



THMC多场耦合作用下岩石力学实验与数值模拟研究进展

颜丙乾 任奋华 蔡美峰 郭奇峰 乔趁

Research review of rock mechanics experiment and numerical simulation under THMC multi-field coupling

YAN Bing-qian, REN Fen-hua, CAI Mei-feng, GUO Qi-feng, QIAO Chen

引用本文:

颜丙乾, 任奋华, 蔡美峰, 郭奇峰, 乔趁. THMC多场耦合作用下岩石力学实验与数值模拟研究进展[J]. *工程科学学报*, 2021, 43(1): 47–57. doi: 10.13374/j.issn2095–9389.2019.07.29.005

YAN Bing-qian, REN Fen-hua, CAI Mei-feng, GUO Qi-feng, QIAO Chen. Research review of rock mechanics experiment and numerical simulation under THMC multi-field coupling[J]. *Chinese Journal of Engineering*, 2021, 43(1): 47–57. doi: 10.13374/j.issn2095–9389.2019.07.29.005

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2019.07.29.005>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

冻融循环对全尾砂固结体力学性能影响及无损检测研究

Mechanical properties and nondestructive testing of cemented mass of unclassified tailings under freeze–thaw cycles
工程科学学报. 2019, 41(11): 1433 <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2019.02.23.002>

一种光敏树脂结构的力学性能

Mechanical properties of a photosensitive resin structure
工程科学学报. 2019, 41(4): 512 <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2019.04.012>

轧辊交叉对中间坯镰刀弯生成过程的影响

Influence of crossed roller on generating camber in hot rough rolling
工程科学学报. 2018, 40(8): 954 <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2018.08.009>

铝电解槽废阴极炭块电热耦合处理过程数值模拟

Numerical simulation of electrothermal coupling process for spent cathode carbon block from aluminum electrolysis cell
工程科学学报. 2020, 42(6): 731 <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2019.06.10.002>

高海拔寒区岩质边坡变形破坏机制研究现状及趋势

Review and prospects for understanding deformation and failure of rock slopes in cold regions with high altitude
工程科学学报. 2019, 41(11): 1374 <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2019.05.07.004>

高地应力硬岩下双孔并行隧道相似模型试验及数值模拟

Similarity model test and numerical simulation of double parallel–tunnel excavation in hard rock under high ground–stress conditions
工程科学学报. 2017, 39(5): 786 <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2017.05.018>

THMC 多场耦合作用下岩石力学实验与数值模拟研究进展

颜丙乾^{1,2)}, 任奋华^{1,2)}, 蔡美峰^{1,2)}, 郭奇峰^{1,2)}✉, 乔 趁^{1,2)}

1) 北京科技大学土木与资源工程学院, 北京 100083 2) 北京科技大学城市与地下空间工程北京市重点实验室, 北京 100083

✉通信作者, E-mail: qifeng_024@163.com

摘 要 岩石多场耦合作用的研究是当前研究的热点难点问题, 为了更好的分析岩石在多场耦合作用条件下的作用机理, 主要通过实验和数值模拟两方面进行研究。在总结国内外多场耦合微观-细观-宏观多尺度力学试验设备的改进和研发、数值模拟软件及耦合计算程序的开发等方面的研究现状的基础上, 展望多场多相耦合作用下岩石力学实验设备和数值分析的研究方向。为了研究岩石多场耦合作用下的力学性能, 通过改进和研发设计了不同物理场多场耦合试验系统, 在开发试验设备的基础上引起和发展现代无损探测手段, 比如实时 CT(Computed tomography)扫描技术, 电镜扫描技术(SEM)、核磁共振技术(NMRI)、X 射线立体成像法、超声波技术等, 既能无损检测到岩石的内部孔隙微观细观结构及演化过程, 也能得出岩石在温度-水流-应力-化学(THMC)多场耦合作用中各物理场的宏观关系, 进一步从微细观和宏观相结合的角度得出岩石在多场耦合作用下的性能。随着计算机技术的进步, 岩石多场耦合作用下的数值模拟软件及耦合计算程序的开发有了一定的发展, 特别是 TOUGHREACT 与 FLAC3D 相结合的 THMC 四场耦合作用的数值模拟软件和数值仿真软件 Comsol 与 Matlab 对接的多场耦合计算程序的开发, 为岩石多场耦合模拟的开展提供了技术支持。

关键词 裂隙岩体; 多场耦合; 无损检测; 有限元; 实验设备; 数值模拟软件

分类号 TG741.7

Research review of rock mechanics experiment and numerical simulation under THMC multi-field coupling

YAN Bing-qian^{1,2)}, REN Fen-hua^{1,2)}, CAI Mei-feng^{1,2)}, GUO Qi-feng^{1,2)}✉, QIAO Chen^{1,2)}

1) School of Civil and Resource Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

2) Beijing Key Laboratory of Urban Underground Space Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

✉ Corresponding author, E-mail: qifeng_024@163.com

ABSTRACT The study of multi-field coupling of rocks is currently a pressing and difficult problem at present. To better analyze the interaction mechanism of rocks under of multi-field coupling, research is mainly carried out by experiment and numerical simulation. On the basis of summarizing the research and development of multi-field coupling micro-meso-macro multi-scale mechanical test equipment at home and abroad, and the developments of numerical simulation software and coupling calculation program, the development direction of rock mechanical test equipment and numerical analysis under multi field and multi-phase coupling are prospected. To study the mechanical properties of rocks under multi-field coupling, a multi-field coupling test system with different physical fields was designed by improvement through research and development. Based on the development of the test equipment, modern non-destructive detection methods, such as real-time computed tomography (CT) scanning technology, scanning electron microscopy (SEM), nuclear

收稿日期: 2019-07-29

基金项目: 国家自然科学基金面上资助项目(51774022); 国家重点研发计划资助项目(2017YFC0804101)

magnetic resonance imaging (NMRI), X-ray stereo imaging and ultrasonography, were developed. Acoustic wave technology can not only nondestructively detect the micro-structure and evolution process of rock internal pores, but also clarify the macro-relationship of rock physical fields in the multi-field coupling action of thermal-hydrological-mechanical-chemical (THMC), and further clarify the rock performance under multi-field coupling action from the perspective of a combination of micro and macro scales. With the advancement of computer technology, the development of numerical simulation software and coupling calculation program under multi-field coupling of rock has made certain progress. Especially, the development of the numerical simulation software of THMC four-field coupling interaction combined with TOUGHREACT and FLAC3D, and the multi-field coupling calculation program of Comsol docking with MATLAB provide technical supports for the development of multi-field coupling simulation of rocks. Finally, the key difficulties and future research directions of rock multi-field coupling research were discussed and analyzed, which can provide a reference for engineering practice and related problems.

