

文章编号: 1000-7598-(2008)01-0212-08

考虑溶质浓度影响的热-水-应力-迁移耦合模型及数值模拟

张玉军

(中国科学院武汉岩土力学研究所, 武汉 430071)

摘 要: 高放射性核废料地质处置库围岩中地下水的密度因溶质浓度不同而发生变化, 这将影响到饱和-非饱和孔隙介质中近场和远场的热-水-应力耦合过程, 同时温度场、应力场也要对地下水中的核素及矿物质迁移产生作用。考虑这两个因素, 建立和引入了相关的应力平衡方程、水连续性方程、能量守恒方程和渗透迁移方程, 并研制出了对应分析孔隙介质中热-水-应力-迁移耦合问题的二维有限元程序。通过对一个假定的核废料地下处置库在核素泄漏后多场耦合过程的数值计算, 考察了近场围岩中的温度、应力、孔隙水压力、核素浓度的分布及随时间的变化。结果初步显示了所建模型及程序可模拟热-水-应力-迁移耦合现象, 因而具有一定的实用性。

关 键 词: 岩土力学; 核废料; 地质处置; 溶质浓度; 热-水-应力-迁移耦合; 数值模拟

中图分类号: O 351

文献标识码: A

Model and numerical simulation for coupled thermo-hydro-mechanical-migratory processes considering influence of solute concentration

ZHANG Yu-jun

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

Abstract: The density of groundwater in the surrounding rockmass of a geological disposal repository of high-level radioactive nuclear waste varies with the solute concentration, which will influence the thermo-hydro-mechanical processes in near field and far field of the saturated-unsaturated porous media. At the same time the temperature field and the stress field will also exert actions on the migratory of nuclides and solutes in groundwater. Considering these two factors the relevant momentum equilibrium equation, the continuity equation for water, the energy balance equation and the percolation and migration equation are established and introduced; and a 2D code of finite element method is developed for analyzing coupled thermo-hydro-mechanical-migratory phenomena in porous media. Through a numerical computation for the multi-field coupling progress after nuclide leakage in an assumed nuclear waste repository, the distribution and change of the temperature, stresses, pore pressures and nuclide concentrations in the near field are investigated. The results show that the established model and FEM code can be used to simulate coupled thermo-hydro-mechanical-migratory phenomena, so as to have certain practicality.

Key words: rock and soil mechanics; nuclear waste; geological disposal; solute concentration; thermo-hydro-mechanical-migratory coupling; numerical simulation

1 引 言

对于一个在有地下水的环境中的高放射性核废料地质处置库而言, 经过数百年乃至几千年后, 浸入的地下水会使得缓冲层饱和并接触到核废料包装容器。在各种化学、物理及力学的损伤作用下, 核废料包装容器上可能出现裂纹与空洞, 使得玻璃

固化体中的有害核素逐渐溶解; 同时, 因为地下水在岩土介质中长期赋存, 一定量的矿物质也会溶解在水中。在处置库围岩中水力场、温度场等的作用下, 这些溶质会随水流而迁移, 并在某些地点被吸附或沉淀下来, 故在空间域和时间域中地下水的密度随溶质浓度的改变也是变化的^[1]。再者从地下水中物质运动的渗透迁移方程来看, 其中包含了渗透

收稿日期: 2007-04-18

基金项目: 国家自然科学基金项目 (No. 50578171)。

作者简介: 张玉军, 男, 1956 年生, 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

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，而地下水的流速较高时渗透成了控制因素。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，但目前人们还很少考虑在放射性核素迁移中温度场、应力场的影响^[2-5]以及在热-水-应力耦合现象中溶质浓度的影响^[6,7]。针对这两个问题，笔者考虑了溶质浓度对地下水的密度的作用，建立和引入了相应的控制方程，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^[8,9]，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进行了改进，从而可以同步地对温度场、渗流场、应力场和放射性核素浓度的变化进行解析。以一个假想的核废料处置库在核素泄漏后多场耦合过程为算例，考察了在热-水-应力-迁移耦合作用条件下近场围岩中温度场、应力场、孔隙水压力场及核素浓度的分布及变化，并得出相应的认识。

2 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^[10,11]，考虑地下水的密度随溶质浓度的不同而变化，笔者推导的应力平衡方程、水连续性方程、能量守恒方程如下。

2.1 应力平衡方程

在饱和-非饱和的岩土体中，总应力 σ 和有效应力 σ' 可分别表示为

$$\sigma = \sigma' - mp \tag{1}$$

$$\sigma' = D_T(\varepsilon - \varepsilon_p - \varepsilon_T - \varepsilon_{sw}) \tag{2}$$

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_p &= -m \frac{p}{3K_s} \\ \varepsilon_T &= m \frac{\beta_s T}{3} \\ \varepsilon_{sw} &= -m\beta_{sw}s_1 \end{aligned} \right\} \tag{3}$$

式中： D_T 为切线弹塑性模量矩阵； ε 为总应变； ε_p 为孔隙压力引起的应变； ε_T 为温度引起的应变； s_1 为饱和度； ε_{sw} 为吸水膨胀引起的应变； m 为法向应力单位列阵； β_s 为固相的热膨胀系数； K_s 为固相的压缩模量； β_{sw} 为吸水膨胀系数； p 为孔隙压力； T 为温度。

