

裂隙中滞水区对溶质运移影响的模拟分析

李国敏^{1, 2}, 黎明¹, 韩巍¹, TSANG Chin-Fu²

(1. 中国科学院地质与地球物理研究所 工程地质力学重点实验室, 北京 100029;

2. *Earth Sciences Division, E.O. Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, CA 94706, USA*)

摘要: 无论是野外还是室内试验所涉及到的均是变隙宽的粗糙裂隙。重点探讨带滞水区的裂隙形态对其中溶质示踪剂运移的影响及导致的运移特征变化。采用的模拟方法是考虑对流与分子扩散步骤的随机粒子追踪方法。数值模型区域选择均质导水介质。不同程度的分子扩散模式用于比较其对溶质运移结果——穿透曲线特征的影响。尝试从不同穿透曲线的特征分析来解析带滞水区裂隙的几何形态及相对分子扩散程度对溶质运移的影响。研究结果表明, 在不带滞水区的单裂隙中, 溶质几乎同时流出系统。对于相同分子扩散尺度下的带较宽或较深滞水区的裂隙, 其对应的穿透曲线的高峰值明显降低并伴随着明显的“拖尾”现象。模拟结果还表明在较高尺度分子扩散条件下, 其穿透曲线具有相类似的特征。

关键词: 数值分析; 裂隙; 滞水区; 溶质运移; 非均质介质

中图分类号: O 319.56

文献标识码: A

文章编号: 1000 - 6915(2007)增 2 - 3855 - 06

SIMULATION ANALYSIS OF EFFECT OF STAGNANT POOL IN FRACTURE ON SOLUTE TRANSPORT

LI Guomin^{1, 2}, LI Ming¹, HAN Wei¹, TSANG Chin-Fu²

(1. *Key Laboratory of Engineering Geomechanics, Institute of Geology and Geophysics,*

Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029, China; 2. *Earth Sciences Division,*

E.O. Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, CA 94706, USA)

Abstract: The more common situations both in field and in laboratory involve nonorthogonal fractures of unequal aperture. The effect of crack shape in stagnant pool on solute tracer and the corresponding change of transport character are discussed especially. Random tracer particle method is adopted, which considers convection and diffusive steps. Numerical experiments are conducted in a homogeneous conductivity field. Simulations with different degrees of diffusion are used to compare their effect on solute transport result, i.e. character of breakthrough curves. The effects of geometric shape of fracture in stagnant pool and relative molecular diffusion degree on the solute transport are analyzed according to the characters of different breakthrough curves. Results indicate that, in the single fracture without stagnant pool, the solute pours out almost at the same time; for the same diffusion scale, the peak value of the breakthrough curves of the fractures with a deeper or wider stagnant pool decreases obviously and the tail of the curve increases. The results also demonstrate that the breakthrough curves have similar characters under the condition of higher scale of molecular diffusion.

Key words: numerical analysis; fracture; stagnant pool; solute transport; heterogeneous medium

收稿日期: 2007 - 03 - 07; **修回日期:** 2007 - 04 - 11

基金项目: 中国科学院知识创新工程重要方向项目(kzcx2 - yw - 116); 中国地质调查局地质调查项目(1212010331302)

作者简介: 李国敏(1963 -), 男, 博士, 1984年毕业于武汉地质学院水文地质专业, 现任研究员、博士生导师, 主要从事水文地质、地下水资源与环境等方面的教学与研究工作。E-mail: guominli@mail.iggcas.ac.cn

1 引言

溶质在裂隙中的运移过程涉及到水利、环境、污染治理及废物处置的主要基础问题，国内外众多水文地质学者对此开展了许多深入的研究。

无论是野外现场还是室内试验研究均发现花岗岩等岩石中的裂隙的隙宽是变化的，裂隙面是粗糙的。针对这一问题，从实验室研究的角度，一些科学家通过将单裂隙打开，通过高精度电子测量，掌握隙宽在平面上的变化规律；或直接通过 CT 等透视技术确定裂隙的尺寸及隙宽变化；进一步开展室内示踪试验，研究隙宽及分布对溶质运移的影响，如王锦国和周志芳^[1]、李春江等^[2]进行了裂隙介质溶质运移试验研究。另一方面，一大批学者从数值模拟的角度开展了研究，如 Y. W. Tsang 和 C. F. Tsang^[3]提出用变隙宽的管状模型描述裂隙介质中的溶质运移；L. Moreno 等^[4]和 Y. W. Tsang 等^[5]研究变隙宽的单裂隙中溶质运移现象，其中将裂隙描述成一个二维的高度非均质的渗流介质；王锦国和周志芳^[6]用分形理论模拟裂隙面和裂隙张开度及粗糙裂隙中的溶质运移。

