

文章编号: 1000-7598(2013)07-1905-09

基于细观均匀化的膨润土有效热传导特性研究

张勤^{1,2}, 周嵩^{1,2}, 陈益峰^{1,2}, 周创兵^{1,2}, 潘少华³, 郑华康^{1,2}

(1. 武汉大学 水资源与水电工程科学国家重点实验室, 武汉 430072;

2. 武汉大学 水工岩石力学教育部重点实验室, 武汉 430072; 3. 长江勘测规划设计研究院, 武汉 430010)

摘要: 基于均匀化方法和椭球夹杂问题基本解给出了非饱和岩土体的有效热传导特性模型。该模型可以考虑夹杂形态、体积分数和空间分布及夹杂间相互作用对有效热传导特性的影响, 反映了由于非均匀夹杂引起有效热传导张量的各向异性特性。讨论了夹杂宽高比以及夹杂与基质热传导系数比对有效热传导张量各向异性系数的影响。将岩土体看作固体基质和孔隙夹杂构成的非均匀材料, 探讨了岩土体有效热传导系数随孔隙形态、孔隙率和饱和度的变化规律。最后, 应用上述模型对高庙子膨润土(GMZ01)有效热传导系数进行预测并与其他模型预测结果进行对比分析。研究表明, 本文模型对 GMZ01 膨润土有效热传导系数具有较好的预测能力, 但更准确的预测需根据膨润土的孔隙结构采用多层次均匀化方法。研究成果对于高放核废料深地质处置库缓冲材料的热-水-力耦合特性具有一定参考价值。

关键词: 细观均匀化; 热传导特性; 各向异性; 高庙子膨润土

中图分类号: TU 443

文献标识码: A

An effective thermal conductivity model for bentonite based on meso homogenization techniques

ZHANG Qin^{1,2}, ZHOU Song^{1,2}, CHEN Yi-feng^{1,2}, ZHOU Chuang-bing^{1,2}, PAN Shao-hua³, ZHENG Hua-kang^{1,2}

(1. State Key Laboratory of Water Resources and Hydropower Engineering Science, Wuhan University, Wuhan 430072, China; 2. Key Laboratory of Rock Mechanics in Hydraulic Structural Engineering, Ministry of Education, Wuhan University, Wuhan 430072, China;

3. Changjiang Institute of Survey, Planning, Design and Research, Wuhan 430010, China)

Abstract: An effective thermal conductivity model is presented based on the basic solution of ellipsoidal matrix-inclusion problem using homogenization techniques. This model integrates well the effects of the shape, volume fraction, space distribution of inclusion and the interaction between inclusion and matrix on the effective thermal conductivity. The anisotropy of conductivity, which is mainly induced by the aspect ratio of inclusion and the ratio between conductivity of inclusion and matrix, is also included in the model. On this basis, by characterizing the geomaterials as heterogeneous media composed of solid matrix and embedded ellipsoidal voids, the influences of void shape, porosity and saturation degree on the effective thermal conductivity are discussed. Finally, the proposed model is used to predict the effective thermal conductivity of Gaomiaozi bentonite(GMZ01); and the predicted results are compared with the experimental data and the predictions by other models. The results show that the proposed model has a better predictive capability for the effective thermal conductivity of the GMZ01 bentonite. Given the complex pore structure of the bentonite, multiscale homogenization techniques should be used to yield more accurate predictions. The research results may provide a helpful reference for better understanding the coupled thermo-hydro-mechanical behaviors of buffer materials for the high-level radioactive waste disposal.

Key words: meso homogenization techniques; thermal conductivity; anisotropy; GMZ01 bentonite

1 引言

在高放核废料深地质处置、地热资源开发利用和石油及液化天然气地下储存等工程实践中, 准确

地描述热能传输过程非常重要。例如, 深埋核废料地质处置库中的高放射性废料衰变将释放大量的热能, 从而引起周围岩土介质(包括缓冲材料和围岩等)温度的升高。这种温度变化产生的热应力可能

收稿日期: 2012-05-04

基金项目: 国家优秀青年基金资助项目(No. 51222903); 国家自然科学基金资助项目(No. 51179136, No. 51079107)。

第一作者简介: 张勤, 男, 1985年生, 博士研究生, 主要研究方向为岩土多场耦合分析。E-mail: zhangqin@whu.edu.cn

通讯作者: 陈益峰, 男, 1974年生, 教授, 博士生导师, 主要研究方向为岩土多场耦合分析, 岩土渗流、变形与稳定分析。E-mail: csyfchen@whu.edu.cn

导致围岩产生新的裂隙而形成核素泄漏的潜在通道,甚至影响到核废料处置库围岩的稳定性。然而,有效热传导系数作为表征岩土介质导热能力大小、描述热能传输过程的关键性参数,它不仅受介质结构特征(如矿物成分、孔隙率、微裂纹及裂隙形态与分布)、多相流特征(如饱和度、水蒸气含量等)和温度等因素影响显著,还表现出显著的各向异性特征和多场耦合特性。因此,正确认识与合理估计岩土介质的有效热传导特性对于高放核废料处置库的安全评估和优化设计具有重要意义。

国内外有关岩土介质有效热传导特性的研究成果极为丰富,大致可以分为如下两类:

一类为通过拟合试验数据得到的经验或半经验公式^[1-10]。例如, Campbell 等^[1]针对美国非饱和土提出了相应的经验公式,但该公式包含 5 个参数,不易获得; Tang 等^[2]针对美国 MX-80 膨润土热传导特性的试验研究表明,热传导系数与孔隙气体体积呈线性关系,并在此基础上讨论了干密度、含水率和饱和度等因素对膨润土热传导系数的影响; Johansen^[3]提出归一化热传导系数的概念,认为归一化热传导系数与饱和度之间存在对数关系,但该模型不适用于低饱和度,特别是干燥土体的情况; Côté 等^[4]改进了 Johansen 归一化热传导系数的表达式,从而能够预测不同土体在更大范围孔隙率和饱和度时的热传导系数; Lu 等^[5]在 Côté 的基础上针对 10 种中国土样给出了归一化热传导系数的表达式;其他的经验公式包括 Kersten^[6]、Van^[7]、Kahr^[8]、Salomone^[9]和 Rao^[10]等。

