

文章编号: 1000-7598 (2012) 10-3129-10

应力腐蚀和压力溶解作用下双重孔隙岩体中 THMM 耦合过程的有限元分析

张玉军¹, 杨朝帅²

(1. 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, 武汉 430071;

2. 中铁隧道集团有限公司 技术中心, 河南 洛阳 471009)

摘要: 在使用 Yasuhara 等建立的裂隙开度的应力腐蚀和压力溶解模型的基础上, 将溶质浓度场引入笔者已开发的双重孔隙-裂隙介质热-水-应力耦合的二维有限元分析程序中, 针对一个假设的位于非饱和岩体中且有核素泄漏的高放废物地质处置库, 拟定 2 种计算工况: (1) 裂隙开度随应力腐蚀和压力溶解而变化 (基岩的孔隙率亦是应力的函数); (2) 裂隙开度和基岩的孔隙率均为常数, 进行热-水-应力-迁移耦合的数值模拟, 考察了岩体中的温度、裂隙开度的闭合速率、闭合量、孔 (裂) 隙水压力、地下水流速、核素浓度和应力的变化、分布等情况。结果主要显示: 应力腐蚀引起的闭合速率要高于压力溶解引起的闭合速率 6 个数量级, 且两种因素产生的闭合速率随时间先增加后减小, 并趋于稳定; 当考虑应力腐蚀和压力溶解时, 近场的负裂隙水压力上升很高; 工况 1 中裂隙开度和孔隙率减小, 使得相应的渗透系数降低, 故该工况的裂隙和孔隙中核素浓度较工况 2 为高; 由于不计入负的孔 (裂) 隙水压力对应力平衡的影响, 2 种工况的岩体中的应力量值及分布基本相同。

关键词: 应力腐蚀; 压力溶解; 双重孔隙介质; 热-水-应力-迁移耦合; 有限元分析

中图分类号: O 242.21

文献标识码: A

FE analysis of THMM coupling processes in dual-porosity rock mass under stress corrosion and pressure solution

ZHANG Yu-jun¹, YANG Chao-shuai²

(1. State Key Laboratory of Geomechanics and Geotechnical Engineering, Institute of Rock and Soil Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Wuhan 430071, China; 2. Technical Centre, China Railway Tunnel Group Co., Ltd., Luoyang, Henan 471009, China)

Abstract: On the basis of using the models of stress corrosion and pressure solution established by Yasuhara et al, the solute concentration field is introduced into the 2D FEM code of thermo-hydro-mechanical coupling analysis for dual-porosity medium developed by the authors. Aiming at a hypothetical nuclear waste repository in unsaturated rock mass from which there is a nuclide leak, two computation conditions are designed: (1) the fracture apertures are changed with the stress corrosion and pressure solution (the porosity of intact rock is also a function of stress); (2) the fracture apertures and the porosity of intact rock are constants, then the corresponding two-dimensional numerical simulation for the coupled thermo-hydro-mechano-migratory processes is carried out; and the states of temperatures, rates and magnitudes of aperture closure, pore and fracture pressures, flow velocities, nuclide concentrations and stresses in the rock mass are investigated. The results show that the aperture closure rates caused by stress corrosion are almost six orders higher than those caused by pressure solution; and the two kinds of closure rates climb up and then decline, furthermore tend towards stability; when the effects of stress corrosion and pressure solution are considered, the negative fracture pressures in near field rise very high; the fracture aperture and porosity decrease in the case 1, so the relative permeability coefficients reduce; therefore the nuclide concentrations in pore and fracture in this case are higher than those in case 2 because the effects of negative pore and fracture pressures on the stress balancing are not reckoned in; the magnitudes and distributions of stresses within the rock mass in two calculation cases are almost the same.

Key words: stress corrosion; pressure solution; dual-porosity medium; thermo-hydro-mechano-migratory coupling; FE analysis

收稿日期: 2011-06-04

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(No. 51079145); 国家重点基础研究发展计划(973)资助项目(No. 2010CB732101)。

第一作者简介: 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

1 引言

当具有流体通道的孔隙和裂隙的双重岩体位于地下数千米的深度时,若在此处进行矿物和能源的回采、高放废物及 CO₂ 的隔离等人工活动,则环境应力和温度条件的改变可能影响这些通道的渗透特性。其综合效应对裂隙而言分别称之为应力腐蚀^[1-4]和压力溶解^[5-8],前者引起支撑糙度的破裂(或压碎)、后者导致接触糙度溶解,从而使得裂隙产生闭合和其渗透性的退化。

这里的应力腐蚀,是指作用在裂隙支撑糙度上的压缩荷载引起局部拉应力时,将出现“次临界”或“准静态”的破裂,形成随时间发展的渐进破坏,特别是有水存在时由化学反应促使次临界裂纹的生长。而压力溶解则包括了3个连续的过程:首先在承受应力的接触糙度处矿物溶解;之后溶质沿着水膜扩散;最终在孔隙壁处溶质沉淀下来。

Dove^[9]曾在较宽广的温度和 pH 值范围内进行室内试验,以此严格地考察石英的溶解动力学,并得到了因化学溶解引起的 I 型裂纹扩展速率经验表达式。Yasuhara 等^[10]基于试验数据,考察一个含有单条天然裂隙的均密石英岩样中的裂隙开度的演化,由此提出描述该现象的应力腐蚀和压力溶解模型。Taron 等^[11]将压力溶解、热-水-应力收缩与膨胀、矿物沉淀与溶解对裂隙开度张开与闭合的复杂影响进行数学简化,建立了一种新的热-水-应力-化学双重介质模型,并以此结合 TOUGHREACT 和 FLAC^{3D}分析了天然裂隙岩体的渗透率变化机制。笔者等也曾对其所建立的双重孔隙-裂隙介质热-水-应力耦合有限元程序作了改进,即引入 Ki-Bok Min 等^[12]提出的简化压力溶解模型,对裂隙开度进行适时修正,建立裂隙的渗透系数随压力溶解的演化模式,并以一个假定的位于非饱和地层中的高放废物地质处置库为算例,针对3种裂隙开度的工况开展了数值模拟^[13]。然而这其中并没有考虑溶质浓度场。众所周知,高放废物地质处置中核素可能的泄漏与扩散是非常重要的研究内容^[14],故基于上述工作,完善已有的计算模型和有限元程序,进行热-水-应力-迁移耦合分析势在必行。

为此笔者首先在文献[13]的控制方程中引入 Yasuhara 的应力腐蚀和压力溶解模型,再加进溶质浓度场,即对于孔隙-裂隙双重介质,认为应力场和温度场是单一的,但存在着孔隙水压力和裂隙水压力、孔隙浓度和裂隙浓度,从而可模拟相应的热-水-应力-迁移耦合过程。然后针对一个假定位于非