粒子追踪方法是一种有效的方法，并被广泛应用于研究非均匀多孔介质中的溶质运移^[7-10]。F. W. Schwartz 等^[11]、J. W. Robinson 和 J. E. Gale^[12]用粒子追踪方法研究由一组裂隙构成的理想模型裂隙中的溶质运移过程；于青春和大西有三^[13]利用粒子追踪方法模拟了圆盘形三维裂隙网络中的溶质运移过程。

本文主要研究单一理想裂隙所含滞水槽的几何特性与在此裂隙中溶质运移的特征之间所存在的关系。针对根据随机运动质点法算出的对流和分子扩散过程，分别模拟和分析质点经过上述两个不同运移过程穿过裂隙的情况。针对单一简单裂隙所含滞水槽的几何特性，计算、绘制其穿透曲线并分析其特征。本文还将对根据不同程度的分子扩散度得到的模拟结果进行比较和讨论。

2 模型结构和边界条件

为了研究滞水槽对裂隙中水流与溶质运移的影响，选择图 1 所示的模型及边界条件。为了模拟地下水流过该区域的过程，其边界取为定水头边界：

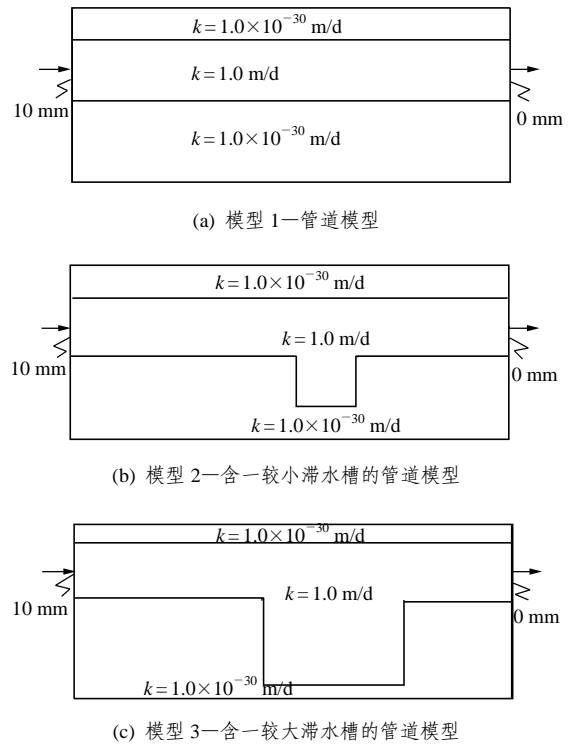


图 1 模型及边界条件

Fig.1 Models and boundary conditions

左侧边界的定水头高度为 10 mm，右侧边界的定水头为 0 mm，并且介质的上、下边界为渗透性极低的隔水边界。

3 数值试验方法

假定裂隙中的地下水为一非黏滞性且无旋转的二维稳定流。地下水头压力 H 的定义如下：

$$\nabla^2 H = 0 \tag{1}$$

边界条件：

$$H = 0 \quad (x = 0) \tag{2}$$

$$H = H_0 \quad (x = h) \tag{3}$$

式中： H_0 为定水头边界 ($x = h$)。在给定边界条件以及滞水槽几何尺寸的情况下，可以确定在一给定的裂隙中溶质运移的流速。因为流线具有二维特征，即不同的流速在空间上的分布将导致质点运移路径长度的不同，因此可推算出溶质运移中的对流过程。