KEY WORDS fractured rock; multi-field coupling; nondestructive testing; finite element; experimental equipment; numerical simulation software

深部能源与资源开采中,经常涉及到复杂的赋存环境,岩体在高温、高渗透压、高应力及复杂水化学环境中将发生多场耦合效应。场的概念源于物理学中的电场、磁场等,在岩石力学相关研究中涉及到的场主要有应力场、温度场、水流场、化学场、变形场、结构场等。在开挖过程中,岩石所处的作用场不断演化,最终在多场作用下会出现直接耦合和间接耦合、双向耦合和单向耦合等不同的多场耦合关系。近年来,岩石多场耦合作用相关的项目收到业界的广泛关注,为了更好地分析岩石在多场耦合作用条件下的作用机理,主要通过实验和数值模拟两方面进行研究。

国内外学者早期对于岩石多场耦合作用下的力学试验研究,主要通过单一场作用、两场作用的试验研究不同场对岩石力学性能的影响,主要集中在应力场、水流场、温度场方面。近年来随着实验设备的改进和升级,基于不同研究背景的应力场、水流场、温度场、化学场综合考虑的多场耦合作用的试验设备不断出现,同时研究岩石损伤及破坏过程的微观试验设备也逐渐得到创新。另外,在模拟多场耦合作用下的岩石破坏过程中,传统的有限元模型通常建立在岩石理想的连续各向同性体的抽象模型上,很难准确描述有明显各向异性特征的岩石的力学性能,因此其数值模拟的结果也将失去参考价值。随着有限元的发展,如今的研究中,已经将岩石的物理力学参数通过试验得出,并应用到数值模拟中。计算机技术的发展和数值模拟软件的发展为研究岩石多场耦合作用下的相关研究提供了较大的帮助,为很多世界难题的研究提供了参考。

1 实验装置研发和实验方法拓展

岩石的力学性能试验使用的设备主要为岩石

力学试验机,随着试验机的改进和研究,出现了美国、德国生产的液压伺服试验机和通过计算机控制操作的试验机^[1-2],日本研发的通过计算机控制的大型结构试验机,长春朝阳试验机厂^[3]研制的岩石三轴流变仪、岩石三轴试验机以及岩石三轴流变试验系统^[1]。

1.1 多场耦合实验设备的改进与优化

随着岩石多场耦合作用研究的深入,科研人员开始专注于研制高温高压条件下的三轴试验机,辅助以围压和温度加载及数据采集记录系统,试验研究温度-应力-化学多场耦合作用下深部页岩的蠕变性能^[4],建立考虑环境温度和化学作用的高应力页岩非线性蠕变模型,得出描述岩石温度-应力-化学三场耦合效应的数学模型,运用 ANSYS 有限元对岩石微细观结构和温度-应力-化学多场耦合作用下的蠕变性能进行数值模拟,验证实验设备和蠕变模型的适用性。

图 1 所示的三轴耦合试验机是由法国里尔科技大学研发的,设备可以同时施加围压、轴向偏应力和孔隙水压力^[5],可同时得出轴向应力、轴向应变和侧向应变,三轴室示意图如图 2 所示。该设备所用岩石试件尺寸一般为 $\phi 50 \text{ mm} \times 100 \text{ mm}$ (两端面平整度误差一般小于 0.01 mm),围压最大可达到 60 MPa ,偏应力最大可达到 300 MPa ,孔隙水压力最大为 60 MPa ^[6]。

岩石的耦合渗透性受岩石多场耦合作用的影响,作用机理复杂,因此需要研究岩石在水流-应力-化学多场耦合作用下围压、渗透压、水化学性质等多种因素对裂隙岩体力学性能的影响。裂隙岩石耦合作用下的力学试验系统如图 3 所示,试验中可用的液压稳定控制台包括稳压控制台(稳压控制台主要保证围压和轴压的稳定)和低压控



图1 三轴水力耦合试验机^[5]

Fig.1 Experimental machine coupling hydraulic and mechanic^[5]

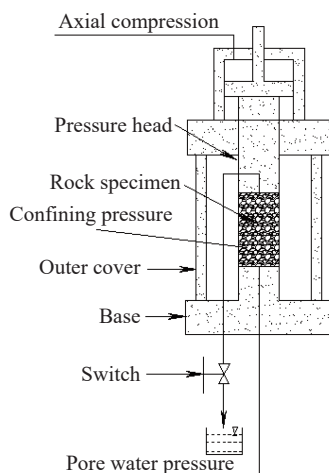


图2 三轴室示意图

Fig.2 Schematic diagram of triaxial chamber

制系统(低压控制系统主要控制渗透压大小和渗透溶液)^[7],实验设备子系统关系如图4所示.该系统可提供最大载荷为 600 kN,最大围压为 10 MPa,稳压精度在静态时达±0.5%,动态时达±2%,低压控制系统的渗透压最大可达 1.6 MPa.

该系统可以完成裂隙多场耦合作用时岩石多种性能的试验测试,通过控制围压恒定,试验得出岩石裂隙渗透率随着渗透压的变化而变化的规



图3 岩石裂隙多场耦合试验系统^[8]

Fig.3 Multifield coupling equipment system for rock fracture^[7]

律;控制围压和渗透压都保持不变,可以试验研究溶液酸碱度对岩石力学性能的影响;利用裂隙岩石渗透系数反算裂隙开度变化,得出岩石应力和溶液酸碱度对岩石所受化学腐蚀的影响;通过试验测定渗出水的浓度也可以推算出岩石裂隙溶质的运移规律^[7].

为了通过岩石实验得到岩石各项指标参数,比如三轴加载下的试件的力学参数、模拟地下岩石所处高温环境的参数,同时获得试验中的裂纹实时 CT 成像,相关学者通过改进电液伺服试验机研发出了一体式试验机.一体式试验机含有机电结构、液压控制系统和加热系统等,其中压力室具有加压和加热功能,在试验过程中,试验机可以绕着中心轴旋转,此时 CT 射线可以透过压力室对岩石的内部裂纹进行实时扫描,得出岩石裂隙演化过程图像.一体式试验机可以计算压力室在受迫、自然对流和有无隔热 4 种条件下的传热边界条件,利用 ICEM CFD 对计算域进行网格划分,然后利用 Fluent 对计算域内的温度场进行计算.通过建立试验机液压系统阀控非对称缸的线性数学模型,得出高温和室温条件下的数学模型参数,然后利用 Matlab Simulink 进行仿真模拟^[8].试验机的轴压最大可达 100 kN,围压可达 20 MPa,加热试验中温度可达 200 °C(精度为±5 °C).一体式试验机可以配合高能射线 CT 扫描技术对岩石进行三轴

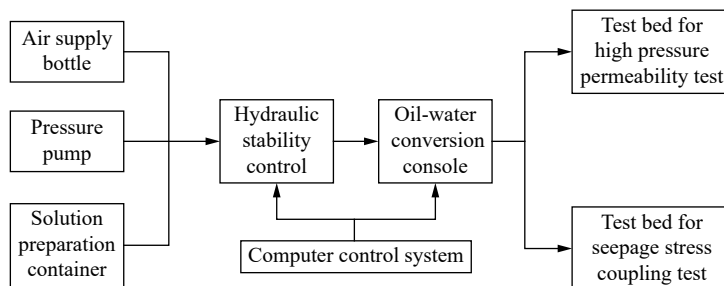


图4 试验设备子系统关系

Fig.4 Relationship chart of test equipment subsystem

应力作用和加热联合试验, 填补了国内岩石力学试验系统中 CT 实时成像的技术空白.