饱和双重孔隙-裂隙介质中的高放废物地质处置库,拟定2种工况:(1)裂隙开度随应力腐蚀和压力溶解而变化(基岩的孔隙率亦是应力的函数);(2)裂隙开度和基岩的孔隙率均为常数,在一定的初始温度、孔隙水压力、岩体应力和核素释放强度条件下,进行有限元分析,考察了处置库近场的温度、孔隙水压力、水流速、饱和度、核素浓度和应力的分布与变化,得出了若干有意义的认识。

2 裂隙渗透特性的修正

2.1 应力腐蚀对裂隙开度的影响

如图1所示,假定脆性材料的裂隙中粗糙面接触是 Hertzian 接触,则在这种接触的内部或外部可能因拉应力 σ_t 产生圆形裂纹,此被称为应力腐蚀。Dove^[9]对石英材料定义其中 I 型裂纹的扩展速率为

$$v_{\text{Si-O}} = A_{\text{H}_2\text{O}} \exp\left(\frac{-\Delta H_{\text{H}_2\text{O}}}{RT}\right) \exp(b_{\text{H}_2\text{O}}^* K_1) (\theta_{\text{Si-O}}^{\text{H}_2\text{O}}) + A_{\text{OH}^-} \exp\left(\frac{-\Delta H_{\text{OH}^-}}{RT}\right) \exp(b_{\text{OH}^-}^* K_1) (\theta_{\text{Si-O}}^{\text{OH}^-}) \quad (1)$$

式中: $v_{\text{Si-O}}$ 为因化学溶解引起的 I 型裂纹扩展速率; $A_{\text{H}_2\text{O}}$ 、 A_{OH^-} 为由试验确定的因子; 其与温度有关; $\Delta H_{\text{H}_2\text{O}}$ 、 ΔH_{OH^-} 为活化焓; R 为气体常数; T 为温度; $b_{\text{H}_2\text{O}}^*$ 、 $b_{\text{OH}^-}^*$ 为由试验确定的常数,其与裂纹尖端的几何条件有关; K_1 为应力强度因子; $\theta_{\text{Si-O}}^{\text{H}_2\text{O}}$ 、 $\theta_{\text{Si-O}}^{\text{OH}^-}$ 为具有分子水或氢氧根离子的硅-氧反应的组成分数,其符合 $\theta_{\text{Si-O}}^{\text{H}_2\text{O}} + \theta_{\text{Si-O}}^{\text{OH}^-} = 1$, 并且在低 pH 值时有 $\theta_{\text{Si-O}}^{\text{H}_2\text{O}} = 1$ 、 $\theta_{\text{Si-O}}^{\text{OH}^-} = 0$, 在高 pH 值时有 $\theta_{\text{Si-O}}^{\text{H}_2\text{O}} = 0$ 、 $\theta_{\text{Si-O}}^{\text{OH}^-} = 1$ 。则 Yasuhara 等^[10]给出裂隙力学开度的应力腐蚀闭合速率为

$$\frac{dE^s}{dt} = -(1 - R_c) v_{\text{Si-O}} \quad (2)$$

而

$$K_1 \approx \sigma_t \sqrt{2\pi r} \quad (3)$$

$$\sigma_t = -\frac{(1-2\mu)}{2} \sigma_a \quad (4)$$

$$\sigma_a = \frac{\bar{R}}{R_c} \bar{\sigma} \quad (5)$$

式中: r 为沿由 σ_t 产生的 I 型裂纹长轴方向的距离,假定裂纹的初始长度及 r 都是足够小的; μ 为材料的泊松比; σ_t 为由 σ_a 引起的拉应力,其在裂隙的接触边缘达到最大值; σ_a 为作用在裂隙接触面积上的真实压应力; \bar{R} 为裂隙的名义面积(可取单位

值); R_c 是裂隙的接触面积, 并且 $R_c \leq \bar{R}$ 。

R_c 由下式求算:

$$E^s = E_r + (E_0 - E_r) \exp[-(R_c - R_{c0})a] \quad (6)$$

式中: E 、 E_r 和 E_0 依次为裂隙力学开度的平均值、

残余值和初始值; R_{c0} 为裂隙接触面积的初始值; a 为经验常数。

从而裂隙力学开度因应力腐蚀的演化律为

$$E_{t+\Delta t}^s = E_t^s + \frac{dE^s}{dt} \Delta t \quad (7)$$

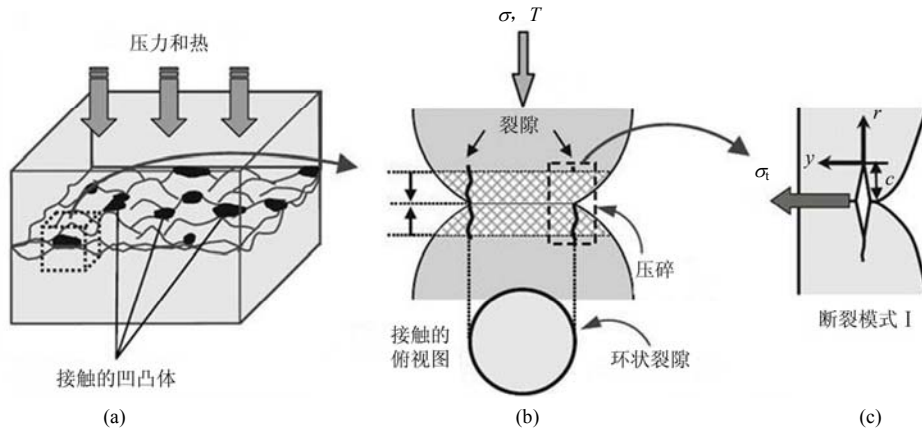


图 1 微裂纹传播引起的裂隙压缩^[10]

Fig.1 Schematic of fracture compaction induced by microcrack propagation^[10]

2.2 压力溶解对裂隙开度的影响

Yasuhara 等^[10]定义了物质的溶解速率为

$$\frac{dM_{diss}}{dt} = \frac{3\pi V_m^2 (\sigma_a - \sigma_c) k_+ \rho_g d_c^2}{4RT} \quad (8)$$

式中: dM_{diss}/dt 为从裂隙界面上进入溶液中的溶解质量速率; V_m 为固体的摩尔体积; σ_c 为临界应力, 当 $\sigma_a = \sigma_c$ 时体系达到平衡、反应停止; k_+ 为固体的溶解速率常数; ρ_g 为固体的密度; d_c 为粗糙面接触的直径。