根据弹性力学理论，应力平衡方程表示如下：

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} - f_i = \nabla \sigma - f_i = 0 \tag{4}$$

式中： f_i 为体积力。

将式 (1)、式 (2) 代入式 (4) 得

$$\nabla \left[D_T \left(\varepsilon + m \frac{p}{3K_s} - m \frac{\beta_s T}{3} + m\beta_{sw}s_1 \right) - mp \right] = f_i \tag{5}$$

若孔隙水中有密度比 γ 、浓度 c 的溶质，取淡水的密度为 ρ_w ，则孔隙水的密度可表示为

$$\rho_1 = \rho_w(1 + \gamma c) \tag{6}$$

令孔隙水压力为 p_1 ，不计孔隙中空气压力，则有：

$$p = s_1 p_1 \tag{7}$$

$$\text{而 } \frac{\partial p}{\partial t} = s_1 \frac{\partial p_1}{\partial t} + p_1 \frac{\partial s_1}{\partial t} = (s_1 + D_{s1} p_1) \frac{\partial p_1}{\partial t} \tag{8}$$

式中： $D_{s1} = \frac{\partial s_1}{\partial p_1}$ 为湿气容量，其由孔隙介质的水分特性曲线确定。

对于吸水膨胀应变，取 Van Genuchten 饱和度计算式为^[12]

$$s_1 = (s_{1s} - s_{1r}) [1 + (\alpha p_1)^n]^{-k} + s_{1r} \quad (\alpha > 0) \tag{9}$$

式中： $k = 1 - 1/n$ ($0 < k < 1, n > 1$)； s_{1s} 为最大饱和度； s_{1r} 为最小饱和度。

由式 (9) 可得

$$\frac{\partial s_1}{\partial t} = \frac{\partial s_1}{\partial p_1} \frac{\partial p_1}{\partial t} = A \frac{\partial p_1}{\partial t} \tag{10}$$

其中：

$$A = -kn\alpha(s_{1s} - s_{1r})(\alpha p_1)^{n-1} [1 + (\alpha p_1)^n]^{-k-1} \tag{11}$$

将式 (5) 对时间 t 取偏微分，并代入式 (8)、式 (10) 可得

$$\nabla \left\{ D_T \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} - D_T \frac{m\beta_s}{3} \frac{\partial T}{\partial t} + \left[\left(\frac{D_T}{3K_s} - 1 \right) \cdot m(s_1 + D_{s1} p_1) + D_T m\beta_{sw} A \right] \frac{\partial p_1}{\partial t} \right\} = \frac{\partial f_i}{\partial t} \tag{12}$$

$$\text{而 } p_1 = \rho_w(1 + \gamma c)g(h - z) \tag{13}$$

式中： g 为重力加速度； h 为全水头； z 为位置水头。

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_1}{\partial t} &= (1 + \gamma c)g(h - z) \frac{\partial \rho_w}{\partial t} + \\ &\rho_w g(h - z) \frac{\partial c}{\partial t} + \rho_w(1 + \gamma c)g \frac{\partial h}{\partial t} \end{aligned} \tag{14}$$

假定淡水的密度 ρ_w 是温度和孔隙水压力的函数，即

$$\rho_w = \rho_{w0}(T, p_1) \tag{15}$$

$$\frac{\partial \rho_w}{\partial t} = \frac{\partial \rho_w}{\partial p_1} \frac{\partial p_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_w}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\rho_{w0}}{k_1} \frac{\partial p_1}{\partial t} - \rho_{w0} \beta_1 \frac{\partial T}{\partial t} \quad (16)$$

式中： k_1 为淡水的压缩模量； β_1 为淡水的膨胀系数。

从而，有：

$$\rho_w = \rho_{w0} \left[1 + \frac{1}{k_1} (p_1 - p_{10}) - \beta_1 (T - T_0) \right] \quad (17)$$

式中： p_{10} 和 T_0 分别为初始状态的孔隙水压力和温度。

将式(14)代入式(16)可得

$$\frac{\partial p_1}{\partial t} = \frac{1}{b} \left[\rho_w g (1 + \gamma c) \frac{\partial h}{\partial t} + \rho_w g (h - z) \gamma \frac{\partial c}{\partial t} - (1 + \gamma c) g (h - z) \rho_{w0} \beta_1 \frac{\partial T}{\partial t} \right] \quad (18)$$

式中： $b = 1 - (1 + \gamma c) g (h - z) \frac{\rho_{w0}}{k_1}$ 。

将式(18)代入式(12)，整理可得

$$\nabla \cdot \left\{ \mathbf{D}_T \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} - \left[\mathbf{D}_T \mathbf{m} \frac{\beta_s}{3} - \zeta (1 + \gamma c) g (h - z) \rho_{w0} \beta_1 \right] \cdot \frac{\partial T}{\partial t} - \zeta \rho_w g (1 + \gamma c) \frac{\partial h}{\partial t} - \zeta \rho_w g (h - z) \gamma \frac{\partial c}{\partial t} \right\} = \frac{\partial f_i}{\partial t} \quad (19)$$

