

Simulace experimentu sycení bentonitu pomocí neizotermální Richardsovy rovnice nástrojem General form PDE

Ilona Hančilová, Jiří Landa,
Milan Hokr

Technická univerzita v Liberci

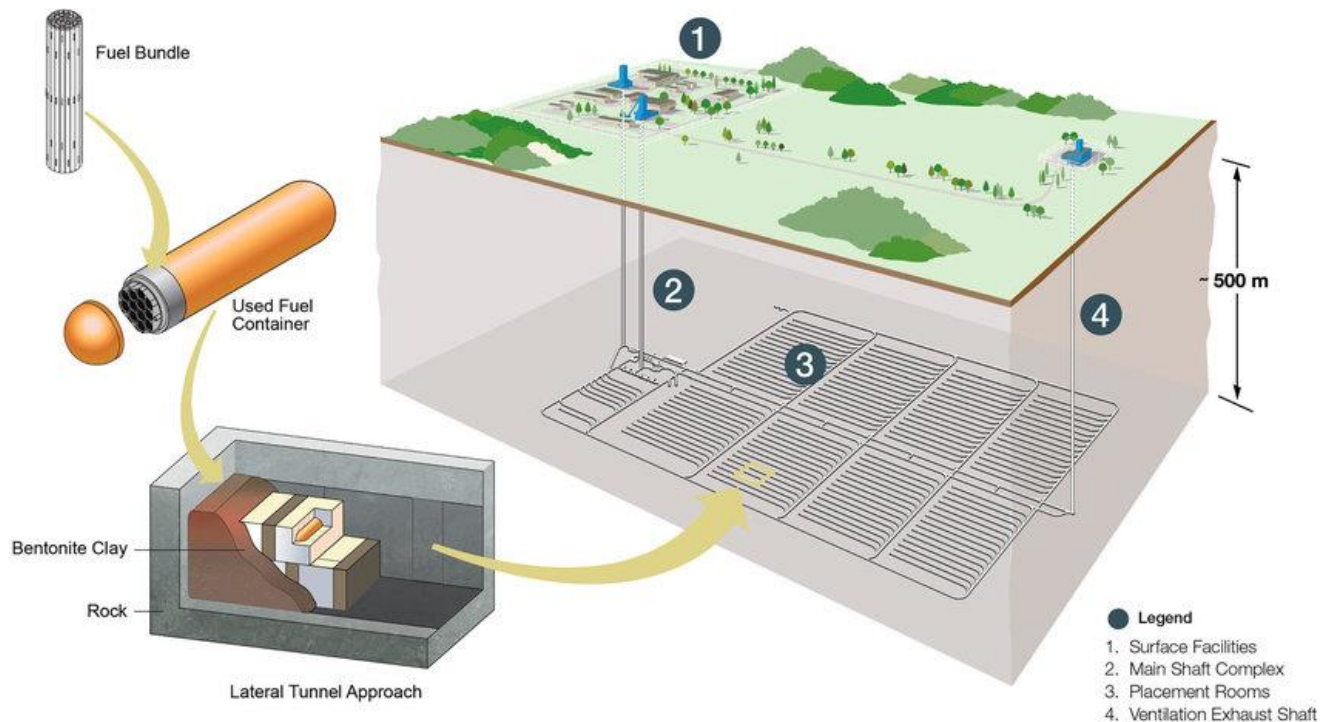
Konference COMSOL Multiphysics 23.-24.5.2019

Přehled

- Motivace: geologické úložiště vyhořelého jaderného paliva
- Fyzikální úloha: neizotermálního proudění nesaturované zemině
- Experiment v podzemní laboratoři
- Řešení v COMSOL
 - General form PDE
 - Vstupní data
 - Chování solveru / nonlinearity
 - Varianty

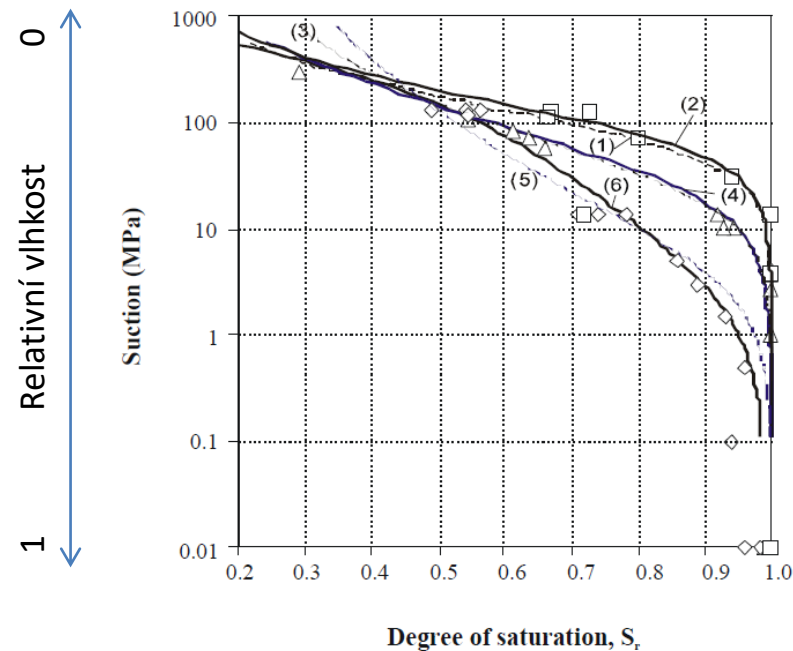
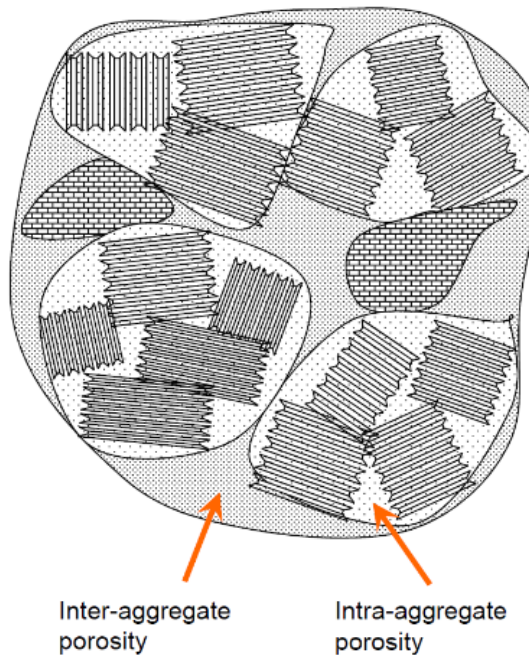
Hlubinné úložiště

- Vyhořelého jaderného paliva a vysoce aktivních odpadů
- Multibariérový koncept
- Prokázání bezpečnosti na >100tis. Let
- Termo-hydro-mechano-chemické procesy
- Těsnící vrstva: bentonit
- In-situ experimenty (analog)



Bentonit

- Bobtnavý jíl (minerál montmorilonit)
- Víceúrovňová pórová struktura
- Voda vázána dominantně chemickou vazbou (vs. kapilární síly v „běžné“ zemině)
- Funkce: těsnící a tlumící materiál, „nedegradující“



Rovnice

- Neizotermální Richardsova rovnice s difúzní páry ... sdružená termo-hydraulická úloha (Wang et al., 2011)
 - Proudění v nesaturovaném porézním prostředí (Richardsova rovnice)
 - Pára a mobilita jako další členy v bilanční rovnici vody
 - Rovnováha pára/kapalina řízená teplotou
 - Vedení tepla v pevné fázi a kapalině, závislost vodivosti na nasycení
- Stavové proměnné: tlak/sací tlak, teplota

$$\begin{aligned}
 & n(\rho_w^l - \rho_w^g) \left(\frac{\partial S^l}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial S^l}{\partial p^l} \frac{\partial p^l}{\partial t} \right) + (1 - S^l) n \left(\frac{\partial \rho_w^g}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial \rho_w^g}{\partial p^l} \frac{\partial p^l}{\partial t} \right) + \\
 & - \nabla \cdot \left[\frac{\rho_w^l k k_r^l}{\mu^l} (\nabla p - \rho^l g) \right] - \nabla \cdot \left[\rho^g \frac{M_a M_w}{M_g^2} D^g \nabla \left(\frac{p_w^g}{p^g} \right) \right] = Q_w
 \end{aligned}$$

