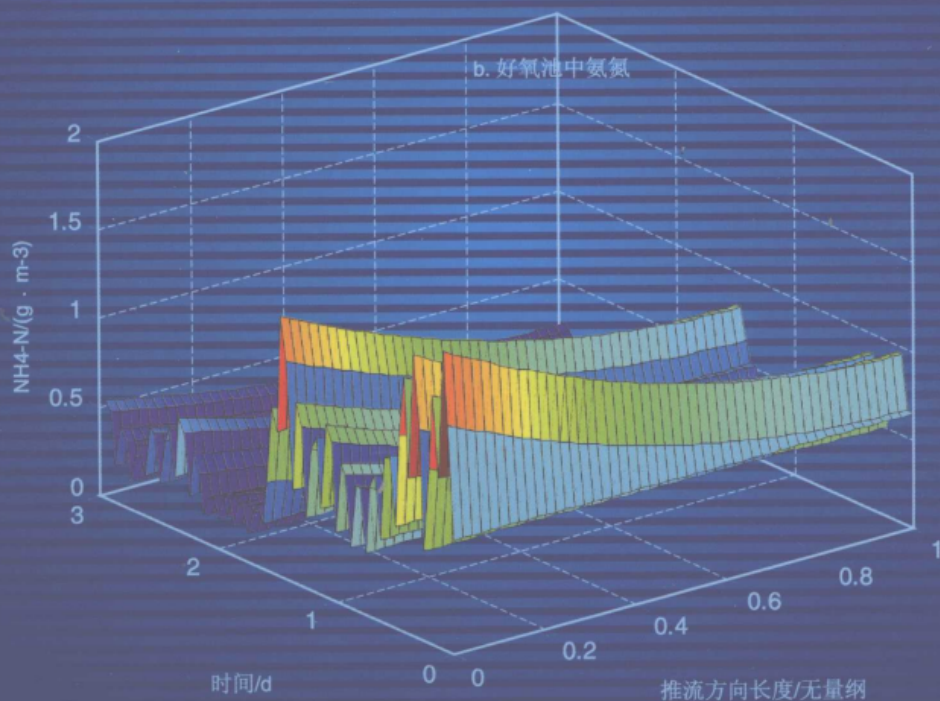


# 多物理场耦合模型 及数值模拟导论

INTRODUCTION TO COUPLING MODELS FOR  
MULTIPHYSICS AND NUMERICAL SIMULATIONS

● 孙培德 杨东全 陈奕柏 著




中国科学技术出版社

本书得到浙江省“新世纪151人才工程”培养基金资助  
本书得到浙江省高校中青年学科带头人培养基金资助

# 多物理场耦合模型 及数值模拟导论

INTRODUCTION TO COUPLING MODELS FOR  
MULTIPHYSICS AND NUMERICAL SIMULATIONS

● 孙培德 杨东全 陈奕柏 著

 中国科学技术出版社  
· 北京 ·

国家自然科学基金“系统工程与仿真”重大项目  
国家自然科学基金“系统工程与仿真”重大项目

图书在版编目(CIP)数据

多物理场耦合模型及数值模拟导论/孙培德,杨东全,  
陈奕柏著. —北京:中国科学技术出版社,2007,5  
ISBN 978-7-5046-4634-7

I. 多... II. ①孙...②杨...③陈 III. 地球物理场-耦  
合-数学模拟-研究 IV. P3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2007)第 055893 号

自 2006 年 4 月起本社图书封面均贴有防伪标志,未贴防伪标志的为盗版图书。

责任编辑:韩扬云 黄爱群  
责任设计:韩 仪  
责任印刷:安利平

中国科学技术出版社出版  
北京市海淀区中关村南大街 16 号 邮政编码:100081  
电话:010-62103210 传真:010-62183872  
<http://www.kjbooks.com.cn>  
科学普及出版社发行部发行  
中共浙江省委办公厅文印中心印刷

\*

开本:889 毫米×1194 毫米 1/16 印张:27.25 字数:750 千字  
2007 年 5 月第 1 版 2007 年 5 月第 1 次印刷  
印数:0001-500 册 定价:68.00 元

(凡购买本社的图书,如有缺页、倒页、  
脱页者,本社发行部负责调换)

中国科学技术出版社  
北京

# 前言

热-水-力-化 (THMC = Thermal-Hydrological-Mechanical-Chemical) 耦合作用是地球科学与环境科学领域中的学术前沿课题。本书针对地下资源与环境安全问题、环境地质问题、废水生物处理工艺优化与节能降耗问题等,系统而深入地论述了建立多物理场耦合模型的基本理论和数值求解方法。内容涉及笛卡儿张量分析、连续介质力学理论基础、多物理场耦合数学模型理论、多物理场耦合数学模型的数值解法、地下煤层气多物理场耦合模型及数值模拟、废水生物处理工艺耦合模型及数值模拟、CO<sub>2</sub> 地下储存耦合模型及数值模拟、核废料地质处置多场耦合模型及数值模拟等。本专著共分为十一章,下面分别对上述内容进行概要介绍。

