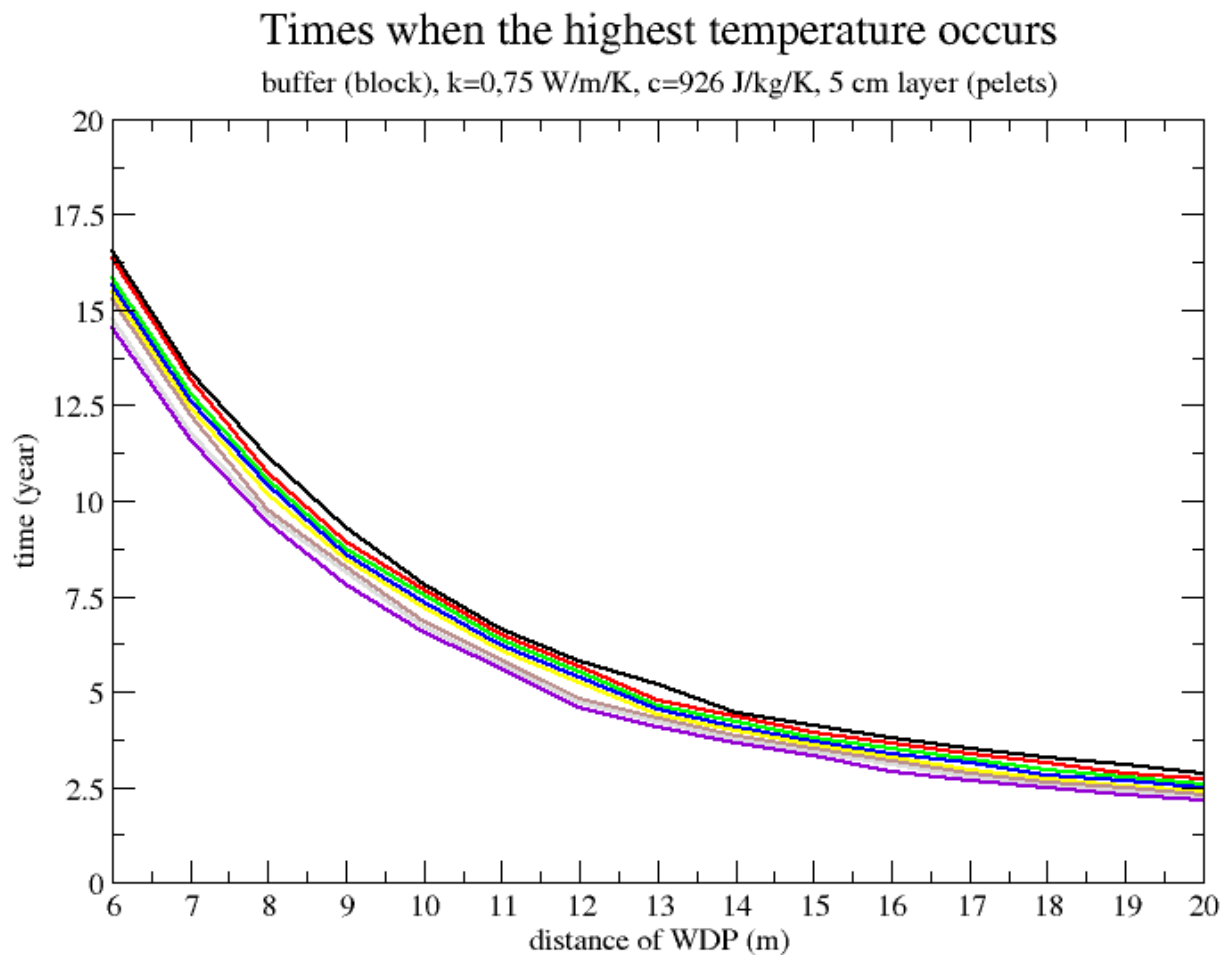
Až do času  $6 \cdot 10^9$  s, což je přibližně 190 let, jsou teploty z obou modelů téměř totožné.