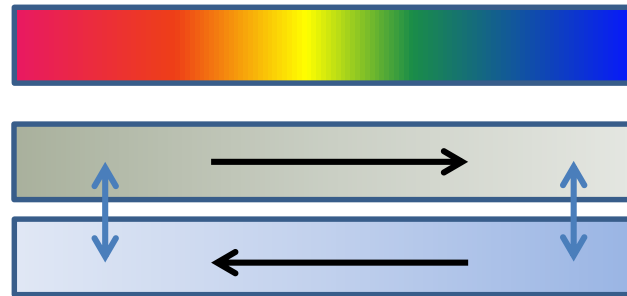
Bilance hmoty
(vody = kapalně
+ páry)

$$(\rho C_p)_{eff} \frac{\partial T}{\partial t} + \rho^l C_p^l \frac{k k_r^l}{\mu^w} (-\nabla p^l + \rho^l g) \nabla T - \nabla \cdot (K_{eff} \nabla T) + Q_T = 0$$

Bilance energie

Proces syčení a transportu tepla

- Teplota
- Pára
- Voda (nasycení)



RH
Kapalina-
pára
mobilita



Tepelná
vodivost
a
kapacita

Experiment

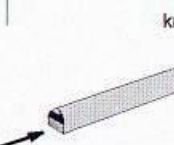
- Podzemní laboratoř Grimsel ve Švýcarsku
- FEE
- in C

LEGEND

Test areas

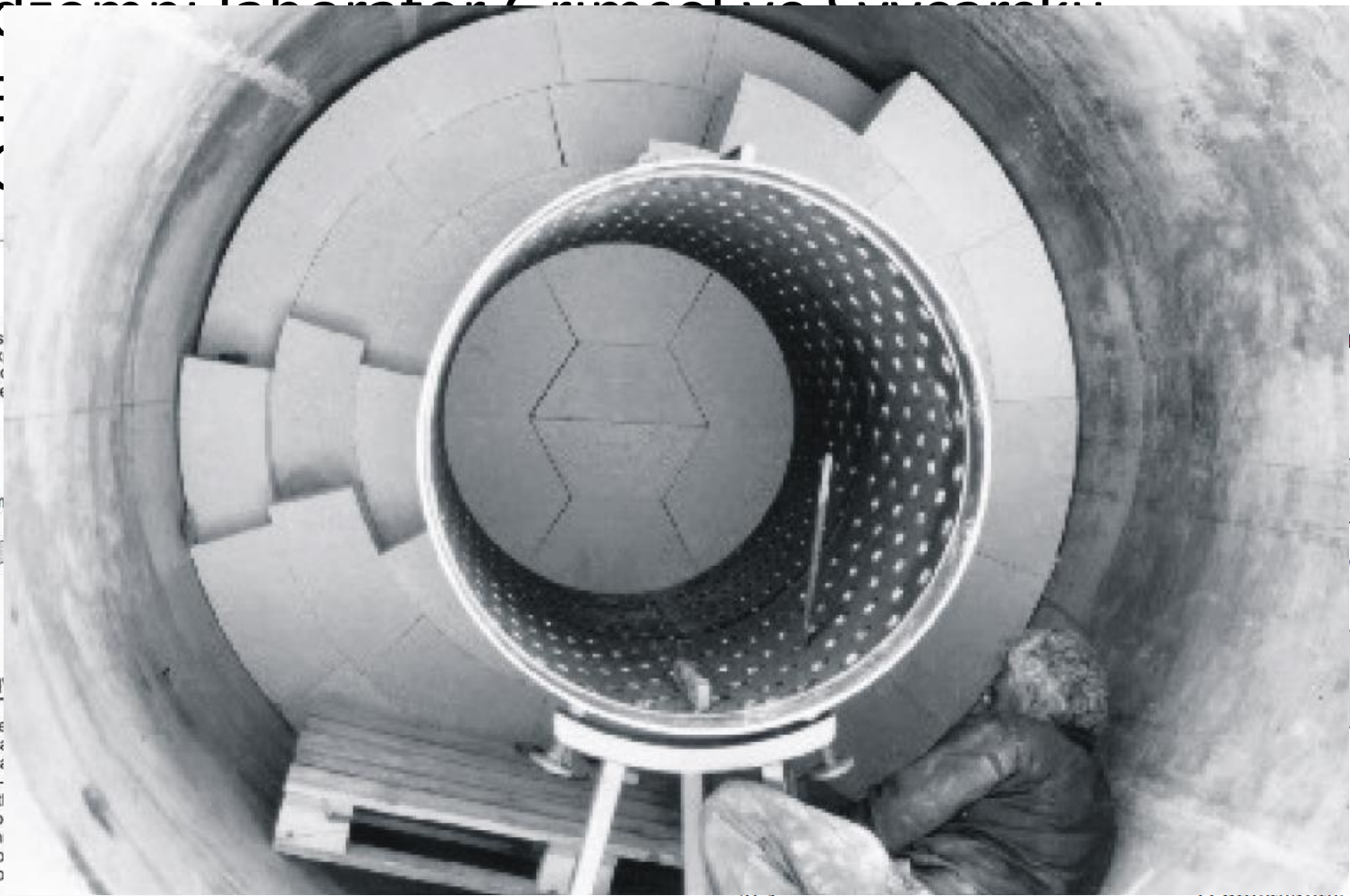
BK	Fracture sys
MI	Migration ex
US	Underground
VE	Ventilation te
WT	Heater test

km



Tests in Phase I

BOS	Bore
EDZ	Exce
EP	Exce
FEBEX	Full-
TOM	Furti
TPF	Two
CP	Con
ZPK	Two
ZPM	Two



rel to KWO

70.4

(Dimensions in meters)



Průběh experimentu

- Kroky
 - Ražba tunelu
 - Instalace bentonitu a topidel
 - 0-53 days ... topidla s nastaveným výkonem
 - 53-1823 d ... topidla s nastavenou teplotou (100)
 - 1827-1917 d ... rozebrání prvního úseku
 - 1917-6600 d ... nastavená teplota topidla č.2

COMSOL model

- General form PDE
- Reprezentace axisymetrického modelu vložení opravného členu
 - Nefunguje s interní kontrolou jednotek
- Stejně rovnice testovány na 1D úloze (vs výsledky v literatuře)
- Postprocessing
 - Časový vývoj, 1D profily, celkový tok (derived values)

Equation

Show equation assuming:
 Study 3, Time Dependent

$$e_a \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} + d_a \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma = f$$

$$\mathbf{u} = [p, T]^T$$

$$\nabla = \left[\frac{\partial}{\partial r}, \frac{\partial}{\partial z} \right]$$

Conservative Flux

Γ_r	$-(\text{rho}_0 * k_{fce}(p) * kr(p) / \text{visc}) * d(p,r) + Dpv(p,T) * d(p,r) + ftv * Dtv(p,T) * d(T,r) * 2 * pi * r$	r	1/m
Γ_z	$-(\text{rho}_0 * k_{fce}(p) * kr(p) / \text{visc}) * d(p,z) + Dpv(p,T) * d(p,z) + ftv * Dtv(p,T) * d(T,z) * 2 * pi * r$	z	1/m
Γ_r	$-\text{alpha}_t(SI(p)) * d(T,r) * 2 * pi * r$	r	1/m
Γ_z	$-\text{alpha}_t(SI(p)) * d(T,z) * 2 * pi * r$	z	1/m

Source Term

f	0	1/m ²
f	$-\left((1000 * 4280 * k_{fce}(p) * kr(p) / \text{visc}) * ((d(p,r) * d(T,r)) + (d(p,z) * d(T,z))) \right) * 2 * pi * r$	1/m ²

