DOI：10.16285/j.rsm.2017.0061

考虑物理性质参数变化的膨润土缓冲材料水−热耦合 SPH 数值解

许 韬，白 冰

（北京交通大学 土木建筑工程学院，北京 100044）

摘 要：为了研究热源温度和外界水压对缓冲层中水−热迁移规律的影响，以 GMZ 膨润土为例，从基于势能的非饱和土的水−热迁移控制方程出发，考虑了蒸发效应的影响，得到了水−热耦合的方程组，采用改进的光滑粒子流体动力学(SPH)算法，能够对每一处土体根据不同时刻的不同状态实时更新计算参数，得到参数变化的水−热耦合解。计算结果表明：土的物理性质参数与土体的温度和饱和度密切相关，是否考虑这些参数的变化会对计算结果产生较大影响；核废料释放的热量能够在较短的时间内扩散到外边界，水分迁移的速度则相对慢很多；缓冲层温度的升高会加快水分的迁移速度，外界水压对温度的分布则影响较小。

关 键 词：缓冲材料；非饱和土；水−热耦合；光滑粒子流体动力学（SPH）算法

中图分类号：TU 43 **文献标识码**：A **文章编号**：1000－7598 (2018) 10－3853－10

SPH numerical solutions of thermo-hydro coupling for bentonite with varying physical parameters

XU Tao, BAI Bing

（School of Civil Engineering, Beijing Jiaotong University, Beijing 100044, China）

Abstract: To study the effect of temperature and water pressure on heat and mass transfer in buffer material, taking the compacted Gaomiaozi bentonite as an example, coupled thermo-hydro equations are derived from potential-based control equations of unsaturated soil, with the consideration of evaporation. We modify the smoothed particle hydrodynamics (SPH) algorithm to get coupled solutions with varying parameters during the calculation. Parameters of each single representation elementary volume will be updated in real time according to the current state. Results indicate that: Because calculation parameters are closely related to soil's state, variation of parameters influence significantly on the results. The heat from nuclear waste can spread through the buffer in a short time, water migration rate is relatively slower. Increasing of buffer's temperature will accelerate the migration of water. In comparison, water pressure has smaller effect on temperature distribution.

Keywords: buffer material; unsaturated soil; thermo-hydro coupling; smoothed particle hydrodynamics (SPH) algorithm

1 引 言

深地质处置是目前国际上普遍认可的核废料处置方案，即将废物罐通过工程屏障隔离，深埋在稳定地质体中，降低其对生物圈的影响。压实的膨润土渗透性低，导热性能优良，吸附性好，将其作为缓冲材料填充在废物罐和围岩中，可实现工程屏障的功能。放射物的衰变过程会不断产生并释放热量，加上地下水的存在，缓冲材料内部会发生长时间的水−热耦合作用，其过程与材料的理化特性以及边界条件都密切相关。研究温度和水分迁移的规律和影响因素，能够对处置库运营过程中的安全性评估提供参考。

近年来国内外研究人员对缓冲材料的制备和性能进行了大量的研究，研究方法主要有实验室试验、数值模拟和现场试验 3 个方面[1−2]。刘月妙[3]、高玉

收稿日期：2017-03-13
基金项目：国家自然科学基金(No. 51478034，No. 51678043)；北京市自然科学基金(No. 8182046)。
This work was supported by the National Natural Science Foundation of China (51478034, 51678043) and the Beijing Natural Science Foundation (8182046).
第一作者简介：许韬，男，1993 年生，博士研究生，主要从事岩土介质数值模拟方面的研究工作。E-mail: ironway@163.com
通讯作者：白冰，男，1966 年生，博士，教授，博士生导师，主要从事岩土介质热力学特性方面的研究工作。E-mail: bbai@bjtu.edu.cn

峰[4]等对高庙子膨润土做了大量的试验，得到了所制备砌块的导热、水分和气体渗透性能等具有价值的参数。张玉军等[5]利用有限元对膨润土参数对热−水−力耦合过程的影响进行了初步的分析；Chen 等[6]建立了相对内容丰富的热−水−力耦合数值模型。但是这些模型并未完全考虑到土性参数会随温度、饱和度等状态发生改变而变化这一现象，也没有考虑水的表面张力系数和动力黏度等变化，以及非饱和土中的蒸发效应等因素，因此，更为精细的模型还需要进一步研究。

光滑粒子流体动力学(SPH)算法是一个基于拉格朗日形式的无网格算法，其特点是用离散的粒子来表示所研究的物体。SPH 方法由 Gingold 等[7]提出，Jeong 等[8]将该方法应用于热传导问题的计算，Cleary 等[9]提出了非均匀介质中 SPH 的计算方法，加上 SPH 算法本身无网格的特性，与传统的基于网格的数值方法如有限元等方法相比，SPH 算法具有适应求解域形状复杂、大变形、材料不均匀等优势，且占用内存小，程序易于编写和扩展，但是其在边界问题和交界面问题的处理上，具有天然的缺陷，如果不加处理，会产生精度的缺失[10]。

本文基于 SPH 算法的思想，针对所研究问题的具体情况，对传统 SPH 算法具体格式做出了一些修正，使其既保留对不均匀介质的适应性，又避免了边界面和交界面处可能发生的缺陷，能适应各类边界条件，具体来说适用于求解域具有一定几何规律的问题。结合基于非饱和土理论的渗流和热传导规律，考虑了蒸发效应的影响，给出了非饱和土的水−热耦合方程组，可以做到每一个时间步的每一个粒子计算参数都随当前状态保持更新，给出了缓冲材料在不同热源温度和外界水压影响下的温度分布与水分迁移的规律。

2 水−热耦合计算原理

2.1 热传导的控制方程

由于膨润土颗粒非常细小，土颗粒比表面积很大，可以达到 10～50 m^2/g 级别，因此，可做如下假设：将计算模型用大量分散的粒子点来表示，在每一个表征粒子内，液态水、孔隙气体和土颗粒的温度 T_l、T_g、T_s 会瞬间达到平衡，即每一个时间步内都有 $T_l=T_g=T_s$，（温度单位为℃）。且水汽的蒸发和凝结快速进行并瞬间达到动态平衡，孔隙中的相对湿度仅与当前吸力和温度有关[11]。另外由于空气的密度较小，故空气所携带的热量不单独考虑，用土体的三相整体的热传导系数来进行计算，便于处理也符合试验的条件（试验结果一般也只是给出整体的热传导系数）。孔隙间气压均为一个标准大气压，不考虑空气在水中的溶解度。

热传导的控制方程为

$$H\frac{\partial T}{\partial t}=\lambda\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}-\rho_l C_l u\frac{\partial T}{\partial x}-E\rho_l L+q \tag{1}$$