第一章概要地阐述了当前主流的多物理场耦合数值模型、煤层瓦斯多场耦合数值模型和污水处理活性污泥过程多场耦合数值模型的研究进展。

第二章介绍了笛卡儿张量分析基础,包括对于指标符号、张量的概念、张量代数、笛卡儿坐标系下的张量分析与主要曲线坐标系下张量分析。

第三章主要介绍了连续介质力学理论基础,涵盖了有关连续介质的运动学、连续介质的应力分析、线弹性固体、各向异性线弹性材料的本构方程和黏性牛顿流体力学等内容。

第四章介绍了多物理场耦合数学模型建立的基本理论,包括对热力场-渗流场-应力场 (THM) 耦合理论以及基于 COMSOL 多物理场耦合数学模型的阐述。同时列举了应用 COMSOL Multiphysics 求解 THM 耦合问题的实例。

第五章介绍了多物理场耦合数学模型的数值解法,主要包括对数值模拟原理和特点的概括以及有限差分法、多物理场有限单元法的介绍,并提出对于数值解法的发展展望。

第六章主要介绍了当今国际上主流的多物理场耦合模型数值模拟软件—COMSOL-Multiphysics,简要介绍了 COMSOL-Multiphysics 软件特点和使用过程,介绍了该软件的几何建模、物理模型建立、网格划分和求解、后处理和结果可视化等过程,并给予 COMSOL-Multiphysics 求解实例。

第七章主要阐述了地下煤层气多物理场耦合模型及数值模拟方法。主要概括了地下煤层气多物理场的基本规律,分别阐述了渗流场-应力场耦合新模型及数值模拟,渗流场-孔隙变形场-应力场耦合新模型及数值模拟的研究新成果。

第八章主要阐述了地下煤层气越流多物理场耦合模型及数值模拟。主要包括双层/多层系统煤层气越流的固-气耦合模型,固-气耦合数学模型的数值解法,地下煤层气越流多物理场耦合模型的数值模拟及应用,双层系统渗流场-孔隙变形场-应力场越流耦合模型等方面的最新研究成果。

第九章主要阐述了活性污泥废水处理过程水力场-生物场耦合模型及其数值模拟的

研究新成果。

第十章主要阐述了 CO<sub>2</sub> 地下储存过程多物理场耦合模型及数值模拟的研究新进展。

第十一章主要阐述了核废料地质处置多物理场耦合模型及数值模拟的研究新进展。

本专著的第一章、第四章、第七至第十一章由孙培德撰写(约 60 万字),第二章与第六章由陈奕柏撰写(约 11 万字),第三章与第五章由杨东全撰写(约 11 万字)。由于著者水平有限,加以时间仓促,书中一定存在缺点和错误,殷切希望读者批评指正。

本书的出版得到了浙江省“151 人才工程”培养基金,浙江省高校中青年学科带头人培养基金的资助。在成书过程中,有关部分内容得到过 The University of Western Australia 刘继山博士、刘建军博士和张宏斌博士等的有益合作和讨论;本书第九章部分成果得到了浙江工商大学宋英琦、王如意等硕士生的大力支持,在此一并表示衷心感谢!在本书的出版过程中,作者还要特别感谢浙江大学韩扬云老师的大力支持,使本书得以高质量与及时的出版。

作者

2007 年 5 月

# 目 录

前 言 .....	(1)
第一章 绪 论 .....	(1)
1.1 多物理场耦合数值模型研究的意义 .....	(1)
1.2 多物理场耦合数值模型研究进展 .....	(1)
1.2.1 THMC 耦合理论的研究进展 .....	(1)
1.2.2 DECOVALEX 项目的研究进展 .....	(2)
1.2.3 地下水溶质运移耦合理论的研究进展 .....	(4)
1.3 煤层瓦斯多场耦合数值模型研究进展 .....	(5)
1.3.1 线性瓦斯流动理论及其应用 .....	(6)
1.3.2 非线性瓦斯流动理论 .....	(8)
1.3.3 多物理场耦合效应的瓦斯流动理论 .....	(9)
1.3.4 多煤层系统瓦斯越流的流-固耦合理论 .....	(10)
1.3.5 THMC 多场耦合理论的研究趋势 .....	(10)
1.4 污水处理活性污泥过程多场耦合数值模型研究进展 .....	(11)
1.4.1 机理研究进展 .....	(11)
1.4.2 活性污泥法生物场数学模型研究进展 .....	(13)
1.4.3 活性污泥法多场耦合模型研究进展 .....	(16)
1.4.4 存在的问题与展望 .....	(17)
参考文献 .....	(18)
第二章 笛卡儿张量分析基础 .....	(26)
2.1 指标符号及矢量分析的指标符号表示 .....	(26)
2.1.1 求和约定与哑指标 .....	(26)
2.1.2 自由指标 .....	(27)
2.1.3 两个特殊的指标符号 .....	(28)
2.1.4 矢量分析的指标符号表示 .....	(29)
2.2 张量的概念与张量代数 .....	(29)
2.2.1 张量的线性变换定义 .....	(29)
2.2.2 张量的代数性质 .....	(30)
2.2.3 张量的基本运算 .....	(31)

