

DOI: 10.11779/CJGE20240355

基于裂隙网络几何特征参数的岩体溶质传输过程预测模型研究

佴宇鏖^{1,2}, 周佳庆^{*1,2}, 李长冬², 郭利国³, 甘馥硕², 朱寅斌²

(1. 武汉大学水资源工程与调度全国重点实验室, 湖北 武汉 430072; 2. 中国地质大学(武汉)工程学院, 湖北 武汉 430074;
3. 广东省建筑设计研究院有限公司, 广东 广州 510010)

摘要: 裂隙岩体中溶质传输的机理与运移过程预测是水工岩石力学与水文地质领域的研究前沿和热点, 同时也是基岩裂隙含水层污染治理、高放射性核废料安全处置、地下资源高效开发、渗漏示踪及灾害化学信号解译等应用需求的关键瓶颈难题。开展了不同裂隙网络几何特征下的岩体溶质运移过程模拟, 系统性分析了裂隙密度、裂隙离散性、裂隙平均开度对溶质运移过程的定量控制机制。分析结果表明, 裂隙密度和平均开度在岩体溶质传输过程中起决定性控制作用, 而裂隙分布离散系数对溶质传输过程的影响程度, 则取决于特定裂隙网络形成的连通路径系统。在此基础上, 建立了基于裂隙无量纲密度和平均开度的岩体关键传质系数(水动力弥散系数 D 和溶质传输速度 V_t)参数化表征公式。通过将岩体关键传质系数的参数化表征公式, 嵌入宏观对流-扩散经典解析解中, 构建出了基于裂隙网络几何特征参数的岩体溶质传输过程预测模型。最后, 通过与不同工况下的岩体溶质传输数值模拟结果对比, 验证了所提预测模型的有效性。所构建的溶质传输过程预测模型, 能够仅依据裂隙网络几何特征参数和水动力条件, 实现溶质传输过程的高保真度预测。研究成果对于低成本、快速高效地预测裂隙岩体中的物质运移过程提供了重要支撑, 对于地下环境污染快速评估、地下资源高效开采具有重要理论意义; 所揭示的裂隙网络几何特征对溶质传输特性的定量控制机制, 为岩体结构演变与水化学信号关联机制的研究奠定了理论基础, 在水化学信号示踪岩体灾变状态及灾害早期预警方面具有潜在应用价值。

关键词: 裂隙岩体; 裂隙网络; 溶质传输; 穿透曲线; 预测模型

中图分类号: TU451 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-4548(2025)08-1641-12

作者简介: 佴宇鏖(1998—), 男, 主要从事裂隙岩体渗流与传输特性方面的研究工作。E-mail: 1202110443@cug.edu.cn。

Predictive model for solute transport processes in fractured rocks based on geometric parameters of fracture network

NAI Yu'ao^{1,2}, ZHOU Jiaqing^{1,2}, LI Changdong², GUO Liguo³, GAN Fushuo², ZHU Yinbin²

(1. State Key Laboratory of Water Resources Engineering and Management, Wuhan University, Wuhan 430072, China; 2. Faculty of Engineering, China University of Geosciences, Wuhan 430074, China; 3. Guangdong Architectural Design & Research Institute Co., Ltd., Guangzhou 510010, China)

Abstract: The mechanisms and predictive modeling of solute transport in fractured rocks represent a frontier and hotspot in the fields of hydraulic rock mechanics and hydrogeology. They also address critical scientific challenges, including pollution remediation in fractured bedrock aquifers, safe disposal of high-level radioactive waste, efficient underground resource extraction, leakage tracing and interpretation of chemical signals associated with geohazards. The solute transport processes under various geometric characteristics of fracture network, is simulated, and the quantitative control mechanisms of fracture density, fracture discreteness and mean fracture aperture on solute transport are analyzed. The results indicate that the fracture density and mean aperture are the decisive factors in controlling solute transport, while the influences of the fracture distribution discreteness depends on the connectivity of pathways formed by specific fracture networks. Based on these findings, the parameterization formulas for key transport coefficients, hydrodynamic dispersion coefficient (D) and solute transport

基金项目: 国家自然科学基金面上项目(42277177); 国家自然科学基金青年基金项目(51909247) This work was supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 42277177, 51909247).

收稿日期(Received): 2024-04-15 修回日期(Revised): 2024-11-21 接受日期(Accepted): 2024-12-16 网络出版日期(Online): 2024-12-17

*通信作者(E-mail: jqzhou@whu.edu.cn)

velocity (V_t), are developed using the dimensionless fracture density and mean aperture. These formulas are incorporated into the classical macroscopic advection-dispersion analytical solution to establish predictive model for solute transport processes based on the geometric parameters of fracture network. A comparison with the numerical results under various conditions validates the model's accuracy and reliability. The proposed model enables high-fidelity prediction of solute transport processes using only the geometric parameters of fracture network and hydrodynamic conditions. This provides critical support for low-cost, efficient predictions of solute transport in fractured rocks. The findings have significant theoretical implications for rapid assessments of subsurface pollution and efficient underground resource exploitation. Additionally, the revealed quantitative control mechanisms of fracture network geometry on solute transport establish a theoretical basis for studying the coupling between the structural evolution of rock mass and the hydrochemical signals. These insights hold potential applications in tracing rock failure states and early warning of geohazards using the hydrochemical signals.

Key words: fractured rock; fracture network; solute transport; breakthrough curve; predictive model

0 引言

天然岩体受到复杂的应力条件、水文环境以及工程活动等因素的影响，内部普遍发育着不同尺度的宏细观裂隙。这些裂隙在地下物质运移中起着至关重要的作用，其物质传输和运移特性与许多地球物理过程和人类工程活动密切相关，如地下碳氮循环^[1]、地质灾害异常化学信号前兆^[2]、基岩裂隙含水层污染^[3]、高放核废料处置^[4]、地下油气资源开发^[5]等。然而，由于裂隙岩体的几何非均匀性和其间流体流态的复杂性，使得裂隙岩体中的物质运移特性表征和预测十分棘手。

为探明岩体溶质传输过程，阐述溶质浓度演化规律，早期研究着重分析了不同形式单裂隙溶质传输控制方程及对应解析解。Philip 等^[6]推导了不考虑基质渗透性的岩石单裂隙中溶质传输的一维解析解。Tang 等^[7]将裂隙-基质系统中的二维运移过程概化成为两个一维偏微分方程的耦合，并推导了考虑基质扩散的溶质传输控制方程解析解。Sudicky 等^[8]在 Tang 等^[7]的基础上提出了一种考虑裂隙-基质相互扩散的单裂隙溶质传输解析解。Mahmoudzadeh 等^[9]考虑了基质-裂隙互相作用条件，构建了放射性核素在单裂隙中的传输控制方程，评估了放射性核素深层处置安全性能。

在天然地质体中，岩体由几何性质各异，物理性质各异，空间分布呈复杂网络状排列的多个裂隙构建而成^[10]。早期研究较少考虑裂隙之间相互作用以及非裂隙部分的影响过程，难以复现实际工况以及岩体渗流传输的时空演化过程，因此裂隙网络研究方法逐渐成为主流。裂隙网络溶质传输研究是在单裂隙研究的基础上耦合裂隙集群属性进行渗流传输分析^[11]。Oda 等^[12]构建了一种基于有效介质理论的二维裂隙网络模型，根据裂隙几何特征模拟裂隙网络溶质传输过程。Bodin 等^[13]使用时域随机游走方法提出了二维离散裂隙网络溶质传输过程的数值解。Khafagy 等^[14]使用随

机游走粒子追踪方法实现了考虑裂隙壁面和基质内部发生反应的二维裂隙网络溶质传输模拟。

为了有效描述和刻画溶质传输特征，国内外许多学者构建了溶质传输宏观表征模型，主要包含两类：①基于物理过程模型^[15-16]：通过概化传输域或传质过程来建立的，如动区-不动区模型、多速率传质模型、等效分层介质模型、分布式动区-不动区双重介质模型等。该类模型物理意义明确、概念清晰，部分模型存在理论解析解，但有时表征能力有限或参数鲁棒性较差，且需要对流速场或浓度场进行较为精准的刻画。②基于统计分析模型^[17-18]：通常是基于流速场和传输场的统计特性建立，如连续时间随机游走模型和马尔可夫链模型。该类模型往往较为抽象，是借助统计学理论方法来对物理过程进行刻画，部分参数缺乏与之匹配的物理意义，参数值非唯一性问题较为突出，且同样需要对流速场或浓度场进行较为精准的刻画。