## Výsledky z MKP

### Largest temperature with respect to the distance of WDP

buffer (blocks)  $k=0,75$  W/m/K,  $c=926$  J/kg/K, 5cm layer (pelets)





soustava algebraických rovnic

$$(\mathbf{C} + \Delta t \alpha \mathbf{K}) \mathbf{v}_{i+1} = \mathbf{f}_{i+1} - \mathbf{K}(\mathbf{d}_i + \Delta t(1 - \alpha)\mathbf{v}_i).$$

byla řešena 33 722-krát

počet neznámých v soustavě je od 70 000 do 150 000

pro tyto analýzy byla použita přímá metoda– $\mathbf{LDL}$  rozklad

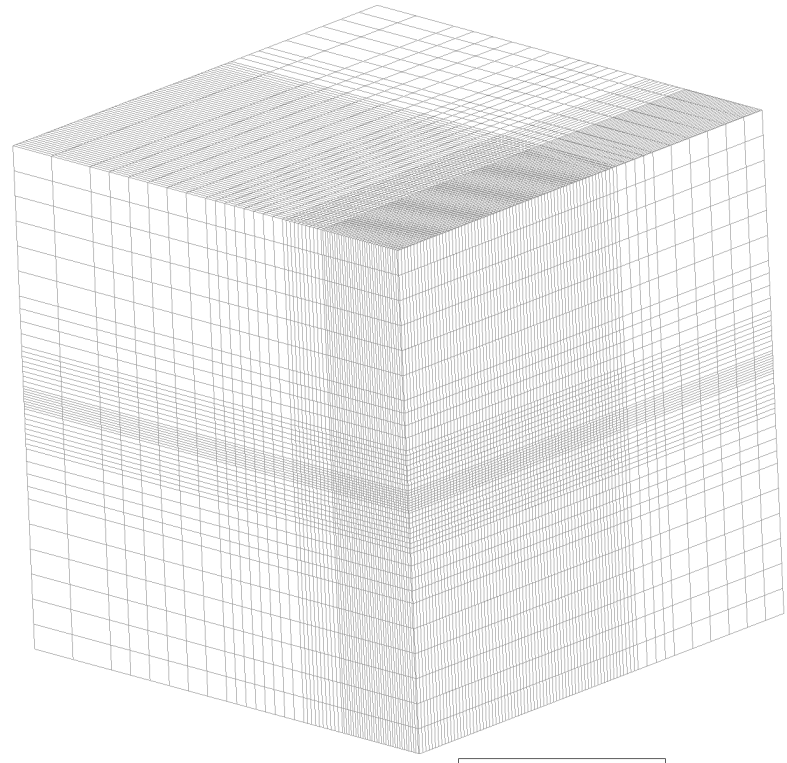
$$\mathbf{Ax} = \mathbf{y} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{L}^T \mathbf{DLx} = \mathbf{y}$$

## Závěry z MKP studie

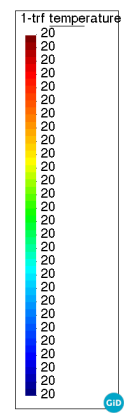
- pro vzdálenost UOS aspoň 8 m jsou teploty na povrchu UOS menší než 95 C v libovolném čase
- součinitel tepelné vodivosti byl uvažován  $k = 2.6 \text{ W/m/K}$