为了比较不同流动条件下的数值模拟结果，引入 Pe 表征流动条件，其定义如下：

$$Pe = \frac{v}{D} \sqrt{(b+d)^2 + w^2} \tag{4}$$

式中： v 为含滞水区域的平均流速； b 为给定的标准裂隙宽度； w 和 d 分别为滞水槽的宽度和深度； D

为水的分子扩散系数; Pe 为在含滞水槽的区域中对流过程和分子扩散过程之间的相对密度, 当流速增大时, Pe 值增大, 分子扩散的影响将减小, 当流速减小时, Pe 值减小, 分子扩散则在整个溶质运移过程中起着相对更为重要的作用。

在单一裂隙中的分子扩散过程将取决于滞水槽的几何尺寸、溶质在裂隙中的滞留时间以及分子扩散系数的大小。不难理解, 如果在裂隙中的滞留时间足够长, 分子扩散将带动质点穿越流线, 甚至可生成在横剖面上较均匀的浓度分布图。

通常条件下, 不发生反应的、可溶解的中性溶质, 其在运移过程中遵守如下列质量平衡方程:

$$\partial c / \partial t + \nabla(cv) - \nabla(D_f \nabla c) = 0 \quad (5)$$

式中: D_f 为流体的分子扩散系数。其中一个时间段内的浓度 c , 不仅取决于浓度 c 的初始条件, 还受边界条件的制约。

在下步的数值模拟计算中, 将运用随机运动的质点示踪模型模拟裂隙中的溶质运移, 分别按对流和分子扩散两步模拟质点穿过裂隙的过程。该方法是根据溶质运移公式和某些随机微分方程推导而来。质点运移遵循以下的简单关系式^[8]:

$$X^n = X^{n-1} + A(X^{n-1})\Delta t + B(X^{n-1})Z\sqrt{\Delta t} \quad (6)$$

式中: X^n 为质点在 $n\Delta t$ 时刻所在的位置, A 为给定的压力矢量, B 为给定的换算矩阵, Z 为各不相同且平均值为 0 的随机数字向量。每个质点的运移都将被单独记录, 不受其他质点运移的影响。如果大量的表征某组分的质点群同时运移, 那么其数量密度 $f(x, t)$ 将近似满足 Ito Fokker-Planck 公式^[14]:

$$\partial f / \partial t + \nabla(Af) - \nabla \nabla (1/2BB^T f) = 0 \quad (7)$$

式(5)表明流体中各组分的质量守恒。如果式(7)中的质点数量密度 f 与式(5)中的 c 成正比, 并且其中 A 和 B 满足以下条件, 即可采用质点法:

$$A \equiv v + \nabla D_f \quad (8)$$

$$BB^T \equiv 2D_f \quad (9)$$

A. F. B. Tompson 和 L. W. Gelhar^[8]详细论述了应用随机运动质点模型所需计算的近似值的一些问题。

4 模拟结果与讨论

图 1 给出了上述 3 个模型的渗透系数分布, 其中模型 1 是模拟质点在宽为 20 mm 的裂隙中运移的

过程, 模型 2 是在上述裂隙的底部增加一较小的滞水槽, 模型 3 则是在裂隙的底部增加一较大的滞水槽。

根据上述流动模型, 模型范围内任意位置的流速均可计算出。在宽为 20 mm 的 3 个裂隙模型中, 所有质点均从左侧水头较高的边界向右侧水头较低的边界运移, 在模拟中统计出穿过右侧边界的质点个数, 根据不同的到达时刻质点通过右侧边界的个数, 可以绘制出质点数随时间变化的穿透曲线。在模拟过程中, 选用 20 个质点表示溶质运移的路径, 并用 10 000 个质点的相关数据绘制穿透曲线。

在空间流速和扩散作用的影响下, 质点的运移过程是随机运动法的基础。在数值模拟试验中, 当质点从一时间步长到下一时间步长时, 部分质点有可能反向, 从左侧边界穿出或是越过上、下边界。因此假定: 质点一旦从左侧边界穿出即消失; 当质点通过上、下边界时, 它必将反弹回模型范围内。

