

DOI : 10.16285/j.rsm.2016.06.031

# 压力溶解对颗粒聚集岩体中热-水-应力耦合作用的弹塑性有限元分析

周英博, 张玉军

(中国科学院武汉岩土力学研究所 岩土力学与工程国家重点实验室, 湖北 武汉 430071)

**摘 要:** 将 Taron 等提出的颗粒聚集体的压力溶解模型引入笔者所研制的孔隙介质热-水-应力耦合有限元程序中, 并使用摩尔-库仑准则, 针对一个假设的实验室尺度且位于饱和石英颗粒聚集岩体中的高放废物地质处置库模型, 拟定弹性分析和弹塑性分析两种计算工况, 进行 4 a 处置时段的数值模拟, 考察了岩体中的温度、颗粒界面水膜及孔隙中的溶质浓度、迁移和沉淀质量、孔隙率及渗透系数、孔隙水压力、地下水流速和应力及塑性区的变化、分布情况。结果主要显示: 弹塑性分析中由于应力调整和增大了分子扩散系数, 使得塑性区的颗粒介质的溶解、迁移和沉淀有明显的变化, 并对渗流场(孔隙水压力及流速)和应力场产生显著的影响。但两种工况弹性区中的颗粒介质的溶解、迁移和沉淀差别较小。

**关键词:** 压力溶解; 颗粒聚集岩体; 弹塑性模型; 热-水-应力耦合; 有限元分析

**中图分类号:** O 242

**文献标识码:** A

**文章编号:** 1000 - 7598 (2016) 06 - 1781 - 10

## Elastoplastic finite element analysis for influences of pressure solution on thermo-hydro-mechanical coupling in aggregate rock

ZHOU Ying-bo, ZHANG Yu-jun

(State Key Laboratory of Geomechanics and Geotechnical Engineering, Institute of Rock and Soil Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Wuhan, Hubei 430071, China)

**Abstract:** This paper introduces the model of pressure solution for granular aggregates established by Taron et al. into the finite element code for analysis of thermo-hydro-mechanical (T-H-M) coupling in porous media developed by the first author. Using the Mohr-Coulomb yield criterion, a hypothetical disposal model for nuclear waste located in a saturated quartz aggregate rock mass with a laboratory scale is simulated. Two computation cases, the elastic analysis and the elastoplastic analysis are designed. Then the corresponding numerical simulation for a disposal period of 4 years is carried out. The states of temperatures, solute concentrations in the intergranular fluid film and at the pore space, migration and precipitation masses, porosities and permeabilities, pore pressures, flow velocities and stresses and plastic zones in the rock mass are investigated. It is shown that, because of the stress adjustment and the increased molecular diffusivity in the elastoplastic analysis, there are obvious changes of solution, migration and precipitation of aggregate medium in the plastic zones, and the seepage field (including pressures and flow velocities of pore water) and the stress field are markedly influenced. But the differences of solution, migration and precipitation of aggregate medium in the elastic zones for two cases are not significant.

**Keywords:** pressure solution; aggregate rock; elastoplastic model; thermo-hydro-mechanical coupling; finite element analysis

### 1 引 言

在高放射性核废物深埋处置、增强型地热系统(EGS)、CO<sub>2</sub>地质封存(CCS)、深层石油开采等应用领域以及地震发生及火山爆发机制的研究中,

必须考虑孔隙介质中存在的温度场、应力场、渗流场和化学场的相互耦合过程(THMC coupling),并涉及到工程岩体的承载能力及稳定性问题,相应的就要对围岩进行热-水-应力-化学耦合条件下的弹性或弹塑性解析和/或数值模拟。为此国内外一些

收稿日期: 2014-10-19

基金项目: 国家重点基础研究发展计划(973计划)项目(No.2010CB732101); 国家自然科学基金项目(No.51379201)

This work was supported by the National Program on Key Basic Research Project of China (973 Program) (2010CB732101) and the National Natural Science Foundation of China (51379201).

第一作者简介: 周英博, 男, 1988年生, 博士, 主要从事边坡的治理与加固技术研究。E-mail: yingbozhou@126.com

通讯作者: 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

学者已就其中若干场的耦合情况进行了探讨。

例如,在著名的国际合作项目 DECOVAL EX III 中,来自美国的 LBNL 研究小组通过数值计算,预测了尤卡山坑道规模试验(DST)中的热-水-应力耦合过程<sup>[1]</sup>。针对经历了 4 a 的人工加热和随后 4 a 的自然冷却的 DST 坑道,Rutqvist 等<sup>[2]</sup>又对围岩中热-水-应力耦合现象进行数值分析,侧重考察了裂隙岩体渗透性的改变。Min 等<sup>[3]</sup>就含有一个假定的核废料处置库的裂隙岩体中热荷载对应力场和渗流场的影响进行了热-水-应力耦合数值模拟。Taron 等<sup>[4]</sup>考察了孔隙-裂隙介质中的热-水-应力-化学过程,其数值计算显示:应力驱动的裂隙糙度溶解、热-水-应力引起的裂隙糙度压缩与膨胀、以及矿物沉淀/溶解的综合作用改变了裂隙的渗透性。沈珍瑶等<sup>[5]</sup>建立了适合饱和与非饱和孔隙介质的热-水-力耦合方程并给出了其求解方法,对高放废物处置库近场热-湿-力耦合过程进行了初步的有限元数值模拟。笔者<sup>[6]</sup>也曾研制出分析岩土体中热-水-应力-迁移耦合问题的二维有限元程序,并通过一个假定的核废料地下处置库的数值计算,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。但以上的研究均为弹性分析,没有考虑围岩中可能的塑性破坏现象,而当地应力较高使得部分岩体屈服时,对热-水-应力-化学耦合仅进行弹性计算是偏于不安全的。

又如,刘泽佳等<sup>[7]</sup>模拟非饱和多孔介质的材料非线性行为,推导了一致性弹塑性切线模量矩阵(单元刚度矩阵)的混合元一致性算法。刘泽佳等<sup>[8]</sup>还在化学-热-水-力学本构模拟框架中计及化学塑性效应,其数值结果突出显示了污染物浓度在多孔介质化学-热-水-力学耦合系统中的影响。李荣涛等<sup>[9]</sup>提出了一个用于模拟高温下混凝土中化学-热-湿-力学耦合行为的化学塑性-损伤耦合本构模型,发展了用于积分率形式的耦合本构方程的三步算子分裂算法。武文华等<sup>[10]</sup>提出了一种非饱和土的热-水-应力本构模型,定量模拟了热力的软化现象,有限元数值分析和试验数据的吻合程度令人满意。Hueckel 等<sup>[11]</sup>通过试验分析了在不排水条件下 Argillaceous 黏土的热应变、热力引发的超固结和孔隙水压力、强度改变及破坏,借助黏土的热-弹-塑理论修正了扩展的剑桥模型。在这些研究中,虽然接触到了材料中的损伤、塑性及破坏现象,但尚无对岩土体进入塑性后热-水-应力-化学耦合中温度场、应力场、渗流场和化学场的变化给出全面的描述。

