

DOI: 10.11779/CJGE20240845

# 考慮孔徑和物化特性的胶结型能源黏土离散元模拟方法

张旭东<sup>1</sup>, 蒋明镜<sup>\*2</sup>

(1. 天津大学建筑工程学院, 天津 300072; 2. 苏州科技大学土木工程学院, 江苏 苏州 215009)

**摘要:** 甲烷水合物是重要的清洁能源, 广泛分布于中国南海的黏质储层(能源黏土)中。能源黏土的力学行为受多场影响(温度-反压-化学)和多种因素(孔径-水合物饱和度-黏土物化特性)的影响, 力学特性复杂。研发能反映能源黏土在复杂应力路径下力学响应的数值分析方法, 对中国甲烷水合物安全开采至关重要。首先引入水化学势建立了考虑孔径和黏土物化特性影响的水合物强度、刚度半理论公式, 并将这一公式引入到结构性黏土的接触模型中, 建立了考虑孔径和物化特性影响的胶结型能源黏土接触模型。并在离散元模拟过程中通过初始组构参数建立了孔径的识别方法, 将计算得到的孔径与接触模型关联, 模拟了等向压缩试验、常规三轴试验和真三轴试验, 分析了胶结型能源黏土的压缩特性, 强度和剪切特性的影响, 并与现有研究成果进行对比, 结果表明离散元模拟得到的试验结果与室内试验结果一致。离散元模拟结果分析表明较高的水合物饱和度和含水率, 较低的温度均会增大胶结型能源黏土的屈服强度和峰值强度, 较高的水合物饱和度会显著增强能源黏土的剪胀性, 且硬(软)化规律和临界状态强度与中主应力系数密切相关。

**关键词:** 胶结型能源黏土; 离散元模拟; 力学行为

中图分类号: TU432 文献标识码: A 文章编号: 1000-4548(2025)12-2456-12

作者简介: 张旭东(1995—), 男, 博士研究生, 主要从事能源岩土工程问题方向的研究。E-mail: xudongzhang@tju.edu.cn。

## Discrete element simulation method for clayey grain-cementing type methane hydrate bearing sediment considering pore size and physicochemical properties

ZHANG Xudong<sup>1</sup>, JIANG Mingjing<sup>2</sup>

(1. School of Architecture and Engineering, Tianjin University, Tianjin 300072, China; 2. School of Civil Engineering, Suzhou University of Science and Technology, Suzhou 215009, China)

**Abstract:** Methane hydrate (MH) is an important clean energy resource, widely distributed in clayey type methane hydrate bearing sediment (MHBS) in the South China Sea. The mechanical behavior of clayey type MHBS is affected by many factors, such as temperature fields, back pressure fields, chemical fields, pore size, MH saturation, physicochemical properties of clay, which is significantly different from that of sandy type MHBS. Therefore, the development of numerical analysis methods reflecting the mechanical response of clayey type MHBS under complex loading paths is crucial for the safe exploitation of MH. This work establishes a semi-theoretical equation of strength and stiffness of MH considering pore size and physicochemical properties by introducing the potential of water, and then this equation is introduced into the existing contact model of structural clay. The algorithm of the pore size is developed by the initial fabric parameters associated with the contact model, and the isotropic compression tests, the conventional triaxial tests and the true triaxial tests are conducted, and the effect of MH saturation, temperature and physicochemical characteristics (represented by water content) on mechanical behavior of clayey type MHBS are analyzed. The results show that the simulation results are consistent with those of experiments. Higher MH saturation and water content, as well as lower temperatures increase the yield strength and peak strength of clayey type MHBS, and higher MH saturation will significantly enhance shear dilation of clayey type MHBS. The true triaxial tests show that the hardening rule and the critical state strength are closely related to the principal stress coefficient.

**Key words:** clayey grain-cementing type methane hydrate bearing sediment; distinct element method; mechanical behavior

基金项目: 国家自然科学基金重点项目(52331010); 国家自然科学基金重大项目课题(51890911) This work was supported by Key Program of National Natural Science Foundation of China (Grant No.52331010), and Major Program of National Natural Science Foundation of China (Grant No.51890911).

收稿日期(Received): 2024-08-20 修回日期(Revised): 2025-03-05 接受日期(Accepted): 2025-03-13 网络出版日期(Online): 2025-03-14

\*通信作者 (E-mail: mingjing.jiang@mail.usts.edu.cn)

## 0 引言

含天然气水合物的深海沉积物可称为深海能源土<sup>[1]</sup>。深海能源土的力学行为受温度场-反压场-化学场的影响, 也会受到水合物饱和度、围压和水合物赋存形式等多种因素的影响, 因此, 深海能源土是一种力学特性复杂的疑难土<sup>[2-3]</sup>, 其力学行为对水合物的安全开采至关重要, 制约着中国天然气水合物的商业开采。

目前各国关于水合物的开采和研究经验主要建立在砂质能源土上, 但中国南海海域的能源土主要以粉质黏土、黏质粉砂为主(如神狐海域和琼东南盆地)<sup>[4-5]</sup>。相较于砂质能源土, 能源黏土具有更小的孔径和显著的物化特性, 如 Smith 等<sup>[6]</sup>基于试验研究建立了孔径对甲烷水合物的相平衡边界压力和温度的影响。Ren 等<sup>[7]</sup>给出了黏土在不同含水率下的相平衡关系, 表明黏土电化学特性导致的水化层会对黏土相平衡关系产生影响。这些相平衡特性的改变会显著影响能源土的力学行为, 但其影响规律尚且未知。如果盲目地利用开采砂质能源土中水合物的理论及技术去开采能源黏土的水合物, 很容易导致海底滑坡等工程问题。

针对这一问题, 国内外一些学者对深海能源黏土力学特性开展了一定的研究。

(1) 室内试验方面, 目前缺乏有效的取样技术手段, 因此一般都以重塑土配置成黏质能源土进行试验。王淑云等<sup>[8]</sup>、石要红等<sup>[9]</sup>和鲁晓兵等<sup>[10]</sup>基于南海海底黏土制成了含四氢呋喃水合物的黏土沉积物试样, 朱一铭<sup>[11]</sup>、骆汀汀<sup>[12]</sup>、和 Li 等<sup>[13]</sup>基于高岭土与甲烷水合物制备了深海能源黏土, 用于深海能源黏土的应力-应变关系和强度特性的研究。上述试验由于对试样的重塑, 破坏了能源黏土原有的结构, 且存在制样均匀以及保持温压条件等诸多难题, 难以准确揭示能源黏土的复杂力学行为。

(2) 理论分析方面, 朱一铭<sup>[11]</sup>和 Li<sup>[13]</sup>基于三轴数据对 Duncan-Chang 模型进行修正, 建立了深海能源黏土的本构模型。但上述理论分析都是基于宏观力学响应规律进行总结, 并未考虑修正参数实际意义。

(3) 现有的能源土数值模拟方法主要适用于以网格单元为基础的有限元法或者有限差分法, 和以离散单元为基础的离散元法。传统的网格法尚且缺乏有效的本构模型, 无法针对能源黏土展开边值试验。离散元可以分析能源土的宏微观特性, 目前主要以能源砂土为主。如 Jiang 等<sup>[3, 14]</sup>将离散元中的钢球简化为砂土颗粒, 分析了水合物赋存形态和盐度的影响。此外, Li 等<sup>[15]</sup>通过团簇的方法模拟了能源粉土的力学行为, 但是受限于计算效率, 团簇内部的颗粒数有所限制。离散元模拟黏土可分为团簇法和团粒替代法, 其中,

团簇法通过钢球形成的团簇模拟单个黏土片的力学行为, 这种模拟方法也受计算效率的影响, 且适用于黏土团粒尺度力学行为的研究, 如文献[16, 17]。团粒替代法将黏土团粒简化为球体, 通过球体的破碎模拟团粒内部孔隙的可压缩性, 具有较高的模拟效率。牛昂懿<sup>[18]</sup>利用这种方法模拟了结构性黏土的力学行为, 取得了较好的效果。在能源黏土的模拟中, 韩振华等<sup>[19]</sup>采用平行胶结模型开展了深海能源黏土三轴压缩试验的离散元模拟, 但其接触模型尚未考虑黏土颗粒间的微观作用, 无法精准反映黏土的力学行为。李政<sup>[20]</sup>建立了考虑孔径和盐度影响的胶结型能源黏土微观接触模型, 通过离散元法模拟能源黏土的应力应变关系。但模型中将黏土孔隙尺寸作为参数输入到接触模型中, 未考虑离散元模拟中的实际孔径大小, 只可以在定性层面反映孔径对能源黏土力学行为的影响规律。