其中：

$$\zeta = \frac{1}{b} \left\{ \left[1 - \frac{\mathbf{D}_T}{3k_s} \right] \mathbf{m} [s_1 + D_{s1} \rho_w g (1 + \gamma c) (h - z)] - \mathbf{D}_T \mathbf{m} \beta_{sw} A \right\} \quad (20)$$

式(19)即是用全水头 h 、溶质浓度 c 取代了式(12)中的孔隙水压力 p_1 得到的应力平衡方程。

2.2 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。设定水的渗流可以用达西定律来描述，笔者经过一系列的推导，得出用 ε ， p_1 和 T 表示的水的连续性方程为^[8]

$$-\nabla^T \left\{ \frac{\mathbf{K} \mathbf{r}_1 \rho_1 \mathbf{g}}{\mu_1} \nabla h \right\} + s_1 \left(\mathbf{m}^T - \frac{\mathbf{m}^T \mathbf{D}_T}{3k_s} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \left[D_{s1} \phi + \frac{\phi s_1}{k_1} + s_1 \left(\frac{1 - \phi}{k_s} - \frac{1}{(3k_s)^2} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{m} \right) (s_1 + p_1 D_{s1}) \right] \cdot \left\{ \phi s_1 \beta_1 + s_1 \left[(1 - \phi) \beta_s - \frac{\mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{m} \beta_s}{3k_s} \right] \right\} \frac{\partial T}{\partial t} = 0 \quad (21)$$

式中： \mathbf{K} 为固有渗透系数矩阵； \mathbf{r}_1 为比渗透系数矩阵，其是 s_1 的函数； μ_1 为孔隙水的黏滞系数。

将式(18)代入式(21)，整理可得

$$-\nabla^T \left\{ \frac{\mathbf{K} \mathbf{r}_1 \rho_1 \mathbf{g}}{\mu_1} \nabla h \right\} + s_1 \left(\mathbf{m}^T - \frac{\mathbf{m}^T \mathbf{D}_T}{3k_s} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \eta \rho_w g \cdot (h - z) \gamma \frac{\partial c}{\partial t} + \eta \rho_w g (1 + \gamma c) \frac{\partial h}{\partial t} - \left\{ \phi s_1 \beta_1 + s_1 \left[(1 - \phi) \beta_s - \frac{\mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{m} \beta_s}{3k_s} \right] \right\} + \eta (1 + \gamma c) g (h - z) \rho_{w0} \beta_1 \left\{ \frac{\partial T}{\partial t} \right\} = 0 \quad (22)$$

其中：

$$\eta = \frac{1}{b} \left[D_{s1} \phi + \frac{\phi s_1}{k_1} + s_1 \left(\frac{1 - \phi}{k_s} - \frac{1}{(3k_s)^2} \mathbf{m}^T \mathbf{D}_T \mathbf{m} \right) (s_1 + p_1 D_{s1}) \right] \quad (23)$$

式(22)即是用全水头 h 、溶质浓度 c 取代了式(21)中的孔隙水压力 p_1 得到的水连续性方程。

2.3 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。笔者经过推导（略去繁琐的过程），得出能量守恒方程为^[8]

$$-\nabla^T \lambda \nabla T + \phi s_1 \rho_1 C_1 (\nabla^T T) V^a + [(1 - \phi) C_s T \frac{\rho_s}{K_s} + \phi C_1 T \frac{\rho_1}{K_1}] (s_1 + D_{s1} p_1) \frac{\partial p_1}{\partial t} - \{ (1 - \phi) C_s T \rho_s \beta_s + \phi C_1 T \rho_1 \beta_1 - [(1 - \phi) \rho_s C_s + \phi \rho_1 C_1] \} \frac{\partial T}{\partial t} = 0 \quad (24)$$

式中： C_1 ， C_s 分别为孔隙水及岩土介质的比热； $\rho_1 C_1$ ， $\rho_s C_s$ 分别为孔隙水及岩土介质的热容量； λ 为岩土介质的导热系数矩阵； V^a 为孔隙水流的表现速度。

将式(18)代入式(24)，整理可得

$$-\nabla^T \lambda \nabla T + \phi s_1 \rho_1 C_1 (\nabla^T T) V^a + \xi \rho_w g (1 + \gamma c) \cdot T \frac{\partial h}{\partial t} + \xi \rho_w g (h - z) \gamma T \frac{\partial c}{\partial t} - [\xi (1 + \gamma c) g (h - z) \rho_{w0} \beta_1 T + \omega] \frac{\partial T}{\partial t} = 0 \quad (25)$$

其中：

$$\xi = \frac{1}{b} \left\{ [(1 - \phi) C_s \frac{\rho_s}{K_s} + \phi C_1 \frac{\rho_1}{K_1}] (s_1 + D_{s1} p_1) \right\} \quad (26)$$

$$\omega = (1 - \phi) C_s T \rho_s \beta_s + \phi C_1 T \rho_1 \beta_1 - [(1 - \phi) \rho_s C_s + \phi \rho_1 C_1] \quad (27)$$

式 (25) 即是用全水头 h 、溶质浓度 c 取代了式 (24) 中的孔隙水压力 p_1 得到的能量守恒方程。

2.4 渗透迁移方程

根据参考文献[13]，笔者引入渗透迁移方程如下：

$$R\theta\rho_w \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta\rho_w D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - \theta\rho_w V_i \frac{\partial c}{\partial x_i} - R\theta\rho_w \lambda' c - Q_c \quad (28)$$