4.1 分子扩散作用

本节仅考虑溶质运移过程中的分子扩散作用, 因此弥散系数 D 可定义为

$$D = D_f$$

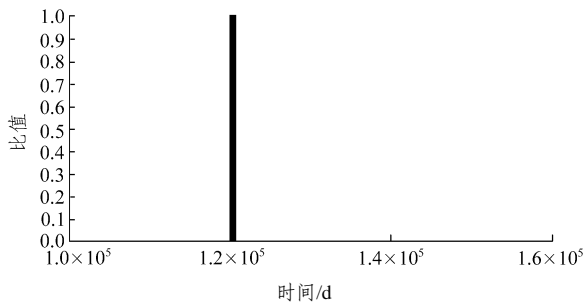
假定 $\sqrt{2D_f t}$ 为扩散长度, 其中 t 为质点运移通过模型范围的平均时间。对于一个稳定流场, t 值不变, 因此, 扩散长度与分子扩散系数成正比。本文将分别模拟图 1 所示 3 个模型中质点在扩散长度分别为 12.00, 6.91 和 0.69 mm 条件下的运移过程。

根据模型 1 所得模拟结果显示: 扩散长度值越小, 粒子的运移路径越呈现沿水平方向; 扩散长度值越大, 粒子受分子扩散作用的影响越大。从模型 2 和 3 的模拟结果可得: 在分子扩散作用的影响下, 大部分粒子运移进入了滞水槽中; 扩散长度值越大, 示踪质点可运移到达滞水槽的深度越深, 部分质点甚至可运移至滞水槽的最深部。

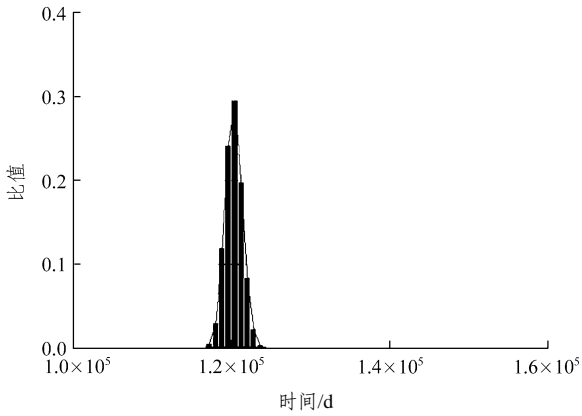
图 2(a)~(d)所示为模型 1 中从右侧边界流出的示踪质点的穿透曲线。如图 2 所示, 扩散系数值越小, 示踪质点流出右侧边界的时间间隔越短, 即在该时段内流出的示踪粒子个数越多, 图中峰值越高; 扩散系数值越大, 示踪粒子所形成的峰值越低, 其流出右侧边界的时间间隔也越长。

4.2 对流作用

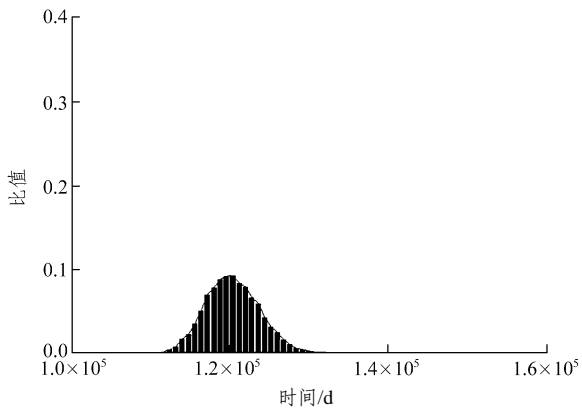
在上述的模型 2 和 3(图 1)中, 模拟的二维流流动区域为一长度为 120 mm、宽度(b)为 10 mm 的裂隙, 该裂隙还含有一宽为 w 、深为 d 的滞水槽。为



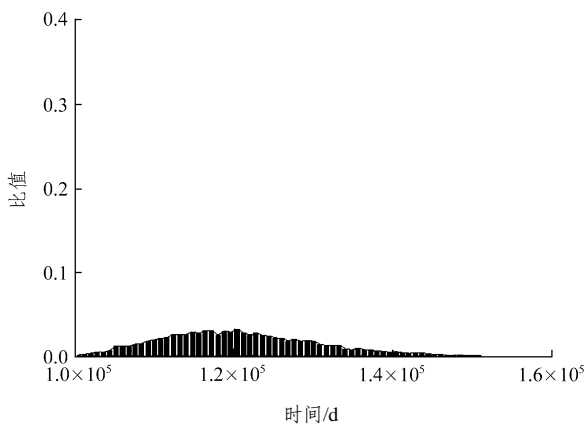
(a) 扩散系数为 $10^{-12} \text{m}^2/\text{s}$