由此可见, 研发能反映能源黏土在多场(温度-反压-化学)、多种因素(孔径-水合物饱和度-黏土物化特性)下和复杂应力路径下的数值分析方法至关重要。本文尝试建立一种考虑孔径和物化特性(以含水率进行表征)影响的胶结型能源黏土接触模型, 并在离散元模拟中考虑了初始组构与孔径的关系, 将这一孔径代入到接触模型中, 模拟胶结型能源黏土的力学特性, 与已有的能源黏土物理试验结果进行对比, 并分析饱和度、应力路径和物化特性对能源黏土力学特性的影响, 为建立胶结型能源黏土本构模型提供了有效途径。

## 1 考虑孔径和物化特性的能源黏土离散元接触模型

离散元接触模型包括颗粒间接触模型和胶结模型。为了反映黏土颗粒之间的电化学作用力, 将团粒简化为球体, 并将黏土团粒之间由黏土片簇形成的电化学作用力通过积分引入球体之间的接触模型中, 反映黏土团粒间力学行为。将黏土团粒之间的水合物考虑为胶结物质, 将水合物的力学行为引入作为胶结模型。在此基础上, 引入团粒破碎准则模拟黏土团粒的破损和变形行为。

### 1.1 粒间接触模型<sup>[14]</sup>

颗粒接触处为一半径为  $R_c = \beta R$  的圆形截面, 其中  $\beta$  为接触半径系数, 其意义详见文献[21]。 $R = 2R_1R_2/(R_1 + R_2)$ ,  $R_1$ ,  $R_2$  为两接触颗粒半径。

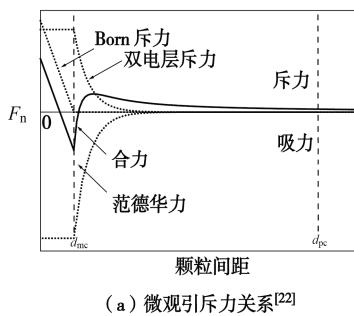
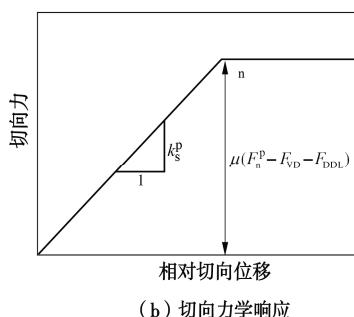
黏土片之间的法向力学作用包括 Born 力学接触力、双电层斥力和范德华引力<sup>[22-24]</sup>。为了简化黏土颗粒间的法向力变化规律, 参照 Anandarajah<sup>[25]</sup>提出的界定不同物理化学微观力变化特征的两个截断距离, 即物理化学截断距离  $d_{pc}$  及力学截断距离  $d_{mc}$  分别引入 3

种作用力的作用范围。在此基础上, 离散元模拟过程中两球体之间的力学行为基于经典的 Gouy-Chapman 双电层模型理论和 Niu 对团粒接触处受力的解析解结果<sup>[26]</sup>, 给出了考虑表面粗糙影响的微观接触模型, 其法向力合力的计算方法为

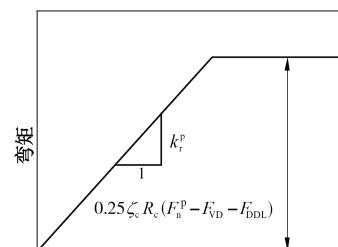
$$F_n = \begin{cases} 0 & (L_{pc} > d_{pc}) \\ F_{vd} + F_{ddl} = -\frac{A}{12L_{pc}^3}(2R_c^2 + L_{pc}R_c) + \\ \frac{64\pi n_0 k_0 T}{\kappa}(\kappa R_c^2 + R_c)\gamma_0^2 \exp(-\kappa L_{pc}) & (d_{mc} < L_{pc} \leq d_{pc}) \\ F_B + F_{vd} + F_{ddl} = k_n^p(d_{mc} - L_{pc}) - \frac{A}{12d_{mc}^3}(2R_c^2 + d_{mc}R_c) + \\ \frac{64\pi n_0 k_0 T}{\kappa}(\kappa R_c^2 + R_c)\gamma_0^2 \exp(-\kappa d_{mc}) & (L_{pc} \leq d_{mc}) \end{cases} \quad (1)$$

式中:  $F_{vd}$  为范德华力;  $F_{ddl}$  为双电层斥力;  $F_B$  为 Born 斥力, 颗粒间距  $L_{pc} < d_{mc}$  时计入 Born 斥力, 范德华引力和双电层斥力。 $d_{mc} < L_{pc} \leq d_{pc}$  时计入范德华引力和双电层斥力;  $A$  为 Hamaker 常数;  $n_0$  为黏土表面零电势位的离子浓度, 由表面电势  $\varphi_0$  唯一确定, 推导过程见文献[26];  $k_0$  为波兹曼常数;  $T$  为温度;  $1/\kappa$  双电层厚度;  $R_c$  为计算接触面积外范德华力的当量半径, 计算方法参考文献[27]。

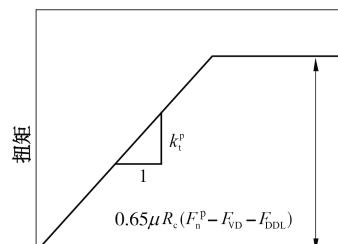
离散元模拟过程中的微观引斥力关系如图 1 (a) 所示。接触切向力  $F_s^p$ , 弯矩  $M_r^p$  和扭矩  $M_t^p$  力学响应如图 1 (b) ~ (d) 所示。图 1 中,  $k_s^p$ ,  $k_r^p$  和  $k_t^p$  分别为切向, 弯转向和扭转向刚度,  $k_s^p = k_n^p/\xi$ ,  $k_r^p = 0.25k_n^p R_c^2$ ,  $k_t^p = 0.5k_s^p R_c^2$ ,  $\xi$  为颗粒接触的法切向刚度比。 $\zeta_c$  为颗粒局部破碎系数,  $\mu$  为颗粒摩擦系数<sup>[21]</sup>。

(a) 微观引斥力关系<sup>[22]</sup>

(b) 切向力学响应



(c) 弯转向力学响应



(d) 扭转向力学响应

图 1 微观接触力学响应

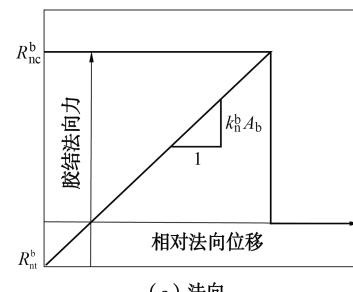
Fig. 1 Microscopic mechanical behaviors of contact

## 1.2 粒间胶结模型

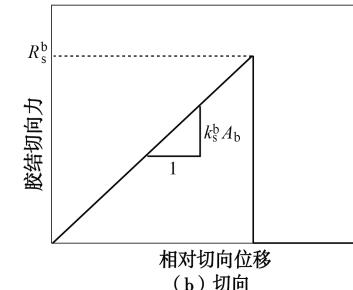
假设水合物作为柱状胶结物连接两球形颗粒, 传力过程中胶结物承受的法向力  $F_n^b$ , 切向力  $F_s^b$ , 弯矩  $M_r^b$  和扭矩  $M_t^b$  水合物在 4 个方向的应力应变关系见图 2。

图 2 中  $k_n^b$  和  $k_s^b$  为法向胶结刚度和切向胶结刚度, 通过串联弹簧刚度的计算方法, 考虑胶结物宽度和厚度对刚度的影响, 计算公式可参考文献[28]。 $A_b$  为胶结截面积,  $I_b$  和  $J_b$  为胶结截面的惯性矩和极惯性矩。