而 $k_+ = k_+^0 \exp(-E_a/RT)$ (9)

$$\sigma_c = \frac{E_m(1-T/T_m)}{4V_m} \quad (10)$$

式中: k_+^0 为常数因子; E_a 为活化能; E_m 和 T_m 分别为熔化热和熔化温度。

则裂隙力学开度的压力溶解闭合速率为

$$\frac{dE^p}{dt} = -\frac{dM_{diss}}{dt} \frac{1}{\rho_g} \frac{1-R_c}{(\pi/4)d_c^2} = -\frac{3V_m^2 k_+^0 (1-R_c)(\sigma_a - \sigma_c)}{RT} \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (11)$$

从而裂隙力学开度因压力溶解的演化律亦为

$$E_{t+\Delta t}^p = E_t^p + \frac{dE^p}{dt} \Delta t \quad (12)$$

2.3 裂隙渗透系数

设岩体中裂隙的间距为 s , 而单条裂隙开度为

$$E_{t+\Delta t} = \left(E_0 + \sum_{\Delta t} dE^s + \sum_{\Delta t} dE^p \right) \quad (13)$$

故单条裂隙的水力开度为^[15]

$$e_{t+\Delta t} = \frac{E_{t+\Delta t}^2}{JRC^{2.5}} \quad (14)$$

式中: JRC 为裂隙粗糙度系数。

从而, 等效后裂隙岩体的渗透系数为

$$K_{t+\Delta t} = \frac{g e_{t+\Delta t}^3}{12\nu s} \quad (15)$$

式中: g 为重力加速度 (9.81 m/s^2); ν 为运动黏度 (对于 20°C 的纯水其值为 $1.0 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$)。

2.4 应力对基岩渗透系数的影响

而对于基岩的孔隙率和渗透系数, 当岩体中的应力发生改变时, 可根据 Davis 等^[16]提出经验公式进行如下修正

$$\phi = \phi_r + (\phi_0 - \phi_r) \exp(a\sigma'_m) \quad (16)$$

$$k = k_0 \exp[c(\phi/\phi_0 - 1)] = F_{\phi k} k_0 \quad (17)$$

式中: ϕ_0 、 k_0 分别为 0 应力状态的基岩孔隙率和渗透系数; ϕ_r 为高应力状态下的基岩残余孔隙率; σ'_m 为平均有效应力; a 、 c 分别是由试验确定的参数; $F_{\phi k}$ 为孔隙渗透系数的修正因子。

3 渗透-迁移方程引入

笔者对于参考文献[17]中渗透-迁移方程进行

了改进,其新意在于增加了孔隙岩体和裂隙介质之间因浓度差产生的溶质交换,其形式如下:

$$R_i \theta_i \rho_w \frac{\partial c_i}{\partial t} = \nabla^T \theta_i \rho_w \mathbf{D}_i \nabla c_i - \theta_i \rho_w \mathbf{V}_i \nabla c_i - R_i \theta_i \rho_w \chi c_i + (-1)^{i+1} \bar{\omega} \theta_i \rho_w \mathbf{D}_1 (c_1 - c_2) - Q_{ci} \quad (18)$$

式中: $i=1, 2$, 分别对应于孔隙岩体和裂隙介质;
 $R_i = \frac{V_i}{V_i^*} = (1 + \frac{\rho_{di}}{\theta_i} K_{di})$, 其为阻滞系数; V_i 为地下水
 水流表观速度; V_i^* 为溶质输运速度; ρ_{di} 为孔隙岩
 体或裂隙介质的干密度; K_{di} 为对饱和介质的分配
 系数; θ_i 为体积含水率; ρ_w 为流体密度; \mathbf{D}_i 为扩
 散张量; c_i 为溶质浓度; \mathbf{V}_i 为地下水表观流速矢量;
 χ 为衰减常数; $\bar{\omega}$ 为取决于裂隙的开度与几何形状
 的参数; Q_{ci} 为源汇项。

而扩散张量可表示为

$$D_{i\alpha\beta} = \alpha_{iT} |\mathbf{V}_i| \delta_{\alpha\beta} + (\alpha_{iL} - \alpha_{iT}) \frac{V_{i\alpha} V_{i\beta}}{|\mathbf{V}_i|} + \alpha_{im} \tau_i \delta_{\alpha\beta} \quad (19)$$

式中: α_{iT} 为横向弥散度; α_{iL} 为纵向弥散度; $|\mathbf{V}_i|$ 为
 表观流速的绝对值; α_{im} 为分子扩散系数; τ_i 为曲
 折率; $\delta_{\alpha\beta}$ 为克罗内克符号。

笔者将 Yasuhara 的应力腐蚀和压力溶解模型以及式 (18) 引入已有的双重孔隙-裂隙岩体热-水-应力耦合控制方程^[13]中,其有限元算法可见文献 [18]。

4 算 例

如图 2 所示,在地下深处埋入一个圆柱状核废料玻璃固化体,其周围是非饱和的双重孔隙-裂隙石英岩体。将该模型近似简化为平面应变问题。取计算域尺寸水平向为 4 m,垂直向为 8 m,有 800 个单元,861 个节点。从固化体边缘向右的点号依次为 432、433、434、435、436。其边界条件为:顶面位移自由,其上作用有分布荷载 $\sigma_v = 26.7 \text{ MPa}$;左、右侧面的水平方向位移约束;底面的垂直方向位移约束;所有边界的孔隙水压力为 -4.59 MPa 、裂隙水压力 -0.46 MPa 及温度 $20 \text{ }^\circ\text{C}$ 固定。岩体中发育有水平及垂直两组裂隙,热-水-应力耦合的环境对裂隙的开度要产生应力腐蚀和压力溶解作用。有关的计算参数见表 1~3 (表 3 中除 R_{c0} 、 \bar{R} 和 JRC 外,其余参数取自文献[10])。初始状态时,岩体的温度均为 $20 \text{ }^\circ\text{C}$ 。核废物以 1000 W 的不变功率释放热量,时间经历了 4 a。

孔隙介质和裂隙介质的水分特性曲线符合 Van Genuchten 模型,即

$$s_w = (s_{ws} - s_{wr})(1 + |\alpha\psi|^n)^{-m} + s_{wr} \quad (20)$$

式中:对于孔隙介质, $\alpha = 3.86 \times 10^{-6} \text{ m}^{-1}$, $n = 1.41$;对于裂隙介质, $\alpha = 5.26 \times 10^{-4} \text{ m}^{-1}$, $n = 2.55$; $m = 1 - 1/n$; ψ 为水势; s_{ws} 为最大饱和度,其值为 1.0; s_{wr} 为最小饱和度,对孔隙介质和裂隙介质其值各取 0.19 和 0.01。