另一类研究从热流传输过程的简单物理意义出发,建立有效热传导系数的机制模型。例如 Wiener^[11]基于热流等效的概念,将岩土介质各组分相分别看作导热热阻进行串联、并联组合得到有效热传导系数的上、下界限; Woodside 等^[12-13]和 Tarnawski 等^[14]认为单元土体内存在不同热流传输通道,提出了非饱和土有效热传导系数的串、并联模型; Tong 等^[15]则利用 Wiener 界限和 Hashin-Shtrikman 界限将岩土介质固、液、气三相进行串、并联组合得到了热-水-力耦合作用下的有效热传导系数预测模型。与经验或半经验公式相比,基于串、并联组合的有效热传导系数模型概念清晰,不仅能够考虑孔隙率、干密度、矿物组分、以及饱和度等因素的影响,对不同种类岩土体也都有较好的预测能力。然而串、并联组合模型无法考虑介质内各组分相的形态、空间分布以及组分相之间相互作用对热传导系数的影响,也缺乏对热传导系数各向异性特性的描述能力,

因此,具有一定的局限性。

Maxwell^[16]最早给出了均匀液体中存在不相互作用的均匀球形悬浮物的有效热传导系数。Fricke^[17]进一步给出了悬浮物为椭球情况下的有效热传导系数。Zimmerman^[18]在 Fricke 的基础上研究了饱和岩石的有效热传导系数。Gruescu^[19-20]等将岩石矿物成分、饱水孔隙和饱气孔隙等各组分看作分布在均匀基质中的椭球状夹杂,利用细观均匀化方法以及单夹杂问题的 Green 函数基本解得到了估计岩石有效热传导系数的均匀化格式(如 dilute、Mori-Tanaka 和 PCW 等),该方法能够反映夹杂形状、空间分布和相互作用对热传导特性的影响。陈益峰等^[21-22]则在脆性岩石细观损伤力学的框架内建立了岩石在损伤过程中热传导特性的演化模型,研究了非饱和岩石有效热传导系数的多场耦合特性。

本文基于热传导问题细观均匀化方法和单夹杂问题基本解得到岩土体的有效热传导张量,研究了有效热传导张量的各向异性特征,讨论了孔隙宽高比、孔隙率以及饱和度对热传导特性的影响。最后运用该模型预测了高庙子膨润土的热传导系数,并通过与几种常用预测模型的对比分析,阐述了本模型的合理性和有效性。

2 热传导问题细观均匀化方法

假设由无限大固相基质 Ω_s 和非均匀椭球型夹杂 Ω_i 组成的表征单元体积(REV)为 Ω ,其中基质相与非均匀相的热传导系数张量分别为 λ^s 和 λ^i ,并假设热传导特性在基质相与非均匀相内为各向同性,即满足 $\lambda^s = \lambda^s \delta$ 和 $\lambda^i = \lambda^i \delta$,这里 δ 为二阶各向同性张量。不失一般性,首先考虑单夹杂的情况,如图 1 所示,设椭圆的主轴方向分别为 x_1 、 x_2 和 x_3 。定义 x_3 方向的单位向量为椭球的方向矢量 n ,则椭球内任一点满足以下关系式

$$\frac{x_1^2 + x_2^2}{a^2} + \frac{x_3^2}{a^2 \omega^2} \leq 1 \quad (1)$$

式中: $\omega = c/a$ 为椭球宽高比; a 为椭球在 x_1 - x_2 平面内的半轴长; c 为 x_3 方向上的半轴长。

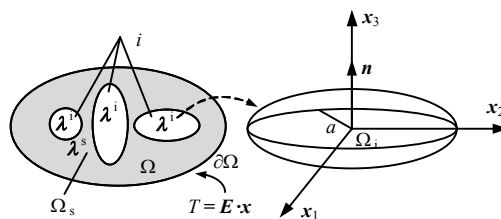


图 1 非均匀椭球夹杂示意图
Fig.1 Illustration of ellipsoidal inhomogeneity embedded in an infinite matrix

假设在 REV 的边界 $\partial\Omega$ 上满足均匀宏观温度梯度场 $\mathbf{E}$, 则 REV 内的稳态热传导问题可用以下微分方程表示

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = 0 \quad (\forall \mathbf{x} \in \Omega) \quad (2)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = -\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \quad (\forall \mathbf{x} \in \Omega) \quad (3)$$

$$T = \mathbf{E} \cdot \mathbf{x} \quad (\forall \mathbf{x} \in \partial\Omega) \quad (4)$$

式中: $\mathbf{x}$ 为 REV 内的位置矢量; $\boldsymbol{\sigma}$ 为细观热流矢量; $\boldsymbol{\varepsilon}$ 为细观温度梯度; $\mathbf{E}$ 为宏观温度梯度; T 为宏观温度; $\boldsymbol{\lambda}$ 为基质相或夹杂相的热传导系数张量, 有

$$\left. \begin{aligned} \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{x}) &= \boldsymbol{\lambda}^s & (\forall \mathbf{x} \in \Omega_s) \\ \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{x}) &= \boldsymbol{\lambda}^i & (\forall \mathbf{x} \in \Omega_i) \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

运用细观均匀化方法可以得到含单椭球夹杂的均匀化宏观热传导系数张量^[19]

$$\boldsymbol{\lambda}^{\text{hom}} = \boldsymbol{\lambda}^s + \varphi^i (\boldsymbol{\lambda}^i - \boldsymbol{\lambda}^s) \cdot \mathbf{A}^i \quad (6)$$

式中: $\mathbf{A}^i$ 表示椭球夹杂的局部化张量; φ^i 为椭球夹杂的体积分数。如果介质由多相介质组成的混合物, 则式 (6) 可写成更一般的表达式

$$\boldsymbol{\lambda}^{\text{hom}} = \sum_i \varphi^i \boldsymbol{\lambda}^i \cdot \mathbf{A}^i \quad (7)$$