胶结物的强度包面的计算公式参考文献[29], 强度包面中考虑了胶结物的形状和加载路径的影响。



(a) 法向



(b) 切向

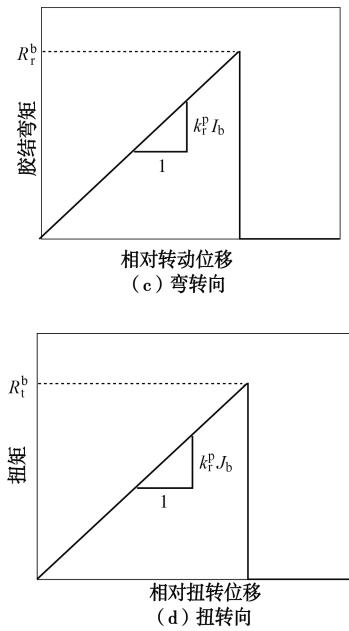


图 2 胶结力学响应

Fig.2 Mechanical behaviors of bond

### 1.3 沉积物孔径和物理化学性质影响下粒间水合物强度和刚度计算方法

甲烷水合物强度  $q_{\max}$  和刚度  $E$  计算方法参考 Hyodo 等<sup>[30]</sup>和 Jiang 等<sup>[14]</sup>提出的计算公式, 计算方法为

$$q_{\max} / q_0 = 69.38 \cdot L, \quad (2)$$

$$E / E_0 = 888.78 \cdot L + 150.49. \quad (3)$$

式中:  $L$  为温度  $T$ -压力  $P$  图上的温度压力点到相平衡线之间的距离;  $q_0 = 1 \text{ MPa}$  和  $E_0 = 1 \text{ MPa}$  分别为单位强度和单位刚度。

甲烷水合物相平衡线在沉积物中的表达式为<sup>[31-32]</sup>

$$\ln \frac{P}{P_0} = \frac{H}{RZ_g} \cdot \frac{T_0}{T} + \ln(a_w) + \ln(a_0). \quad (4)$$

式中:  $R$  为气体常数;  $Z_g$  气体压缩系数;  $H$  为潜热。 $\ln(a_w)$  为水活度, 受孔径, 溶液中离子的含量及类型和黏土的物理化学特性影响, 可以通过水化学势  $\eta_w$  计算<sup>[33]</sup>,  $\Delta \ln(a_w) = \Delta \eta_w / RT$ 。

孔径对水化学势  $\mu_{sa}$  的影响与 Young-Laplace 公式相关<sup>[34]</sup>, 沉积物矿物表面的水化层中电场也会对水化学势  $\mu_{ad}$  产生影响<sup>[35]</sup>, 计算公式为

$$\mu_{sa} = V_w \frac{2 \cos \phi E_{hw}}{r_t}, \quad (5)$$

$$\mu_{ad} = -\frac{N}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \left( \alpha + \frac{\eta^2}{3k_0 T} \right) E(x)^2. \quad (6)$$

式中:  $V_w$  为液体的摩尔体积;  $r_t$  为孔径;  $\phi$  为水-颗粒接触角;  $E_{hw}$  为水合物-水界面能;  $N$  为阿伏伽德罗常数;  $\varepsilon_r$  为介质的相对介电常数;  $\varepsilon_0$  为真空介电常数;  $\alpha$  为极化的偶极子;  $\eta$  为偶极矩;  $E(x)$  为距离黏土表

面一定距离的电场,

$$E(x) = \sqrt{\frac{2RTc_0}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \left[ \exp\left(\frac{z^i F \varphi(x)}{RT}\right) - 1 \right]}. \quad (7)$$

式中:  $F$  为法拉第常量;  $c_0$  为溶液中的离子浓度;  $z^i$  为离子价态;  $\varphi(x)$  为距离黏土表面一定位置处的电势, 可表示为  $\varphi(x) = \varphi_0 e^{-\kappa x}$ , 则由矿物表面的水化层中电场影响的水化学势为

$$\mu_{ad} = \frac{-2Nc_0 RT \left( \alpha + \frac{\eta^2}{3k_0 T} \right) \left[ \exp\left(\frac{z^i F \varphi_0 e^{-\kappa x}}{RT}\right) - 1 \right]}{\left( \varepsilon_r \varepsilon_0 \right)^2}. \quad (8)$$

式中:  $x$  为距离黏土表面的距离。

根据文献[36], 在黏土表面处一定距离处由于结合水层中水分子相对固定容易水化, 使得此处开始形成水合物。因此, 引入一个水活度变化零点, 定义在此处的位置为临界计算距离  $x_{cri}$ , 取值根据黏土矿物而定, 对应的含水率和结合水含量分别  $w_{cri}$  和  $w_{\xi_w}$ ,  $\xi_w = 0.7$  为结合水转化率。因此, 不同含水率下水活度的计算位置可表示为  $x = x_{cri} (w_{\xi_w} / w_{cri})^{1/3}$ 。

## 2 能源黏土离散元模拟方法

第 1 节详细介绍了考虑孔径和物化特性的胶结型能源黏土接触模型, 由第 1 节可知, 离散元模拟过程中需要精确计算颗粒间净孔隙体积、水合物体积, 将其与接触模型中的孔径值关联, 便可以模拟不同孔隙尺寸下的胶结型能源黏土。其中, 水合物体积的计算同时可以确定胶结型能源黏土的饱和度, 用于模拟不同饱和度下能源黏土的力学行为。

### 2.1 计算单元体孔径识别方法

真实土体中的孔径分布十分复杂, 难以准确得到孔径分布的理论解。因此, 将孔隙与周围的土颗粒视为局部单元体, 通过分析颗粒排列角度、胶结形状与孔隙尺寸的关系, 计算局部单元体孔隙体积, 并通过制样完成后的初试组构参数近似得到了宏观角度下试样的平均孔径。

Cooke 等<sup>[37]</sup>等推导了如图 3 所示下几种特殊排列下的孔隙与颗粒单元体的孔隙率计算公式。计算所得的孔隙率如表 1 所示。在此基础上, 将图 4 视为带有胶结的计算单元体, 可以得到在单元体局部坐标下含胶结下任一排列角的净孔隙体积  $V_{WEV}$  的计算公式:

$$V_{WEV} = 8 \cos(\theta') \cos(w') \cos(\eta') \cdot$$

$$(R + m\lambda_b R)^3 \cdot -\frac{4\pi}{3} R^3 - V_{MHi}. \quad (9)$$

式中:  $\theta'$ ,  $w'$  和  $\eta'$  分别为颗粒在 3 个方向的转角;  $\lambda_b$  为胶结半径因子, 用于表征胶结圆柱半径的大小;  $m$  为胶结的临界长细比, 用于表征胶结厚度;  $V_{MHi}$  为颗粒间水合物的体积计算方法,  $i=1,2$ , 参考文献[14],

$V_{\text{MH1}}$  和  $V_{\text{MH2}}$  分别适用于颗粒之间无重叠的情况和有重叠的情况。

对应于无胶结情况下的孔隙体积  $W_{\text{VE}}$  计算公式为

$$W_{\text{VE}} = 8 \cos(\theta') \cos(w') \cos(\eta') \cdot (R + m\lambda_b R)^3 - \frac{4\pi}{3} R^3 \quad (10)$$

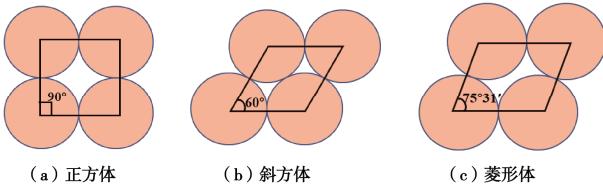


图 3 3 种特殊排列情况示意图

Fig. 3 Schematic diagram of particles in special arrangements

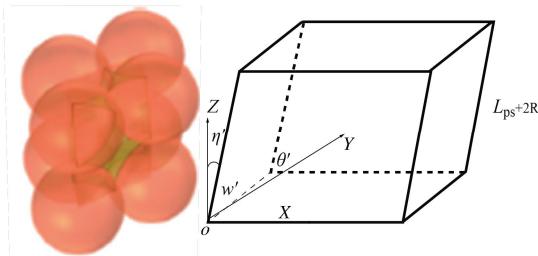


图 4 孔径计算简化图

Fig. 4 Schematic diagram of pore size calculation

表 1 3 种规则排列下孔隙率

Table 1 Porosity in special arrangements

排列方式	单元体积	孔隙率/%
正方体	$8R^3$	47.64
斜方体	$4\sqrt{3}R^3$	39.54
菱形	$8\sqrt{2}R^3$	25.95

上述孔隙单元体的计算是在局部坐标系下完成的, 模拟过程中需要转化为整体坐标系进行计算, 转化公式为

$$\begin{pmatrix} \cos(\theta) \\ \cos(w) \\ \cos(\eta) \end{pmatrix} = \mathbf{T} \begin{pmatrix} \cos(\theta') \\ \cos(w') \\ \cos(\eta') \end{pmatrix} \quad (11)$$