考虑到以往研究主要针对岩体溶质传输过程的反演分析开展工作，且反演分析模型传质系数与岩体几何特性之间的定量关系仍不明晰，鲜有研究探讨基于几何特征参数的溶质传输过程直接预测。为解决上述问题，以 Zhou 等^[19-20]基于单裂隙几何特征参数直接预测溶质传输过程研究为基础，将单裂隙几何特征分析扩展到二维裂隙岩体尺度，基于蒙特卡洛方法构建具有不同裂隙密度、离散特性和开度的基质-裂隙网络模型。通过耦合达西方程和对流-扩散 (advection-diffusion equation, ADE) 方程对不同裂隙网络几何特征条件下岩体地下水流动和溶质传输过程进行模拟。据此在宏观对流-弥散理论的框架下反演分析溶质穿透曲线 (breakthrough curve, BTC)，定量表征裂隙开度和密度与水动力弥散系数和溶质传输速度的关系。将参数化的水动力弥散系数和溶质传输速度嵌入宏观对流-扩散理论解析解中，构建了基于裂隙网络几何

特征的岩体溶质传输过程解析预测模型。

1 传输控制方程与裂隙网络模型

1.1 渗流传输控制方程

岩体裂隙中不可压缩、恒定黏滞系数的牛顿流体稳态流受 Navier-Stokes 方程和质量连续性方程控制。在低流速线性层流条件下, Navier-Stokes 方程可退化为立方定律 (cubic law) [12]

$$Q = \int_0^{W/2} \int_{-b/2}^{b/2} u(z) dz dy = \frac{-Wb^3}{12\mu} \frac{dp}{dx} \quad (1)$$

式中: Q 为流体流量; W 为裂隙宽度; b 为裂隙开度; dp/dx 为压力梯度; μ 为动力黏滞系数。

岩体裂隙中溶质运移过程在对流-扩散方程基础上耦合上述渗流场方程求解, 控制方程如下^[14]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_0 \nabla^2 C - \nabla \cdot (\mathbf{u}C) \quad (2)$$

式中: C 为溶质浓度; t 为时间; D_0 为分子扩散系数。

1.2 几何特征参数选取

为分析裂隙岩体溶质传输过程与裂隙网络几何特征的量化关系, 本文选取裂隙密度、裂隙分布离散系数以及裂隙开度 3 个关键性影响指标进行研究。

裂隙开度取值在 Matthäi 等^[21]的基质-裂隙渗透率影响分类方法和 Wang 等^[22]基质-裂隙渗透率结果上进行分析。在设置基质渗透性为 $8.33 \times 10^{-18} \text{ m}^2$ 的情况下选择相应裂隙开度 (裂隙渗透性根据裂隙开度 b 由立方定律求得), 使渗透率比 k_m/k_f (下标 m 和 f 分别代表基质 matrix 和裂隙 fracture) 取值在 $10^{-2} \sim 10^{-6}$ 之间, 满足整体裂隙网络传输过程由基质主导到裂隙主导的转变要求。

在裂隙岩体的逾渗理论中, 广泛使用无量纲密度 (dimensionless density) 和裂隙强度 (intensity) 来量化裂隙岩体内部连通程度, 其中裂隙密度 ρ 和二维裂隙线强度 P_{21} 定义如下^[23]:

$$\rho = N_{\text{fracture}} / s_{\text{sample}} \quad , \quad (3)$$

$$P_{21} = \sum_{i=1}^{N_{\text{fracture}}} L_i / s_{\text{sample}} \quad . \quad (4)$$

式中: ρ 为裂隙密度; P_{21} 为裂隙线强度; N_{fracture} 为裂隙数量; s_{sample} 为研究区域面积; i 为研究区域内第 i 条裂隙; L_i 为该裂隙迹长。二维无量纲密度 ρ'_{2d} 与裂隙和研究区域的绝对大小无关, 在二维裂隙线强度基础上考虑了裂隙间影响区域 (excluded area), 是连通性的直接度量^[23], 对应计算方法如下^[24]:

$$s_{\text{ex}} = 2L^2 / \pi \quad (5)$$

$$\rho'_{2d} = \rho s_{\text{ex}} = 2P_{21}L / \pi \quad . \quad (6)$$

式中: s_{ex} 为二维裂隙的影响区域; L 为裂隙平均迹长, 即 L_i 的算术平均值; ρ'_{2d} 为二维裂隙网络无量纲密度。

建模中裂隙角度分布采用了目前应用广泛的 von-Mises Fisher (vMF) 分布, 这类方法因符合裂隙在天然岩体内分布特征而受到广泛运用。研究区域内任意 P 维单位矢量 \mathbf{x} 方位角的 vMF 分布概率密度函数如下^[25]:

$$f_p(\mathbf{x}; \theta, S) = C_p(S) \exp(S\theta \cdot \mathbf{x}) \quad . \quad (7)$$

式中: θ 为裂隙网络方位角均值; S 为离散程度 ($S > 0$); θ 和 S 可以近似视作正态分布的均值和方差; $C_p(S)$ 为由修正贝塞尔公式得到的归一化常数。本文采用简化 vMF 分布, 其概率密度函数 (PDF) 写为^[25]

$$f(\theta) = S \frac{\sin \theta e^{S \cos \theta}}{e^S - e^{-S}} \quad . \quad (8)$$

式 (8) 对应的概率密度函数及其累积分布函数 (CDF) 绘制如图 1 所示。

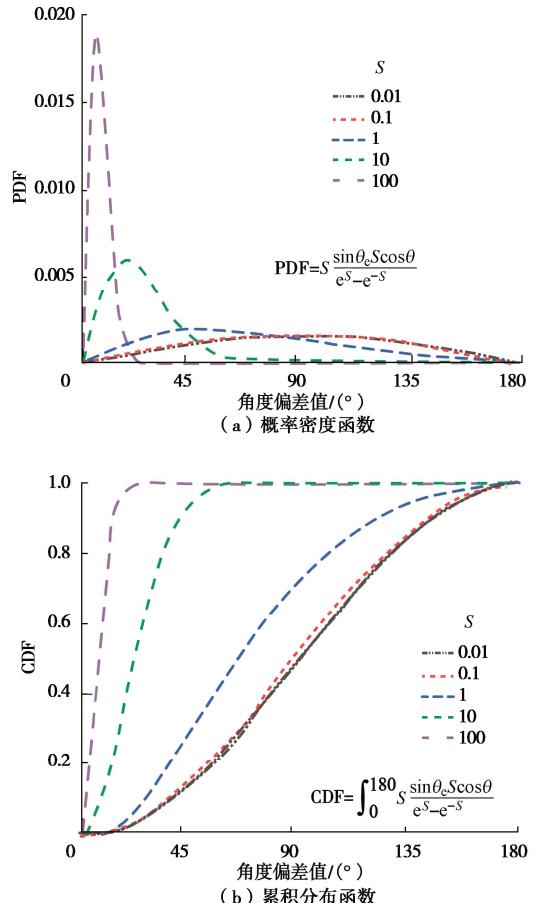


图 1 vMF 分布的概率密度函数和累积分布函数

Fig. 1 Probability density function (a) and cumulative distribution function (b) of vMF distribution

1.3 岩体裂隙网络模型与边界条件

本文以裂隙岩体作为研究对象, 裂隙采用无厚度单元进行建模, 通过蒙特卡洛法构建不同裂隙密度、裂隙开度和裂隙分布离散度的基质-裂隙网络模型。

需要注意的是，随着裂隙数量不断增加，裂隙与模型边界相交概率增大，采取布尔运算建模时截断了部分裂隙，使得名义裂隙线强度和真实的裂隙线强度存在一定的偏差。岩体试样模型（网格）和边界（初始）条件设置如图 2 所示。

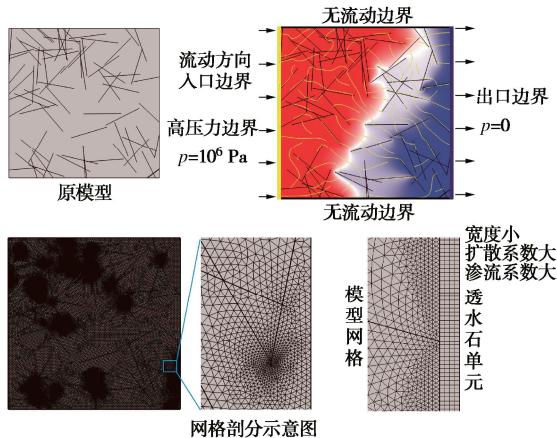


图 2 裂隙网络模型网格划分图及边界条件设置

Fig. 2 Meshing diagram and boundary condition setting for fracture network model

在模型出入口设置高、低压力边界，将模型上下边界设置为无流动边界，通过进出口压力差驱动流体由左向右流动。研究区域初始浓度场设置为零；入口边界设置为狄利克雷边界，即模拟过程中入口边界从始至终都在注入溶液，且保持溶质浓度 $C = C_0 = 1$ （单位浓度）；浓度场的出口边界条件设置为开放边界：