式中： R 为阻滞系数， $R = \frac{V}{V^*} = \left(1 + \frac{\rho_d}{\theta} K_d \right)$ ； V 为地下水流表观速度； 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 为体积含水率； ρ_w 为流体密度； D_{ij} 为扩散张量； c 为溶质浓度； V_i 为地下水表观流速矢量； λ' 为衰减常数； Q_c 为源汇项。

而扩散张量可表示为

$$D_{ij} = \alpha_T |V| \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{V_i V_j}{|V|} + \alpha_m \tau \delta_{ij} \quad (29)$$

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

3 建立有限元格式

3.1 空间域离散

使用 Galerkin 方法，对前述的 4 个控制方程进行空间域离散，整理可得

$$\left. \begin{aligned} K \frac{d\bar{u}}{dt} + C \frac{d\bar{h}}{dt} + I \frac{d\bar{T}}{dt} + V \frac{d\bar{c}}{dt} &= \hat{f} \\ E \frac{d\bar{u}}{dt} + F\bar{h} + G \frac{d\bar{h}}{dt} + M\bar{T} + L \frac{d\bar{T}}{dt} + U \frac{d\bar{c}}{dt} &= \hat{f} \\ P \frac{d\bar{h}}{dt} + Q\bar{T} + J\bar{h} + R \frac{d\bar{T}}{dt} + S \frac{d\bar{c}}{dt} &= X \\ W\bar{c} + Z \frac{d\bar{c}}{dt} &= Y \end{aligned} \right\} \quad (30)$$

其中：

$$K = \int_{\Omega} -B^T D_T B d\Omega \quad (31)$$

$$C = \int_{\Omega} B^T \zeta \rho_w g (1 + \gamma \bar{c}) N d\Omega \quad (32)$$

$$I = \int_{\Omega} B^T \left[D_T m \frac{\beta_s}{3} - \zeta g (1 + \gamma \bar{c}) (\bar{h} - z) \rho_{w0} \beta_1 \right] N d\Omega \quad (33)$$

$$V = \int_{\Omega} B^T \zeta \rho_w g (\bar{h} - z) \gamma N d\Omega \quad (34)$$

$$E = \int_{\Omega} N^T s_w (m - D_T \frac{m}{3k_s}) B d\Omega \quad (35)$$

$$F = \int_{\Omega} (\nabla N)^T \frac{K r_w \gamma_w}{\mu_w} \nabla N d\Omega \quad (36)$$

$$G = \int_{\Omega} N^T \eta \rho_w g (1 + \gamma \bar{c}) N d\Omega \quad (37)$$

$$M = \int_{\Omega} (\nabla N)^T D_l \nabla N d\Omega \quad (38)$$

$$L = \int_{\Omega} -N^T \{ s_1 \phi \beta_1 + s_1 [(1 - \phi) \beta_s - \frac{1}{3K_s} \frac{\beta_s}{3} m^T D_T m] + \eta g (1 + \gamma \bar{c}) (\bar{h} - z) \rho_{w0} \beta_1 \} N d\Omega \quad (39)$$

$$U = \int_{\Omega} B^T \eta \rho_w g (\bar{h} - z) \gamma N d\Omega \quad (40)$$

$$P = \int_{\Omega} N^T \xi \rho_w g (1 + \gamma \bar{c}) N \bar{T} N d\Omega \quad (41)$$

$$Q = \int_{\Omega} (\nabla N)^T \lambda \nabla N d\Omega + \int_{\Omega} (\nabla N)^T \phi s_1 \rho_w C_w V^a N d\Omega \quad (42)$$

$$J = \int_{\Omega} -(\nabla N)^T \left(LD_{\theta v} \frac{\partial \theta}{\partial \psi} \right) \nabla N d\Omega \quad (43)$$

$$R = \int_{\Omega} N^T [-\xi g (1 + \gamma \bar{c}) (\bar{h} - z) \rho_{w0} \beta_1 N \bar{T} + (1 - \phi) \rho_s C_s + \phi \rho_w C_w - (1 - \phi) \rho_s C_s \beta_s N \bar{T} - \phi \rho_w C_w \beta_s N \bar{T}] N d\Omega \quad (44)$$

$$S = \int_{\Omega} B^T \xi \rho_w g (\bar{h} - z) \gamma N \bar{T} N d\Omega \quad (45)$$

$$W = \int_{\Omega} (\nabla N)^T \theta \rho D \nabla N d\Omega + \int_{\Omega} (\nabla N)^T \theta \rho V^a N d\Omega + \int_{\Omega} N^T R \theta \rho \lambda' N d\Omega \quad (46)$$

$$Z = \int_{\Omega} N^T R \theta \rho N d\Omega \quad (47)$$

$$\hat{f} = - \int_{\Omega} N^T b b d\Omega - \int_{\Gamma} N^T \hat{d} \hat{d} \Gamma - \int_{\Omega} B^T D_T d \epsilon_0 d\Omega \quad (48)$$

