

文章编号: 1000-7598 (2014) 04-1041-09

非饱和膨润土的有效热传导特性模型

周 嵩^{1,2}, 陈益峰^{1,2}, 张 勤³, 郑华康^{1,2}, 周创兵^{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. 中国水电顾问集团 中南勘测设计研究院, 长沙 410014)

摘 要: 膨润土缓冲材料热传导特性的研究, 对于高放废物深地质处置系统的安全评价至关重要。基于串、并联原理, 通过将土体孔隙划分为与固相基质并联和串联两部分, 提出了考虑矿物成分、颗粒亲水性、孔隙率及饱和度等因素的非饱和膨润土有效热传导系数的 4 种预测形式, 建立了基于 4 种形式线性组合的有效热传导特性预测模型。详细讨论了模型参数的确定方法, 并讨论了孔隙率、饱和度和孔隙结构、颗粒亲水性等因素对土体有效热传导特性的影响。基于 MX-80 膨润土和高庙子膨润土热传导特性试验成果, 对模型的预测性能进行了验证。结果表明, 由于膨润土颗粒尺寸较小且具有亲水特性, 孔隙内的空气与水宜采用并联描述。研究成果对于非饱和膨润土的导热性能以及工程屏障系统的 THM 耦合数值模拟研究具有一定的参考价值。

关 键 词: 非饱和土; 有效热传导系数; 高放废物地质处置; 膨润土

中图分类号: TU 443

文献标识码: A

A model for effective thermal conductivity of unsaturated bentonite

ZHOU Song^{1,2}, CHEN Yi-feng^{1,2}, ZHANG Qin³, ZHENG Hua-kang^{1,2}, ZHOU Chuang-bing^{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 of Ministry of Education, Wuhan University, Wuhan 430072, China;
3. Zhongnan Engineering Corporation, Hydrochina Investment Co., Ltd., Changsha 410014, China)

Abstract: Bentonites have been widely adopted as the buffer/backfill materials for repositories of high-level radioactive waste disposal. Characterization of the effective thermal conductivity of the buffer materials is of great importance for optimization design and safety assessments of the repositories. Using the concept of the series-parallel structural models, the porosity of soils is decomposed into two components: one in parallel and the other in series connected to the solid phase. An effective structure depends on the decomposition is introduced to describe the heat transfer process of the porous soils considering the structural connections of pores and the solid phase. On this basis, four formulas which represent different series-parallel arrangements of pore fluids (water and air mixture) are proposed to predict thermal conductivity of unsaturated soils with a comprehensive consideration of the effects of mineralogical composition, porosity and saturation. An effective model for thermal conductivity of unsaturated soil is then developed based on a linear composition of the four formulas. Parameterization of the model is discussed; and the behaviors of the model with respect to the variations in porosity and saturation are illustrated. The model is validated against experimental data of thermal conductivity of MX-80 and Gaomiaozi bentonites. The results show that the arrangement of air and water in the pores tended to be in parallel connection for unsaturated bentonites because of the fine size and wettability of the soil particles. This research may provide a helpful reference for predicting thermal conductivity of unsaturated bentonites and numerical modeling of the coupled thermo-hydro-mechanical (THM) processes in the engineered barrier systems.

Key words: unsaturated soil; coefficient of effective thermal conductivity; high-level radioactive waste disposal; bentonite

1 引 言

核能的安全开发和利用对于改善我国能源结

构、推进节能减排和发展低碳经济具有重要的战略意义, 而高放射性废物的安全处置则是保障核工业可持续发展的一项长期的战略任务。核废料深地质

收稿日期: 2013-10-28

基金项目: 国家优秀青年科学基金项目(No. 51222903); 国家自然科学基金面上项目(No. 51179136, No. 51079107)。

第一作者简介: 周嵩, 男, 1986 年生, 博士研究生, 主要从事岩土多场耦合分析方面的研究工作。E-mail: zhousong@whu.edu.cn

通讯作者: 陈益峰, 男, 1974 年生, 教授, 博士生导师, 主要从事岩土多场耦合分析, 岩土渗流、变形与稳定分析方面的研究工作。

E-mail: csyfchen@whu.edu.cn

处置正是通过将放射性废物深埋在 500~1 000 m 的地质体中,并在废物容器和围岩之间形成一道人工屏障系统,从而阻止地下水的入渗,阻滞放射性核素的迁移,使废物与人类生存环境永久隔离^[1]。高放射性废物的衰变热的消散过程必然会引起较大的热应力,最终可能导致处置库围岩的性质弱化,甚至产生热损伤或宏观裂隙,从而为核素泄露提供通道。以蒙脱石为主要成分的膨润土因具有极低的渗透性、良好的吸附性和较强的膨胀自愈性能,是高放射性废物地质处置人工屏障系统理想的缓冲回填材料。因此,膨润土缓冲材料的热传导特性直接影响热量的消散过程以及围岩的温度和热应力分布,对处置库安全评价至关重要。目前国际上已经被广泛用作缓冲材料的膨润土有美国的 MX-80、日本的 Kunigel V1、西班牙的 FEBEX、法国的 Fo-Ca 等^[2]。国内的内蒙古高庙子膨润土蒙脱石的含量高,储量丰足,是理想的高放射性废物处置库缓冲材料^[2-5]。