式中：H 为单位体积热容；T 为温度；λ 为热传导系数；ρ_l 为液态水的密度；C_l 为水的比热容；u 为水流速度；E 为水的体积蒸发速率；L 为水的蒸发潜热；q 为热源强度。因此，等号右侧第 2 项表示水分迁移携带的热量，第 3 项表示蒸发而吸收的潜热，第 4 项表示内部热源项。其中流速 u 可通过非饱和土中的达西定律得到。

$$u=-\frac{K_l}{\rho_l g}\frac{\partial\varphi(x)}{\partial x},\ \varphi=\psi+\rho_l gz \tag{2}$$

式中：K_l 为水的渗透系数；φ 为总压强；ψ 为吸力，非饱和状态时，ψ 的绝对值等于基质吸力；g 为重力加速度；z 为高度。

根据刘月妙等[3]的试验，材料导热系数 λ 随饱和度 S_ω 近似线性增长，对于 GMZ 膨润土砌块，热传导系数 λ_0 =1.2 W·m/℃，热传导相关系数 λ_1 =1.07。

$$\lambda(S_\omega)=\lambda_0+\lambda_1 S_\omega \tag{3}$$

单位体积热容为

$$H(S_\omega)=(1-n)\rho_s C_{ps}+S_\omega n\rho_l C_{pl}+(1-S_\omega)n\rho_{sat}(RH)C_{pv} \tag{4}$$

式中：n 为孔隙率；RH 为相对湿度；C_{ps}、C_{pl}、C_{pv} 分别为土颗粒、液态水和水汽的质量比热容；ρ_s 为土颗粒密度；ρ_{sat} 为当前温度饱和状态下的水蒸气分密度，是关于温度 T 的函数，从 10～100 ℃其值约从 0.01 kg/m^3 增加到 0.58 kg/m^3，远小于液态水的密度 10^3 kg/m^3，故计算中可以忽略这部分的热量。式（4）简化为

$$H(S_\omega)=(1-n)\rho_s C_{ps}+S_\omega n\rho_l C_{pl} \tag{5}$$

2.2 水分迁移的控制方程

采用基于势能的水分迁移方程，当土体处于非饱和状态时，水压为负，存在吸力势，当处于饱和状态时，水压为正。水分在压强差的驱使下发生迁移，由于膨润土质地致密，渗流缓慢，可以认为渗流符合达西定律，那么有控制方程：

$$n\frac{\partial S_\omega}{\partial t}=\frac{K_l}{\rho_l g}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+\frac{\partial K_l(x)}{\partial x}\vec{n}\cdot\vec{z}-E \tag{6}$$

$\vec{n}\cdot\vec{z}$ 为问题方向向量和竖直向上的 z 轴的单位

向量的点积，表示重力的影响。

渗透系数为固有渗透率乘以比渗透系数，固有渗透率 K_{int} 通过试验得到[6]，本文取值见表 1，比渗透系数 $K_{\mathrm{r}}=S_{\omega}^{3}$。且由于温度的升高会使水的动力黏度下降，所以渗透系数 K_{l} 会随温度升高而升高。

$$K_{\mathrm{l}}\left(S_{\omega},T\right)=\frac{K_{\mathrm{int}}S_{\omega}^{3}}{\mu_{\mathrm{l}}\left(T\right)}\rho_{\mathrm{l}}g \tag{7}$$

水的动力黏度 μ_{l} 有如下近似的拟合公式[12]：

$$\mu_{\mathrm{l}}\left(T\right)=0.666\times\left(T+46\right)^{-1.55}\times10^{-6} \tag{8}$$

室温取 T_{rm} =20 ℃，此时 μ_{l} 约为 1.0×10^{-9} MPa • s，而 90 ℃时 μ_{l} 约为 0.32×110^{-9} MPa • s。水的密度受温度影响较小，因此，$\rho_{\mathrm{l}}g$ =9.8×10^{-3} MPa/m，可以认为是常数。为了计算的简化，令：

$$\frac{K_{\mathrm{l}}}{\rho_{\mathrm{l}}g}=K_{\psi} \tag{9}$$

将式（9）代入式（6）得

$$n\frac{\partial S_{\omega}}{\partial t}=K_{\psi}\frac{\partial^{2}\psi(x)}{\partial x^{2}}+\rho_{\mathrm{l}}g\frac{\partial K_{\psi}(x)}{\partial x}\vec{n}\cdot\vec{z}-E \tag{10}$$

其中：K_{ψ} 的单位为 m^2/(MPa • s)，表达式为

$$K_{\psi}=\frac{K_{\mathrm{int}}S_{\omega}^{3}}{\mu_{\mathrm{l}}\left(T\right)} \tag{11}$$

非饱和土的基质吸力 ψ 与饱和度和温度有关，关系式取决于土体和溶液的性质，可通过试验得到。

2.3　水汽迁移的控制方程

水汽的来源有两部分：来自孔隙间液态水的蒸发和来自相邻介质中水汽的传递，其控制方程与水分迁移的方程类似，只是不需要考虑重力因素。

$$\frac{\partial\theta_{\mathrm{v}}}{\partial t}=\frac{\rho_{\mathrm{v}}}{\rho_{\mathrm{l}}}K_{\mathrm{v}}\frac{\partial^{2}p_{\mathrm{v}}(x)}{\partial x^{2}}+E \tag{12}$$

式中：p_{v} 为水汽的分压，大小等于饱和水汽压 p_{sat} 和相对湿度 RH 的乘积。

$$p_{\mathrm{v}}=p_{\mathrm{sat}}RH \tag{13}$$

$$p_{\mathrm{sat}}=0.611\times10^{-3}\exp\left(17.27\frac{T}{T+237}\right) \tag{14}$$

K_{v} 为水汽扩散系数，一般来说与土体性质有关，试验表明[4]，干密度越大，膨润土颗粒排列越紧密，气体渗透性越小。且试验表明 K_{v} 与饱和度有关，温度对 K_{v} 的影响不大。

$$K_{\mathrm{v}}=\frac{K_{\mathrm{v,int}}\left(1-S_{\omega}\right)^{3}}{\mu_{\mathrm{v}}} \tag{15}$$

式中：$K_{\mathrm{v,int}}$ 为干燥条件下的气体固有渗透率[4]，取值见表 1，水汽的动力黏度约为 μ_{v} =1.8×10^{-11} MPa • s。

θ_{v} 表示孔隙间的水汽若凝结成水所占土体体积的比例：

$$\theta_{\mathrm{v}}=\left(1-S_{\omega}\right)n\frac{\rho_{\mathrm{v}}}{\rho_{\mathrm{l}}} \tag{16}$$

其中：

$$\rho_{\mathrm{v}}=\rho_{\mathrm{sat}}RH=\rho_{\mathrm{sat}}\left(T\right)RH\left(\psi,T\right) \tag{17}$$

$$RH=\exp\left[\frac{\psi v_{\mathrm{w}}}{R(T+273.15)}\times10^{6}\right] \tag{18}$$

式中：v_{w} 为水的摩尔体积，v_{w} =1.8×10^{-5} m^3/mol；ρ_{sat} 为饱和状态下的水蒸气分密度（kg/m^3）；R 为气体状态方程中的普适气体常数，R=8.314 4 J/(mol •℃)。

$$\rho_{\mathrm{sat}}=0.005\,144\exp\left(0.063\,74T-1.634\times10^{-4}T^{2}\right) \tag{19}$$