比渗透率与饱和度的关系为

$$k_{rw} = s_w^{2.0} \quad (21)$$

取孔隙介质及裂隙介质的温度梯度水分扩散系数相同,即 $D_i = 2.5 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s } ^\circ\text{C}$

贮存罐为孔隙岩体中的源项,某种放射性核素的释放强度为 $Q_c = 1.44 \times 10^{-10} \text{ mol} \cdot \text{kg}/\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ 。设与核素的渗透迁移有关且在计算中不变的参数为:孔隙曲折率 τ_1 、 τ_2 分别为 0.4、0.8,纵向弥散度 α_{1L} 、 α_{2L} 分别为 1.0 m 和 2.0 m,横向弥散度 $\alpha_{1T} = \alpha_{1L}/10$,分子扩散系数 α_{1m} 、 α_{2m} 分别为 $1.0 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ 和 $2.0 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$,分配系数 K_{d1} 、 K_{d2} 分别为 8.0 ml/g 和 5.3 ml/g,干密度 ρ_{d1} 、 ρ_{d2} 分别为 $2.3 \text{ g}/\text{m}^3$ 和 $2.1 \text{ g}/\text{m}^3$,参数 $\bar{\omega}$ 为 100.0 m^2 ,放射性核素的衰减常数 $\chi = \ln 2/T_{\text{half}}$,其中 T_{half} 为半衰期,取为 1000 a。

针对前述的 2 种裂隙开度变化工况,计算了岩体中的温度、位移、孔隙水压力、核素浓度和应力等的变化及分布情况,其主要结果及分析如下。

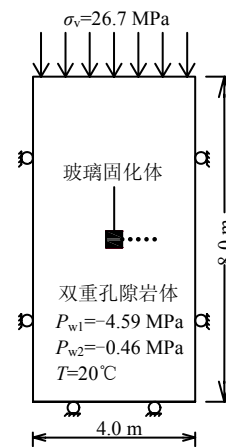


图 2 计算模型
 Fig.2 Computation model

工况 1 和工况 2 两种条件下计算域中的温度变化基本相同。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 3。由图看到,在开始的约 0.1 a 内缓冲层的温度快速上升,之后增加减缓,到计算终了时 432、433、434、435 各点的温度依次为 $77.8 \text{ }^\circ\text{C}$ 、 $62.0 \text{ }^\circ\text{C}$ 、 $52.5 \text{ }^\circ\text{C}$ 和 $45.7 \text{ }^\circ\text{C}$ 。

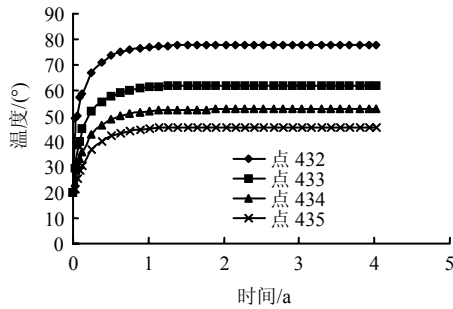


图 3 工况 1 温度-时间曲线

Fig.3 Temperatures versus time at some nodes for case 1

图 4、5 分别为玻璃固化体右缘中点的水平和垂直裂隙开度因应力腐蚀、压力溶解产生的闭合速率随时间的变化。从中看到，两种因素产生的闭合速率均先随时间增加，到达峰值再衰减，之后逐渐趋于不变，并且应力腐蚀引起的闭合速率要比压力溶解引起的闭合速率高 6 个数量级，这与文献[10]中呈现的规律类似；同时水平裂隙开度比垂直裂隙开度闭合速率大，这是由于岩体中垂直应力大于水平应力的缘故。

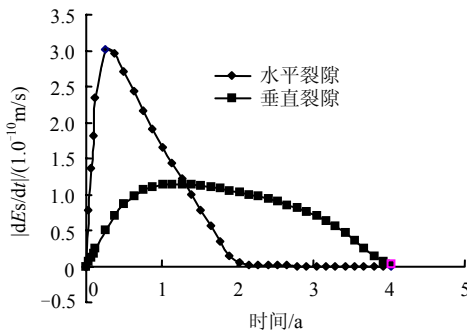


图 4 玻璃固化体右缘中点因应力腐蚀引起的 |dE^s/dt| - 时间曲线

Fig.4 |dE^s/dt| caused by stress corrosion versus time at middle point of right margin of vitrified waste

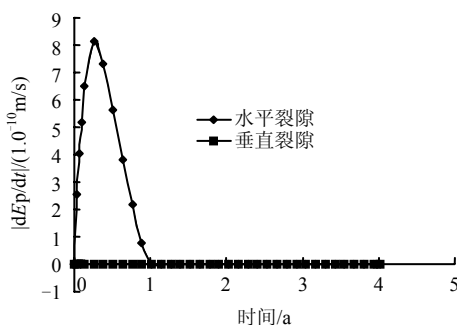


图 5 玻璃固化体右缘中点因压力溶解引起的 |dE^p/dt| - 时间曲线

Fig.5 |dE^p/dt| caused by pressure solution versus time at middle point of right margin of vitrified waste

图 6、7 分别表现了该中点处水平和垂直裂隙开度、粗糙面接触率随时间的演化，前者由初始开度

下降而趋于残余开度，后者由初始接触率上升而趋于其名义接触率（单位值），并且对应于水平裂隙的值的明显要快。

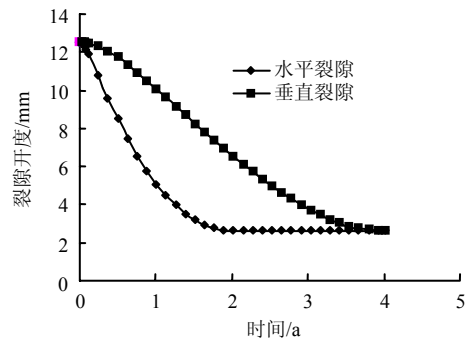


图 6 玻璃固化体右缘中点裂隙开度-时间曲线

Fig.6 Fracture apertures versus time at middle point of right margin of vitrified waste

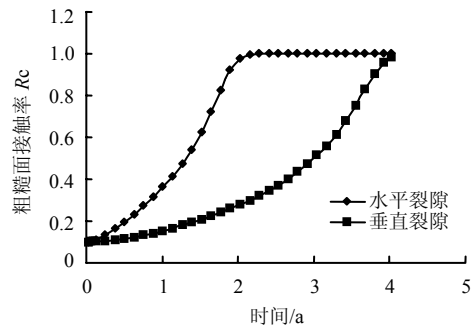


图 7 玻璃固化体右缘中点粗糙面接触率-时间曲线

Fig.7 Contact-area ratios versus time at middle point of right margin of vitrified waste