针对岩体、砂土、黏土及人工材料,国内外学者已提出了大量的热传导系数预测模型,这些模型大致可分为 3 类。一类是通过孔隙率、饱和度等变量,建立反映材料热传导特性演化的经验或半经验模型,如 Johansen^[6]提出的相对热传导系数模型, Ewen 等^[7]和 Côté 等^[8]先后基于负指数和双曲线关系建立的相对热传导系数改进模型, Kahr 模型^[9], Knutsson 模型^[10], Sakashita-Kumada 模型^[11]等。经验或半经验模型考虑的影响因素及适用范围均有限,且物理意义不明确。另一类则试图通过等效理论描述孔隙介质的基本结构来建立热传导系数模型。Wiener 界限^[12]基于串并联方式给出了有效热传导系数的上下界限;而 Hashin-Shtrikman 界限^[13]则独立于孔隙结构,仅适用于各向同性土体。Woodside 等^[14]研究了松散砂土的热传导特性,提出了基于串并联的两相土体有效热传导系数的预测模型;Tarnawski 等^[15]在 Woodside 的两相模型的基础上,建立了三相非饱和土的热传导特性模型,并应用该模型研究了不同粒径土体的热传导特性,但该模型含有较多拟合参数,实用性差。童富果等^[16]基于串并联原理,提出了非饱和土热-水-力耦合作用下的热传导系数预测模型,但该模型中部分参数的离散性较大。与经验或半经验模型相比,基于等效理论的热传导特性模型概念清晰,不仅能够考虑矿物组分、孔隙率以及饱和度等因素的影响,而且对不同种类岩土体均具有一定的预测能力。然而现有模型无法考虑介质内各组分的颗粒形状、孔隙的形

态及其空间分布、矿物的亲水特性以及各组分之间的相互作用对热传导系数的影响,因此,也存在一定局限性。

第 3 类模型则基于夹杂理论,采用细观均匀化方法描述岩土材料的热传导特性。其中,Maxwell^[17]及 Fricke^[18]分别提出了均匀连续介质中随机分布均匀球形、椭球状悬浮物情况下的热传导系数模型;Gruescu 等^[19]基于椭球夹杂问题的基本解,采用两步均匀化方法给出了岩石有效热传导系数的预测模型;陈益峰等^[20]基于均匀化方法建立了脆性岩石有效热传导特性的细观力学模型,并应用该模型探讨了损伤扩展过程中脆性岩石热传导特性的演化规律;张勤等^[21]应用该模型讨论了膨润土的热传导特性。均匀化模型可反映夹杂形状、空间分布以及夹杂之间的相互作用对热传导特性的影响,但目前的研究对象以岩石为主,针对土体的研究成果相对较少。

针对我国高庙子膨润土的热传导特性,尽管已开展了一定的试验研究^[1-6],但相应的理论模型还很少。本文基于串、并联原理,从两相土体的等效结构出发,给出了三相非饱和土有效热传导系数的 4 种预测形式。采用 4 种预测形式的线性加权组合模型研究了 MX-80 及高庙子膨润土的热传导特性,结果表明,本文模型具有良好的预测性能。

2 膨润土有效热传导系数模型

岩土体等多孔介质可视为由基质颗粒以及充填于孔隙中的水、气组成的 3 相混合物。记土体组成各相的体积分数为 ϕ_α , 热传导系数为 λ_α ($\alpha = s, w, g$ 分别代表固相、水和气), 满足 $\sum \phi_\alpha = 1$ 。在完全干燥或完全饱和情况下, 3 相混合物退化为两相, 此时土体由固相颗粒和流体(空气或水分)之间的串并联组合而成。对于干燥情况, Wiener 界限^[12]的上、下界 λ_{dry}^U 、 λ_{dry}^L 分别代表固相颗粒和流体并联、串联情况下的热传导系数。

$$\left. \begin{aligned} \lambda_{dry}^U &= \sum \phi_\alpha \lambda_\alpha = \phi_g \lambda_g + (1 - \phi_g) \lambda_s \\ \lambda_{dry}^L &= \left[\sum \frac{\phi_\alpha}{\lambda_\alpha} \right]^{-1} = \left[\frac{1 - \phi_g}{\lambda_s} + \frac{\phi_g}{\lambda_g} \right]^{-1} \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

介质在干燥情况下的有效热传导系数 λ_e^{dry} 应当介于 Wiener 界限之间, 因此, 可表示为 Wiener 上、下界的线性组合

$$\lambda_e^{dry} = (1 - \eta) \lambda_{dry}^L + \eta \lambda_{dry}^U \quad (2)$$

式中: 参数 η 是插值系数, 依赖于土体的孔隙结构,

可视为孔隙率 ϕ 的函数, 且 $0 < \eta(\phi) < 1$ 。将式(1)代入式(2), 且有孔隙率 $\phi = \phi_g$, 可得

$$\lambda_e^{\text{dry}} = \eta(1-\phi)\lambda_s + \eta\phi\lambda_g + (1-\eta)\lambda_{g-s}^s \quad (3)$$

式中: $\lambda_{g-s}^s = \frac{\lambda_s \lambda_g}{\phi\lambda_s + (1-\phi)\lambda_g}$, 表示完全干燥状态下, 空气和固体颗粒串联的有效热传导系数。

式(3)右端第1项是固体颗粒的贡献, 仅与固相的热传导系数及孔隙分布有关, 不受孔隙中流体分布的影响; 第2、3项则都与孔隙中流体分布有关, 其等效结构的组成如图1所示。图中的孔隙可分为两部分, 与固相串联的孔隙 ϕ_1 及与固相并联的孔隙 ϕ_2 。事实上压实膨润土一般经过人工筛分及压实处理, 研究结果揭示, 压实膨润土结构中一般存在3类孔隙, 即颗粒内部孔隙、颗粒间孔隙(集合体内孔隙)和集合体间孔隙^[22]。压实膨润土的孔隙尺寸分布曲线中对应于小尺寸峰值的孔隙基本属于颗粒内部孔隙, 对应于大尺寸峰值的孔隙为颗粒间孔隙, 而颗粒间孔隙尺寸的峰值一般将集合体间孔隙尺寸的峰值覆盖而导致两者难以区分, 因而孔隙尺寸分布曲线表现为双峰结构。试验结果显示, 压实过程对颗粒内部孔隙影响较小, 只有当颗粒间孔隙破坏后, 颗粒内部孔隙才会明显变化^[22]。膨润土的热传导特性与其微观结构密切相关, 但由于本文模型采用的是宏观等效的方法, 因此, 只能通过孔隙率、饱和度、温度及压力等宏观变量来反映微观结构的变化对热传导系数的影响, 因而孔隙 ϕ_1 、 ϕ_2 并不能与膨润土的微观孔隙一一对应。但在宏观尺度上区分孔隙 ϕ_1 、 ϕ_2 有助于区分不同性质的孔隙对热传导特性贡献的差别。