比较式（13）和式（17）得

$$p_{\mathrm{v}}=p_{\mathrm{sat}}\frac{\rho_{\mathrm{v}}}{\rho_{\mathrm{sat}}} \tag{20}$$

将式（20）代入式（12）可得

$$\frac{\partial\theta_{\mathrm{v}}}{\partial t}=\frac{\rho_{\mathrm{v}}}{\rho_{\mathrm{l}}}K_{\mathrm{v}}\frac{p_{\mathrm{sat}}}{\rho_{\mathrm{sat}}}\frac{\partial^{2}\rho_{\mathrm{v}}(x)}{\partial x^{2}}+E \tag{21}$$

将式（17）代入式（21）得

$$\frac{\partial\theta_{\mathrm{v}}}{\partial t}=K_{\mathrm{v}}\frac{p_{\mathrm{sat}}}{\rho_{\mathrm{l}}}RH\frac{\partial^{2}\rho_{\mathrm{v}}(x)}{\partial x^{2}}+E \tag{22}$$

将 $K_{\rho\mathrm{v}}$ 表示为与饱和度和温度有关的函数，单位为 m^5/(MPa • s)。

$$K_{\rho\mathrm{v}}=K_{\mathrm{v}}\frac{p_{\mathrm{sat}}}{\rho_{\mathrm{l}}}RH=K_{\rho\mathrm{v}}\left(S_{\omega},T\right) \tag{23}$$

$K_{\rho\mathrm{v}}$ 的控制方程简化为

$$\frac{\partial\theta_{\mathrm{v}}}{\partial t}=K_{\rho\mathrm{v}}\frac{\partial^{2}\rho_{\mathrm{v}}(x)}{\partial x^{2}}+E \tag{24}$$

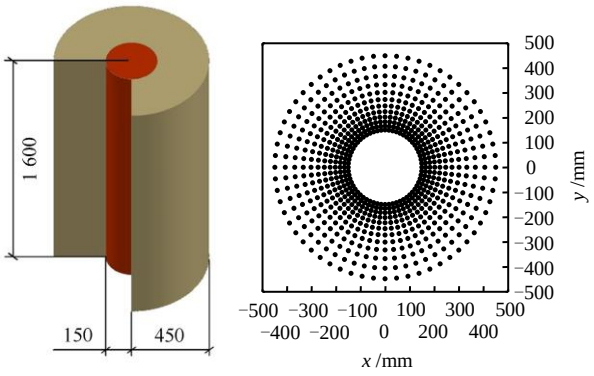
式（16）表示 θ_{v} 与 S_{ω} 和 ρ_{v} 有关，ρ_{v} 是一个与当前吸力和温度有关的状态量，而吸力 ψ 又是关于饱和度 S_{ω} 和温度 T 的函数，因此，水汽含量 θ_{v} 可以表示为 S_{ω} 和 T 的函数。

$$\theta_{\mathrm{v}}=\theta_{\mathrm{v}}\left(S_{\omega},T\right) \tag{25}$$

将水汽迁移公式和热传导的公式联立，即可得到蒸发速率 E，进而得到水分迁移的结果。利用水分迁移的结果，可以得到耦合后的水汽迁移和热传导结果，3 个控制方程互相影响，形成耦合。

3 计算模型和参数

处置库计算模型如图 1 所示，整体为圆柱形，中心部分为废物罐(热源)，废物罐被厚度为 300 mm 的膨润土紧密包裹，外界为岩体。岩体的渗透系数较大，高水压试验渗透系数在 10^{-5}～10^{-7} cm/s 之间[13]，可以认为岩体中水流充足且外界水压可以保持恒定。数值计算中，可用纯水来替代饱和岩体的导热作用，并设定水压来模拟岩体中的孔隙水压力。在温度计算中，第 1 类边界距离膨润土外侧 100 mm，温度恒为 20 ℃。不考虑膨润土与水交界面的热阻，将模型看成复合介质模型，而 SPH 算法对于此类边界问题不需要单独处理，计算方法与处理不均匀介质问题完全相同。图 1 右侧为粒子离散示意图。



(a) 处置库示意图（单位：mm） (b) SPH 粒子离散示意图

图 1 数值计算模型示意图

Fig.1 Diagram of numerical model

从模型可以看出该数值试验本质上属于一维轴对称问题，热传导偏微分方程变为

$$H\frac{\partial T}{\partial t}=\lambda\left(\frac{\mathrm{d}^2T}{\mathrm{d}r^2}+\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r}\right)-\rho_{\mathrm{l}}C_{\mathrm{l}}u\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r}-E\rho_{\mathrm{l}}L+q \quad (26)$$

式中：r 表示粒子点的坐标值。膨润土的内热源项 q=0，且由于废物罐竖直放置，温度和水分水平方向扩散，可不考虑重力作用，即 $\vec{n}\cdot\vec{z}=0$，同理，水分迁移的控制方程极坐标形式为[14−15]

$$n\frac{\partial S_\omega}{\partial t}=K_\psi\left(\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}r^2}+\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r}\right)-E \quad (27)$$

水汽迁移的控制方程极坐标形式为

$$\frac{\partial\theta_{\mathrm{v}}}{\partial t}=K_{\rho\mathrm{v}}\left(\frac{\mathrm{d}^2\rho_{\mathrm{v}}}{\mathrm{d}r^2}+\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}\rho_{\mathrm{v}}}{\mathrm{d}r}\right)+E \quad (28)$$

土体在非饱和状态下的基质吸力与饱和度和温度有关，关系如下：

$$\psi\left(S_\omega,T\right)=\psi_{\mathrm{r}}\left(S_\omega\right)\sigma(T) \quad (29)$$

式中：$\sigma(T)$ 为水的表面张力系数，与温度有关，表达式为

$$\sigma(T)=\sigma_0-\sigma_1(T-T_{\mathrm{rm}}) \quad (30)$$

温度的单位为℃，处置库的设计规定废物体表面温度应限制在 100 ℃以内[16]，故不需要考虑水的沸腾问题。$\psi_{\mathrm{r}}(S_\omega)$ 为膨润土的土−水特征曲线(SWCC)，本文采用 GMZ 膨润土，根据 Chen 等[17]提出的模型可描述为

$$\psi_{\mathrm{r}}=-\left(a_3\frac{S_{\mathrm{s}}-S_\omega}{S_\omega-S_{\mathrm{res}}}\right)^{1/a_2}/a_1 \quad (31)$$

式中：S_{s} 为吸水过程中吸力趋于 0 时的饱和度，取 S_{s}=95%；S_{res} 为吸力相关系数。

数值计算是模拟土体在外界水压影响下饱和的过程，使用吸水曲线(wetting curve)。数值试验中孔隙率取 0.35，对应干密度约为 1.75 g/cm^3，初始饱和度取 48%。数值计算所需参数见表 1。