(b) 扩散系数为 $10^{-9} \text{m}^2/\text{s}$



(c) 扩散系数为 $10^{-8} \text{m}^2/\text{s}$



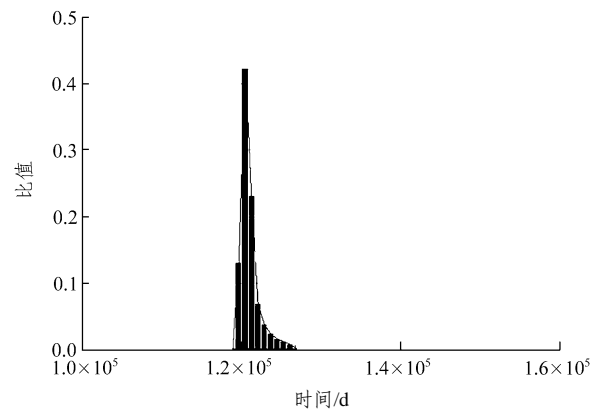
(d) 扩散系数为 $10^{-7} \text{m}^2/\text{s}$

图2 不同扩散系数下模型中示踪质点的穿透曲线

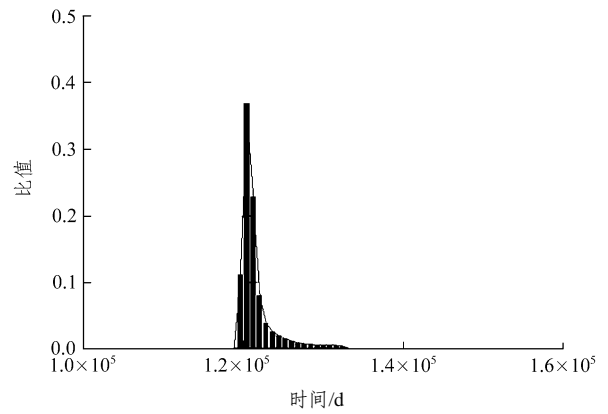
Fig.2 Breakthrough curves of tracer particle in models with different diffusion coefficients

了探讨滞水槽的几何尺寸与相应的溶质运移特征之间的关系, 给定分子扩散系数值为 $10^{-12} \text{m}^2/\text{s}$, 也就意味着相对于对流过程, 分子扩散作用的影响很小。因为流线具有二维结构分布的特点, 即不同的流速分布将导致质点运移路径长度的不同, 因此可推算出对流过程对溶质运移扩散的影响。

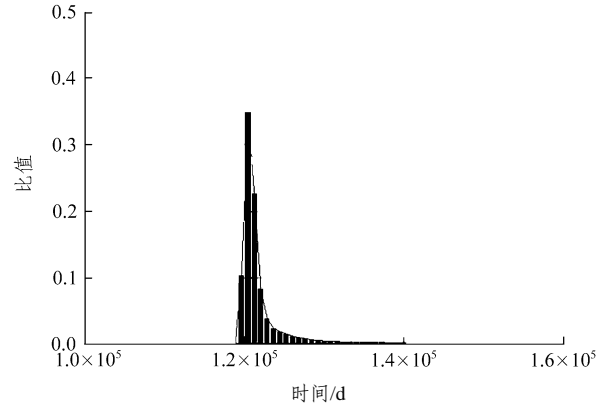
图 3(a)~(d)所示为裂隙中所含滞水槽的槽宽为 b , 槽深分别为 $0.3b$, $0.5b$, $1.0b$ 和 $4.0b$ 时, 相对应的 4 种示踪质点穿透曲线。比较图 3 可看出, 滞水槽越深, 示踪质点所形成的一系列峰值越低, “拖尾”现象也越明显(低浓度的“尾巴”越长), 即示踪质点流出右侧边界的时间间隔越长。这表明滞水槽的



