

多尺度裂隙介质中溶质运移研究进展

黄 勇,周志芳

(河海大学土木工程学院,江苏 南京 210098)

摘要:总结了单裂隙尺度和网络裂隙尺度中溶质运移的基本特点、试验研究成果、裂隙交叉处的混合模式、数学模型以及模拟方法等。分析了裂隙介质中溶质运移试验研究的局限性,评价了各种数学模拟方法在实际应用中的优缺点,指出了溶质运移的研究特别是裂隙几何特征和交叉处的混合模式的研究还有待进一步完善。

关键词:尺度;裂隙介质;溶质运移;弥散;质点追踪法

中图分类号: TU46 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-198X(2005)05-0500-05

近年来,许多国家包括加拿大、法国、瑞典和美国,正在评价核废料在岩体中的永久存储问题。岩体中溶质运移的主要路径很可能是通过具有水力联系的裂隙网络进行的,可溶性溶质与裂隙壁的相互作用导致了溶质的延迟现象,从而影响地下含水介质中污染物的迁移。通常将含水介质分为 3 种类型:孔隙介质、裂隙介质和岩溶介质。目前,国内外对孔隙介质中的溶质运移问题的研究已达到相当水平,相应的数学模型也日趋成熟,但是对于裂隙介质的研究还处于理论和试验探索阶段。因此,有必要研究裂隙介质中的溶质运移问题,为污染物运移预测和控制提供科学依据。本文总结了有关单裂隙和网络裂隙介质中溶质运移的研究成果。

1 研究概况

单个水管中质量运移的研究最早要追溯到 1953 年,Taylor^[1]首先研究了管流中的溶质弥散。Aris^[2]在 Taylor 方法的基础之上进行了拓展。Gill 等^[3]获得了管流中溶质运移的解析解。为了获得弥散系数,Grance 等^[4]使用 Hermite 矩阵来描述浓度场,类似于 Aris 的幂矩阵方法。而在变管径裂隙中,Russell 等^[5]研究了其中的溶质弥散作用,认为它是几个作用的综合结果,包括分子扩散、溶质在裂隙平面上的速度变化所引起的大弥散以及溶质通过裂隙管径时的速度变化所引起的 Taylor 弥散。Golay^[6]将 Taylor 分析方法应用到平衡条件下的化学反应系统中,通过线性等温过程描述了表面吸附性质,在柱坐标和直角坐标系推导了浓度的解析表达式。Starr 等^[7]用试验验证了 Golay 的研究结果,并将 Golay 的表达式推广应用到非线性等温吸附过程中。Home 等^[8]研究了平行板裂隙中非活性溶质运移过程,讨论了对流和横向分子扩散对溶质运移的影响。结果表明,溶质弥散以“Taylor 弥散”占优。裂隙岩体二维和三维裂隙网络中溶质运移的研究始于 20 世纪 80 年代中期,国外大量进行裂隙中核素迁移的室内和野外试验,试验尺度不断扩大,试验装置不断改进。除了试验外,还对裂隙交叉处的混合模式、数学模型和模型求解方法进行了探讨,为裂隙网络中溶质运移研究比较活跃的时期。20 世纪 90 年代,溶质运移的研究有了进一步的发展,集中研究溶质与裂隙壁的相互作用和在网络中的局部运移特征。

2 研究成果

2.1 试验研究

2.1.1 室内试验

室内试验集中在单裂隙中进行,主要研究裂隙粗糙度、弯曲度、隙宽变化和表面吸附等方面对示踪剂运移的影响。Brown 等^[9]量测了天然裂隙的粗糙度并进行了试验,发现实际裂隙面是相当粗糙的,以至于裂隙

面内的有些地方相互接触,影响溶质的运移特性。Pyrak 等^[10]也进行了室内试验,在不同的压力条件下观察了裂隙面内弯曲的水流路径。Neretnieks^[11]使用含有一个天然裂隙的花岗岩岩芯做了示踪剂试验,发现非吸附溶质的穿透曲线与岩芯内的管道水流一致。因此,就实验室尺度而言,裂隙隙宽是变化的,且裂隙面内的水流并不是均匀分布。Edson 等^[12]用 Pyranine 作为示踪剂来研究可变隙宽的单裂隙内的溶质运移,结果表明单裂隙内的溶质运移由其平均隙宽控制。Laurence 等^[13]设计了二维裂隙网络的溶质运移试验,首次在室内用网络裂隙试验模拟了溶质运移过程。

