

DOI: 10.11779/CJGE202107022

双孔隙压实膨润土的细观导热模型

周殷康^{1, 2}, 阎长虹^{*2}, 郑军³, 谢胜华¹, 项国圣¹

(1. 安徽工业大学建筑工程学院, 安徽 马鞍山 243002; 2. 南京大学地球科学与工程学院, 江苏 南京 210023;
3. 南京地铁集团有限公司, 江苏 南京 210008)

摘要: 压实膨润土导热系数是评价核废料处置库散热安全以及计算温度场分布的关键指标, 准确预测不同条件下压实膨润土导热系数对于处置库的安全设计具有重要意义。数值模拟是预测土体导热系数的有效途径之一, 然而, 由于压实膨润土双孔隙结构的复杂性, 基于细观数值模拟的压实膨润土导热模型较少。建立了一种适用于双孔隙压实膨润土导热系数的细观模型, 选取了不同含水率和孔隙比下5种典型压实膨润土160个实测导热数据, 并与模型预测导热系数值进行比较。结果显示膨润土导热系数的模型预测值基本在实测值±20%范围内, 有效验证了模型的可靠性, 表明本文模型在压实膨润土导热系数预测方面的潜力。为复杂双孔隙压实膨润土导热系数的精确预测提供了一种新的思路和方法。

关键词: 压实膨润土; 双孔隙; 导热系数; 细观模型

中图分类号: TU45 文献标识码: A 文章编号: 1000-4548(2021)07-1352-08

作者简介: 周殷康(1988—), 男, 博士, 安徽太湖人, 主要从事岩土体传热相关的试验和模拟工作。E-mail: Zhouyk@ahut.edu.cn。

Mesoscale model for thermal conductivity of compacted dual-porosity bentonite

ZHOU Yin-kang^{1, 2}, YAN Chang-hong², ZHENG Jun³, XIE Sheng-hua¹, XIANG Guo-sheng¹

(1. Anhui University of Technology, Maanshan 243002, China; 2. School of Earth Sciences and Engineering, Nanjing University, Nanjing 210023, China; 3. Nanjing Metro Group Co., Ltd., Nanjing 210008, China)

Abstract: The thermal conductivity of compacted bentonite is very crucial in evaluating the safety of heat dissipation and in calculating the temperature distribution of radioactive waste repository. An accurate predictive model is of great significance to the calculation of their thermal conductivity under various conditions. A mesoscale model is proposed for the thermal conductivity of compacted dual-porosity bentonite by numerical simulation. The thermal conductivity of 160 measured samples is selected and compared with their simulated one for five typical kinds of compacted bentonite with different dry densities and water contents. The results show that the most predictive values are within ±20% range of the measured ones, which verifies the reliability of the model effectively. The results in this study provide a new approach and/or strategy to predict the thermal conductivity of the compacted dual-porosity bentonite.

Key words: compacted bentonite; dual-porosity; thermal conductivity; mesoscale model

0 引言

压实膨润土是核废料地质处置库最理想的缓冲回填材料^[1-2]。处置库散热效率很大程度上取决于压实膨润土的导热系数; 同时, 压实膨润土导热系数也是计算处置库温度场分布的基础参数之一。因此在处置库工程背景下, 压实膨润土导热系数一直受到国内外学者的广泛关注^[3-4]。

预测模型是膨润土导热研究中的重要内容之一, Kahr等^[5]最早归纳了膨润土导热系数与其密度、含水率的关系, 并提出了对应的经验导热模型。随后, 受

Johansen归一化导热模型启发, Kuntsson^[6]提出了基于 K_e 数的膨润土导热系数预测模型。Sakashita等^[7]最早将压实膨润土中团聚体内孔隙和团聚体间孔隙近似为不同大小的长方体, 通过理论计算得到了压实膨润土导热预测模型。该模型的突出特点是能够考虑压实膨润土双孔隙结构特征^[8-9]: 孔径分布曲线呈双峰形态, 其中较小孔径峰对应团聚体内孔隙, 而较大孔径峰对应

基金项目: 江苏省重点研发计划项目 (BE2019705)

收稿日期: 2020-07-17

*通信作者 (E-mail: yanchh@nju.edu.cn)