假设土体等多孔介质可由图1所示结构等效描述, 则三相土体的有效热传导系数模型可以在此基础上建立。由于两相土体的热传导特性的确定较3相非饱和土更容易, 因此, 可以依据两相土体的特性先确定土体的等效孔隙结构的组成。以干燥情况为例, 在缺乏干燥状态试验数据的情况下, 为确定图1中各组成部分的体积分数, Johansen 建议的干燥土体的有效热传导系数估算公式应用广泛^[15-16], 即

$$\lambda_e^{\text{dry}} = \frac{0.135\rho_d + 64.7}{\rho_s - 0.947\rho_d} \quad (4)$$

式中: ρ_d 为土体干密度; ρ_s 为土体固体颗粒密度。

但由于 Johansen 公式与土颗粒及孔隙气体的热传导性无直接联系, 所确定的干燥土体的有效热传导系数可能产生较大误差, 为简化分析, 本文采用

几何平均模型^[23], 也可称为对数法则:

$$\lambda_e^{\text{dry}} = \lambda_g^\phi \lambda_s^{1-\phi} \quad (5)$$

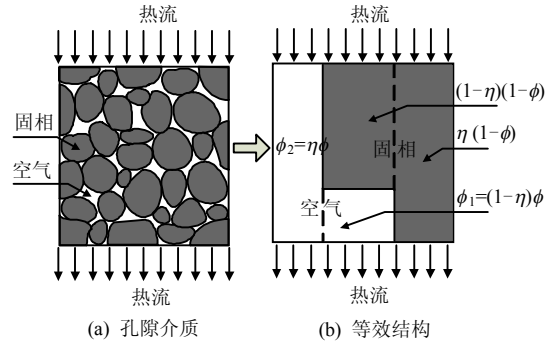


图1 两相土体等效结构的组成示意图

Fig.1 Sketch of effective structure of two-phase soil

干燥情况下, 联立式(3)、(5)即可确定 η , 等效孔隙结构各组成部分的贡献也就确定。对于非饱和土体, 当水分逐渐将孔隙中的气体驱替, 热传导系数将逐渐增大。水分进入孔隙后对土体热传导特性的影响主要体现在式(3)右端第2、3项中。在大气压和室温条件下, 一般土体固相的热传导系数约为 $2.0 \sim 4.0 \text{ W/(m} \cdot \text{K)}$, 水的热传导系数约为 $0.6 \text{ W/(m} \cdot \text{K)}$, 空气的热传导系数约为 $0.026 \text{ W/(m} \cdot \text{K)}$, 因而水和空气的热传导系数相对于固相而言较小。如图1所示, 水分侵入孔隙 ϕ_1 更易形成热传导的优势通道, 增强固相之间的联系, 因而接触热阻显著减小, 土体的有效热传导特性明显提高。从对热阻的影响分析, 与固相并联的孔隙 ϕ_2 中流体的热传导特性及分布特征对有效热传导特性的影响较孔隙 ϕ_1 小。从颗粒亲水特性方面分析, 当固体颗粒表现出较强的亲水性时, 水分将优先侵入与固相联系更为紧密的孔隙 ϕ_1 , 反之, 当固体颗粒相对憎水时, 水分更容易侵入孔隙 ϕ_2 。针对孔隙中水分与气体的排列分布情况, 本文讨论土体结构的如下4种串、并联形式。

(1) 孔隙中的水与空气并联排列, 且孔隙 ϕ_2 更易被水分侵入, 水分先驱替孔隙 ϕ_2 中的气体。若饱和度 $S_r < \eta$, 则孔隙 ϕ_2 部分饱和, 孔隙 ϕ_1 仍被气体充满, 如图2所示, 则相应的有效热传导系数 $\lambda_e^{s,p}$ 为

$$\lambda_e^{s,p} = \eta(1-\phi)\lambda_s + [\phi(1-S_r) - (1-\eta)\phi]\lambda_g + [\eta\phi - \phi(1-S_r) + (1-\eta)\phi]\lambda_w + (1-\eta)\frac{1}{\frac{1}{\lambda_s} + \frac{\phi}{\lambda_g}} = \eta(1-\phi)\lambda_s + \phi(\eta - S_r)\lambda_g + \phi S_r \lambda_w + (1-\eta)\lambda_{g-s}^s \quad (6)$$

若饱和度 $S_r \geq \eta$ ，则孔隙 ϕ_2 被水饱和后，水分侵入孔隙 ϕ_1 ，孔隙 ϕ_1 部分饱和，如图 2 所示。根据串、并联原理，相应的有效热传导系数 $\lambda_e^{g,p}$ 为

$$\lambda_e^{g,p} = \eta(1-\phi)\lambda_s + \eta\phi\lambda_w + \frac{1}{(1-\eta)\left[\frac{1-\phi}{\lambda_s} + \frac{\phi}{\frac{\phi(1-S_r)}{(1-\eta)\phi}\lambda_g + (1-\frac{\phi(1-S_r)}{(1-\eta)\phi})\lambda_w}\right]} = \eta(1-\phi)\lambda_s + \eta\phi\lambda_w + \frac{1-\eta}{\frac{1-\phi}{\lambda_s} + \frac{\phi(1-\eta)}{(1-S_r)\lambda_g + (S_r-\eta)\lambda_w}} \quad (7)$$