式中:  $\mathbf{T}$  为欧拉转化矩阵。

## 2.2 离散元模拟中孔径计算方法

针对试样整体, 计算每个孔隙单元体的孔径较为复杂且计算量较大, 通过统计的角度近似得到整体试样的孔径可模拟整体试样的平均孔径<sup>[38]</sup>。这里参考其具有统计意义的组构方程, 应用到孔径计算中, 可以近似得到试样的平均孔径。定义  $E(n)$  为  $n$  方向的颗粒接触概率密度, 则  $E(n)dn$  表示在  $(n, n+dn)$  范围内的颗粒接触概率。根据该定义,  $E(n)$  需满足以下条件:

$$\iint_{\Omega} E(n)dn = 1 \quad (12)$$

在离散介质中, 满足:

$$F_{ij} = \frac{1}{2N_c} \sum_{k=1}^{2N} n_i^k n_j^k = \langle n_i n_j \rangle \quad (13)$$

式中:  $N_c$  为离制样完成后的所有接触数;  $F_{ij}$  为制样完成后的初始组构;  $n_i^k$  为第  $k$  个接触的法向向量在  $i$  方向上的分量。为了反映接触方向向量的在 3 个主轴方向上的分量, 分别对 3 个方向上分量的分布密度求期望值, 即可反映 3 个分量的平均分布特征:

$$\lambda_i = \frac{1}{2N_c} \sum_{k=1}^{2N} (n_i^k n_i^k) = F_{ii} \quad (14)$$

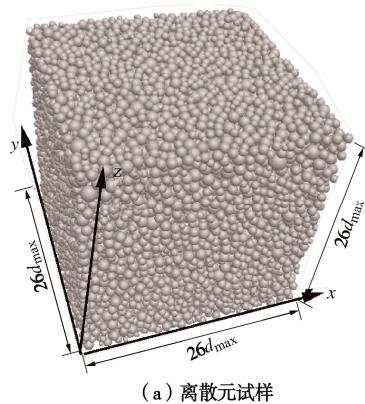
式中:  $i$  为三维坐标系下的 3 个主轴方向,  $i=1, 2, 3$ 。

将式(14)计算得到的统计组构参数代入到式(9), (10) 中, 即可得到离散元模拟时中的孔隙尺寸, 进一步将这一尺寸引入接触模型中, 可模拟实际孔径下胶结型能源黏土的力学行为。

## 3 能源黏土离散元试样制备与模拟

### 3.1 离散元试样制备

采用分层欠压法分 5 层进行制样<sup>[39]</sup>, 加载边界采用刚墙, 忽略颗粒与墙体间的摩擦。离散元试样以及使用的级配如图 5 所示, 团粒的平均粒径  $d_{50} = 10 \mu\text{m}$ 。ASTM 标准及 Head 的研究<sup>[40-41]</sup>建议试样的尺寸与最大颗粒粒径之比大于 10。此外, Collop 等<sup>[42]</sup>提出影响胶结体力学性质的最少颗粒数量为 20000。因此, 本文制样时的颗粒数为 20040 个。试样尺寸与颗粒最大粒径比值为 26。同时满足颗粒数量的要求和粒径比值的要求。制样中的法切向刚度比  $\xi = 1.5$ , 局部阻尼系数为 0.7, 颗粒局部破碎系数  $\zeta_c = 2.1$ , 颗粒摩擦系数  $\mu = 0.5$ , 接触半径系数  $\beta = 0.4$ , 数值取值参考结构性黏土的标定成果<sup>[18]</sup>。试样生成后在 1 MPa 下进行各向同性压缩, 用于反映能源黏土的原位应力状态并形成稳定均匀的力链。试样加载过程中, 团粒会发生破坏, 其破坏准则和破坏后的子颗粒级配分布参考文献<sup>[43]</sup>。黏土团粒破碎参数的选取参考文献<sup>[18]</sup>的标定结果。



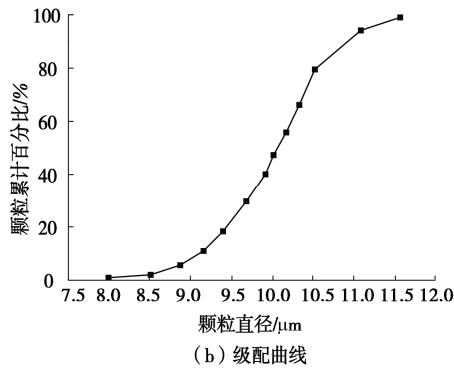


图 5 离散元试样及颗粒粒径级配

Fig. 5 Specimen and particle size distribution curve in simulation

### 3.2 黏土接触胶结模型参数

颗粒之间的电化学力的作用范围由黏土的两个截断距离定义。其中力学接触截断距离  $d_{mc} = 0.9 \text{ nm}$ ，物理化学截断距离  $d_{pc} = 25 \text{ nm}$ ，双电层厚度  $1/\kappa = 5 \text{ nm}$ 。Hamaker 常数  $A = 2 \times 10^{-20} \text{ J}$ ，表面电势  $\varphi_0 = 200 \text{ mV}$ 。胶结强度和模量根据式 (2), (3) 计算，胶结的法切向刚度比  $\xi_b = 1.5$ ，模量的折减系数  $\eta_E = 0.35$ ，拉压强度比  $\eta_\sigma = 0.1$ ，参考李政的标定结果<sup>[20]</sup>。临界长细比  $m$  根据水合物的饱和度而定。通过对水合物相平衡线数据进行拟合，得到水合物块体的相平衡线关系式为<sup>[14]</sup>

$$\ln(P/P_0) = \begin{cases} -35 \times (T_0/T) + 35 & (T \geq T_0) \\ -7.5 \times (T_0/T) + 7.5 & (T < T_0) \end{cases} \quad (15)$$

式中： $P_0 = 2.23 \text{ MPa}$ ， $T_0 = 273 \text{ K}$ 。计算水活度时，水合物-水界面能  $E_{hw} = 0.027 \text{ J/m}^2$ 。本文临界计算距离  $x_{cri} = 91 \text{ nm}$  和临界含水率  $w_{cri} = 30\%$  的取值根据蒙脱石的水活度进行标定，标定结果如图 6 所示，标定数据来自文献<sup>[44]</sup>。

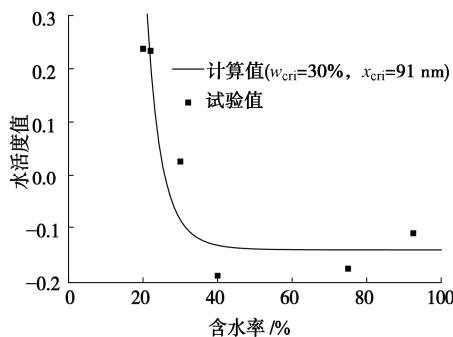


图 6 不同含水率下的水活度试验值和计算值

Fig. 6 Experimental and calculated values of water activity under different water contents

### 3.3 模拟过程

设置初始孔隙比  $e_0 = 1.5$  (零应力状态) 进行模拟。为了研究应力路径对能源黏土力学行为的影响，分别模拟了等向压缩试验，常规三轴试验和等  $p$  真三轴试验。试样首先等向压缩至孔隙比减小到 0.9。在此基础

上生成水合物胶结，然后进行等向压缩试验，墙体以应力控制。常规三轴试验对离散元试样加载到预定围压后，以准静态条件进行剪切，侧墙以应力控制，按照预定围压伺服。在真三轴试验中固结完成后，保持平均应力不变，上下墙体以应变控制，以准静态条件进行剪切，同时实时记录上的大主应力  $\sigma_1$ ，通过大主应和中主应力系数  $b$  以及恒定的平均应力  $p$ ，按照下式求得侧墙的伺服应力。

$$\left. \begin{aligned} \sigma_2 &= \frac{3p(1-b) + (2b-1)\sigma_1}{2-b}, \\ \sigma_3 &= \frac{3p - (1+b)\sigma_1}{2-b}. \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