团聚体间孔隙(图1), 一般以 $0.15\text{ }\mu\text{m}$ 作为压实膨润土中团聚体间孔隙和团聚体内孔隙的孔径分界点^[10]。Tang 等^[11]测试了 Mx-80 压实膨润土导热性能, 发现其与孔隙气体积呈明显的线性负相关关系, 并据此提出了压实膨润土导热系数的线性拟合模型。Chen 等^[12]基于“夹杂理论”建立了考虑压实膨润土双孔隙结构的细观导热模型, 并特别指出双孔隙结构的差异会引起压实膨润土导热系数的变化, 双孔隙结构对压实膨润土导热性能的影响不可忽视。

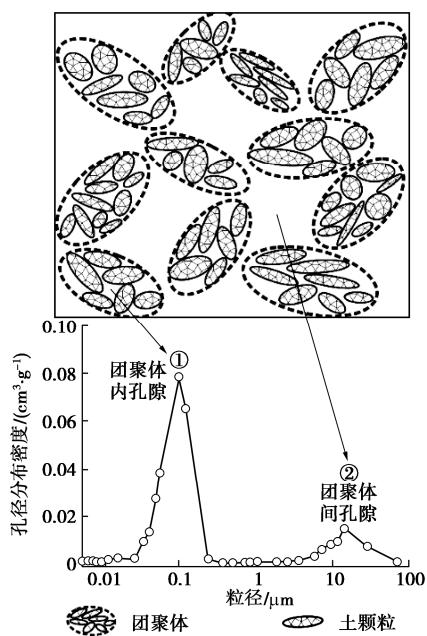


图 1 压实膨润土双孔隙结构示意图

Fig. 1 Schematic view of compacted dual-porosity bentonite

尽管前人已经提出了多类压实膨润土的导热预测模型, 但总体而言, 多是基于实测导热数据的简单拟合, 或者基于结构简化和复杂推导的理论导热模型。实际上, 数值模拟在预测土体导热系数方面具有很大优势, 近年来有学者陆续提出了基于细观模拟的土体导热模型^[13-14], 大幅拓展了土体导热系数的预测途径。然而, 压实膨润土具有复杂的双孔隙结构特征, 难以对其细观结构开展精确建模和导热模拟, 加大了建立压实膨润土细观导热模型的难度。对于双孔隙结构细观建模的难点, Jiang 等^[15-16]基于嵌套策略构造了岩土体的双孔隙结构。受此启发, 本文尝试通过嵌套策略开展压实膨润土双孔隙结构的细观精细化建模, 并结合稳态导热模拟计算整体导热系数, 据此建立双孔隙压实膨润土的细观导热模型。最后, 将模型预测值与已有压实膨润土的导热实测值进行比较, 以检验模型的可靠性。

1 双孔隙压实膨润土的细观建模

细观建模是构建压实膨润土细观导热模型的前提, 建模精度很大程度上决定着模型的预测效果。对于压实膨润土, 除双孔隙系统外, 还需考虑水分的空间分布问题。膨润土以蒙脱石矿物为主, 蒙脱石水化能力极强, 特别是蒙脱石晶层间孔隙可吸附大量水分。虽然压实膨润土双孔隙内水分的空间分布未知, 但近来有研究表明压实膨润土团聚体内蒙脱石会继续水化^[17-18], 受此驱动团聚体间孔隙水将继续向团聚体内孔隙迁移, 使得团聚体内孔隙最后总是趋向于优先饱和, 呈明显的有偏水分布特征。针对压实膨润土双孔隙结构和有偏水分布特征^[19], 通过分步嵌套策略逐一开展精细化建模表征, 具体分为如下 3 部分。