有鉴于此,笔者所研制的岩土介质热-水-应力

耦合有限元分析程序中使用 Taron 等<sup>[12]</sup>建立的压力溶解模型,以一个假定的位于饱和地层中的高放废物地质处置库实验室尺度模型为算例,在相同的初始温度和岩体应力条件下,针对两种计算工况:弹性分析;基于摩尔-库仑准则的弹塑性分析,进行热-水-应力耦合有限元数值模拟,考察了处置库近场的温度、颗粒界面水膜及孔隙中的溶质浓度、迁移和沉淀质量、孔隙率和渗透系数、孔隙水压力、地下水流速、应力和塑性区的变化、分布情况,得出了某些新的认识。

## 2 混合质量平衡

对于如图 1、2 所示的颗粒聚集体化学压缩模型,Taron 等<sup>[12]</sup>提出了物质在压力作用下的溶解浓度平衡关系为

$$\dot{C}_i V_i = k^+ \alpha A_i^{rx} a_{\text{SiO}_2} \left( 1 - \frac{\tilde{C}_i}{a_{\text{SiO}_2} C_{\text{eq}}^h} \right) - D(\tilde{C}_i - \tilde{C}_p) \quad (1)$$

$$\dot{C}_p V_p = k^+ \alpha A_p^{rx} \left( 1 - \frac{\tilde{C}_p}{C_{\text{eq}}^h} \right) + D(\tilde{C}_i - \tilde{C}_p) - Q_{ss} \tilde{C}_p \quad (2)$$

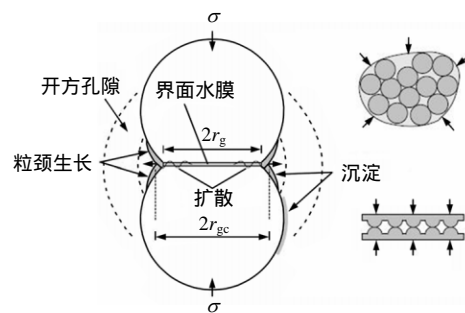


图1 孔隙介质、裂隙及化学压缩过程的概念化<sup>[12]</sup>  
Fig.1 Conceptualization of porous media, fractures and chemical compaction process<sup>[12]</sup>

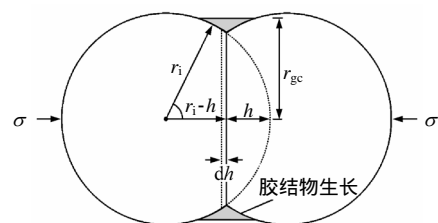


图2 压缩及颗粒和生长的胶结物半径的关系示意<sup>[12]</sup>  
Fig.2 Diagram of compaction and relationship between granular and growing cement radius<sup>[12]</sup>

其迭代求解式为

$$\left\{ \begin{matrix} C_i \\ C_p \end{matrix} \right\}_{t+\Delta t} =$$

$$\begin{bmatrix} \left( \frac{k^+ \alpha A_1^{rx}}{C_{eq}^h} + D \right) + \frac{V_i}{\Delta t} & -D \\ -D & \left( \frac{k^+ A_p^{rx}}{C_{eq}^h} + Q_{ss} + D \right) + \frac{V_p}{\Delta t} \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{Bmatrix} k^+ \alpha A_1^{rx} a_{SiO_2} + \frac{V_i C_i}{\Delta t} \\ k^+ A_p^{rx} + \frac{V_p C_p}{\Delta t} \end{Bmatrix} \quad (3)$$

式中： $C_i$  为在颗粒接触面水膜中溶解硅的即时浓度； $C_p$  为在颗粒周界（孔隙空间）处的即时硅浓度； $k^+$  为溶解速率常数； $\alpha$  为固体接触部分所占据的颗粒边界的比例常数（ $0 < \alpha < 1$ ）； $A_1^{rx}$  为表征体颗粒交界处的反应面积（REV）； $C_{eq}^h$  为液态水中硅的溶解度； $D$  为扩散系数； $V_i$  为颗粒接触之内表征体的体积（REV）； $A_p^{rx}$  为表征体的孔隙反应面积（REV）； $V_p$  为表征体的孔隙体积（REV）； $a_{SiO_2}$  为应力作用下固体硅的化学活度； $Q_{ss}$  为因边界水头差产生的稳态流量； $\Delta t$  为时间增量。

式（1）中各物理量可表示为

$$A_T = V_0(1 - \phi_0)S_{ag} / V_g \quad (4)$$

$$A_1^{rx} = V_0(1 - \phi_0)N_c a_g / V_g \quad (5)$$

$$A_p^{rx} = A_T - A_1^{rx} \quad (6)$$

$$D = 8D_f \omega \left( \frac{A_1^{rx}}{2a_g} \right) \quad (7)$$

$$V_i = \omega A_1^{rx} / 2 \quad (8)$$

$$V_p = \phi V \quad (9)$$

$$a_{SiO_2} = \exp \left( \frac{\Delta \mu}{RT} \right) \quad (10)$$

式中： $V_0$ 、 $V$  分别为表征体（可取单位量）的初始和即时体积（REV）； $\phi_0$ 、 $\phi$  分别为初始和即时的孔隙率； $S_{ag}$ 、 $V_g$  分别为平均的单个颗粒表面积和体积； $a_g$  为两个相互贯穿球形颗粒的接触面积； $N_c$  为每个颗粒的接触数； $D_f$  为分子扩散系数，笔者考虑到岩体在弹性阶段的完整程度较好， $D_f$  取低值，而在塑性区较为破碎， $D_f$  取高值； $\omega$  为颗粒接触面水膜的厚度； $\Delta \mu$  为化学势梯度； $R$  为气体常数； $T$  为绝对温度。

并且有

$$a_g = \pi h(2r_i - h) \quad (11)$$

$$V = V_0 \left[ \left( \frac{r_i - h}{r_i} \right)^3 + \frac{\sigma'}{K_b} \right] \quad (12)$$

$$h = \sum_t \Delta h = \sum_t (\Delta m_i^{SiO_2} V_m) / A_1^{rx} \quad (13)$$

$$\Delta \mu = \frac{(\sigma_a - \sigma_a^{eq})}{\alpha} V_m \quad (14)$$

式中： $r_i$  为初始时刻的平均颗粒半径； $h$  为累积的球形颗粒贯穿深度（初值为 0）； $\sigma'$  为有效应力； $K_b$  为颗粒材料的体积模量（式（12）中  $\sigma'/K_b$  项为笔者所加，以体现应力压缩的作用）； $\Delta m_i^{SiO_2}$  为产生于颗粒接触面处的迁移质量（以溶解的数值为正）； $V_m$  为固体的摩尔体积。

