袁奕梁,杨 蕴,宋 健,等.碳酸盐岩裂隙网络中酸性矿坑水反应运移数值模拟 [J]. 中国环境科学, 2025,45(11):6168-6177.
Yuan Y L, Yang Y, Song J, et al. Numerical simulation of acid mine drainage reactive transport in carbonate rock fracture network [J]. China Environmental Science, 2025,45(11):6168-6177.

碳酸盐岩裂隙网络中酸性矿坑水反应运移数值模拟

袁奕梁[1],杨 蕴[1*],宋 健[1],吴剑锋[2],窦 智[1],王锦国[1],吴吉春[2] (1.河海大学地球科学与工程学院,地下水保护与利用国家级重点实验室培育建设点,江苏 南京 211100；2.南京大学地球科学与工程学院,江苏 南京 210023)

摘要：为了准确预测裂隙介质中酸性水污染迁移过程和向地表环境的排泄强度,提出了基于升尺度离散裂隙-基质方法(Upscaled Discrete Fracture-Matrix method, UDFM)的模拟技术,该技术通过对裂隙结构进行局部加密并将其映射为等效连续介质模型.在此基础上,构建了碳酸盐岩裂隙网络中酸性矿坑水反应运移数值算例,结合酸性水排泄通量和 Damkohler 数分析,定量化揭示了关键裂隙参数(裂隙方向、裂隙密度 P_{32})对酸性水迁移过程的影响规律,刻画裂隙与基质的水动力-水化学交互和演化过程.模拟结果表明:裂隙密度越高、裂隙夹角越小(即方向集中),酸性水迁移速率越快、排泄强度越大;连通裂隙优势流现象明显,当裂隙密度较高时,酸性水通过基质扩散至优势通道附近的非连通裂隙,促使非连通裂隙由反应占优向对流占优转变,由于其与下游边界的连通性导致酸性水的排泄强度增大;裂隙密度越低,裂隙方向越集中,在反应系统达到稳定后反应占优的裂隙模拟单元越多,即未充分与酸性水发生中和反应的区域越大.

关键词：离散裂隙网络；非结构化网格；反应运移；等效连续介质模型
中图分类号：X703 **文献标识码**：A **文章编号**：1000-6923(2025)11-6168-10

Numerical simulation of acid mine drainage reactive transport in carbonate rock fracture network. YUAN Yi-liang[1], YANG Yun[1*], SONG Jian[1], WU Jian-feng[2], DOU Zhi[1], WANG Jin-guo[1], WU Ji-chun[2] (1.National Key Laboratory Cultivation and Development Site, Key Laboratory of Groundwater Protection and Utilization School of Earth Sciences and Engineering, Hohai University, Nanjing 211100, China；2.School of Earth Sciences and Engineering, Nanjing University, Nanjing 210023, China). *China Environmental Science*, 2025,45(11)：6168~6177

Abstract：To accurately predict the migration process of acidic minedrainage (AMD) in fractured media and its discharge intensity into the surface environment, an novel simulation technique based on the Upscaled Discrete Fracture-Matrix (UDFM) method is proposedinthisstudy, which involves locally refining the fracture structure and mapping it onto an equivalent continuum model. Building upon this approach, we construct a series of numerical casesfor AMD reactive transport in carbonate fracture networks. By integrating AMD discharge flux analysis with Damkohler number(Da_I), we quantitatively elucidate the influence of key fracture parameters (fracture direction, fracture density P_{32}) on AMD migration patterns and meticulously characterize the hydrogeochemical interactions and their dynamic evolution between fractures and the rock matrix. The simulation results demonstrate that: The higher the fracture density and the smaller the fracture angle (i.e., direction concentrating)correlate with the faster AMD migration rates and increased discharge intensity; conductive fractures dominates preferential flow under high-density conditions, AMD diffuses through the matrix into adjacent non-conductive fractures near preferential pathways, triggering a transition from reaction-dominated (highDa_I) to advection-dominated (lowDa_I) regimes within these fractures. Connectivity to the downstream boundary subsequently amplifies AMD discharge; lower fracture density and greater orientation alignment result in a higher proportion of reaction-dominated simulation units after system stabilization, indicating larger zones of incomplete neutralization.

Key words：Discrete fracture network；unstructured grid；reactive transport；equivalent continuous medium model

酸性矿坑水污染对矿区及其周边水资源、生态环境造成了极大的危害,其科学治理与防控已成为当前高硫矿区环境综合整治的关键性问题之一[1].酸性矿坑水在裂隙岩体中运移过程直接控制其向地表环境的排泄强度,为实现低成本、可持续治理矿区酸性矿坑水污染,量化研究酸性水在裂隙岩体中反应运移过程是基础前提,但裂隙岩体的强非均质性和各向异性导致裂隙水流极不均匀[2-4],难以基于现场试验解析酸性水迁移扩散过程[5-7].在自然界中,裂隙岩体中不同裂隙面构成的裂隙网络控制着地

收稿日期：2025-04-14
基金项目：国家重点研发计划项目(2022YFC3702202);国家自然科学基金资助项目(42472311);江苏省优秀青年基金项目(BK20240190)
* 责任作者，教授, yy_hhu@hhu.edu.cn

下水流场[8-9],不同尺度的裂隙分布及其空间连通性主导着复杂的裂隙水溶质运移过程[10-12].如酸性水形成后在碳酸盐岩裂隙网络中运移涉及裂隙通道与基质之间水流、溶质运移和水-岩反应,实现离散裂隙网络下酸性水反应运移过程的精细模拟极具挑战性.

裂隙水模拟通常采用等效多孔介质模型和离散裂隙网络模型.等效多孔介质模型采用连续多孔介质近似刻画非连续裂隙介质[13],如 TOUGHREACT 采用多重相互作用连续体方法模拟多相流体在裂隙介质中的反应性运移过程.但是,采用细网格剖分精细表征裂隙结构极易产生巨大的数值计算负荷,而采用粗网格剖分可能会导致裂隙网络结构特征的丢失[14].离散裂隙网络模型采用二维线条或三维平面多边形刻画裂隙几何形状和属性,能够模拟裂隙结构中的水流和溶质运移过程,但以往研究往往忽略了周围基质或裂隙-基质之间的交互作用[15-19],同时忽视了关键的水文地球化学反应[20-21]以及三维裂隙网络结构的影响[22-24].裂隙网络的物理参数,如裂隙大小、方向、密度、开度等,对其中的地下水溶质运移过程起着主导作用[25-27].已有研究表明上述裂隙含水层特征和水化学反应均对溶质运移过程产生了不同程度的影响,但鲜有研究考量多因素共同作用下的反应性溶质运移规律.此外,非连通裂隙对三维裂隙介质中溶质运移过程的贡献尚不明确,而其中部分潜在的非连通裂隙很有可能与优势通道存在水力联系,改变酸性水在裂隙岩体中的空间分布和扩散规律.