Damping or Mass Coefficient

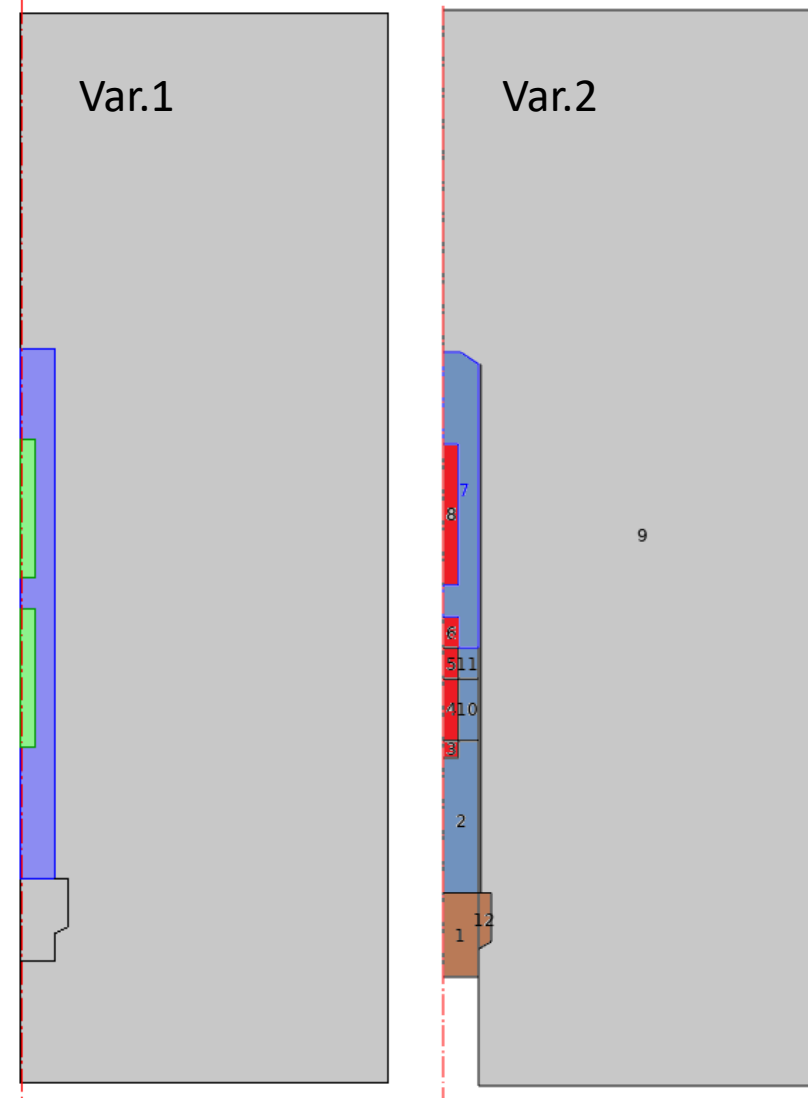
d_a	$(n_b * ((\text{rho}_0 - \text{rho}_g(p,T)) * d(SI(p),p) + (1 - SI(p)) * d(\text{rho}_g(p,T),T))) * 2 * pi * r$	s/m ²	$n_b * ((1 - SI(p)) * d(\text{rho}_g(p,T),T)) * 2 * pi * r$	s/m ²
d_a	0	s/m ²	$((1 - n_b) * C_b(T) * \text{rho}_b + n_b * SI(p) * 1000 * 4280) * 2 * pi * r$	s/m ²

Mass Coefficient

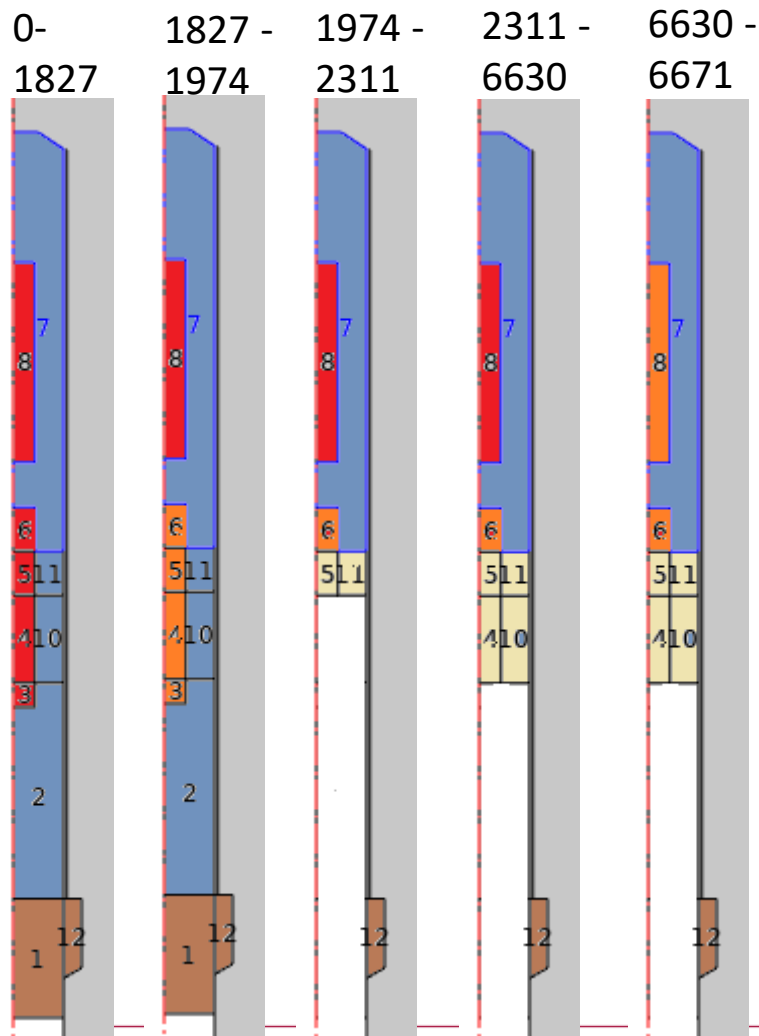
e_a	0	s ² /m ²	0	s ² /m ²
e_a	0	s ² /m ²	0	s ² /m ²

Geometrie a podmínky

- 2D osově symetrický model
 - 12m x 35m
- Domény:
 - Hornina, bentonit, topidlo (ocel), zátka
- Okrajové podmínky
 - Konstantní teplota (12 degC)
 - Konst. Tlak 10kPa/3MPa
 - Topidlo: výkon / povrchová teplota
- Počáteční podmínky
 - sací tlak bentonit -120 Mpa
 - Tlak hornina 10kPa / stac.stav