从图 8 看到，在该中点处水平裂纹上的应力强度因子比垂直裂纹上的应力强度因子大得多，且二者均随时间减小。

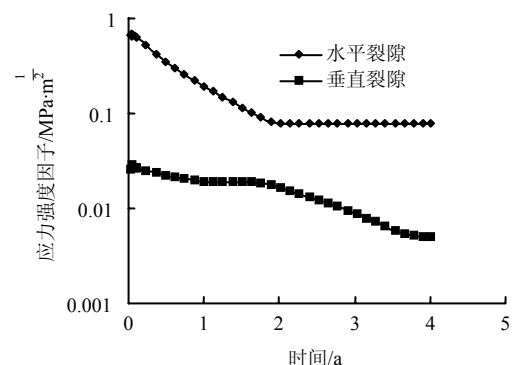


图 8 玻璃固化体右缘中点应力强度因子-时间曲线

Fig.8 Stress intensity factors versus time at middle point of right margin of vitrified waste

而图 9 显示了该中点处水平和垂直裂隙的临界应力相同，且其在开始阶段快速下降，之后逐渐趋于常数。产生上述现象的原因正是由温度、应力与

化学的综合作用。

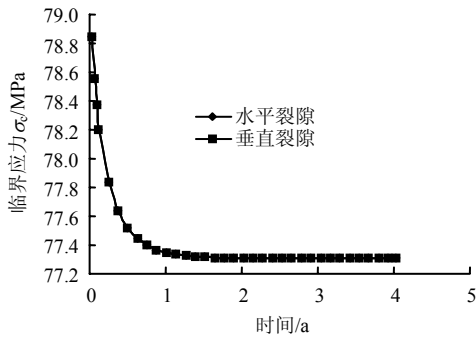


图9 玻璃固化体右缘中点临界应力-时间曲线

Fig.9 Critical stresses versus time at middle point of right margin of vitrified waste

图 10、11 为工况 1、2 中 432、433、434、435 各点处的孔（裂）隙水压力随时间的变化曲线。比较后看到，由于工况 1 考虑了应力腐蚀和压力溶解对裂隙开度的减小作用及孔隙的渗透系数随应力的变化，而工况 2 的裂隙开度及孔隙的渗透系数保持为常数，故工况 1 的负孔（裂）隙水压力上升较高，特别是在应力腐蚀和压力溶解效应最强烈的 432 点，该处的负裂隙水压力达到很大的值。在 4 a 时 432 点的负孔（裂）隙水压力分别为工况 1：-12.25、-7.95 MPa；工况 2：-6.03、-0.66 MPa。

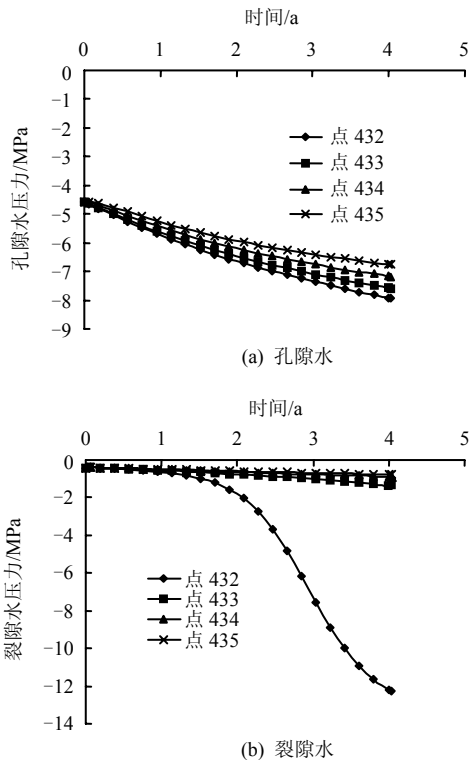


图 10 工况 1 孔(裂)隙水压力-时间曲线

Fig.10 Pore and fracture water pressures versus time at some nodes for case 1

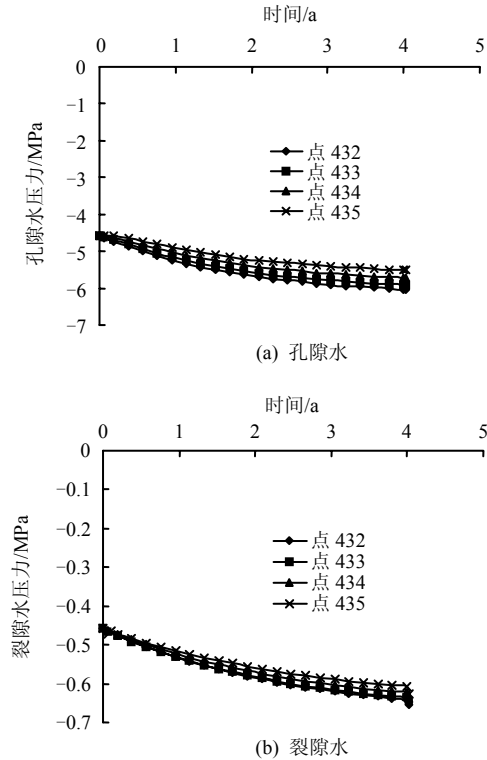


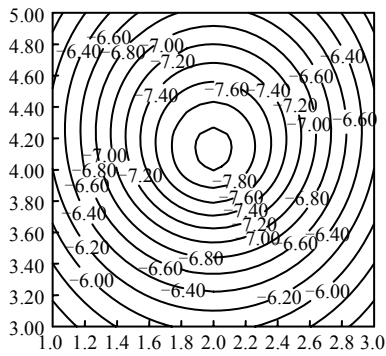
图 11 工况 2 孔(裂)隙水压力-时间曲线

Fig.11 Pore and fracture water pressures versus time at some nodes for case 2

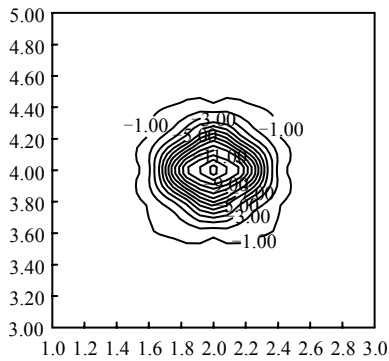
图 12、13 是工况 1、2 在 4 a 时贮存罐周围 2 m × 2 m 范围内孔（裂）隙水压力等值线的分布。从中看到，由于工况 1 受到应力腐蚀和压力溶解的影响，与工况 2 相比，其中的裂隙水压力在贮存罐周围呈现明显的增高区域。