局部化张量 $\mathbf{A}^i$ 取决于不同的均匀化方法, 通过 $\mathbf{A}^i$ 可以考虑各相的体积分数、热传导系数以及夹杂形状、空间分布与相互作用对有效热传导张量的影响。

3 含椭球夹杂的有效热传导张量

3.1 含椭球夹杂的有效热传导张量

在第 2 节细观均匀化过程的基础上, 对于无限大均匀基质中含单一椭球夹杂的情况, 可采用 Shafiro 等^[23]给出的基本解得到基于不同均匀化方法 (如稀疏方法、Mori-Tanaka 方法和 PCW 方法) 的有效热传导特性张量

$$\boldsymbol{\lambda}^{\text{dil}} = \boldsymbol{\lambda}^s + \varphi^i (\boldsymbol{\lambda}^i - \boldsymbol{\lambda}^s) \cdot \mathbf{A}_{\text{dil}}^i \quad (8)$$

$$\boldsymbol{\lambda}^{\text{MT}} = \boldsymbol{\lambda}^s + \varphi^i (\boldsymbol{\lambda}^i - \boldsymbol{\lambda}^s) \cdot \mathbf{A}_{\text{MT}}^i \quad (9)$$

$$\boldsymbol{\lambda}^{\text{PCW}} = \boldsymbol{\lambda}^s + (\boldsymbol{\delta} - \varphi^i \mathbf{T}^i \mathbf{P}_d) \cdot (\varphi^i \mathbf{T}^i) \quad (10)$$

式中: φ^i 、 $\boldsymbol{\lambda}^i$ 和 $\mathbf{A}_\alpha^i$ ($\alpha = \text{dil}, \text{MT}, \text{PCW}$) 分别为夹杂的体积率、热传导张量和局部化张量, 并且有

$$\mathbf{A}_{\text{dil}}^i = [\boldsymbol{\delta} + \mathbf{P}_i (\boldsymbol{\lambda}^i - \boldsymbol{\lambda}^s)]^{-1} \quad (11)$$

$$\mathbf{A}_{\text{MT}}^i = \mathbf{A}_{\text{dil}}^i \cdot [(1 - \varphi^i) \boldsymbol{\delta} + \varphi^i \mathbf{A}_{\text{dil}}^i]^{-1} \quad (12)$$

$$\mathbf{T}^i = [(\boldsymbol{\lambda}^i - \boldsymbol{\lambda}^s)^{-1} + \mathbf{P}_i]^{-1} \quad (13)$$

式中: $\mathbf{P}_i$ 为与夹杂几何形态有关的作用张量; $\mathbf{P}_d$ 为与夹杂空间分布有关的作用张量, 根据单一椭球夹杂的基本解, 它们的表达式均可写为

$$\mathbf{P} = \frac{\zeta}{\lambda^s} (\boldsymbol{\delta} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) + \frac{1 - 2\zeta}{\lambda^s} \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \quad (14)$$

式中: ζ 为与椭球宽高比 ω 有关的几何参数, 且有

$$\zeta = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{1 - \omega^2} \left(1 - \frac{\omega}{\sqrt{1 - \omega^2}} \arctan \frac{\sqrt{1 - \omega^2}}{\omega} \right) \right] & (0 < \omega < 1) \\ 1/3 & (\omega = 1) \\ \frac{1}{2} \left[1 + \frac{1}{\omega^2 - 1} \left(1 - \frac{\omega}{2\sqrt{\omega^2 - 1}} \ln \frac{\omega + \sqrt{\omega^2 - 1}}{\omega - \sqrt{\omega^2 - 1}} \right) \right] & (\omega > 1) \end{cases} \quad (15)$$

式 (15) 中, $\omega = 1$ 时为圆球状夹杂; $0 < \omega < 1$ 时为扁球状夹杂, 且当 $\omega \rightarrow 0$ 时为钱币状夹杂, 并有 $\zeta \rightarrow \pi\omega/4$; $\omega > 1$ 时为长球状夹杂, 且当 $\omega \rightarrow \infty$ 时为针状夹杂, 并有 $\zeta \rightarrow 0.5$ 。当 ω 在 0.01~10 之间变化时, ζ 变化比较显著, 如图 2 所示。

在上述均匀化方法中, 稀疏方法尽管简单, 但无法考虑夹杂之间的相互作用, 仅适用于夹杂体积分数较小的情况; Mori-Tanaka 方法考虑了夹杂之间的相互作用, 但无法考虑夹杂的空间分布效应; 更为复杂的 PCW 则可同时考虑夹杂的相互作用和空间效应。

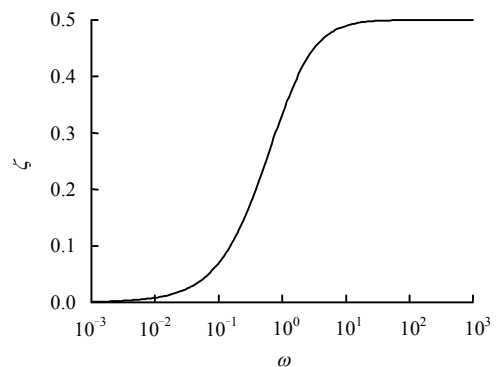


图 2 参数 ζ 与宽高比 ω 关系曲线
Fig.2 Curve of geometric parameter ζ and aspect ratio ω

将单一椭球夹杂推广到一般的情况, 即基质中含有多族夹杂, 且在空间上具有任意分布时, 介质的有效热传导张量可以借助单位球面上的积分写为

$$\lambda^{\text{dil}} = \lambda^s + \oint_{l^2} \varphi^i(\mathbf{n}) [(\lambda^i(\mathbf{n}) - \lambda^s)] \cdot \mathbf{A}_{\text{dil}}^i(\mathbf{n}) d\Gamma \quad (16)$$

$$\lambda^{\text{MT}} = \lambda^s + \oint_{l^2} \varphi^i(\mathbf{n}) [(\lambda^i(\mathbf{n}) - \lambda^s)] \cdot \mathbf{A}_{\text{MT}}^i(\mathbf{n}) d\Gamma \quad (17)$$