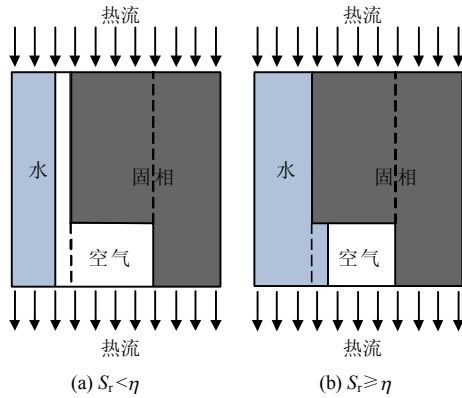


图 2 水分相对容易侵入孔隙 ϕ_2 时土体的等效结构示意图
Fig.2 Sketch of effective structure of three-phase soil where pore ϕ_2 is more hydrophilic

(2) 孔隙中的水与空气并联排列，且水分更容易侵入孔隙 ϕ_1 。若饱和度 $S_r < 1-\eta$ ，则孔隙 ϕ_1 部分饱和，孔隙 ϕ_2 被空气占据，如图 3 所示，则相应的有效热传导系数为 $\lambda_e^{w,p}$ 为

$$\lambda_e^{w,p} = \eta(1-\phi)\lambda_s + \eta\phi\lambda_g + \frac{(1-\eta)}{\frac{1-\phi}{\lambda_s} + \frac{\phi(1-\eta)}{S_r\lambda_w + (1-\eta-S_r)\lambda_g}} \quad (8)$$

若 $S_r \geq 1-\eta$ ，则孔隙 ϕ_1 饱和，水分开始驱替孔隙 ϕ_2 中空气，孔隙 ϕ_2 部分饱和，如图 3 所示，则有效热传导系数 $\lambda_e^{w,p}$ 为

$$\lambda_e^{w,p} = \eta(1-\phi)\lambda_s + \phi(S_r + \eta - 1)\lambda_w + \phi(1-S_r)\lambda_g + (1-\eta)\lambda_{w-s} \quad (9)$$

式中： $\lambda_{w-s} = \frac{\lambda_s\lambda_w}{\phi\lambda_s + (1-\phi)\lambda_w}$ ，表示饱和状态下，水和固体颗粒串联的有效热传导系数。

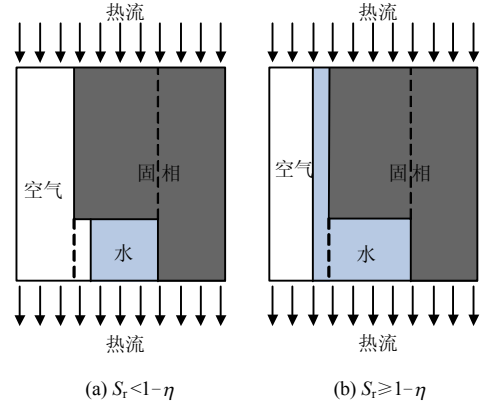


图 3 水分相对容易侵入孔隙 ϕ_1 时土体的等效结构示意图
Fig.3 Sketch of effective structure of three-phase soil where pore ϕ_1 is more hydrophilic

(3) 孔隙中的水与空气串联排列，且水分更容易侵入孔隙 ϕ_2 。若饱和度满足 $S_r < \eta$ ，则孔隙 ϕ_2 部分饱和，孔隙 ϕ_1 仍被气体占据，此时有效热传导系数 $\lambda_e^{g,s}$ 为

$$\lambda_e^{g,s} = \eta(1-\phi)\lambda_s + \frac{\eta^2\phi\lambda_g\lambda_w}{(\eta-S_r)\lambda_w + S_r\lambda_g} + (1-\eta)\lambda_{g-s} \quad (10)$$

若饱和度 $S_r \geq \eta$ ，则孔隙 ϕ_2 饱和，孔隙 ϕ_1 部分饱和，此时相应的有效热传导系数 $\lambda_e^{g,s}$ 为

$$\lambda_e^{g,s} = \eta(1-\phi)\lambda_s + \eta\phi\lambda_w + \frac{(1-\eta)}{\frac{(1-\phi)}{\lambda_s} + \frac{\phi(1-S_r)}{(1-\eta)\lambda_g} + \frac{\phi(S_r-\eta)}{(1-\eta)\lambda_w}} \quad (11)$$

(4) 孔隙中的水与空气串联排列，且水分更容易侵入孔隙 ϕ_1 。若饱和度 $S_r < 1-\eta$ ，则孔隙 ϕ_1 部分饱和，孔隙 ϕ_2 被空气占据，此时相应的有效热传导系数 $\lambda_e^{w,s}$ 为

$$\lambda_e^{w,s} = \eta(1-\phi)\lambda_s + \eta\phi\lambda_g + \frac{(1-\eta)}{\frac{(1-\phi)}{\lambda_s} + \frac{\phi S_r}{(1-\eta)\lambda_w} + \frac{\phi(1-\eta-S_r)}{(1-\eta)\lambda_g}} \quad (12)$$

若 $S_r \geq 1-\eta$ ，则孔隙 ϕ_1 饱和，孔隙 ϕ_2 部分饱和，此时的有效热传导系数 $\lambda_e^{w,s}$ 为

$$\lambda_e^{w,s} = \eta(1-\phi)\lambda_s + \frac{\eta^2\phi\lambda_w\lambda_g}{(S_r + \eta - 1)\lambda_g + S_r\lambda_w} + (1-\eta)\lambda_{w-s} \quad (13)$$