$$\frac{\partial C}{\partial n} = 0 \quad (9)$$

式中： C 为溶质浓度； n 为垂直边界的单位法向量。

表 1 岩体裂隙网络建模工况设置

Table 1 Summary of modeling settings for fracture network

构建参数	采用方法	计算方法	模型设置
裂隙尺寸及分布形式	常数分布 (相同迹长)	裂隙迹长 $l=0.2L$ (0.2 m)	模型大小为 $1\text{m} \times 1\text{m}$ 的正方形研究区
裂隙密度及无量纲密度	递增	裂隙密度从小到大分别为（按条数计）： 25, 50, 75, 100, 150, 200, 250, 300, 400, 500 无量纲密度计算方法为 $S_{ex} = 2l^2 / \pi$ $\rho'_{2d} = \rho S_{ex} = 2P_2 l / \pi$	裂隙密度每次增加都是在上一个低密度模型基础上进行。根据不同密度计算得到对应无量纲密度和线强度。
裂隙密度从小到大分别为（按条数计）：			
裂隙角度及分布形式	均匀随机分布 vMF 分布 常数分布	角度分布方法对应概率密度分布： $f(\theta) = S \frac{\sin \theta e^{S \cos \theta}}{e^S - e^{-S}}$	基质渗透性设置为 $8.33 \times 10^{-18} \text{ m}^2$ ，对应 渗透率比 k_m/k_f 为 $1 \times 10^{-2}, 1 \times 10^{-3},$ $1 \times 10^{-4}, 1 \times 10^{-5}, 2.5 \times 10^{-6}$ 和 1×10^{-6} 。
裂隙开度	Matthäi 方法	裂隙开度依次设置为 $1 \times 10^{-7}, 3.16 \times 10^{-7}, 1 \times 10^{-6},$ $3.16 \times 10^{-6}, 6.32 \times 10^{-6}, 1 \times 10^{-5} \text{ m}$	方位角均值 θ 设置为 45° ；裂隙分布离散系数 S 采用对数方法设置为 $0.01 \sim 100$ ，设置均匀随机分布 0.001，常数分布为 1000

本文采用多场耦合模拟分析软件 COMSOL Multiphysics 开展岩体渗流和传质模拟。选择标准流体水作为溶质传输的载体介质：密度 $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ ，动力黏滞系数 $\mu = 0.001 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ ；溶质分子扩散系数设置为 $8.0 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ 。采用三角形单元对研究区域进行网格划分，模型主体部分的网格数量在百万级。为减小裂隙网络边界效应影响，获得更为精确结果，在模型出口边界设置了宽度为 0.001 m ，渗透系数和扩散系数远大于模型的透水石单元，通过映射方法构建四边形网格，利用透水石出口边界进行流量和浓度计算（图 2）。模拟工况和参数设置详见表 1。

1.4 溶质传输理论分析模型

任意位置处截面上的平均浓度可以用一维宏观传输模型来描述^[26]：

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V_t \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (10)$$

式中： C 为截面上的溶质平均浓度； V_t 为溶质传输速度； D 为水动力弥散系数； x 为浓度测点与岩体入口边界间的投影距离。

通过 Duhamel 理论将二维裂隙网络中复杂溶质传输过程简化为一维纵向（即沿流动方向）传输过程。在式（10）基础上可以获得溶质传输过程中任意时刻 t 和任意位置处 x 浓度 C 的大小，具体表达式如下^[17]：

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - V_t t}{2\sqrt{Dt}} \right) + \exp \left(\frac{V_t x}{D} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x + V_t t}{2\sqrt{Dt}} \right) \right]. \quad (11)$$

式中： C_0 为岩体入口边界处设置的恒定浓度； $\operatorname{erfc}(x)$

是互补误差函数, ψ 为函数自变量, 表达式为

$$\operatorname{erfc}(x) = 2/\sqrt{\pi} \int_x^{\infty} e^{-\psi^2} d\psi \quad (12)$$

为求解出口处浓度场变化情况, 首先将出口边界处水流速度矢量与溶质浓度进行点乘, 随后在出口边界处进行积分计算, 再与出口边界处流量通量积分相除, 得到岩体试样出口端流量平均浓度 (flux-weighted concentration) [19], 得到表达式如下:

$$C = \frac{\int_0^w (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) c dy}{\int_0^w (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) dy} \quad (13)$$

式中: $\mathbf{u}=[u, v]$ 为速度矢量; $\mathbf{n}=[n_x, n_y]$ 为出口边界单位法向量; c 为出口边界浓度; w 为出口边界宽度。

2 溶质传输的几何特征控制机制

2.1 流体渗流结果分析

在变裂隙密度条件下, 从渗透压力的分布特征可见, 当裂隙密度较低或较高时, 渗透压力沿程变化较为均匀; 而在中等密度条件下, 渗透压力的分布非均质性显著增强 (图 3)。究其原因, 裂隙密度较低时, 渗流主要集中在渗透性各向同性的基质中, 导致压力变化较均匀; 随着裂隙密度逐步增大, 渗流通道的非均质性逐步增强, 导致渗流各向异性也同步增强; 但当裂隙密度进一步增大时, 裂隙网络在各方向形成贯通通道的概率增加, 使渗流压力变化重新趋于均匀。

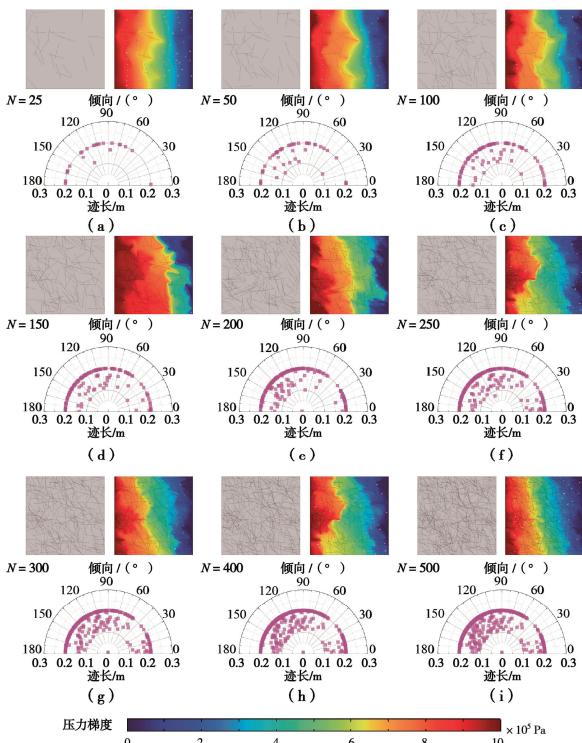


图 3 变裂隙密度下岩体模型与渗透压力分布云图

Fig. 3 Contour maps of pressure field for fractured rocks under varying fracture densities

在变裂隙分布离散性条件下, 当裂隙分布离散系数大于 5 时, 裂隙角度接近常数分布, 渗透压力云图随裂隙分布变化显著 (图 4); 当离散系数小于 0.5 时, 裂隙角度接近均匀随机分布, 渗透压力分布较为均匀。当离散系数在 0.5~5 时, 裂隙角度分布由均匀随机分布向 vMF 分布再向常数分布过渡, 此过程中渗透压力云图的分布受裂隙空间位置影响显著, 变化无明显规律性, 需结合裂隙连通性进行具体渗流情况的判断。

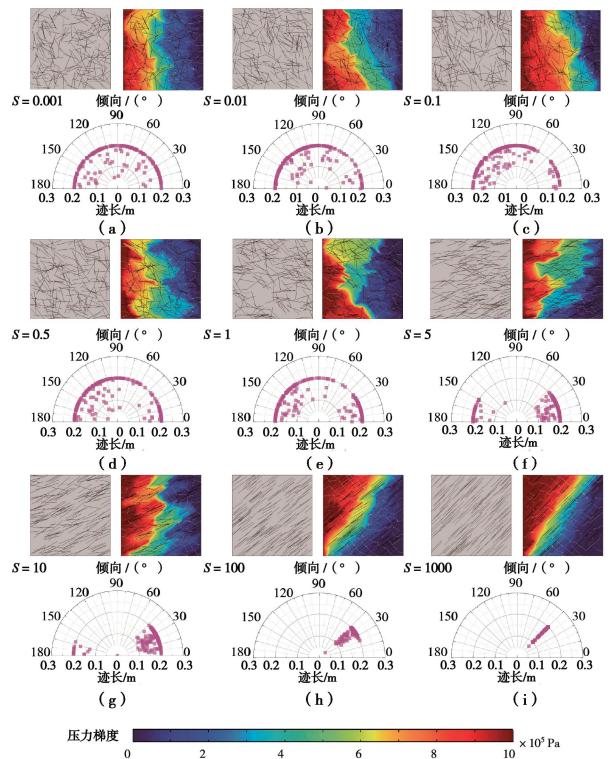


图 4 变裂隙分布离散系数下岩体模型与渗透压力分布云图

Fig. 4 Contour maps of pressure field for fractured rocks under varying distribution discreteness coefficients