1.2 多场耦合实验设备的研发

周辉等^[9]设计了一套盐岩裂隙水流-化学溶蚀的耦合试验装置, 如图 5 所示. 上部分为加工好的盐岩试块, 将盐岩试块的裂隙面打磨光滑, 考虑到两块盐岩试件贴在一起形成的人工节理很难达到试验规定的平整闭合度, 因此设计了一块表面光滑的有机玻璃试件代替下部分的盐岩试件. 在进水口位置通入一定饱和度的盐岩溶液, 盐岩溶液流经盐岩试件和有机玻璃试件之间形成的盐岩裂隙, 测定和分析盐岩裂隙面的溶解形态. 实验结果表明, 盐岩试件的溶解开始于裂隙的进口处, 盐岩

的溶解速度随着盐岩裂隙深度的增加而变慢.

重庆大学煤矿灾害动力学与控制国家重点实验室^[10]自主研发了如图 6 所示的岩石 THMC 多场耦合作用水流装置, 该装置由三轴加载系统、二氧化碳加压系统、恒温油浴控制系统和数据采集系统组成, 可以模拟不同地应力、不同层压、不同温度等多场耦合作用下岩石的渗透性能. 通过多场耦合作用下不同相态的二氧化碳致裂来驱替甲烷, 在二氧化碳压裂页岩的基础上, 进行了有效应力、孔隙压力和温度等对页岩渗透特性影响的实验研究.

河海大学等单位合作研制了超高压大流量渗透仪及水流-应力耦合试验系统, 试验中的裂隙岩体采用含有裂隙的石灰岩, 渗透液为碳酸溶液和

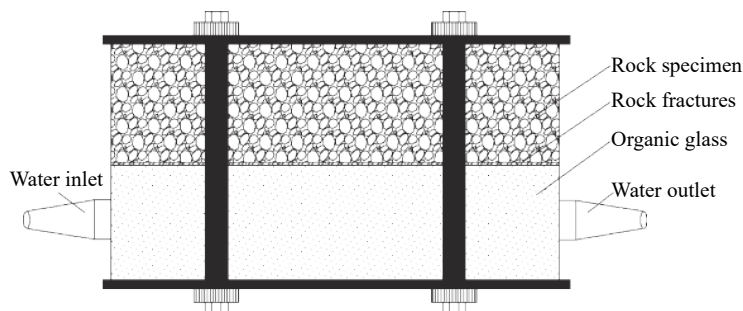
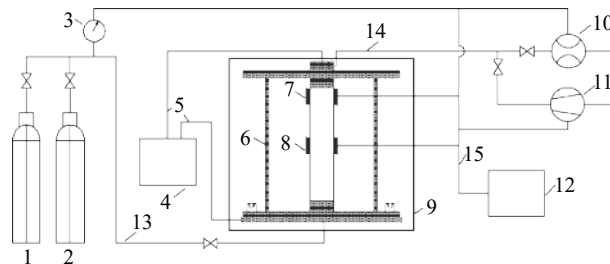


图 5 盐岩裂隙溶解的试验装置图

Fig.5 Experimental setup for coupled fluid flow and dissolution test for salt rock fracture



1 —CO₂ cylinder; 2 —CH₄ gas; 3 —pressure sensor; 4 —servo pump; 5 —hydraulic oil circuit; 6 —triaxial pressure chamber; 7 —axial deformation sensor; 8 —radial deformation sensor; 9 —constant temperature oil bath; 10 —flowmeter; 11 —vacuum pump; 12 —computer; 13 —intake pipe; 14 —outlet pipe; 15 —data acquisition line

图 6 岩石 THMC 多场耦合作用下水流装置和原理图^[10]

Fig.6 Device and schematic diagram under THMC multi field coupling of rocks^[10]

自来水,通过试验得出渗出水量、离子浓度和 pH 值变化,用以表征岩石裂隙演化机理,深入探讨岩石的水流-应力-化学耦合机制。

盛金昌等^[1]在超高压大流量渗透仪及水流-应力耦合试验系统的基础上增加了温度、化学等因素对岩石试块的影响试验,研制了如图 7 所示的岩石温度-水流-应力-化学 (THMC) 多场耦合效应试验系统,用来开展岩石在高温、高渗透压、高应力和复杂化学作用下的岩石渗透性能和力学性能演化,其温度控制及化学溶液自配系统原理如图 8 所示。

岩石温度-水流-应力-化学 (THMC) 多场耦合效应试验系统包括主加载系统、液压控制系统、温度控制系统、化学溶液配制系统、渗出水量测

量系统、保温系统等。试验系统的主要技术参数指标有温度场、渗透压、应力和化学场。设备设定了加载速率和压力上限预警,为确保压力试验精度,加载的最终值和目标值误差在 0.5% 以内,以期岩石多场耦合作用的试验工况更精准,仪器增设了位移传感器用以实时测量耦合试验中的岩石试件变形及应力-应变测试。

渗透压调节可以分为裂隙岩石低渗透压通道 (0~0.4 MPa) 和完整岩石高渗透压通道 (0.4~30 MPa),根据岩石渗透特性的不同采用多管路渗透压控制选择相应的水流通道,确保试验结果的精准性。温度控制系统分为制热系统和制冷系统两种,将水、液压油和钢铁外壳一起综合计算吸热量和散热量,并对压力室、水流液体、管道和升压缸分别制