图 14 为两种工况在 4 a 时计算域中的孔隙水流速和裂隙水流速矢量分布。可以看到，由于工况 1 考虑了应力腐蚀和压力溶解效应，与工况 2 相比，其中的裂隙水流速矢量有显著的不同，特别是在贮存罐附近。以 432 点为例，孔隙水流速和裂隙水流速分别为工况 1：3.40 × 10⁻⁸、1.52 × 10⁻⁸ m/s；工况 2：2.32 × 10⁻⁸，2.77 × 10⁻⁸ m/s。

图 15、16 是 2 种工况中 432、433、434、435 各点处的孔隙核素浓度和裂隙核素浓度随时间的变化曲线。比较后可知，由于工况 1 中考虑了应力腐蚀和压力溶解对裂隙开度的减小作用、平均有效应力对孔隙率的压缩功能，使得裂隙和孔隙的渗透系数降低，而工况 2 中的裂隙开度、孔隙率及其渗透系数均为常数，故工况 1 的裂隙和孔隙中核素聚集程度较高，到 4 a 时 2 种工况中 432、433、434、435 各点的核素浓度分别为孔隙岩体：20.18/6.82、15.42/3.60、12.06/2.55、9.36/1.76；裂隙介质：0.86/18.44、8.39/6.82、6.28/5.54、5.00/4.63（“/”的上、下分别是工况 1、2 的数据，其单位是 10⁻³ mol/m³）。



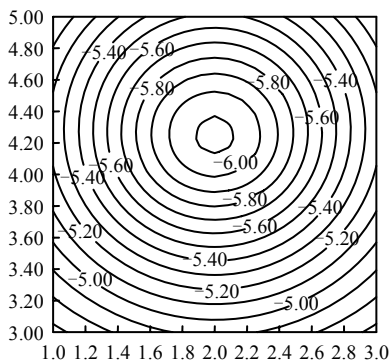
(a) 孔隙水



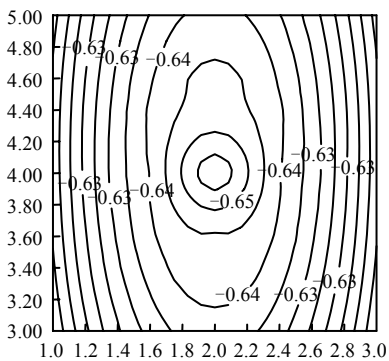
(b) 裂隙水

图 12 工况 1 中 4 a 时 2 m×2 m 区域中的孔(裂)隙水压力等值线(MPa)

Fig.12 Contours of pore and fracture pressures in a 2 m×2 m area at 4 years for case 1 (MPa)



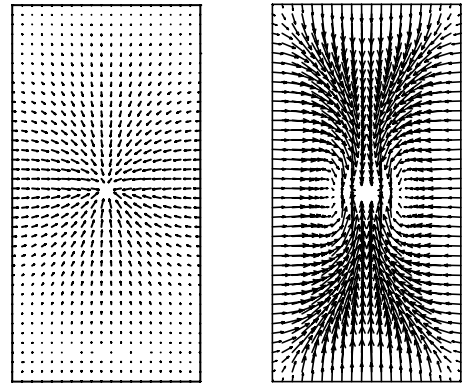
(a) 孔隙水



(b) 裂隙水

图 13 工况 2 中 4 a 时 2 m×2 m 区域中的孔(裂)隙水压力等值线(MPa)

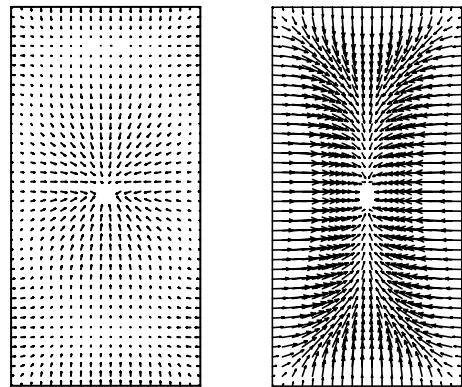
Fig.13 Contours of pore and fracture pressures in a 2 m×2 m area at 4 years for case 2 (MPa)



孔隙水

裂隙水

(a) 工况 1

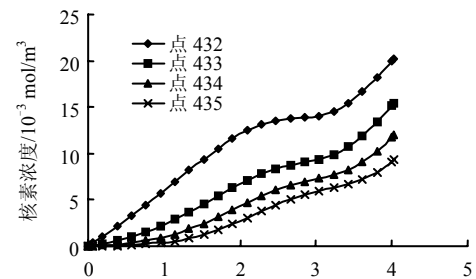


孔隙水

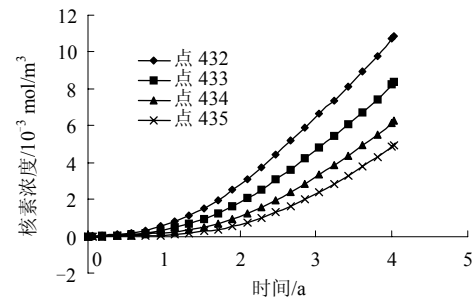
裂隙水

(b) 工况 2

图 14 4 a 时计算域中的孔(裂)隙水流速矢量
Fig.14 Flow vectors of pore and fracture water in calculation domain at 4 years

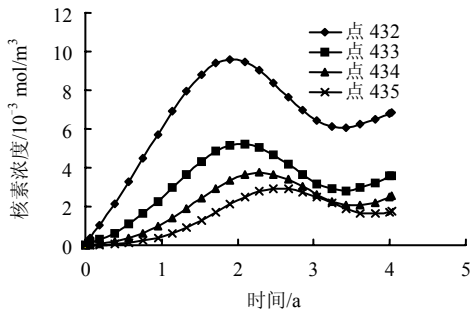


(a) 孔隙

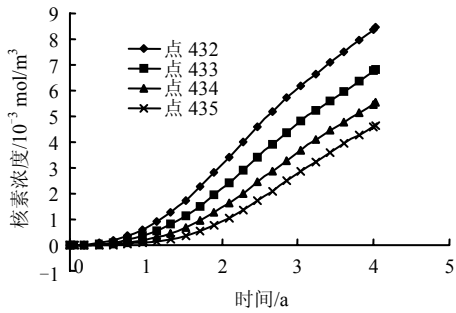


(b) 裂隙

图 15 工况 1 中 4 a 时岩体中核素浓度-时间曲线
Fig.15 Nuclide concentrations versus time at some nodes for case 1