而

$$\sigma_a = \sigma' / R_c \quad (15)$$

$$\sigma_a^{eq} = \frac{E_A(1 - T/T_A)N_c(1 - \phi_0)}{4V_m} \beta_c^2 \quad (16)$$

$$\beta_c = \frac{r_{gc} / r_i}{1 - h / r_i} \quad (17)$$

$$R_c = (\phi_0 - \phi) / \phi_0 \quad (18)$$

$$\Delta m_i^{SiO_2} = V_i(C_i^{t+\Delta t} - C_i^t) + D(C_i^{t+\Delta t} - C_p^{t+\Delta t})\Delta t \quad (19)$$

式中： $\sigma_a$ 、 $\sigma_a^{eq}$  分别为真实应力及达到平衡时的临界应力； $R_c$  为接触面积比； $E_A$ 、 $T_A$  分别为熔化热和熔化温度； $\beta_c$  为埋置常数； $r_{gc}$  为颗粒交界处沉淀胶结物外表面到颗粒中心连线的距离（见图 2）。

### 3 孔隙率-渗透系数演化律

Taron 等给出的孔隙率表达式为

$$\phi = 1 - \left[ \frac{1 - \phi_0}{1 - \varepsilon_v} + \frac{R}{V_0(1 - \varepsilon_v)} \right] \quad (20)$$

式中： $\varepsilon_v$  为有限的体积应变； $R$  为作为源/汇项的随时间求和的反应体积。

并且

$$\varepsilon_v = 1 - \left( 1 - \frac{h}{r_i} \right)^3 + \frac{\sigma'}{K_b} \quad (21)$$

$$R = V_m \sum_t (\Delta m_i^{SiO_2} + \Delta m_p^{SiO_2}) \quad (22)$$

$$\Delta m_p^{SiO_2} = V_p(C_p^{t+\Delta t} - C_p^t) - D(C_i^{t+\Delta t} - C_p^{t+\Delta t})\Delta t \quad (23)$$

式中： $\Delta m_p^{SiO_2}$  为在孔隙处溶解/沉淀的质量（以沉淀的数值为负）；式（21）中  $\sigma'/K_b$  项为笔者所加。

由此可求出对应的渗透系数为<sup>[13]</sup>

$$k = k_0 \frac{(1 - \phi_0)^2}{(1 - \phi)^2} \left( \frac{\phi}{\phi_0} \right)^3 \quad (24)$$

式中： $k_0$  为初始时刻的渗透系数。

### 4 弹塑性分析

在进行弹塑性计算时，有效应力增量可表示为

$$d\sigma' = \left[ \begin{array}{c} D^e - \frac{D^e \left\{ \frac{\partial Q}{\partial \sigma'} \right\} \left\{ \frac{\partial F}{\partial \sigma'} \right\}^T D^e}{A + \left\{ \frac{\partial F}{\partial \sigma'} \right\}^T D^e \left\{ \frac{\partial Q}{\partial \sigma'} \right\}} \end{array} \right] d\varepsilon \quad (25)$$

式中： $\sigma'$ 、 $\varepsilon$  分别为有效应力列阵和应变列阵； $D^e$  为弹性矩阵； $A$  为硬化参数； $Q$ 、 $F$  分别为塑性势及屈服函数。

当  $Q = F$  时称为相关联的流动法则，当  $Q \neq F$  时称为不相关联的流动法则。

本程序中使用相关联的流动法则，并令  $A = 0$ ，取摩尔-库仑准则为屈服函数<sup>[14]</sup>，即

$$F = (\sigma'_1 - \sigma'_3) + (\sigma'_1 + \sigma'_3) \sin \varphi - 2c \cos \varphi = 0 \quad (26)$$

或

$$F = \frac{1}{3} J_1 \sin \varphi + (J_2')^{1/2} \left( \cos \theta - \frac{1}{\sqrt{3}} \sin \theta \sin \varphi \right) - c \cos \varphi = 0 \quad (27)$$

其中，

$$\left. \begin{aligned} \sin 3\theta &= -\frac{3\sqrt{3}}{2} \frac{J_3}{(J_2')^{3/2}} \\ J_1 &= \sigma'_x + \sigma'_y + \sigma'_z \\ J_2' &= \frac{1}{6} [(\sigma'_x - \sigma'_y)^2 + (\sigma'_y - \sigma'_z)^2 + (\sigma'_z - \sigma'_x)^2 + 6(\tau_{xy}^2 + \tau_{yz}^2 + \tau_{zx}^2)] \\ J_3 &= \sigma'_x \sigma'_y \sigma'_z + 2\tau_{xy} \tau_{yz} \tau_{zx} - \sigma'_x \tau_{yz}^2 - \sigma'_y \tau_{zx}^2 + \sigma'_z \tau_{xy}^2 \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

式中： $\sigma'_1$ 、 $\sigma'_3$  分别为有效最大、最小主应力； $c$ 、 $\varphi$  分别为岩土介质的黏聚力及内摩擦角； $\sigma'_x$ 、 $\sigma'_y$  和  $\sigma'_z$  为有效正应力； $\tau_{xy}$ 、 $\tau_{yz}$  和  $\tau_{zx}$  为剪应力，在平面应变的情况下  $\tau_{yz}$ 、 $\tau_{zx}$  为 0。

将上述颗粒聚集体的压力溶解模型引入笔者所研制的孔隙介质热-水-应力耦合有限元程序中<sup>[15]</sup>。

其计算步骤为：

(1) 开始时，孔隙率、渗透系数和其他参数取初值。

(2) 经  $t_i = \Delta t$  时段的弹性或弹塑性热-水-应力耦合分析后，得出相应的温度场、渗流场和应力场。

(3) 求出新的孔隙率、渗透系数和其他参数。

(4) 用新的温度、有效应力和相关参数求出真实应力  $\sigma_a$  和临界应力  $\sigma_a^{eq}$ 。

(5) 求出化学势梯度  $\Delta\mu$ 、化学活度  $a_{SiO_2}$  和有关参数后，由式（1）解出  $t_i$  时刻的  $C_i$  和  $C_p$ 。

(6) 取  $t_{i+1} = t_i + \Delta t$ ，进行步骤（2）~（6）的新循环计算，直到预定的时间长度终止。

### 5 算 例

如图 3 所示，此为一实验室尺度的核废料玻璃固化体埋置模型，其周围的介质是饱和的石英颗粒聚集孔隙岩体。作为近似简化，认为这是一个平面应变问题。取计算域的范围为水平向 4 m，垂直向 8 m，有 800 个单元，861 个节点。玻璃固化体为矩形，其尺寸为 0.4 m×0.4 m、中心的坐标  $x = y = 0$ （ $y$  轴向下为正）。图中从固化体边缘向右的点号依次为 432、433、434、435、436，而从固化体边缘向下分别为  $y$  为 0.3 m 和 1.1 m 处的点。