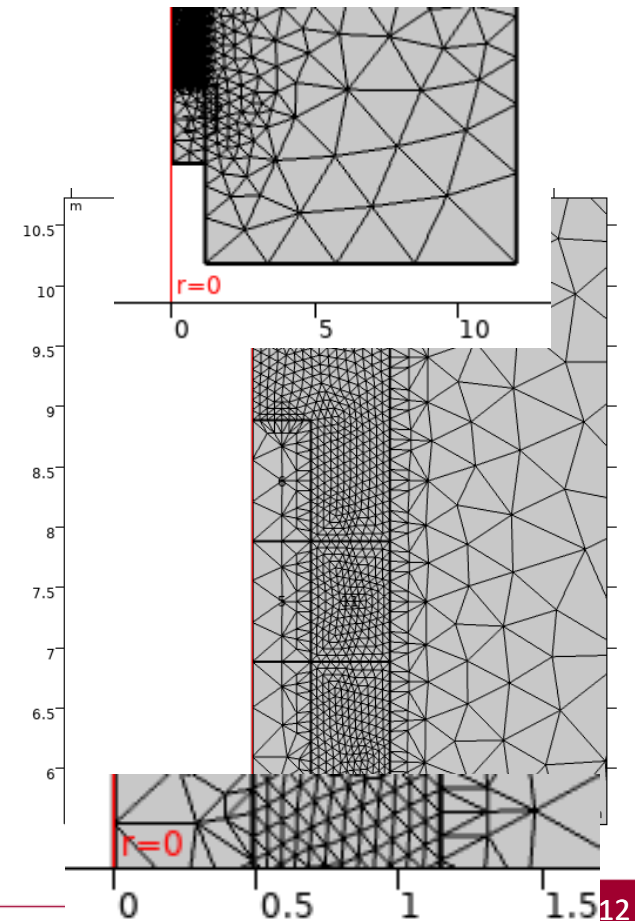
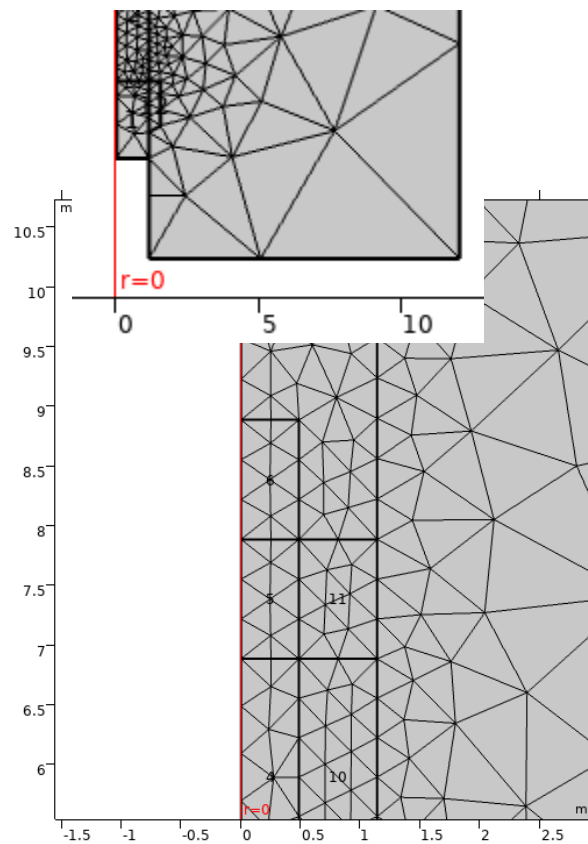
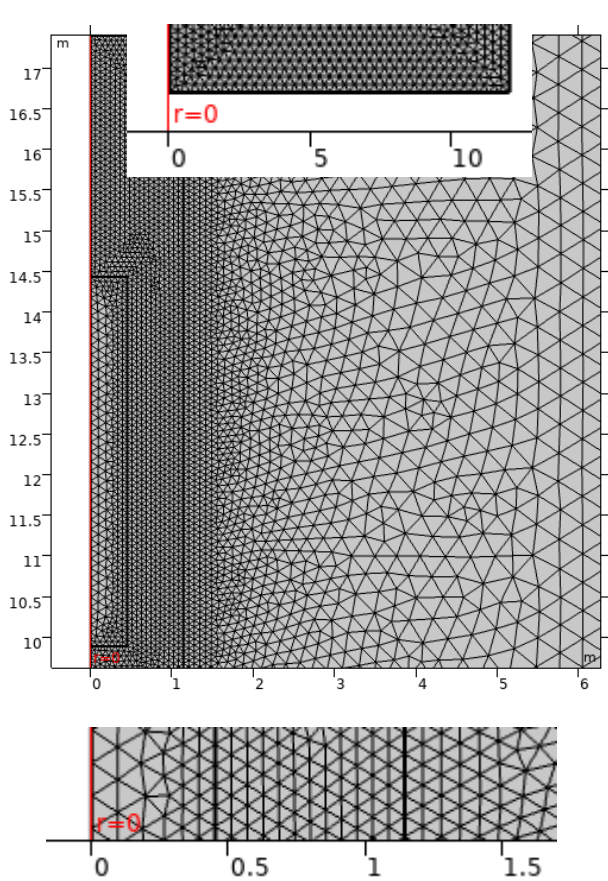
Změny geometrie v 5 krocích



time point	date	event	simulation time [d]
0	27.02.1997	Heaters switch on (day 0)	0
1		Heaters control change	53
2	28.02.2002	Heater #1 switch off	1827
3	25.07.2002	End shotcrete stage #1	1974
4	27.06.2003	End shotcrete stage #2	2311
5	24.04.2015	Heater #2 switch off	6630
6	04.06.2015	Extraction of heater #2	6671