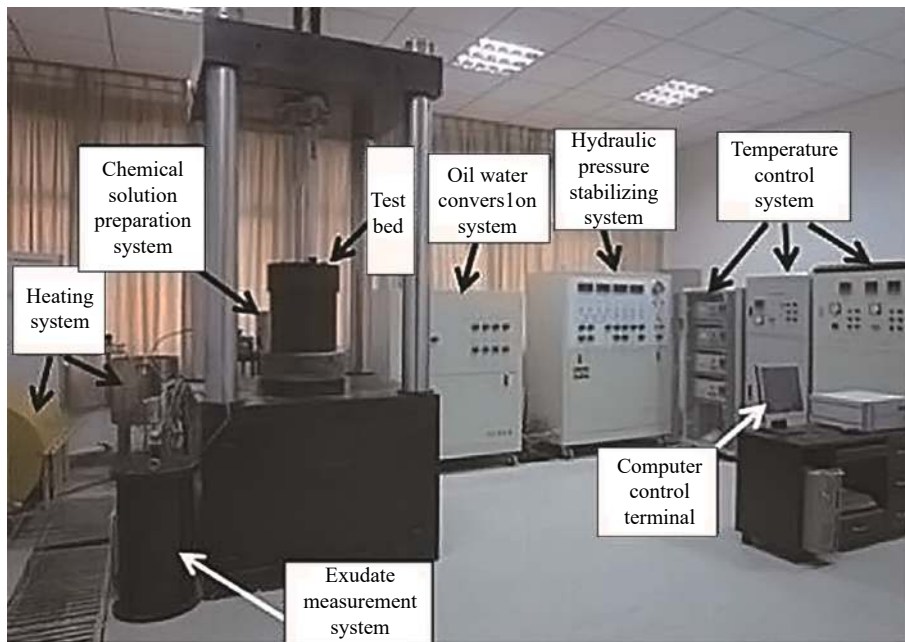


图 7 岩石 THMC 多因素耦合试验系统

Fig.7 Test system coupling THMC processes of rocks

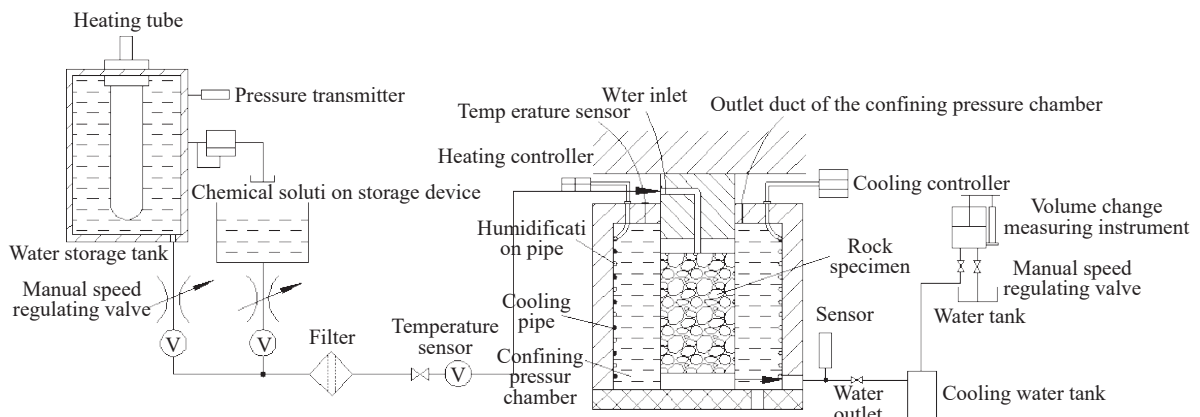


图 8 温度控制及化学溶液自配系统原理

Fig.8 Schematic diagram of temperature control and self-distribution system of chemical solution

热和制冷到预定温度后施加保温措施, 温度控制系统可在 3 h 内达到指定高温(室温 ~ 150 °C)或低温(-20 °C ~ 室温). 化学配置系统的管路可以耐受 pH 值为 0 ~ 14 之内任一酸碱性液体的腐蚀, 试验中计算机可以根据设定的化学溶液浓度自动调节化学溶液和水的比例, 因此渗透系统和化学配置系统综合在一起可以更真实地模拟地下复杂的水化学环境, 在渗透系统中施加化学作用相较于传统化学溶液浸泡更接近工程实际.

1.3 微观机理试验的开拓

细观损伤力学的提出可以追溯到 20 世纪 50 年代, 而在 20 世纪 80 年代该方法已经应用到包括岩石、混凝土在内的几乎所有工程材料领域. 我国科学家钱学森在 20 世纪 50 年代首次在国内提出并系统阐述了细观力学的概念, 细观力学是用连续介质力学方法分析具有微观结构的材料的力学^[12]. 岩石细观力学理论由 Hill 和 Mora 等基于 Taylor 细观塑性理论提出, 主要通过不同仪器对复杂环境下岩石的细观力学结构进行直观研究, 更好地翻译岩石变形特性并对岩石细观内部结构进行定量、定性的描述. 在岩石力学中, 室外天然岩体中直接影响岩石力学性质的毫米级以上的裂隙、节理称为宏观尺度; 介于毫米和微米级别之间的对岩石力学性质产生直接影响的岩石微裂隙称为细观尺度^[13]; 发育在岩石矿物晶体中, 不会直接影响岩石力学性能的微裂隙称为微观尺度.

根据国内外相关学者的研究得出, 岩石的损伤存在形式主要为岩石的微裂隙. 由于岩石在多场耦合作用下会出现微裂隙的演化、扩展和贯通, 进而影响岩石的稳定性, 因此研究岩石的裂隙演化和扩展机理对理解岩石破坏本质具有现实意义.

为了研究复杂环境中的岩石多场耦合机理, 需要开发用于温度-水流-应力-化学 (THMC) 多场耦合作用下裂隙岩体耦合的细观测试设备, 用以对裂隙岩体多场耦合作用下的岩石渗透性能进

行实时细观测试. 试验中的裂纹研究方法可以分为直接研究法和间接研究法. 直接研究法就是使用相关试验设备对岩石破坏过程进行细观观测, 更为直观地了解岩石的破坏机理, 间接研究法通过岩石的渗透性、声波波速等参数间接反映岩石裂隙的扩展情况^[14].

岩石多场耦合作用下微裂纹的变化规律和岩石破坏本质是研究的重难点. 由于设备发展的局限性, 过去裂隙岩体内部的细观结构和不同材料的实际空间布局很难通过无损微细检测定量表达. 随着技术的进步和发展, 在开发试验设备的基础上引起和发展现代无损探测手段, 比如实时 CT 扫描技术, 电镜扫描技术、核磁共振技术、X 射线立体成像法和超声波技术等, 既能无损检测到岩石的内部孔隙微细观结构及演化过程, 也能得出岩石在温度-水流-应力-化学 (THMC) 等多场耦合作用中各物理场的宏观关系, 进一步从微细观和宏观相结合的角度得出岩石在多场耦合作用下的性能.

图 9 所示为岩石巴西圆盘试件渗透性试验测试前后的断面裂隙形态对比图, 可以看出, 岩石试件经过地下水和蒸馏水的渗透融蚀作用后, 断面裂隙中间位置形成了较大的孔洞, 是上下游水流通道的明显标志^[15]. 图 10 所示为盐岩及粉砂质页岩细观结构扫描电镜结果.