式中: l^2 为单位球面, $l^2 = \{\mathbf{n} | |\mathbf{n}|=1\}$; $\varphi^i(\mathbf{n})$ 为在非均匀夹杂在方向 $\mathbf{n}$ 上的体积分数。通常夹杂在空间上分布十分复杂, 式 (16)、(17) 难以导出显式表达式, 但可以在单位球面上采用高斯积分进行求解。如果夹杂在空间上均匀分布, 则介质的有效热传导张量是各向同性的, 并有

$$\lambda^{\text{dil}} = \lambda^s + \varphi^i(\lambda^i - \lambda^s) R_\lambda \quad (18)$$

$$\lambda^{\text{MT}} = \lambda^s + \varphi^i(\lambda^i - \lambda^s) \frac{R_\lambda}{1 - \varphi^i(1 - R_\lambda)} \quad (19)$$

式中: R_λ 为与 λ^i 和 λ^s 之比以及夹杂形态有关的系数, 且有

$$R_\lambda = \frac{2}{3} \frac{\lambda^s}{(1 - \zeta)\lambda^s + \zeta\lambda^i} + \frac{1}{3} \frac{\lambda^s}{2\zeta\lambda^s + (1 - 2\zeta)\lambda^i} \quad (20)$$

3.2 有效热传导张量各向异性特性

将式 (14) 代入式 (11) 得到稀疏方法的局部化张量为

$$\mathbf{A}_{\text{dil}}^i = \left[1 + \frac{\zeta(\lambda^i - \lambda^s)}{\lambda^s} \right]^{-1} (\boldsymbol{\delta} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) + \left[1 + \frac{(1 - 2\zeta)(\lambda^i - \lambda^s)}{\lambda^s} \right]^{-1} \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \quad (21)$$

定义有效热传导张量的增量^[23] $\mathbf{H} = \boldsymbol{\lambda}^{\text{hom}} - \boldsymbol{\lambda}^s$, 根据夹杂体积分数 $\varphi^i = \Omega_i / \Omega$ 并结合式 (8) 得到

$$\mathbf{H}^{\text{dil}} = \frac{\Omega_i}{\Omega} (\lambda^i - \lambda^s) \left\{ \left[1 + \frac{\zeta(\lambda^i - \lambda^s)}{\lambda^s} \right]^{-1} (\boldsymbol{\delta} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) + \left[1 + \frac{(1 - 2\zeta)(\lambda^i - \lambda^s)}{\lambda^s} \right]^{-1} \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \right\} \quad (22)$$

式中: $\Omega_i = 4\pi a^3 \omega / 3$ 为夹杂相的体积; Ω 为 REV 的体积。对于式 (22) 分别考虑如下 3 种特殊情况:

(1) 钱币型夹杂 ($\omega \rightarrow 0$, $\zeta \rightarrow \pi\omega/4$)

如果基质的热传导系数远大于夹杂的热传导系数, 可认为 $\lambda^i \rightarrow 0$, 则有

$$\mathbf{H}^{\text{dil}} = -\frac{8}{3} d\lambda^s \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \quad (23)$$

如果基质的热传导系数远小于夹杂的热传导系数, 可认为 $\lambda^i \rightarrow \infty$, 则有

$$\mathbf{H}^{\text{dil}} = \frac{16}{3} d\lambda^s (\boldsymbol{\delta} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \quad (24)$$

式中: $d = a^3 / \Omega$ 为夹杂密度参数。如果夹杂为裂纹或空隙, 则参数 d 可作为损伤内变量被广泛运用于细观损伤力学模型中, 据此建立的细观损伤与有效热传导张量之间的关系^[21-22]反映了有效热传导张量的多场耦合特性。

(2) 针状夹杂 ($\omega \rightarrow \infty$, $\zeta \rightarrow 0.5$)

此时, 式 (22) 可改写为

$$\mathbf{H}^{\text{dil}} = \frac{\Omega_i}{\Omega} (\lambda^i - \lambda^s) \left[\frac{2\lambda^s}{\lambda^i + \lambda^s} (\boldsymbol{\delta} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) + \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \right] \quad (25)$$

如果 c 为常数, $a \rightarrow 0$ 为线状夹杂, 则 $\Omega_i = 4\pi a^3 \omega / 3 \rightarrow 0$, 从而 $\mathbf{H}^{\text{dil}} \rightarrow 0$ 。另一种情况, 如果 a 为常数, $c \rightarrow \infty$ 为无限长圆柱夹杂, 此时 $\Omega_i = 4\pi a^3 \omega / 3 \rightarrow \infty$, 定义 REV 垂直于长圆柱轴的横截面的表征面积 A , 则 $\Omega_i / \Omega = 2\pi a^3 / 3A$, 于是

$$\mathbf{H}^{\text{dil}} = \frac{2\pi a^2}{3A} (\lambda^i - \lambda^s) \left[\frac{2\lambda^s}{\lambda^i + \lambda^s} (\boldsymbol{\delta} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) + \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \right] \quad (26)$$