2.2.4	张量的其他定义方式	(33)
2.2.5	张量的对称性	(36)
2.2.6	二阶张量的特征值和特征矢量	(38)
2.3	笛卡儿坐标系下的张量分析	(41)
2.3.1	张量对时间的导数	(41)
2.3.2	标量场的微分和耐普拉算子	(41)
2.3.3	矢量场和张量场的微分	(42)
2.3.4	常用的积分恒等式	(45)
2.3.5	张量方程的不变性	(46)
2.4	主要曲线坐标系下的张量分析	(46)
2.4.1	极坐标系下的张量分析	(47)
2.4.2	柱坐标系下的张量分析	(50)
2.4.3	球坐标系下的张量分析	(51)
	参考文献	(54)
<b>第三章 连续介质力学理论基础</b>		<b>(55)</b>
3.1	连续介质的运动学	(55)
3.1.1	连续介质运动的物质描述和空间描述	(55)
3.1.2	连续介质的无限小变形	(57)
3.1.3	变形率张量	(64)
3.1.4	连续性方程	(65)
3.1.5	有限变形	(66)
3.2	连续介质的应力分析	(74)
3.2.1	Cauchy 应力张量	(74)
3.2.2	运动微分方程及力的边界条件	(77)
3.2.3	两类 Piola-Kirchhoff 应力张量及有限变形下的运动方程	(79)
3.2.4	能量方程	(82)
3.3	线弹性固体	(84)
3.3.1	本构理论的客观性原理	(85)
3.3.2	各向同性线弹性材料的本构方程	(89)
3.3.3	各向同性线弹性理论的基本方程	(92)
3.3.4	线弹性理论的几个基本原理	(95)
3.4	各向异性线弹性材料的本构方程	(95)
3.4.1	最一般情况下各向异性线弹性材料的本构方程	(96)
3.4.2	特定各向异性线弹性材料的本构方程	(97)
3.4.3	线性弹性材料的工程常数	(101)
3.5	黏性牛顿流体	(105)
3.5.1	流体的基本性质	(105)

3.5.2	不可压牛顿流体的 Navier-Stokes 方程	(107)
3.5.3	可压缩牛顿流体的控制方程	(109)
	参考文献	(109)
<b>第四章</b>	<b>多物理场耦合数学模型理论</b>	<b>(110)</b>
4.1	引言	(110)
4.2	热力场-渗流场-应力场 (THM) 耦合理论	(110)
4.2.1	应力场控制方程	(110)
4.2.2	渗流场控制方程	(111)
4.2.3	热力场控制方程	(112)
4.3	基于 COMSOL 多物理场耦合数学模型	(113)
4.3.1	COMSOL Multiphysics 的特征	(113)
4.3.2	COMSOL Multiphysics 表达 THM 耦合数学模型	(113)
4.4	多物理场耦合数学模型的合理性	(116)
4.4.1	问题的定义	(116)
4.4.2	问题的求解与讨论	(117)
4.5	应用 COMSOL Multiphysics 求解 THM 耦合问题实例	(120)
4.5.1	Model Navigator	(120)
4.5.2	Geometry Modelling	(120)
4.5.3	Parameters Settings	(121)
4.5.4	Physics Settings	(123)
4.5.5	Mesh Generation	(130)
4.5.6	Computing the Solution	(130)
4.5.7	Postprocessing and Visualization	(131)
4.6	小结	(133)
	参考文献	(134)
<b>第五章</b>	<b>多物理场耦合数学模型的数值解法</b>	<b>(137)</b>
5.1	数值模拟原理和特点简介	(137)
5.1.1	数值方法原理	(137)
5.1.2	数值模拟的特点	(138)
5.2	有限差分法	(139)
5.2.1	导数的差分近似	(139)
5.2.2	一维弥散方程的差分格式	(141)
5.2.3	二维弥散方程的差分格式	(144)
5.3	多物理场有限单元法	(146)
5.3.1	有限单元法的理论基础	(146)
5.3.2	有限单元法常用的单元和插值函数	(149)