上述 4 种形式基于孔隙中空气和水不同的排列及分布情况导出，其中 $\lambda_e^{w,p}$ 、 $\lambda_e^{g,s}$ 总体上分别代表 4 种形式的上、下界， $\lambda_e^{w,s}$ 、 $\lambda_e^{g,p}$ 基本则处于 $\lambda_e^{w,p}$ 、 $\lambda_e^{g,s}$

之间。不同的土体有效热传导系数, 由于受孔隙大小及形状、矿物组成以及亲水特性等物理性质的影响, 并不能由某一种形式完全表示。为预测实际土体在不同孔隙率及饱和度条件下的有效热传导系数, 本文采用上述4种形式的线性组合, 即

$$\left. \begin{aligned} \lambda_e &= f_1 \lambda_e^{g,p} + f_2 \lambda_e^{w,p} + f_3 \lambda_e^{g,s} + f_4 \lambda_e^{w,s} \\ f_1 + f_2 + f_3 + f_4 &= 1 \quad (0 \leq f_i \leq 1, i=1,2,3,4) \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

式中: f_i ($i=1, 2, 3, 4$) 分别为4种有效热传导系数模型预测值的加权系数。根据试验数据求解加权系数, 是一个有约束条件的多元线性拟合, 可以转化为有约束的优化问题

$$\left. \begin{aligned} \min F &= \sum_{k=1}^n (\lambda_{\text{exp},k} - \lambda_{e,k})^2 \\ \text{s.t.} &\begin{cases} f_1 + f_2 + f_3 + f_4 = 1 \\ 0 \leq f_i \leq 1, i=1,2,3,4 \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

式中: F 为最优化函数; n 为试验数据点个数; $\lambda_{\text{exp},k}$ 、 $\lambda_{e,k}$ 分别为试验值及预测值。

求解以上最优化问题的实质就是选定参考数据集 DR , 在式 (15) 的约束条件下求解系数 f_i ($i=1, 2, 3, 4$), 使得在 DR 数据集上预测值与试验数据的误差最小。 DR 的选取要遵循以下原则: (1) 试验数据可靠性好; (2) 数据宜均布在孔隙率及饱和度的整个区间上。

3 模型参数的确定

模型参数中 λ_g 、 λ_w 、 λ_s 与温度及压力有关, 温度及压力一定时为常数; η 则决定于土体的结构, 可根据完全干燥或饱和状态的信息预先确定; 为优化参数, 通过试验数据的拟合得到。

(1) 气体和水的导热系数 λ_g 、 λ_w

多孔介质中气体可以认为是干燥空气与水蒸气的混合物, 因气体的热传导系数对三相土体的热传导系数影响有限, 可简单按干燥空气的热传导系数估算^[17]:

$$\lambda_g = \lambda_a = [4.55 + 0.072T + (36.17 - 0.0167) \frac{p_a}{286.9T} + (47.4 + 0.121T) (\frac{p_a}{286.9T})^2] \times 10^{-3} \quad (16)$$

式中: λ_a 为干燥空气的热传导系数 ($\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$); T 采用绝对温度 (K); p_a 为绝对压强 (kPa)。

本文采用 Kimball 等^[24]提出的经验公式确定水的热传导系数:

$$\lambda_w = 0.552 + 2.34 \times 10^{-3} T - 1.1 \times 10^{-5} T^2 \quad (17)$$

式中: T 采用摄氏温度 ($^{\circ}\text{C}$)。

(2) 固相的热传导系数 λ_s

固相的热传导系数由固相的矿物成分决定, 特别是石英的含量, 可用如下公式确定:

$$\lambda_s = \lambda_q^{\zeta} \lambda_o^{1-\zeta} \quad (18)$$

式中: λ_s 为固相的热传导系数; λ_q 、 λ_o 分别为石英及其他矿物的热传导系数; ζ 为石英的体积分数。室温下, λ_q 、 λ_o 可分别取 7.7 、 $2.0 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ ^[6, 16, 25], Tarnawski 等^[15]及 Usowicz 等^[26]给出了在不同温度下 λ_q 、 λ_o 的取值。

(3) 参数 η

η 决定于土体的基本孔隙结构, 在试验数据缺乏时, 需根据非饱和土的试验数据, 选择合适的预估模型代替试验数据确定 η 。干燥状态下的热传导系数 λ^{dry} 可视作 λ_g 、 λ_s 及 ϕ 的函数, 不妨设函数 $\lambda^{\text{dry}}(\lambda_s, \lambda_g, \phi)$ 为干燥土体的热传导系数的预估模型, 由式 (3), η 可表示为

$$\eta = \frac{\lambda^{\text{dry}}(\lambda_s, \lambda_g, \phi) - \lambda_{g-s}^s}{(1-\phi)\lambda_s + \phi\lambda_g - \lambda_{g-s}^s} \quad (19)$$

