

# 水-力条件下膨润土中气体运移的数值模拟研究

奚晨宇

同济大学土木工程学院地下建筑与工程系 上海 200092

**【摘要】**：在深地质处置库（DGR）长期封存放射性废物的过程中，由金属腐蚀，微生物分解等产生的气体可能超过工程屏障或宿主岩石的容纳能力，从而通过这些屏障迁移，增加人类和环境接触放射性物质的风险。本研究针对这一问题，提出了一种数学模型，用于模拟和预测气体在饱和压实膨润土中的迁移行为。该模型综合考虑了流体力学、土力学和毛细作用，通过 Darcy 定律描述了土孔隙中的水分和气体流动，并引入了 Bishop 有效应力原理来表征非饱和土的应力状态。本项目采用有限元软件 COMSOL 对模型进行了数值求解，模拟了一维注气条件下气体在膨润土中的流动情况。模拟结果显示了气体在膨润土内的迁移过程，验证了模型的有效性，但没能成功模拟气体突破。研究结果表明，该数学模型在模拟气体迁移方面具有良好的前景，未来将进一步改进以实现气体突破和优势渗流路径的模拟。

**【关键词】**：放射性废物处置；气体迁移；数学模型；有限元方法

DOI:10.12417/2811-0536.26.03.002

## 1 引言

目前，国际上公认的技术可行、经济合理且安全可靠核废料处置方案是深地质处置<sup>[1-3]</sup>。研究表明，高压实膨润土因具有极低的渗透性、极高的吸附性、出色的热传导及膨胀性<sup>[4-5]</sup>，被公认是最理想的缓冲/回填材料<sup>[6]</sup>。处置库封闭运营后，围岩中的地下水渗入并逐渐饱和屏障材料，冲刷、消耗库内氧气，形成无氧环境。随后，入渗的地下水将腐蚀金属废物罐（处置容器）及库内其他金属构件，发生还原反应产生氢气<sup>[7-8]</sup>；同时，由于微生物的存在，腐蚀产生的氢气将在碳酸盐、硫酸盐、硫代硫酸盐等作用下转化为甲烷、硫化氢等气体。同时，上述气体将在浓度梯度作用下，溶解于屏障材料孔隙液或向远场区域扩散。当产生速率超出屏障材料的扩散能力时，气体将发生富集并形成独立气相。由于高压实膨润土尤其是其水化饱和后，具有极低的渗透性能和极高的毛细阻滞能力，部分气体将在屏障材料与处置库其他构件交界处积聚，形成积聚气压。随着积聚气压的持续增加，积聚气体可导致库内核素随地下水或气体向库周环境泄漏，甚至危及处置库力学稳定<sup>[9]</sup>。

因此，开展处置库运营环境下、高压实 GMZ 膨润土气体迁移过程研究，对于评价 THM 耦合条件下、压实膨润土气体迁移行为特征，丰富非饱和土力学理论，指导我国高放核废料的深地质处置等均具有重要的理论与实践价值。

## 2 数学模型

### 2.1 理论模型构建

本研究的核心部分是建立了一个基于多孔介质力

学的线弹性粘性-毛细数学模型，该模型能够描述饱和压实膨润土中的两相流动（气相和液相）。模型中引入了 Bishop 有效应力原理，考虑了土体的孔隙水和孔隙气的压力对土体骨架应力状态的影响。

(1) 守恒方程：

①考虑 Darcy 定律的水质量守恒方程：

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho_w \frac{k_{ij} k_{rw}}{\mu_w} \left( \frac{\partial p_w}{\partial x_j} + \rho_w g_j \right) \right) = -\rho_w \left[ n \left( \frac{ds_w}{ds} \right) \frac{\partial s}{\partial t} + n \frac{S_w}{K_w} \frac{\partial p_w}{\partial t} + S_w (1-n) \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right] \quad (1)$$

式中： $\rho_w$ 为水的密度， $k_{ij}$ 为土体的固有渗透率， $k_{rw}$ 为水的相对渗透率， $\mu_w$ 为水的动力粘滞系数， $g_j$ 为重力加速度， $n$ 为孔隙度， $S_w$ 为水的饱和度， $s$ 为吸力， $K_w$ 为水的体积模量， $p_w$ 为孔隙水压力， $\frac{\partial u_k}{\partial x_k}$ 为体应变。

②考虑 Darcy 定律的气质量守恒方程：

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho_g \left( \frac{k_{ij} k_{rg}}{\mu_g} \left( \frac{\partial p_g}{\partial x_j} + \rho_g g_j \right) + H \frac{k_{ij} k_{rw}}{\mu_w} \left( \frac{\partial p_w}{\partial x_j} + \rho_w g_j \right) \right) \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( -D_e \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho_g n(HS_w)) \right) = -\rho_g \left[ n(H-1) \left( \frac{ds_w}{ds} \right) \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{n(1-S_w+HS_w)}{K_g} \frac{\partial p_g}{\partial t} + (1-S_w+HS_w)(1-n) \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right] \quad (2)$$