2.1.2 现场试验

早期水流和运移的研究采用了平行板假定,Witherspoon 等^[14]发现,对于受压紧闭的裂隙而言,立方体定律是适用的。然而,现场试验研究表明,裂隙的隙宽变化及其对水流和运移的影响较大,将裂隙当作平行板是不适宜的。Rasmuson 等^[15]在瑞典一个废弃的 Stripa 矿里进行了现场试验,该试验是裂隙岩体中最典型的示踪剂迁移现场试验之一,揭示了裂隙岩体中水流和运移的主要特征。Bourke 也在康沃尔做了现场试验,他们的研究发现,并没有大面积的水流发生,水流仅仅在裂隙岩体中 5%~20% 的裂隙面内流动。在伊利诺斯州东北部的志留纪白云岩中,Shapiro 等^[16]进行了现场示踪剂试验,发现通过裂隙隙宽估计的渗透系数和溶质的迁移规律与现场观测的不一致,如果裂隙隙宽的变化很小,则与实际观测吻合得较好。因此,上述的现场试验提供了一个事实:裂隙面的平行板模型假定并不适用,水流和运移只在裂隙形成的管道或沟槽中发生。

2.1.3 数值试验

由于裂隙弯曲度、裂隙表面粗糙度以及裂隙壁与溶质之间的物理化学反应等因素的影响,使得溶质在裂隙中的运移相当缓慢,用物理试验需要很长时间才能获得结果,且耗费相当多的人力和物力。因此,在已有资料的基础上,通过计算机模拟来研究溶质运移的规律是很有必要的。Moreno 等^[17]用数值迁移试验研究了网络中的溶质运移,发现可以用裂隙的平均隙宽来代替阻滞方程中的隙宽。Dverstorp^[18]使用数值迁移试验来研究大裂隙网络中隙宽变化对溶质运移的影响,当用考虑表面吸附的一维对流-弥散方程来分析研究区下游边界处的浓度穿透曲线时,发现裂隙隙宽的方差越大,介质的阻滞时间比用阻滞因子模型预测的时间越长。

2.2 裂隙交叉处的混合模式研究

在二维裂隙网络中,根据溶质运移特征,裂隙交叉处的混合模式主要为:完全混合和流线路径混合。前者假定在裂隙交叉处溶质的滞留时间较长,以至于在水流排泄处溶质的浓度达到了均一化。然而后者则认为示踪剂质点沿流线方向运动而没有混合,两种模型仅仅在有限的水力条件下才有效。已有的研究显示,溶质转移特征随着 Péclet 数的增加从完全混合模型到流线路径模型发生变化。Park 等^[19~22]考虑了其中的一种混合模式,重点研究了二维裂隙网络几何特性变化对溶质运移的影响。

三维裂隙交叉处运移模式的研究文献很少,Huseby 等^[23]在模拟三维裂隙网络中的运移时,假定裂隙交叉处的混合模式为完全混合。Olivier^[24]以渗透理论为基础,假定断层的长度满足随机幂律分布,研究了三维断层网络的连通性和裂隙交叉处的溶质运移规律。Stockman 等^[25]也研究了三维正交裂隙交叉处的运移规律和混合模式,主要考虑了在光滑和粗糙的裂隙中,应用数值模拟和室内试验集中研究溶质运移、完全混合和流线路径混合过程。他们发现,如果假定裂隙交叉处的混合模式为流线路径混合,则溶质运移行为和预测的结果相比偏差较大。进一步研究发现,裂隙壁的粗糙度会引起不均匀的混合模式,且浓度会出现“条带”状变化。在三维裂隙网络中,局部水流环流是网络独一无二的特征,分析表明,局部水流环流对整体水流几乎没有影响,但也许对浓度穿透曲线的“拖尾”现象和质点延迟有贡献。