5.3.3	一维弥散方程的有限单元法	(154)
5.3.4	二维弥散方程的有限单元法	(157)
5.3.5	三维多孔介质流固耦合系统的有限单元格式	(161)
5.4	数值解法发展展望	(164)
	参考文献	(165)
<b>第六章</b>	<b>多物理场耦合模型数值模拟软件—COMSOL-Multiphysics</b>	<b>(166)</b>
6.1	COMSOL-Multiphysics 的特点和使用过程简介	(166)
6.1.1	COMSOL Multiphysics 的应用领域	(167)
6.1.2	COMSOL Multiphysics 的多物理场耦合分析	(171)
6.1.3	COMSOL Multiphysics 使用过程简介	(171)
6.1.4	COMSOL Multiphysics 在科研、设计开发和教育方面的应用	(172)
6.2	几何建模概述和举例	(172)
6.2.1	COMSOL Multiphysics 运行说明	(172)
6.2.2	几何建模概述	(174)
6.2.3	一维建模	(177)
6.2.4	二维建模举例	(175)
6.2.5	创建几何模型时的注意事项	(179)
6.3	建立物理模型	(181)
6.3.1	COMSOL Multiphysics 中的变量和表达式	(181)
6.3.2	物理设置	(184)
6.4	网格划分和求解	(186)
6.4.1	网格划分	(186)
6.4.2	方程的求解	(186)
6.4.3	求解管理器	(188)
6.5	后处理和结果可视化	(189)
6.5.1	显示变量在空间点的值	(189)
6.5.2	计算积分	(189)
6.5.3	计算结果的可视化	(190)
6.6	COMSOL Multiphysics 求解举例	(192)
6.6.1	COMSOL Multiphysics 的 PDE 模式	(193)
6.6.2	Darcy-Brinkman-Navier-Stokes 流动转换问题	(200)
	参考文献	(213)
<b>第七章</b>	<b>地下煤层气多物理场耦合模型及数值模拟</b>	<b>(214)</b>
7.1	引言	(214)
7.2	地下煤层气多物理场的基本规律	(214)
7.2.1	含气煤体多孔介质的基本特性	(214)

7.2.2	煤层气运动方程	(215)
7.2.3	煤层气流动的连续性方程	(216)
7.2.4	煤层气赋存的状态方程	(218)
7.2.5	煤层气赋存的含量方程	(219)
7.2.6	煤岩体的变形方程	(219)
7.3	渗流场-应力场耦合模型及数值模拟(英文)	
	Fully Coupled Model for Coal Deformation and Gas Flow and Numerical Simulations	
		(220)
7.3.1	Introduction	(222)
7.3.2	Model Descriptions	(223)
7.3.3	Cross Coupling Models	(228)
7.3.4	The Analytical Solutions and Numerical Simulation of Gas Migration in Coal Seam	(229)
7.3.5	Geometry and Boundary Conditions	(233)
7.3.6	The Time-Dependent Gas Pore Pressure Distributions in Coal Seams	(235)
7.3.7	Porosity and Permeability Changes	(237)
7.3.8	Distributions for Methane Gas Contents in Coal Seam	(241)
7.3.9	Impact on The Fully-Coupling Effects	(242)
7.3.10	Comparisons for Main Coupling Models	(246)
7.3.11	Conclusions	(250)
7.4	渗流场-孔隙变形场-应力场耦合模型及数值模拟(英文)	
	Fully Coupled Modelling Between Coal/Porosity Deformation and GAS Flow and Numerical Simulation	
		(251)
7.4.1	Introduction	(253)
7.4.2	Cross Coupling Models	(254)
7.4.3	Geometry and Boundary Conditions	(256)
7.4.4	The Time-Dependent Gas Pressure Distributions in Coal Seams	(257)
7.4.5	Porosity and Permeability Changes	(259)
7.4.6	Distributions for Methane Gas Contents in Coal Seam	(262)
7.4.7	Impact on The Fully-Coupling Effects	(264)
7.4.8	Comparisons for Main Coupling Models	(267)
7.4.9	Conclusions	(271)
	References	(272)
<b>第八章 地下煤层气越流多物理场耦合模型及数值模拟</b>		
		(274)
8.1	引言	(274)
8.2	基本规律与假设	(274)
8.3	双煤层系数煤层气越流的固-气耦合模型	(275)

8.3.1	黏弹性介质煤层气越流的固-气耦合模型	(276)
8.3.2	弹性介质煤层气越流的固-气耦合模型	(276)
8.3.3	刚性介质煤层气越流模型	(280)
8.4	多层系统煤层气多物理场越流耦合模型	(281)
8.4.1	基本假设	(281)
8.4.2	多煤层系统煤层气越流方程组	(282)
8.4.3	多煤层系统黏弹性介质煤层气越流的固-气耦合模型	(282)
8.5	固-气耦合数学模型的数值解法	(283)
8.5.1	SIP——有限差分的强隐式解法	(284)
8.5.2	越流控制方程的离散	(284)
8.5.3	固体变形方程的离散	(288)
8.5.4	程序设计	(289)
8.5.5	耦合模型的小波数值解法的探讨	(289)
8.6	地下煤层气越流多物理场耦合模型的数值模拟及应用	(292)
8.6.1	双层系统渗流场-应力场越流耦合模型的数值模拟	(293)
8.6.2	保护层开采中安全保护范围的动态数值模拟应用	(298)
8.7	双煤层系统固体变形-瓦斯越流多场耦中祸化数值模拟	(301)
8.7.1	双煤层系统煤层气越流场的3-D数据场	(302)
8.7.2	均质煤层越流场孔隙压力分布的3-D立体图	(303)
8.7.3	均质煤层越流场孔隙压力分布的2-D等值线图	(305)
8.7.4	非均质煤层越流场孔隙压力分布的3-D立体图	(307)
8.7.5	非均质煤层越流场孔隙压力分布的2-D等值线图	(309)
8.8	双层系统渗流场-孔隙变形场-应力场越流耦合模型(英文)	
	(Coupled Moedling Between Gas Flow and Coal/Porosity Deformation)	(311)
8.8.1	Model Description	(313)
8.8.2	Cross Coupling Models for Gas Leak Flow and Coal-mass/porosity Deformation	(317)
8.9	渗流场-应力场越流耦合模型	
	(Coupled Modelling Getueen Gas Leak Flow and Solid Deformation)	(319)
8.9.1	Introduction	(320)
8.9.2	Assumption for Models	(321)
8.9.3	A Coupled Model for Solid Elastic-Deformation and Gas Leak Flow	(323)
8.9.4	A Coupled Model for Solid Visco-Elastic-Deformation and Gas Leak Flow	(325)
8.9.5	Numerucal Solution of the Solid-Gas Coupled Mathematical Model	(331)
8.9.6	Visualiation Simulation of the Coupled Model for Solid eElastic-Deformation	(336)
8.9.7	Conclusions	(341)
8.10	小结	(344)
	参考文献	(344)