表 1 数值计算的相关参数

Table 1 Parameters in numerical calculation

孔隙率 n	水的密度 ρ_{l} /(kg/m^3)	土颗粒密度 ρ_{s} /(kg/m^3)	初始饱和度 $S_{\omega0}$/%	比热容/(J/(kg·℃)) 水 C_{l}	比热容/(J/(kg·℃)) 土颗粒 C_{s}	水的蒸发潜热 /(J/(kg))	固有渗透率/m^2 液体 K_{int}	固有渗透率/m^2 气体 $K_{\mathrm{v,int}}$	热传导系数λ_0 /(W·m/℃)	热传导相关系数λ_1	S_{s} /%	a_1 /MPa^{-1}	a_2	a_3	σ_0	σ_1 /℃$^{-1}$	S_{res}
0.35	1 000	2 700	48	4 200	1 200	2.4×10^{-6}	2×10^{-21}	5×10^{-17}	1.2	1.07	95	3.5	0.8	90	1	0.004	0.1

注：a_1、a_2、a_3、σ_0、σ_1、S_{res} 为吸力相关系数。

4 数值计算处理

4.1 控制方程的 SPH 离散

SPH 方法的基本思想是将求解域用多个离散的粒子点来代表，每个粒子点都具有一定的体积和质量，以及其所代表区域的物理性质（如渗透系数导热系数等），每个粒子会受到相邻一定范围内的粒子的影响，此范围称为影响域，利用一个具有 Dirac

函数性质的核函数对影响域内的其他粒子加权求和，即可得到待求点的粒子的信息。

$$T(\boldsymbol{r}_i)=\int_{\Omega}T(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r},h)\mathrm{d}V \tag{32}$$

式中：$T(\boldsymbol{r})$为场函数；$\boldsymbol{r}$ 为位置矢量；Ω 为积分区域；δ 为 Dirac 函数；h 为光滑长度，h 决定了影响域的范围；dV 为积分微元。如果粒子取的足够密集，该式是严格成立的。实际计算中用特定的核函数 W 替代 δ，并将积分形式离散成求和形式，有

$$T_i=\sum_{j=1}^{n}T_jW(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r},h)\frac{m_j}{\rho_j} \tag{33}$$

式中：W 为核函数；m_j 为质量；ρ_j 为密度。

直接对 SPH 的离散形式中的核函数求导即可得到相应场函数的导数，但是对于温度二阶导数，直接对核函数求二阶导会引起一些非物理的结果。比如说粒子 j 向 i 传递的热量仅取决于 j 的温度和 j 与 i 的距离，而与 i 的温度无关，且大多数的核函数的二阶导数不能在坐标轴的一侧保持同号，因此，并不能直接用于热传导问题的计算。Jeong 等[8]将核函数的一阶导数经过特殊处理，提出了求解热传导问题的实用方案，热传导的 SPH 表达式为

$$\frac{\partial^2T_i}{\partial x^2}=\sum_{j=1}^{n}\frac{2m_j}{\rho_j}(T_i-T_j)\frac{\boldsymbol{x}_{ij}}{\boldsymbol{r}_{ij}^2}\frac{\partial W(\boldsymbol{r}_{ij},h)}{\partial x_i} \tag{34}$$

式中：$\boldsymbol{x}_{ij}=x_i-x_j$，$\boldsymbol{x}$ 为粒子某一方向上的坐标值；$\boldsymbol{r}_{ij}=|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|$，$\boldsymbol{r}$ 空间位置的矢量，是空间坐标 x，y，z 的多元函数，对应的 $\boldsymbol{r}_{ij}$ 是表示粒子间空间距离的量，在一维问题下 $\boldsymbol{r}_{ij}=\boldsymbol{x}_{ij}$。而常规形式的热传导控制方程 $H\dfrac{\partial T}{\partial t}=\lambda\dfrac{\partial^2T}{\partial x^2}$ 只适用于均匀介质，将不均匀性考虑进去得到：

$$\lambda_i\frac{\partial^2T_i}{\partial x^2}=\sum_{j=1}^{n}\frac{2m_j}{\rho_j}(T_i-T_j)\lambda_{ij}\frac{\boldsymbol{x}_{ij}}{\boldsymbol{r}_{ij}^2}\frac{\partial W(\boldsymbol{r}_{ij},h)}{\partial x_i} \tag{35}$$

其中，导热系数为

$$\lambda_{ij}=\left(\frac{\alpha}{\lambda_i}+\frac{1-\alpha}{\lambda_j}\right) \tag{36}$$

式中：α 表示粒子间分界处与粒子点的位置关系，一般认为分界处与两粒子距离相等，α 取 0.5[9]；λ_{ij} 为 λ_i 和 λ_j 的调合平均数。

常规的核函数如高斯函数一般为钟形曲线，其导函数一般在 y 轴两侧有两个符号相反的极值，且在 x=0 处为 0，这不符合距离越近，热传导速度越快的物理规律，因此，本文使用的核函数导数取为

$$\frac{\partial W(\boldsymbol{r}_{ij},h)}{\partial x_i}=-\frac{1}{2\boldsymbol{x}_{ij}h_i} \tag{37}$$

核函数形式见图 2，粒子 i 为待求点，其余粒子点处的曲线值表示该点对 i 的影响程度，粒子距离越远，影响的程度越小，超出影响域的点不再参与计算。核函数的导数的值与 $\boldsymbol{x}_{ij}$ 成反比，Johnson 等[18]称具有此种特性的核函数可以解决压力不稳定问题。光滑长度 h 与粒子 i 周围的粒子分布疏密程度有关，粒子间距越大，h 取值越大，取

$$h_i=\frac{\sum_{j=1}^{n}|\boldsymbol{x}_{ij}|}{n}=\overline{|\boldsymbol{x}_{ij}|} \tag{38}$$

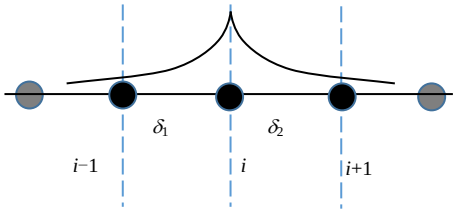


图 2　核函数形态以及相邻粒子示意图

Fig.2　Diagram of kernel function and adjacent particles

传统 SPH 算法影响域的半径通常为 1～3 倍的 h，影响域的大小决定了与 i 相关联的粒子数量，对于粒子随机布置的问题来说影响域越大，包含的粒子点越多，加权得到的值就越准确。然而影响域过大会使两个不相邻的粒子之间直接产生影响，即所谓的非物理渗透现象，在具有分界面的复合介质问题上是不符合自然规律的，且影响域过大也会导致在边界处出现缺陷，边界缺陷是 SPH 算法提出以来就一直需要面对的问题。为消除这些缺陷，将 h 取为所有最邻近粒子与 i 距离的平均值，且影响域半径为 1h，计算中不考虑土体变形，此粒子位置保持固定，圆柱体的求解域易于进行规则的离散，所以实际上对于一维问题，i 的相邻粒子只有 2 个。因此，近似地有

$$\frac{m_j}{\rho_j}=|x_j-x_i| \tag{39}$$

那么 SPH 的表达式（35）可以具体表示为

$$\lambda_i\frac{\partial^2T_i}{\partial x^2}=\frac{\lambda_{i,2}(T_i-T_{i+1})}{(x_i-x_{i+1})(\delta x_2+\delta x_1)/2}+\frac{\lambda_{i,1}(T_i-T_{i-1})}{(x_i-x_{i-1})(\delta x_2+\delta x_1)/2} \tag{40}$$