$$\hat{f} = - \int_{\Gamma} N^T q d\Gamma \quad (49)$$

$$X = - \int_{\Gamma} N^T q_h d\Gamma - \int_{\Omega} (\nabla N)^T \left(LD_{\theta v} \frac{\partial \theta}{\partial \psi} \right) \nabla z d\Omega \quad (50)$$

$$Y = - \int_{\Omega} N^T Q_c d\Omega \quad (51)$$

将式 (30) 以矩阵的形式表示，有：

$$\begin{bmatrix} K & C & I & D \\ E & G & L & U \\ 0 & P & R & S \\ 0 & 0 & 0 & Z \end{bmatrix} \frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \bar{u} \\ \bar{h} \\ \bar{T} \\ \bar{c} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & F & M & 0 \\ 0 & J & Q & 0 \\ 0 & 0 & 0 & W \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{u} \\ \bar{h} \\ \bar{T} \\ \bar{c} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{f} \\ \hat{f} \\ X \\ Y \end{bmatrix} \quad (52)$$

3.2 时间域离散

使用整体解法 (Monolithic Augmentation Appr-

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{C} & \mathbf{I} & \mathbf{D} \\ \mathbf{E} & \mathbf{G} + \alpha \mathbf{F} \Delta t_k & \mathbf{L} + \alpha \mathbf{M} \Delta t_k & \mathbf{U} \\ 0 & \mathbf{P} + \alpha \mathbf{J} \Delta t_k & \mathbf{R} + \alpha \mathbf{Q} \Delta t_k & \mathbf{S} \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{Z} + \alpha \mathbf{W} \Delta t_k \end{bmatrix}_{k, \alpha} \begin{Bmatrix} \bar{\mathbf{u}} \\ \bar{h} \\ \bar{T} \\ \bar{c} \end{Bmatrix}_{t_k + \Delta t_k} = \begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{C} & \mathbf{I} & \mathbf{D} \\ \mathbf{E} & \mathbf{G} - (1 - \alpha) \mathbf{F} \Delta t_k & \mathbf{L} - (1 - \alpha) \mathbf{M} \Delta t_k & \mathbf{U} \\ 0 & \mathbf{P} - (1 - \alpha) \mathbf{J} \Delta t_k & \mathbf{R} - (1 - \alpha) \mathbf{Q} \Delta t_k & \mathbf{S} \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{Z} - (1 - \alpha) \mathbf{W} \Delta t_k \end{bmatrix}_{k, \alpha} \begin{Bmatrix} \bar{\mathbf{u}} \\ \bar{h} \\ \bar{T} \\ \bar{c} \end{Bmatrix}_{t_k} + \begin{Bmatrix} \frac{\partial f}{\partial t} \\ \hat{\mathbf{f}} \\ \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{Bmatrix}_{k, \alpha} \Delta t_k \quad (53)$$

这种方法可直接求解不对称刚度矩阵, 要使用非对称求解器。

4 算 例

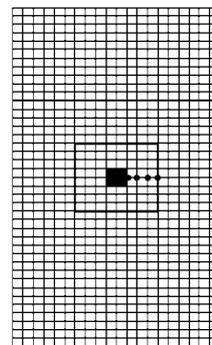
4.1 有限元程序特点

- (1) 可使用平面 3 节点、4 节点及 8 节点等参数单元;
- (2) 可求解平面应力、平面应变及空间轴对称问题;
- (3) 可使用整体解法;
- (4) 可使用 2×2、3×3 或 4×4 的高斯求积方法。

4.2 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 处一个 1.6 m×1.6 m 的矩形坑道内, 在玻璃固化体的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。其顶面水头为 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℃ (均匀分布), 玻璃固化体为源项, 溶解的核素的扩散强度为 $Q_c / \rho = 7.0 \times 10^{-4} \text{ mol/m}^3 \cdot \text{s}$ (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。取自重应力场, 暂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_t 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。



(从固化体边缘向右的点号依次为 432~436)

图 1 有限元网格
Fig.1 FEM mesh

表 1 主要计算参数
Table 1 Main computation parameters

介质	重度 ρ / $\text{kN} \cdot \text{m}^{-3}$	孔隙率 ϕ	渗透系数 k / $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	弹性模量 E / MPa	泊松系数 μ	比热 C / $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{°C}^{-1}$	热膨胀系数 β / °C^{-1}	导热系数 λ / $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{°C}^{-1}$
岩石	26.7	0.1	1.0×10^{-8}	3.7×10^3	0.23	1.0	1.0×10^{-4}	2.8
缓冲材料	18.0	0.3	1.4×10^{-9}	1.3×10^1	0.4	0.34	1.0×10^{-4}	0.3
固化体	25.0	0.0	1.0×10^{-27}	5.3×10^3	0.21	0.7	1.0×10^{-4}	53.0

由文献[13], 假定与溶解的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 $\alpha_m = 20.0 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$, 分配系数 $K_d = 80.1 \text{ ml/g}$

(缓冲材料)、58.3 ml/g (岩体), 密度比 $\gamma = 0.025$, 衰减常数 $\lambda' = \ln 2 / T_{\text{half}}$, 其中 T_{half} 是放射性核素的半衰期, 该值为 10 000 a。