第九章 活性污泥过程多场耦合模型及数值模拟	(347)
9.1 引言	(347)
9.1.1 活性污泥法概述	(347)
9.1.2 活性污泥过程模型概述	(347)
9.2 活性污泥过程水力场-生物场耦合模型	(349)
9.2.1 模型假设	(349)
9.2.2 水力流场模型	(349)
9.2.3 生物场模型	(351)
9.2.4 水力场-生物场耦合模型	(360)
9.3 活性污泥过程水力场-生物场耦合模型的 AAO 工艺数值模拟	(366)
9.3.1 活性污泥过程水力场-生物场耦合模型 AAO 工艺建模	(366)
9.3.2 数值模拟的方法	(369)
9.3.3 活性污泥过程工艺优化数值模拟	(372)
9.4 小结	(385)
参考文献	(386)
第十章 CO <sub>2</sub> 地下储存过程多物理场耦合模型及数值模拟	(388)
10.1 引言	(388)
10.2 基本规律与假设	(389)
10.3 CO <sub>2</sub> 地下储存过程多物理场耦合模型	(390)
10.3.1 热力场-渗流场-溶质运输场-应力场耦合模型	(390)
10.3.2 热力场-渗流场-孔隙变形场-溶质运输场-应力场耦合模型	(390)
10.4 CO <sub>2</sub> 地下储存过程多物理场耦合模型的数值模拟	(391)
10.4.1 CO <sub>2</sub> 驱油过程中多场耦合模型的数值模拟	(391)
10.5 结论	(394)
10.6 Deduction of Fully Coupled Modelling for Thermal-Gas Flow-Coal/Porosity Deformation	(394)
10.6.1 Mechanical Equilibrium Equation	(395)
10.6.2 Flow Equation	(398)
10.6.3 Energy Conservation Equation	(400)
10.6.4 Initial and Boundary Conditions	(401)
10.7 小结	(401)
参考文献	(402)
第十一章 核废料地质处置多物理场耦合模型及数值模拟	(403)
11.1 引言	(403)
11.1.1 组织机构	(404)

11.1.2	第一阶段研究的问题与方法	(404)
11.1.3	远场的HAM模型—BMT1	(405)
11.1.4	多裂隙模型(BMT2)	(406)
11.1.5	应力—流动耦合模型(TC1)	(407)
11.2	Thermal-Hydrological-Mechanical 耦合模型	(407)
11.2.1	THAMES的THM耦合数学模型	(408)
11.2.2	MOTIF的THM耦合数学模型	(410)
11.2.3	CASTEM的THM耦合数学模型	(411)
11.2.4	ROCMAS的THM耦合数学模型	(412)
11.2.5	UDEC的THM耦合数学模型	(413)
11.2.6	线性和非线性分析程序的THM耦合数学模型	(414)
11.2.7	T-H-M耦合数学模型的新进展	(415)
11.3	Thermal-Hydrological-Mechanical 耦合数值模拟	(416)
11.3.1	引言	(417)
11.3.2	THM耦合模型控制方程	(418)
11.3.3	建立有限元格式	(419)
11.3.4	算例	(421)
11.4	小结	(424)
	参考文献	(424)

# 第一章 绪 论

## 1.1 多物理场耦合数值模型研究的意义

热-水-力-化(THMC = Thermal-Hydrological-Mechanical-Chemical)耦合作用是环境地质与岩石力学研究中重要的新课题。核废料地质处置库周围的缓冲材料和围岩裂隙-孔隙中的热-水-力-化耦合现象将影响其力学稳定性、热传导性和渗透性,进而影响放射性核素在裂隙岩体中的溶质迁移规律。因此在放射性废物地质处置安全性评价、地下深层资源开采、城市水资源管理、地下水资源评价等领域的研究中,描述地下水溶质迁移行为特征的 THMC 全耦合模型及仿真技术研究已成为当前重要的环境影响定量评价课题。本书中的天然地质系统定义为由包含孔隙介质的岩块和裂隙结构组成的岩体。由于天然地质系统的孔隙与裂隙结构、地质构造等具有明显的空间变异性,致使裂隙岩体的非均质性和各向异性在不同尺度上反映出来。由此可知,在地质系统的空间变异性的影响下,由 THMC 耦合作用揭示的溶质迁移规律也具有相应的不确定性和空间分布不规则性的特点。因此,应用确定性方法处理非确定性的 THMC 耦合问题具有很大的局限性,有必要探讨新的理论和方法来研究此问题,也即用非确定性方法来研究地质系统中 THMC 全耦合过程,这已成为当前该交叉领域的重要新课题(Hassanizadeh et al,1990;Hudson et al,1992;Jiao et al,1995)。