野外可观测的裂隙结构特征以及基于钻孔获取的裂隙分布特征信息十分有限,难以刻画真实的三维裂隙网络特征[28-29].采用现场试验,如示踪试验、振荡试验,仅能获取局部的裂隙渗透性[30-31].本文基于有限的裂隙统计信息,借助 DFNWorks 生成三维裂隙网络结构,采用升尺度离散化裂隙-基质方法 (Upscaled Discrete Fracture-Matrix method, UDFM)生成局部加密的裂隙—基质接触区域的非结构化网格,通过等效多孔介质方法实现渗透率和孔隙度等参数的空间映射,结合 PFLOTRAN 程序求解三维离散裂隙网络下酸性矿坑水在碳酸盐岩中的迁移转化过程[32-34].本研究所提出的数值模拟方法,能在精细刻画裂隙网络特征保证模拟精度的前提下,显著减小模型整体计算负荷,整合三维条件下的裂隙几何参数、裂隙-基质交互作用及水文地球化学反应,综合考量上述多因素耦合作用下的裂隙地下水反应运移过程.在此基础上,本文进一步分析裂隙参数对碳酸盐岩中酸性水迁移过程的影响规律,针对非连通裂隙对裂隙水反应运移过程的影响,采用 Damkohler 数量化分析酸性水迁移过程中反应受限与运移受限区域的时空演化规律,为准确刻画裂隙与基质的水动力-水化学交互和演化过程提供模型支撑和量化工具.

1　研究方法

基于 UDFM 的裂隙网络地下水反应运移模拟技术框架主要分为三部分:三维离散裂隙网络生成、裂隙—基质等效连续体映射、裂隙水反应性溶质运移模拟.具体模拟流程如图 1 所示.

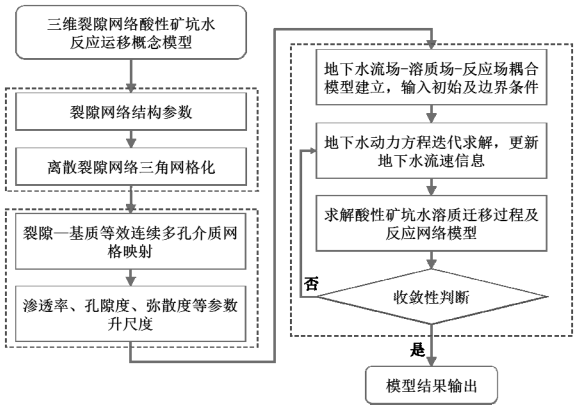


图 1　裂隙网络地下水反应运移模拟技术流程

Fig.1　Flowchart of the groundwater reactive transport modeling in fracture network

1.1　离散裂隙网络模型

裂隙水反应运移模拟首先要刻画裂隙网络结构的复杂性与裂隙—基质空间结构的非均质性.本文采用 DFNWorks 程序对三维离散裂隙网络 (Discrete Fracture Networks, DFN)进行刻画,模型的每个裂隙简化为平面圆盘状[33].模型生成的裂隙方向服从 Fisher 分布,裂隙大小根据截断幂律公式计算,裂隙半径 $r \in [2,\ 8.5]$m,幂律指数 α =2.6,采用渗流参数 p'定义裂隙网络密度[35]:

$$p' = \frac{p}{p_c} \tag{1}$$

式中:p 为特定模型中生成的裂隙条数,取决于模型

范围和截断幂率参数;p_c 为临界裂隙密度即连通模型上下游边界所需的最少裂隙数.

裂隙密度参数计算式如下:

$$p_{32}=\frac{\sum S_f}{V} \tag{2}$$

式中:S_f 为裂隙面积,m^2;V 为模型域体积,m^3.

模型假设裂隙宽度 b 与裂隙半径 r 呈正相关性,满足以下函数关系[36]:

$$b=C\cdot r^{\delta} \tag{3}$$

式中:C 和 δ 均为经验参数,分别设为 5×10^{-5} 和 0.5.

1.2 升尺度离散裂隙—基质方法

采用 UDFM 方法离散三维裂隙网络并进行等效多孔介质参数映射,UDFM 采用八叉树加密的非结构化网格剖分,计算等效渗透率与孔隙度参数,以开展裂隙地下水流及溶质运移模拟[34].UDFM 非结构化网格生成需要指定基础四面体网格单元的边界长度 l 与八叉树连续体网格剖分的加密级别 a.首先指定基础网格单元的长度 l,确定与裂隙交叉的基础单元为“裂隙”单元,未与裂隙相交的单元为“基质”单元;裂隙单元与其相邻的基质单元通过将边界长度再次剖分为 $l/2$ 后生成 8 个加密单元,而后依次类推直至达到指定的加密精度要求.裂隙−基质相邻单元的局部加密剖分有助于提升裂隙与周边基质的水动力与水质交换过程的数值模拟精度.

在网格方案确定后,需要开展渗透率与孔隙度的升尺度计算.裂隙−基质连续体模拟网格单元的孔隙度 ϕ 计算如下:

$$\phi=\frac{V_F}{V_C} \tag{4}$$

$$V_F=\sum_{f=1}^{N}A_f\cdot b_f \tag{5}$$

式中:V_F 是 N 个在模型单元内相交的裂隙;V_C 是模型单元体积;A_f 是单元内裂隙面积;b_f 是裂隙宽度.

等效的裂隙渗透系数张量可以表示为:

$$[k]_F=\frac{1}{12}\sum_{f=1}^{N}\phi_f\cdot {b_f}^2\cdot\Omega_{ij}^{(f)} \tag{6}$$

$$\Omega_{ij}^{(f)}=\begin{pmatrix} {n_2}^2+{n_3}^2 & -n_1n_2 & -n_1n_3\\ -n_2n_1 & {n_1}^2+{n_3}^2 & -n_2n_3\\ -n_3n_1 & -n_3n_2 & {n_1}^2+{n_2}^2 \end{pmatrix} \tag{7}$$

式中:ϕ_f 是在模拟单元内裂隙 f 的孔隙度;是裂隙 f 的宽度;是坐标转换张量;n_2,n_3 是裂隙 f 的正交向量.

为了减轻非结构化网格下各向异性渗透率场导致的数值计算负荷,通常取渗透率在 x,y,z 三轴主方向的值作为裂隙渗透率[34].