从式 (19) 可看出 η 主要依赖于 $\lambda^{\text{dry}}(\lambda_s, \lambda_g, \phi)$ 的形式, 本文采用几何平均模型预测干燥情况下土体的有效热传导系数。由于式 (19) 使用不太方便, 根据 η 的变化规律, 推荐采用如下简单的拟合形式:

$$\eta = e^{-a\phi+b} \quad (20)$$

式中: a 和 b 可由最小二乘法拟合确定。

以高庙子 GMZ01 膨润土为例, 在大气压和室温 (20°C) 条件下, 模型相关参数如下: $\lambda_q=7.7 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$, $\lambda_o=2.0 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$, $\lambda_s=2.342 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$, $\lambda_g=0.026 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$; 水的密度 $\rho_w=1.0 \text{ g}/\text{cm}^3$, 土体颗粒密度 $\rho_s=2.66 \text{ g}/\text{cm}^3$ 。分别采用 Johansen 公式及几何平均模型预测干燥土体的热传导系数, 由式 (19) 得到的 η 值如图 4 所示, 可见 Johansen 公式在低孔隙率时给出的 η 值较几何平均模型小。对膨润土的预测数据分析发现, 采用几何平均模型的预测结果误差更小。利用式 (20) 对几何平均模型进行拟合, 得到如下拟合参数: $a=3.382$, $b=-0.063$, 由图 4 可知, 式 (20) 的拟合效果较好。

4 模型验证

采用本文模型对美国 MX-80 膨润土及国内内蒙古高庙子膨润土 GMZ01 的热传导特性进行研究。MX-80 膨润土产自美国怀俄明州, 高庙子膨润土产自内蒙古兴和县, 二者矿物组成如表 1 所示。

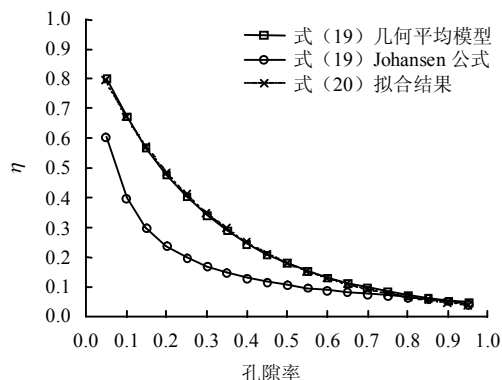


图 4 式 (19)、(20) 确定的 η 值对比
Fig.4 Comparisons of η values determined by Eq.(19) and Eq.(20)

表 1 几种膨润土的矿物组成

Table 1 Mineralogical compositions of some bentonites

土样	成分/%						
	石英	蒙脱石	长石	斜长石	高岭石	方石英	方解石
MX-80 ^[25]	3.0	92.0					
MX-80 ^[27]	15.0	76.0	5.0~8.0	8.2±2.7			
GMZ01 ^[5]	11.7	75.4	4.3		0.8	7.3	0.5

4.1 MX-80 膨润土热传导系数预测

Madsen^[27]和 Tang 等^[25]对 MX-80 膨润土的性质进行了探讨,如表 1 所示,二者所采用的 MX-80 膨润土土样的蒙脱石及石英含量不同。Tang 等^[25]经过研究发现,热传导系数与气体的体积分数有近似的线性关系。

由于试验数据量小,直接选用所有数据作为参考数据集。通过求解式 (15) 的最优化问题,根据 Madsen 的数据,有 $f_1=0.513\ 6$, $f_2=0.220\ 9$, $f_3=0.265\ 5$, $f_4=0$; 根据 Tang 的数据有 $f_1=0.307\ 3$, $f_2=0.401\ 1$, $f_3=0.291\ 7$, $f_4=0$,如表 2 所示,表明 MX-80 膨润土等效结构中的气体与水分更倾向于并联排列。最终的模型预测值与试验值的比较如图 5 所示,由图可见, Tang 的数据点基本上位于 $\pm 10\%$ 误差线内, Madsen 的数据点离散性较 Tang 大,但基本上位于 $\pm 20\%$ 误差线内,因此,模型对 MX-80 膨润土热传导特性的描述能力较好。图 6 为 Tang 关于 MX-80 膨润土热传导系数研究成果的实测值及预测值与气体体积分数的关系对比,由图可见,实测值及预测值与气体体积分数确实存在近似的线性关系,与 Tang 的试验结果吻合。

表 2 几种膨润土的模型参数

Table 2 Model parameters of the bentonites

土样	a	b	f_1	f_2	f_3	f_4
MX-80 ^[25]	3.277	0.067	0.307 3	0.401 0	0.291 7	0
MX-80 ^[27]	3.422	0.061	0.513 6	0.220 9	0.265 5	0
GMZ01 ^[5]	3.382	0.063	0.382 8	0.617 2	0.000 0	0

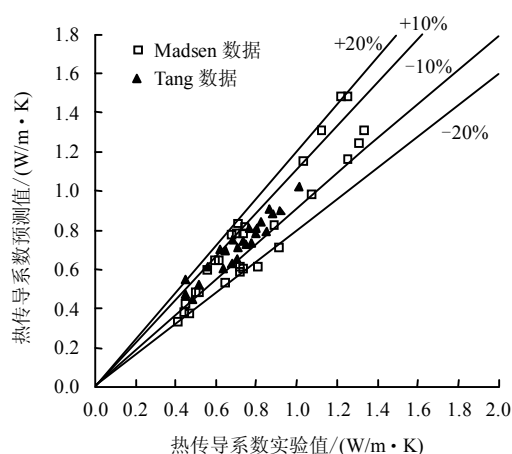


图 5 MX-80 膨润土热传导系数预测值与实测值对比
Fig.5 Prediction of thermal conductivity by Eq.(14) against the experimental data of MX-80 bentonite

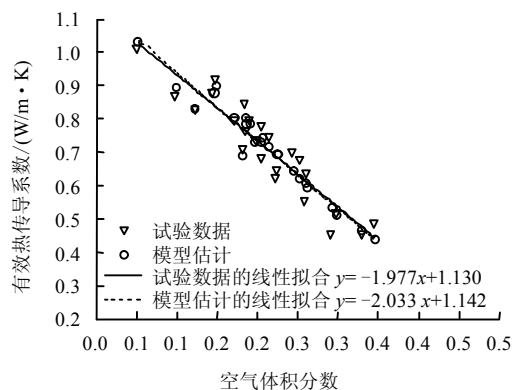


图 6 MX-80 膨润土有效热传导系数随气体体积分数的变化

Fig.6 Evolution of the thermal conductivity of MX-80 bentonite against the volume fraction of pore air