## 1.2 多物理场耦合数值模型研究进展

### 1.2.1 THMC 耦合理论的研究进展

地下储存核废料或放射性废料的地质岩体会产生包括热(Thermal)、水渗流(Hydrological)、应力(Mechanical)和化学(Chemical)等多个相互作用过程的耦合作用现象。20世纪80年代初以来,国际上基于地下永久性储存核废料问题开始关注 THM 耦合效应的研究(Noorishad J et. al, 1984; Tsang C F,1987,1991)。“耦合过程”即意味着上述一个过程会影响另一个过程或该初始过程的发生和发展;又对相互过程进一步强化影响与作用。因此,存储有核废料的岩体之行为就不可能用传统的各个过程相互独立的封闭系统来预测;自然因素和工程因素相结合也组成了耦合系统(Hudson,1992;Jiao and Hudson,1995),由此演化出了各种耦合过程机理的研究技术路线;对于 THM 耦合模型,当然应研究这两个因素在其中的相互作用。

科学家与工程师们为了认识“THM 耦合过程”的复杂物理系统,数学模型及其数值模拟方法是唯一有效的定量分析手段,人们常常应用多随机系统的实现和参数灵敏度分析去考虑如此多的过程、性质和参数的相互作用以及参变量的不确定性。由于各个方向存在的岩石裂隙,使 THM 耦合问题的复杂性大大增加;也即,主要由于岩体裂隙面的几何复杂性和不可预测性,含裂隙岩体中 T-H-M 耦合作用的物理特征还远未能认识清楚(Jing L,2003)。

回顾历史,THM 耦合过程主要应用多孔介质力学来描述含裂隙岩体中 T-H-M 耦合作用的。这方面最早是应用 Terzaghi 一维土的固结理论(Terzaghi,1923);之后,应用 Biot 对多孔弹性介质的等温固结理论——多孔弹性介质的唯象方法(Biot,1941,1956)和混合介质理论(Morland,1972;Bowen,1982)。THM 现代耦合模型是基于可变形多孔介质的非等温固结理论基础上建立起来的(Hassanizadeh and Gray,1979a,b,1980,1990;Achanta,1994),以及考虑温度变化的 Biot 增产唯象方法的 THM 现代耦合模型(de Boer,1998)。前者,适合于描述多孔介质的微观特征,而后者更适合于描述多孔介质的宏观特征与计算机模拟。

THM 耦合模型及其数值模拟研究课题之所以如此地吸引着人们,是由于该数值模拟结果可以广泛地应用于地质材料相关的力学分析与工程设计。THM 耦合模型及其数值模拟研究的进一步基础理论研究成果引起了国际学术界的关注。这些典型学术成果可以系统地列出如下,如 Whitaker(1977),Domenico and Schwartz(1990),Charlez and Keramsi(1995),Coussy(1995),Selvadurai(1996),Lewis and Schrefler(1988,1998),Bai and Elsworth(2000);Sahimi(1995)关注油气储存和环境工程应用中的多孔介质的多相流动与传质;Tsang(1987) and Stephansson et al(1996)则更关注核废料地质处置工程应用中的裂隙岩体内应力变形-流体流动-热传输的耦合作用。

THM 耦合模型的有效解法可以应用连续的和非连续的数值方法。对于 THM 耦合模型的连续解法,常用的数值模拟方法如下:有限元法(FEM)、边界元法(BEM)、有限差分法(FDM)以及有限体积法(FVM)等;这方面的代表性文献如下(Noorishad et al,1992;Noorishad and Tsang,1996;Rutqvist et al,2001a,b;B. orgsson et al,2001;Nguyen et al,2001;Pruess,1991;Millard,1996;Ohnishi and Kobayashi et al,1996)。

对于 THM 耦合模型的非连续数值解法——离散元法(DEM),比较连续数值解法要年轻得多,这主要由于流体流动大多只限于在裂隙或基岩孔隙内流动,而没有考虑裂隙与基岩孔隙介质之间的相互作用。应用非连续数值解法模拟裂隙岩体内 THM 耦合过程的最有代表性的例子是 UDEC/3DEC 离散元软件;该软件可以考虑热交换,但由于假设基岩孔隙内没有流体,故地质处置库缓冲材料的部分饱和性以及流体相变都没有考虑(Abdaliah et al,1995)。