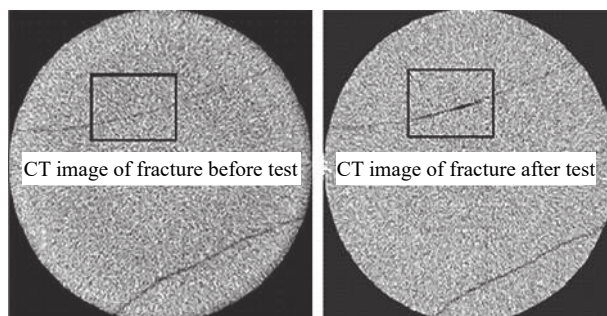


图 9 渗透试验前后的裂隙形态对比图^[15]

Fig.9 Comparison of scanned core images between test initiation and after 1492 hours^[15]

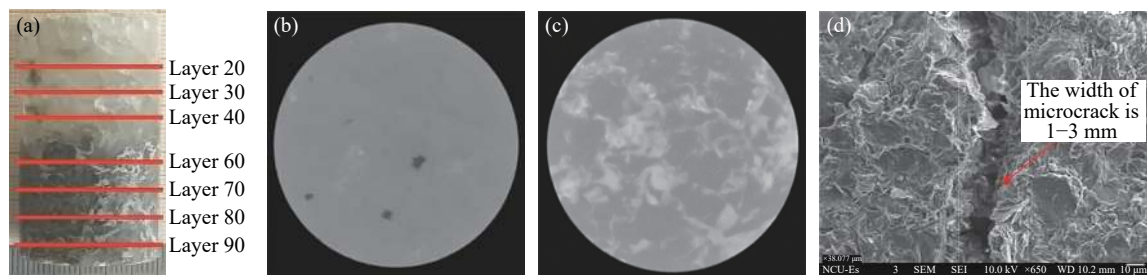


图 10 盐岩及粉砂质页岩细观结构^[16]. (a) 试件分层电镜扫描示意图; (b) 第 30 层扫描图; (c) 第 90 层扫描图; (d) 微裂隙电镜扫描图

Fig.10 Meso structure of salt rock and silty shale: (a) schematic image of layered scanning of specimen; (b) layer 30; (c) layer 90; (d) scanned core image of microcrack

Homand-Etienne 和 Houpert^[17] 对高温处理后的 Senones 和 Remirement 花岗岩试件进行扫描电镜 (SEM) 分析, 定性和定量地研究了岩石微观结构的损伤情况对岩石力学性能的影响. Wang 与 Dusseault^[18] 对美国 Westerly 花岗岩进行热处理, 利用声发射 (AE) 进行岩石热破坏过程中的微裂隙扩展监测. 葛修润^[19] 将 CT 机和压力试验机配合使用, 通过观测砂岩单轴和三轴加载过程中的微裂隙萌生-演化-扩展-破坏过程, 得出了各阶段的 CT 图像. 陈四利等^[20-21] 使用 CT 试验机对化学腐蚀后的砂岩进行了三轴应力试验观测, 得出了岩石破坏过程实质是岩石受力过程中岩石微裂隙的演化和微观结构变形累计的宏观表现. 周克群等^[22] 研究了不同岩石热效应影响下的力学性能, 岩石在经过高温处理后进行低温处理, 利用核磁共振技术得出的岩石孔隙度和渗透率有一定的增加. 杨建等^[23] 在研究致密砂岩渗透性的过程中采用了精细描述了微观结构的新技术如核磁共振、CT 扫描和扫描电镜, 定性和定量地描述岩石微观裂纹及微孔洞的变化. Dong 等^[24] 在研究深部岩石渗透率与应力的关系时, 利用扫描电镜技术得出如图 10 所示的岩石渗透率降低与原生初始裂隙在应力作用下压密闭合的相关性.

2 数值模拟软件及耦合计算程序

岩石力学性能的数值模拟方法主要有较早提

出的有限差分法、20 世纪 50 年代开始盛行的有限元法^[25]、20 世纪 70 年代开始使用的边界元法及无单元法^[26]、1971 年由 Cundall 提出的离散元法^[27]、20 世纪 80 年代石根华提出的非连续变形法^[28] 以及 20 世纪 90 年代提出的流形元法等. 鉴于计算机的发展, 深部岩体工程多场耦合程序也得到了很大的发展, 总结如表 1 所示.

基于连续介质理论的简单数值分析方法无法较好地描述裂隙岩体的裂隙演化扩展, 因此学者探索了 DDA、混合有限元离散元和流形元等非连续介质方法^[29]. 基于移动最小二乘法的无网格法可以较好地描述岩石水流-应力耦合作用下的裂隙扩展. 刘泉声与刘学伟^[30] 对多场耦合作用下岩石裂隙演化的主要问题进行了详细研究, 分析了数值模拟流形元法在岩石多场耦合模拟中的优势.

岩石在应力-水压-温度三场耦合作用中常用的数值模拟软件有 FRACTURE、GEOH3D、FRACSIM-3D、THAMES、MOTIF、FRACON、FEHM、FRIP 和 GEORACK 等. FRACTURE 可以通过模拟流体流动、示踪剂运移和热传导等, 来模拟温度-水流-应力耦合过程和耦合效应. GEOH3D 可以建立非均质多孔介质模型, 模拟温度-水流-应力耦合作用下达西水流过程中的热质运移. 杨冰等^[48] 开发的 TOUGHREACT 是在 TOUGH2 的基础上添加了化学反应模块, 模拟液体三相反应和运移, 计

表 1 深部岩体工程多场耦合程序^[31-32]

Table 1 Codes for modeling the multi-field coupling programs for deep rock engineering^[31-32]

Multi-field coupling function	Procedure	Algorithm	References
THMC	COMSOL	Finite element	Pirmia et al. ^[33]
	FALCON	Finite element	Xia et al. ^[34]
	FEHM	Finite element	Pandey et al. ^[35]
	OpenGeoSys	Finite element	Kolditz et al. ^[36]
	STOMP	Finite volume	Scheibe et al. ^[37]
	Fluent	Finite volume	Cao et al. ^[38]
THM	GEOFRAC	Boundary element	Vecchiarelli ^[39]
	TOUGH-FLAC	Finite difference	Rutqvist ^[40]
	NUFT	Finite volume	Blair et al. ^[41]
THC	SHEMAT	Finite difference	Clauser et al. ^[42]
	TOUGHREACT	Finite difference	Xu et al. ^[43]
HM	GEOS	Finite element + Finite volume	Settgast ^[44]
	GPRS	Finite volume	Wong et al. ^[45]
TH	MRST	Finite volume	Lie et al. ^[46]
	FEFLOW	Finite element	Diersch ^[47]
	FEFLOW	Finite element	Diersch ^[47]