式中：$\delta x_1=|x_i-x_{i-1}|$；$\delta x_2=|x_i-x_{i+1}|$。

若一维问题中采用粒子均匀等间距布置的形式，即对任意的 i 有 $x_i - x_{i-1} = \Delta x$，再用 r 替换 x，则得到极坐标下径向等间距情况下的温度二阶导数为

$$\lambda_i \frac{\partial^2 T_i}{\partial r^2} = \frac{\lambda_{i,2}\left(T_{i+1} - T_i\right) + \lambda_{i,1}\left(T_{i-1} - T_i\right)}{\Delta r^2} \tag{41}$$

式中：Δr 为相邻粒子环之间的距离。对于极坐标中温度一阶导数，SPH 离散格式如下：

$$\lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial r} = \sum_{j=1}^{n} \frac{m_j}{\rho_j} T_j \lambda_{ij} \frac{\partial W\left(\boldsymbol{r}_{ij},\, h\right)}{\partial r_i} = \frac{\lambda_{i,2}\left(T_i - T_{i+1}\right)}{2(r_i - r_{i+1})} + \frac{\lambda_{i,1}\left(T_i - T_{i-1}\right)}{2(r_i - r_{i-1})} \tag{42}$$

对于粒子等间距布置的情况，有

$$\lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial r} = \frac{\lambda_{i,2}\left(T_{i+1} - T_i\right) + \lambda_{i,1}\left(T_i - T_{i-1}\right)}{2\Delta r} \tag{43}$$

同理水流速度公式为一阶导数的形式，有

$$u_i = -\left[\frac{K_{\mathrm{li},2}\left(\psi_{i+1} - \psi_i\right) + K_{\mathrm{li},1}\left(\psi_i - \psi_{i-1}\right)}{2\Delta r} + K_{\mathrm{li}} \vec{n}\cdot\vec{z} \cdot g\right] \tag{44}$$

水分迁移和水汽迁移的控制方程同为二阶导数形式，可以对其进行与热传导控制方程类似的处理，此处不再赘述。特别的，渗透系数的导数为

$$\frac{\partial K_{\mathrm{li}}(x)}{\partial x} = \frac{K_{\mathrm{l},i+1} - K_{\mathrm{l},i-1}}{2\Delta r} \tag{45}$$

4.2 时间积分和迭代过程

相关联的控制方程通过迭代求解。假设 t 时刻各点的温度、饱和度等状态已知，先不考虑蒸发的影响，即令 E=0，通过温度传递的控制方程为

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda \dfrac{\partial^2 T}{\partial r^2} - \rho_{\mathrm{l}} C_{\mathrm{l}} u \dfrac{\partial T}{\partial r}}{H} \tag{46}$$

得到各点温度随时间的导数，那么 t+Δt 时刻的温度为

$$T_i\big|_{t+\Delta t} = T_i\big|_t + \Delta t \frac{\partial T_i}{\partial t} \tag{47}$$

通过水分迁移控制方程

$$\frac{\partial S_\omega}{\partial t} = \frac{1}{n} \frac{K_{\mathrm{l}}}{\rho_{\mathrm{l}} g} \frac{\partial^2 \psi(r)}{\partial r^2} \tag{48}$$

得到 $t + \Delta t$ 时刻的饱和度分布为

$$S_{\omega,i}\big|_{t+\Delta t} = S_{\omega,i}\big|_t + \Delta t \frac{\partial S_{\omega,i}}{\partial t} \tag{59}$$

因此，可通过平衡时的水汽含量公式

$$\theta_{\mathrm{v}} = \left(1 - S_\omega\right) n \frac{\rho_{\mathrm{v}}}{\rho_{\mathrm{l}}} \tag{50}$$

得到 $t + \Delta t$ 时刻的 θ_{v} 分布为

$$\theta_{\mathrm{v},i}\big|_{t+\Delta t} = \theta_{\mathrm{v}}\left(S_{\omega,i}\big|_{t+\Delta t}, T_i\big|_{t+\Delta t}\right) \tag{51}$$

由水汽迁移的控制方程

$$\frac{\partial \theta_{\mathrm{v}}}{\partial t} = K_{\rho\mathrm{v}} \frac{\partial^2 \rho_{\mathrm{v}}(r)}{\partial r^2} + E \tag{52}$$

可知水汽的变化量减去因水汽迁移增加的水汽即可得到蒸发产生的水汽，进而得到蒸发速率为

$$E^s = \frac{\left(\theta_{\mathrm{v},i}\big|_{t+\Delta t} - \theta_{\mathrm{v},i}\big|_t\right)}{\Delta t} - K_{\rho\mathrm{v}} \frac{\partial^2 \rho_{\mathrm{v}}}{\partial r^2}\bigg|_t \tag{53}$$

式中：s 为迭代次数。将式（53）所得结果修正热传导和水分迁移公式得到：

$$T_i\big|^s_{t+\Delta t} = T_i\big|_{t+\Delta t} - \Delta t E^s \rho_{\mathrm{l}} L / H \tag{54}$$

$$nS_\omega\big|^s_{t+\Delta t} = nS_\omega\big|_{t+\Delta t} - \Delta t E^s \tag{55}$$

将修正后的结果代入式（55）得到新的蒸发速率 E^{s+1}，若满足下式：

$$\left|E^{s+1} - E^s\right| < \varepsilon \tag{56}$$

则认为已经收敛，否则将 E^{s+1} 替换式（54）、（55）中的 E^s，得到新的结果后重复上一步的计算，得到新的 E^{s+1}，直到满足收敛条件。

5 计算结果分析

5.1 水热迁移随时间的演化规律

采用一组工程中较认可的设计条件[6]来观察水热迁移随时间的演化规律。外边界水压为 2 MPa，初始温度和外边界温度均为 20 ℃，内边界热源温度固定为 90 ℃，相邻粒子间距为 0.01 m，时间步长为 10 s，时间积分采用欧拉法，通过编程实现。

由图 3 可以看出，温度 1 d 内就可以传递到外边界，30 d 后温度分布基本稳定。而水分从外界向内部渗透则是一个相对漫长的过程，最初的 90 d 内，缓冲层靠近内边界的部分还没有受到外界水压的影响，但是由于温度升高，饱和度出现略微的下降。外界水分在 t =180 d 渗透到内边界，随后缓冲层各部饱和度升高，开始逐渐饱和，在 t=3 a 时，整体饱和度能达到 85%以上。