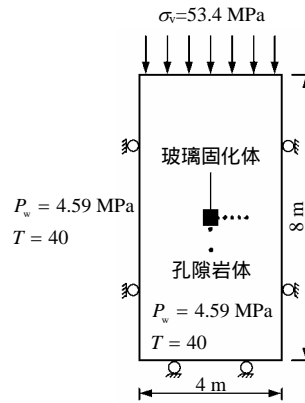


图 3 计算模型  
Fig.3 Computation model

对于边界条件，计算域的顶面位移自由，其上作用有分布荷载 53.4 MPa；左、右侧面的水平方向位移约束；底面的垂直方向位移约束；所有边界的温度为 40；各边界的孔隙水压力均为 4.59 MPa。热-水-应力耦合的环境对岩体颗粒要产生压力溶解作用，从而引起孔隙率和渗透系数的变化。有关的计算参数见表 1、2（该表中主要数据参考自文献 [12, 16]）。需要说明，为了突出压力溶解的作用并与文献 [12] 的试验结果对比，特将初始孔隙率取得较大（0.3），而渗透系数取得很小，这与实际情况

有一定误差。取玻璃固化体为弹性体，而岩体的凝聚力和内摩擦角分别为  $c = 12.0 \text{ MPa}$  和  $\varphi = 35^\circ$ 。初

始状态时，岩体的温度均为  $40^\circ\text{C}$ 。核废物以  $1\,000 \text{ W}$  的不变功率释放热量，时间经历了  $4 \text{ a}$ 。

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

介质	重度 $\gamma$ ( $\text{kN/m}^3$ )	孔隙率 $\phi$	渗透系数 $k_0$ ( $\text{m/s}$ )	弹性模量 $E$ ( $\text{MPa}$ )	泊松系数 $\mu$	比热 $C$ ( $\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot^\circ\text{C}^{-1}$ )	热膨胀系数 $\beta$ ( $^\circ\text{C}^{-1}$ )	导热系数 $\lambda$ ( $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot^\circ\text{C}^{-1}$ )
岩石	26.7	0.3	$1.24 \times 10^{-13}$	370	0.30	1.0	$8.8 \times 10^{-6}$	2.8
固化体	25.0	0.0	$1.00 \times 10^{-27}$	530	0.25	0.7	$1.0 \times 10^{-5}$	5.3

表 2 压力溶解计算参数(1)  
Table 2 Parameters for pressure solution(1)

$C_i$ ( $\text{mol}/\text{m}^3$ )	$C_p$ ( $\text{mol}/\text{m}^3$ )	$r_i$ ( $\text{mm}$ )	$\omega$ ( $\text{nm}$ )	$N_c$	$V_0$ ( $\text{m}^{-3}$ )	$\beta_c$	$E_A$ ( $\text{J}/\text{mol}$ )	分子扩散系数 $D$ ( $\text{m}^2/\text{s}$ )	
								弹性阶段 $D_e$	塑性阶段 $D_p$
0.0	0.0	0.4	10.0	6	1.0	0.3	$8.57 \times 10^3$ (石英)	$7.7 \times 10^{-10}$	$77.0 \times 10^{-10}$

表 2 压力溶解计算参数(2)  
Table 2 Parameters for pressure solution(2)

$k^*$ ( $\text{mol}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$ )	$\alpha$	$R$ ( $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ )	$T_A$ ( $\text{K}$ )	$V_m$ ( $\text{m}^3/\text{mol}$ )	$C_{eq}$ ( $\text{mol}/\text{m}^3$ )	$K_b$ ( $\text{GPa}$ )
$6.05 \times 10^{-8}$	1.0	8.31	1 883 (石英)	$2.27 \times 10^{-5}$ (石英)	12.997	1.0

注： $C_i$  为初始颗粒界面间溶质浓度； $C_p$  为初始孔隙空间中溶质浓度； $r_i$  为颗粒直径； $\beta_c$  近似取实值； $C_{eq}$  为溶质的平衡溶解度。当岩体进入塑性后因其破碎程度增加而使得溶质较易迁移，故取分子扩散系数值为弹性阶段值的 10 倍。

岩体介质的水分特性曲线符合 Van Genuchten 模型<sup>[17]</sup>，即

$$s_w = (s_{ws} - s_{wr})(1 + |\alpha\psi|^\beta)^{-\gamma} + s_{wr} \quad (29)$$

式中： $\alpha = 3.86 \times 10^{-6} \text{ m}^{-1}$ ； $\beta = 1.41$ ； $\gamma = 1 - 1/\beta$ ； $\psi$  为水势； $s_{ws}$ 、 $s_{wr}$  分别为最大饱和度和最小饱和度， $s_{ws} = 1.0$ ， $s_{wr} = 0.19$ 。

比渗透率与饱和度的关系为

$$k_{rw} = s_w^2 \quad (30)$$

取岩体介质的温度梯度水分扩散系数为

$$D_t = 2.5 \times 10^{-12} \text{ m}^2 / (\text{s}\cdot^\circ\text{C}) \quad (31)$$

针对前述的两种工况，对其主要结果分析如下。

由于渗流和地应力对核废物释热的影响较小<sup>[18]</sup>，故两种工况条件下计算域中的温度场基本相同。以工况 1 为例，432、433、434、435 各点处的温度随时间的变化曲线见图 4。由图看到，在开始的约 0.1 a 内缓冲层的温度快速上升，之后缓慢增加，到计算终了时，432、433、434、435 各点的温度依次为 97.8、81.9、72.6、65.7。图 5 为工况 1 在 4 a

时计算域中的温度等值线分布。

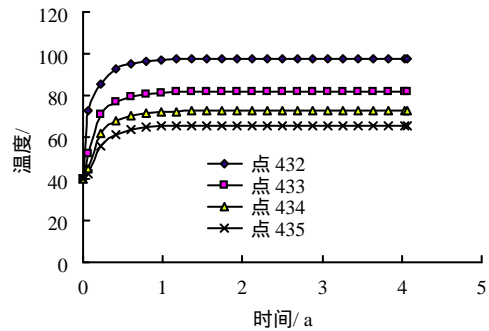


图 4 温度-时间曲线  
Fig.4 Curves of temperature versus time

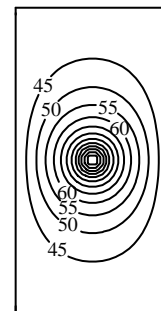


图 5 4 a 时工况 1 计算域中温度等值线图(单位： $^\circ\text{C}$ )  
Fig.5 Contour map of temperature in calculation domain at 4 years for case 1 (unit： $^\circ\text{C}$ )