4.2 高庙子膨润土 GMZ01 热传导系数预测

刘月妙等^[5]对高庙子天然膨润土 GMZ01 的热传导特性进行了研究。试样取自高庙子膨润土矿床 III 矿层深部,天然样品自然风干、粉碎并去除部分不易粉碎的杂质矿物。主要矿物成分见表 1。试样颗粒密度为 2.66 g/cm^3 ,以小于 $2\ \mu\text{m}$ 粒径的黏土为主。刘月妙等^[5]采用瞬态热线法测定了纯膨润土 GMZ01 在不同干密度和不同含水率下的热传导特性。试验结果表明^[6],在相同饱和度条件下,热传导系数随压实干密度的增加而显著增大。在相同压实干密度条件下,热传导系数随饱和度增大而增大,当饱和度大于 20% 时,不同干密度样品的热传导系数与饱和度具有近似的线性关系;而当压实干密度较低时,饱和度对热传导系数的影响较小,随着干密度的增大饱和度对热传导系数的影响逐渐增大。

参考数据集来自文献[5]中图 5,通过式 (14) 预测文献[5]中所有热传导系数试验数据。通过求解

式(15)的最优化问题, 可得 $f_1=0.3828$, $f_2=0.6172$, $f_3=f_4=0$, 相应地所有数据实测值与模型预测值的对比如图7所示。结果表明, GMZ01 膨润土的等效结构与 MX-80 膨润土一致, 孔隙中的气体与水分的排列方式用并联模式更为合理, 但对于 GMZ01 膨润土, 水分更容易侵入孔隙 ϕ 。模型预测值在热传导系数的高值区和低值区存在一定误差, 主要原因在于线性组合模型对热传导系数与饱和度的非线性关系的描述不足。实际上对于膨润土, 在低饱和度时, 热传导系数随饱和度的变化十分显著, 在高饱和度则基本是线性变化的。

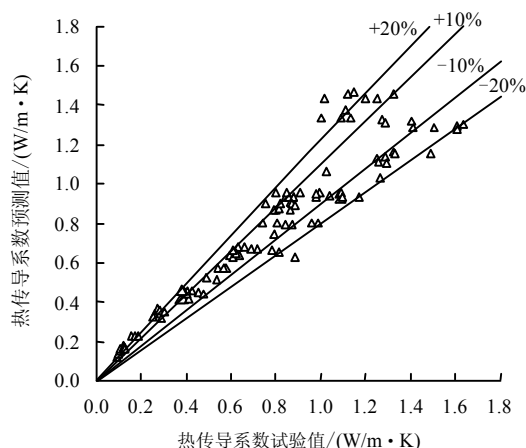


图7 GMZ01 膨润土热传导系数预测值与实测值对比
Fig.7 Prediction of thermal conductivity by Eq.(14) against the experimental data of GMZ01 bentonite

以高庙子膨润土为例, 讨论本文模型与 Wiener 界限及 Hashin-Shtrikman (H-S) 界限的关系。结果表明, λ_e 严格满足 Wiener 上、下界, 数据分析显示 $\phi \in [0, 0.98]$, $S_r \in [0, 1]$ 时落在 H-S 界限之内, 可见预测模型并不严格遵循各向同性的假定。

λ_e 与孔隙率及饱和度的关系如图8、9所示。从图8可见, 饱和度越大, 有效热传导系数越大, 而 λ_e 随孔隙率的变化则相对变缓。 λ_e 与孔隙率曲线在低孔隙率时出现不光滑折点, 主要是由于本文模型对水分侵入孔隙方式的相关假定造成了模型的不光滑性, 而且饱和度越大, 折点处对应的孔隙率越小。图9表明, 孔隙率越大, λ_e 随饱和度的变化越趋近于线性; 孔隙率越小, λ_e 的变化越集中于低饱和度区间; λ_e 与饱和度曲线的不光滑性在高孔隙率时不明显, 孔隙率为10%时, 折点出现在70%饱和度处。热传导系数与干密度和饱和度正相关, 且随孔隙率增大(压实干密度随之减小)而显著减低。由此可见, 本文模型的变化规律与高庙子试验结果的规律基本一致。

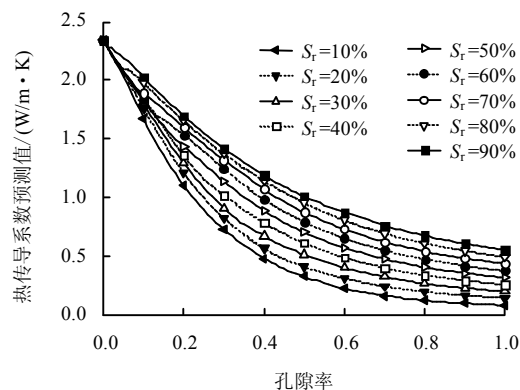


图8 不同饱和度下 λ_e 随孔隙率的变化规律
Fig.8 Evolution of λ_e against porosity with varying saturations

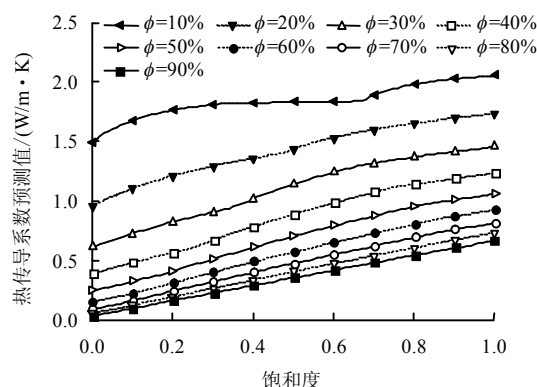


图9 不同孔隙率下 λ_e 随饱和度的变化规律
Fig.9 Evolution of λ_e against saturation with varying porosities