1.1 团聚体间大孔隙建模

基于传统的四参数随机生长 (QSGS) 法^[20], 团聚体间孔隙建模流程如下: ①以气相 (孔隙) 为生长相, 团聚体为背景相。根据 C_{dM} (压实土中团聚体间孔隙的生长核概率分布值) 在建模背景区域 (网格空间) 内随机分布团聚体间孔隙生长核。具体过程如下, 给任意背景网格一个 $[0, 1]$ 之间的随机数, 当该随机数值不大于 C_{dM} 时, 则该团聚体网格变为气相 (大孔隙) 网格。②每个气相生长核逐步向四周背景区域扩张, 二维条件下共有 8 个扩张方向 (图 2)。首先在 8 个方向上相邻网格内随机赋予一个 $[0, 1]$ 之间的随机数, 只要该网格内随机数大小不超过该方向上的方向生长概率 D_i , 则该方向上相邻网格自动由背景相转为生长相。③重复步骤②直至气相 (孔隙) 的体积比例达到团聚体间孔隙的给定值 (这里用团聚体间孔隙比 e_M 表示) 为止, 自此建立了团聚体间大孔隙, 定为 Ω_M ; 背景区域代表团聚体基质, 定为 Ω_A 。

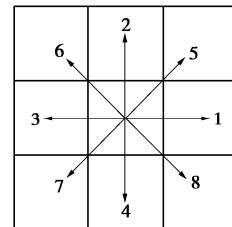


图 2 单元八方向生长示意图

Fig. 2 Schematic view of eight growing directions for each cell

1.2 团聚体内小孔隙建模

在团聚体基质区域 (即 Ω_A), 基于嵌套策略通过 QSGS 法再次构建团聚体内小孔隙系统, 过程如下: ①以固相 (土颗粒) 为生长相, 根据土颗粒的概率分布密度值 C_{ds} 在 Ω_A 中随机分布土颗粒生长核。类似地,

给各背景网格赋予一个[0, 1]间的随机数, 当该数不大于土颗粒生长核概率密度 C_{ds} 时, 则该背景网格转为土颗粒生长核。②每个土颗粒生长核沿周围 8 个方向扩张生长。给每个方向上相邻背景网格一个[0, 1]之间的随机数, 当其值不大于该方向上的生长概率时, 该网格自动变为主颗粒相网格。需要指出的是, 当生长核处在 Ω_A 区域边界上时, 扩张生长方向上相邻网格为团聚体间孔隙, 则该方向上扩张生长无效。③重复步骤②直至土颗粒体积满足要求为止。 Ω_A 区域内固相区域即为压实膨润土颗粒骨架, 定义为 Ω_s ; 其他部分则构成团聚体内小孔隙系统, 定义为 Ω_m , 对应孔隙比为 e_m (即团聚体内孔隙比), 其与 e_M (团聚体间孔隙比) 之和为总孔隙比 e 。图 3 为不同孔隙比 e 下构建的压实膨润土双孔隙精细结构模型。

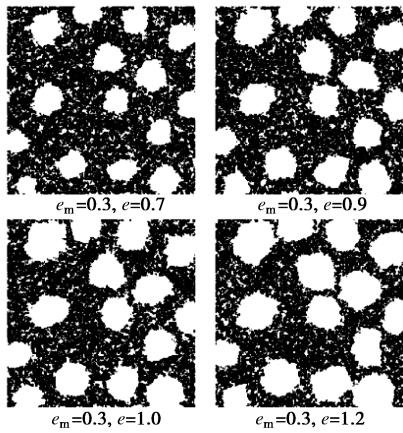


图 3 不同孔隙比下压实膨润土双孔隙建模 (黑色: 固相颗粒; 白色: 孔隙气)

Fig. 3 Modeling of dual-porosity for compacted bentonite with different void ratios (black: solid particle; white: pore air)

1.3 有偏水分布建模

在双孔隙空间内, 基于区域选择性生长策略逐步开展有偏水分布的填充建模。步骤如下: ①基于有偏水分布假设, 首先指定 Ω_m 为孔隙水的优先生长域。分别设置如下两个方向生长概率 I_i^{sw} 和 I_i^{ww} , 其中 I_i^{sw} 为考虑固-液相互作用的孔隙水方向生长概率, 而 I_i^{ww} 为考虑液-液相互作用的孔隙水方向生长概率, 考虑膨润土固相颗粒 (如蒙脱石等) 的强烈水合作用, 在此令 $I_i^{sw}=10I_i^{ww}$ ^[21]。对于 Ω_m 中的每个网格, 给一个[0, 1]之间的任意随机数, 如果其 i 方向上相邻网格为固相网格, 当该随机数不大于 I_i^{sw} 时, 该背景网格变为水相网格 (团聚体内水)。同样地, 如果其 i 方向上相邻网格为水相网格, 当该随机数不大于 I_i^{ww} 时, 背景网格变为团聚体内水相网格。②在含水率较小时, 水分不足以将团聚体内孔隙全部饱和, 重复步骤①直至团