2.3 数学模型研究

Browl^[26]使用分形模型产生裂隙面,认为立方体定律在局部水流处成立,计算了裂隙面内的速率分布和浓度分布。随后他使用这个分形模型将水流类比为电流,在变隙宽裂隙中讨论了溶质运移规律。Moreno 应用对数正态分布和指数协方差函数来模拟了裂隙隙宽的变化和通过粗糙裂隙壁的水流规律,研究表明,该模型产生了裂隙面内的优势流。Tsang 等^[27]提出了一维可变隙宽的管道流模型。Silliman^[28]研究了变隙宽裂隙内的水力和运移特性,发现等效隙宽裂隙内的水流规律不同于变隙宽,且应用等效隙宽估计的水力和运移特性对裂隙管道的方位是极其敏感的,即不能用等效隙宽代替可变隙宽来研究裂隙内的水流和溶质运移特性。

Kennedy 等^[29]提出了控制体积模型模拟单裂隙中的溶质运移。控制体积方法是基于质量守恒定律,将整个区域划分为大小不同、不重叠的控制单元,每个单元中包含一个中心网格点,各单元的浓度可由此点求出。

这种模型没有考虑吸附作用的影响,认为分子扩散是主要的过程. Berkowitz 等^[30]等重点研究了活性溶质在单裂隙中的运移,考虑其控制因素有对流、纵向分子扩散、横向分子扩散以及裂隙壁和液相成分间的质量传输,并给出活性和非活性溶质的表面反应方程式.通过对无量纲参数的分析,能够获得有关溶质运移过程的重要信息.

Josselin^[31]提出了各向异性介质的弥散理论,并将该理论应用于裂隙网络中,提供了一种能直接计算裂隙网络弥散张量的方法,推导两组正交裂隙网络中弥散系数张量的解析表达式. Wille 等^[32]提出了裂隙岩体中水流和溶质运移的可变开度的裂隙网络模型,模型中考虑了裂隙开度的变化. Tsang 等用统计等效模型、变隙宽模型和一维管道流模型来研究裂隙介质网络的非均质性.这些研究主要集中分析了污染物的浓度穿透曲线^[33]. Jane 等^[34]假定裂隙面为圆盘形,符合平行板模型,裂隙交叉处的水头损失忽略,提出了三维随机裂隙网络稳定流模型.其他模拟裂隙网络中水流和溶质运移的模型是以渗透理论为基础,考虑了水流在裂隙网络中的优势流和管道流路径.

2.4 模拟方法研究

单裂隙和网络裂隙介质中溶质运移的模拟方法主要采用质点追踪法和解析法.解析法适用于边界条件和网络较简单的情形.相比之下质点追踪法是比较有效的模拟方法,其中随机步行法是常用的质点追踪法之一,它的基本思想是:将溶质运移视为大量示踪剂特征点运动的平均结果,每个特征点做两种运动:一种是对流,即特征点按平均流速运动;一种是弥散,即特征点围绕着平均运动的起伏,具随机性.当模型中考虑的特征点足够多时,能够大体上刻画出溶质运移过程.

若将溶质视为大量示踪剂特征点,则溶质运移方程可类比于质点运移的随机微分方程.一般说来,质点运移方程由非随机项或绝对项、对流项和描述分子弥散的随机项组成,质点追踪方程可表示如下^[35]

$$X_{j+1} = X_j + A(X_j)\Delta t + B(X_j)Z\sqrt{\Delta t} \quad (1)$$

式中: X_{j+1} —— t_{j+1} 时刻质点的位置矢量; X_j —— t_j 时刻质点的位置矢量; $A(X_j)$ ——确定力的矢量(如速度); $B(X_j)$ ——确定尺度的二阶张量(如分子弥散系数); Z ——均值为0、方差为1的正态分布的随机数矢量; $\Delta t = t_{j+1} - t_j$ ——时间间隔.每个质点的运动都独立于其他质点,如果构成某个溶质组分的大量质点同时运动,则质点的概率密度函数 $f(X, t)$ 满足 Ito Focker-planck 方程^[36].

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial (Af)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial \left(\frac{1}{2} B \cdot B^T f \right)}{\partial x_j} \right] \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (2)$$

不考虑吸附和衰变的溶质运移方程

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial (uc)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial Dc}{\partial x_j} \right) \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (3)$$

对比式(2)和(3)可以看出,质点的概率密度函数 $f(X, t)$ 正比于溶质浓度 c ,此时

$$\begin{cases} A = u \\ B \cdot B^T = 2D \end{cases} \quad (4)$$

式中: u ——速度; D ——弥散系数.因此,统计出了研究区域内某点的质点个数,就可得到该点的相对浓度.