式中： $k_{rg}$ 为气体的相对渗透率， $\mu_g$ 为气体的动力粘滞系数， $D_e$ 为气体的有效扩散系数， $p_g$ 为孔隙气压力。

③动量守恒方程（准静态平衡）：

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + F_{vi} = 0(3)$$

式中： $\sigma_{ij}$ 为应力张量， $F_{vi}$ 为体力。

Bishop 有效应力原理：

$$\sigma = \sigma' + (1 - \chi)p_g + \chi p_w(4)$$

式中： $\sigma$ 为总法向应力， $\sigma'$ 为有效应力， $\chi$ 为与土饱和度有关的参数。

代入 Bishop 有效应力原理并进行微分，使用线性孔隙弹性模型的动量守恒的控制方程如下：

$$G \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + (G + \lambda) \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + (1 - \chi) \frac{\partial p_g}{\partial x_i} + \chi \frac{\partial p_w}{\partial x_i} + F_{vi} = 0(5)$$

式中： $G$ 为土体的剪切模量， $\lambda$ 为拉梅常数， $\chi$ 为与土饱和度有关的参数。

(2) 水力本构方程：

采用 van Genuchten 方程对 SWCC 进行拟合，方程如下：

$$S_{e,w} = \begin{cases} \frac{1}{\left[1 + \left| a' \left( \frac{s}{\rho_w g} \right)^{n'} \right|^m \right]^{\frac{1}{m}}}, & s > 0 \\ 1, & s \leq 0 \end{cases} (6)$$

式中： $S_{e,w}$ 为水的有效饱和度， $a'$ ， $n'$ ， $m'$ 为 VG 模型拟合参数。

(3) 力学本构方程

$$\sigma_{ij} = \frac{E}{2(1 + \nu)} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \left( \frac{\nu E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} + \alpha_B \bar{p} \right) \delta_{ij} (7)$$

式中： $E$ 为杨氏模量， $\nu$ 为泊松比。

通过守恒方程、水力本构方程和力学本构方程成功建立起饱和压实膨润土内的气体运移模型。

## 2.2 数值建模过程

(1) 模型几何建立：本研究采用有限元软件 COMSOL 进行数值建模，膨润土单元设置成二维轴对称几何图形，宽为 60mm，高为 120mm。网格划分采用极细化。

(2) 模型初始参数与边界条件设置：首先定义模型不变量（膨润土，水和气体的水-力学常数，状态常数，VG 模型拟合参数），再定义气体迁移（两相流）模型所需的中间变量，最后定义各类所需的插值函数或阶跃函数（用于边界条件的设置）。

通过物理接口实现上述控制方程，膨润土单元弹性模型通过固体力学模块创建，在其中设置基体的

位移场，选择基本的材料参数（杨氏模量，泊松比，材料密度等），设置四周的力学边界条件为辊支承，修改固体力学线弹性材料接口下的方程视图；膨润土单元内水相控制方程通过一般形式 PDE 模块创建，在其中设置控制方程的因变量为  $P_w$ ，根据（公式 1）修改 PDE 模块中方程的守恒通量、源项和阻尼系数，设置孔隙水压力  $P_w$  的初始值，设置底部和四周的水力学边界为水边界，顶部为恒压边界；膨润土单元内气相控制方程通过一般形式 PDE 模块创建，设置控制方程的因变量为  $P_g$ ，根据（公式 2）修改 PDE 模块中方程的守恒通量、源项和阻尼系数，设置孔隙气压力  $P_g$  的初始值，设置四周的水力学边界为隔气边界，顶部为恒压边界，底部为变压边界。

## 3 模拟结果与讨论

为了探究在一维注气条件下，气体在饱和压实膨润土中的运移过程，开展了为期 80 天的注气试验模拟，孔隙水压力随时间变化的二维分布情况如图 1 所示。

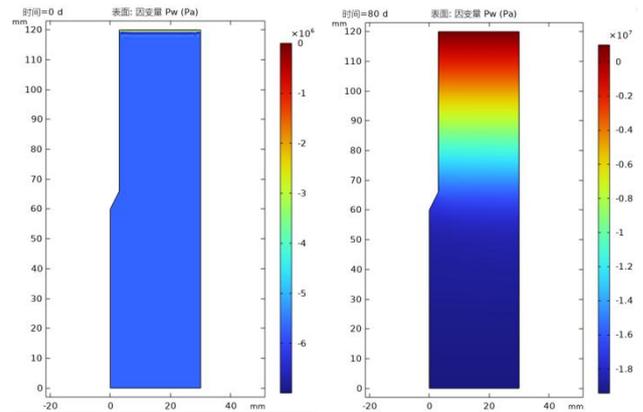


图 1 孔隙水压力 0 d 和 80 d 时的分布图

从图 1 中可以看出，在注气 0d 时，膨润土内部的孔隙水压力均为初始值，只在上表面有较高的值，这是因为上表面施加了恒定的水压；在注气 20d 后，膨润土上部的孔隙水压力有所增加，这是因为上表面受到恒定的水压作用，上表面的恒定水压大小为  $1.0e6$  Pa，而膨润土内的初始孔隙水压力为  $-5.7e6$  Pa，故上表面附近的孔隙水压力会逐渐增大。当注气 53d 时，此时气压已达到土体的进气值，此时膨润土下表面的孔隙水受到气体的挤压，故孔隙水压力会高于中部的孔隙水压力，但注气 80d 时，气体已经进入膨润土内，故膨润土中下部中水的饱和度降低，导致孔隙水压力呈负值。