1992 年以来,大型国际合作项目 — DECOVALEX 中广泛应用了上述的连续的和非连续的数值方法,对核废料地质处置库周围裂隙岩体与缓冲材料中 THM 耦合过程问题进行了大量的数值模拟研究。该国际合作项目的研究成果已经在国际学术界产生了显著的影响(孙培德,鲜学福,1997;孙培德,2001),其代表性的学术成果有如下系列性的技术报告(Jing L et al,1996,1999),一部专著(Stephansson et al,1996),《国际岩石力学与矿业科学学刊》两本专集(Stephansson,1999;Stephansson et al,2001)。

总之,上述理论建模均依据确定性的基本方法和假设,采用一组确定性的平衡方程、本构方程和约束条件来描述 THM 耦合作用过程;选用基本变量去表达场方程;最终用有限差分法、有限元法、边界元法或离散元法等求解 THM 耦合问题。然而,主要由于岩体裂隙面的几何分布复杂性和不可预测性,地质系统 THM 耦合行为特征的确定性模型的合理性与可靠性至今受到挑战(Jing L,2003,孙培德,2002~2004)。

### 1.2.2 DECOVALEX 项目的研究进展

DECOVALEX 项目包括三个阶段,第一阶段(1992~1995),称为 DECOVALEX-I,主要目标是发展 THM 耦合过程的计算机程序并且根据实验室数据或者野外实验数据进行参数识别优化。第二阶段称为 DECOVALEX-II(1996~1999),主要目标是为了进一步发展 DECOVALEX-I 并根据有大量预设标准周期的两个大型的野外实验校正计算机程序编码。第三阶段为 DECOVALEX-III

(1999~2003)。目前已经启动 DECOVALEX-IV(2004~2007)的国际合作项目。DECOVALEX 项目的第一阶段包括三个分段,迄今三个分段的研究任务已完成。在第2和第3分段中他们又提出了1个工作台标定试验(BMT3)和6个测试实例(TC2-TC6);BMT3是一个含有6580条裂隙的储藏室之近场模型,TC2-TC6是关于裂隙岩体和工程障碍性材料中热-水-力耦合过程的实验室和现场试验实例。本章是根据 DECOVALEX 项目第一阶段第1分段所取得的成果编写而成的,该项目还在国际合作研究之中,其耦合数学模型和相应的计算程序都继续得以改进,使它们成为更适于对核废料储藏隔离的裂隙岩体中的耦合行为进行数值模拟。

开展 DECOVALEX-III(Morland et al,1972; Bowen et al,1982)项目的目的有两个,其一是为了通过模拟两个增添的大型现场实验进一步校正计算机程序,这两个大型现场实验分别为在瑞士的 Grimsel 进行的第一项任务 FEBEX THM 实验,第二项任务为在美国 Nevada 的 Yucca 山进行的加热流域(drift scale heater test)实验。其二是为了确定 THM 程序在核废料地质处置仓库安全评价性中的意义。

为了达到 DECOVALEX-III 的这两个目的,提出了三个基准实验来检测 THM 过程与性能和安全性相关性。

BMT1:THM 对于在断裂硬质岩层中的假定储区中的拟域影响;

BMT2:断裂岩层的流体和谐性与质优性以及对于远域表现和安全性评价的影响;

BMT3:对于远域表现和安全性评价的冻结进展的影响。

这三个 BMTs 被作为第三项任务。

另外添加开展了第四项任务来介绍参与项目的废物管理机构和有关政府部门对 THM 在评价核废料储藏的安全性和执行性中的影响和处理的最新了解状况。这项任务包括了编辑过的关于项目目标调查问卷的答案。

DECOVALEX-III 项目的运行与欧洲委员会发起的项目 BENCHPAR 有很相近的联系,同时其目的在于推进 THM 在核废料储藏中的影响的了解。所有项目的基本委员和研究队伍同样也是 DECOVALEX-III 项目的成员。

DECOVALEX 是一个大型国际合作项目。它之所以会在耦合过程的科学知识探索方面取得富有成果的进展,其关键因素就是在担负放射性废料处理的不同国家的研究会之间,以及在此研究项目中的各位科研人员之间有着密切合作的精神。2004年,我国加入了 DECOVALEX-IV 的国际合作研究。国际合作项目 DECOVALEX-THMC 第三次研讨会(The 3rd Workshop of the International DECOVALEX-THMC Project)于2005年2月20日至25日在中国云南昆明召开。本次会议由中国科学院武汉岩土力学研究所组织承办,来自瑞典、美国、德国、法国、加拿大、日本、芬兰和东道主中国在内的8个国家的41名代表参加了会议。中国科学院武汉岩土力学研究员、中国岩石力学与工程学会副理事长冯夏庭研究员任组委会主席,并与本项目首席科学家、美国 Lawrence Berkeley 国家实验室 Yucca Mountain 核废料研究地下实验室项目负责人 Chin-Fu Tsang 和国际知名岩石力学专家、瑞典皇家工学院教授 Ove Stephansson 一起主持了本次研讨会。国际岩石力学学会前任副主席、国际岩石力学学会测试方法委员会主席、《国际岩石力学与采矿科学学报》主编、英国皇家工程院院士 J. A. Hudson 教授等国际知名专家出席了本次会议。

