

DOI:10.3876/j.issn.1000-1980.2015.05.012

水电站坝址渗流微观动态研究综述

宋汉周,霍吉祥,王建平,朱旭芬

(河海大学地球科学与工程学院,江苏南京 210098)

摘要:从水电站坝址地下水水质与渗水析出物的形成、演变及其影响因素,以及水-岩相互作用地球化学模拟等方面对运行工况下水电站坝址渗流微观动态的研究进展进行综述,并对其中存在的问题进行探讨。指出需要进一步研究的方向包括:水质异常变化所具有的化学损伤效应;渗水析出物中微量元素的地球化学特性及其指示意义;考虑细观结构改变的液-固相间多组分反应-运移多尺度模型及其应用;水-岩(还包括工程材料)间相互作用地球化学模拟不确定性及其方法论。

关键词:坝址水-岩相互作用;地下水水质;渗水析出物;形成机制;试验模拟;数值模拟;综述
中图分类号:TV223.4 **文献标志码:**A **文章编号:**1000-1980(2015)05-0472-08

Review of micro-regimes of seepage around dam sites of hydropower stations

SONG Hanzhou, HUO Jixiang, WANG Jianping, ZHU Xufen

(College of Earth Sciences and Engineering, Hohai University, Nanjing 210098, China)

Abstract: Some progresses in the research of micro-regimes of seepage around the dam site of hydropower stations under operational conditions are reviewed, with a focus on the groundwater quality, the formation and evolution of seepage precipitates as well as the factors influencing them, and geochemical simulation of water-rock interaction. On the basis of discussion of related problems, four topics are presented for further research, including the chemical damage caused by abnormal variation of groundwater quality, geochemical behaviors of some trace elements from seepage precipitates and their denotative meanings, multi-scale models for multicomponent reaction-transport between liquid and solid phases and their application in consideration of chemical reaction-induced variation in mesostructures, and the uncertainty and methodology involved in geochemical simulation of water-rock interaction.

Key words: water-rock interaction around dam site; groundwater quality; seepage precipitate; mechanism of formation; experimental modeling; numerical simulation; review

渗流动态多指地下水的各要素(水位、水量、水质及水温等)在自然和人为双重因素的影响下随时间而呈现的规律性变化。一般可把地下水水位、水量等要素归为渗流的宏观动态要素,而水质(还包括渗水析出物)、水温等要素则归为渗流的微观动态要素。

已有研究^[1-2]表明,定期开展运行工况下水电站坝址渗流微观动态的监测/检测工作,其成果有助于:(a)判断坝址区渗流系统的补、径、排条件及其变化;(b)分析水-岩-帷幕间存在的复杂物理-化学作用;(c)评价坝基帷幕体的防渗效果及其时效性;(d)诊断坝址区内可能存在的地质隐患。渗流的微观动态隐含的信息远丰富于渗流的宏观动态,因此越来越引起人们的重视。许多学者对水电站坝址渗流的微观动态及其潜在影响开展了较多研究,目前研究主要集中在地下水水质的形成、演变机制及其影响因素,渗水析出物的形成、演变机制及其影响因素,以及水-岩相互作用地球化学作用模拟等方面。本文对上述3个方面的研究进展进行总结、归纳和评述,并就有关问题进行探讨。

收稿日期:2015-03-09

基金项目:国家自然科学基金(41272265)

作者简介:宋汉周(1954—),男,江苏启东人,教授,主要从事环境水文地质研究。E-mail:songhz@hhu.edu.cn

1 地下水水质的形成、演变机制及其影响因素

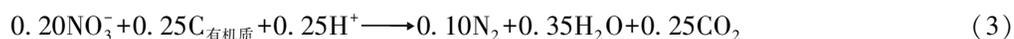
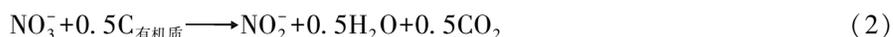
与补给源(通常为坝前库水)相比,坝址地下水总体上具有如下水化学特征^[3]:(a)TDS(溶解性固体总量)值显著增大,为补给源TDS值的1~2倍或以上;(b)帷幕体下游侧(简称幕后)地下水普遍呈碱性,局部甚至呈强碱性(pH>10.0),不同于天然条件下的pH;(c)幕后地下水中可溶性SiO₂含量增加,为补给源SiO₂含量的1~2倍或以上,一般以Si(OH)₄、SiO(OH)₃⁻、SiO₂(OH)₂²⁻这3种形式出现;(d)不同部位间水化学类型的多样化,包括OH-Ca型等,也有别于天然条件下的水化学类型。Mason^[4]曾对坝体渗漏水的碱性化及其化学侵蚀(或腐蚀)性作了探讨,但未论及坝基幕后地下水的碱性化问题。