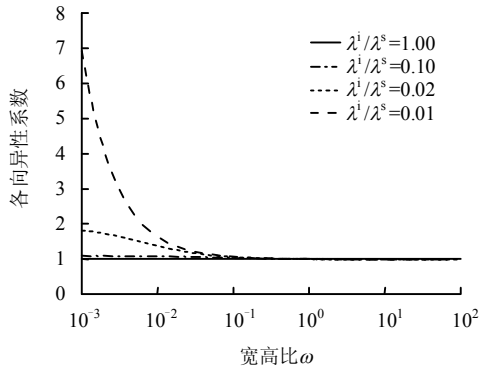
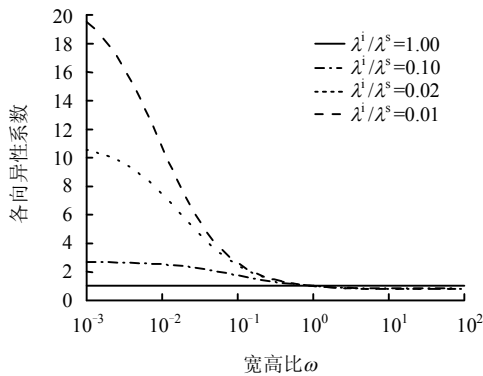
当 $A \rightarrow \infty$, $\mathbf{H}^{\text{dil}} \rightarrow 0$ 。这说明, 当 $\omega \rightarrow \infty$ (针状夹杂) 时, 介质的有效热传导系数增量 $\mathbf{H}^{\text{dil}} \rightarrow 0$, 即有效热传导张量基本上与基质的热传导张量相同, 表明针状夹杂所引起的各向异性特征并不明显。

(3) 圆球夹杂 ($\omega = 1$, $\zeta = 1/3$)

$$\mathbf{H}^{\text{dil}} = \frac{\Omega_i}{\Omega} (\lambda^i - \lambda^s) \left(1 + \frac{\lambda^i - \lambda^s}{3\lambda^s} \right)^{-1} \boldsymbol{\delta} \quad (27)$$

这表明, 圆球夹杂并不引起介质有效热传导张量的各向异性。

假设基质中分布一族椭球状夹杂 (夹杂方向矢量 $\mathbf{n}$ 相同、宽高比 ω 相同, 热传导系数 λ^i 也相同), 定义有效热传导张量在垂直于椭球夹杂方向矢量 $\mathbf{n}$ 和平行于方向矢量 $\mathbf{n}$ 的分量之比为各向异性系数, 它反映了有效热传导张量的各向异性的程度。分别采用稀疏方法和 Mori-Tanaka 方法得到的各向异性系数随椭球宽高比的变化如图 3、4 所示。由图可知, $\omega < 1$ 时, ω 越小, 各向异性系数越大, 有效热传导张量的各向异性特性越显著; $\omega = 1$ 时, 有效热传导张量表现为各向同性; $\omega > 1$ 时, ω 对各向异性系数影响不大, 即长球状夹杂几乎不引起有效热传导张量的各向异性。对于扁球状夹杂, 当夹杂与基质间的热传导系数之比越小, 有效热传导张量的各向异性特性越显著。

图3 稀疏方法的有效热传导张量各向异性系数 ($\varphi^i=0.1$)Fig.3 Anisotropic coefficients for effective thermal conductivity using dilute scheme ($\varphi^i=0.1$)图4 Mori-Tanaka 方法的有效热传导张量各向异性系数 ($\varphi^i=0.3$)Fig.4 Anisotropic coefficients for effective thermal conductivity using Mori-Tanaka scheme ($\varphi^i=0.3$)

3.3 非饱和和岩土介质有效热传导特性

岩土体的热传导特性与含水率或饱和度、空隙(包括裂纹和孔隙)的几何形态、壁面的起伏度、粗糙度、湿润性、比表面积、面积接触率和接触热阻等因素有关。为简单起见,空隙壁面的几何形态和接触特征的影响可以通过孔隙率与宽高比间接表征。而空隙尺寸及湿润性对岩土体有效热传导系数的影响则通过以下关系式进行反映^[21-22]

$$\lambda^c = S_r^{f(\varphi^c)} \lambda^f + [1 - S_r^{f(\varphi^c)}] \lambda^g \quad (28)$$

式中: λ^f 和 λ^g 分别为液体和气体的热传导系数; S_r 为饱和度; f 为 φ^c 的函数, 用来反映空隙尺寸和湿润性对热传导性的影响。若采用最简单的线性函数, 则 f 可表达为

$$f(\varphi^c) = \alpha + \beta \varphi^c \quad (29)$$

式中: α 和 β 为满足条件 $\alpha > 0$ 且对于任意 φ^c 有 $f > 0$ 的系数。对于亲水性空隙, f 取小值 ($f < 1$), 以反映流体对小尺寸空隙的优先侵入; 对于憎水性空隙, f 可取较大值。

结合式 (9) 和式 (28) 对非饱和岩土介质有效

热传导特性进行研究, 结果如图 5、6 所示, 式中涉及的相关参数取值为: $\lambda^s = 2.28 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, $\lambda^w = 0.5984 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, $\lambda^g = 0.0255 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。图 5 为饱和度 S_r 与参数 f 对有效热传导系数的影响, 总体上有效热传导系数随饱和度的增大而增大。当参数 f 取较小值时, 空隙壁面表现出亲水性, 在水的侵入过程中小尺寸和亲水性空隙会优先被水占据, 导致饱和度在从完全干燥状态逐步增大的初始阶段, 热阻显著减小, 有效热传导系数显著增大。当参数 f 取较大值时, 空隙壁面表现出憎水性, 水只能优先侵入较大尺寸的空隙中, 低传导性气体逐步被高传导性的水驱替, 在水侵入初始阶段, 有效热传导系数变化并不明显, 而当空隙逐步被水充满时, 有效热传导系数显著增大。图 6 为完全干燥情况下宽高比和孔隙率对有效热传导系数的影响, 由图可知, 随着孔隙率的增大, 低传导性的空隙对有效热传导系数的影响越来越明显, 有效热传导系数不断减小。对于扁长状的空隙, 宽高比越小, 较小的孔隙率会引起热传导系数显著降低, 随着孔隙率的不断增大而接近于气体的热传导系数; 随着宽高比逐步增大, 例如圆球状空隙 ($\omega=1$), 有效热传导系数与孔隙率近似呈线性关系。