1.3 地下水反应运移模拟

采用 PFLOTRAN 程序求解地下水流及反应性溶质迁移过程, 主要控制方程如下:

(1)地下水流方程:

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t}-\nabla\left(\rho\frac{k}{\mu}\nabla\left(P-\rho gz\right)\right)=w \tag{8}$$

式中:ϕ 为孔隙度;ρ 为流体密度,kg/m^3;w 为入渗补给量,m^3; k 为渗透率,m^2; μ 流体粘滞系数,Pa·s; P 为压强,Pa; g 为重力加速度,m/s^2; z 为位置水头,m.

(2)地下水溶质运移方程:

$$\frac{\partial\left(\phi\left(C_j+\sum_{i=1}^{N_i}v_{ji}C_i'\right)\right)}{\partial t}+\nabla(V-\phi D\nabla)\left(C_j+\sum_{i=1}^{N_i}v_{ji}C_i'\right)=Q_j-\sum_{m=1}^{M}v_{jm}{}'R \tag{9}$$

式中:C_j 为第种溶质浓度,mol/m^3; C_i' 为第 j 种溶质发生反应后生成的第 i 种溶质浓度,mol/m^3; v_{ji} 为第 j 种和第 i 种溶质反应的化学计量数;N_i 为第 j 种溶质发生反应后生成的第 i 种溶质的总数;V 为地下水流速,m/s; D 为水动力弥散系数张量;Q_j 为第 j 种溶质的源汇项,$mol/(m^3\cdot s)$; R 为矿物反应速率; v_{jm}' 为第 j 种溶质与矿物相反应的化学计量数;M 为第种溶质涉及的矿物相反应的总数.

(3)矿物动力学反应速率方程:

$$R=-k_mA_m\left(1-\frac{Q}{K_{\mathrm{eq}}}\right) \tag{10}$$

式中:k_m 为反应速率常数,$mol/(m^2\cdot s)$;A_m 为矿物比表面积,m^2/m^3;K_{eq} 为反应平衡常数; Q 为离子活度积.本文中酸性水对方解石溶解速率即为方解石矿物反应速率.

为了研究三维裂隙网络中溶质对流与反应过程对酸性水运移的影响机制,采用 Damkohler 数(Da_I)评价酸性水迁移过程中反应受限与运移受限区域的时空演化规律[25],具体公式如下:

$$Da_I=\frac{k\cdot A\cdot L}{V\cdot C_{\mathrm{eq}}} \tag{11}$$

式中:k 为反应速率常数,$mol/(m^2\cdot s)$;A 为矿物比表面积,m^2/m^3;L 为特征长度,m,在本文中 L 为计算 Da_I 的

网格单元长度;V 为流体速度,m/s;为反应中某溶质的平衡浓度,mol/m^3,本文取 H^+离子浓度作为计算值.

当地下水对流速度小于反应速度时,反应产物不断积累,系统趋于平衡,则 Da_I>>1 并代表系统处于反应占优状态;当流体对流速度大于反应速度时,则 Da_I<<1 并代表该系统处于对流占优状态[25].本文对模拟结果计算的 Da_I 取对数 lg(Da_I),则有 lg(Da_I)=0 作为界限值,正值表示反应占优状态,负值表示对流占优状态.

2　算例设计

模型范围为 15m×15m×15m 的区域,东、西边界设为定水头边界,西侧水头为 105m,东侧水头为 100m,其余边界为隔水边界.概念模型如图 2,主要参数如表 1 所示.

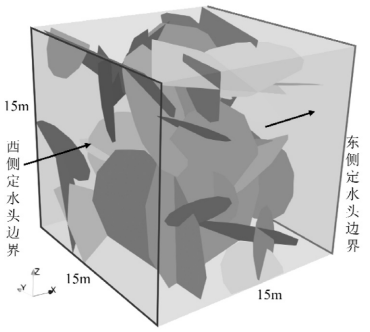


图 2　算例概念模型

Fig.2　Conceptual model diagram

表 1　数值模型参数

Table 1　Parameters of numerical model

参数	单位	数值	数据来源
基质渗透率	m^2	1×10^{-18}	[25]
基质孔隙度	–	0.01	[25]
流体密度	kg/m^3	1×10^{3}	[39]
分子扩散系数	m^2/s	1×10^{-9}	[39]
纵向弥散度	m	2.5×10^{-3}	[39]
横向弥散度	m	2.5×10^{-4}	[39]
垂向弥散度	m	2.5×10^{-5}	[39]

为讨论裂隙方向与渗流方向对酸性水反应运移的影响,本文设置 A、B 两种不同组合的三维裂隙网络:A 组为随机方向的裂隙,κ=0.1;B 组为两组等权重的水平面上正交裂隙,走向分别为 45°与 135°,倾角为 75°,κ=10.其中,κ 表示裂隙方向聚集程度,参数值越大表明裂隙方向与预设角度的偏移程度越小[37].本文生成 8 组离散裂隙网络模型,主要参数如表 2,其中 N 为裂隙条数.模型 A1 代表 A 组裂隙方向,p'=1 表示低裂隙密度且只考虑有效连通裂隙的 DFN 模型;模型 B2i 代表 B 组裂隙方向,p'=2 表示高裂隙密度且保留非连通裂隙的 DFN 模型.

表 2　DFN 模型的裂隙参数

Table 2　Fracture parameters for DFN model

裂隙组	p'	N	κ(m^{-1})
A1	1	15	0.33
A2	2	42	0.77
A1i	1	30	0.50
A2i	2	60	0.95
B1	1	11	0.21
B2	2	29	0.69
B1i	1	30	0.45
B2i	2	60	1.02

为对比分析非连通裂隙对酸性水反应运移规律的影响和贡献,由于模型设置裂隙渗流方向为东西向,有效连通裂隙定义为与东西主渗流方向上直接或间接连通的裂隙,非连通裂隙设置为未与有效连通裂隙相连的孤立裂隙组.图 3 显示了 A 组裂隙方向与 p'=2 的裂隙密度下只考虑有效连通裂隙(A2)与初始裂隙组合(A2i)的 DFN 模型.