3 结 论

a. 试验研究表明,影响裂隙中溶质运移过程主要有:裂隙隙宽、裂隙表面粗糙度、裂隙弯曲度、溶质在裂隙表面的物理化学吸附等.裂隙面的平行板模型假定不适用,溶质运移不会在整个裂隙面内进行,仅发生在裂隙形成的管道和沟槽中.

b. 溶质在裂隙交叉处的混合模式主要为完全混合和流线路径混合.对于二维规则裂隙网络,混合模式的选择对溶质运移有较大的影响;对于二维随机网络,模式的选择不重要.三维裂隙网络中,裂隙交叉处的混合模式和局部水流环流是预测溶质运移路径和分布的关键因素.

c. 多尺度裂隙介质中溶质运移模型主要有:变隙宽管道流模型、分形模型、控制体积模型、表面吸附模型、统计等效模型、随机裂隙网络模型等.这些模型的提出通常基于溶质运移的某一方面因素.

d. 裂隙介质中溶质运移模拟方法有解析法、质点追踪法、随机分析法、边界元法等.其中质点追踪法是

最常用、最有效的方法。

e. 目前,裂隙网络中溶质运移研究还有待进一步完善,如裂隙数量、规模和几何特性的确定问题。若将裂隙比作神经元,裂隙网比作神经网络,溶质运移比作神经元传递电信号,神经网络与裂隙网有一定的类似,那么神经网络方法对于研究裂隙网中溶质运移可能会有很大的帮助。

参考文献:

- [1] TAYLOR G R. Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube[J]. Proc R Soc London A ,1953 ,219 :186—203.
- [2] ARIS R. On the dispersion of a solute in a fluid flow through a tube[J]. Proc R Soc London A ,1956 ,235 :67—77.
- [3] GILL W N ,SANKARASUBRAMANIAN R. Exact analysis of unsteady convective diffusion[J]. Proc R Soc London A ,1970 ,316 :341—350.
- [4] GRANCE A E ,JOHNS L E. The theory of dispersion of chemically active solutes in a rectilinear flow field[J]. Appl Sci Res ,1978 ,34 (a) :189—225.
- [5] RUSSELL L D ,GLASS R J. Solute transport in a variable aperture fractures :an investigation of the relative importance of Taylor dispersion and macrodispersion[J]. Water Resour Res ,2000 ,36 (7) :1611—1625.
- [6] GOLAY M J E. Theory of chromatography in open and coated tubular columns with round and rectangular cross-section[J]. Gas Chromatography ,1958 (5) :36—58.
- [7] STARR J L ,SAWHNEY B L ,FRINK C R. Diffusivity of solute in absorbing porous media ,in surface and subsurface hydrology[M]. Fort Collins :Water Resource Publ ,1979 .512—521.
- [8] HOME R N ,RODRIGUEZ F. Dispersion in tracer flow in geothermal system[J]. Geophys Res Lett ,1983 ,10 (4) :289—292.
- [9] BROWN S R ,SCHOLZ C H. Closure of random elastic surfaces in contact[J]. Geophys Res ,1985 ,90 :5531—5545.
- [10] PYRAK L R ,COOK N G. Determination of fracture void geometry and contact area at different effective stress[J]. Eos Trans AGU ,1985 ,66 (46) :903—908.
- [11] NERETNIEKS I. Diffusion in rock matrix :an important factor in radionuclide retardation[J]. Geophys Res ,1980 ,85 :4379—4397.
- [12] EDSON W ,THOMAS H. Transport simulation with stochastic aperture for a single fracture :comparison with a laboratory experiment[J]. Water Resour Res ,2002 ,38 (1) :19—32.
- [13] LAURENCE C ,JOHN D ,TOM M. Laboratory and simulation studies of solute transport in fracture networks[J]. Water Resour Res ,1987 ,23 (8) :1505—1513.
- [14] WITHERSPOON P A ,JWAI K. Validity of cubic law for fracture flow in a deformable rock fracture[J]. Water Resour Res ,1980 ,16 (6) :1016—1024.
- [15] RASMUSSEN A ,NERETNIEKS I. Radionuclide transport in fast channels in crystalline rock[J]. Water Resour Res ,1986 ,22 (8) :1247—1256.
- [16] SHAPIRO A M ,NICHOLAS J R. Assessing the validity of the channel model of fracture aperture under field conditions[J]. Water Resour Res ,1989 ,25 (5) :817—828.
- [17] MORENO L Y ,TSANG W. Flow and tracer transport in a single fracture :a stochastic model and its relation to some field observations[J]. Water Resour Res ,1988 ,24 (12) :2033—2048.
- [18] DVERSTORP B ,NORDGVIK W. Discrete fracture network interpretation of field tracer migration in sparsely fractured rock[J]. Water Resour Res ,1992 ,28 (9) :2327—2343.
- [19] PARK Y J ,LEE K ,BERKOWITZ B. Transport and intersection mixing in random fracture networks with power law length distribution[J]. Water Resour Res ,2001 ,37 (10) :2493—2501.
- [20] SAHIMI M B ,DAVIS H T. Dispersion in flow through porous media :one phase flow[J]. Chem Eng Sci ,1986 ,41 (8) :2103—2122.
- [21] SCHWARTZ F W ,SMITH L. A continuum approach for modeling mass transport in fractured media[J]. Water Resour Res ,1988 ,24 (8) :1360—1372.
- [22] 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.
- [23] HUSEBY O J ,ADLER P M. Dispersion in three dimensional fracture networks[J]. Phys Fluid ,2001 ,13 (3) :594—615.
- [24] OLIVIER B ,PHILIPPE D. On the connectivity of three-dimension fault networks[J]. Water Resour Res ,1998 ,34 (11) :2611—2622.
- [25] STOCKMAN H W ,BROWN S R. Mixing at fracture intersections :influence of channel geometry and the Reynolds and Peclet numbers [J]. Geophys Res Lett ,2001 ,28 (22) :4299—4302.