算多孔介质和裂隙表面的化学反应过程以及化学溶解对孔隙度和渗透率等的影响。FRACSIM-3D 可以模拟裂隙网络模型的地下水水流、热传导和化学溶解反应过程, 得出岩石在水力作用下裂隙的剪切和扩展, 流体水流循环中的热弹性效应和化学溶解过程^[49]。TOUGH2 和 FLAC3D 的外部耦合模块连接形成多场耦合软件, 建立应力和多相流孔隙压力、温度的关系, 以及应力和孔隙度、渗透率之间的关系。在 TOUGH2-FLAC3D 的基础上, 利用 FISH 语言开发水力压裂模块, 实现了 THM 三场耦合模拟。FEHM 软件基于有限体积法, 建立了多孔裂隙水流模型, 模拟岩石在应力、温度等影响下的渗透率和孔隙度等的变化。国内开发的 RFPA 系列软件是基于有限元理论和损伤理论对非均质各向异性材料进行破坏过程的数值模拟。RFPA3D-FLOW 通过建立的非均质裂隙岩体在多场耦合作用下的物理模块, 研究分析岩石在多场耦合作用下的损伤演化和应力分布。ABAQUS 在岩土介质多场耦合中使用较为广泛, 基于温度-水流-应力三场耦合数学模型, 使用 Matlab 语言, 以 ABAQUS 为求解器开发 THM 多场耦合程序, 分析岩石多场耦合效应^[50]。运用 ANSYS 有限元软件对岩石多场耦合条件下的细观结构进行力学分析, 建立多场耦合作用的数学模型, 对深部软岩巷道围岩进行温度-应力-化学耦合作用的蠕变规律进行数值模拟。

根据现场工程实际, 综合考虑裂隙岩体的温度-水流-应力-化学 (THMC) 多场耦合机理与数值模拟更符合实际。THMC 多场耦合效应数值模拟的重难点主要在于确定化学场作用下水化学对岩石参数的影响和化学场作用下矿物的运移机制, 进一步得出考虑化学场的裂隙岩体多场耦合作用机理。2003 年开始的国际合作项目 DECOVALEX-THMC 极大促进了化学场的研究工作。THMC 四场耦合作用的数值模拟软件主要有 TOUGHREACT、FLAC3D 和 COMSOL。

Hou 等^[51]将 TOUGHREACT 与 FLAC3D 相结合开发了岩石 THMC 四场耦合软件, 可以综合反映岩石热传导性能、水压、化学反应及裂隙渗透性能。多场耦合作用主要表现在应力导致的裂隙面的磨平和固热流化多场耦合作用下裂隙的扩展和岩石矿物的溶解^[52]。多场耦合软件模拟得出注入低温流体时的水压效应在几天内显现, 热效应在一个月左右显现, 而化学效应在一年左右显现。于子望等^[53]介绍了 TOUGHREACT 和 FLAC3D 的

搭接方法, 对实测值与数值模拟数据进行了对比分析, 验证数值模拟软件的实用性。

Comsol 是一款通用的数值仿真软件, 通过添加模块实现对岩石多场耦合作用的模拟, 其中数学模型模块可以通过自订立偏微分方程组的形式进行模型构建和模拟。Comsol 与 Matlab 可以实现完美对接, 利用 Matlab 进行模型设定和预处理, 生成需要的随机裂隙网络模型。国内对 Comsol 涉及化学场的耦合模拟研究相对较少。国外的研究中, Nardi 等^[54]通过 COMSOL 和 PHREEQC 搭接的方法对 THMC 耦合进行模拟, Nasir 等^[55]利用 MATLAB 对 COMSOL 与 PHREEQC 程序进行搭接, 使用 COMSOL 计算流固热耦合部分, 使用 PHREEQC 程序计算化学反应部分, 得出的数值模拟结果与实验数据有良好的匹配性。

3 结论与展望

本文总结分析了国内外关于裂隙岩体在温度-水力-应力-化学 (THMC) 多场耦合作用下的岩石微观-细观-宏观多尺度力学试验设备的改进和研发, 以及数值模拟软件和耦合计算程序的开发等方面的研究, 分析探讨了岩石在多场耦合作用下研究的重难点。

岩石多场耦合研究中, 目前的研究重点还是集中在两场、三场耦合状态下的岩石力学性能, 而化学场的引入是今后研究 THMC 四场耦合作用的关键和重点。因此, 需要强化相关理论知识, 优化实验设备, 基于多场耦合模型相关实验结果的支撑, 开展相关的原位实验研究, 建立可靠的数据库, 为模型的研究与数值计算提供指导和保障。

基于不同科研单位的创新研发成果, 优化岩石多场多相耦合作用下的力学性能试验设备, 对应力场、温度场、水流场、化学场等多场耦合作用下岩石的三轴加载、水压致裂、裂隙水流、化学劣化等不同试验研究, 辅助以微观机理研究设备, 分析其多场耦合作用机理, 有效模拟现场工程问题, 以期得到有利于改进现场施工、对工程有一定指导和参考价值的结果。

研究多场耦合作用过程中, 要充分考虑岩石所处的多场耦合作用场在不同时间、空间尺度下的耦合作用机理及岩石各向异性对数值模拟准确性产生的影响, 通过对多场耦合作用机理的分析, 构建更合理的模型并将其应用到数值方法和程序实现等方面。