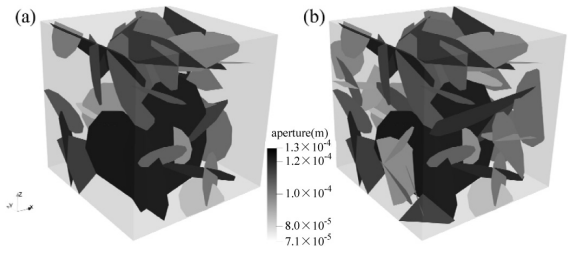


图 3　A 组 p'=2 的离散裂隙模型

Fig.3　Discrete fracture model with p'=2 for group A

(a)有效连通裂隙模型(A2);(b)初始裂隙模型(A2i)

模拟情景为酸性水从模型西侧边界流入,与含有方解石的岩体反应后从东侧边界流出.通过计算东侧边界的溶质浓度及通量评价裂隙网络对溶质运移的影响.模型设置的方解石矿物反应速率常数为 1×10^{-6}mol/(m^2·s)[38],矿物体积分数为 1×10^{-5},矿物比表面积为 1m^2/m^3[39].数值模型水文地球化学参数参考 Trinchero 等[39]文献数据,具体如表 3 与表 4 所示,其中设置不参与任何反应的示踪剂 tracer 用于对

比分析 H^+反应运移的影响.

表 3 化学反应参数(25℃)

Table 3 Chemical reaction parameters (25℃)

反应方程式	平衡常数 lg*K*
$CaCO_3 + H^+ \leftrightarrow Ca^{2+} + HCO_3^-$	1.85
$CO_2(aq) + H_2O \leftrightarrow H^+ + HCO_3^-$	−6.34
$HCO_3^- \leftrightarrow H^+ + CO_{2-3}$	−10.33

表 4 组分浓度参数(mol/L)

Table 4 Ion concentration parameters (mol/L)

主要组分	初始背景浓度	入渗边界浓度
H^+	1.0×10^{-8}	1.0×10^{-4}
tracer	1.0×10^{-8}	1.0×10^{-4}
HCO_3^-	1.7×10^{-3}	1.0×10^{-3}
Ca^{2+}	5.2×10^{-4}	1.0×10^{-6}

3 结果与讨论

3.1 不同裂隙参数模拟分析

3.1.1 裂隙密度的影响 对比图 4 中相同裂隙密度下的 H^+和 tracer 通量变化可以发现,H^+通量达到峰值的时间要晚于 tracer,表明方解石对酸性水的缓冲效应,即大量的 H^+在碳酸盐岩裂隙运移中不断被中和,导致下游酸性水通量峰值出现滞后现象.对比图 4 中不同裂隙密度的通量变化曲线可知,低裂隙密度组中的 H^+和 tracer 通量明显低于高密度组,表明裂隙密度增加时,裂隙数量和裂隙连通性增加,裂隙网络中有效渗流通道增多,溶质反应性迁移范围扩大.此外,高裂隙密度组中 H^+通量曲线在初始阶段(2.5a 左右)的斜率明显高于低密度裂隙组,表明裂隙密度增大导致酸性水的排泄速率增大.

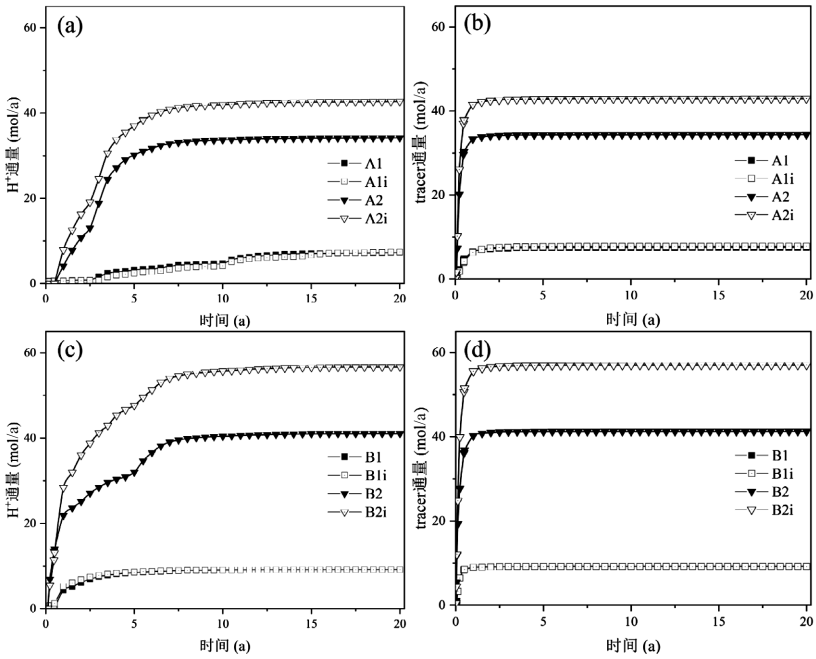


图 4 A((a), (b))、B((c), (d))组不同裂隙密度下游界面 H^+和 tracer 通量变化曲线

Fig.4 H^+ and tracer flux variation curves at downstream interface of different fracture densities for groups A ((a), (b)) and B ((c), (d))

如图 5(a), (d)所示,裂隙−基质中酸性水对方解石的溶解过程经历了三个阶段:(1)初期为优势流裂隙通道中的快速溶解;(2)转向连通性较差的非连通裂隙部分,溶解速率大幅下降;(3)转为以弥散作用主导的基质扩散,溶解速率趋于稳定且达到最低值.受三维裂隙网络结构的影响,模型域中方解石平均溶解速率在初期变化表现为多峰段快速溶解特征.从图中可以看出,低密度组中初期最大溶解速率均小于高密度组,表明裂隙密度增大时,酸性水与基质反应接触面积增加,使得前期在优势流通道中方解石溶解速率增大.由于高密度组中酸性水迁移对流迁移速率更大,在第二阶段时溶解速率下降幅度明显高于低密度组.

如图 5(b), (e)所示,模拟初期为方解石沉淀溶解平衡的 Ca^{2+}通量,而后由于酸性水反应前锋向下游迁移产生高浓度 Ca^{2+}羽流,最后由于溶解速率降低,下游 Ca^{2+}浓度降低,Ca^{2+}通量快速下降.对比不同裂

隙密度下 Ca^{2+}通量可知,高密度组中初期 Ca^{2+}通量更大,峰值到达时间更早,Ca^{2+}总增量更大,表明裂隙密度增加导致酸性水对裂隙-基质系统中方解石的溶解能力更强,溶解反应更剧烈.如图 5(c), (f)所示,酸性水反应前锋(以最小 pH 值量化)迁移速率与裂隙密度呈正相关关系.在第 3a 时,高密度裂隙组下游界面处最小 pH 为 4,已达到稳定趋势.结合图 5(b),(c), (e), (f)可以看出,下游界面 Ca^{2+}通量达到峰值的时间与最小 pH 达到稳定的时间和 H^+达到峰值的时间近似一致(图 4(a), (c)),表明酸性水在碳酸盐岩中的反应性迁移产生高浓度 Ca^{2+}锋面,同时可视为酸性水反应前锋.