2.2 溶质传输结果分析

选取一组岩体算例模型 (裂隙数量为 400, 裂隙开度为 3.16×10^{-6} m) 进行溶质传输模拟, 获得代表性溶质穿透曲线如图 5 所示。由图 5 可知, 岩体溶质传输过程中出现了明显的优势传输通道, 传输过程中裂隙连通性良好处会比其他区域更快达到饱和状态。因此在溶质传输过程中, 裂隙网络内部贯通程度是影响溶质传输过程的关键内因。

图 6 展示了变裂隙密度和裂隙开度下岩体溶质穿透曲线。当裂隙开度较小时 (即 k_m/k_f 值较大), 此时虽然裂隙密度增加, 但溶质穿透曲线变化并不明显。随着裂隙开度增大, 不同裂隙密度的岩体溶质穿透曲线逐步拉开差距, 出口边界溶质最早抵达时间和饱和平衡时间显著缩短。当裂隙开度大于 1×10^{-6} m (即 $k_m/k_f < 10^{-4}$) 时, 不同裂隙密度的岩体溶质穿透曲线差异显著。

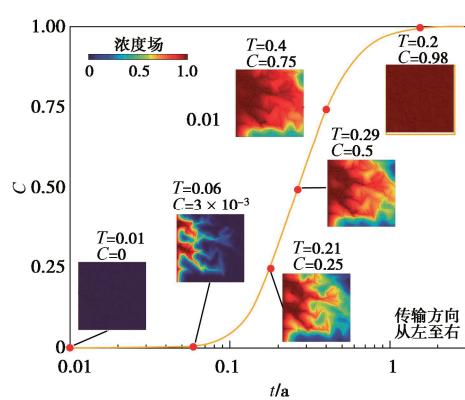


图 5 典型岩体溶质穿透曲线 (BTC)

Fig. 5 Representative solute breakthrough curves (BTCs) of fractured rocks

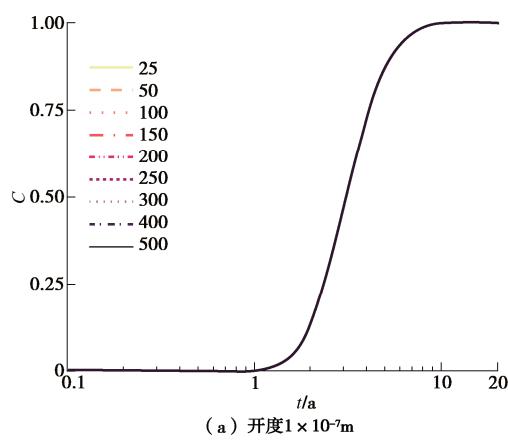
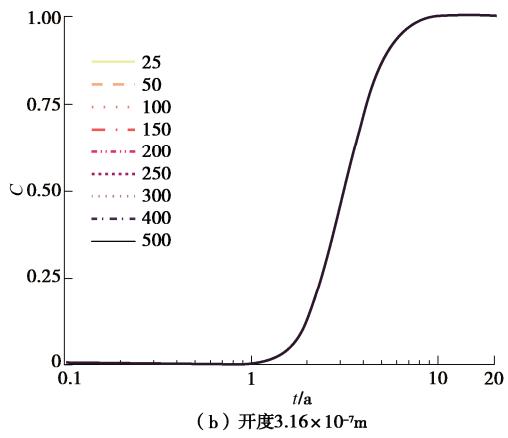
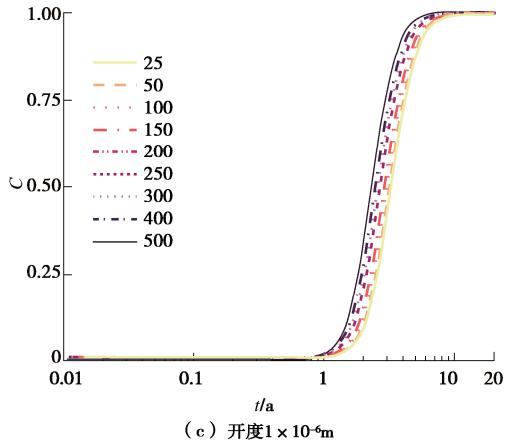
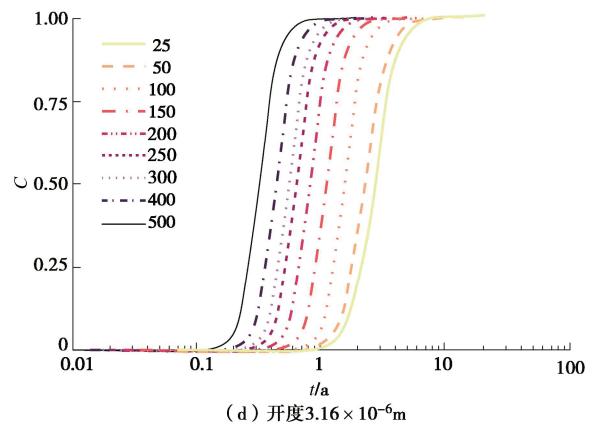
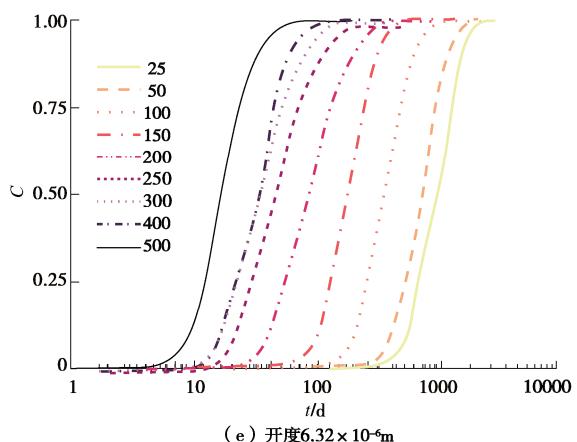
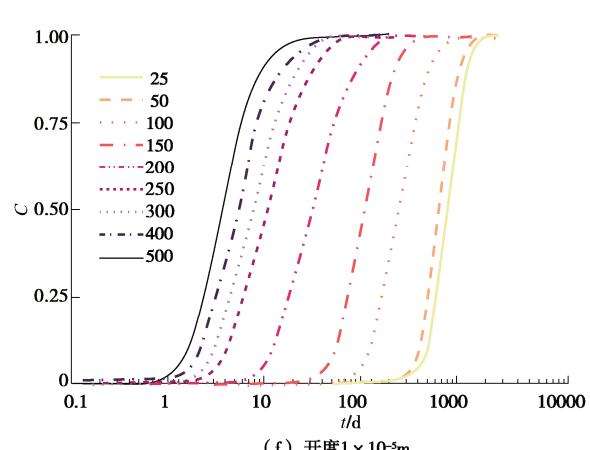
(a) 开度 1×10^{-7} m(b) 开度 3.16×10^{-7} m(c) 开度 1×10^{-6} m(d) 开度 3.16×10^{-6} m(e) 开度 6.32×10^{-6} m(f) 开度 1×10^{-5} m

图 6 变裂隙密度和裂隙开度下岩体溶质穿透曲线

Fig. 6 Solute breakthrough curves of fractured rocks with different fracture densities and fracture apertures

相同裂隙开度下，随着裂隙密度增加，溶质穿透曲线逐渐左移（即传质加速）。裂隙密度和裂隙开度增大显著加快溶质传输过程，在裂隙数量为 150 和 200 的两组算例中，随着裂隙开度增大，溶质穿透曲线间距离逐渐拉开，变化幅度在所有相邻算例中最大，基于此推测裂隙网络在此区间内逐渐连通，形成了优势贯通通道。

变裂隙分布离散系数和裂隙开度下岩体溶质穿透曲线如图 7 所示。裂隙开度增大显著改变溶质穿透曲

线: 在裂隙开度大于 $1 \times 10^{-6} \text{ m}$ (即 $k_m / k_f < 10^{-4}$) 时, 随着裂隙开度增大, 溶质穿透曲线出现明显变化, 而裂隙开度小于 $1 \times 10^{-6} \text{ m}$ (即 $k_m / k_f > 10^{-4}$) 时, 溶质穿透曲线变化不大。由于不同裂隙分布离散系数模型采取了相同的裂隙密度和无量纲密度, 在均匀随机分布到 vMF 分布再到常数分布的转变中, 裂隙分布离散系数逐渐增大, 形成贯通通道几率下降, 一般来说溶质穿透曲线会右移 (即传质减缓)。考虑到裂隙分布离散系数相差不大时, 裂隙分布产生的贯通通道会极大影响传输过程, 因此部分结果的溶质穿透曲线在离散系数增大过程中出现左移现象 (即传质加速)。