由坝址地下水化学的基本特征可知,存在着多种水质形成作用^[5],如溶解作用、混合作用、氧化还原作用等。当坝基地质体为多孔介质(如深厚覆盖层)、且具有较大比表面时,发生于液-固相之间的离子吸附交换作用也成为坝址区内水质的重要形成作用之一。其中,发生于水-岩系列(还包括工程材料)间的溶解-沉淀作用最为广泛,具有普遍性^[6]。目前,在实际工作中多应用基于化学热力学理论建立的饱和指数SI(saturation index,在数值上为目标反应矿物于水溶液中相关组分的活度积与该矿物的溶度积常数 K_{sp} 之比的对数值)模型来量化解析水溶液与特定矿物(如碳酸盐类矿物)之间的反应状态:即SI小于0、SI等于0以及SI大于0分别表示 $\Delta G < 0$ 、 $\Delta G = 0$ 和 $\Delta G > 0$ (ΔG 为反应自由能的变化),并分别指示水-岩间处于溶解状态、溶解-沉淀平衡状态以及沉淀状态。已有研究表明,采用饱和指数模型解析液-固相间的反应状态存在误差^[7]。究其原因:一方面与模型中涉及的水化学组成类型及其“有效浓度”的计算存在不确定性有关;另一方面也与水质的实际检测过程有关。对于实际检测过程,目前开展的水质化验分析(包括常规单项指标及pH、电导率等综合指标),多将水样从现场采集至实验室再进行化验。显然,室内待测水样的环境特征(如温度、压力等)已不同于水体原位的,以致水质的部分敏感指标(如pH以及暂时硬度HCO₃⁻等)难以避免地发生了变化。刘再华^[8]曾分别采用原位测试及室内化验方法,在岩溶地区对水质敏感指标的检测结果进行了对比,发现两者之间存在较大差异。因此认为,若需要根据水质检测资料作进一步量化解析时,建议尽可能或至少应对水质的上述敏感指标采用现场测量方法。

影响坝址地下水水质演变的多种因素包括岩性因素、水动力因素、微生物因素以及人类活动因素等。有关岩性因素、水动力因素的研究已多有进展^[9-10],而对于微生物因素、人类活动因素的研究还有待深入。事实上,坝址地下水系统中一些化学反应的发生多与微生物有关。如一定环境下水体中硫酸盐组分的还原反应是在脱硫硫酸细菌的参与下发生的,而有机质的氧化则是在好氧细菌的参与下进行的^[11]。在好氧细菌的参与下,有机质氧化过程中还可形成NO₃⁻等组分,有关反应式^[12]为



在上述有机质的氧化过程中,溶解氧被不断消耗,以致发生反硝化作用即NO₃⁻被还原为NO₂⁻,甚至为N₂。有关反应分别为



坝址地下水中的微生物可分为2类^[13]:一类为化能异养型细菌,其生存需要有机养料;另一类为化能自养型细菌,从氧化无机物过程中获得能量。坝前库底水中相对富集的有机物为第一类细菌的繁殖提供了养料,故坝基地下水中一般以第一类细菌为主,由此可产生对大坝混凝土的酸性(pH<6.50)腐蚀作用。因此建议,当经无机化验表明渗流水不具有腐蚀性,而相应部位混凝土仍有受到腐蚀的迹象时,就应进行微生物化验,以进一步寻找成因。然而,目前现有规范还没有对由生物化学作用产生的对混凝土大坝的腐蚀问题提出具体的评价指标,此有待研究。

人类活动对坝址地下水水质的影响可以分为来自系统内部、外部2类。系统内部影响指坝址渗流场内诸如帷幕体类的基础工程对地下水水质产生的直接和间接影响;外部影响指来自环境,多指库水水质由于人类活动而受到的污染,从而影响到坝址地下水水质的形成及演变。人们已经注意到了系统内部影响;但对于外部因素对坝址流场内水质的影响还少有研究。自水库蓄水之后,一方面水库所在流域内诸如工农业生产类活动不仅普遍存在,且随经济的发展呈现加剧之势;另一方面,库水流速比建库前明显减小,以致污染物扩

散系数大大降低。这样,建坝后流域内若仍有污染物排入水库,则极易造成库水水质的恶化。如灌溉时使用的化肥以及没有经过处理而直接排入水库的污水,均可导致库水中氮、磷类元素含量的显著增加^[14]。因此建议在加强对库水水质保护的同时,也应开展由于库水水质改变而产生的对于坝址地下水水质的形成及其演变的潜在影响研究。

2 渗水析出物的形成、演变机制及其影响因素

坝址不同部位伴随渗水而出现的胶状物质,一般称为渗水析出物。此现象在已经投入运行的水电站坝址区比较常见,多数出现在坝踵幕后廊道(包括灌浆廊道和排水廊道)部分排水孔口,少数则见于岩体裂隙渗水溢出处。此现象的长期存在某种程度上会对相应部位岩体的渗透稳定性及帷幕体的防渗性能产生不利影响,因而引起了关注。