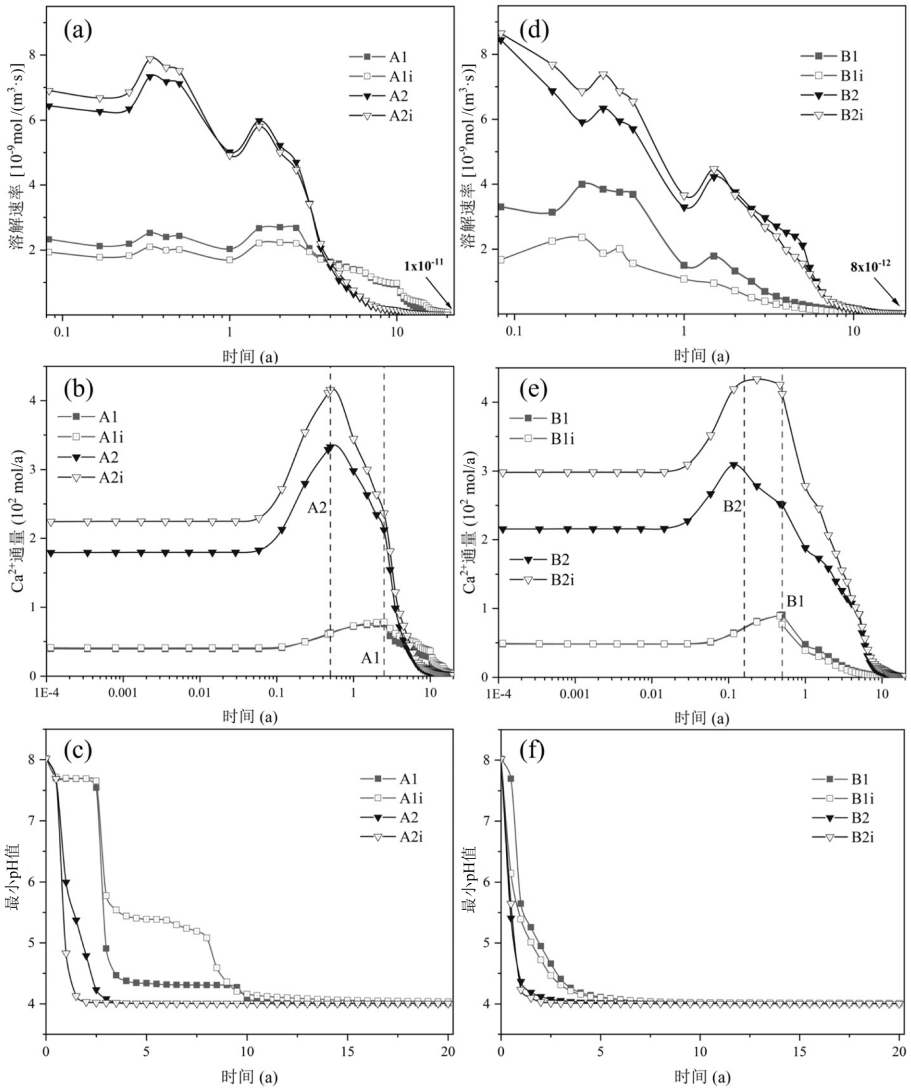


图 5　A(a, b, c)、B(d, e, f)组方解石平均溶解速率、下游界面处 Ca^{2+}通量和最小 pH 变化曲线

Fig.5　Curves of average calcite dissolution rate, Ca^{2+} flux and minimum pH change at the downstreaminterface for group A (a, b, c) and B (d, e, f)

3.1.2　裂隙方向的影响　在相同裂隙密度条件下,B 组下游界面 H^+和 tracer 峰值通量均高于 A 组(图 4),而当裂隙密度增加时,B 组峰值通量相较于 A 组增加明显,表明当前固定裂隙方向形成的优势流现象与裂隙方向完全随机的情形相比更加明显.从图 5(a), (d)可知,由于 A 组裂隙方向随机性大,裂隙通道相较 B 组裂隙连通性更差.因此,A 组中第一阶段溶解速率较为稳定且持续时间更长,最低平均溶解速率为 1×10^{-11}mol/m^3·s;而 B 组初期溶解速率则呈多段快速下降的趋势,最低平均溶解速率为 8×10^{-12}mol/m^3·s,略小于 A 组.对比图 5(b),(e)可见,相同裂隙密度下,B 组相较 A 组而言,Ca^{2+}通量峰值更早、

高浓度 Ca^{2+}滞留更短,表明其(方向固定)酸性水反应性迁移速率更快.同时,B 组溶解释放的 Ca^{2+}总量少于 A 组,反映 A 组裂隙网络(方向随机)对酸性水迁移阻碍更大.由于 A 组裂隙方向的随机性,其低密度组下游界面最小 pH 呈阶梯式减小(图 5(c)).由于 B 组裂隙的连通性更优,其中下游界面处最小 pH 下降速率快于 A 组(图 5(c),(f)),酸性水反应性前锋迁移速度更大.

3.1.3 非连通裂隙的影响 结合图 4(a), (c)和图 5(b), (e)可知,当裂隙密度较低时,A、B 组 DFN 模型剔除非连通裂隙前后,下游界面处 H^+与 Ca^{2+}的通量差别较小.低裂隙密度网络中,有效渗流通道较少且分散,基质渗透率低,限制了酸性水向非连通裂隙的扩散,难以形成连通裂隙以外的排泄通道.随着裂隙密度增加,网络连通性改善,酸性水得以迁移至优势流通道附近的非连通裂隙,从而提升下游边界的 H^+通量(图 4(a),(c)).其中,在高裂隙密度组中,B 组由于存在非连通裂隙部分而增加的 H^+通量大于 A 组(图 4(a),(c)),表明当裂隙密度达到一定程度时,非连通裂隙对酸性水迁移的影响程度明显.当裂隙密度较低时,初始裂隙组由于存在非连通裂隙,方解石溶解产生的 Ca^{2+}在非连通裂隙中积累甚至长时间滞留,导致该部分方解石溶解反应逐渐减缓,甚至产生饱和现象,使得平均溶解速率低于连通裂隙组(图 5(a), (d)).当裂隙密度增大时,非连通裂隙与优势流通道水力联系增强,初始裂隙组的前期溶解速率均高于连通裂隙组(图 5(a),(d)).如图 5(b),(e)所示,在高密度组中,B 组初始裂隙组(B2i)相较于连通裂隙组(B2)的 Ca^{2+}通量的增量大于 A 组.因此,B 组中非连通裂隙对酸性水溶解反应的影响更大.同时,在低密度组中,初始裂隙组(A1i)下游界面处最小 pH 下降速率受非连通裂隙影响显著(图 5(c),(f)),而当裂隙密度增大后(B1i),其影响程度减小.