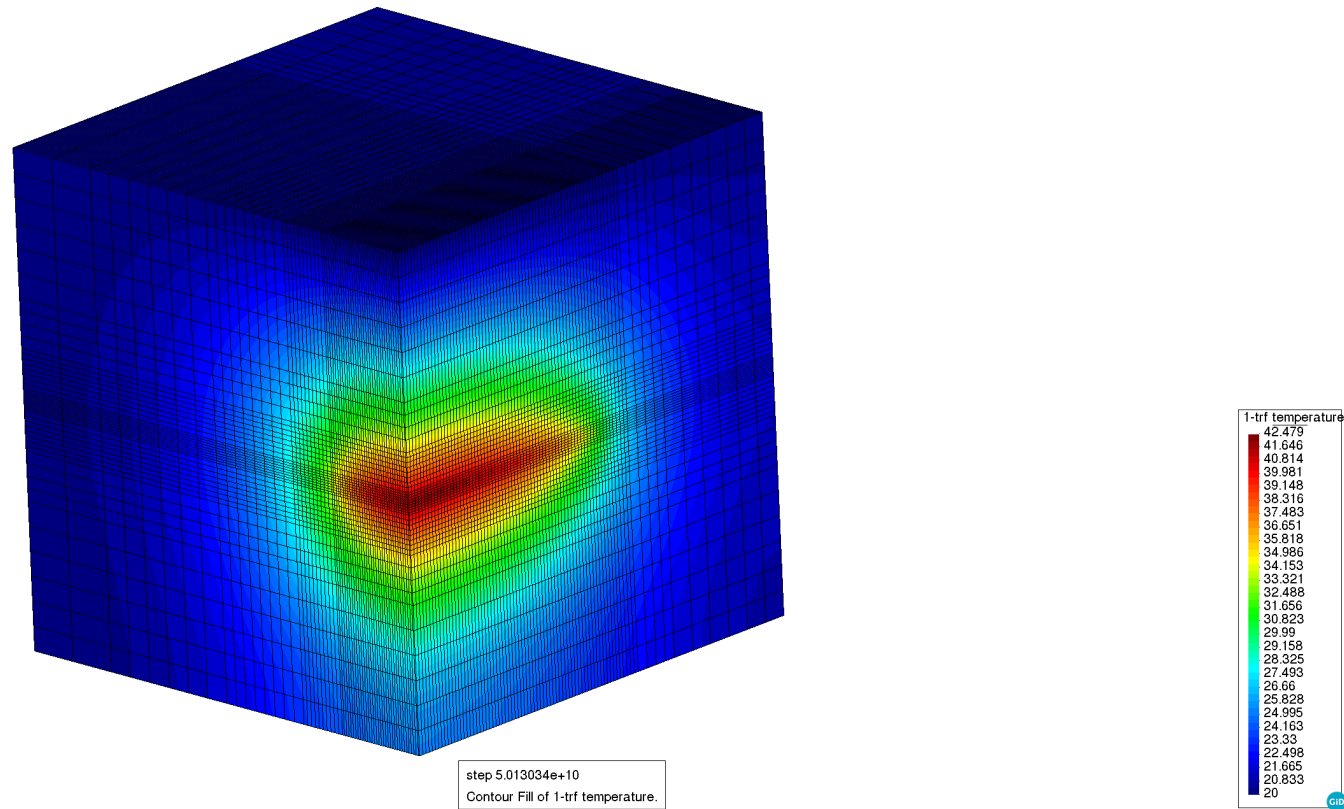
## Numerický model celého úložiště

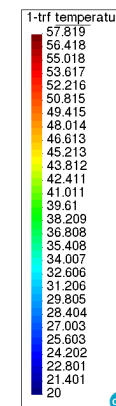
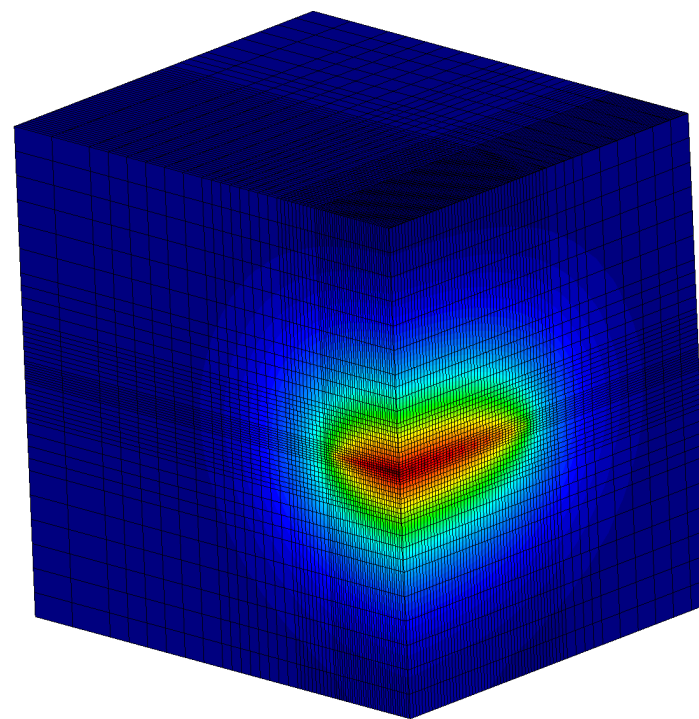
- homogenní hornina bez bentonitových vrstev
- liniový zdroj tepla v místech UOS
- rozměry oblasti  $2 \times 2 \times 1$  km, s ohledem na symetrii se řeší čtvrtina
- 330 480 uzlů, 316 039 šestistěnných prvků s lineárními aproximačními funkcemi
- výpočetní čas kolem 32 hodin