(a) 孔隙

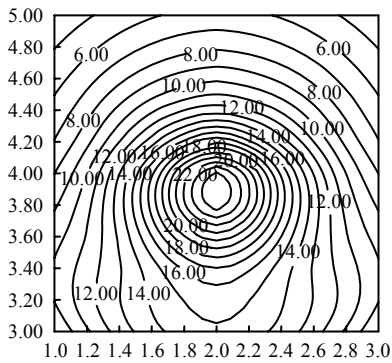


(b) 裂隙

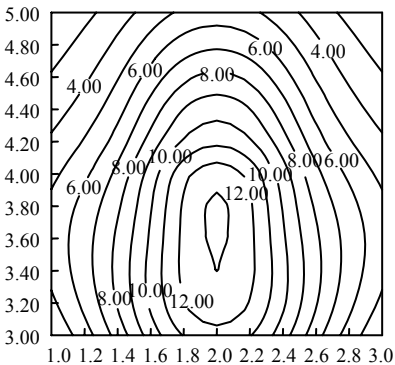
图 16 工况 2 中 4 a 时岩体中核素浓度-时间曲线

Fig.16 Nuclide concentrations versus time at some nodes for case 2

图 17、18 是 2 种工况 4 a 时贮存罐周围 2 m×2 m 范围内的核素浓度和裂隙核素浓度等值线分布。



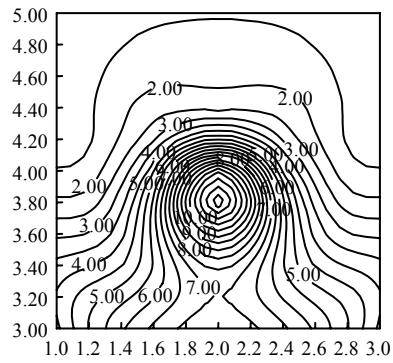
(a) 孔隙浓度



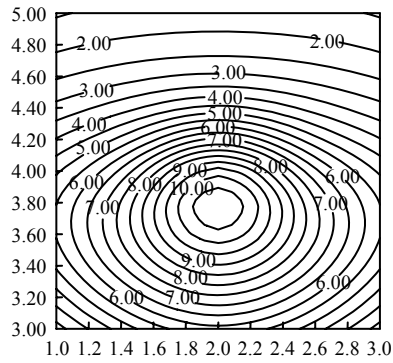
(b) 裂隙浓度

图 17 工况 1 中 4 a 时 2 m×2 m 区域中核素浓度等值线(10^{-3} mol/m^3)

Fig.17 Contours of nuclide concentration in a 2 m×2 m area at 4 years for case 1 (10^{-3} mol/m^3)



(a) 孔隙浓度

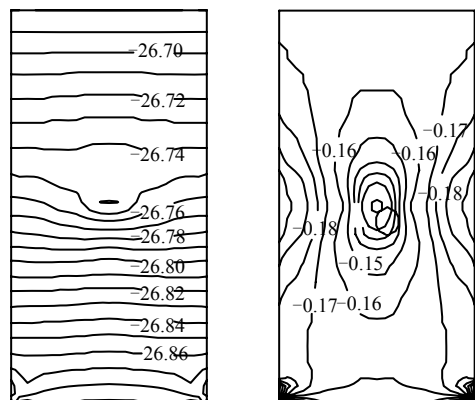


(b) 裂隙浓度

图 18 工况 2 中 4 a 时 2 m×2 m 区域中核素浓度等值线(10^{-3} mol/m^3)

Fig.18 Contours of nuclide concentration in a 2m×2m area at 4 years for case 2 (10^{-3} mol/m^3)

由于不考虑负的孔(裂)隙水压力对应力平衡的影响^[19], 两种工况的计算域中应力场量值及分布差别很小, 这里以工况 1 为例给出 4 a 时计算域中的正应力等值线, 见图 19。从中看到, 由于玻璃固化体的存在及放热效应, 使得计算域中的应力场不同于仅由岩体自重产生的应力场(后者的应力等值线为水平线)。到 4 a 时玻璃固化体右缘中点的水平应力和垂直应力分别为 -0.124 MPa 和 -26.75 MPa。



(a) 垂直正应力

(b) 水平正应力

图 19 4 a 时工况 1 计算域中正应力等值线(MPa)

Fig.19 Normal stress contours in calculation domain at 4 years for case 1 (MPa)

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

介质	重度 $\rho / (\text{kN}/\text{m}^3)$	孔隙率 ϕ_1	渗透系数 $k_1 / \mu_w /$ $(\text{m}^2/\text{Pa}\cdot\text{s})$	弹性模量 E/GPa	泊松系数 μ	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 λ $/(\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot^\circ\text{C}^{-1})$
岩石	26.7	0.11	1.24×10^{-13}	37.0	0.30	1.0	8.8×10^{-6}	2.8
固化体	25.0	0.00	1.00×10^{-27}	53.0	0.25	0.7	1.0×10^{-5}	5.3

表 2 裂隙组的计算参数
Table 2 Parameters for fracture sets used in calculation

裂隙类型	间距 S/m	连通率 l	倾角 $\theta / (^\circ)$	法向刚度 $k_n / (\text{MPa}/\text{m})$	切向刚度 $k_s / (\text{MPa}/\text{m})$	孔隙率 ϕ_2	渗透系数 $k_2 / \mu_w / (\text{m}^2/\text{Pa}\cdot\text{s})$
水平裂隙	0.3	1	0	1 000	500	0.01	9.7×10^{-9}
垂直裂隙	0.3	1	90	2 000	1 000	0.01	9.7×10^{-9}

表 3 应力腐蚀和压力溶解的计算参数
Table 3 Parameters for stress corrosion and pressure solution

计算参数	经验常数 a	初始粗糙面 接触率 R_{c0}	名义粗糙面 接触率 \bar{R}	裂隙粗糙度 系数 JRC	因子 $A_{\text{H}_2\text{O}}/\text{ms}^{-1}$	因子 $A_{\text{OH}^-}/\text{ms}^{-1}$	初始开度 E_0/m
数值	5.0	0.1	1.0	9.7	$1.12 \times 10^{-4}T$	2.51×10^3T	0.0125
计算参数	残余开度 E_r/m	常数 $b_{\text{H}_2\text{O}}^*/N^{-1}\text{m}^{3/2}$	常数 $b_{\text{OH}^-}^*/N^{-1}\text{m}^{3/2}$	活化能 $E_a/\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$	熔化热 $E_m/\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$	H_2O 的活化焓 $\Delta H_{\text{H}_2\text{O}}/\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$	OH^- 的活化焓 $\Delta H_{\text{OH}^-}/\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$
数值	0.0025	2.69×10^{-5} (石英)	1.78×10^{-5} (石英)	7.0×10^4 (石英)	8.57×10^3 (石英)	6.6×10^4	8.27×10^4
计算参数	参考的溶解速率常数 $k_p^0/\text{mol}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$	到裂纹尖端的 微小距离 r/m	气体常数 $R/\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	熔化温度 T_m/K	摩尔体积 $V_m/\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$	组成分数 $\theta_{\text{Si-O}}^{\text{H}_2\text{O}}$	组成分数 $\theta_{\text{Si-O}}^{\text{OH}^-}$
数值	1.59	1.0×10^{-6}	8.31	1883 (石英)	2.27×10^{-5} (石英)	0.999 21 (pH=7)	0.000 79 (pH=7)