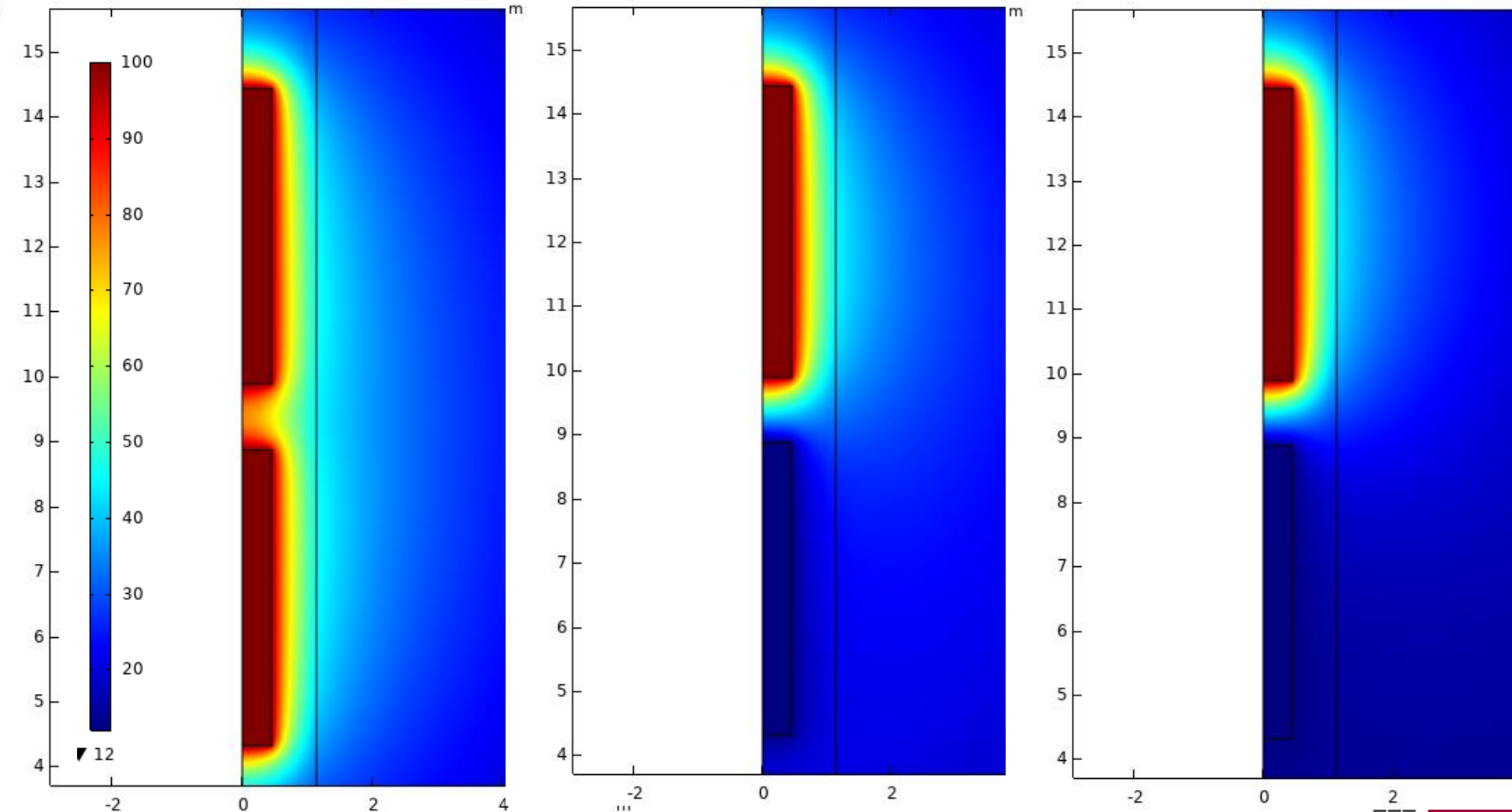
Výpočet

	Ver.1	Ver.2	Ver.3
elementů	24111	937	7321

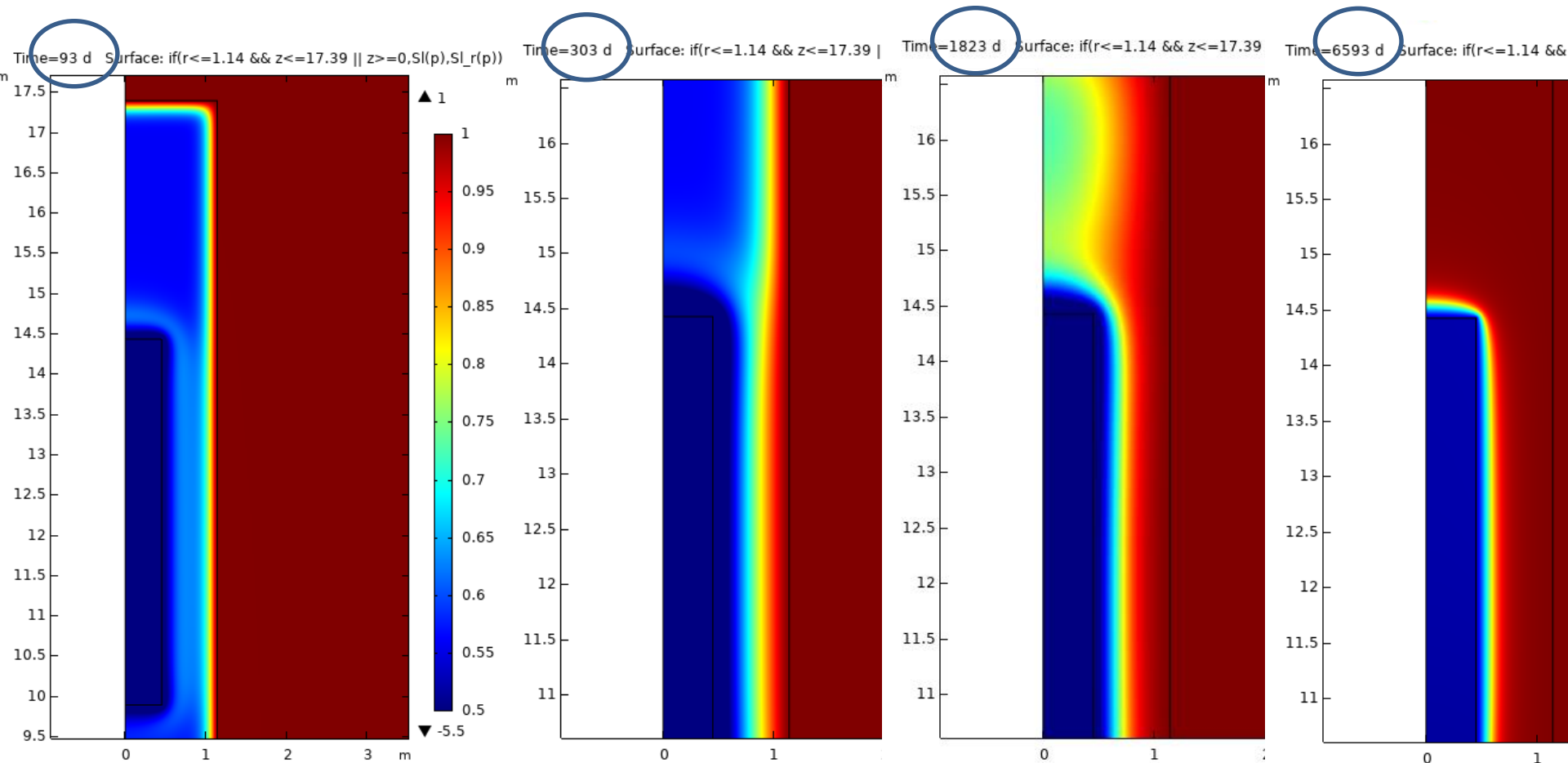


Výsledky: tepelné pole

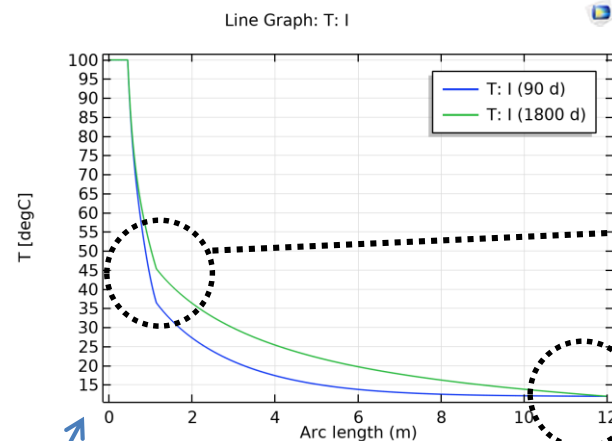
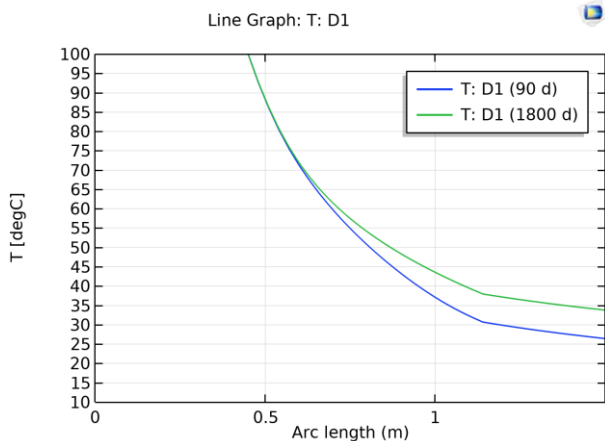
Time=1823 d if(r<=1.14 && z<=17.39 || z>=0,SI(v),SI_r) Time=1923 d if(r<=1.14 && z<=17.39 || z>=0,SI(v),SI_r) Time=6593 d if(r<=1.14 && z<=17.39 || z>=0,SI(v),SI_r)



Výsledky: pole nasycení

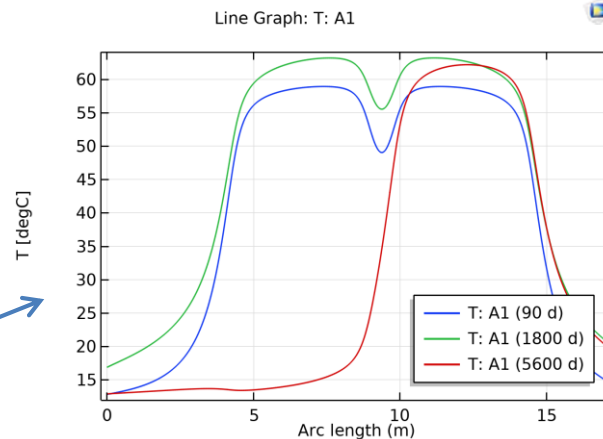
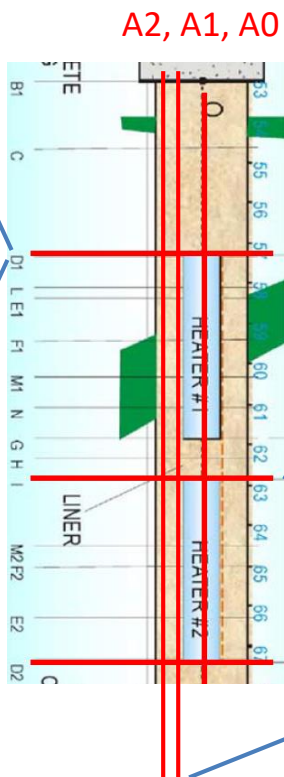
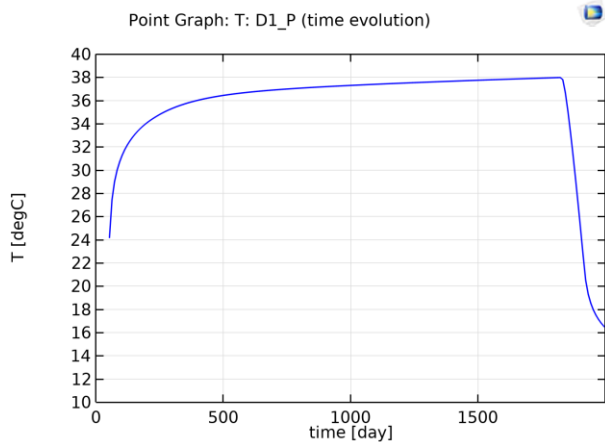