step 0  
Contour Fill of 1-trf temperature.





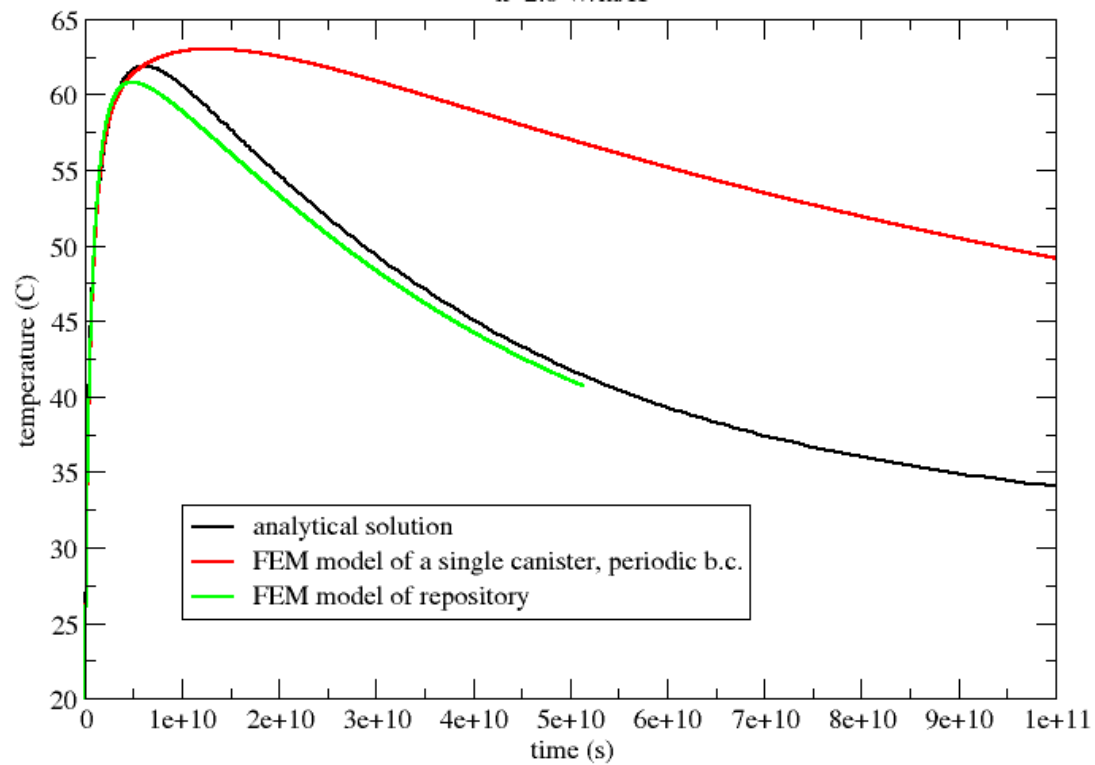


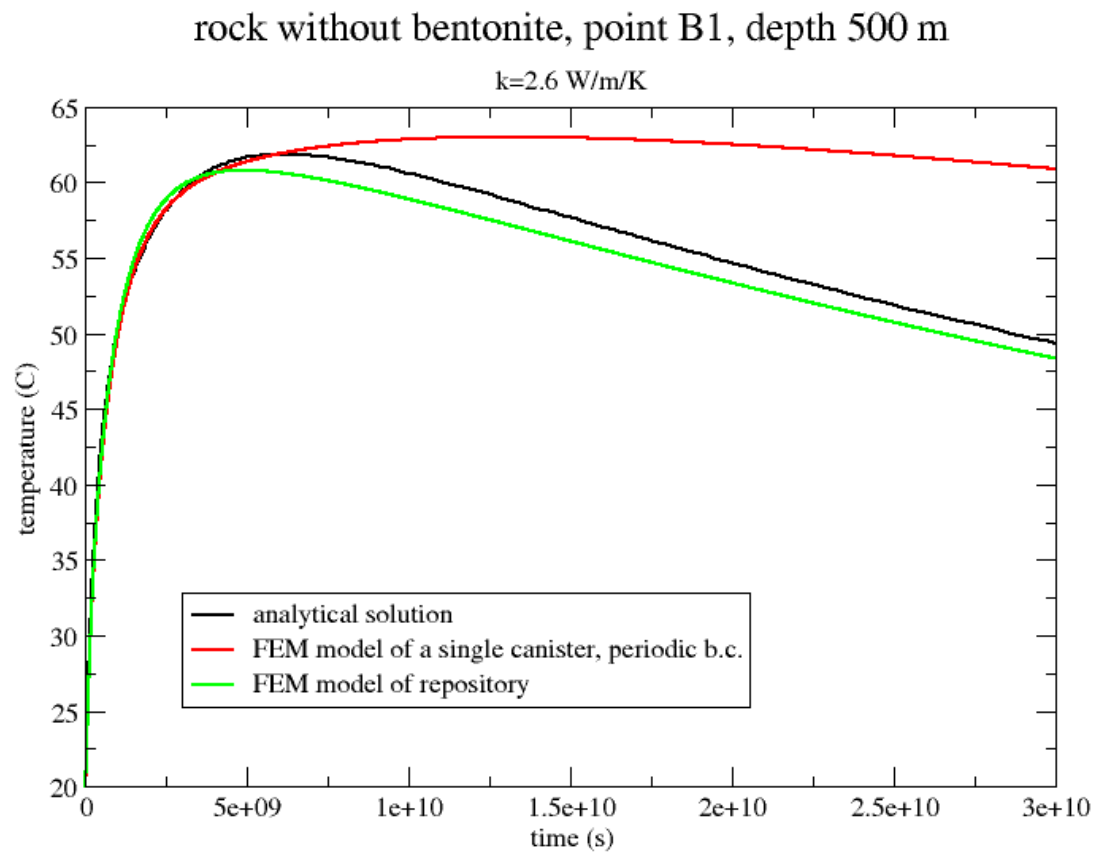
step 1.819034e+10  
Contour Fill of 1-trf temperature.