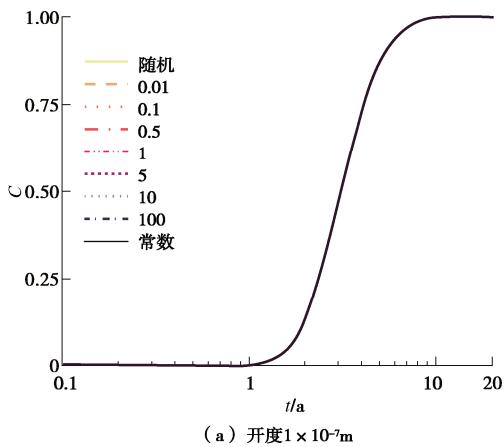
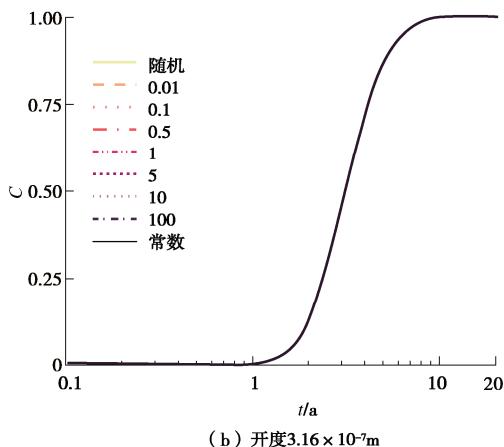
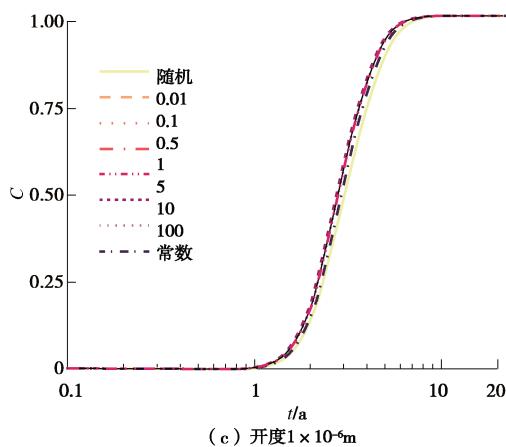
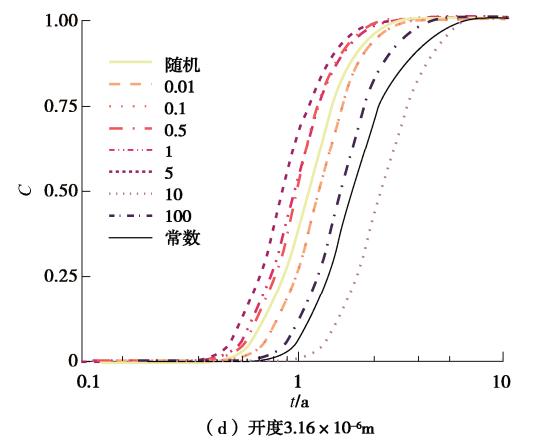
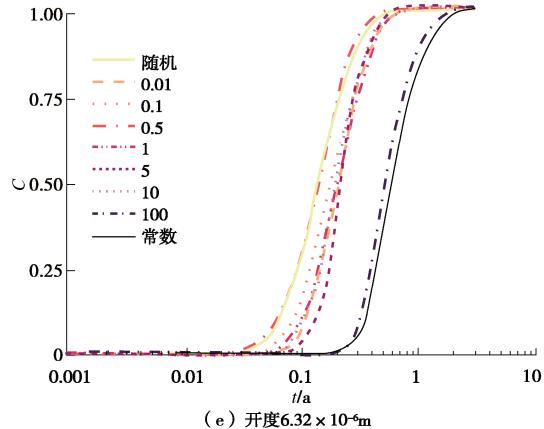
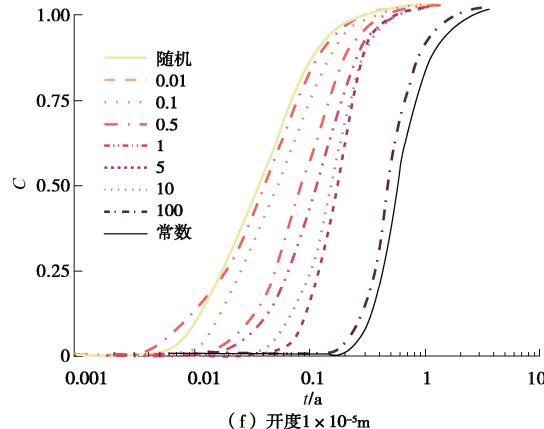
(a) 开度 $1 \times 10^{-7} \text{ m}$ (b) 开度 $3.16 \times 10^{-7} \text{ m}$ (c) 开度 $1 \times 10^{-6} \text{ m}$ (d) 开度 $3.16 \times 10^{-6} \text{ m}$ (e) 开度 $6.32 \times 10^{-6} \text{ m}$ (f) 开度 $1 \times 10^{-5} \text{ m}$

图 7 变裂隙分布离散系数和裂隙开度下岩体溶质穿透曲线

Fig. 7 Solute breakthrough curves with different fracture distribution discreteness coefficients and fracture apertures

2.3 溶质传输系数影响机制

在描述岩体溶质传输运移过程的宏观对流-弥散理论中, 确定水动力弥散系数 D 和溶质传输速度 V_t 是表征溶质传输过程的关键。 D 和 V_t 可以在宏观对流-扩散理论的框架下反演分析获得, 并通过相同水动力/浓度边界(初始)条件的无裂隙岩体模型模拟结果 D_m 和 V_m (下标 m 代表基质 matrix) 进行归一化处理。

就水动力弥散系数和溶质传输速度与裂隙密度变化关系而言 (图 8 中用无量纲密度代替裂隙密度), 裂隙密度增加会显著加快裂隙岩体溶质传输过程。一般来说, 相同裂隙开度条件下, 随着裂隙密度增大, 水动力弥散系数同样增大, 其增大幅度先大后小, 呈现

类似生长曲线变化形式; 裂隙密度增大时, 溶质传输速度同样会增大, 其变化幅度在裂隙网络连通前比较小, 而在逐渐连通的过程中变化幅度增大, 呈现类似幂函数变化形式。

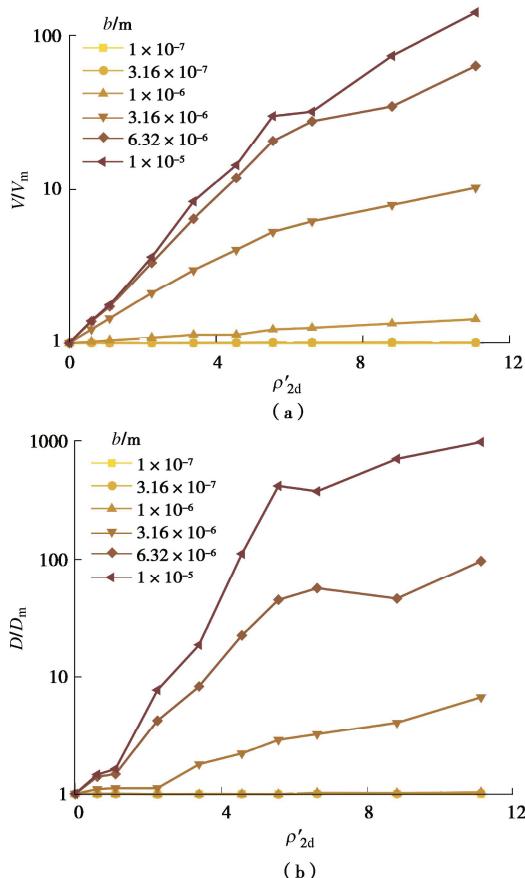


图 8 溶质传输系数-裂隙密度关系曲线

Fig. 8 Relationships between transport coefficients and fracture densities

由图 9 可知, 在开度较大时 ($k_m/k_f < 10^{-4}$) 随着裂隙分布离散系数逐渐增大, 溶质传输系数整体变化是先平稳后突降。因此可以根据裂隙分布离散系数的变化幅度判断裂隙网络的连通性, 这在裂隙分布离散系数为 5~100 左右时变化最为明显, 算例表明水动力弥散系数和溶质传输速度会在对应离散系数阈值前后出现突变, 据此可判断贯通通道形成与否。