计算所模拟的时间为 1 150 d (假定玻璃固化体

的发热功率不变)。所得主要结果如下：1 000 d 时近场（缓冲层内）温度等值线见图 2，看出温度产生明显变化的部位是以固化体中点为中心、半径约 1.4 m 的圆形区域；对应于图 1 中若干特征点的温度-时间曲线见图 3，终了时其温度值由初始的 20℃ 依次上升到 23.49℃（432 点）、23.38℃（433 点）、23.32℃（434 点）、23.29℃（435 点）和 23.29℃（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 4；得知在以固化体中点为中心、长宽各约 1.6 m 的区域内孔隙水压力发生了明显变化；若干特征点的孔隙水压力-时间曲线见图 5；终了时其孔隙水压力值由初始的 0.96 MPa 依次增加到 0.99 MPa（432 点）、0.99 MPa（433 点）、0.98 MPa（434 点）、0.97 MPa（435 点）和 0.94 MPa（436 点）。1 000 d 时近场的核素浓度等值线见图 6，其显示出核素扩散明显的区域是以固化体中点为中心、半径约 1.0 m 的圆形面积；若干特征点的浓度-时间曲线见图 7。从中看到，由于核素半衰期很长，各点的核素浓度增加的速率随时间而减缓的程度也很小，在 1 150 d 时，432 点、433 点、434 点、435 点和 436 点的核素浓度分别达到了 1.756, 0.472, 0.127, 0.033, 0.009 mol/m³，且在所计算的时间内各点的核素浓度均是单调增加。

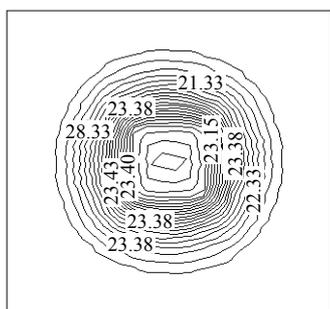


图 2 1 000 d 时温度等值线(单位:℃)

Fig.2 Temperature contours at 1 000 days (unit: °C)

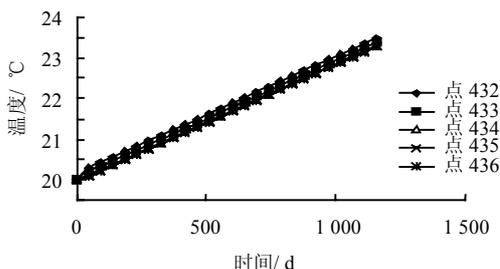


图 3 温度-时间曲线

Fig.3 Temperature-time curves

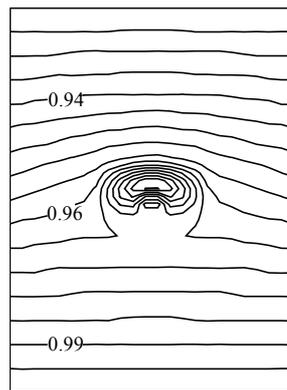


图 4 1 000 d 时孔隙水压力等值线 (单位: MPa)

Fig.4 Pore pressure contours at 1 000 days (unit: MPa)

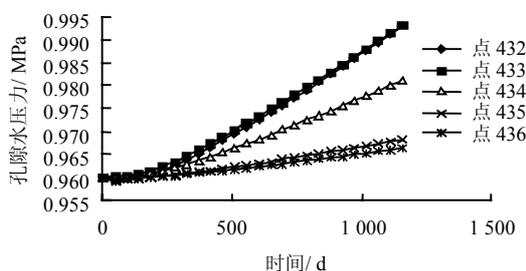


图 5 孔隙水压力-时间曲线

Fig.5 Pore pressure-time curves

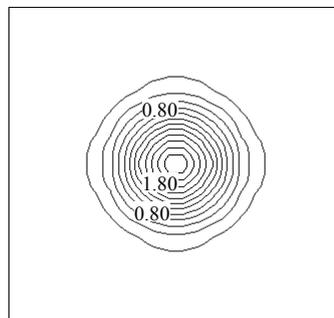


图 6 1 000 d 时核素浓度等值线 (半衰期=10 000 a) (单位: mol/ m³)

Fig.6 Nuclide concentration contours at 1 000 days (half life =10000 years) (unit: mol/ m³)

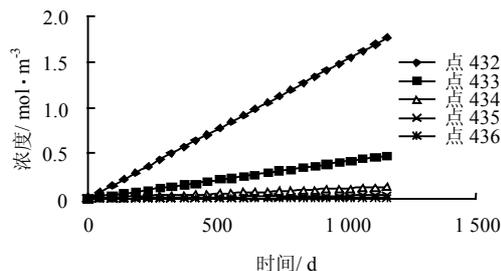


图 7 核素浓度-时间曲线 (半衰期=10 000 a)

Fig.7 Nuclide concentration-time curves (half life =10 000 years)