参 考 文 献

- [1] Wang Y C. *Study on Creep Law of Deep Soft Rock under Thermal-Mechanical-Chemical Coupling Effect* [Dissertation]. Qingdao: Qingdao University of Science and Technology, 2013
(王艳春. 深部软岩温度—应力—化学三场耦合作用下蠕变规律研究[学位论文]. 青岛: 青岛科技大学, 2013)
- [2] Chen W Z, Yu H D, Wang X Q, et al. Development of a double linkage triaxial testing machine for hydro-mechanical coupling in soft rock. *Chin J Rock Mech Eng*, 2009, 28(11): 2176
(陈卫忠, 于洪丹, 王晓全, 等. 双联动软岩渗流—应力耦合流变仪的研制. *岩石力学与工程学报*, 2009, 28(11): 2176)
- [3] Jia Y R. Research on triaxial rock creep apparatus and its preliminary test results. *J Wuhan Inst Hydraul Eng*, 1985(1): 149
(贾愚如. 岩石三轴流变仪的研制及初步试验成果. *武汉水利电力学院学报*, 1985(1): 149)
- [4] Ping C, Wen Y D, Wang Y X, et al. Study on nonlinear damage creep constitutive model for high-stress soft rock. *Environ Earth Sci*, 2016, 75(10): 900
- [5] Wang X J, Rong G, Zhou C B. Permeability experimental study of gritstone in deformation and failure processes. *Chin J Rock Mech Eng*, 2012, 31(Suppl1): 2940
(王小江, 荣冠, 周创兵. 粗砂岩变形破坏过程中渗透性试验研究. *岩石力学与工程学报*, 2012, 31(增刊1): 2940)
- [6] Peng J, Rong G, Zhou C B, et al. Experimental study of effect of water pressure on progressive failure process of rocks under compression. *Rock Soil Mech*, 2013, 34(4): 941
(彭俊, 荣冠, 周创兵, 等. 水压影响岩石渐进破裂过程的试验研究. *岩土力学*, 2013, 34(4): 941)
- [7] Sheng J C, Li F B, Yao D S, et al. Experimental study of seepage properties in rocks fracture under coupled hydro-mechano-chemical process. *Chin J Rock Mech Eng*, 2012, 31(5): 1016
(盛金昌, 李凤滨, 姚德生, 等. 渗流-应力-化学耦合作用下岩石裂隙渗透特性试验研究. *岩石力学与工程学报*, 2012, 31(5): 1016)
- [8] Ye Y M. *Research on Heating System and Hydraulic Servo System of Integral Rock Mechanics Testing Machine* [Dissertation]. Beijing: Beijing Jiaotong University, 2018
(叶育茂. 一体式岩石力学试验机加热系统及液压伺服系统研究[学位论文]. 北京: 北京交通大学, 2018)
- [9] Zhou H, Tang Y C, Hu D W, et al. Study on coupled penetrating-dissolving model and experiment for salt rock cracks. *Chin J Rock Mech Eng*, 2006, 25(5): 946
(周辉, 汤艳春, 胡大伟, 等. 盐岩裂隙渗流—溶解耦合模型及试验研究. *岩石力学与工程学报*, 2006, 25(5): 946)
- [10] Zhang D C, Zhou J P, Xian X F, et al. Experiment study on the coupling multi-field effect on the dynamic variation of permeability in shale. *Chin J Underground Space Eng*, 2018, 14(3): 613
(张道川, 周军平, 鲜学福, 等. 多场耦合作用下页岩渗透特性实验研究. *地下空间与工程学报*, 2018, 14(3): 613)
- [11] Sheng J C, Du Y C, Zhou Q, et al. Development and application of a permeability test system for rock coupling thermal-hydrological-mechanical-chemical Processes. *J Yangtze River Sci Res Inst*, 2019, 36(3): 145
(盛金昌, 杜昀宸, 周庆, 等. 岩石THMC多因素耦合试验系统研制与应用. *长江科学院院报*, 2019, 36(3): 145)
- [12] Xu W J, Wang S, Zhang H Y, et al. Discrete element modelling of a soil-rock mixture used in an embankment dam. *Int J Rock Mech Min Sci*, 2016, 86: 141
- [13] Liu D M, Cai M F, Zhou Y B. Study on the relationship between meso damage development and macro deformation of rock under uniaxial compression. *China Tungsten Ind*, 2006, 21(4): 16
(刘冬梅, 蔡美峰, 周玉斌. 岩石细观损伤演化与宏观变形响应关联研究. *中国钨业*, 2006, 21(4): 16)
- [14] Zhang F, Wang L, Zhao J J, et al. Evolution of permeability of granite with tensile and compressive-shear cracks. *Rock Soil Mech*, 2016, 37(10): 2803
(张帆, 王亮, 赵建建, 等. 花岗岩张拉和压剪裂隙渗透率演化研究. *岩土力学*, 2016, 37(10): 2803)
- [15] Polak A, Elsworth D, Liu J S, et al. Spontaneous switching of permeability changes in a limestone fracture with net dissolution. *Water Resour Res*, 2004, 40(3): W03502
- [16] Zhou H W, He J M, Wu Z D. Permeability and meso-structure characteristics of bedded salt rock. *Chin J Rock Mech Eng*, 2009, 28(10): 2068
(周宏伟, 何金明, 武志德. 含夹层盐岩渗透特性及其细观结构特征. *岩石力学与工程学报*, 2009, 28(10): 2068)
- [17] Homand-Etienne F, Houpert R. Thermally induced microcracking in granites: characterization and analysis. *Int J Rock Mech Min Sci Geomech Abstracts*, 1989, 26(2): 125
- [18] Wang Y, Dusseault M B. A coupled conductive—convective thermo-poroelastic solution and implications for wellbore stability. *J Petrol Sci Eng*, 2003, 38(3-4): 187
- [19] Ge X R. Deformation control law of rock fatigue failure, real-time X-ray CT scan of geotechnical testing, and new method of stability analysis of slopes and dam foundations. *Chin J Geotech Eng*, 2008, 30(1): 1
(葛修润. 岩石疲劳破坏的变形控制律、岩石力学试验的实时X射线CT扫描和边坡坝基抗滑稳定分析的新方法. *岩土工程学报*, 2008, 30(1): 1)
- [20] Chen S L, Zhang J Y, Ning B K, et al. Experimental study of sodium sulfate solution effect on the shear strength of cemented soil. *Adv Sci Technol Water Resour*, 2015, 35(6): 82
(陈四利, 张精禹, 宁宝宽, 等. 硫酸钠溶液对水泥土抗剪强度的影响试验. *水利水电科技进展*, 2015, 35(6): 82)
- [21] Chen S L, Feng X T, Li S J. The effects of chemical erosion on mechanical behaviors of Xiaolangdi sandstone. *Rock Soil Mech*, 2002, 23(3): 284
(陈四利, 冯夏庭, 李邵军. 化学腐蚀对黄河小浪底砂岩力学特性的影响. *岩土力学*, 2002, 23(3): 284)
- [22] Zhou K Q, Chu Z H, Zhang Y Z, et al. Research of the detection