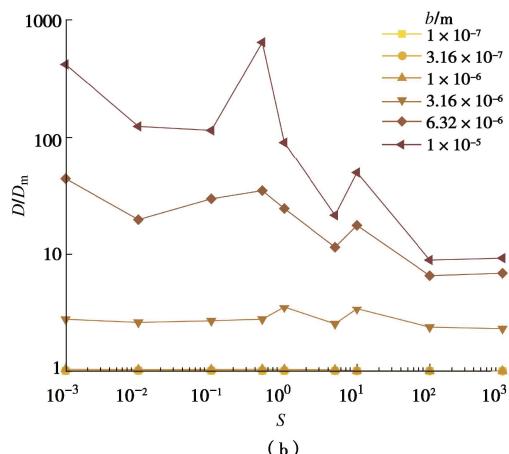
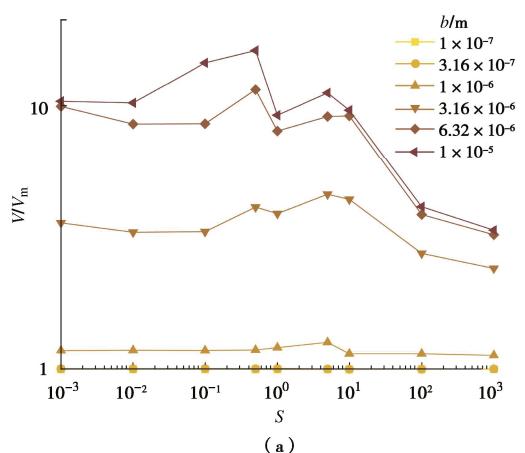


图 9 溶质传输系数-裂隙分布离散系数关系曲线

Fig. 9 Relationships between transport coefficients and fracture distribution discrete coefficients

由图 10 可知, 岩体溶质传输速度 V_t 在 $k_m/k_f > 10^{-3}$ 时, 裂隙密度增加没有使 V_t 发生明显变化, 当 $k_m/k_f < 10^{-3}$ 时 V_t 随裂隙密度增加发生明显的变化, 且开度越大, 溶质传输速度变化越明显, 在本文算例中, 变化范围最大跨越了两个数量级。在 D/D_m 变化过程中, 裂隙开度和水动力弥散系数 D 关系出现明显变化始于 $k_m/k_f = 10^{-4}$, 随着裂隙开度增大, D/D_m 的数值逐渐增大, 其变化范围最大跨越了近 3 个数量级。

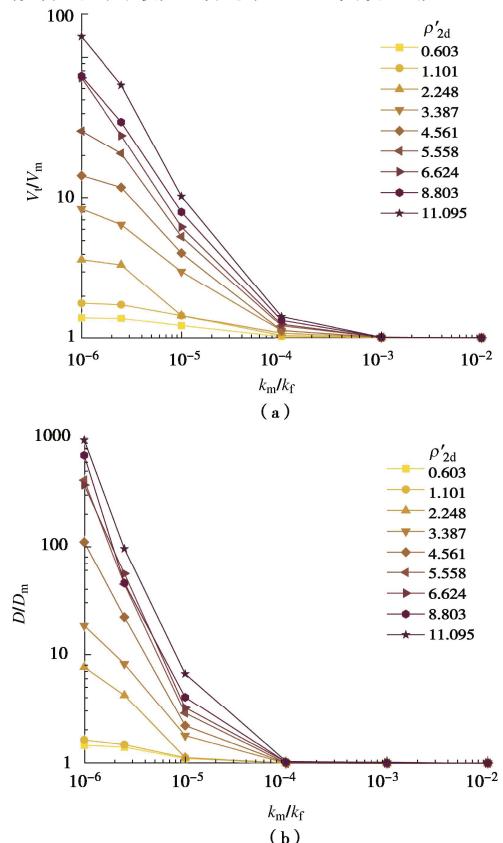


图 10 溶质传输系数与基质-裂隙相对渗透性关系曲线 (不同裂隙密度条件)

Fig. 10 Relationships between transport coefficients and relative permeability between matrix and fracture (different fracture densities)

图 11 表明, 不同裂隙开度情况下, 裂隙分布离散系数对 D/D_m 和 V_t/V_m 的影响, 与裂隙密度影响相似, 但是影响程度没有裂隙密度大。相同裂隙开度情况下, 裂隙分布离散系数变化对溶质传输速度影响较小, 不会发生数量级变化。由于裂隙分布离散系数并非直接对岩体溶质传输过程产生影响, 而是依据裂隙实际分布形成的传输路径连通性强弱来影响传输过程, 因此不同裂隙分布离散系数的裂隙网络模型特异性较强, 对传输系数的影响难以定量化分析。

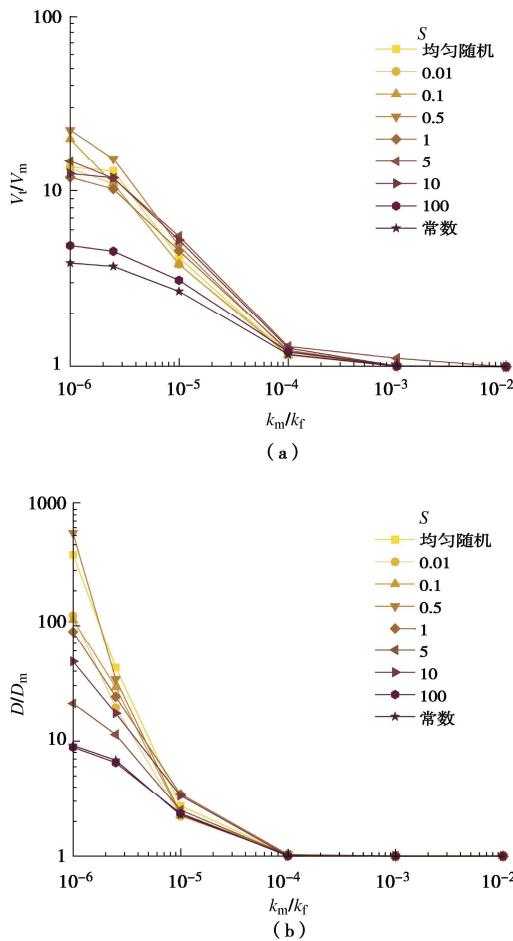


图 11 溶质传输系数与基质-裂隙相对渗透性关系曲线
(不同裂隙分布离散系数条件)

Fig. 11 Relationships between transport coefficients and relative permeability between matrix and fracture (different fracture distribution discreteness coefficients)

3 基于几何参数的传输预测模型

3.1 溶质传输系数定量表征

在选取溶质传输系数随裂隙网络几何特征变化的代表性工况基础上(裂隙数量 500 条, 开度 1×10^{-5} m), 分别对溶质传输速度和水动力弥散系数进行参数化分析(图 12), 得到分析结果如下:

$$V_t/V_m = 1 + \alpha(\rho'_{2d})^\beta \quad (14)$$

式中: 拟合系数 $\alpha = 0.244$, $\beta = 2.633$; $R^2 = 0.989$ 。由 2.3 节结果可知, 在分析裂隙密度时, 溶质传输速度与裂隙密度的变化关系可用类似幂函数形式公式对数值模拟结果进行拟合, 结果如式(14)所示。需注意的是, 因为在裂隙密度为 0 时, 裂隙网络模型退化为无裂隙模型, 此时 $V_t/V_m = 1$ 。因此在公式中, $\rho'_{2d} = 0$ 时, V_t/V_m 可以退化为 1。

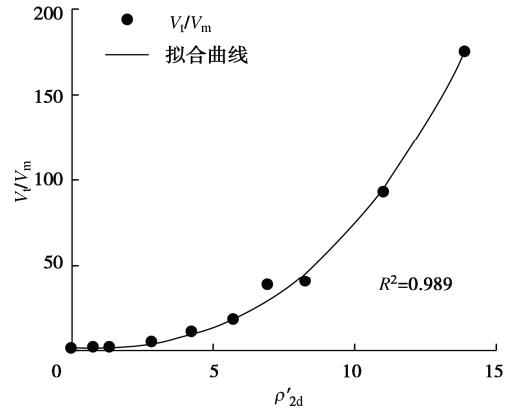


图 12 溶质传输速度-裂隙密度关系拟合表征
Fig. 12 Solute transport velocity as a function of fracture density
水动力弥散系数与裂隙密度的变化关系类似于生长函数(图 13), 拟合结果为

$$D/D_m = 1 + \frac{\delta(\rho'_{2d})^\varepsilon}{\varphi + \gamma(\rho'_{2d})^\varepsilon} \quad (15)$$

式中: 拟合系数 $\delta = 893.089$, $\varepsilon = 5.742$, $\varphi = 27069.803$, $\gamma = 1$; $R^2 = 0.946$ 。与 V_t/V_m 类似, 当裂隙密度为 0 时退化为无裂隙模型, 也即 $\rho'_{2d} = 0$ 时, $D/D_m = 1$ 。

3.2 溶质传输预测模型构建

根据 1.1 节计算方法以及 3.1 节得出的拟合关系, 基于式(16), (17) 两个参数化模型, 结合裂隙开度和裂隙密度进行如下耦合分析:

$$V_t/V_m = f_{V_t} = 1 + \eta \lambda^{\lg b} (\rho'_{2d})^\nu \quad , \quad (16)$$

$$D/D_m = f_D = 1 + \varpi \vartheta^{\lg b} \frac{(\rho'_{2d})^\sigma}{\varsigma + (\rho'_{2d})^\sigma} \quad . \quad (17)$$