Teplota – profily a průběh



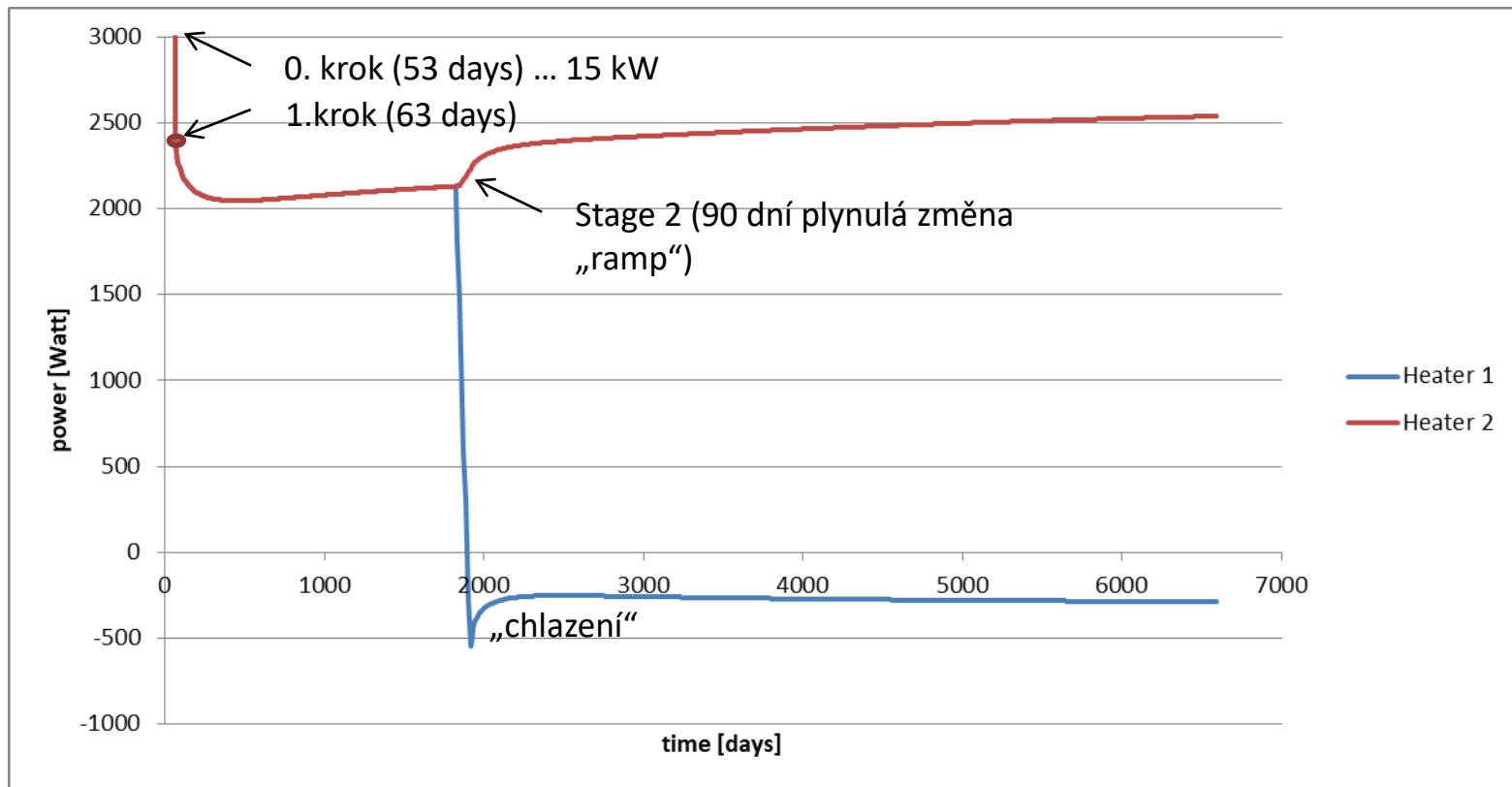
Rozhraní materiálů (tepelná vodivost)

Efekt okrajové podmínky



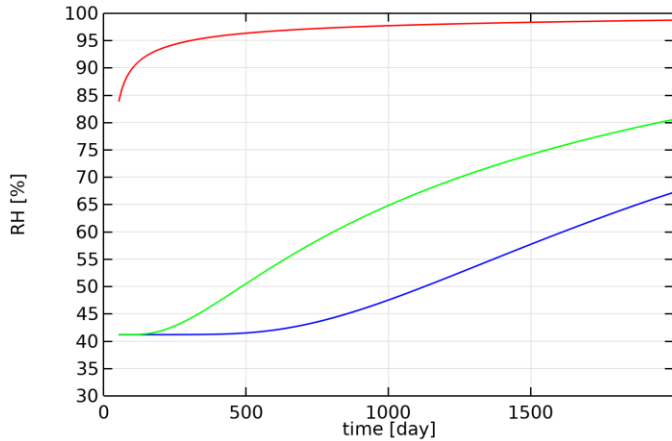
Průběh výkonu topidel

- Exp: Řízen automatikou pro udržení předepsané teploty
- Model: Derived values ... line integration, uflux.T, dflux.T

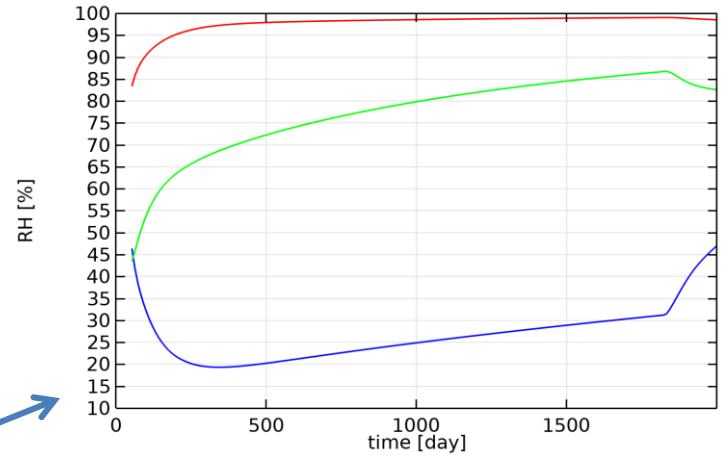


Relativní vlhkost (ekv. nasycení)

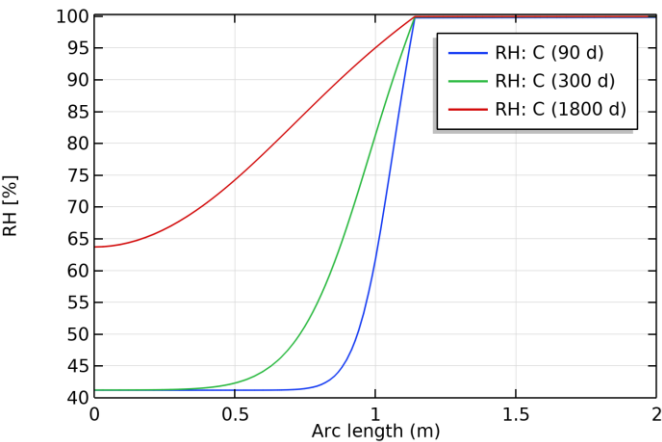
Point Graph: RH: C_P (time evolution)



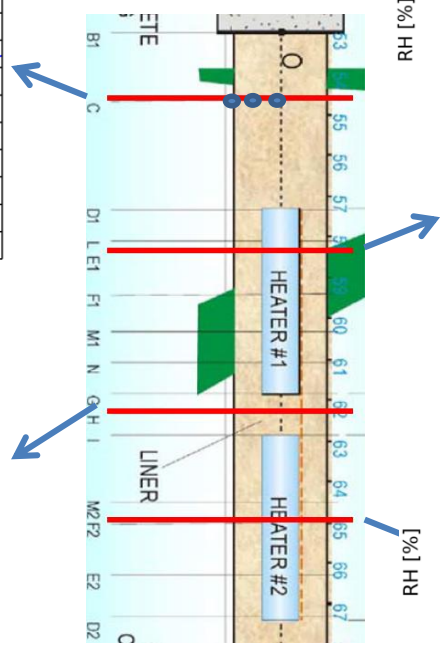
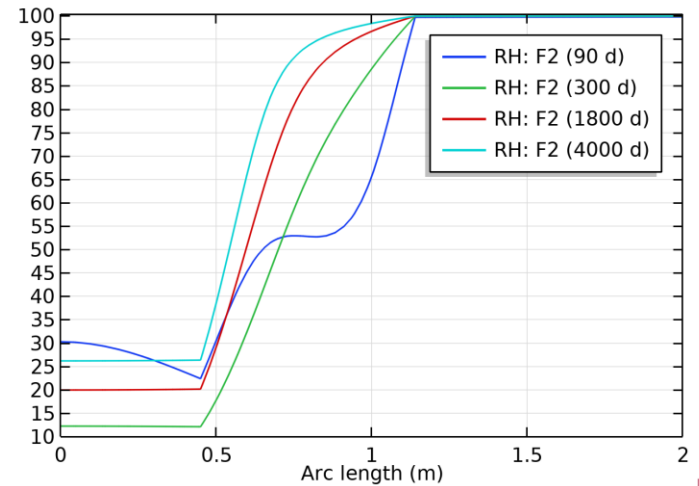
Point Graph: RH: E1_P (time evolution)