两种膨润土的预测结果表明, 由于膨润土基本属于亲水性黏土, 由细小的蒙脱石、伊利石和高岭石等黏土矿物组成, 孔隙尺寸较小, 孔隙中的空气不易阻断水分的热量传输, 因而孔隙中的气体与水分的排列方式采用并联描述更为合理。需要指出的是, 在膨润土的饱水过程中, 颗粒的外层蒙脱石会先遇水膨胀, 形成一种胶体结构^[28], 从而会大大降低颗粒间的热阻, 显著提高膨润土热传导特性。这种膨胀效应对热传导特性的影响在本文模型中尚未得到充分反映, 有待进一步的研究。

5 结 论

(1) 基于串、并联原理和土体的等效结构特征, 提出了非饱和膨润土有效热传导特性的4种串并联组合形式, 并基于这些形式的线性组合建立了有效热传导系数的预测模型。详细阐述了模型参数的确定方法, 并讨论了孔隙率、饱和度和孔隙结构、颗粒亲水性等因素对有效热传导特性的影响。

(2) 本文模型严格满足 Wiener 界限, 但模型并不严格遵循各向同性的假定, 分析结果表明, 当 $\phi \in [0, 0.98]$, $S_r \in [0, 1]$ 时模型预测值落在 H-S 界限之内。

(3) 基于 MX-80 膨润土及 GMZ01 膨润土热传导特性的试验研究成果, 对该模型进行了验证, 表明该模型对膨润土热传导特性具有较好的描述能力, 可为高放射性废物地质处置库的性能评价提供理论模型。研究结果还表明, 由于膨润土属于亲水性黏土, 孔隙尺寸小, 孔隙中的气体与水分的排列方式采用并联描述更为合理。

(4) 本文模型未能充分反映微观结构对热传导特性的影响, 也未考虑土体结构遇水膨胀的机制, 因此, 还需要进一步改进。

参考文献

- [1] 王驹, 陈伟明, 苏锐, 等. 高放废物地质处置及其若干关键科学问题[J]. 岩石力学与工程学报, 2006, 25(4): 801—812.
WANG Ju, CHEN Wei-ming, SU Rui, et al. Geological disposal of high-level radioactive waste and its key scientific issues[J]. **Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering**, 2006, 25(4): 801—812.
- [2] YE W M, CHEN Y G, CHEN B, et al. Advances on the knowledge of the buffer/backfill properties of heavily-compacted Gaomiaozi bentonite[J]. **Engineering Geology**, 2010, 116(1—2): 12—20.
- [3] 叶为民, 王琼, 潘虹, 等. 高压实高庙子膨润土的热传导性能[J]. 岩土工程学报, 2010, 32(6): 821—826.
YE Wei-min, WANG Qiong, PAN Hong, et al. Thermal conductivity of compacted Gaomiaozi01 bentonite[J]. **Chinese Journal of Geotechnical Engineering**, 2010, 32(6): 821—826.
- [4] 钱丽鑫. 高放废物深地质处置库缓冲材料——高庙子膨润土基本特性研究[博士学位论文 D]. 上海: 同济大学, 2007.
- [5] 刘月妙, 蔡美峰, 王驹. 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. 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.
- [6] JOHANSEN O. Thermal conductivity of soils[D]. Norway: University of Trondheim, 1975.
- [7] EWEN J, THOMAS H R. The thermal probe—a new method and its use on an unsaturated sand[J]. **Geotechnique**, 1987, 37(1): 91—105.
- [8] CÔTÉ J, KONRAD J M. A generalized thermal conductivity model for soils and construction materials[J]. **Canadian Geotechnical Journal**, 2005, 42(2): 443—458.
- [9] KAHR G, MULLER-VON MOOS M. Wärmeleitfähigkeit von Bentonit MX80 und von Montigel nach der Heizdrahtmethode[R]. Zurich: Swiss National Cooperative for the Disposal of Radioactive Waste, NAGRA Technischer Bericht, 1982.
- [10] KNUTSSON S. On the thermal conductivity and thermal diffusivity of highly compacted bentonite[R]. [S. l.]: Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Company, 1983: 83—72.
- [11] SAKASHITA H, KUMADA T. Heat transfer model for predicting thermal conductivity of highly compacted bentonite[J]. **Journal of the Atomic Energy Society of Japan**, 1998, 40(3): 235—240.
- [12] WIENER O. Lamellare doppelbrechung[J]. **Physikalische Zeitschrift**, 1904, 5: 332—338.
- [13] LIU L P. Hashin-Shtrikman bounds and their attainability for multi-phase composites[J]. **Proceedings of the Royal Society A—Mathematical Physical and Engineering Sciences**, 2010, 466(2124): 3693—3713.
- [14] WOODSIDE W, MESSMER J H. Thermal Conductivity of Porous Media. I. Unconsolidated Sands[J]. **Journal of Applied Physics**, 1961, 32(9): 1688—1699.
- [15] TARNAWSKI V R, LEONG W H. A series-parallel model for estimating the thermal conductivity of unsaturated soils[J]. **International Journal of Thermophysics**, 2012, 33(7): 1191—1218.
- [16] TONG FUGUO, JING LANRU, 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.
- [17] MAXWELL J C. An elementary treatise on electricity, third ed[M]. New York: Dover Publications Inc., 1954.
- [18] 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.