根据化验结果,渗水析出物具有复杂的物质组成,但不同颜色者具有不同的主化学成分。其中,白色者以钙元素为主化学成分,棕红色者以铁元素为主化学成分,黑色者以锰元素为主化学成分,渗水析出物还含有 Si、Al、Na、K、P、Mg、Ti、S 等元素。已有研究^[15-16]表明,渗水析出物化学方面的形成作用包括溶解-沉淀作用、还原-氧化-絮凝作用、不全等溶解-浸析作用等。Wan 等^[17]分析了水溶液中的胶体在多孔介质中的运移机制,认为在渗流系统的排泄区在一定环境下此类胶体可形成絮凝而析出。除了上述化学方面的形成作用,坝基渗水析出物还可能存在物理方面的成因,如局部地质薄弱体(软弱夹层、断层破碎带等)部位细小颗粒于渗流作用下的带出等。目前,人们对于渗水析出物成因及其潜在影响的探讨多采用取样化验并结合坝址区内岩性、岩相特征以及渗流宏观动态特征来综合判定^[18],还缺少具体的量化指标。

由于坝基天然(地质体)及人工(帷幕体)2类固相介质中均含有可溶性组分(如钙质),在对析出物潜在影响的评价中对于此类多源组分的溯源区分是必要的。一般,可采用如下2种方法^[18]:折减系数法、化学计量法。对于折减系数法,可用折减系数($k \leq 1$)来量化对幕后渗水析出物中的目标组分具有贡献的某来源(如坝踵帷幕体)所占的份额。严格而言,折减系数法仍属于定性或半定量。对于化学计量法,由于渗水析出物的物质组成与所在部位的水质组成有关,因此可根据水溶液中与相关组分有关的反应过程的化学计量关系,来量化对渗水析出物中的目标组分具有贡献的某来源所占的份额。化学计量法仅适合于低矿化的淡水($TDS < 1.0 \text{ g/L}$)。

幕后渗水析出物在单位时间(如1 a)或单位体积(如 1 m^3)水溶液中的析出量变化是反映相应部位岩体渗透稳定性的一个重要指标。彭红明等^[19]应用 PHREEQC 中的 Reaction 模块,根据岩样、水样的化验资料以及排水孔流量观测资料,对某大坝幕后渗水析出物的年析出量进行了预测,并对不同坝段间的年析出量变化作了比较。对于已运移至幕后排水孔位的地下水溶液,蕴含着丰富的有关坝址渗流系统沿渗径发生的水文地球化学作用信息,可视为形成渗水析出物的初始液,而溶液中析出物的形成,很大程度上为该部位水环境(如温度、压力等)的显著变化所致,显然系统中的固相介质不再参与此过程所发生的反应。因此认为,该过程所发生的反应属于“平衡相反应”,宜应用 PHREEQC 中的 Equilibrium_phase 模块对析出物进行量化解析。

影响渗水析出物演变因素包括水质、岩性、渗流宏观动态以及多物理场耦合作用等因素。有关前3种单一因素对析出物演变的影响已有一定的研究,而有关后一种综合因素对析出物演变的影响还鲜有报道。这里所指的多物理场至少包括:地质体结构场、水化学场和渗流场。施斌^[20]认为,地质体结构场作为“基本场”,具有相对稳定性;作为“作用场”的水化学场和渗流场具有非稳定性。水化学场和渗流场之间相互联系、相互作用又相互制约,以双向耦合的形式对地质体结构场产生作用,使之在细观结构(如空隙度)及基本物质(如可溶性组分)组成等方面发生变化。从这个意义而言,在多物理场耦合作用下坝址幕后渗水析出物随时间而发生的演变将具有某种不稳定性。对于这样的时变过程及其效应,可以应用数值分析方法进行模拟。

3 水-岩相互作用地球化学模拟

已有研究表明,坝址地下水水质的形成及其演变、渗水析出物的形成及其演变是在一定水环境及地质环境下水-岩系列(还包括工程材料)间相互作用的产物。水-岩相互作用研究已成为地球科学多个学科之间

交叉融合的一个热点。自20世纪70年代以来,国内外很多学者对不同环境下的水-岩相互作用从多个方面开展了研究并取得了很大进展,以此作为主题先后召开了14次国际学术会议。其中,第12次学术会议于2007年7月31日至8月5日在我国昆明召开,作为热点之一——人类工程活动对区内水化学场以及其他物理场的扰动及其效应的研究引起了新的关注,认为水-岩系列间的物理-化学作用是导致区内工程安全隐患的形成并可能进一步发展的一个主要诱发因子^[21]。

最近10多年来,对于水-岩相互作用地球化学模拟的研究仍主要是从室内试验模拟和数值模拟这2个方面展开。

3.1 室内试验模拟

采用室内试验方法,可以再现液-固相(包括天然的地质体及工程材料)之间的相互作用过程,揭示其反应机制,同时也可数值模拟提供相关的热力学参数(如溶解度、溶度积常数等)或动力学参数(如反应速率等)。