(a) 深为 $0.3b$



(b) 深为 $0.5b$



(c) 深为 $1.0b$

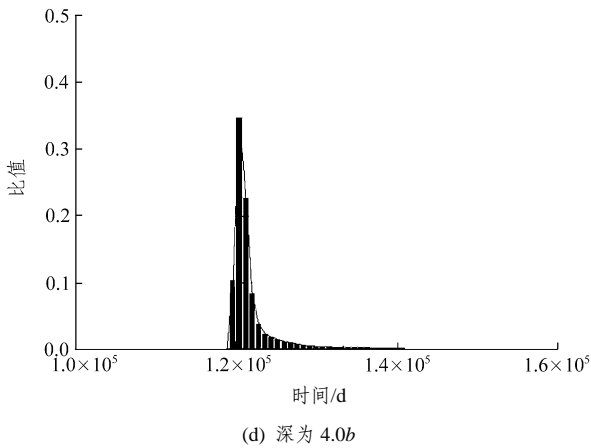


图 3 不同槽深下模型中示踪质点的穿透曲线

Fig.3 Breakthrough curves of tracer particle in models with different depths of pool

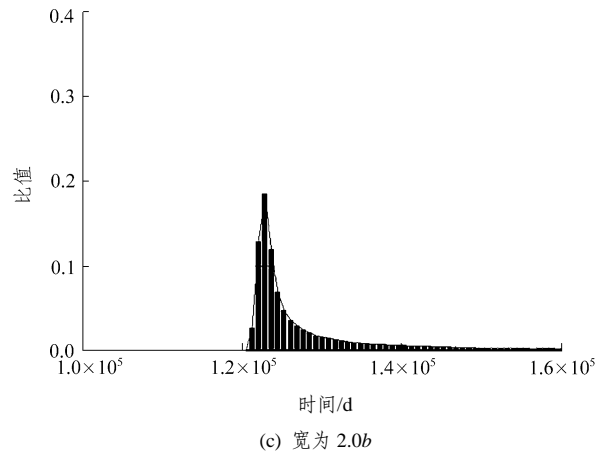


图 4 不同槽宽时模型中示踪质点的穿透曲线

Fig.4 Breakthrough curves of tracer particle in models with different widths of pool

深度对溶质的运移有一定的影响, 滞水槽越深, 部分溶质在滞水槽中停滞的时间就越长。

图 4(a)~(c)给出了当裂隙中所含滞水槽的槽深固定为 b , 槽宽分别为 $0.5b$, $1.0b$ 和 $2.0b$ 时相对应的 3 种示踪质点穿透曲线。图示结果表明, 滞水槽越宽, 示踪质点所形成的穿透曲线的一系列峰值越低, 低浓度“拖尾”现象也越明显, 即示踪质点流出右侧边界的时间间隔越长。这表明滞水槽的宽度