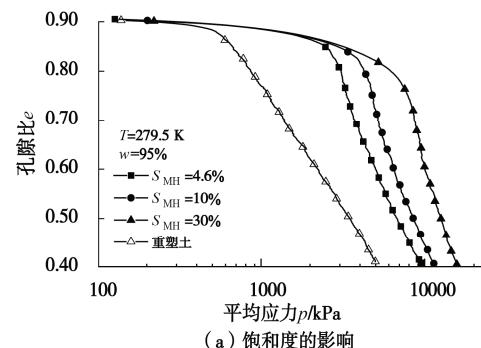
## 4 能源黏土模型验证及力学响应分析

采取等向压缩试验和常规三轴试验在不同饱和度、环境温度和孔压下的模拟结果进行验证，为了研究应力路径对能源黏土力学行为的影响，同时模拟了等  $p$  真三轴试验进行力学响应分析。

### 4.1 等向压缩试验验证及分析

图 7 (a), (d) 分别为不同饱和度下能源黏土等向压缩模拟结果和试验结果。由图可知无论是室内试验还是模拟结果，水合物的存在使得能源黏土的屈服强度增大，且能源土屈服后的孔隙比接近于平行发展，表明屈服后还有部分水合物承担荷载。图 7 (b), (e) 给出了不同温度下能源土的压缩曲线。表明无论模拟值还是试验值，温度的降低都会增大能源黏土的屈服强度。

图 7 (c) 给出了含水率对压缩曲线的影响，需要注意的是，这里只能分析物化特性（以含水率表示）对水合物胶结力学行为的影响，忽略了水桥作为软胶结的影响。从图 7 (c) 可知较高的含水率下，能源黏土的压缩曲线几乎重合，表明高含水率下含水率的变化对能源土的屈服强度影响较小，但是低含水率会显著影响能源土的屈服强度，这本质上是因为较小的含水率下黏土颗粒表面结合水强，抑制了水合物的水化过程，缩短了温度-压力点到相平衡线的距离，使得水合物强度和能源土的屈服强度降低。



(a) 饱和度的影响

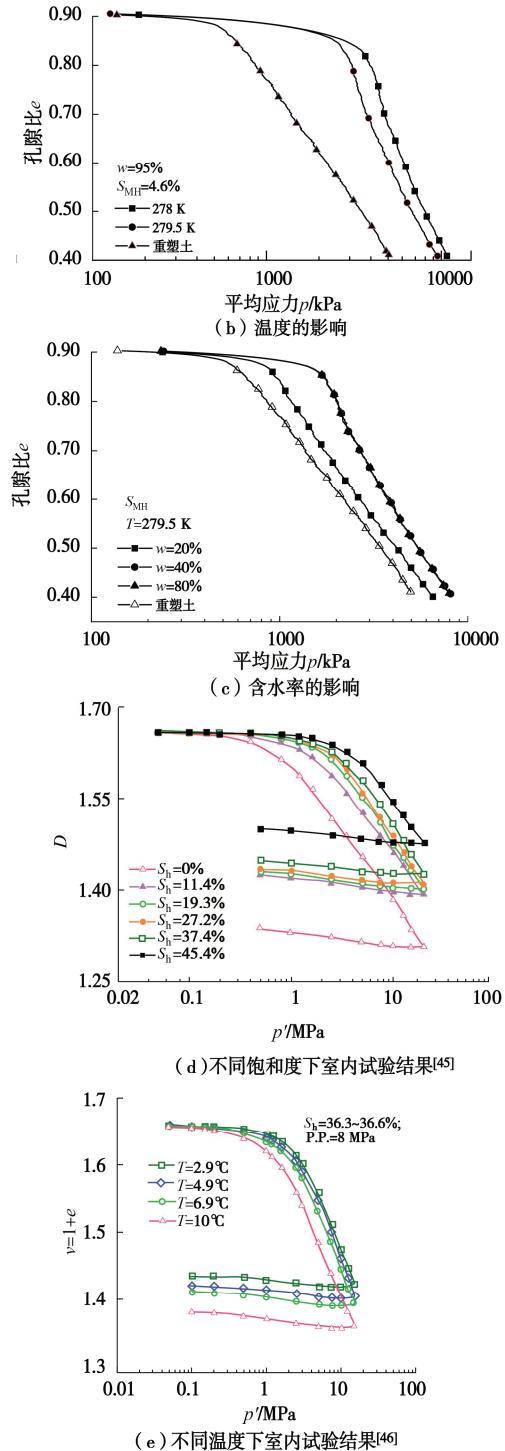


图 7 能源黏土等向压缩结果与室内试验结果

Fig. 7 Simulation results and laboratory test results of isotropic compression

图 8 给出了不同饱和度和参数  $L$  值下能源黏土的归一化屈服强度的试验值和模拟结果。表明本文的模拟方法与室内试验结果的变化规律一致。对模拟结果进行拟合, 可得考虑水合物饱和度和参数  $L$  的屈服强度表达式为

$$p_y = p_{y0} + a^y S_{\text{MH}}^{b^y} L^{c^y} \quad (17)$$

式中:  $p_{y0} = 500 \text{ kPa}$ ,  $a^y = 936$ ,  $b^y = 0.527$ ,  $c^y = 1.1$ 。

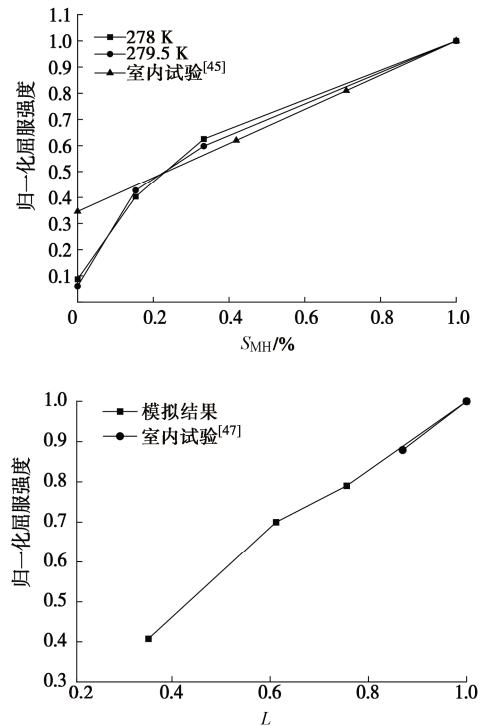
图 8 水合物饱和度和参数  $L$  对屈服强度的影响<sup>[20, 45-47]</sup>

Fig. 8 Yield strength in variable MH saturation and parameter  $L$

#### 4.2 常规三轴试验验证及分析

图 9 (a) ~ (c) 为不同饱和度, 含水率和温度下能源黏土与重塑黏土常规三轴试验的应力应变关系曲线和孔隙比演化曲线, 图 9 中的围压都是 1 MPa, 图 9 (d), (e) 分别为不同饱和度和温度下的室内试验结果<sup>[45, 48]</sup>。对比图 9 (a), 10 (d) 可知, 模拟结果和室内试验结果一致, 随着饱和度的增高, 能源黏土的峰值强度增高, 应力应变关系由应变硬化状态转变为应变软化状态, 且剪胀性更强。图 9 (b), (e) 为不同温度下胶结型能源黏土的模拟值和物理试验值, 随着温度的降低, 能源黏土的峰值强度增大。孔隙比演化都为减缩, 且随着温度的升高剪缩性降低, 表明数值模拟和物理实验规律一致。图 9 (c) 表明含水率的增加会增大能源黏土的峰值强度。随着轴向应变的增加, 能源黏土的应力最终会与重塑黏土重合, 到达临界状态。

图 10 (a), (b) 总结了饱和度和温压参数对能源黏土峰值强度的影响, 并与室内试验结果进行对比, 表明模拟结果与室内试验结果相近。强度包线的对比尚需在多组围压下进行试验, 将在后续工作中进行。此外, 这里给出的室内试验结果尚未达到临界状态, 对比模拟结果可知, 尽管达到临界状态后残余应力基本相同, 但是在此应变下的孔隙比相差较大。且在高饱和度下更加明显, 这是因为此时剪切带内的水合物胶结和团粒基本破坏, 不再承受剪应力, 剪切带发生塑性流动。但是剪切带外的水合物胶结和团粒并未破坏, 可以继续承受传递荷载, 因此孔隙比并未归于一致。