孔隙气压力随时间变化的二维分布情况如图 2 所示。

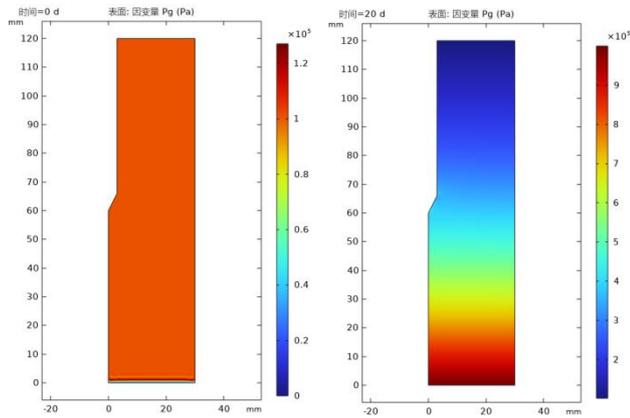


图2 孔隙气压力0 d 和 80 d 时的分布图

从图2中可以看出,注气0d时,膨润土内部的孔隙气压力均为初始值 $1.01 \times 10^5$  Pa,只有下表面气压值较高,这是因为下表面施加了随时间变化的注气压力;在注气20d后,膨润土下部的孔隙气压力逐渐增大,且越靠近下表面增加的幅度越大。当注气53d时,此时注气压力已达到土体的进气值 $8 \times 10^6$  Pa,但是此时气体似乎已通过整个试样,这与实际试验结果不符,根据实际试验结果,当气体达到进气值时,气体才开始进入土体,即土体下表面附近的孔隙气压会急剧增大,而不是模拟结果所示的整个内部气压都升高。当注气80d时,膨润土内部出现了负孔隙气压,这与实际试验结果不符。

本研究已初步达到预期目标,成功开发了一种数

学模型,并验证了其有效性。代表性成果为提出的数学模型,该模型能够模拟气体在饱和压实膨润土中的迁移过程,对DGR的设计和长期安全评估具有重要意义。科学意义在于提供了一种新的工具,用于评估和预测放射性气体的潜在风险,为放射性废物的安全处置提供了理论支持。

#### 4 结论与展望

在本研究中,通过建立线弹性粘-毛细管两相流模型对一维注气试验进行了数值模拟,成功的模拟了气相和水相的流动,但也存在一些问题。

##### 4.1 存在的问题

(1) 模型参数的不确定性:模型中的关键参数,如进气值和固有渗透率,这些参数的不同取值会对气体的流入行为造成一定的影响。

(2) 模型的局限性:尽管模型在模拟二相流动方面取得了成功,但在模拟气体突破方面存在较大差异。这可能是由于模型在描述毛细现象方面还不够完善。

##### 4.2 后续研究方向

本研究在模拟饱和压实膨润土内气体迁移过程时,未能复现气体突破的时间,因此后续需要改进模型来成功复现气体突破的时刻。此外,由于采用的膨润土弹性模量是各向同性,无法模拟优势气体渗流通道,后面可以引入损伤模型来进一步模拟优势气体渗流通道,并结合实际工程案例进行模型的校准和验证。

#### 参考文献:

- [1] 王驹.高放废物安全处置需科学对待[J].中国核工业,2012,(06):20.
- [2] 王驹.高放废物地质处置:进展与挑战[J].中国工程科学,2008,(03):58-65.
- [3] 王驹.安全处置高放废物,确保核能可持续发展[J].中国核工业,2008,(6):16-19.
- [4] Ye W M,Chen Y G,Chen B,et al.Advances on the knowledge of the buffer/backfill properties of heavily-compacted GMZ bentonite[J].Engineering Geology,2010,116(1):12-20.
- [5] 王驹,苏锐,陈亮,宗自华.论我国高放废物地质处置地下实验室发展战略[J].中国核电,2018,11(01):109-115.
- [6] Ye W M,Borrell N C,Zhu J Y,et al.Advances on the investigation of the hydraulic behavior of compacted GMZ bentonite[J].Engineering Geology,2014,169:41-49.
- [7] Ortiz L,Volckaert G,Mallants D.Gas generation and migration in Boom Clay,a potential host rock formation for nuclear waste storage[J].Engineering Geology,2002,64:287-296.
- [8] NEA,2001.Gas generation and migration in radioactive waste disposal:safety-relevant issues:organization for economic co-operation and development[A].92-64-18672-7(192 pp.).
- [9] NEA,2001.Gas generation and migration in radioactive waste disposal:safety-relevant issues:organization for economic co-operation and development[A].92-64-18672-7(192 pp.).