影响了溶质的运移过程, 滞水槽越宽, 部分溶质在滞水槽中停留的时间就越长。

图 5(a), (b)为裂隙中所含滞水槽体积不变($3b^2$), 但其宽度和深度分别取不同值时对应模型的示踪质点穿透曲线。因为在模型中分子扩散系数取值较小

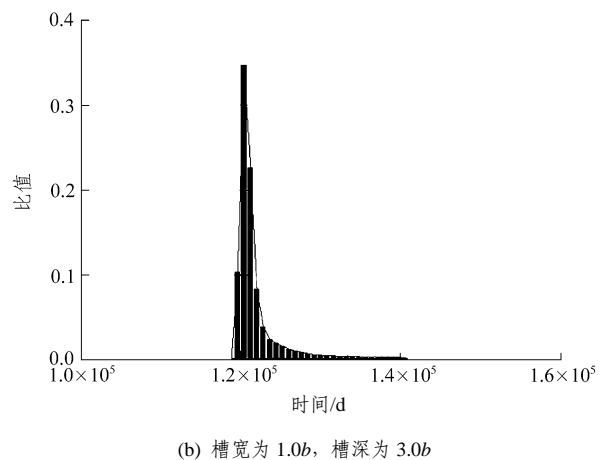
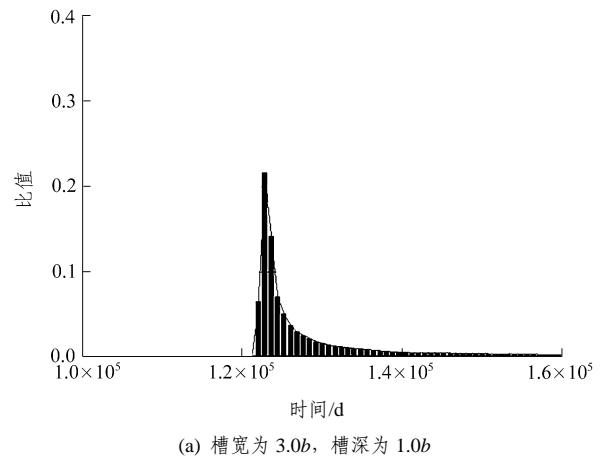
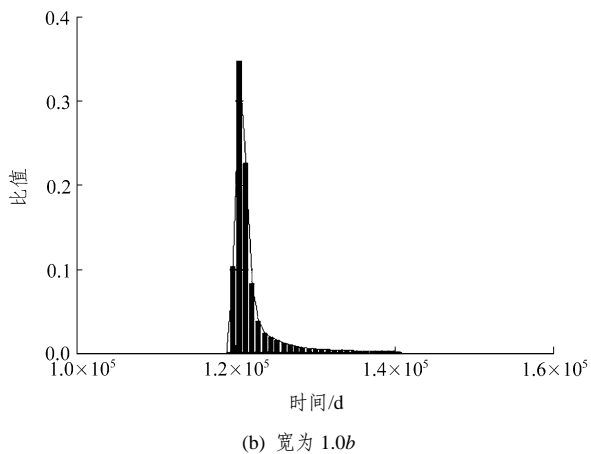
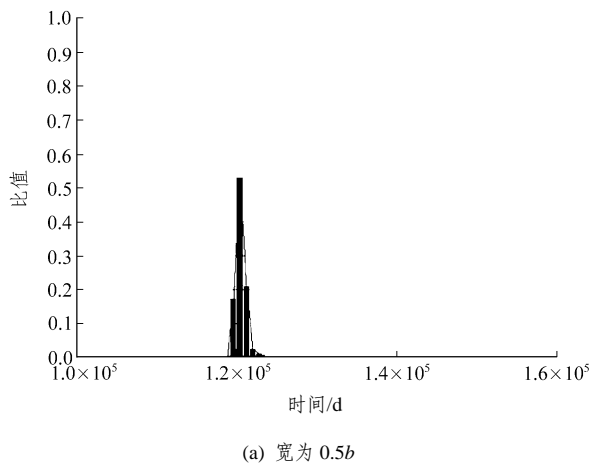


图 5 不同槽宽和槽深模型的示踪质点穿透曲线

Fig.5 Breakthrough curves of tracer particle in models with different depths and widths

($10^{-12} \text{ m}^3/\text{s}$), 即相对于对流过程, 分子扩散作用的影响很小, 所以滞水槽的宽度变化对模型中溶质运移起着相对更为重要的作用, 滞水槽越宽, 示踪质点所形成的一系列穿透曲线的峰值越低, “拖尾”现象也越明显, 即示踪质点流出右侧边界的时间间隔越长。这表明滞水槽的形状对溶质的运移有影响。

5 结 论

众所周知, 岩石中的裂隙一般是由隙宽不等的粗糙裂隙组成的。本文从这一现象入手, 概化出一个均匀隙宽的裂隙连接着一个滞水区的模型。就对流占主导(忽略分子扩散)与分子扩散占主导(忽略对流作用, 流动很慢)两种情况, 模拟比较和讨论了单一的均匀裂隙、带滞水区裂隙对溶质运移的影响。采样用随机粒子追踪方法, 模拟质点运移的结果用穿透曲线来表达。

在单裂隙不含滞水槽的情况下, 当忽略分子扩散时, 所有质点均在同一时刻到达右侧边界(图 2(a))。对于有滞水槽的模型, 靠近模型下边界的部分质点需在滞水槽中停留较长的时间。从图 3, 4 可看出, 当取同一分子扩散系数不变, 滞水槽越大, 示踪质点所形成的一系列峰值越低, “拖尾”现象也越明显。数值模拟结果还表明, 裂隙所含滞水槽的形状也对溶质的运移起着重要的作用(见图 5)。

致谢 本研究得到日本电站与核燃料发展组织(PNC)与美国能源部的资助, 在此表示衷心的感谢!