5 结 论

针对已建立的双重孔隙-裂隙介质热-水-应力耦合控制方程，在应用了 Yasuhara 等提出的裂隙开度的应力腐蚀和压力溶解算式的基础上，引入溶质浓度场，发展为相应的热-水-应力-迁移耦合模型。以一个假定的位于非饱和双重孔隙-裂隙岩体中的高放废物地质处置库的核素泄漏为算例，就主要考虑裂隙开度是否随应力腐蚀和压力溶解而变化（同时基岩的孔隙率也作为是否是应力函数的处理）的 2 种工况，通过热-水-应力-迁移耦合的二维有限元模拟，考察了岩体中的温度、裂隙开度的闭合速率、闭合量、孔隙水压力、地下水流速、核素浓度和正应力的变化、分布情况。计算结果表明：工况 1、2 中的温度状态差别不大，计算终了（4 a）时，近场的温度可达到 $30.0\text{ }^\circ\text{C} \sim 80.0\text{ }^\circ\text{C}$ ；应力腐蚀引起的闭合速率要高于压力溶解引起的闭合速率 6 个数量级，且两种因素产生的闭合速率随时间先增加后减小，并趋于稳定；随着时间的推移裂隙开度由初始值下降并趋于残余值，而粗糙面接触率亦由初始值上升

并趋于其名义值；作用在裂纹上的应力强度因子及临界应力均随时间减小，并趋于常数；当考虑应力腐蚀和压力溶解时，与不计该作用时相比，近场的负裂隙水压力上升很高，且其流速矢量场有显著的不同；由于工况 1 中应力腐蚀、压力溶解和平均有效应力使得裂隙和孔隙的渗透系数降低，而工况 2 中的裂隙及孔隙的渗透系数均为常数，故前者的裂隙和孔隙中核素浓度较后者为高；但 2 种工况的岩体中的应力量值及分布基本相同。

参 考 文 献

[1] ATKINSON K. A fracture mechanics study of subcritical tensile cracking of quartz in wet environments[J]. *Pure and Appl. Phys.*, 1979, 117: 1011—1024.

[2] DOVE M. The dissolution kinetics of quartz in sodium chloride solutions at 25° to 300°C [J]. *Am. J. Sci.*, 1994, 294: 665—712.

[3] CHESTER S, LENZ C, CHESTER M, et al. Mechanisms of compaction of quartz sand at diagenetic conditions[J].

- Earth Planet Sci. Lett.**, 2004, 220(3-4): 435-451.
- [4] NARA Y, KANEKO K. Study of subcritical crack growth in andesite using the double torsion test[J]. **Int. J. Rock Mech. Min. Sci.**, 2005, 42(4): 521-530.
- [5] ROBIN F. Pressure solution at grain to grain contacts[J]. **Geochim. Cosmochim. Acta**, 1978, 42: 1383-1389.
- [6] DEWERS T, HAJASH A. Rate laws for water-assisted compaction and stress-induced water-rock interaction in sandstones[J]. **J. Geophys. Res.**, 1995, 100: 13093-13112.
- [7] REVIL A. Pervasive pressure-solution transfer: A poro-visco-plastic model[J]. **Geophys. Res. Lett.**, 1999, 26: 255-258.
- [8] YASUHARA H, ELSWORTH D, POLAK A. Evolution of permeability in a natural fracture: Significant role of pressure solution[J]. **J. Geophys. Res.**, 2004, 109(B3): B03204. doi: 10.1029/2003JB002663.
- [9] DOVE M. Geochemical controls on the kinetics of quartz fracture at subcritical tensile stresses[J]. **J. Geophys. Res.**, 1995, 100(B11): 22349-22359.
- [10] YASUHARA H, ELSWORTH D. Compaction of a rock fracture moderated by competing roles of stress corrosion and pressure solution[J]. **Pure. Appl. Geophys.**, 2008, 165: 1289-1306.
- [11] TARON J, ELSWORTH D. Thermal-hydrologic-mechanical-chemical processes in the evolution of engineered geothermal reservoirs[J]. **Int. J. Rock Mech. Min. Sci., International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences**, 2009, 01: j.ijrmmms. doi: 07. 1016/200901.
- [12] MIN K B, RUTQVIST J, ELSWORTH D. Chemical and mechanically mediated influences on the transport and mechanical characteristics of rock fractures[J]. **International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences**, 2009, 02: j.ijrmmms. doi: 10. 1016/200804002.
- [13] 张玉军, 张维庆. 裂隙开度的压力溶解对双重孔隙介质热-水-应力耦合影响的有限元分析[J]. **岩土力学**, 2010, 31(41): 1269-1275.
ZHANG Yu-jun, ZHANG Wei-qing. Finite element analysis of influence of pressure solution of fracture aperture on T-H-M coupling in dual-porosity medium[J]. **Rock and Soil Mechanics**, 2010, 31(41): 1269-1275.
- [14] SONNENTHAL E, ITO A, SPYCHER N, et al. Approaches to modeling coupled thermal, hydrological, and chemical processes in the drift scale heater test at Yucca Mountain[J]. **International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences**, 2005. 42(5/6), 698-719.
- [15] OLSSON R, BARTON N. An improved model for hydromechanical coupling during shearing of rock joints[J]. **International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences**, 2001, 38(3): 317-329.
- [16] DAVIS J, DAVIS D. Stress-dependent permeability: Characterization and modeling[R]. [S.l.]: Society of Petroleum Engineers, 1999.
- [17] NISHIGAKI M. Density dependent transport analysis saturated-unsaturated porous media—3 dimensional eulerian lagrangian method[R]. [S.l.]: Okayama University, 2001.
- [18] 张玉军, 张维庆. 双重孔隙介质 THMM 耦合模型及其有限元分析[J]. **力学学报**, 2010, 42(4): 660-669.
ZHANG Yu-jun, ZHANG Wei-qing. Coupled thermo-hydro-mechanical-migratory model and FEM analyses for dual-porosity medium[J]. **Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics**, 2010, 42(4): 660-669.
- [19] 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[M]. [S.l.]: [s.n.], 2002.