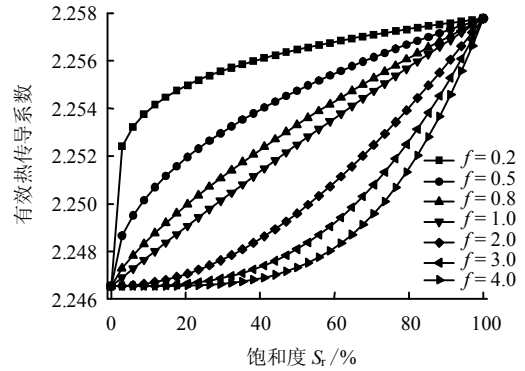


图5 有效热传导系数随空隙饱和度变化规律

Fig.5 Influence of saturation degree on effective thermal conductivity

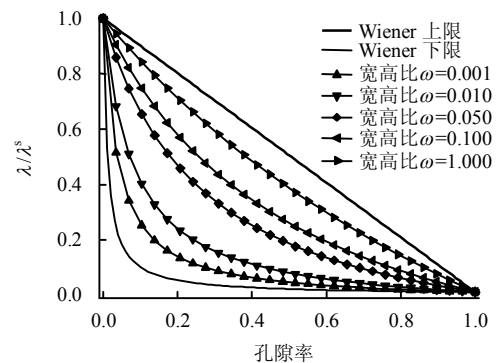


图6 有效热传导系数随孔隙率变化规律

Fig.6 Influence of porosity on effective thermal conductivity

4 高庙子膨润土热传导特性研究

缓冲材料的有效热传导特性是高放核废料处置库设计的一项关键指标,直接影响着核废料衰变热量向周围介质场的传递,对确保核废料处置库安全、有效运行具有重要意义。目前普遍认为以蒙脱石为主要成分的膨润土是最为合适的缓冲材料,如美国的 MX-80、西班牙的 FEBEX、日本的 Kunigel V1、和法国的 Fo-Ca 等,中国则选用内蒙古高庙子膨润土作为缓冲材料。本文根据刘月妙等^[24]针对高庙子天然钠基膨润土 GMZ01 的导热性能试验数据,基于前述细观各向异性热传导模型研究了不同孔隙率和饱和度下热传导特性的变化规律。

试样取自高庙子膨润土矿床 III 矿层深部,样品为浅灰白色,主要矿物成分为蒙脱石 75.4%,次要矿物为石英 11.7%、方英石 7.3%和长石 4.3%等。化学成分以 SiO_2 、 Al_2O_3 和 H_2O 为主。试样颗粒密度为 2.66 g/cm^3 ,粒径以 $< 2 \mu\text{m}$ 的黏土为主,总比表面积为 $570 \text{ m}^2/\text{g}$ 。采用瞬态热线法测定纯膨润土 GMZ01 在不同干密度和不同含水量下的导热性能,如图 7 所示^[24]。结果表明,相同压实干密度条件下,热传导系数随饱和度增大而增大,并且在饱和度较低时热传导系数增大较缓慢,当饱和度大于 20%时热传导系数增大较快。

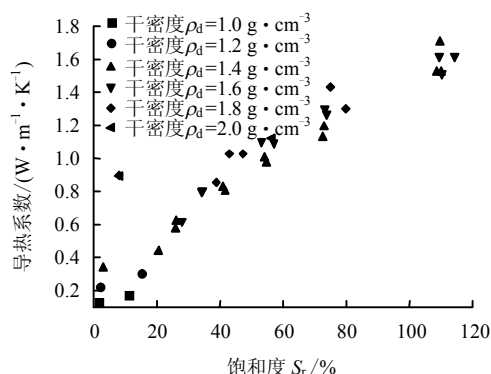


图 7 高庙子膨润土(GMZ01)热传导系数试验数据
Fig.7 Experimental data of thermal conductivity for GMZ01 bentonite

蒙脱石作为膨润土的主要矿物成分,其晶体结构是由两层硅片中间夹一层铝片形成的层状结构,它构成膨润土的基本单元。若干个晶层组成一个颗粒体,而若干个颗粒体聚集在一起组成集合体,膨润土即为若干集合体组成的黏土矿物。从膨润土这种组成结构看,膨润土中存在 3 个层次的孔隙:第 1 层次为晶层与晶层之间的孔隙;第 2 层次为颗粒体之间的孔隙;最后则为集合体之间的孔隙。Lloret 等^[25]根据压汞试验结果,进一步将其划分为集合体

内孔隙和集合体间孔隙两个层次,其中集合体内孔隙包含晶层间孔隙和颗粒间孔隙。基于细观尺度的膨润土有效热传导特性研究应该从这种孔隙结构出发,采用多层次的均匀化过程。然而,在缺乏对这种多层次孔隙结构足够认识及其对有效热传导特性影响机制的充分理解时,可以采用一次均匀化过程初步估计膨润土的有效热传导特性。

不考虑这种多层次孔隙结构,认为膨润土仅由土体基质相和孔隙夹杂相组成,其中孔隙部分内可以仅由水和空气占据,也可以由二者共同占据,水和空气对孔隙夹杂热传导特性的影响可以根据式(28)确定。采用前述的均匀化过程即可对膨润土有效热传导特性进行初步估计。针对高庙子膨润土热传导特性试验数据和最佳拟合结果,基于细观均匀化的有效热传导系数模型参数取值如下: $\lambda^s = 2.28 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, $\lambda^w = 0.5984 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, $\lambda^g = 0.0255 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, $\omega = 0.016$, $f(\varphi^c) = 1.2$ 。需要说明的是,膨润土有效热传导特性不仅受孔隙结构控制,还与水在孔隙内的存在形式,如结合水、自由水等,以及孔隙壁面的亲、憎水性有关。同时,在不同层次的孔隙内,孔隙结构和水对有效热传导系数产生的影响也不相同,这里宽高比 ω 和参数 f 的取值实际上是孔隙结构和水的影响在不同层次孔隙内的一种平均效应,从计算结果来看,这种平均取值具有一定的合理性。采用 Mori-Tanaka 均匀化方法(见式(9))得到的高庙子膨润土有效热传导系数随孔隙率和饱和度变化曲线如图 8、9 所示。由图可知,有效热传导系数随孔隙率的增大而减小,随饱和度的增大而增大。当孔隙率较小时,固相基质的热传导系数对有效热传导系数影响较大;而当孔隙率较大时,有效热传导系数受空气和水的影响较大,且当饱和度较低时主要受空气热传导系数控制,而高饱和度时则受水的热传导系数影响更为明显。