从图 6 看到，两种工况计算域中的应力量值及分布有一定差别。如到 4 a 时，432、433、434、435 各点水平正应力/垂直正应力依次为，工况 1：-9.9/-31.6、-12.5/-33.4、-14.2/-34.8、-15.5/-35.9 MPa；工况 2：-9.1/-32.3、-12.2/-34.2、-14.1/-35.1、-15.1/-36.2 MPa。弹塑性计算到 4 a 时岩体中塑性区见图 7，其分布大致呈竖立的哑铃形。

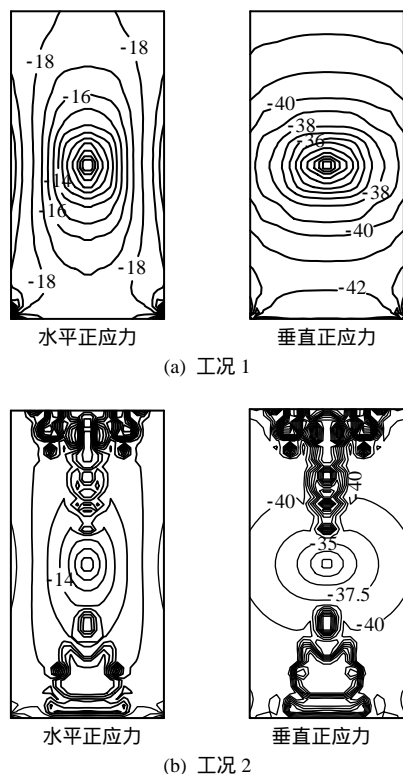


图 6 4 a 时计算域中正应力等值线图(单位: MPa)  
Fig.6 Contour maps of normal stress in calculation domain at 4 years (unit: MPa)

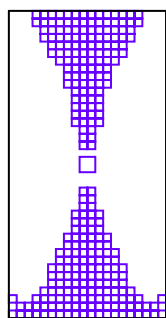


图 7 4 a 时计算域中塑性区(工况 2)  
Fig.7 Plastic zone in calculation domain at 4 years for case 2

从图 8 看到，在压力溶解作用下，颗粒接触面处和颗粒孔隙中的溶质浓度  $C_i$ 、 $C_p$  在开始约 0.2 a 内急速升、降，之后随时间的推移仍在减小，但变化

幅度不大。到计算终了时玻璃固化体中心正下方  $y=0.3\text{ m}$  和  $y=1.1\text{ m}$  处的工况 1  $C_i$  分别为：14.644 77、15.006 73  $\text{mol/m}^3$ ；工况 2  $C_i$  分别为：14.639 78、13.659 69  $\text{mol/m}^3$ ；工况 1  $C_p$  分别为：13.032 24、13.040 53  $\text{mol/m}^3$ ；工况 2  $C_p$  分别为：13.032 13、13.118 66  $\text{mol/m}^3$ 。对照图 8 可知，固化体中心正下方  $y=0.3\text{ m}$  和  $y=1.1\text{ m}$  的点分别处于弹性区、塑性区，其中前者由于始终是在弹性阶段，该点的分子扩散系数保持定值，故  $C_i$  及  $C_p$  变化很小；后者是在约 3 a 时进入屈服的，这之后该点的分子扩散系数增大到其初值的 10 倍，因而  $C_i$  及  $C_p$  分别有明显的下降和上升。

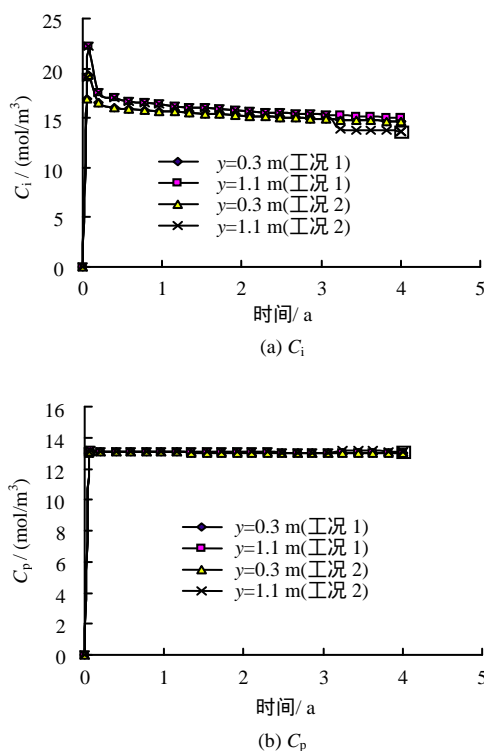


图 8 岩体中 2 个点的溶质浓度-时间曲线 (固化体中心  $y=0$ )

Fig.8 Curves of solute concentrations versus time at two nodes in rock mass( $y=0$  at the center of vitrified waste)

从图 9 也可见，在压力溶解作用下，颗粒接触面处的迁移质量  $\Delta m_i^{\text{SiO}_2}$  和颗粒孔隙中的沉淀质量  $\Delta m_p^{\text{SiO}_2}$  亦在开始约 0.2 a 内急速升、降，之后随时间的变化趋缓。正是因为颗粒接触面处的溶解和颗粒孔隙中的沉淀使得岩体孔隙率减小。到计算终了时固化体中心正下方  $y=0.3\text{ m}$  和  $y=1.1\text{ m}$  处的迁移和沉淀质量分别为：工况 1  $\Delta m_i^{\text{SiO}_2} = 1.037 48$ 、 $1.265 02\text{ mol}$ ，工况 2  $\Delta m_i^{\text{SiO}_2} = 1.034 34$ 、 $3.480 89\text{ mol}$ ；工况 1  $\Delta m_p^{\text{SiO}_2} = -1.037 50$ 、 $-1.265 05\text{ mol}$ ，工况 2  $\Delta m_p^{\text{SiO}_2} = -1.034 36$ 、 $-3.482 00\text{ mol}$ 。比较可知，

$\Delta m_i^{SiO_2} \approx -\Delta m_p^{SiO_2}$  ,即颗粒接触面处的溶解质量基本变为颗粒孔隙中的沉淀质量。也可知,  $y=1.1$  m 处进入塑性区之后, 该点  $\Delta m_i^{SiO_2}$  和  $\Delta m_p^{SiO_2}$  的绝对值明显变大, 其约为工况 1 (弹性) 相应值的 3 倍。其主要原因亦在于岩体进入塑性后取了较高的分子扩散系数值 (为弹性阶段值的 10 倍)。