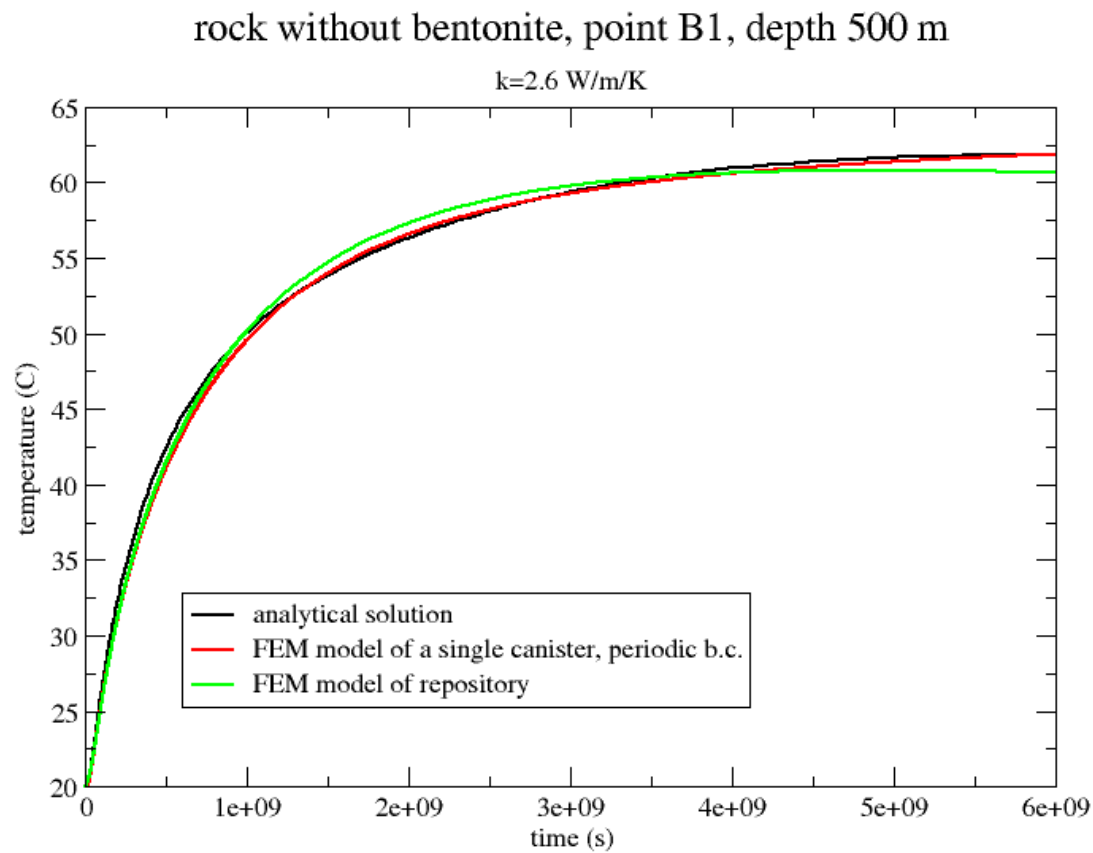


rock without bentonite, point B1, depth 500 m

$k=2.6 \text{ W/m/K}$







soustava algebraických rovnic

$$(\mathbf{C} + \Delta t \alpha \mathbf{K}) \mathbf{v}_{i+1} = \mathbf{f}_{i+1} - \mathbf{K}(\mathbf{d}_i + \Delta t(1 - \alpha)\mathbf{v}_i).$$

byla řešena 5 000-krát

počet neznámých v soustavě je přibližně 330 000

pro tyto analýzy byla použita metoda sdružených gradientů

volba počáteční aproximace  $\mathbf{x}_0$