3.2 基于 Damkohler 数的溶质迁移机制解析

当酸性水迁移至第 10a 时,各组下游 H^+通量趋于稳定(图 4(a),(c)).此时,反应区域由主干裂隙-基质转向基质-非连通裂隙,碳酸盐岩溶解速率变化趋缓,反应系统接近平衡.因此,基于第 10a 的水动力场与溶质场计算 $\lg(Da_I)$,并通过统计裂隙与基质网格中 $\lg(Da_I)$的累计频数分布(以 H^+浓度计算),系统分析酸性水在碳酸盐岩裂隙网络中对流与反应占优机制.其中,$\lg(Da_I)<0$ 为对流占优,表明酸性水浓度超过与方解石发生中和反应所需浓度,其数值越小,pH 值越低;$\lg(Da_I)>0$ 为反应占优,表明方解石对酸性水缓冲能力较强,其数值越大,潜在中和反应强度越高.

通过统计连通裂隙区域不同网格单元的 $\lg(Da_I)$数据(图 6(a), (c)),可以得出在低密度组中,处于对流占优的裂隙模拟单元比例为 63%~67%,而在高密度裂隙组中比例增加至 88%~95%.总体上,裂隙密度增大,裂隙网络的连通性增强,有效渗流通道增加,裂隙水平均流速增大,酸性水对流迁移扩散范围增大,$\lg(Da_I)$曲线分布集中于负值区.同时,高密度裂隙组(frac-A2、frac-B2)的 $\lg(Da_I)$分布曲线的众数值小于低密度裂隙组(frac-A1、frac-B1).因此,裂隙密度越大,连通性越好,在模拟期内碳酸盐岩裂隙网络受酸性水影响的范围与程度明显增加.

基于统计分析(图 6(a), (c)),各组算例中反应占优的裂隙网格单元比例为:frac-A1(33%)、frac-B1(37%)、frac-A1i (35%)、frac-B1i(71%)、frac-A2(5%)、frac-B2(12%)、frac-A2i(6%)、frac-B2i(25%).由此可知,A 组方向的裂隙网络中反应占优的比例低于 B 组,表明 A 组裂隙网络总体上对流占优.结合下游 H^+、Ca^{2+}通量增量可知,A 组酸性水反应产生的 Ca^{2+}总量大于 B 组(图 5(b), (e)),而 H^+排泄总量小于 B 组(图 4(a), (c)).因此,裂隙方向随机的 A 组的连通性相对于固定裂隙方向的 B 组较差,酸性水在 A 组迁移过程中反应更加充分,有效降低了 H^+排泄通量,增大了 Ca^{2+}通量.在反应系统进入稳定期时(第 10a),B 组的反应占优区域即 $\lg(Da_I)$为正值的网格数更大,主要是由于 B 组的优势流通道较多,前期以优势通道的反应过程为主,后期逐步扩散至非优势流的裂隙通道而有效增加了反应占优的区域.如在高密度裂隙组,frac-B2 与 frac-B2i 的高频率 $\lg(Da_I)$负值分布曲线的峰值要低于 fracA2 与 A2i,同时 B 组 $\lg(Da_I)$曲线在[-2, 2]的区间仍有分布.因此,裂隙方向的不同易造成裂隙连通性的差异,进一步影响酸性水在碳酸盐岩裂隙网络中排泄通量的差异.

如图 6(a)所示,当裂隙密度较低时,在考虑非连通裂隙的算例(frac-A1i 与 frac-B1i)中 $\lg(Da_I)$的正值区域的网格数相较于只考虑连通裂隙的算例(frac-A1 与 frac-B1)明显增加.因此,在低密度裂隙下非连通裂

隙迟滞反应性溶质迁移,有效增加反应占优的区域.在低裂隙密度组中,A 组初始裂隙(frac−A1i)中 lg(Da_I)的负值区域网格数相较于连通裂隙(frac−A1)明显增加,而 B 组两者(frac−B1i 与 frac−B1)的 lg(Da_I)负值区域网格数变化基本相似.由此可知,当裂隙密度较低时,A 组存在部分非连通裂隙处于对流占优状态,即酸性水迁移至此区域;而在 B 组裂隙网络下,酸性水迁移范围基本局限在连通裂隙内部.同时结合 A、B 组初始裂隙和连通裂隙的 H^+通量分析(图 4(a), (c)),两者 H^+通量基本相等,表明在低密度裂隙组,对流占优的非连通裂隙未形成与出流边界相连接的渗流通道.但是,当裂隙密度增大时,裂隙渗流通道增多,酸性水更易扩散迁移至优势流通道附近的非连通裂隙中并进一步运移至出流边界.

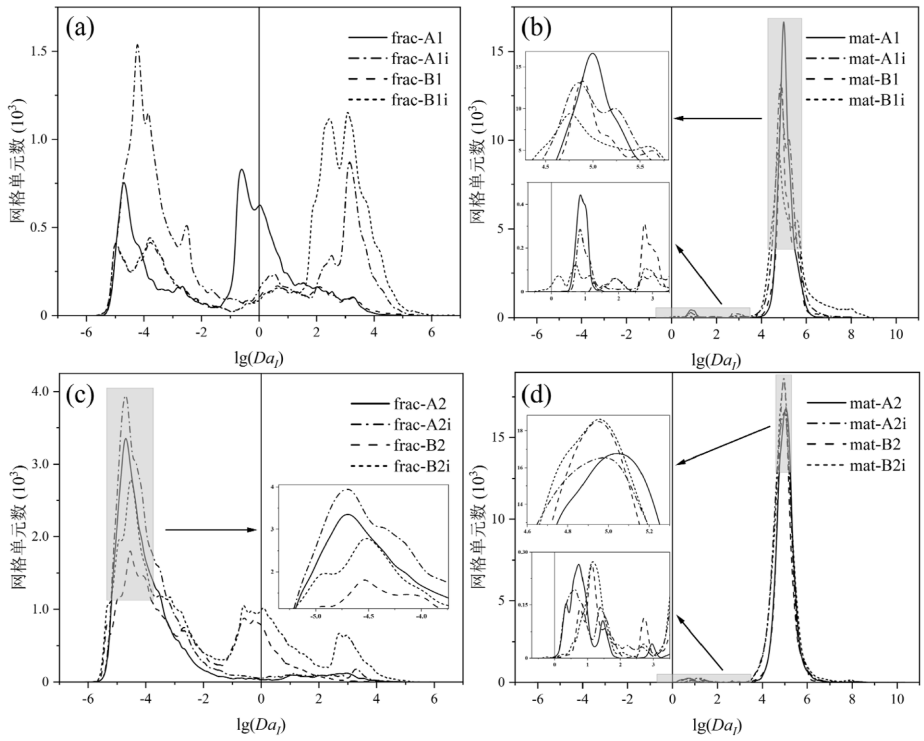


图 6　模拟第 10a 所有网格单元的 lg(Da_I)统计曲线

Fig.6　Statistical curves of lg(Da_I) for all grid cells in the 10th year of simulation