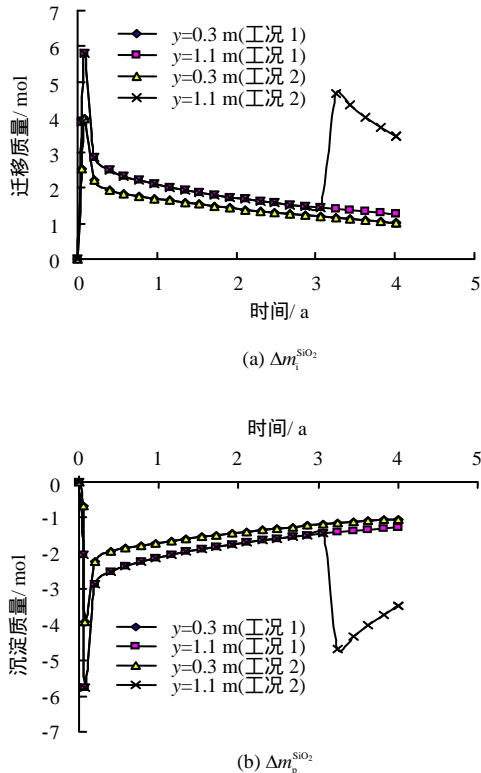


图 9 岩体中 2 个点的迁移/沉淀质量-时间曲线 (固化体中心  $y=0$ )

Fig.9 Curves of migration/precipitation masses versus time at two nodes in rock mass ( $y=0$  at the center of vitrified waste)

图 10 为源/汇项反应体积  $R$  和颗粒贯穿深度  $h$  随时间的变化曲线。从图中看到, 在压力溶解作用下,  $R$  和  $h$  也是在开始约 0.2 a 内急速上升, 之后随时间的推移  $R$  缓慢下降, 而  $h$  还呈现明显的增长趋势 (孔隙率减小的原因之一)。到计算终了时  $x=0.3$  m 和  $x=1.5$  m 处的迁移和沉淀质量分别为: 工况 1  $R=8.331\ 23 \times 10^{-5}$ 、 $8.262\ 32 \times 10^{-5}$   $m^3$ , 工况 2  $R=8.331\ 17 \times 10^{-5}$ 、 $8.245\ 26 \times 10^{-5}$   $m^3$ ; 工况 1  $h=1.312\ 46 \times 10^{-5}$ 、 $1.471\ 77 \times 10^{-5}$  m, 工况 2  $h=1.311\ 74 \times 10^{-5}$ 、 $1.664\ 55 \times 10^{-5}$  m。

亦可见,  $y=1.1$  m 处进入塑性区之后该点  $R$  和  $h$  也有一定的变化, 特别是  $h$  的增加较明显。

图 11 为 4 a 时岩体中孔隙率等值线分布。此时在固化体中心正下方  $y=0.3$  m 和  $y=1.1$  m 处的具体值依次为: 工况 1 为 0.166 0、0.152 5; 工况 2 为

0.166 3、0.141 1, 分别约为初始值 0.3 的 55.3%、50.8%和 55.4%、47.0%。由图看到, 距离玻璃固化体越远, 孔隙率减小越多, 其原因为: 在玻璃固化体附近温度较高, 由此产生的热效应使得真实应力  $\sigma_a$  与临界应力  $\sigma_a^{eq}$  之差较小, 并且固体硅的化学活度  $a_{SiO_2}$  与温度  $T$  成反比, 因而该处孔隙率下降较少, 反之亦然。并且  $y=1.1$  m 处进入塑性区之后该点孔隙率也比弹性时有较明显的减小。上述两点处的孔隙率随时间的变化曲线见图 12, 从图中也可知, 在开始的约 0.2 a 内, 因上覆及自重荷载的施加, 压力溶解使得岩体孔隙率内急速下降, 之后随时间的推

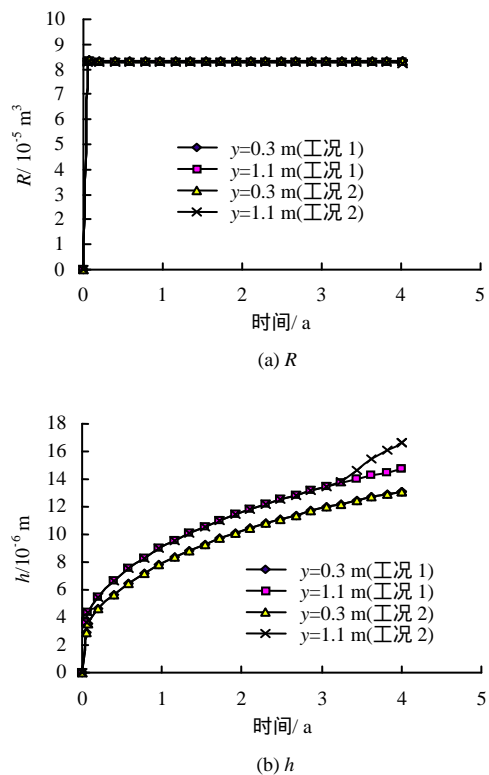


图 10 岩体中 2 个点的反应体积和颗粒贯穿深度-时间曲线(固化体中心  $y=0$ )

Fig.10 Curves of reaction volumes and granular interpenetrations versus time at two nodes in rock mass ( $y=0$  at the center of vitrified waste)

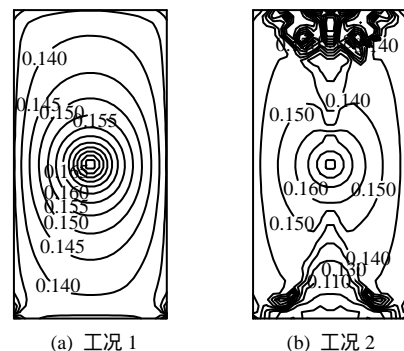


图 11 4 a 时岩体中孔隙率等值线分布图

Fig.11 Contour maps of porosity in rock mass at 4 years

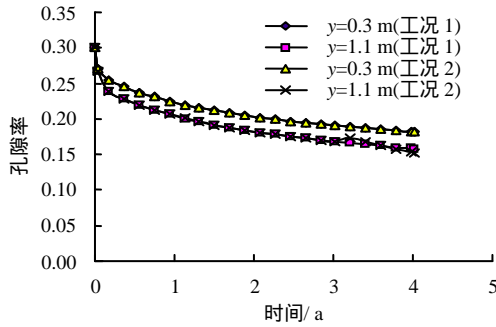


图 12 岩体中 2 个点的孔隙率-时间曲线(固化体中心  $y=0$ )  
 Fig.12 Curves of porosity versus time at two nodes in rock mass ( $y=0$  at the center of vitrified waste)

移孔隙率虽仍在衰减,但变化幅度较小(渐趋平衡),且与温度的增长趋势并不同步。并且  $y=1.1$  m 处进入塑性区之后,该点孔隙率也比弹性时有较明显的减小。将图 12 与 Taron 等由解析及试验得出的岩体孔隙率-时间曲线(见图 13)相比较,可见两者定性较为一致。