1 000 d 时岩体中的主应力等值线见图 8。由此看出,在与缓冲层相接的部分围岩区域内主应力变化强烈,其诱因是缓冲材料与岩体材料的弹性模量相差悬殊、以及热-水-应力-迁移耦合的作用。在 1 000 d 时坑道顶板中点、底板中点及边墙中点的最小、最大主应力依次为 0.17, 2.29, -10.89, -0.06, -0.42, -0.254 MPa, 而在 0 d 时这 3 点的最小、最大主应力依次为 0.55, 2.10, -11.30, -0.32, -0.40, -0.24 MPa。435 点(缓冲层与围岩的界面上)的水平方向正应力-时间变化曲线见图 9。从中可看到:由于缓冲材料中温度应力和孔隙水压力的持续升高,二者的综合作用不断抵消掉缓冲层与围岩界面上的部分接触压应力,使得该压应力随时间推移而逐渐下降。

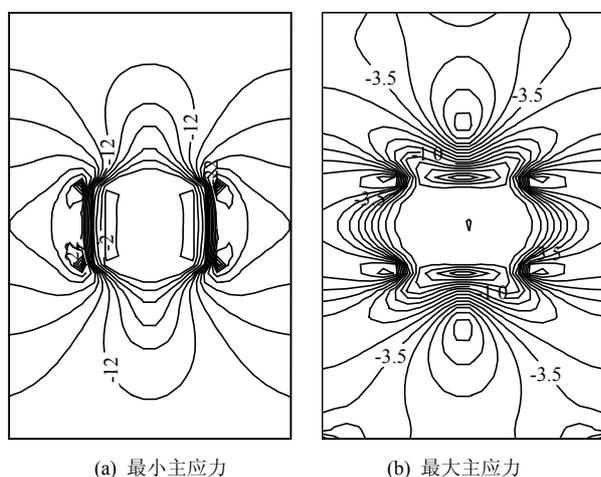


图 8 1 000 d 时围岩中主应力等值线图(单位: MPa)

Fig.8 Principal stress contours in surrounding rockmass at 1 000 days (unit: MPa)

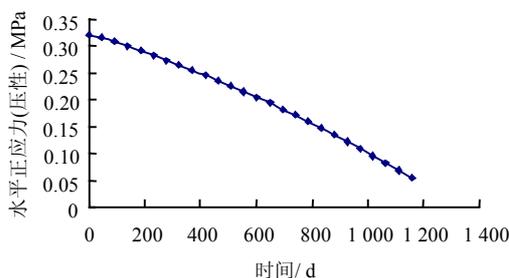


图 9 点 435 点(缓冲层与围岩的界面上)的水平方向正应力-时间曲线

Fig.9 Horizontal compressive stress-time curve of point 435 (at boundary between buffer and rockmass)

5 结 论

通过上面的叙述与分析可以看到,在高放射性核废料地质处置的特殊环境中,经过漫长的年代缓冲层会被地下水浸润饱和,若玻璃固化体包装容器

被腐蚀损坏,则可能出现核素泄漏。在这之后如果核废料固化体仍以一定的功率发热,就会形成热-水-应力-迁移耦合现象。其中温度场和应力场影响地下水的流动,溶解的核素及矿物质的迁移又与地下水的流速密切相关,而核素及矿物质的浓度的增加又引起孔隙水压力升高,进而使得温度场和应力场发生变化。这一过程要比只考虑热-水-应力耦合更为复杂。为了对此过程进行数值模拟,笔者计入溶质浓度对地下水重度的“贡献”,建立和引入了相应的应力平衡方程、水连续性方程、能量守恒方程和渗透迁移方程,使用 Galerkin 方法,将各控制方程分别在空间域和时间域进行离散,研制出了一个用于分析饱和-非饱和和孔隙介质中热-水-应力-迁移耦合问题的二维有限元程序。通过对一个假定的核废料地下处置库在核素泄漏后多场耦合过程的数值计算,考察了近场围岩中的温度场、应力场、孔隙水压力场、核素浓度场的分布及随时间的变化。计算结果在定性上与实际情况较为一致,因而初步地显示了所建模型及程序的正确性与实用性。

参 考 文 献

- [1] 西垣诚, 菱谷智幸, 桥本学, 等. 饱和・不饱领域における物质移动を伴う密度依存地下水流の数值解析手法に関する研究[C]//土木学会论文集, 1995: 135-144.
- [2] 刘德军, 范显华, 章英杰, 等. T_c^{99} 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, ZHANG Ying-jie, et al. Survey of T_c^{99} migrating action in simulated geological conditions[J]. **Chinese Journal of Nuclear Science and Engineering**, 2004, 24(1): 6-11.
- [3] 姚军, 苏锡光, 龙会遵, 等. N_p^{237} 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 N_p^{237} in bentonite[J]. **Journal of Nuclear and Radiochemistry**, 2003, 25(4): 190-203.
- [4] 任立宏, 苏锡光, 龙会遵. 钨在膨润土中的吸附与扩散的研究[C]//王驹, 范显华, 徐国庆, 郑华铃主编. 中国高放废物地质处置十年进展. 北京: 原子能出版社, 2004: 173-179.
- [5] 温瑞媛, 常辉, 王祥云, 等. 裂片核素在岩石中的迁移研究[C]//王驹, 范显华, 徐国庆, 郑华铃主编. 中国高放废物地质处置十年进展. 北京: 原子能出版社, 2004: 134-138.