výpočet počátečního rezidua  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$

nastavení počátečního směrového vektoru  $\mathbf{s}_0 = \mathbf{r}_0$

iterace  $k = 0, 1, \dots$

$$\alpha_k = \frac{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{A} \mathbf{s}_k}$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{s}_k$$

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{A} \mathbf{s}_k$$

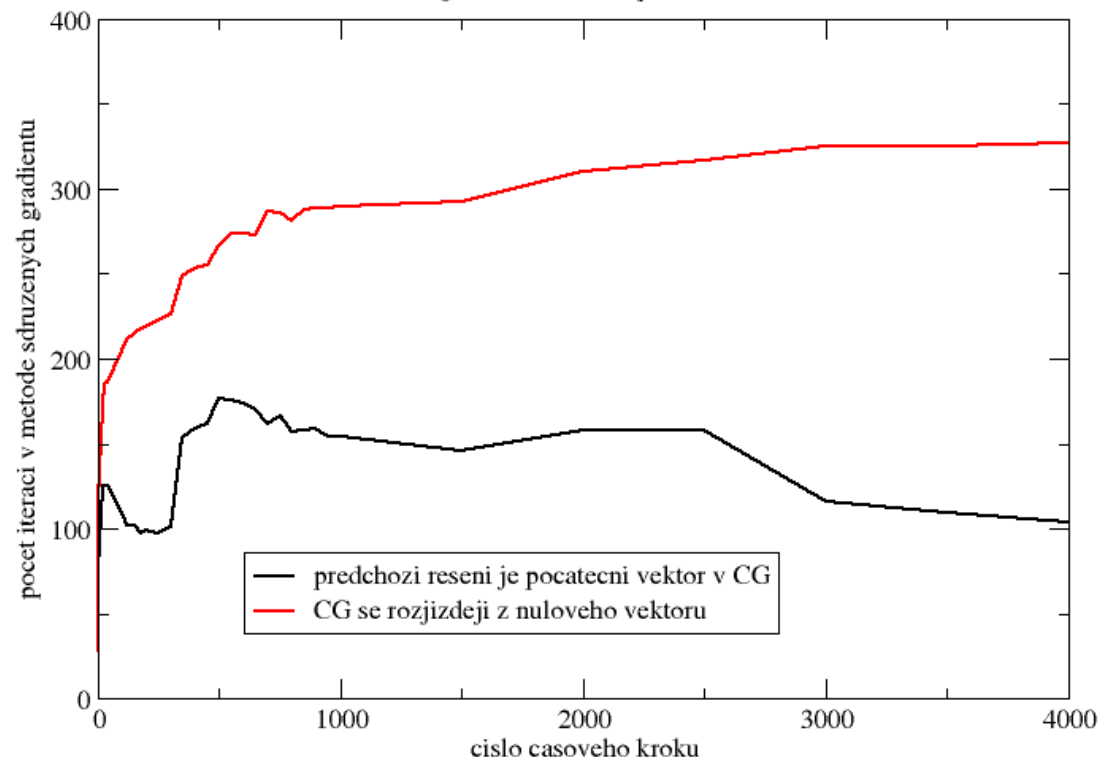
pokud  $\|\mathbf{r}_{k+1}\| < \varepsilon$ , konec iterace