Line Graph: RH: C

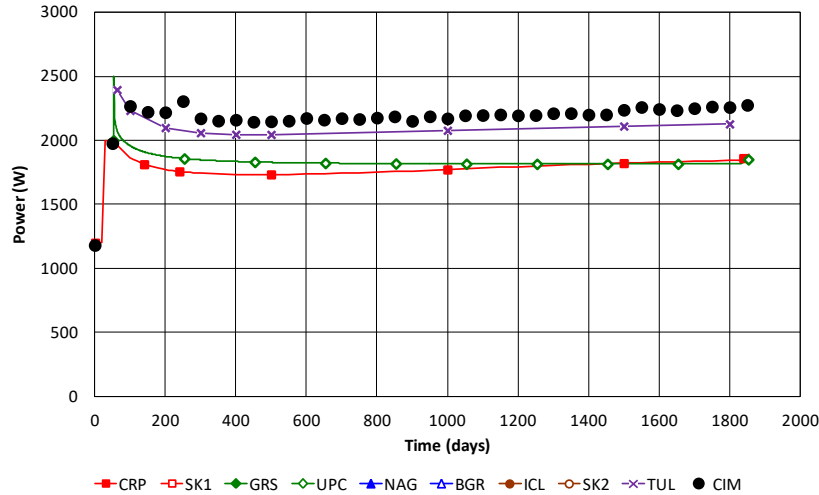


Line Graph: RH: F2

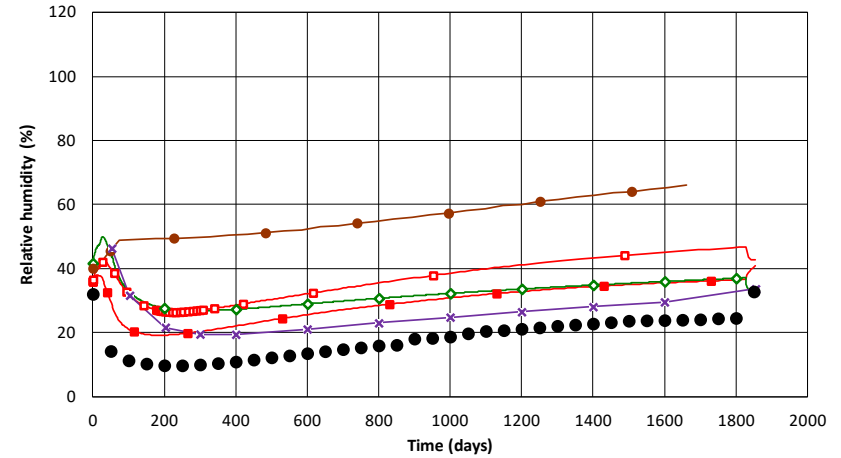


Porovnání

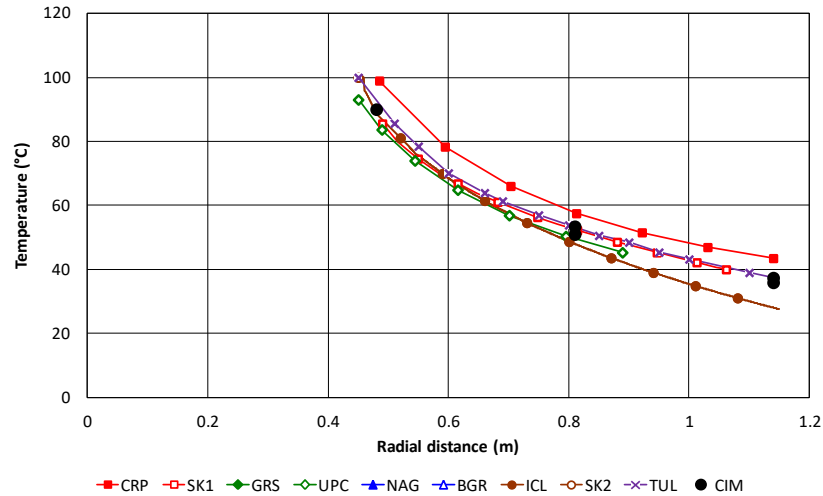
Evolution at heater H2



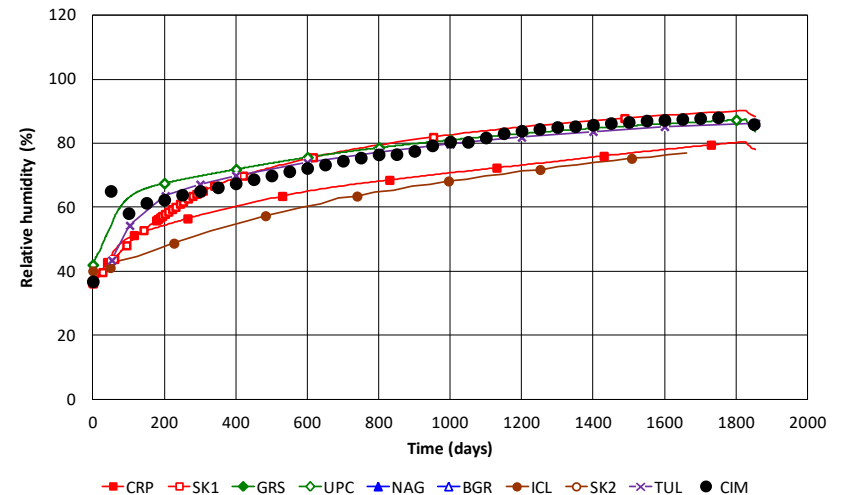
Evolution at point P1 on section E1



Distributions along radial segments on section D2 at 1800 days

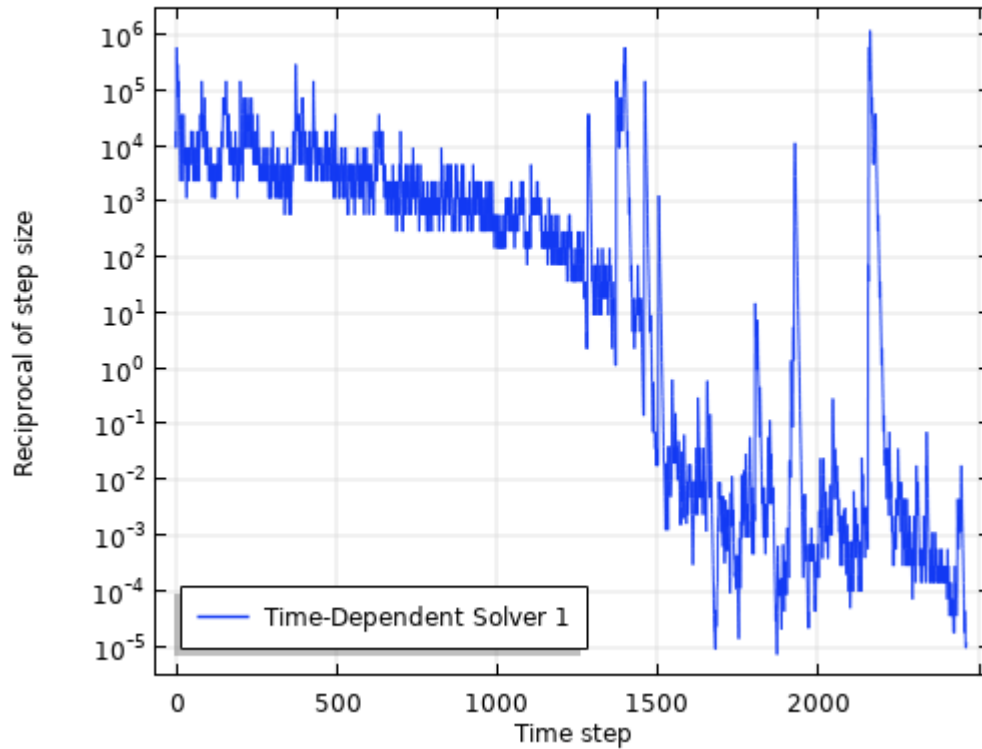


Evolution at point P2 on section E1

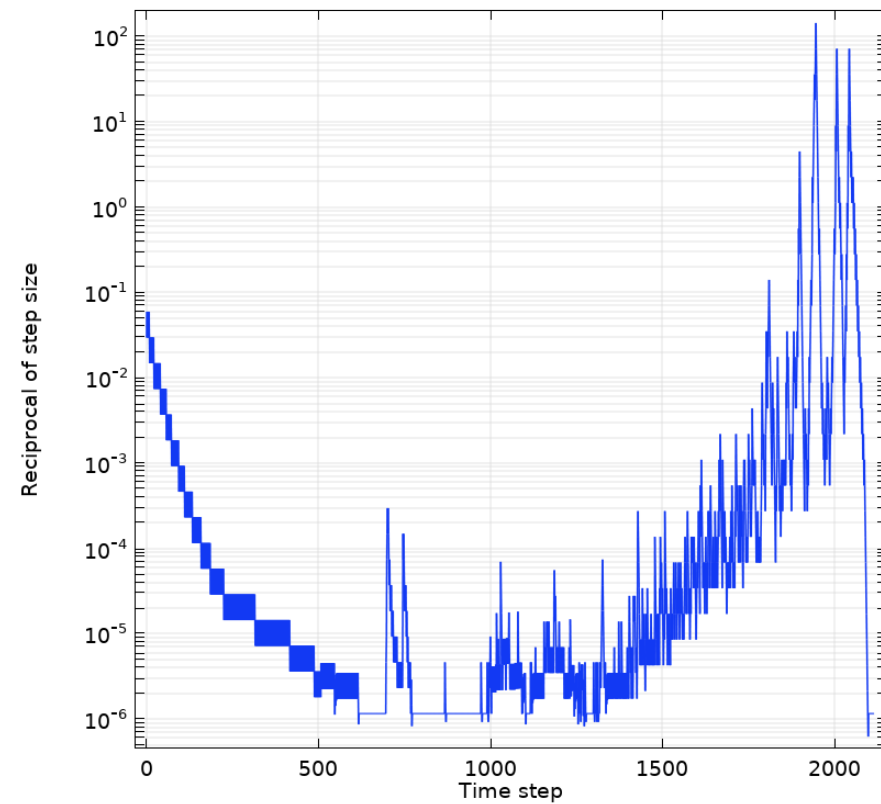


Chování řešiče

Time-Dependent Solver 1



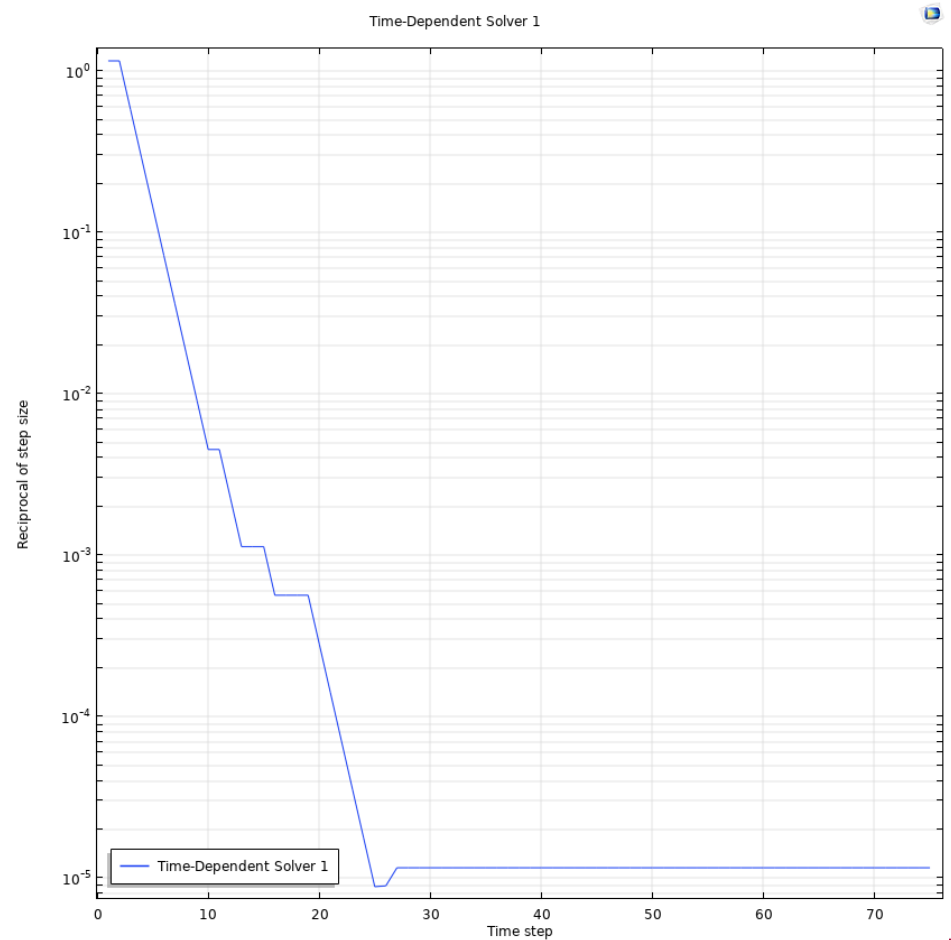
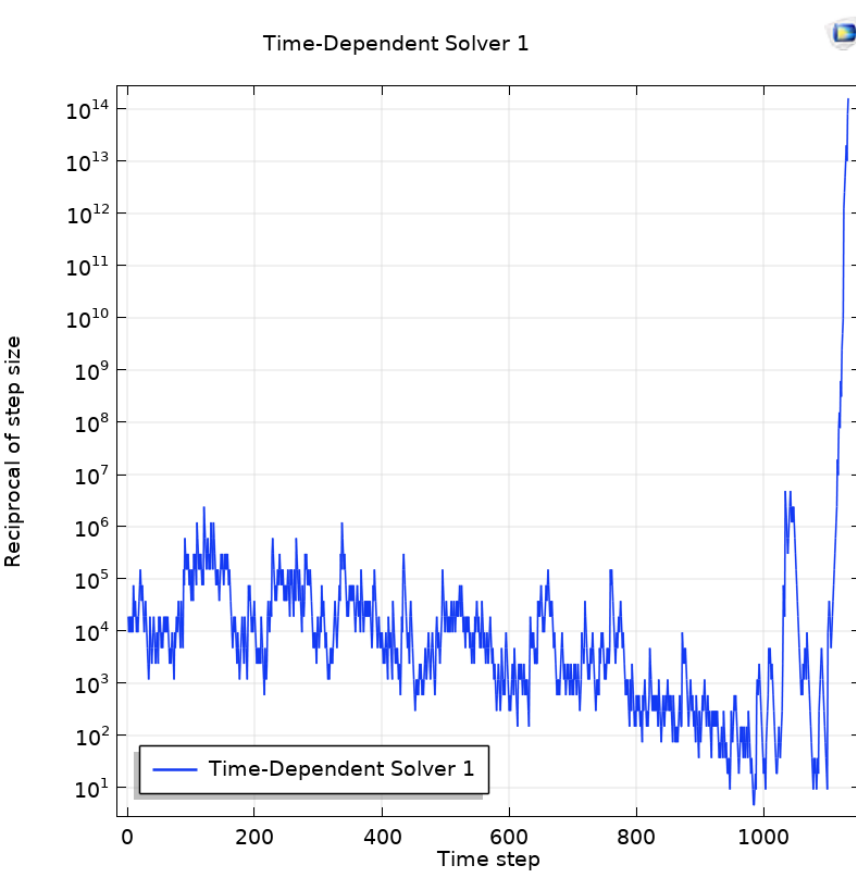
Time-Dependent Solver 2



Chování řešiče

- Nekonvergence

Zlepšení s předpočítanou počáteční podmínkou



Alternativy pro simulace

- OpenGeoSys (UFZ Leipzig)
- TOUGH2 (Lawrence Berkeley Nat.Lab.)
- CODE_BRIGHT (Univ. Politecnica Catalunya – Barcelona)

Shrnutí

- „Modelářské“ výzvy
 - Složitá sada rovnic a konstitučních vztahů
 - Silná nelinearita Richardsovy rovnice
 - Prostorové měřítko (mesh)
 - Nejistoty přírodních podmínek
 - Časová procedura experimentu
- Problémy s konvergencí řešiče a časovými kroky
- Dobrá shoda s měřenými daty

- Zhodnocení použití COMSOL

Pokračování

- Analýza nelinearit/konvergence
 - Na 1D modelu
- Rozšíření modelu
 - Mechanika (PDE+modul)
- Parametrizace/citlivost/kalibrace

- Děkuji za pozornost