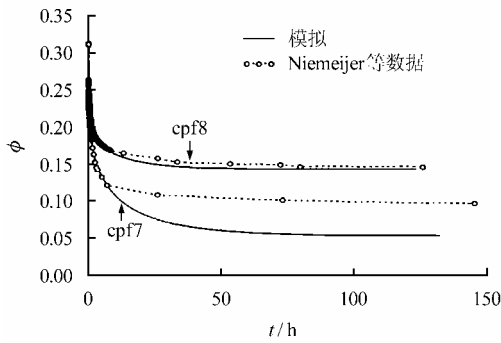


图 13 Taron 模型与试验数据的对比<sup>[12]</sup>  
 Fig.13 Comparison between Taron model and experimental data<sup>[12]</sup>

相对应的渗透系数的等值线分布及随时间的变化曲线分别见图 14、15,其与孔隙率的演化规律类似,在时间上表现了一定的非线性特征(由式(24)决定)。上述两点处的渗透系数依次为:工况 1 为  $0.1476 \times 10^{-13}$ 、 $0.1111 \times 10^{-13}$  m/s;工况 2 为  $0.1488 \times 10^{-13}$ 、 $0.0867 \times 10^{-13}$  m/s,分别约为初始值的 11.9%、9.0%和 12.0%、7.0%。与孔隙率变化的情况类似,  $y=1.1$  m 处进入塑性区之后该点渗透系数也比弹性时有较明显的下降。

图 16 为两种工况中 432、434 点处的孔隙水压力随时间的变化曲线。从图中可知,一开始由于岩体荷载的突然施加,孔隙水压力有瞬时的少许下降,之后在压力溶解(岩体孔隙率和渗透系数减小)应力场和温度场的共同作用下,孔隙水压力随时间呈

现一定幅度的上升。到 4 a 时 432、434 点处的孔隙水压力值,工况 1 为 4.580 1、4.580 5 MPa;工况 2 为 4.579 5、4.579 9 MPa。可以看到,弹性及弹塑性分析时孔隙水压力随时间的变化有所差别。计算终了时两种工况下的孔隙水压力等值线见图 17。

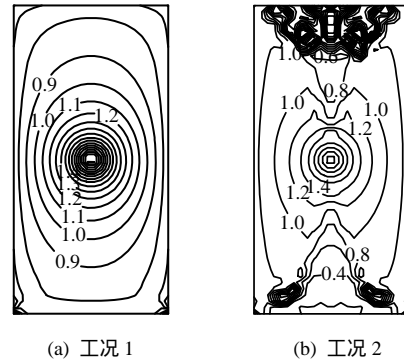


图 14 在 4 a 时岩体中渗透系数等值线分布图  
 (单位:  $10^{-14}$  m/s)

Fig.14 Contour maps of permeability in rock mass at 4 years for case 1(unit:  $10^{-14}$  m/s)

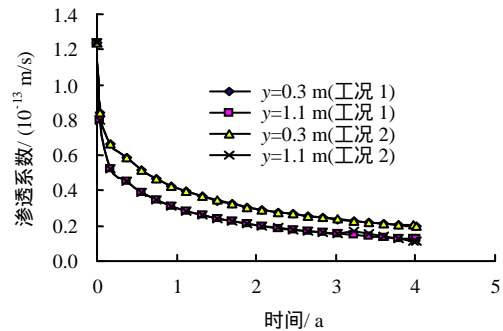


图 15 岩体中 2 个点的渗透系数-时间曲线  
 (固化体中心  $y=0$ )

Fig.15 Curves of permeability versus time at two nodes in rock mass ( $y=0$  at the center of vitrified waste)

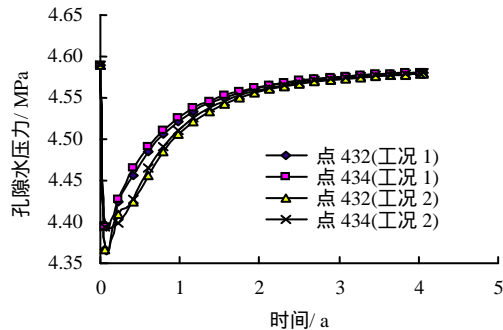


图 16 岩体中 2 个点的孔隙水压力-时间曲线  
 Fig.16 Curves of pore pressure versus time at two nodes in rock mass

图 18 为工况 1、2 在 4 a 时计算域中的孔隙水流速矢量分布。可以看到,弹性及弹塑性分析时的



流速矢量分布有明显的不同。以 432、433、434、435 点为例,孔隙水流速分别为:工况 1 时为  $6.66 \times 10^{-11}$ 、 $5.21 \times 10^{-11}$ 、 $4.63 \times 10^{-11}$ 、 $4.58 \times 10^{-11}$  m/s; 工况 2 时为  $5.92 \times 10^{-11}$ 、 $5.26 \times 10^{-11}$ 、 $5.15 \times 10^{-11}$ 、 $5.35 \times 10^{-11}$  m/s。

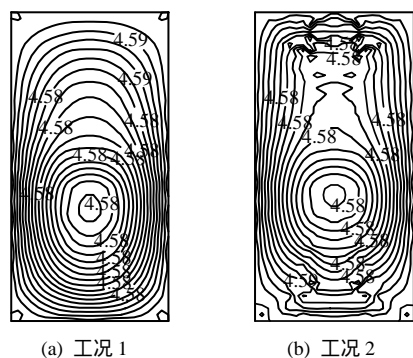


图 17 4 a 时岩体中的孔隙水压力等值线图(单位: MPa)  
Fig.17 Contour maps of pore water pressure in rock mass at 4 years (unit: MPa)

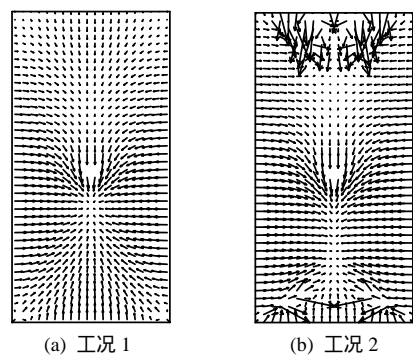


图 18 4 a 时计算域中的孔隙水流速矢量图  
Fig.18 Flow vectograms of pore water in calculation domain at 4 years

## 6 结 论

在笔者所研制的孔隙介质热-水-应力耦合有限元程序中引入 Taron 等建立的颗粒聚集体的压力溶解模型,使用摩尔-库仑准则,以一个假定的实验室尺度且位于饱和颗粒聚集孔隙岩体中的高放废物地质处置模型为例子,分别进行了弹性和弹塑性两种工况的热-水-应力耦合的二维有限元模拟,考察了岩体中的温度、颗粒界面及孔隙中的溶质浓度、迁移和沉淀质量、孔隙率及渗透系数、孔隙水压力、地下水流速和主应力的变化、分布情况。计算结果表明:

(1) 两种工况下的温度状态基本相同,计算终了 4 a 时,近场的温度可达到 40~98 。

(2) 相比于弹性分析,弹塑性分析中因部分岩

体进入塑性而产生应力调整和增大了分子扩散系数,使得塑性区的颗粒介质的溶解、迁移和沉淀有明显的变化,并引起该区的孔隙率和渗透系数下降加快,从而对渗流场(孔隙水的压力及流速)和应力场产生显著的影响。

(3) 两种工况弹性区中的颗粒介质的溶解、迁移和沉淀差别较小。

也需要指出,因目前世界上尚缺乏类似于文中算例的室内模型试验,且无真实的高放核废料地质处置库运行,还不能提供相关的试验或/和实测数据,故本文分析成果的适用性暂时无法以实例来验证,加上其虚拟的背景及一些简化(如没有考虑处置库开挖以及屏障系统的效应等),从而使得算例的真实性存在某种局限,但其耦合模型、计算方法、揭示的现象仍具有一定的方法论意义和借鉴作用。

## 参 考 文 献

- [1] 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 modes[J]. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 2005, 42(5/6): 680 - 697.
- [2] RUTQVIST J, FREIFELD B, MIN K B, et al. Analysis of thermally induced changes in fractured rock permeability during 8 years of heating and cooling at the Yucca Mountain Drift Scale Test[J]. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 2008, 45(8): 1373 - 1389.
- [3] MIN K B, RUTQVIST J, TSANG C F, et al. Thermally induced mechanical and permeability changes around a nuclear waste repository—A far-field study based on equivalent properties determined by a discrete approach[J]. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 2005, 42(5/6): 765 - 780.
- [4] TARON J, ELSWORTH D, MIN K B. Numerical simulation of thermal-hydrologic-mechanical-chemical processes in deformable, fractured porous media[J]. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 2009, 46(5): 855 - 864.
- [5] 沈珍瑶, 李国鼎, 李书绅. 高放废物处置库近场热湿力耦合初步模拟[C]//中国高放废物地质处置十年进展. 北京: 原子能出版社, 2004: 370 - 378.

- SHEN Zhen-yao, LI Guo-ding, LI Shu-shen. The coupled calculation in near field of a HLW deep geological disposal repository[C]//Geological Disposal of High Level Radioactive Waste in China: Progress in Last Decade. Beijing: Atomic Energy Press, 2004: 370 - 378.
- [6] 张玉军. 考虑溶质浓度影响的热-水-应力-迁移耦合模型及数值模拟[J]. 岩土力学, 2008, 29(1): 212 - 218.
- ZHANG Yu-jun. Model and numerical simulation for coupled thermo-hydro-mechanical-migratory processes considering influence of solute concentration[J]. **Rock and Soil Mechanics**, 2008, 29(1): 212 - 218.
- [7] 刘泽佳, 李锡夔. 非饱和和多孔介质中混合元法的化学-热-渗流-力学耦合的本构模拟[J]. 计算力学学报, 2007, 24(4): 397 - 402.
- LIU Ze-jia, LI Xi-kui. The coupled chemo-thermo-hydro-mechanical constitutive modeling for the mixed finite element of unsaturated porous media[J]. **Chinese Journal of Computational Mechanics**, 2007, 24(4): 397 - 402.
- [8] 刘泽佳, 李锡夔, 武文华. 多孔介质中化学-热-水力-力学耦合过程本构模型和数值模拟[J]. 岩土工程学报, 2004, 26(6): 797 - 803
- LIU Ze-jia, LI Xi-kui, WU Wen-hua. constitutive model and numerical simulation for coupled chemo-thermo-hydro-mechanical process in porous media[J]. **Chinese Journal of Geotechnical Engineering**, 2004, 26(6): 797 - 803.
- [9] 李荣涛, 李锡夔. 高温下混凝土化学塑性-损伤耦合本构模拟及破坏分析[J]. 应用力学学报, 2008, 25(1): 51 - 56.
- LI Rong-tao, LI Xi-kui. Coupled chemo-elastoplastic-damage constitutive model of concrete at high temperature and failure analysis[J]. **Chinese Journal of Applied Mechanics**, 2008, 25(1): 51 - 56.
- [10] WU Wen-hua, LI Xi-kui, CHARLIER R, et al. A thermo-hydro-mechanical constitutive model and its numerical modelling for unsaturated soils[J]. **Computers and Geotechnics**, 2004, 31(2): 155 - 167.
- [11] HUECKEL T, PELLEGRINI R, OLMO C. A constitutive study of thermoelasto-plasticity of deep carbonatic clays[J]. **International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics**, 1998, 22(7): 549 - 574.
- [12] TARON J, ELSWORTH D. Constraints on compaction rate and equilibrium in the pressure solution creep of quartz aggregates and fractures: Controls of aqueous concentration[J]. **Journal of Geophysical Research**, 2010, 115: B07211. doi:10.1029/2009JB007118.
- [13] LEE D, ELSWORTH D, YASUHARA H, et al. Experiment and modeling to evaluate the effects of proppant-pack diagenesis on fracture treatments[J]. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, 2006, 74: 67 - 76.
- [14] OWEN D, HINTON E. Finite elements in plasticity: theory and practice[M]. Swansea, UK: Pineridge Press Limited, 1980.
- [15] 张玉军. 废料地质处置近场热-水-应力-迁移耦合二维有限元分析[J]. 岩土工程学报, 2007, 29(10): 1553 - 1557.
- ZHANG Yujun. 2D FEM analysis for coupled thermo-hydro-mechanical-migratory process in near field of geological disposal of nuclear waste[J]. **Chinese Journal of Geotechnical Engineering**, 2007, 29(10): 1553 - 1557.
- [16] YASUHARA H, ELSWORTH D, POLAK A. A mechanistic model for compaction of granular aggregates moderated by pressure solution[J]. **Journal of Geophysical Research**, 2003, 108, B11, 2530, doi: 10.1029/2003JB002536.
- [17] CHIJIMATSU M, KURIKAMI H, ITO A, et al. Implication of THM coupling on the near-field of a nuclear waste repository in a homogeneous rock mass[R]. Tokyo: Hazama Corporation, 2002: 1 - 43.
- [18] RUTQVIST J, CHIJIMATSU M, JING L, et al. A numerical study of THM effects on the near-field safety of a hypothetical nuclear waste repository—BMT1 of the DECOVALEX III project. Part 3: Effects of THM coupling in sparsely fractured rocks[J]. **International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences**, 2005, 42(5/6): 745 - 755.