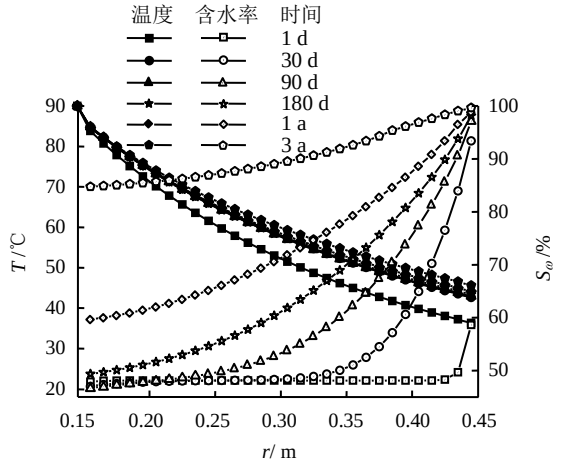


图 3　温度和饱和度分布随时间的演化
Fig.3　Evolutions of temperature and saturation vs. time

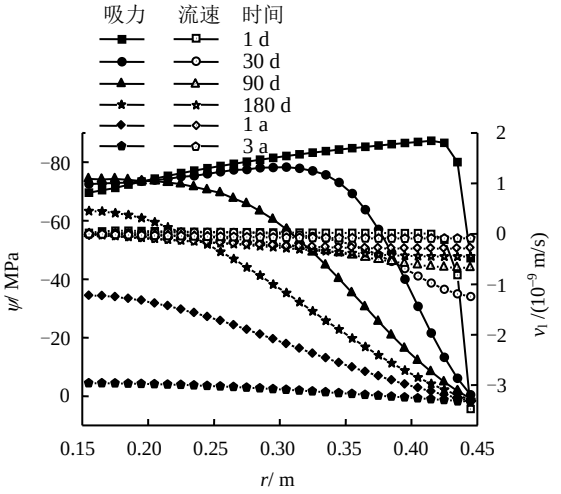


图 4　吸力和流速分布随时间的演化
Fig.4　Evolutions of suction and flow velocity vs. time

由图 4 可知，试验早期，尽管缓冲层内饱和度变化极小，但由于水的表面张力随温度升高而降低，温度升高会导致吸力减小，在吸力差的驱使下，土体水流方向由内向外，水流速度为正。随着时间的推移，土体从外向内逐渐饱和，吸力大幅降低，水流速度减慢，且从 90 d 开始缓冲层的各个位置水流方向都变为从外向内。结合图 4 表明，在缓冲层的水分迁移问题中，外界水压对饱和度的影响占主导地位。

5.2　计算结果的影响因素

5.2.1　土性参数变化的影响

在 5.1 节的 SPH 计算中，每一个粒子点的热传导系数、渗透系数等土性参数都会随着当前的温度、饱和度等状态实时更新，以得到更精确的结果。早期的一些数值模拟中，这些参数可能都为定值，或者考虑因素较为单一。保持边界条件与 5.1 节相同，将 λ、K_ψ 和 $K_{\rho v}$ 取初始值且固定不变，与考虑参数变化的计算结果对比如图 5 所示。

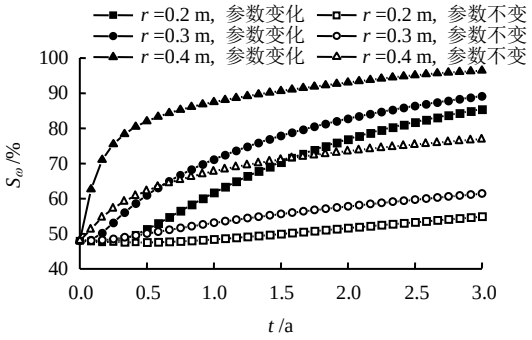


图 5　参数变化对饱和度分布的影响
Fig.5　Distribution of saturation with varying/constant parameters

由图 5 可知，参数的变化对饱和度分布影响很大，因为渗透系数是一个与饱和度和温度都有关的参数，饱和度越高，渗流的面积越大，渗透系数也就越高，此外温度升高，水的动力黏度会显著降低，也会使水分迁移加快。如果不考虑参数的变化，将会带来较大的误差。

由图 6 可以看出，参数变化对初期温度分布影响并不大，是因为热传导过程较快，在处置库的工作时间尺度内，温度的变化属于稳定后重分布的结果，由于饱和度直接影响热传导系数和比热容的大小，所以后期温度分布的变化很可能来源于饱和度分布的变化。所以在初期（1 d 和 30 d）时，温度分布相同，而在后期（3 a）时，考虑参数变化的缓冲层温度要略微高于不考虑参数变化的结果。

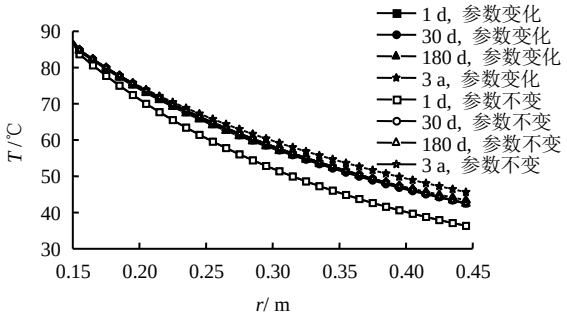


图 6　参数变化对温度分布的影响
Fig.6　Distribution of temperature with varying/constant parameters

5.2.2　蒸发效应的影响

水分的蒸发和凝结过程是一个持续地保持动态平衡的过程，温度和吸力的变化都会导致蒸发的平衡状态发生改变，而蒸发效应又会影响温度和水分的传递。本节的数值计算中假设膨润土层与外界没

有水分交换。土体受到热源的影响温度会升高，水分仅在温度的驱使下发生迁移，通过程序中是否加载蒸发模块来对比蒸发效应对水分迁移计算结果的影响。内边界温度为 90 ℃，初始温度和钢桶外边界都为 20 ℃，计算结果截取了 1 h、1 d 和 30 d 时的数据（见图 7）。