根据研究对象和目的,常用的室内试验方法主要包括吸附试验、胶结试验、淋滤试验和溶解-运移试验等。

吸附试验常被用于研究颗粒细小、具有较大比表面积的多孔介质对地下水中的重金属离子、放射性元素组分在运移过程中发生的吸附现象。Gabriel等^[22]分别进行了静态和动态吸附试验,研究了水溶液中的放射性铀(VI)在通过尾矿砂材料过程中发生的吸附-解吸现象,结果表明,影响这一过程的不仅与固相介质的物理特征有关,还与水溶液中的相关组分(如硅酸盐及碳酸盐类)及其含量有关。

胶结试验多用于研究工程材料(如水泥基材料)与特定水溶液间发生的化学反应,从而引起孔隙度变小,即“堵塞”的现象。Trotignon等^[23]以一定浓度 $\text{Na}_2\text{C}_2\text{O}_4$ 溶液和水泥基材料作为试验材料进行胶结试验,通过观测发现: $\text{Na}_2\text{C}_2\text{O}_4$ 与 $\text{Ca}(\text{OH})_2$ 反应生成的新物质 CaC_2O_4 充填于固相骨架之间的孔隙之中,从而造成“堵塞”孔隙使其量化指标减小。Cochepin等^[24]对此作了进一步分析,认为上述试验过程中可能还存在导致孔隙度减小的其他次生矿物。

淋滤试验(或淋溶试验)一般用于反映岩体中可溶性组分在水-岩相互作用过程中的完全溶蚀过程。冯志刚等^[25]以典型碳酸盐岩原位风化壳的岩-土界面作为研究对象,模拟干热风化条件下利用饱和 CO_2 水对典型剖面岩样柱开展了系统的淋溶试验研究(淋溶终点以碳酸盐完全溶蚀为标志)。通过对淋出液中主要造岩元素和淋溶残余物的动态取样分析,初步揭示了碳酸盐岩风化壳岩-土界面的风化作用机制。同时认为,存在多个影响水-岩相互作用反应强度的因素,如固相介质的渗透性、硅酸盐等酸不溶物组分及其含量等,但未对这些因素的影响程度作进一步探讨。

溶解试验则多用于揭示固相介质的可溶蚀性能,不要求其完全溶蚀。由于溶蚀过程通常是一个相对缓慢的过程,一般采用加速试验的方法缩短试验周期,主要有化学试剂加速法和电化学加速法2种。刘再华等^[26]将碳酸盐岩试样制成一定尺寸(直径3 cm、厚5 mm)的圆盘状,并在溶解试验中加入了能催化 CO_2 转换反应的生物碳酸酐酶(CA),定时测量溶液的电导率,利用该物理量与溶液的钙镁浓度间存在的线性关系,发现同为开放状态下,白云岩的初始溶解速率只有灰岩的1/3~1/60,而且灰岩和白云岩的溶解呈现出不同的速率控制机理,另外灰岩的溶解对水动力条件的变化比白云岩溶解更敏感。此类自然界中广泛存在的可溶岩体的溶解(或岩溶化)多始于所含的裂隙(发生渗流的主要通道)发育部位,随着溶蚀的持续、裂隙开度的改变,即使对于同一种岩石、同一部位而言,在不同的溶解阶段也可能具有不同的速率控制机理,如由初期的表面反应控制转为后期的扩散迁移控制等。Bertron等^[27]分别以不同的有机酸($\text{pH}=4$ 、 $\text{pH}=6$)作为侵蚀介质对水泥试件进行溶解试验,结果表明前者的侵蚀强度相当于后者的9倍。无论是自然界中的天然岩体还是人工合成材料(如混凝土)在来自环境的不同侵蚀介质作用下发生的溶解(或其他腐蚀)作用,其作用过程将受到多因素的协同影响,并非仅受到单一因素的影响。

在受到来自环境的不同侵蚀介质作用下,混凝土类材料及其结构的耐久性将受到影响,其腐蚀程度宜采用多手段测试方法加以综合判定。Planel等^[28]采用X射线衍射(XRD)、电镜扫描(SEM)等测试手段,对受到硫酸盐侵蚀后的水泥试件的主要矿物相以及可能形成的腐蚀产物进行了识别,把侵蚀部位分为3个主要区域(钙矾石为主、钙矾石与石膏共存、氢氧化钙为主)。在应用上述测试方法的同时,若能结合应用其他方法,如微区元素测试(EDAX),则有助于新矿物相的准确判定;而在进行相关液-相间反应机制探讨时,若能

结合具体的水质化验结果,得到的结论将更具有说服力。

3.2 数值模拟

依据试验模拟成果以及其他有关渗流动态的监测/检测等资料,可开展水-岩相互作用地球化学数值模拟,其基本理论主要是地下水动力学和水文地球化学。其中,地下水动力学侧重于研究地下水本身的运动以及溶质运移规律;而水文地球化学的研究重点则是地下水的化学组成、演变及其机理。