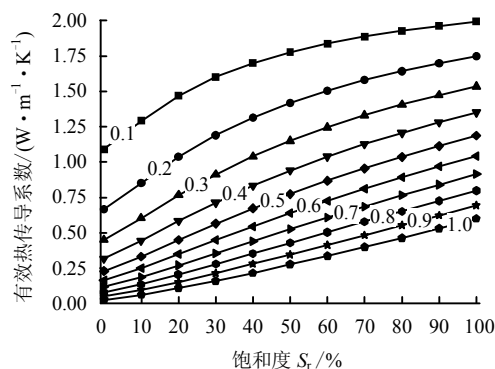


图 8 GMZ01 有效热传导系数与饱和度关系曲线
Fig.8 Effective thermal conductivity vs. saturation degree

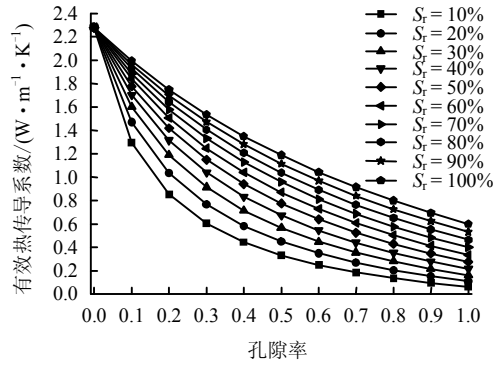


图9 有效热传导系数随孔隙率变化曲线
Fig.9 Effective thermal conductivity vs. porosity

图10为本文模型、Sakashita-Kumada模型、Johansen模型和Kahr模型对高庙子膨润土有效热传导系数预测结果。

3种热传导系数预测模型如下:

(1) Johansen 预测模型^[3]

Johansen 提出膨润土热传导系数的预测公式

$$\lambda = (\lambda_{\text{sat}} - \lambda_{\text{dry}})\lambda_e + \lambda_{\text{dry}} \quad (30)$$

式中: λ_{dry} 、 λ_{sat} 分别为干燥状态 ($S_r=0$) 和饱和状态 ($S_r=100\%$) 时的热传导系数 (W/mK); λ_e 为归一化热传导系数, 是饱和度 S_r 的函数, 它反映了饱和度对热传导系数的影响。式 (30) 中参数的具体数值可以根据下式计算得到:

$$\left. \begin{aligned} \lambda_e &= 1.0 + \lg S_r \\ \lambda_{\text{sat}} &= \lambda_s^{1-n} \lambda_w^{1-n} \\ \lambda_{\text{dry}} &= (0.135\rho_d + 64.7)/(\rho_s - 0.947\rho_d) \end{aligned} \right\} \quad (31)$$

式中: λ_s 、 λ_w 分别为膨润土颗粒与水的导热系数 (W/mK); ρ_d 、 ρ_s 分别为膨润土的干密度与膨润土颗粒的本征密度 (kg/m^3); n 为膨润土的孔隙率。

(2) Kahr 模型^[8]

Kahr 等针对 MX-80 膨润土提出了热传导系数的预测模型为

$$\lambda = -0.56 + 0.6\rho_d + 0.4\rho_d^3[w/(1+w)] \quad (32)$$

式中: w 为膨润土中水的质量与干燥膨润土质量之比, 又称含水率; ρ_d 为膨润土的干密度 (g/cm^3)。

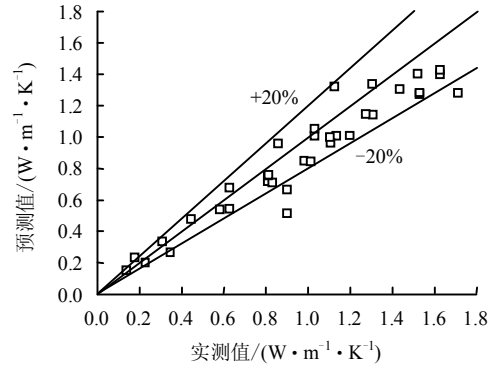
(3) Sakashita-Kumada 模型^[26]

Sakashita 和 Kumada 等从压实膨润土细观结构出发提出了预测膨润土热传导系数的半经验模型, Ould-Lahoucine 等^[26]将该模型进一步表示为

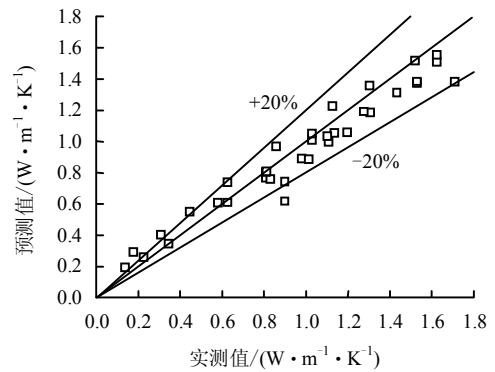
$$\lambda/\lambda_{\text{dry}} = 1 + [(9.750n - 0.706)S_r]^{0.285n+0.731} \quad (33)$$

其中干燥膨润土的热传导系数 λ_{dry} 根据下式计算

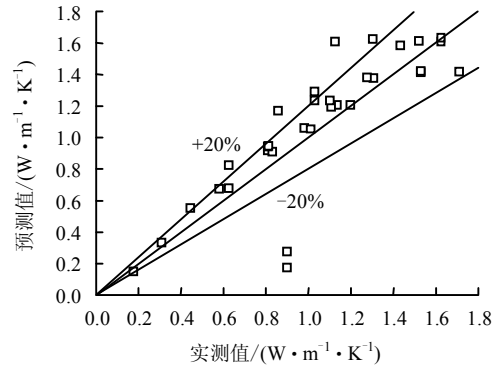
$$\lambda_{\text{dry}} = 0.0497 + 0.222(1-n) + 0.968(1-n)^3 \quad (34)$$