- method and thermal cracking of rock. *Chin J Rock Mech Eng*, 2000, 19(4): 412
(周克群, 楚泽涵, 张元中, 等. 岩石热开裂与检测方法研究. *岩石力学与工程学报*, 2000, 19(4): 412)
- [23] Yang J, Kang Y L, Li C L, et al. Study on the time-space distribution of liquid phase around wellbore in the fractured tight sandstone reservoir. *Oil Drill Prod Technol*, 2010, 32(1): 57
(杨建, 康毅力, 李朝林, 等. 裂缝性致密砂岩储层井周液相时空分布规律. *石油钻采工艺*, 2010, 32(1): 57)
- [24] Dong J J, Hsu J Y, Wu W J, et al. Stress-dependence of the permeability and porosity of sandstone and shale from TCDP Hole-A. *Int J Rock Mech Min Sci*, 2010, 47(7): 1141
- [25] Lysmer J, Kulemeyer R L. Finite dynamic models for infinite media. *J Eng Mech Div*, 1969, 95: 759
- [26] Jaswon M A, Poter A R. An integral equation solution of the torsion problem. *Proc R Soc London Ser A*, 1963, 273(1353): 237
- [27] Cundall P A. A computer model for simulating progressive, large scale movements in rocky block systems. *Proc Symp Int Soc Rock Mech*, 1971, 2: 129
- [28] Shi G H. *Discontinuous Deformation Analysis for Jointed Rock Masses and Other Dynamics of Block System* [Dissertation]. Berkeley: University of California, 1988
- [29] Yan B, Kouame K J, Lv W, et al. Influence of new hydrophobic agent on the mechanical properties of modified cemented paste backfill. *J Mater Res Technol*, 2019, 8(6): 5716
- [30] Liu Q S, Liu X W. Research on critical problem for fracture network propagation and evolution with multifield coupling of fractured rock mass. *Rock Soil Mech*, 2014, 35(2): 305
(刘泉声, 刘学伟. 多场耦合作用下岩体裂隙扩展演化关键问题研究. *岩土力学*, 2014, 35(2): 305)
- [31] Steefel C I, Appelo C A, Arora B, et al. Reactive transport codes for subsurface environmental simulation. *Comput Geosci*, 2015, 19(3): 445
- [32] White M D, Phillips B R. Code comparison study fosters confidence in the numerical simulation of enhanced geothermal systems // *Fortieth Workshop on Geothermal Reservoir Engineering*. Stanford, 2015: SGP-TR-204
- [33] Pirnia P, Duhaime F, Ethier Y, et al. ICY: an interface between COMSOL multiphysics and discrete element code YADE for the modelling of porous media. *Comput Geosci*, 2018, 123: 38
- [34] Xia Y D, Plummer M, Mattson E, et al. Design, modeling, and evaluation of a doublet heat extraction model in enhanced geothermal systems. *Renewable Energy*, 2017, 105: 232
- [35] Pandey S N, Chaudhuri A, Kelkar S. A coupled thermo-hydro-mechanical modeling of fracture aperture alteration and reservoir deformation during heat extraction from a geothermal reservoir. *Geothermics*, 2017, 65: 17
- [36] Kolditz O, Shao H, Wang W Q, et al. *Thermo-Hydro-Mechanical Chemical Processes in Fractured Porous Media: Modelling and Benchmarking*. Berlin: Springer, 2016
- [37] Scheibe T D, Yang X F, Chen X Y, et al. A hybrid multiscale framework for subsurface flow and transport simulations. *Procedia Comput Sci*, 2015, 51: 1098
- [38] Cao W J, Huang W B, Jiang F M. A thermal-hydraulic-mechanical fully coupled model for heat extraction in enhanced geothermal systems // *Proceedings World Geothermal Congress*. Melbourne, 2015: 1
- [39] Vecchiarelli A. *Application of the 3-D Hydro-Mechanical Model GEOFRAC in Enhanced Geothermal Systems* [Dissertation]. Massachusetts Institute of Technology, 2013
- [40] Rutqvist J. Status of the TOUGH-FLAC simulator and recent applications related to coupled fluid flow and crustal deformations. *Comput Geosci*, 2011, 37(6): 739
- [41] Blair S C, Carlson S R, Lee K, et al. Coupled THM simulations of the drift scale test at Yucca Mountain // *5th American Rock Mechanics Symposium (NARMS) and 17th Tunneling Association of Canada (TAC) Conference*. Toronto, 2002
- [42] Clauser C, Bartels J. *Numerical Simulation of Reactive Flow in Hot Aquifers: SHEMAT and Processing SHEMAT*. Springer Science & Business Media, 2003
- [43] Xu T F, Sonnenthal E, Spycher N, et al. TOUGHREACT—a simulation program for non-isothermal multiphase reactive geochemical transport in variably saturated geologic media: applications to geothermal injectivity and CO₂ geological sequestration. *Comput Geosci*, 2006, 32(2): 145
- [44] Settgast R R, Johnson S, Fu P, et al. Simulation of hydraulic fracture networks in three dimensions utilizing massively parallel computing resources // *Unconventional Resources Technology Conference*. Denver, Colorado, 2014: 1730
- [45] Wong Z Y, Horne R, Voskov D. A geothermal reservoir simulator with AD-GPRS // *Proceedings World Geothermal Congress*. Melbourne, 2015: 1
- [46] Lie K A, Krogstad S, Ligaarde I S, et al. Open-source MATLAB implementation of consistent discretisations on complex grids. *Comput Geosci*, 2012, 16(2): 297
- [47] Diersch H J G. *FEFLOW: Finite Element Modeling of Flow, Mass and Heat Transport in Porous and Fractured Media*. Springer Science & Business Media, 2013
- [48] Yang B, Xu T F, Li F Y, et al. Numerical simulation on impact of water-rock interaction on reservoir permeability: a case study of upper Paleozoic sandstone reservoirs in Northeastern Ordos Basin. *J Jilin Univ Earth Sci*, 2019, 49(2): 526
(杨冰, 许天福, 李凤昱, 等. 水-岩作用对储层渗透性影响的数值模拟研究——以鄂尔多斯盆地东北部上中生界砂岩储层为例. *吉林大学学报(地球科学版)*, 2019, 49(2): 526)
- [49] Yan B, Guo Q, Ren F, et al. Modified Nishihara model and experimental verification of deep rock mass under the water-rock interaction. *Int J Rock Mech Min Sci*, 2020, 128: 104250
- [50] Wang X. Deformation characteristics of deep roadway under the influence of temperature and groundwater. *Coal Sci Technol Mag*, 2018(1): 22
(王晓. 深部巷道在温度和地下水影响下的变形特征. *煤炭科技*,

- 2018(1): 22)
- [51] Hou Z M, Gou Y, Taron J, et al. Thermo-hydro-mechanical modeling of carbon dioxide injection for enhanced gas-recovery (CO₂-EGR): a benchmarking study for code comparison. *Environ Earth Sci*, 2012, 67(2): 549
- [52] Yan B, Ren F, Cai M, et al. Bayesian model based on Markov chain Monte Carlo for identifying mine water sources in submarine gold mining. *J Clean Prod*, 2020, 253: 120008
- [53] Yu Z W, Zhang Y J, Zhang Q, et al. Algorithm of TOUGHREACT links to FLAC^{3D}. *J Jilin Univ Earth Sci Ed*, 2013, 43(1): 199
- (于子望, 张延军, 张庆, 等. TOUGHREACT 搭接 FLAC^{3D} 算法. 吉林大学学报(地球科学版), 2013, 43(1): 199)
- [54] Nardi A, Idiart A, Trinchero P, et al. Interface COMSOL-PHREEQC (iCP), an efficient numerical framework for the solution of coupled multiphysics and geochemistry. *Comput Geosci*, 2014, 69: 10
- [55] Nasir O, Fall M, Evgin E. A simulator for modeling of porosity and permeability changes in near field sedimentary host rocks for nuclear waste under climate change influences. *Tunnell Underground Space Technol*, 2014, 42: 122