在传统的地下水溶质运移模拟中,通常将由水-岩相互作用引起的流场中溶质浓度的变化作为源/汇项来表示,并在数学上作了一定的简化处理。如第 1 节述及的多种地下水水质的形成作用中,发生于液-固相间的离子交换吸附作用一般具有非线性,而在数值模拟中多被简化为线性吸附的形式^[29]。

早期的水文地球化学模型主要研究平衡状态下地下水化学成分组成,如单一离子、络阴离子及络合物等。进行水化学组成类型及其含量的计算,是进行其他水文地球化学模型计算不可缺少的部分。近年来仍得到应用的有 2 类水文地球化学模型^[30]:一类是基于自由能变化或基于质量平衡的反向模拟(逆问题);另一类则主要是基于质量平衡的反应路径模拟(正问题)。对于逆问题,渗流系统的起点和终点水化学是已知的,这样可根据起点和终点间的水质差异并结合对区内水-岩相互作用系统(多为灰色系统)的认知,推断可能发生的水文地球化学反应;通过分别对所建模型的求解,可以解析系统内液-固相间地球化学反应的方向及其程度、量化不同相间物质组分的迁移量。对于正问题,仅已知渗流系统起点的水化学,据此并结合对于区内水-岩相互作用系统的认知,推断可能发生的水文地球化学反应;所建的模型多由一组非线性方程组成(若考虑动力学反应,则所建的模型还应包括微分方程组),可采用 Newton-Raphson 法对此进行线性化处理后再迭代求解,预测终点水化学组成。

需要指出,在对上述水-岩系列间地球化学作用正向、反向模拟的步骤中,“物质交换相”的确定在很大程度上将影响到模拟结果的可靠性,因而是关键的一步。郑西来^[31]根据含水介质的物质来源(基岩及其风化产物),分别采用镜下鉴定方法(对岩样)和 XRD 方法(对土样)识别含水介质所含的矿物;据此并结合水化学资料,判定系统内水-岩系列间可能发生的主要化学反应。王锦国等^[32]依据待建水电站库坝区多孔位岩芯镜下鉴定资料,并结合地下水补给、径流、排泄区不同取样点的水化学资料,判定系统内沿渗流方向水-岩系列间可能发生的主要化学反应。采用单一方法确定模型中涉及的“物质交换相”,很难避免不确定性。因此认为,在实际工作中尤其是需要求解正问题时,对系统中重要的一类“物质交换相”的确定应采用多种测试手段,以便相互印证。

液-固相间多组分反应-运移(multi-component reactive transport, MRT)模型是在上述地下水溶质运移模型和水文地球化学模型的基础上发展形成的^[33]。自 20 世纪 80 年代被提出以来,不断地得到发展和实际应用,显示了强大的活力。MRT 模型的学术观点:由液-固相间的化学反应产生的物质转移多具有方向性,即不同相间的物质转移是不对称的,这种方向性不仅使地下水的化学组成发生了变化,而且还改变了固相介质的细观结构(如空隙度或裂隙开度)以及水理性质(如渗透性),从而导致流场也发生了变化。与此同时,水化学场和流场的变化又控制着地下水与固相介质之间的反应速率。因而,系统内液-固相间发生的化学反应与地下水溶质运移之间是一个相互影响、相互作用的过程;反映这一多物理场耦合过程的数学模型^[34]一般包括:渗流模块、溶质运移模块和固相介质细观结构时变模块,而在后 2 个模块中还分别镶嵌了“反应项”子模块。Van 等^[35]将传统的水文地球化学模型称为静态的,而将 MRT 模型称为动态的,认为 MRT 模型能够仿真模拟渗流场与其他物理场之间的耦合作用及其动力学过程。有关建立此类模型的基本原理以及求解的方法、步骤等见文献[36]。

当水溶液与多孔介质间发生的反应主要为溶解作用时,所建的 MRT 模型涉及的多物理场之间的耦合,主要是通过以下参数间的函数关系^[37]来实现。

3.2.1 渗透率与孔隙度

根据 Kozeny-Carman 定律,渗透率与孔隙度间具有如下函数关系:

$$k_s = k_0 \left(\frac{\theta}{\theta_0} \right)^3 \left(\frac{1 - \theta_0}{1 - \theta} \right)^2 \quad (4)$$

式中: k_0 、 θ_0 ——初始状态下多孔介质典型单元体的渗透率和孔隙度; k_s 、 θ ——该典型单元体于不同反应时刻时的渗透率和孔隙度。

3.2.2 弥散系数与孔隙度

弥散系数与孔隙度间的函数关系为

$$D = \alpha \left| U \right| + D_m \theta \quad (5)$$

式中: D ——水动力弥散系数; α ——弥散度; U ——渗流速度; D_m ——分子扩散系数。

当溶液中含有带电荷的组分时,必要时还应考虑由此产生的电迁移,以便对分子扩散系数进行修正。

3.2.3 孔隙度与反应速率

多孔介质孔隙度的变化速率与反应速率之间满足以下方程:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = - \theta \sum r_m V_m \quad (6)$$