a, b 分别为低密度组裂隙、基质单元;c, d 分别为高密度组裂隙、基质单元

根据图 6(c)可知,初始裂隙组(frac−A2i 与 frac−B2i)中 lg(Da_I)负值区的网格数大于相对应的连通裂隙组(frac−A2 与 frac−B2).因此,在高密度裂隙组,处于对流占优的非连通裂隙模拟单元的比例增加.结合对应 H^+通量变化曲线可以看出(图 4(c)),此部分的非连通裂隙显著增大了酸性水反应前锋的迁移扩散.此外,A 组初始裂隙(frac−A2i)与连通裂隙(frac−A2)lg(Da_I)曲线形状相似,均呈单峰分布且位于[−5.5, −2]区间内,表明裂隙网络总体处于对流占优.B 组初始裂隙(frac−B2i)与连通裂隙(frac−B2)的 lg(Da_I)曲线呈多峰分布,且 frac−B2i 的曲线中存在较多的反应占优单元.因此,在高密度裂隙组,裂隙方向越集中,优势流现象明显,部分非连通裂隙仍处于反应占优状态,未与酸性水发生中和反应,导致 B 组的酸性水排泄通量更大(图 4(a), (b)).

由于岩体中未包含裂隙的基质模拟单元渗透率较低,酸性水的迁移扩散范围有限,其主要通过水动力弥散与化学反应发生运移.如图 6(b)与 6(d)所示,基质模拟单元的 lg(Da_I)曲线大部分均分布在正值区域,为反应占优状态.少部分基质模拟单元分布在[−0.5, 3.5]区间,主要为酸性水向基质扩散的反应锋面影响区域.当裂隙密度增大时,酸性水迁移扩散范围增大,更多基质中的方解石参与溶解反应,使得[−0.5, 3.5]区间段内的基质网格单元数目增多.对比高频率峰值区域的 lg(Da_I)曲线可知,高密度裂隙组的反应占优程度更大,即具有更多的高值 lg(Da_I)单

元.因此,裂隙网络密度增大导致酸性水与基质单元的反应强度增大,进一步表现为较高的 Ca^{2+}通量(图5(b), (e)).

4 结论

4.1 裂隙几何参数对酸性水运移具有控制性影响:小夹角(即方向集中)、高密度的裂隙网络特征,增强了裂隙-基质系统的连通性,导致酸性水反应前锋的迁移速率与排泄通量相应增加.

4.2 非连通裂隙的动力学状态转变机制:高密度裂隙网络中,连通裂隙形成的优势流驱动酸性水通过基质扩散侵入邻近非连通裂隙,诱发后者从反应占优向对流占优状态转变,提高了包含非连通裂隙的裂隙−基质系统 H^+和 Ca^{2+}排泄通量.

4.3 反应空间格局的定量表征:基于 H^+浓度 Damkohler 数的空间演化分析表明,在反应系统达到稳定后,低密度、方向集中的裂隙网络中反应占优的裂隙模拟单元比例较高,即未充分与酸性水发生中和反应的区域较大;而高密度随机走向裂隙网络因优势流路径曲折程度增加,酸性水与碳酸盐岩反应充分,导致 H^+排泄通量显著降低.

参考文献:

[1] 贾梦旋,王金满,李禹凝,等.基于自然解决方案的矿山生态修复研究进展 [J]. 煤炭科学技术, 2024,52(8):209−221.
Jia M, Wang J, Li Y, et al. Ecological restoration of mines based on nature−based solution: a review [J]. Coal Science and Technology, 2024,52(8):209−221.

[2] Bai Q, Tu S. A general review on longwall mining−induced fractures in near−face regions [J]. Geofluids, 2019,2019(19):1−22.

[3] Ning J, Wang J, Tan Y, et al. Mechanical mechanism of overlying strata breaking and development of fractured zone during close−distance coal seam group mining [J]. International Journal of Mining Science and Technology, 2020,30(2):207−215.

[4] Kong X, He D, Liu X, et al. Strain characteristics and energy dissipation laws of gas−bearing coal during impact fracture process [J]. Energy, 2022,242:123028.

[5] Zhang L, Huang M, Li M, et al. Experimental study on evolution of fracture network and permeability characteristics of bituminous coal under repeated mining effect [J]. Natural Resources Research, 2022, 31(1):463−486.

[6] Zheng P, Xia Y, Yao T, et al. Formation mechanisms of hydraulic fracture network based on fracture interaction [J]. Energy, 2022, 243:123057.

[7] Kuzmenko O, Dychkovskyi R, Petlovanyi M, et al. Mechanism of interaction of backfill mixtures with natural rock fractures within the zone of their intense manifestation while developing steep ore deposits [J]. Sustainability, 2023,15(6):4889.

[8] Doolaeghe D, Davy P, Hyman J D, et al. Graph−based flow modeling approach adapted to multiscale discrete−fracture−network models [J]. Physical review E, 2020,102(5):053312.

[9] Hyman J D. Flow channeling in fracture networks: characterizing the effect of intensity on preferential flow path formation [J]. Water Resources Research, 2020,56(9):e2020WR027986.

[10] Liao J, Xu B, Mehmood F, et al. Numerical study of the long−term performance of EGS based on discrete fracture network with consideration of fracture deformation [J]. Renewable Energy, 2023, 216:119045.

[11] Sweeney M R, Hyman J D, O'Malley D, et al. Characterizing the impacts of multi−scale heterogeneity on solute transport in fracture networks [J]. Geophysical Research Letters, 2023,50(21): e2023GL104958.

[12] Han B, Wang S, Zhang Z, et al. Numerical simulation of geothermal reservoir thermal recovery of heterogeneous discrete fracture network−rock matrix system [J]. Energy, 2024,305:132306.

[13] 黄鸿蓝,宋 健,杨 蕴,等.三维裂隙网络中典型重金属污染物反应运移数值模拟 [J]. 地球科学, 2024,49(8):2879−2890.
Huang H, Song J, Yang Y, et al. Reactive transport numerical modeling of typicalheavy metal pollutants in three−dimensional fracture networks [J]. Earth Science, 2024,49(8):2879−2890.