- 21(2): 21–24.
- [2] 王学滨, 潘一山, 于海军. 考虑塑性应变率梯度的单轴压缩岩样轴向响应[J]. 岩土力学, 2003, 24(6): 943–946.
WANG Xue-bin, PAN Yi-shan, YU Hai-jun. Axial response of rock specimen considering strain rate gradient effect in uniaxial compression[J]. **Rock and Soil Mechanics**, 2003, 24(6): 943–946.
- [3] ZHANG Z N, GE X R. A new quasi-continuum constitutive model for crack growth in an isotropic solid[J]. **European Journal of Mechanics-A/Solids**, 2005, 24(2): 243–252.
- [4] ZHANG Z N, GE X R. Micromechanical consideration of tensile crack behavior based on virtual internal bond in contrast to cohesive stress[J]. **Theoretical and Applied Fracture Mechanics**, 2005, 43(3): 342–359.
- [5] ZHANG Z N, GE X R. Micromechanical modelling of elastic continuum with virtual multi-dimensional internal bonds[J]. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, 2006, 65(1): 135–146.
- [6] ZHANG Z N, GE X R, LI Y H. A multiscale mechanical model of materials based on Virtual Internal Bond theory[J]. **Acta Mechanica Sinica**, 2006, 19(3): 196–202.
- [7] GAO H J, KLEIN P. Numerical simulation of crack growth in an isotropic solid with randomized internal cohesive bond[J]. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, 1998, 46(2): 187–218.
- [8] KLEIN P, GAO H. Crack nucleation and growth as strain localization in a virtual-bond continuum[J]. **Engineering Fracture Mechanics**, 1998, 61(1): 21–48.
- [9] 张振南, 葛修润, 李永和. 虚拟多维内连结键模型 (VMIB) 在岩石类材料单轴破坏中的应用[J]. 岩土工程学报, 2006, 28(4): 504–509.
ZHANG Zhen-nan, GE Xiu-ren, LI Yong-he. Application of VMIB (Virtual Multi-dimensional Internal Bond) to the uniaxial failure of rocklike materials[J]. **Journal of Geotechnical Engineering**, 2006, 28(4): 504–509.
- [10] ZHANG Z N, GE X R. Multiscale shear fracture of heterogeneous material using the virtual internal bond[J]. **Theoretical and Applied Fracture Mechanics**, 2007, 47(3): 185–191
- [11] CHANG C S, WANG T K, SLUYS L J, et al. Fracture modelling using a micro-structural mechanics approach-I[J]. **Theory and formulation. Engineering Fracture Mechanics**, 2002, 69(17): 1 941–1 958.
- [12] 邢纪波, 俞良群, 王泳嘉. 三维梁-颗粒模型与岩石材料细观力学行为模拟[J]. 岩石力学与工程学报, 1999, 18(6): 627–630.
XING Ji-bo, YU Liang-qun, WANG Yong-jia. 3-D beam-particle model for simulating meso-mechanical behavior of rock material[J]. **Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering**, 1999, 18(6): 627–630.
- [13] 蒋宇. 周期荷载作用下岩石疲劳破坏及变形发展规律 [硕士学位论文 D]. 上海: 上海交通大学, 2003.
- [14] DE BORST R. Some recent issues in computational failure mechanics[J]. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, 2001, 52(1–2): 63–95.

上接第 218 页

- [6] RUTQVIST J, BARR D, DATTA R, et al. Coupled thermal–hydrological–mechanical analyses of the yucca mountain drift scale test—comparison of field measurements to predictions of four different numerical models[J]. **International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences**, 2005, 42: 680–697.
- [7] MILLARD A, REJEB A, CHIJIMATSU M, et al. Numerical study of the THM effects on the near-field safety of a hypothetical nuclear waste repository—BMT1 of the DECOVALEX III project. Part 1: Conceptualization and characterization of the problems and summary of results[J]. **International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences**, 2005, 42: 720–730.
- [8] 张玉军. 核废料处置概念库近场热-水-应力耦合模型及数值分析[J]. 岩土力学, 2007, 28(1): 17–22.
ZHANG Yu-jun. Coupled thermo-hydro-mechanical model and relevant numerical analysis for near field of conceptual nuclear waste repository[J]. **Rock and Soil Mechanics**, 2007, 28(1): 17–22.
- [9] 张玉军. 考虑膨胀力的非饱和介质热-水-应力耦合二维有限元分析[J]. 固体力学学报, 2006, 27(1): 31–37.
ZHANG Yu-jun. 2D FEM analysis for coupled thermo-hydro-mechanical processes in unsaturated media considering swelling pressure[J]. **Acta Mechanica Sinica**, 2006, 27(1): 31–37.
- [10] LEIWS R W, SCHREFLER B A. The finite element method in the deformation and on solidation of porous media[M]. New York: John Wiley, 1987.
- [11] RUTQVIST J, BÖRGESSON L, CHIJIMATSU M, et al. Thermohydromechanics of partially saturated geological media: governing equations and formulation of four finite element models[J]. **International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences**, 2001, 38: 105–127.
- [12] 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 [博士学位论文 D]. 京都: 京都大学, 2003.
- [13] 西垣诚. Density dependent transport analysis saturated-unsaturated porous media-3 dimensional eulerian lagrangian method[R]. 日本: 冈山大学, 三菱マテリアル株式会社, (株) ダイマコンサルタント, 2001.