式中: V_m ——矿物 m 的摩尔体积; r_m ——矿物 m 的溶解速率。

为更有效地对 MRT 模型进行求解,Friedly 等^[38]最早提出了去耦合化方法,并证明该方法是有效的。去耦合化方法的基本思路:对 MRT 模型进行求解前,先对溶质运移模块中的反应项这一非线性方程组进行一定的线性变换,使得待求解变量数减少;然后,采用现有的计算方法进行求解,一般多采用分裂算子算法。近年来,一些学者针对不同反应体系的 MRT 模型先后提出了一些新的去耦合化方法,如 Simoni 等^[39]提出了考虑“快速”热力学平衡反应的 MRT 模型求解的去耦合化方法;Molins 等^[40]提出了考虑“慢速”动力学反应的 MRT 模型求解的去耦合化方法。关于去耦合化方法对于计算效率的影响,Kräutle 等^[41]和 Hoffmann 等^[42]分别证明了此类求解方法的应用可以提高计算效率,且不失计算精度。需要指出的是,现有的 MRT 模型的尺度大多比较小,一般小于场地尺度。

由于采用去耦合化方法求解 MRT 模型时,通常需根据系统内可能发生的化学反应构建去耦合化矩阵,为得到统一的表达式,目前有关 MRT 模型的实际应用还多限于均质介质区域。Huo 等^[43]参照了地下水动力学中对于不同边界的处理方法,提出了非均质区域 MRT 模型求解的去耦合化方法,从而拓宽了此类模型的应用范围。自然界中的含水介质往往呈非均质,因此建立此类介质区域的 MRT 模型并进行有效的求解,无疑具有较强的实际意义。

4 有待进一步研究的问题

水电站坝址渗流微观动态及其变化过程中隐含着极为丰富的有关水环境及地质环境的信息,研究内容很广。在综述了坝址地下水水质和渗水析出物的形成、演变及其影响因素,以及水-岩相互作用地球化学模拟等方面的研究进展后,笔者认为今后仍有待深入研究的方向如下:

a. 地下水水质的异常变化所具有的化学损伤效应,这里主要指强酸性水($\text{pH} < 5.0$)和强碱性水($\text{pH} > 10.0$)。

b. 渗水析出物中微量元素的地球化学特性及其指示意义。

c. 考虑微观结构改变的液-固相间多组分反应-运移多尺度模型及其应用。

d. 水-岩(还包括工程材料)间相互作用地球化学模拟不确定性及其方法论。

渗流微观动态要素中还包括水温这一要素,限于篇幅,本文未予述及。

参考文献:

- [1] 彭汉兴,宋汉周,严安康,等. 新安江水电站坝址环境水特征与作用[J]. 水利学报,1994, 25(2):40-45.(PENG Hanxing, SONG Hanzhou, YAN Ankang, et al. Interaction between water, rock and concrete near Xinanjiang dam-ste[J]. Journal of Hydraulic Engineering, 1994, 25(2):40-45.(in Chinese))
- [2] 宋汉周,周祖权. 探查坝基帷幕体防渗缺陷的水文地球化学方法[J]. 大坝观测与土工测试,2001(2):13-16.(SONG Hanzhou, ZHOU Zuquan. Locating anti-leakage deficiency of curtain-grouting with hydrogeochemical method[J]. Dam Observation and Geotechnical Tests, 2001(2):13-16.(in Chinese))
- [3] 宋汉周. 大坝环境水文地质研究[M]. 北京:中国水利水电出版社,2007.