式中: 拟合系数 $\eta = 1.56 \times 10^8$, $\lambda = 53.537$, $\nu = 2.469$; $R^2 = 0.985$ (式(16)); 拟合系数 $\varpi = 1.967 \times 10^{29}$, $\vartheta = 1.855 \times 10^5$, $\sigma = 5.692$, $\varsigma = 24891.734$; $R^2 = 0.983$ (式(17))。

裂隙密度、裂隙开度与溶质传输速度关系拟合的空间曲面形式如图 14 所示, 当 $\rho'_{2d} > 2.5$ 时或 $b > 10^{-6}$ m 时, V_t/V_m 开始出现明显变化, 意味着在该区域内, 裂隙密度或裂隙开度已逐渐连通, 开始显著影响溶质传输过程。在裂隙开度 $b = 10^{-6}$ m 前后, V_t/V_m 变化幅度相差较大, 可据此判断裂隙部分逐渐占据溶质传输的优势控制地位。而在 $\rho'_{2d} = 2.5$ 时出现的参数突变, 可以结合 2.2 节分析判断岩体内部此时是否连通。

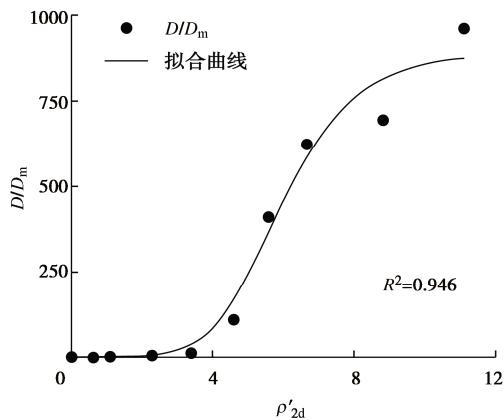


图 13 水动力弥散系数-裂隙密度关系拟合表征

Fig. 13 Hydrodynamic dispersion coefficient as a function of fracture density

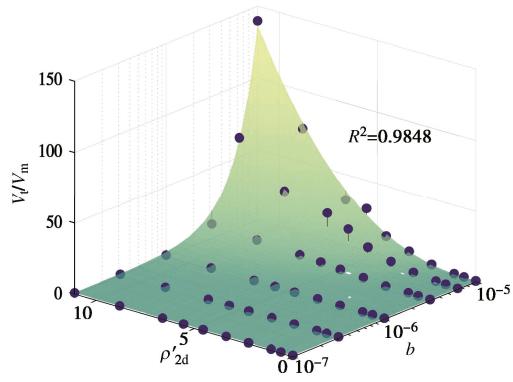


图 14 基于裂隙密度与开度的岩体溶质传输速度表征模型
Fig. 14 Characterization model for solute transport velocity based on fracture aperture & density

裂隙密度、裂隙开度与水动力弥散系数关系拟合所得空间曲面形式如图 15 所示。与 V_t/V_m 分析类似, 当 $\rho'_{2d} > 2$ 或 $b > 3.16 \times 10^{-6} \text{ m}$ 时, D/D_m 开始出现明显变化, 可以根据 $\rho'_{2d} = 2$ 或 $b = 3.16 \times 10^{-6} \text{ m}$ 这两个节点来判断裂隙网络内部连通与否, 以及基质和裂隙谁在溶质传输过程中占据主导地位。

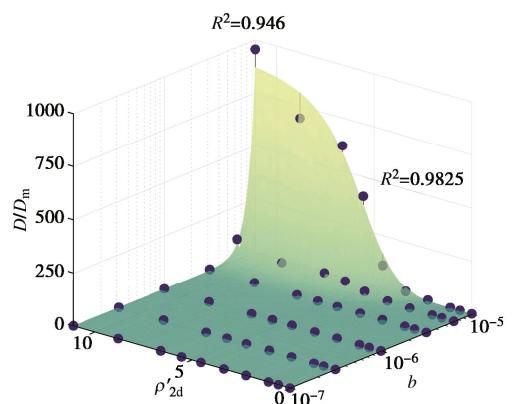


图 15 基于裂隙密度与开度的岩体水动力弥散系数表征模型

Fig. 15 Characterization model for hydrodynamic dispersion coefficient based on fracture aperture & density

将参数化水动力弥散系数和溶质传输速度 (式

(16), (17)) 代入式 (11), 可以构建出基于不同裂隙网络几何特征的溶质传输预测模型:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left[\frac{x - f_{V_t}(\rho'_{2d}, b)V_m t}{2\sqrt{f_D(\rho'_{2d}, b)D_m t}} \right] + \exp \left[\frac{f_{V_t}(\rho'_{2d}, b)V_m x}{f_D(\rho'_{2d}, b)D_m} \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{x + f_{V_t}(\rho'_{2d}, b)V_m t}{2\sqrt{f_D(\rho'_{2d}, b)D_m t}} \right] \right\}。 \quad (18)$$

式中: f_{V_t} (见式 (16)) 和 f_D (见式 (17)) 与裂隙岩体裂隙密度和裂隙开度大小有关, 对于仅存在基质模型 ($\rho'_{2d} = 0$), f_{V_t} 和 f_D 均可退化为 1。

式 (18) 可以依据裂隙几何信息直接预测岩体溶质宏观传输过程。为验证模型有效性, 通过该预测模型直接预测本文溶质传输过程的所有数值模拟结果, 并采用均方根误差 (RMSE) 评估预测结果与数值模拟结果之间的误差, 其计算方法如下:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\sum_{i=1}^N (C_{\text{simulation}} - C_{\text{model}})^2 / N}。 \quad (19)$$

式中: $C_{\text{simulation}}$ 为裂隙网络模型数值模拟结果; C_{model} 为式 (18) 预测结果, N 为裂隙网络模型数据点总数。

式 (19) 预测计算的误差评估效果如图 16 所示, 结果表明本文所提出的模型 (式 (19)) 预测误差维持在一个较低水平 (小于 0.04), 且对于不同裂隙几何特征的岩体溶质传输过程预测均表现出良好的性能。出现较大误差处是裂隙形成贯通通道阶段, 裂隙密度较小和较大的 RMSE 结果均小于裂隙密度中等的情况, 裂隙开度较大的 RMSE 结果大于裂隙开度较小的情况。因此, 本文所提出拟合公式最适用于裂隙数量较多, 裂隙岩体内部连通性良好的情况。

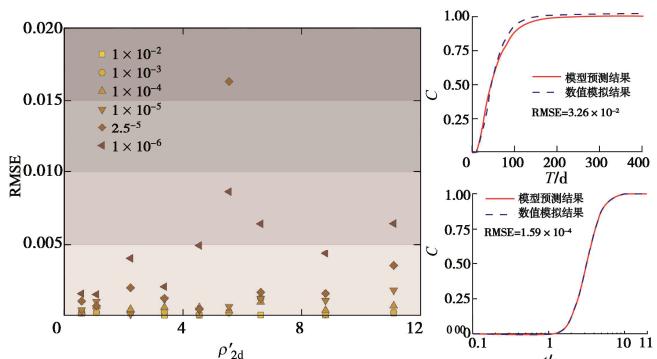


图 16 本文构建模型有效性评估

Fig. 16 Validation assessment of proposed model

需要说明的是, 仅采用本文涉及到的岩体样本集, 不足以充分验证所提预测模型的有效性和普适性。在进一步研究中, 还应该结合更多岩体样本的室内试验或者数值模拟结果, 对本文所提预测模型的有效性进行充分探讨。

相较于建模和求解成本高的数值模拟方法, 本文所构建的预测模型, 通过岩体裂隙关键几何特征参数, 来

直接计算并预测岩体溶质传输过程。因此, 尽管预测精度可能不及数值模拟, 但本文构建模型在预测时效性方面有着显著优势, 这对于快速、高效、低成本的预测和评估岩体溶质传输过程具有重要意义。此外, 本文构建预测模型定量刻画了岩体裂隙几何统计特征对岩体溶质传输过程的影响和控制机制, 为岩体结构演变与水化学信号演化关联机制研究奠定了理论基础。而上述关联机制, 在氡映震、同位素示踪变形破坏^[3, 27-28]等岩体灾害早期预警方面具有潜在应用价值。

4 结 论

本文研究了裂隙几何统计特征对岩体溶质传输过程的定量影响和控制机制, 建立了基于裂隙无量纲密度和平均开度的岩体关键传质系数参数化表征公式, 据此构建了基于裂隙网络几何特征参数的岩体溶质传输过程预测模型, 得到以下3点主要结论。

(1) 裂隙密度和平均开度在岩体溶质传输过程中起决定性控制作用, 而裂隙分布离散系数对溶质传输过程的影响程度, 则取决于特定裂隙网络形成的连通路径系统, 可根据传输系数突变阈值判断裂隙网络连通性与否。

(2) 岩体溶质传输系数与裂隙密度和开度之间存在较强的定量联系, 其中岩体水动力弥散系数与裂隙密度成幂函数关系、与裂隙开度成指数函数关系, 岩体溶质传输速度与裂隙密度成生长函数关系、与裂隙开度成指数函数关系。

(3) 基于水动力弥散系数和溶质传输速度的参数化表征公式, 构建岩体溶质传输过程预测模型, 能够仅依据裂隙网络几何特征参数和水动力条件, 实现溶质传输过程的快速解析预测。

本文研究成果对于岩体物质传输迁移的实时预测、岩体结构演变与水化学信号演化关联机制研究具有重要理论意义, 在基岩裂隙含水层污染风险评估与治理、水化学信号示踪岩体灾变及早期预警方面具有潜在应用价值。

利益冲突声明/Conflict of Interests: 所有作者声明不存在利益冲突。All authors disclose no relevant conflict of interest.