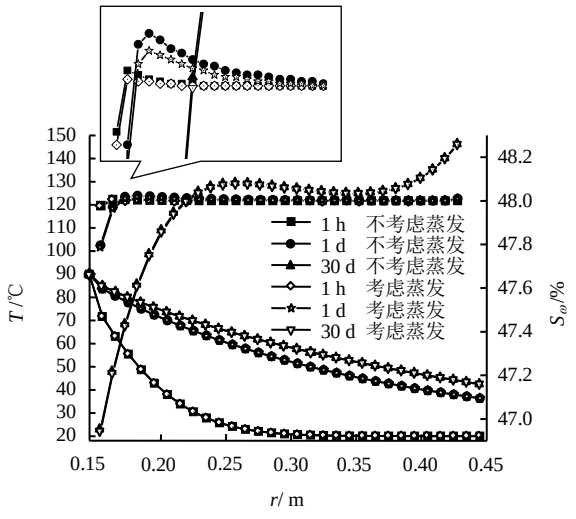


图 7 蒸发效应对水分迁移的影响

Fig.7 Influence of evaporation effect on moisture transfer

由图 7 可以看出，蒸发效应对热传导的影响并不显著，对于水分迁移，在试验早期（1 d 以内），蒸发效应会对饱和度的分布产生一定的影响。如果不考虑蒸发效应，由于不与外界进行水分交换，整个求解域的液态水总量一定，所以水分从热源处向外迁移，并在距离热源一定距离（约 0.05 m）外产生滞留。如果考虑蒸发效应，滞留的现象就不那么明显，分析可能是因为高温区域的水分以水汽的形式向外扩散了。30 d 后，两种情况的饱和度分布都趋于稳定，即近高温源处饱和度较低，近低温源处饱和度较高。总的来说，由于水汽迁移比液态水迁移要快，蒸发效应可以一定程度上加快水分传递，但图 7 中两饱和度曲线值相差最大不超过 0.02%，因此，认为在致密的膨润土砌块中，蒸发效应对饱和度的影响十分有限。

5.2.3 外界水压的影响

实际工程中，工程屏障一定会受到地下水的影响，由于地质处置要求埋深较深（大于 500 m），地下水压力往往较大。本次数值模拟条件为膨润土缓冲层周围被渗透系数为 10^{-6} m/s 的透水岩体所包围，岩体保持饱和，水压分别设定为 0、2、5、10 MPa 4 种情况，内热源温度保持为 90 ℃，时间跨度为处置库开始工作的 3 a 时间内，研究外界水压对热量和水分迁移的影响。

由图 8 可知，不同外界水压情况下，t=3 a 时的温度分布几乎相同，说明外界水压对温度的影响不大。但是饱和度的分布与外界水压密切相关。外界水压为 10 MPa 的情况下，整个膨润土层几乎完全饱和；水压为 5 MPa 的情况下，整体饱和度也达到了 90%以上；对于外界水压为 0、2 MPa 的情况下，则需要更多的时间土体才会完全饱和。由图 9 也可看出，外界水压越大，饱和度上升越快。

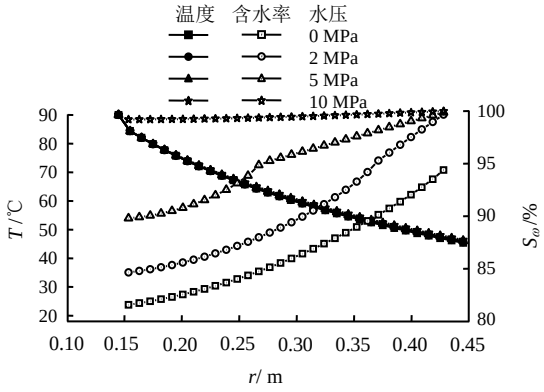


图 8 不同水压下 t=3 a 温度和饱和度分布

Fig.8 Distributions of temperature and saturation at t=3 a with different water pressures

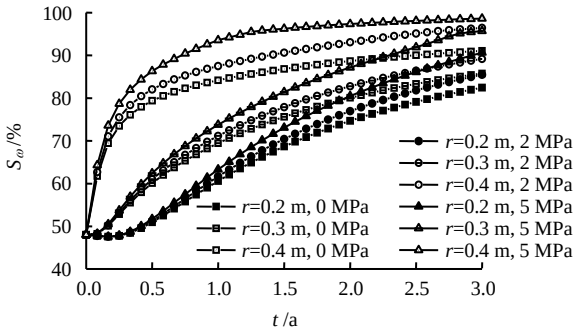


图 9 3 种不同水压下饱和度随时间的变化

Fig.9 Variation of saturation with time for three water pressures

5.2.4 热源温度的影响

保持外界水压为 2 MPa，初始温度和外表面温度为 20 ℃，研究废物罐温度不同对水热迁移的影响。热源温度分别取 30、60、90 ℃。

由图 10、11 可知，温度的分布对水分传递的影响较大，温度越高，水分传递的越快，土体越早达到饱和，可能与温度升高导致水的动力黏度系数降低有关。因此，控制废物罐的温度一定程度上可以减慢缓冲层的饱和过程。

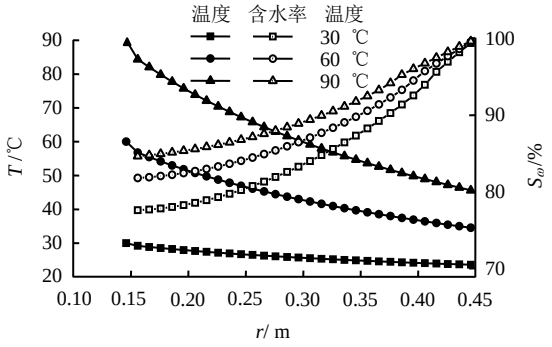


图 10　不同热源下 *t*=3 a 温度和饱和度分布

Fig.10　Distributions of temperature and saturation at *t*=3 a with different heat sources

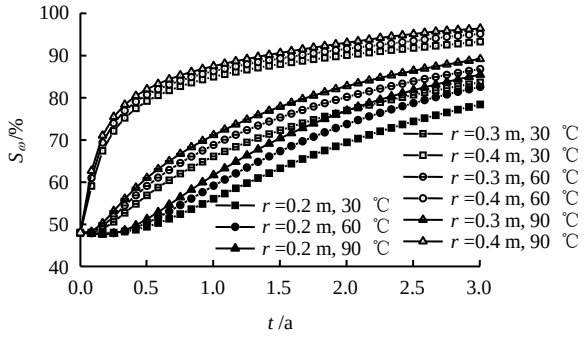


图 11　3 种不同热源下饱和度随时间的变化

Fig.11　Variation of saturation with time for three heat sources

6　结　论

提出了考虑蒸发效应和物理性质参数可变的非饱和土水-热耦合模型，并利用改进的 SPH 算法加以实现，得到结论如下：

（1）考虑参数的变化对计算结果有较大影响，对水分迁移计算的影响尤为显著。

（2）处置库开始工作后，热量会在较短的时间内扩散到缓冲层外侧，温度分布在 30 d 时基本达到稳定，且受外界水压影响较小。水分需要较长的时间才能扩散到缓冲层内侧，即使 5 MPa 的外界水压也需要 3 a 时间才能使全部土体饱和度达到 90%以上。

（3）温度升高会导致非饱和土的吸力降低，从而产生水分迁移的驱动力。但是温度的驱动力相比于外界水压十分微小。

（4）热源的温度对缓冲层的温度分布起到了决定性的作用，同时温度的分布也会影响水分迁移的速度，温度越高，水分迁移进行的越快，建议在设计时注意控制废物罐的表面温度。

参 考 文 献

[1] BAI B, GUO L, HAN S. Pore pressure and consolidation of saturated silty clay induced by progressively heating/ cooling[J]. **Mechanics of Materials**, 2014, 75(10): 84－94.