- [4] MASON P J. The effects of aggressive water on dam concrete[J]. *Construction and Building Materials*, 1990, 4(3): 115-118.
- [5] KEHEW A E. Applied chemical hydrogeology[M]. Upper Saddle River: Prentice Hall, 2001.
- [6] AAGAARD P, HELGESON H C. Thermodynamic and aqueous solution: theoretical consideration[J]. *American Journal of Science.*, 1982, 282: 237-285.
- [7] 彭鹏, 宋汉周, 吴志伟. 基于化学热力学的饱和指数模型求解方法的改进[J]. *水文地质工程地质*, 2009(5): 76-79. (PENG Peng, SONG Hanzhou, WU Zhiwei. Modification of solution method of SI model based on the chemical thermodynamics[J]. *Hydrogeology and Engineering Geology*, 2009(5): 76-79. (in Chinese)).
- [8] 刘再华. 岩溶水文地球化学研究中 pH 值野外测定的必要性[J]. *中国岩溶*, 1990(4): 310-317. (LIU Zaihua. Necessities of measuring pH in situ in the study of karst hydrogeochemistry[J]. *Carsologica Sinica*, 1990(4): 310-317. (in Chinese)).
- [9] 马晓辉, 彭汉兴, 余进. 某些大坝坝基水质资料的分析与评价[J]. *水力发电学报*, 2001(1): 40-47. (MA Xiaohui, PENG Hanxing, SHE Jin. Analysis and appraisalment on groundwater quality in some dam sites [J]. *Journal of Hydroelectric Engineering*, 2001(1): 40-47. (in Chinese))
- [10] 马晓辉, 彭汉兴, 杨光中, 等. 大坝环境水质特征与化学潜蚀[J]. *水利学报*, 2001, 32(10): 44-47. (MA Xiaohui, PENG Hanxing, YANG Guangzhong, et al. Characteristics and suffusion of environment water around dam site[J]. *Journal of Hydraulic Engineering*, 2001, 32(10): 44-47. (in Chinese))
- [11] 宋汉周, 彭汉兴, 严安康, 等. 新安江水电站坝基地下水化学成分成因分析[J]. *河海大学学报: 自然科学版*, 1992, 20(4): 54-60. (SONG Hanzhou, PENG Hanxing, YAN Ankang, et al. Formation of groundwater quality under dam foundation of Xin'anjiang water power station[J]. *Journal of Hohai University: Natural Sciences*, 1992, 20(4): 54-60. (in Chinese))
- [12] DREVER J I. The geochemistry of natural waters[M]. 2ed. Englewood Cliffs, New Jersey: Prentice Hall, 1988.
- [13] 马晓辉, 彭汉兴, 杨光中. 大坝坝址环境水中微生物腐蚀作用[J]. *水力发电学报*, 2006(5): 58-61. (MA Xiaohui, PENG Hanxing, YANG Guangzhong. Erosion actions of microorganisms in water of dam site environment[J]. *Journal of Hydroelectric Engineering*, 2006(5): 58-61. (in Chinese)).
- [14] GULBAHAR N. Estimation of environmental impacts on the water quality of the Tahtah dam watershed in Izmir, Turkey[J]. *Environment Geology*, 2005(47): 725-728.
- [15] 施希京, 彭汉兴. 新安江水电站坝基析出物成因分析[J]. *河海大学学报: 自然科学版*, 1993, 21(2): 65-71. (SHI Xijing, PENG Hanxing. Study on formative mechanism of exudates from the dam foundation of Xin'anjiang Water Power Station[J]. *Journal of Hohai University: Natural Sciences*, 1993, 21(2): 65-71. (in Chinese))
- [16] 钱会, 席临平, 宵莉, 等. 宝珠寺水电站坝基排水孔异常溢物成因分析[J]. *岩土工程学报*, 2001, 23(2): 205-208. (QIAN Hui, XI Linping, XIAO Li, et al. Analysis of the formation of abnormal substances discharged from drainage well in Baozhusi dam base[J]. *Chinese Journal of Geotechnical Engineering*, 2001, 23(2): 205-208. (in Chinese))
- [17] WAN J, WILSON J L. Colloid transport in saturated porous media[J]. *Water Resources Research*, 1994 30: 857-864.
- [18] 宋汉周, 朱旭芬, 彭鹏, 等. 坝址渗水析出物及其潜在影响研究[J]. *水利学报*, 2011, 42(4): 454-460. (SONG Hanzhou, ZHU Xufen, PENG Peng, et al. Study on seepage colloidal educts of dam and its effects[J]. *Journal of Hydraulic Engineering*, 2011, 42(4): 454-460. (in Chinese))
- [19] 彭红明, 梁杏, 毛绪美, 等. 基于 PHREEQC 的某大坝排水洞析出物定量预测[J]. *水文地质工程地质*, 2010(4): 111-115. (PENG Hongming, LIANG Xing, MAO Xumei, et al. Quantitative prediction of precipitate in a dam's drainage holes based on PHREEQC[J]. *Hydrogeology and Engineering Geology*, 2010(4): 111-115. (in Chinese))
- [20] 施斌. 论工程地质中的场及其多场耦合[J]. *工程地质学报*, 2013(5): 673-680. (SHI Bin. On fields and their coupling in engineering geology[J]. *Journal of Engineering Geology*, 2013(5): 673-680. (in Chinese))
- [21] BULLEN T D, WANG Yanxin. Water-rock interaction: proceed of the 12th international symposium on water-rock interaction WRI-12[M]. Beijing: Taylor & Francis Group, 2007.
- [22] GABRIEL U, GAUDET J P, SPADINI L, et al. Reactive transport of uranyl in a goethite column: an experimental and modeling study[J]. *Chemical Geology*, 1998, 151: 107-128.
- [23] TROTIGNON L, DIDOT A, BILDSTEIN O, et al. Design of a 2-D cementation experiment in porous medium using numerical simulation[J]. *Oil and Gas Science and Technology-Rev IFP*, 2005(2): 307-318.
- [24] COCHEPIN B L, TROTIGNON O, BILDSTEIN C I, et al. Approaches to modeling coupled flow and reaction in a 2D cementation experiment[J]. *Advances in Water Resources*, 2008, 31: 1540-1551.
- [25] 冯志刚, 马强, 李石朋, 等. 碳酸盐岩风化壳岩-土界面风化作用机制-对岩粉层淋溶模拟的初步研究[J]. *地质学报*, 2013(1): 119-132. (FENG Zhigang, MA Qiang, LI Shipeng, et al. Weathering mechanism of rock-soil interface in weathering profile