$$\beta_k = \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}$$

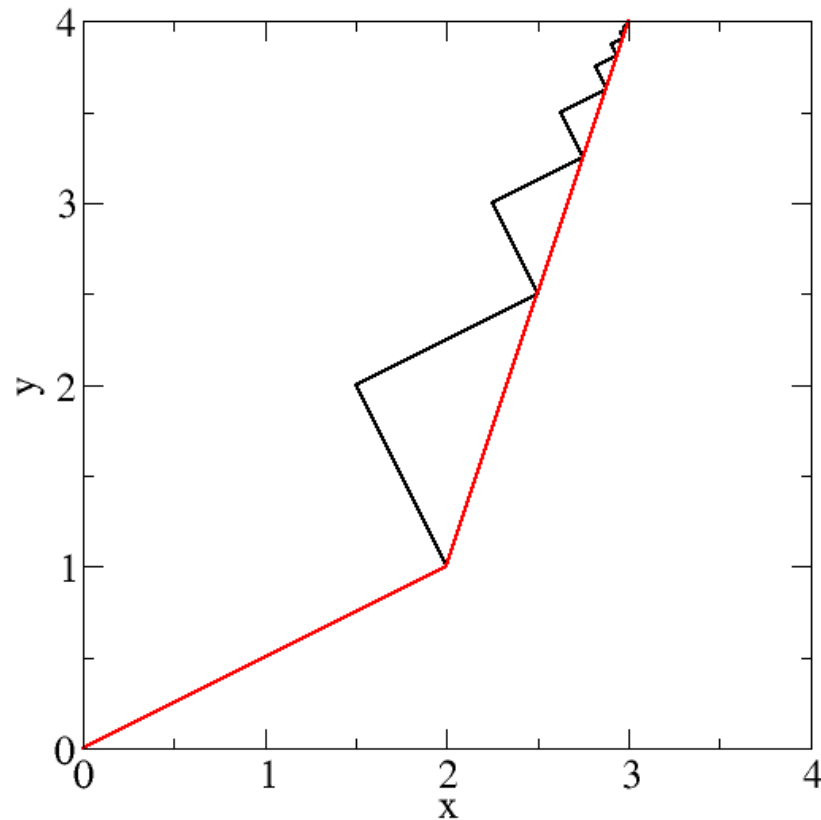
$$\mathbf{s}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{s}_k$$

### Vliv počátečního vektoru v CG na počet iterací

casova integrace ve vedeni tepla v celem ulozisti



## Porovnání chování metody sdružených gradientů a metody největšího spádu



## Závěr

- Používají se modely v různých měřítcích.
- Je nutné používat vhodné aproximační funkce (např. kvůli inf-sup podmínce).
- Zásadní je výběr vhodné metody řešení soustav nelineárních a lineárních algebraických rovnic.
- Kvůli nedostatku dat hrají roli nejistoty.