DECOVALEX 计划的目的是集中系统地研究核废料处理问题中的基础科学问题,主要是地质介质中的温度-应力(变形)-流体流动-化学反应过程的耦合作用及其对高放核废料最终处置场的结构/环境安全的影响。重点是温度-应力(变形)-流体流动-化学反应过程的耦合作用的数学模型、数值方法和室内及大型现场试验的研究发展与验证。方式为集中各国研究精英对所选定的共同课题开展各种方式(平行,交叉,面对面及背靠背)的研究与比较,以便综合各国不同的



研究方式和方法的长处来推进研究的发展。从 1992 ~ 今该计划已进行了三期。目前正在进行的 DECOVALEX THMC 为该计划的第四期,研究期限从 2004 ~ 2007 年,共由 5 项 TASK 组成,主要研究内容包括 TASK A:“近场 THM 耦合对质量评估的影响”、TASK B:“开挖扰动区(EDZ)的 MHC 耦合研究”、TASK C:“黏土岩 EDZ 模拟与演化”、TASK D:“EDZ 和近场 THC 和 THM 耦合引起的永久渗透率与孔隙度变化研究”、TASK E:“长期气候变化对地质处置场的影响”等。

武汉岩土所通过承担国家自然科学基金国际合作重大项目“高放核废料深地质处置围岩温度-应力-水流-化学耦合效应”的形式参加了国际合作项目 DECOVALEX-THMC 的 TASK B 和 TASK D,到目前为止已在该项目中开展了近一年的研究。在本次会议上,武汉岩土所冯夏庭研究员和刘泉声研究员带领的两个研究小组分别作了 Elastic-plastic cellular automata model for simulating the fracture process of rocks 和 THM simulation on FEBEX and YMP DST conception model 的研究报告,受到与会专家的一致好评。

目前,由于人类面临着越来越多的放射性废料需进行永久性隔离的紧迫形势,急需保护人类赖以生存的地球环境;而另一方面,我们对放射性废料深埋隔离的地质材料的耦合行为尚知之甚少。因此,笔者期望本书对促进我国在此领域的深入研究和积极赶超世界先进水平方面能有所裨益。

### 1.2.3 地下水溶质运移耦合理论的研究进展

溶质在多孔介质中运移理论研究已有多年的历史(黄康乐,1987;杨金忠,1993,1986;Bear,1969,1972;Fried,1975)。但这些研究主要涉及溶质在小尺度范围内(如在实验室土柱中)运动所遵循的规律和基本方程。描述溶质分散的基本理论为水动力弥散理论,在该理论中,孔隙流速的不均匀性和分子的扩散作用导致溶质在多孔介质运动过程中的分散,即水动力弥散。溶质运动所遵循的基本方程为对流-弥散方程,溶质与介质间的其他物理化学作用而引起溶质质量的变化作为源汇项加在基本方程中(冯绍元等,1995;黄康乐,1987;杨金忠,1993)。室内试验表明,水动力弥散理论可以较好地描述小尺度范围的溶质运动,所测得的弥散度值在  $10^{-4} \sim 10^{-2}$  m 量级范围内(Klotz et al,1980)。但是将此理论用于实际区域污染物运移过程时,则出现许多问题。首先是实际区域内各点弥散度难以得到,其次,当用数值方法求解对流-弥散方程时,由于弥散度值过小(或 Peclet 值过大)而出现数值困难,使大区域溶质运移的预测分析难以实现。特别是近年来国内外在这一领域的研究成果表明,溶质在小尺度范围运移所确定的方程和弥散系数不能描述溶质在大区域范围内的运动特征和规律。在野外大区域所求得的弥散度值在  $10^{-1} \sim 10^{-3}$  m 量级范围内(杨金忠等,1993;Gelhar et al,1992),弥散度随着区域尺度的增大而增加。其原因是控制大区域溶质运移的机理是宏观地下水流速的不均匀性(杨金忠和叶自桐,1994),而地下水流速的不均匀性主要起源于储水介质沉积特征和水力特征的空间变异性,这些影响区域溶质运移的基本特征在室内实验中是反映不出来的。正如研究水动力弥散时分子扩散可以忽略一样,小范围测得的弥散度对大区域溶质的分散过程可以忽略不计。因而,微观的水动力弥散理论不能用于宏观的研究(杨金忠等,2000)。

真正对地下水污染监测治理有实际意义的恰恰是大空间范围的宏观水动力弥散特征。于是人们的注意力开始由微观转向宏观,大尺度范围内溶质运移理论成为目前国内外力图攻克的基础理论课题(杨金忠等,2000)。为了获得宏观范围内介质的非确定性特征,随机理论开始成为地下水水质研究中的重要工具。统计近几年国际上有关水科学研究的著名杂志(如 Water Resources Research, J Hydrology 等)所发表的论文可以看出,大部分有关地下水污染的理论研究都涉及随机模型,这在一定程度上也反映出要解决实际地下水污染管理问题,必须由确定模型转为随机模型