- derived from carbonate rocks[J]. *Acta Geologica Sinica*, 2013(1):119-132.(in Chinese))
- [26] 刘再华, DREYBRODT W, 李华举. 灰岩和白云岩溶解速率控制机理的比较[J]. *地球科学:中国地质大学学报*, 2006, 31(3):411-416.(LIU Zaihua, DREYBRODT W, LI Huaju. Comparison of dissolution rate-determining mechanisms between limestone and dolomite[J]. *Earth Science:Journal of China University of Geosciences*, 2006, 31(3):411-416.(in Chinese))
- [27] BERTRON A, DUCHESNE J, ESCADEILLAS G. Accelerated tests of hardened cement pastes alteration by organic acids: analysis of the pH effect[J]. *Cement and Concrete Research*, 2005, 35(1):155-166.
- [28] PLANEL D, SERCOMBE J, BESCOP P L, et al. Long-term performance of cement paste during combined calcium leaching-sulfate attack: kinetics and size effect[J]. *Cement and Concrete Research*, 2006, 36(1):137-143.
- [29] SAIERS J E, HORNBERGER G M. Migration of ¹³⁷Cs through quartz sand: experimental results and modeling approaches[J]. *Journal of Contaminant Hydrology*, 1996, 22(3/4):255-270.
- [30] 沈照理, 王焰新, 郭华明. 水-岩相互作用研究的机遇与挑战[J]. *地球科学:中国地质大学学报*, 2012, 37(2):207-219.(SHEN Zhaoli, WANG Yanxin, GUO Huaming. Opportunities and challenges of water-rock interaction studies[J]. *Earth Science:Journal of China University of Geosciences*, 2012, 37(2):207-219.(in Chinese))
- [31] 郑西来. 模拟水-岩作用的新方法[J]. *西安地质学院学报*, 1990(3):39-44.(ZHENG Xilai. A new method of water-rock interaction simulation[J]. *Journal of Xi'an College of Geology*, 1990(3):39-44.(in Chinese))
- [32] 王锦国, 周志芳, 汤瑞凉. 水-岩作用的线性规划模型与应用研究[J]. *水科学进展*, 1999, 10(2):118-122.(WANG Jinguo, ZHOU Zhifang, TANG Ruiliang. Research of linear programming model for water-rock reactions and its application[J]. *Advance in Water Science*, 1999, 10(2):118-122.(in Chinese))
- [33] CARL I S, DONALD J D, PETER C L. Reactive transport modeling: an essential tool and a new research approach for the Earth sciences[J]. *Earth and Planetary Letters*, 2005, 240(3/4):539-558.
- [34] YEH G T, TRIPATHI V S. A critical evaluation of recent developments in hydrogeochemical transport models of reactive multichemical components[J]. *Water Resources Research*, 1989, 25(1):93-108.
- [35] VAN D L, WINDT L D, LAGNEAU V, et al. Module-oriented modeling of reactive transport with HYTEC[J]. *Computers & Geosciences*, 2003, 29:265-275.
- [36] MERKEL B J, FRIEDRICH B P. 地下水地球化学模拟的原理及应用[M]. 朱义年, 王焰新, 译. 武汉:中国地质大学出版社, 2005.
- [37] COCHEPIN B. Approaches to modeling coupled flow and reaction in a 2D cementation experiment[J]. *Advance in Water Resources*, 2008, 31(12):1540-1551.
- [38] FRIEDLY J C, RUBIN J. Solute transport with multiple equilibrium-controlled or kinetically controlled chemical reactions[J]. *Water Resources Research*, 1992(6):1935-1953.
- [39] SIMONI M D, CARRERA X J, SANCHEZ V. A procedure for the solution of multicomponent reactive transport problems[J]. *Water Resources Research*, 2005, 41(11):W11410.
- [40] MOLINS S, MAYER K U. Coupling between geochemical reactions and multicomponent gas and solute transport in unsaturated media: a reactive transport modeling study[J]. *Water Resources Research*, 2007, 43(5):W05435.
- [41] KRAUTLE S, KNABNER P. A new numerical reduction scheme for fully coupled multicomponent transport-reaction problems in porous media[J]. *Water Resources Research*, 2005, 41(9):W09414.
- [42] HOFFMANN J, KRAUTLE S, KNABNER P. A general reduction scheme for reactive transport in porous media[J]. *Computational Geosciences*, 2012, 16(4):1081-1099.
- [43] HUO Jixiang, SONG Hanzhou, WU Zhiwei. Multi-component reactive transport in heterogeneous media and its decoupling solution[J]. *Journal of Contaminant Hydrology*, 2014, 166:11-22.