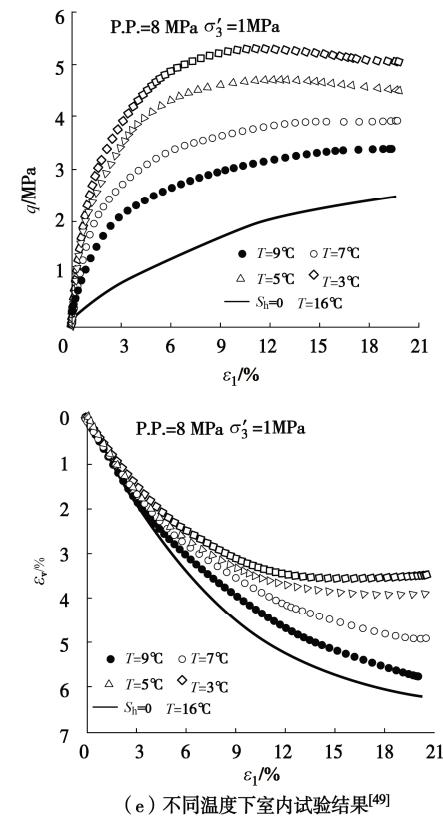
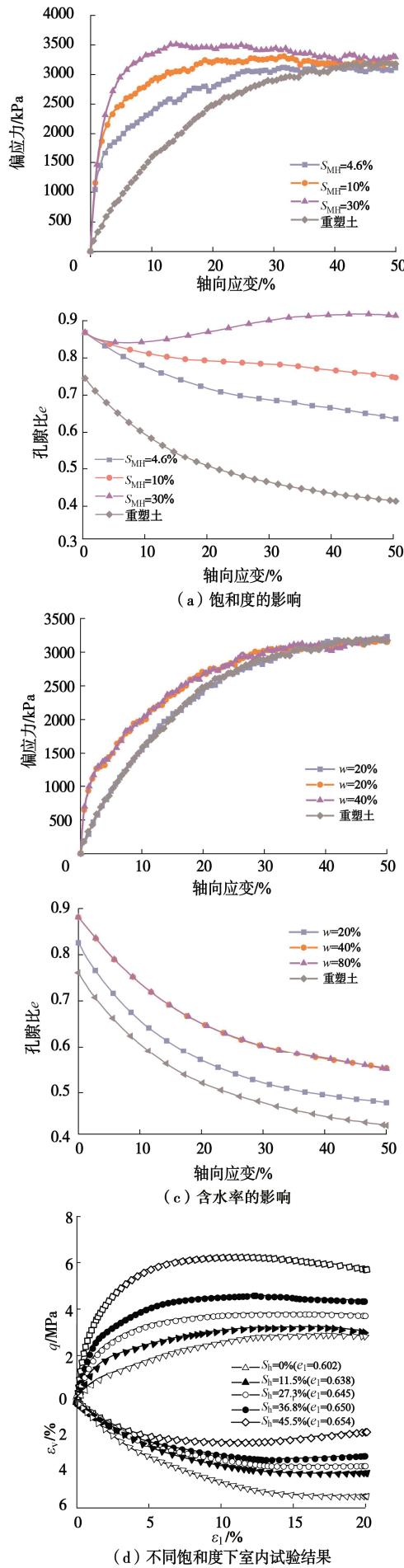


图9 模拟和室内试验下胶结型能源黏土常规三轴试验结果

Fig. 9 Results of conventional triaxial tests simulated and in laboratory

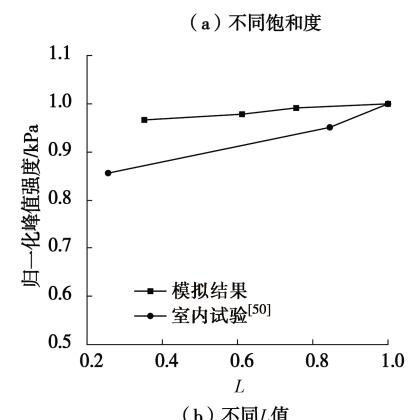
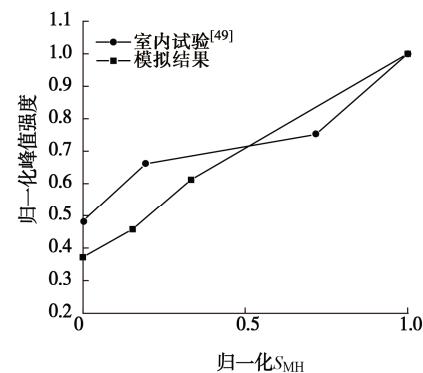
图10 峰值强度变化<sup>[48, 50]</sup>

Fig. 10 Peak stress in variable MH saturation and parameter L

### 4.3 真三轴试验分析

4.1, 4.2 节给出了常规三轴试验和等向压缩试验模拟结果并进行了验证。本节给出胶结型能源黏土真三轴试验结果, 分析复杂应力路径下胶结型能源黏土的力学响应。

图 11 给出了在水合物饱和度为  $S_{\text{MH}}=4.6\%$ , 温度 279.5 K, 含水率  $w=20\%$  下, 等球应力 1 MPa 下的真三轴剪切模拟结果。图 11 (a) 为应力应变曲线, 表明胶结型能源黏土的力学响应明显依赖于中主应力系数, 在相同剪切应变下, 峰值和残余偏应力均随  $b$  值增大而减小, 这是由于中主应力系数影响了胶结破损的发展。因此可以推测, 水合物饱和度很高或者温压参数很大时, 中主应力系数对胶结破损的影响直接导致宏观力学特性的变化。表明胶结型能源黏土在单调加载的真三轴剪切过程中, 硬(软)化规律和临界状态强度需用剪切应变和中主应力系数描述。图 11 (b) 为孔隙比的演化规律, 可以看出较高的中主应力系数会增大试样的剪胀性。值得注意的是, 图 11 (b) 中孔隙比演化规律呈现剪缩-剪胀-剪缩的趋势, 且在  $b$  值较高的时候更为明显。这是因为  $b$  值较高时土体剪胀后复杂应力使得胶结和团粒破碎更多, 后期发生了减缩现象, 如图 12 所示。图 11 (c), (d) 为真三轴试验下大主应变和小主应变的变化规律, 表明在大主应  $\varepsilon_1$  压缩加载下, 小主应变  $\varepsilon_3$  向外膨胀, 且  $b$  值越大, 扩张越明显; 中主应变  $\varepsilon_2$  在  $b$  为 0.0, 0.2 时向外膨胀, 在  $b=0.4$  时接近平面应变条件, 当  $b$  超过 0.4 后, 中主应变方向应变为压缩。

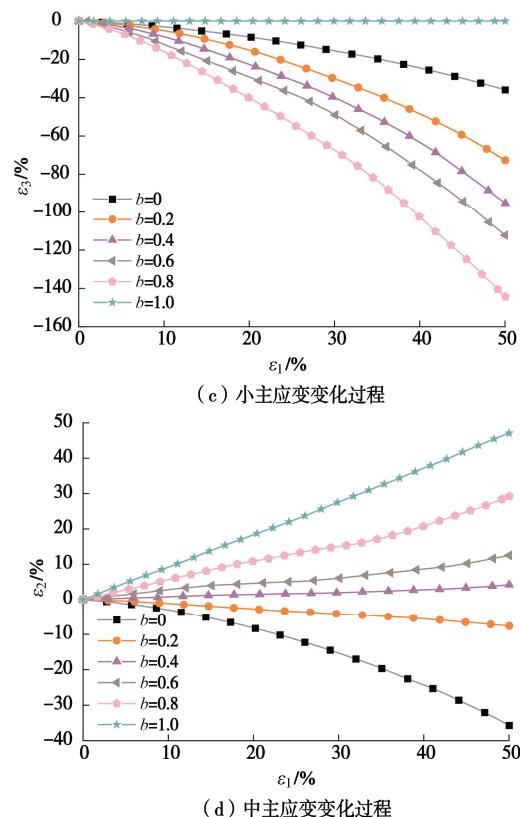
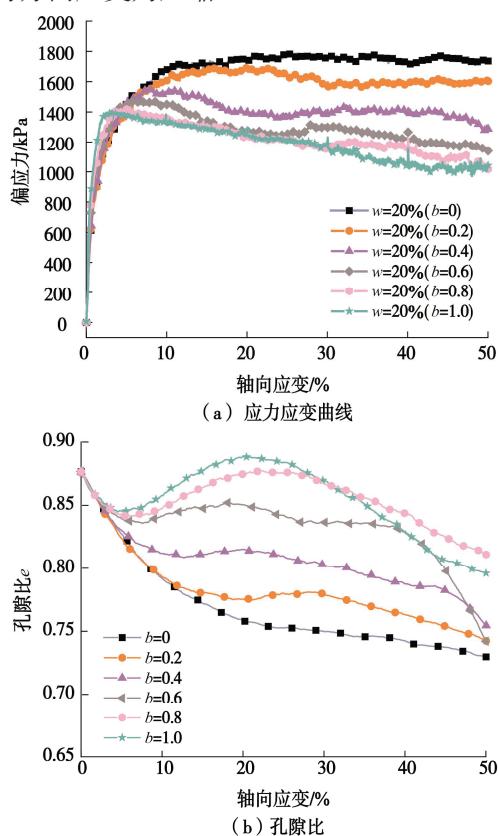