[14] Cacas M, Ledoux E, de Marsily G, et al. Modeling fracture flow with a stochastic discrete fracture network: calibration and validation: 1. The flow model. Water Resources Research [J]. 1990,26(3):479−489.

[15] Li X, Li D, Xu Y, et al. A DFN based 3D numerical approach for modeling coupled groundwater flow and solute transport in fractured rock mass [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2020, 149:119179.

[16] Tran M, Jha B. Effect of poroelastic coupling and fracture dynamics on solute transport and geomechanical stability [J]. Water Resources Research, 2021,57(10):e2021WR029584.

[17] Zhang X, Ma F, Dai Z, et al. Radionuclide transport in multi−scale fractured rocks: A review [J]. Journal of hazardous materials, 2022, 424:127550.

[18] 黄诗棋,胡立堂,刘东旭,等.裂隙介质中 Pu 迁移的连续时间随机游走模拟 [J]. 中国环境科学, 2023,43(12):6321−6328.
Huang S, Hu L, Liu D, et al. Transport simulation of Pu through fractured media based on continuous time random walk model [J]. China Environmental Science, 2023,43(12):6321−6328.

[19] Masciopinto C, Alghalandis Y F. A new two−step particle tracking and channels model method for preferential 3−D flow and transport in large DFNs of fractured aquifers [J]. Journal of Hydrology, 2024,629: 130566.

[20] Viswanathan H S, Ajo-Franklin J, Birkholzer J T, et al. From fluid flow to coupled processes in fractured rock: Recent advances and new frontiers [J]. Reviews of Geophysics, 2022,60(1):e2021RG000744.

[21] Cavalcante T M, Souza A C R, Hajibeygi H, et al. Simulation of two−phase flow in 3D fractured reservoirs using a projection−based Embedded Discrete Fracture Model on Unstructured tetrahedral grids(pEDFM−U) [J]. Advances in Water Resources, 2024,187:

104679.

[22] Sherman T, Hyman J, Dentz M, et al. Characterizing the influence of fracture intensity on network scale transport [J]. Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 2020,125(1):e2019JB018547.

[23] Zhang X, Ma F, Yin S, et al. Application of upscaling methods for fluid flow and mass transport in multi‐scale heterogeneous media: A critical review [J]. Applied Energy, 2021,303:117603.

[24] Ma L, Gao D, Qian J, et al. Multiscale fractures integrated equivalent porous media method for simulating flow and solute transport in fracture‐matrix system [J]. Journal of Hydrology, 2023,617:128845.

[25] Andrews E M, Hyman J D, Sweeney M R, et al. Fracture intensity impacts on reaction front propagation and mineral weathering in three‐dimensional fractured media [J]. Water Resources Research, 2023,59(2):e2022WR032121.

[26] 佴宇鏖,周佳庆,李长冬,等.基于裂隙网络几何特征参数的岩体溶质传输过程预测模型研究 [J]. 岩土工程学报, 2025,47(8):1641‐1652.
Nai Y, Zhou J, Li C, et al. Predictive model for solute transport processes in fractured rocks based on geometric parameters of fracture network [J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2025, 47(8):1641‐1652.

[27] 王　婷,王子龙,李炎隆,等.粗糙裂隙渗流‐溶蚀耦合过程可视化试验及渗透性演化规律研究 [J]. 岩土工程学报, 2025,47(8):1662‐1671.
Wang T, Wang Z, Li Y, et al. Visualization experiments study on coupling process of flow‐erosion in rough fractures and evolution of permeability [J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2025, 47(8):1662‐1671.

[28] Wenli Y, Sharifzadeh M, Yang Z, et al. Assessment of fracture characteristics controlling fluid flow performance in discrete fracture networks (DFN) [J]. Journal of Petroleum Science and Engineering, 2019,178:1104‐1111.

[29] Yan X, Yu H. Numerical simulation of hydraulic fracturing with consideration of the pore pressure distribution based on the unified pipe‐interface element model [J]. Engineering Fracture Mechanics, 2022,275:108836.

[30] Reeves D M, Pham H, Parashar R, et al. Fracture connectivity and flow path tortuosity elucidated from advective transport to a pumping well in complex 3D networks [J]. Engineering Geology, 2023,313: 106960.

[31] Zhao Z, Chen S, Zhang J, et al. In‐situ tracer test in fractured rocks for nuclear waste repository [J]. Earth‐Science Reviews, 2024,250: 104683.

[32] Lichtner P C, Hammond G E, Lu C, et al. PFLOTRAN user manual: A massively parallel reactive flow and transport model for describing surface and subsurface processes [R]. Los Alamos National Laboratory (LANL), Los Alamos, NM (United States); Sandia National Lab. (SNL‐NM), Albuquerque, NM (United States); Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), Berkeley, CA (United States); Oak Ridge National Laboratory (ORNL), Oak Ridge, TN (United States); OFM Research, Redmond, WA (United States), 2015.

[33] Hyman J D, Karra S, Makedonska N, et al. dfnWorks: A discrete fracture network framework for modeling subsurface flow and transport [J]. Computers & Geosciences, 2015,84:10‐19.

[34] Sweeney M R, Gable C W, Karra S, et al. Upscaled discrete fracture matrix model (UDFM): an octree‐refined continuum representation of fractured porous media [J]. Computational Geosciences, 2020,24(1): 293‐310.

[35] de Dreuzy J R, Méheust Y, Pichot G. Influence of fracture scale heterogeneity on the flow properties of three‐dimensional discrete fracture networks (DFN) [J]. Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 2012,117(B11).

[36] Hyman J D, Aldrich G, Viswanathan H, et al. Fracture size and transmissivity correlations: Implications for transport simulations in sparse three‐dimensional discrete fracture networks following a truncated power law distribution of fracture size [J]. Water Resources Research, 2016,52(8):6472‐6489.

[37] Hyman J D, Painter S L, Viswanathan H, et al. Influence of injection mode on transport properties in kilometer‐scale three‐dimensional discrete fracture networks [J]. Water Resources Research, 2015,51(9): 7289‐7308.

[38] Jordan G, Rammensee W. Dissolution rates of calcite (1014) obtained by scanning force microscopy: Microtopography‐based dissolution kinetics on surfaces with anisotropic step velocities [J]. Geochimica et Cosmochimica Acta, 1998,62(6):941‐947.

[39] Trinchero P, Sanglas J, Iraola A, et al. On the parameterisation of dual‐continuum models for reactive transport modelling in fractured media [J]. Journal of Hydrology, 2022,615:128691.

作者简介：袁奕梁 (2000‐),男,湖南湘潭人,河海大学博士研究生,主要从事地下水数值模拟研究.yyl_hhu@hhu.edu.cn.