[2] BAI B. Thermal response of saturated porous spherical body containing a cavity under several boundary conditions[J]. **Journal of Thermal Stresses**, 2013, 36(11): 1217－1232.

[3] 刘月妙, 蔡美峰, 王驹, 等. 高放废物处置库缓冲材料导热性能研究[J]. 岩石力学与工程学报, 2007, 26(增刊 2): 3891－3896.

LIU Yue-miao, CAI Mei-feng, WANG Ju, et al. Thermal properties of buffer material for high-level radioactive waste disposal[J]. **Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering**, 2007, 26(Supp.2): 3891－3896.

[4] 高玉峰, 刘月妙. 压实膨润土气体渗透特性研究[C]//第六届废物地下处置学术研讨会论文集. 北京: 原子能出版社, 2016: 159－163.

GAO Yu-feng, LIU Yue-miao. Study on gas permeability of compacted bentonite[C]//The Sixth Symposium on Waste Underground Disposal. Beijing: Atomic Press, 2016: 159－163.

[5] 张玉军, 琚晓冬. 热-水-应力-迁移耦合条件下双重孔隙-裂隙介质的抗剪强度及有限元分析[J]. 岩土力学, 2015, 36(3): 877－884.

ZHANG Yu-jun, JU Xiao-dong. Shear strength of dual-pore-fracture medium and finite element analysis under thermo-hydro-mechanical-migratory coupling[J]. **Rock and Soil Mechanics**, 2015, 36(3): 877－884.

[6] CHEN L, WANG J, LIU Y M, et al. Numerical thermo-hydro-mechanical modeling of compacted bentonite in China-mock-up test for deep geological disposal[J]. **Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering**, 2012, 4(2): 183－192.

[7] GINGOLD R A, MONAGHAN J J. Smoothed particle hydrodynamics: Theory and application to non-spherical stars[J]. **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society**, 1977, 181(3): 375－389.

[8] JEONG J H, JHON M S, HALOW J S, et al. Smoothed particle hydrodynamics: Applications to heat conduction[J]. **Computer Physics Communications**, 2003, 153(1): 71－84.

[9] CLEARY P W, MONAGHAN J J. Conduction modelling using smoothed particle hydrodynamics[J]. **Journal of Computational Physics**, 1999, 148(1): 227－264.

[10] BAI B, RAO D Y, XU T, et al. SPH-FDM boundary for the analysis of thermal process in homogeneous media

with a discontinuous interface[J]. **International Journal of Heat & Mass Transfer**, 2018, 117: 517－526.

[11] THOMAS H R, KING S D. Coupled heat and mass transfer in unsaturated soil: A potential-based solution[J]. **International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics**, 1992, 16(10): 757－773.

[12] 李守巨, 上官子昌, 孙伟, 等. 多孔岩土材料渗透系数与孔隙率关系随机模拟[J]. 辽宁工程技术大学学报(自然科学版), 2010, 29(4): 589－592.
LI Shou-ju, SHANGGUAN Zi-chang, SUN Wei, et al. Simulation on relationship between hydraulic conductivity and porosity for porous soils[J]. **Journal of Liaoning Technical University (Natural Science)**, 2010, 29(4): 589－592.

[13] 杨春和, 王贵宾, 王驹, 等. 甘肃北山预选区岩体力学与渗流特性研究[J]. 岩石力学与工程学报, 2006, 25(4): 825－832.
YANG Chun-he, WANG Gui-bin, WANG Ju, et al. Study on rock mass mechanics and seepage characteristics of candidate site–Beishan, Gansu province[J]. **Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering**, 2006, 25(4): 825－832.

[14] BAI B, XU T, LI H W. The semi-analytical solution of particle transport in porous media induced by seepage[J]. **Fresenius Environmental Bulletin**, 2017, 26(10): 6286－6294.

[15] BAI B, SHI X Y. Experimental study on the consolidation of saturated silty clay subjected to cyclic thermal loading[J]. **Geomechanics and Engineering**, 2017, 12(4): 707－721.

[16] 刘月妙, 王驹, 蔡美峰, 等. 热–力耦合条件下高放废物处置室间距研究[J]. 铀矿地质, 2007, 25(6): 373－379.
LIU Yue-miao, WANG Ju, CAI Mei-feng, et al. Study on disposal pit space for high-level radioactive waste in thermal-mechanical coupling condition[J]. **Uranium Geology**, 2007, 25(6): 373－379.

[17] CHEN B, QIAN L X, YE W X, et al. Soil-water characteristic curves of Gaomiaozi bentonite[J]. **Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering**, 2006, 25(4): 788－793.

[18] JOHNSON G R, STRYK R A, BEISSEL S R. SPH for high velocity impact computations[J]. **Computer Methods in Applied Mechanics & Engineering**, 1996, 139(1－4): 347－373.

（接第3852页）

《岩土力学》2018 年第 1 期被 EI 收录论文（45 篇，收录率 100%）

序号	论文题名	作者	页码
29	引入非线性瞬时弹性模量的软土流变模型	谷任国，邹 育，房营光，等	237－241
30	硬岩隧道高压气体膨胀破岩开挖试验	彭怀德，刘敦文，褚夫蛟，等	242－248
31	盐溶液对膨润土膨胀性的影响	高子瑞，陈 涛，徐永福	249－253
32	厚煤层快速回采切顶卸压无煤柱自成巷工程试验	何满潮，高玉兵，杨 军，等	254－264
33	隧道正交穿越深厚滑坡体的相互影响分析与应对措施	刘天翔，王忠福	265－274
34	湛江湾高水头跨海盾构隧道管片结构典型断面受力计算与监测反馈分析	姜 燕，杨光华，陈富强，等	275－286
35	基于三维节理网络模拟的坝基岩体结构分类研究	倪卫达，单治钢，刘 晓	287－296
36	缓倾地层微震定位算法探讨及其数值验证	吴顺川，陈子健，张诗淮，等	297－307
37	基于热–水–力–损伤耦合数值模型的高地温水工高压隧洞围岩承载特性	苏国韶，秦子华，彭立锋，等	308－319
38	基于带状震源破裂机制的斜坡动力响应	崔芳鹏，许 强，殷跃平，等	320－330
39	边坡稳定性分析双折减法的几个问题	朱彦鹏，杨晓宇，马孝瑞，等	331－338
40	基坑土体卸荷平面应变试验离散元数值分析	张伏光，蒋明镜	339－348
41	结点虚流量法理论基础阐释及改进算法	周 斌，严 俊，刘斯宏，等	349－355
42	锦屏深部地下实验室初始地应力测量实践	钟 山，江 权，冯夏庭，等	356－366
43	地质力学磁力模型试验原理及其在工程中的应用	罗先启，毕金锋	367－374
44	岩石破裂声发射关键特征信号优选方法	姚旭龙，张艳博，刘祥鑫，等	375－384
45	页岩岩屑高精度波速测量的仪器与方法	索 彧，葛洪魁，王小琼，等	385－392