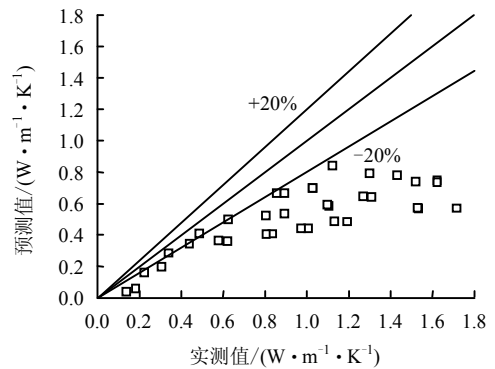
(a) 本文模型



(b) Sakashita-Kumada 模型



(c) Johansen 模型



(d) Kahr 模型

图10 GMZ01 膨润土热传导系数预测值与实测值比较
Fig.10 Predicted values vs. measured values of thermal conductivity for GMZ01 bentonite

各模型中的参数取值为 $\lambda^s = 2.28 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, $\lambda^w = 0.5984 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, $\rho_s = 2.6756 \text{ kg/m}^3$ 。图 10 中“+20%”和“-20%”线分别表示预测值与实测值的误差为 $\pm 20\%$ 。由图可知, 本文模型和基于细观结构的半经验 Sakashita-Kumada 模型得到的 GMZ01 膨润土热传导系数预测值与实测值较为接近, 而本文模型对于低热传导系数的样本预测值更接近于实测值; Johansen 模型预测值较实测值偏大, 同时由于 Johansen 模型的局限性, 当饱和度较低时, 该模型无法给出合理的预测结果, 这些数据点并没有在图 10(c)中予以反映; Kahr 模型预测值与实测值有较大的偏差, 这可能是由于 Kahr 模型中的经验参数主要根据 MX-80 膨润土拟合得到, 应用于 GMZ01 膨润土需要作一定修正。

5 结 论

(1) 基于细观均匀化方法和单夹杂问题基本解得到的有效热传导张量不仅能够反映岩土体孔隙的形状、空间分布及其相互作用, 还具有对有效热传导特性各向异性的描述能力。

(2) 岩土体的有效热传导张量的各向异性与夹杂形状密切相关, 长球状夹杂的各向异性特征不显著; 扁球状夹杂引起的各向异性特征不仅随着宽高比的不断减小而不断增大, 还受基质与夹杂间热传导系数之比的影响, 比值越大, 各向异性特征越明显。

(3) 针对 GMZ01 膨润土, 讨论了饱和度和宽高比和孔隙率对于岩土介质热传导特性的影响。研究表明, 本文模型对 GMZ01 膨润土热传导系数有一定的预测能力, 但对膨润土热传导系数更准确的预测需要从膨润土孔隙结构出发, 采用多层次的均匀化方法。

参 考 文 献

- [1] CAMPBELL G S. Soil physics with BASIC: Transport models for soil-plant systems[M]. Netherlands: Elsevier, 1985.
- [2] TANG A, CUI Y, LE T. A study on the thermal conductivity of compacted bentonites[J]. *Applied Clay Science*, 2008, 41(3-4): 181-189.
- [3] JOHANSEN O. Thermal conductivity of soils[D]. Norway: University of Trondheim, 1975.
- [4] CÔTÉ J, KONRAD J M. A generalized thermal conductivity model for soils and construction materials[J]. *Canadian Geotechnical Journal*, 2005, 42(2): 443-458.
- [5] LU S, REN T, GONG Y, et al. An improved model for predicting soil thermal conductivity from water content at room temperature[J]. *Soil Science Society of America Journal*, 2007, 71(1): 8-14.
- [6] KERSTEN M S. Thermal properties of soils[J]. *Highway Research Board Special Report*, 1952, (2): 161-166.
- [7] VAN R M, WINTERKORN H F. Structural and textural influences on thermal conductivity of soils[C]// *Proceedings of Highway Research Board*. Washington: Highway Research Board, 1959.
- [8] KAHR G, MULLER-VON MOOS, M. Thermal conductivity of MX80 bentonite and Montigel after hot-wire[R]. Zurich: Swiss National Cooperative for the Disposal of Radionactive Waste, 1982.
- [9] SALOMONE L A, KOVACS W D, KUSUDA T. Thermal performance of fine-grained soils[J]. *Journal of Geotechnical Engineering*, 1984, 110(3): 359-374.
- [10] RAO M G, SINGH D N. A generalized relationship to estimate thermal resistivity of soils[J]. *Canadian Geotechnical Journal*, 1999, 36(4): 767-773.
- [11] WIENER O. Lamellare doppelbrechung[J]. *Physikalische Zeitschrift*, 1904, 5(12): 332-338.
- [12] WOODSIDE W, MESSMER J H. Thermal conductivity of porous media. I. Unconsolidated sands[J]. *Journal of Applied Physics*, 1961, 32(9): 1688-1699.
- [13] WOODSIDE W, MESSMER J H. Thermal conductivity of porous media. II. Consolidated rocks[J]. *Journal of Applied Physics*, 1961, 32(9): 1699-1706.
- [14] TARNAWSKI V, LEONG W. A series-parallel model for estimating the thermal conductivity of unsaturated soils[J]. *International Journal of Thermophysics*, 2012, 33(7): 1191-1218.
- [15] TONG F, JING L, ZIMMERMAN R W. An effective thermal conductivity model of geological porous media for coupled thermo-hydro-mechanical systems with multiphase flow[J]. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 2009, 46(8): 1358-1369.
- [16] MAXWELL J C. A treatise on electricity and magnetism[M]. Oxford: Clarendon Press, 1881.
- [17] FRICKE H. A mathematical treatment of the electric conductivity and capacity of disperse systems I. The electric conductivity of a suspension of homogeneous spheroids[J]. *Physical Review*, 1924, 24(5): 575-587.