图 11 模拟胶结型能源黏土真三轴试验结果

Fig. 11 True triaxial simulation results

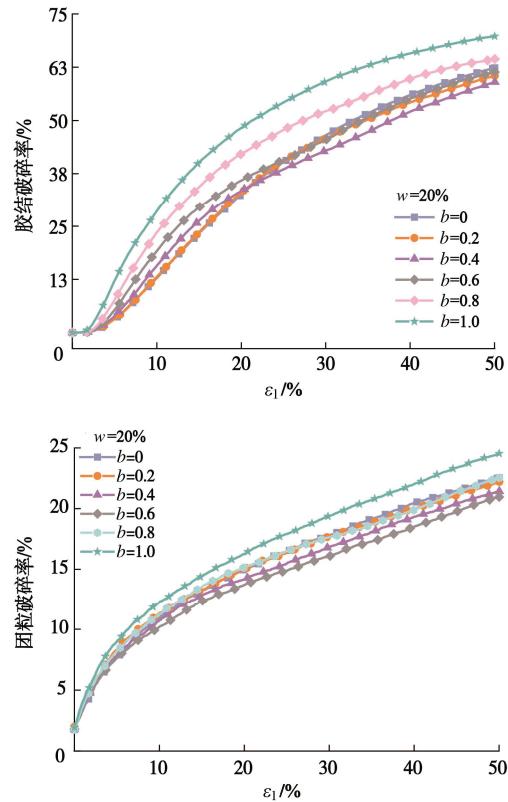


图 12 胶结破碎率和团粒破碎率

Fig. 12 Percentage of bond breakage and aggregate crushing

## 5 结 论

建立能反映能源黏土孔径、物化特性的和复杂应

力路径的数值分析方法, 对中国水合物安全开采至关重要。通过引入水化学势建立了考虑孔径和黏土物化特性影响的水合物强度、刚度半理论公式, 并建立了考虑孔径和物化特性影响的温-压-力-化胶结型能源黏土接触模型。引入了组构参数与孔隙尺寸的关系, 建立了胶结型能源黏土模拟方法, 通过已有的物理试验进行了验证, 表明离散元模拟的力学特性与室内试验结果具有一致性, 可以反映温压场, 饱和度以及应力路径的影响。饱和度和温压参数值的增加提高了胶结型能源黏土的强度, 较高的饱和度会增强能源黏土的结构性。此外, 中主应力系数也对能源黏土的强度产生一定的影响, 后续本构的建立时需要考虑其影响。相比于现有的模拟方法, 本文提出的离散元方法可以通过组构分析孔径对能源土力学行为的影响, 更加符合真实情况。但是, 黏土在不同含水率下的会存在基质吸力等软胶结作用, 本文提到的模拟方法只对比了含水率对胶结的影响, 未分析软胶结作用的影响, 后续可进一步引入软胶结, 更加精准的模拟胶结型能源黏土的力学行为。

致 谢: 感谢牛昂懿和李政在本文中提供的帮助。

**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:** 蒋明镜设计研究内容, 提供研究指导, 张旭东完成计算分析, 张旭东和蒋明镜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。This study was designed and supervised by JIANG Mingjing. The numerical analyses were conducted by ZHANG Xudong. The manuscript was drafted and revised by JIANG Mingjing and ZHANG Xudong. All the authors have read the last version of manuscript and consented for submission.

## 参考文献:

- [1] 蒋明镜, 肖俞, 刘芳. 深海能源土开采对海床稳定性的影响研究思路[J]. 岩土工程学报, 2010, 32(9): 1412-1417. (JIANG Mingjing, XIAO Yu, LIU Fang. Methodology for assessing seabed instability induced by exploitation of methane hydrate[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2010, 32(9): 1412-1417. (in Chinese))
- [2] HE J, JIANG M J, LIU J. Effect of different temperatures and pore pressures on geomechanical properties of pore-filling type of methane hydrate soils based on the DEM simulations[C]// Proceedings of the 7th International Conference on Discrete Element Methods. Singapore: Springer Singapore, 2017: 827-835.
- [3] JIANG M J, LIU J, SHEN Z F. DEM simulation of grain-coating type methane hydrate bearing sediments along various stress paths[J]. Engineering Geology, 2019, 261: 105280.
- [4] ZHANG W, LIANG J Q, SU P B, et al. Distribution and characteristics of mud diapirs, gas chimneys, and bottom simulating reflectors associated with hydrocarbon migration and gas hydrate accumulation in the Qiongdongnan Basin, northern slope of the South China Sea[J]. Geological Journal, 2019, 54(6): 3556-3573.
- [5] LIANG J Q, ZHANG W, LU J, et al. Geological occurrence and accumulation mechanism of natural gas hydrates in the eastern Qiongdongnan Basin of the South China Sea: insights from site GMGS5-W9-2018[J]. Marine Geology, 2019, 418: 106042.
- [6] SMITH D H, WILDER J W, SESHADRI K. Methane hydrate equilibria in silica gels with broad pore-size distributions[J]. AIChE Journal, 2002, 48(2): 393-400.
- [7] REN J J, YIN Z Y, CHEN G J, et al. Effect of marine clay minerals on the thermodynamics of  $\text{CH}_4$  hydrate: Evidence for the inhibition effect with implications[J]. Chemical Engineering Journal, 2024, 488: 151148.
- [8] 王淑云, 罗大双, 张旭辉, 等. 含水合物黏土的力学性质试验研究[J]. 实验力学, 2018, 33(2): 245-252. (WANG Shuyun, LUO Dashuang, ZHANG Xuhui, et al. Experimental study of mechanical properties of hydrate clay[J]. Journal of Experimental Mechanics, 2018, 33(2): 245-252. (in Chinese))
- [9] 石要红, 张旭辉, 鲁晓兵, 等. 南海水合物黏土沉积物力学特性试验模拟研究[J]. 力学学报, 2015, 47(3): 521-528. (SHI Yaohong, ZHANG Xuhui, LU Xiaobing, et al. Experimental study on the static mechanical properties of hydrate-bearing silty-clay in the South China Sea[J]. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2015, 47(3): 521-528. (in Chinese))
- [10] 鲁晓兵, 张旭辉, 石要红, 等. 黏土水合物沉积物力学特性及应力应变关系[J]. 中国海洋大学学报(自然科学版), 2017, 47(10): 9-13. (LU Xiaobing, ZHANG Xuhui, SHI Yaohong, et al. Mechanical properties of hydrate-bearing silty-clay and stress-strain relation[J]. Periodical of Ocean University of China, 2017, 47(10): 9-13. (in Chinese))
- [11] 朱一铭. 天然气水合物沉积物静动力学特性研究[D]. 大连: 大连理工大学, 2016. (ZHU Yiming. Study on Static and