作者贡献/Authors' Contributions: 周佳庆完成论文构思、方案设计; 佴宇鏖和周佳庆参与模拟方法研究、有效性验证; 佴宇鏖、周佳庆、郭利国完成结果分析与理论建模; 佴宇鏖、周佳庆、李长冬、郭利国、甘馥硕、朱寅斌参与论文的写作和修改。所有作者均阅读并同意最终稿件的提交。ZHOU Jiaqing conceived the research idea and designed the study framework. NAI Yu'ao and ZHOU Jiaqing developed the simulation methodology and conducted validation experiments. NAI Yu'ao,

ZHOU Jiaqing, and GUO Liguo performed data analysis and theoretical modeling. All authors including NAI Yu'ao, ZHOU Jiaqing, LI Changdong, GUO Liguo, GAN Fushuo, ZHU Yinbin participated in manuscript preparation, critical revisions, and final approval of the submitted version.

参 考 文 献:

- WAN J M, TOKUNAGA T K, BROWN W, et al. Bedrock weathering contributes to subsurface reactive nitrogen and nitrous oxide emissions[J]. *Nature Geoscience*, 2021, **14**: 217-224.
- BAUER S J, GARDNER W P, LEE H. Release of radiogenic noble gases as a new signal of rock deformation[J]. *Geophysical Research Letters*, 2016, **43**(20): 10688-10694.
- MALDANER C H, MUNN J D, GREEN B A, et al. Quantifying groundwater flow variability in a poorly cemented fractured sandstone aquifer to inform in situ remediation[J]. *Journal of Contaminant Hydrology*, 2021, **241**: 103838.
- 郭永海, 杨天笑, 刘淑芬. 高放废物处置库甘肃北山预选区水文地质特征研究[J]. *铀矿地质*, 2001, **17**(3): 184-189. (GUO Yonghai, YANG Tianxiao, LIU Shufen. Hydrogeological characteristics of Beishan preselected area, Gansu province for China's high-level radioactive waste repository[J]. *Uranium Geology*, 2001, **17**(3): 184-189. (in Chinese))
- MEDINA R, DETWILER R L, PRIOL R, et al. Settling and mobilization of sand-fiber proppants in a deformable fracture[J]. *Water Resources Research*, 2018, **54**(12): 9964-9977.
- PHILIP J R. Dynamics of Fluids in Porous Media [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1973, **61**(1): 206-208.
- TANG D H, FRIND E O, SUDICKY E A. Contaminant transport in fractured porous media: Analytical solution for a single fracture[J]. *Water Resources Research*, 1981, **17**(3): 555-564.
- SUDICKY E A, FRIND E O. Contaminant transport in fractured porous media: analytical solutions for a system of parallel fractures[J]. *Water Resources Research*, 1982, **18**(6): 1634-1642.
- MAHMOUDZADEH B, CRAWFORD J. Modelling simultaneous transport of natural and anthropogenic radionuclides in fractured media: Diffusion into the heterogeneous layered rock matrix for an arbitrary length decay chain[J]. *Journal of Contaminant Hydrology*, 2023, **256**: 104138.
- LIU R C, LI B, JIANG Y J, et al. Review: Mathematical

- expressions for estimating equivalent permeability of rock fracture networks[J]. *Hydrogeology Journal*, 2016, **24**(7): 1623-1649.
- [11] 李博, 黄嘉伦, 钟振, 等. 三维交叉裂隙渗流传质特性数值模拟[J]. 岩土力学, 2019, **40**(9): 3670-3678. (LI Bo, HUANG Jialun, ZHONG Zhen, et al. Numerical simulation on hydraulic and solute transport properties of 3D crossed fractures[J]. *Rock and Soil Mechanics*, 2019, **40**(9): 3670-3678. (in Chinese))
- [12] ODA M. Permeability tensor for discontinuous rock masses[J]. *Géotechnique*, 1985, **35**(4): 483-495.
- [13] BODIN J, POREL G, DELAY F. Simulation of solute transport in discrete fracture networks using the time domain random walk method[J]. *Earth and Planetary Science Letters*, 2003, **208**(3/4): 297-304.
- [14] KHAFAGY M M, ABD-ELMEGEED M A, HASSAN A E. Simulation of reactive transport in fractured geologic media using random-walk particle tracking method[J]. *Arabian Journal of Geosciences*, 2020, **13**(1): 34.
- [15] 何忱, 姚池, 邵玉龙, 等. 低裂隙密度条件下三维裂隙岩体的有效渗透性[J]. 清华大学学报(自然科学版), 2021, **61**(8): 827-832. (HE Chen, YAO Chi, SHAO Yulong, et al. Effective permeability of three-dimensional fractured rock with low fracture densities[J]. *Journal of Tsinghua University (Science and Technology)*, 2021, **61**(8): 827-832. (in Chinese))
- [16] ZHOU J-Q, WANG L C, CHEN Y-F, et al. Mass transfer between recirculation and main flow zones: is physically based parameterization possible?[J]. *Water Resources Research*, 2019, **55**(1): 345-362.
- [17] BERKOWITZ B, CORTIS A, DENTZ M, et al. Modeling non-Fickian transport in geological formations as a continuous time random walk[J]. *Reviews of Geophysics*, 2006, **44**(2): RG2003.
- [18] KANG P K, DENTZ M, LE BORGNE T, et al. Spatial Markov model of anomalous transport through random lattice networks[J]. *Physical Review Letters*, 2011, **107**(18): 180602.
- [19] ZHOU J Q, GUO L G, JIAO J J, et al. Geometry-based prediction of solute transport process in single 3D rock fractures under laminar flow regime[J]. *Journal of Geophysical Research (Solid Earth)*, 2023, **128**(3): e2022JB025542.
- [20] ZHOU J-Q, GUO L-G, JIAO J J, et al. Can geometric parameters enable direct prediction of non-fickian transport in rock fractures across diverse flow regimes?[J]. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 2024, **129**(2): e2023JB027695.
- [21] MATTHÄI S K, BELAYNEH M. Fluid flow partitioning between fractures and a permeable rock matrix[J]. *Geophysical Research Letters*, 2004, **31**(7): 2003GL019027.
- [22] WANG Z C, GUO J F, QIAO L P, et al. Matrix-fracture flow transfer in fractured porous media: experiments and simulations[J]. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 2022, **55**(4): 2407-2423.
- [23] HAMZEHPOUR H, MOURZENKO V V, THOVERT J F, et al. Percolation and permeability of networks of heterogeneous fractures[J]. *Physical Review E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 2009, **79**(3 pt 2): 036302.
- [24] BALBERG I, ANDERSON C H, ALEXANDER S, et al. Excluded volume and its relation to the onset of percolation[J]. *Physical Review B*, 1984, **30**(7): 3933-3943.
- [25] 郑俊, 邓建辉, 魏进兵. 不连续面产状 Fisher 分布拟合度检验方法的改进[J]. 岩石力学与工程学报, 2015, **34**(8): 1561-1568. (ZHENG Jun, DENG Jianhui, WEI Jinbing. An improved method of goodness-of-fit test for fisher distribution to discontinuity orientations[J]. *Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering*, 2015, **34**(8): 1561-1568. (in Chinese))
- [26] LI X X, LI D Q, XU Y, et al. A DFN based 3D numerical approach for modeling coupled groundwater flow and solute transport in fractured rock mass[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2020, **149**: 119179.
- [27] INGEBRITSEN S E, MANGA M. Hydrogeochemical precursors[J]. *Nature Geoscience*, 2014, **7**(10): 697-698.
- [28] GIRAUT F, SCHUBNEL A, PILI É. Transient radon signals driven by fluid pressure pulse, micro-crack closure, and failure during granite deformation experiments[J]. *Earth and Planetary Science Letters*, 2017, **474**: 409-418.