- [26] BROWN S R. Fluid flow through rock joints the effect of surface roughness[J]. J Geophys Res ,1987 ,92 :1337—1347.
- [27] TSANG Y W ,TSANG C F. Flow and tracer transport in fractured media :a variable aperture channel model and its properties[J]. Water Resour Res ,1988 ,24(12) :2049—2060.
- [28] SILLIMAN S E. An interpretation of the difference between aperture estimates derived from hydraulic and tracer tests in a single fracture [J]. Water Resour Res ,1989 ,25(10) :2275—2283.
- [29] KENNEDY Y ,LENNO X. A control volume model of solute transport in a single fracture[J]. Water Resour Res ,1995 ,31(2) :313—322.
- [30] BERKOWITZ B ,ZHOU J. Reactive solute transport in a single fracture[J]. Water Resour Res ,1996 ,32(4) :901—913.
- [31] JOSSELYN. Restoration of insitu coal gasification sites from naturally occuring flow and dispersion[J]. In Situ ,1981 ,5(2) :77—101.
- [32] WILLE A ,TSANG Y W. A variable aperture fracture network model for flow and transport in fractured rocks[J]. Water Resour Res , 1992 ,28(6) :1703—1713.
- [33] TSANG Y W ,TSANG C F. Channel model of flow through fractured media[J]. Water Resour Res ,1987 ,23(1) :467—479.
- [34] JANE C S ,PAUL A. WITHERPOON. A model for steady fluid flow in random three dimensional networks of disc-shaped fractures[J]. Water Resour Res ,1985 ,21(8) :1105—1115.
- [35] THOMPSON A B ,GELHAR L W. Numerical simulation of solute transport in three-dimensional ,randomly heterogeneous porous media [J]. Water Resour Res ,1990 ,26(10) :2541—2562.
- [36] UFFINK G M. Modeling of solute transport with the random walk method[J]. InE Custodio A Gurgui ,1988 ,21(7) :247—265.

Advances in research on solute transport in multi-scale fractured media

HUANG Yong , ZHOU Zhi-fang

(College of Civil Engineering , Hohai University , Nanjing 210098 , China)

Abstract :A summary was made of the fundamental properties , experimental research results , hybrid models of fracture intersection , and mathematical models and simulation methods of solute transport in single fracture and network fracture scales. Limitations of experimental research on solute transport in fractured media were analyzed. Furthermore , advantages and disadvantages of the mathematical simulation methods were evaluated. It is pointed out that study of solute transport , especially the geometric characteristics of fracture and hybrid models of fracture intersection , should be further improved.

Key words :scale ; fractured media ; solute transport ; dispersion ; particle tracking method