- Dynamic Characteristics of Natural Gas Hydrate Sediments[D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2016. (in Chinese))
- [12] 骆汀汀. 天然气水合物开采过程粉质沉积物力学特性研究[D]. 大连: 大连理工大学, 2020. (LUO Tingting. Study on Mechanical Properties of Silty Sediments During Natural Gas Hydrate Exploitation[D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2020. (in Chinese))
- [13] LI Y H, SONG Y C, LIU W G, et al. Analysis of mechanical properties and strength criteria of methane hydrate-bearing sediments[J]. International Journal of Offshore and Polar Engineering, 2012, **22**(4): 209-296.
- [14] JIANG M J, SUN R H, ARROYO M, et al. Salinity effects on the mechanical behaviour of methane hydrate bearing sediments: a DEM investigation[J]. Computers and Geotechnics, 2021, **133**: 104067.
- [15] LI T, LI L Q, LIU J J, et al. Influence of hydrate participation on the mechanical behaviour of fine-grained sediments under one-dimensional compression: a DEM study[J]. Granular Matter, 2021, **24**(1): 32.
- [16] SHEN Z F, LI X X, YI X J, et al. DEM simulation of microscopic structure and macroscopic mechanical behavior of clay in oedometer and triaxial compression tests[J]. Computers and Geotechnics, 2024, **173**: 106544.
- [17] LIU J, LIN C L, MILLER J D. Simulation of cluster formation from kaolinite suspensions[J]. International Journal of Mineral Processing, 2015, **145**: 38-47.
- [18] 牛昴懿. 基于团粒破碎的结构性黏土力学特性的三维离散元模拟研究[D]. 上海: 同济大学, 2022. (NIU Maoyi. Three-dimensional Discrete Element Simulation of Mechanical Properties of Structural Clay Based on Particle Breakage[D]. Shanghai: Tongji University, 2022. (in Chinese))
- [19] 韩振华, 张路青, 周 剑, 等. 黏土矿物颗粒特征对含水合物的沉积物力学特性影响研究[J]. 工程地质学报, 2021, **29**(6): 1733-1743. (HAN Zhenhua, ZHANG Luqing, ZHOU Jian, et al. Effect of clay mineral grain characteristics on mechanical behaviours of hydrate-bearing sediments[J]. Journal of Engineering Geology, 2021, **29**(6): 1733-1743. (in Chinese))
- [20] 李 政. 胶结型深海能源黏土力学特性离散元模拟及结构破损演化规律分析[D]. 天津:天津大学,2023. (LI Zheng. Discrete Element Simulation of Mechanical Properties and Structural Damage Evolution of Grain-cementing Type Methane Hydrate Bearing Clay[D]. Tianjin: Tianjin University, 2023. (in Chinese))
- [21] JIANG M J, SHEN Z F, WANG J F. A novel three-dimensional contact model for granulates incorporating rolling and twisting resistances[J]. Computers and Geotechnics, 2015, **65**: 147-163.
- [22] ANANDARAJAH A, CHEN J. Van der waals attractive force between clay particles in water and contaminants[J]. Soils and Foundations, 1997, **37**(2): 27-37.
- [23] ANANDARAJAH A, CHEN J. Double-layer repulsive force between two inclined platy particles according to the gouy-chapman theory[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1994, **168**(1): 111-117.
- [24] SHANG X Y, HU N, ZHOU G Q. Calculation of the repulsive force between two clay particles[J]. Computers and Geotechnics, 2015, **69**: 272-278.
- [25] ANANDARAJAH A. Numerical simulation of one-dimensional behaviour of a kaolinite[J]. Géotechnique, 2000, **50**(5): 509-519.
- [26] NIU M Y, JIANG M J. Discrete element modelling of reconstituted and natural clays using crushable cluster[C]// 8th Asian Particle Technology Symposium, Osaka, 2021.
- [27] DERJAGUIN B, LANDAU L. Theory of the stability of strongly charged lyophobic sols and of the adhesion of strongly charged particles in solutions of electrolytes[J]. Progress in Surface Science, 1993, **43**(1/2/3/4): 30-59.
- [28] 李 涛, 蒋明镜, 孙若晗. 多种应力路径下结构性土胶结破损演化规律离散元分析[J]. 岩土工程学报, 2020, **42**(6): 1159-1166. (LI Tao, JIANG Mingjing, SUN Ruohan. DEM analysis of evolution law of bond degradation for structured soils[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2020, **42**(6): 1159-1166. (in Chinese))
- [29] SHEN Z F, JIANG M J, WAN R. Numerical study of inter-particle bond failure by 3D discrete element method[J]. International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, 2016, **40**(4): 523-545.
- [30] HYODO M, NAKATA Y, YOSHIMOTO N, et al. Basic research on the mechanical behavior of methane hydrate-sediments mixture[J]. Soils and Foundations, 2005, **45**(1): 75-85.
- [31] YANG D H, CHEN Y, WU Y C, et al. Phase equilibrium of methane hydrate in sediments: experimental and theoretical characterization[J]. Energy & Fuels, 2023, **37**(3): 1872-1880.
- [32] KOOP T, LUO B, TSIAS A, et al. Water activity as the

- determinant for homogeneous ice nucleation in aqueous solutions[J]. *Nature*, 2000, **406**(6796): 611-614.
- [33] ZHOU J Z, LIANG W P, WEI C F. Phase equilibrium condition for pore hydrate: theoretical formulation and experimental validation[J]. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 2019, **124**(12): 12703-12721.
- [34] 颜荣涛, 魏厚振, 吴二林, 等. 一个考虑沉积物孔径分布特征的水合物相平衡模型[J]. *物理化学学报*, 2011, **27**(2): 295-301. (YAN Rongtao, WEI Houzhen, WU Erlin, et al. A phase equilibrium model for gas hydrates considering pore-size distribution of sediments[J]. *Acta Physico-Chimica Sinica*, 2011, **27**(2): 295-301. (in Chinese))
- [35] LOW P F, DEMING J M. Movement and equilibrium of water in heterogeneous systems with special reference to soils[J]. *Soil Science*, 1953, **75**(3): 187-202.
- [36] BEN CLENNELL M, HOVLAND M, BOOTH J S, et al. Formation of natural gas hydrates in marine sediments: 1. Conceptual model of gas hydrate growth conditioned by host sediment properties[J]. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 1999, **104**(B10): 22985-23003.
- [37] COOKE A J, ROWE R K. Extension of porosity and surface area models for uniform porous media[J]. *Journal of Environmental Engineering*, 1999, **125**(2): 126-136.
- [38] OUADFEL H, ROTHENBURG L. 'Stress - force - fabric' relationship for assemblies of ellipsoids[J]. *Mechanics of Materials*, 2001, **33**(4): 201-221.
- [39] JIANG M J, KONRAD J M, LEROUEIL S. An efficient technique for generating homogeneous specimens for DEM studies[J]. *Computers and Geotechnics*, 2003, **30**(7): 579-597.
- [40] HEAD K H. *Manual of Soil Laboratory Testing*. Volume 2: Permeability, Shear Strength and Compressibility Tests. ed. 2[M]. Caithness: Whittles Publishing, 1994.
- [41] ASTM Committee D-18 on Soil and Rock. Standard Test Method for Unconsolidated-Undrained Triaxial Compression Test on Cohesive Soils[M]. West Conshohocken: ASTM International, 2007.
- [42] COLLOP A C, McDOWELL G R, LEE Y. Use of the distinct element method to model the deformation behavior of an idealized asphalt mixture[J]. *International Journal of Pavement Engineering*, 2004, **5**(1): 1-7.
- [43] CIANTIA M O, ARROYO M, CALVETTI F, et al. An approach to enhance efficiency of DEM modelling of soils with crushable grains[J]. *Géotechnique*, 2015, **65**(2): 91-110.
- [44] 江书慧. 黏土矿物对水合物形成和再形成影响规律研究[D]. 长春: 吉林大学, 2022. (JIANG Shuhui. Study on the Influence of Clay Minerals on Hydrate Formation and Reformation[D]. Changchun: Jilin University, 2022. (in Chinese))
- [45] YANG D H, YAN R T, YAN M Q, et al. Geomechanical properties of artificial methane hydrate-bearing fine-grained sediments[J]. *Gas Science and Engineering*, 2023, **109**: 104852.
- [46] YAN R T, YU H F, YANG D H, et al. Isotropic compression behavior for methane hydrate-bearing soil with varying temperature and pore pressure[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2023, **48**(93): 36327-36339.
- [47] WU P, LI Y H, WANG L, et al. Hydrate-bearing sediment of the South China Sea: microstructure and mechanical characteristics[J]. *Engineering Geology*, 2022, **307**: 106782.
- [48] YANG F, LI C J, WEI N, et al. Mechanical properties and constitutive model of high-abundance methane hydrates containing clayey-silt sediments[J]. *Ocean Engineering*, 2024, **298**: 117245.
- [49] YAN R T, WU Y C, YANG D H, et al. Temperature and pore pressure dependencies of the mechanical behavior of methane hydrate-bearing fine-grained sediment[J]. *International Journal of Geomechanics*, 2024, **24**(11): 04024252.
- [50] WANG L, LI Y H, SHEN S, et al. Mechanical behaviours of gas-hydrate-bearing clayey sediments of the South China Sea[J]. *Environmental Geotechnics*, 2022, **9**(4): 210-222.