参考文献(References):

- [1] 王锦国, 周志芳. 裂隙介质溶质运移试验研究[J]. 岩石力学与工程学报, 2005, 24(5): 829 - 834.(WANG Jinguo, ZHOU Zhifang. Testing study on solute transport in fractured media[J]. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2005, 24(5): 829 - 834.(in Chinese))
- [2] 李春江, 郭志明, 林章基. 花岗岩体单裂隙中核素 $^{125}\text{I}^-$, $^{134}\text{Cs}^+$ 的弥散渗透试验[J]. 水文地质工程地质, 1999, 26(6): 45 - 47, 51.(LI Chunjiang, GUO Zhiming, LIN Zhangji. Study on dispersion test of $^{125}\text{I}^-$, $^{134}\text{Cs}^+$ in single fracture granite[J]. Hydrogeology and Engineering Geology, 1999, 26(6): 45 - 47, 51.(in Chinese))
- [3] TSANG Y W, TSANG C F. Channel model of flow through fractured medium[J]. Water Resources Research, 1987, 23(3): 467 - 479.
- [4] MORENO L, TSANG Y W, TSANG C F, et al. Flow and tracer transport in a single fracture: a stochastic model and its relation to some field observations[J]. Water Resources Research, 1988, 24(12): 2 033 - 2 048.
- [5] TSANG Y W, TSANG C F, NERETNIEKS I, et al. Flow and tracer transport in fractured media: a variable aperture channel model and its properties[J]. Water Resources Research, 1988, 24(12): 2 049 - 2 060.
- [6] 王锦国, 周志芳. 基于分形理论的裂隙岩体地下水溶质运移模拟[J]. 岩石力学与工程学报, 2004, 23(8): 1 358 - 1 362.(WANG Jinguo, ZHOU Zhifang. Simulation of solute transport in fractured rocks based on fractal theory[J]. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2004, 23(8): 1 358 - 1 362.(in Chinese))
- [7] SMITH L, SCHWARTZ F W. Mass transport I, a stochastic analysis of macroscopic dispersion[J]. Water Resources Research, 1980, 16(2): 303 - 313.
- [8] TOMPSON A F B, GELHAR L W. Numerical simulation of solute transport in three-dimensional, randomly heterogeneous porous media[J]. Water Resources Research, 1990, 26(10): 2 541 - 2 562.
- [9] MORENO L, TSANG C F. Flow channeling in strongly heterogeneous porous medium: a numerical study[J]. Water Resources Research, 1994, 30(5): 1 421 - 1 430.
- [10] BIRKHOFFER J, TSANG C F. Solute channeling in unsaturated heterogeneous porous media[J]. Water Resources Research, 1997, 33(10): 2 221 - 2 238.
- [11] SCHWARTZ F W, SMITH L, CROWE A S. A stochastic analysis of macroscopic dispersion in fracture media[J]. Water Resources Research, 1983, 19(5): 1 253 - 1 265.
- [12] ROBINSON J W, GALE J E. A laboratory and numerical investigation of solute transport in discontinuous fracture systems[J]. Ground Water, 1990, 28(1): 25 - 36.
- [13] 于青春, 大西有三. 三维裂隙网络溶质运移粒子追踪法[J]. 水文地质工程地质, 2003, 30(6): 11 - 14.(YU Qingchun, OHNISHI Y. Particle tracking method for solute transport in three-dimensional fracture network[J]. Hydrogeology and Engineering Geology, 2003, 30(6): 11 - 14.(in Chinese))
- [14] KINZELBACH W. The random walk method in pollutant transport simulation[C]// Groundwater Flow and Quality Modeling. Rotterdam, Netherlands: Reidel Publishing Company, 1988: 227 - 245.