聚体内水分含量与总含水率相等。此时所有孔隙水分布在 Ω_m 区域 (团聚体内孔隙) 中, 呈典型有偏水分布特征。③当含水率较高时, 除了率先将 Ω_m (团聚体内孔隙) 区域充满外, 其余水分移置到 Ω_M 区域 (团聚体间孔隙) 内生长。在 Ω_M 区域, 同样根据 I_i^{sw} 和 I_i^{ww} , 对 Ω_M 中每个网格赋予一个[0, 1]之间随机数, 如果在该网格 i 方向上相邻网格为固相, 或者是团聚体内孔隙水时, 且随机数不大于 I_i^{sw} , 该网格变为孔隙水 (团聚体间水)。如果 i 方向上相邻网格为团聚体间水网格, 则当随机数不大于 I_i^{ww} , 则该网格也变为团聚体间水网格。④重复步骤③直至团聚体内水和团聚体间水的总量与总含水率相等为止。至此通过预先指定孔隙水生长区域, 即可构建压实膨润土有偏水分布模型 (图 4)。

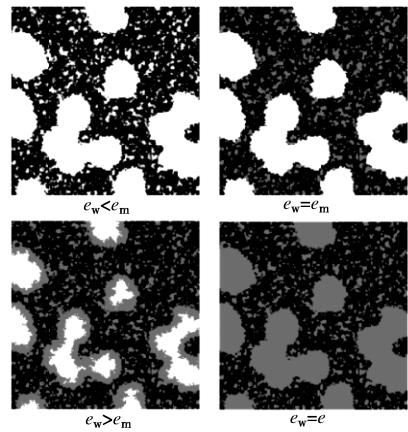


图 4 双孔隙中有偏水分布建模 (黑色: 固相颗粒; 灰色: 孔隙水; 白色: 孔隙气)

Fig. 4 Modeling of preferential water distribution within dual-porosity (black: solid particle; grey: pore water; white: pore air)

2 稳态导热模拟

在精细建模基础上, 为了进一步预测压实膨润土导热系数, 必须开展相应的热传导模拟。对于二维热传导问题的模拟, 相应边界条件如图 5 所示: 左右为高低温边界, 上下为绝热边界。本文采用稳态热传导模拟, 稳态条件下格子 i 和格子 j 之间的热流密度为

$$q_{ij} = \lambda_{ij} \frac{T_i - T_j}{L_{ij}} \quad , \quad (1)$$

式中, q_{ij} 为格子 i 和 j 之间的热流密度, L_{ij} 为相邻两格子 i 和 j 之间的距离。 T_i 和 T_j 为格子 i , j 的中心温度, λ_{ij} 是相邻两格子之间的等效导热系数, 通常采用调和平均模型^[14]进行计算。

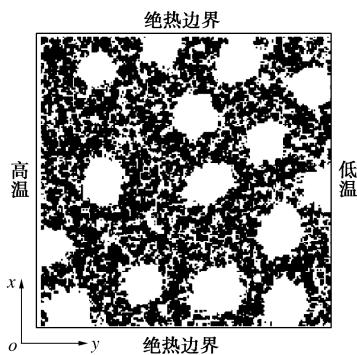


图 5 稳态导热模拟的边界条件

Fig. 5 Boundary conditions of steady heat conduction

当土体导热达到稳态时, 温度维持不变, 则流入和流出每个网格的热流密度之和为零:

$$\sum q_{ij} = 0 \quad (2)$$

根据式(2), 即可得到区域内各网格温度的离散方程组, 采用高斯-塞德尔迭代法求出稳态温度场, 并据此计算整体导热系数:

$$\lambda = \frac{L \cdot \int_1^n q_{ij} dx}{L} \quad (3)$$

式中 q_{ij} 为左右边界壁面上每个网格热流密度; n 为竖直向网格数量; T_h 为左侧高温边界温度; T_c 为右侧低温边界温度; L 为左右壁面之间距离。

文中采用方形网格, 水平和竖直向上网格数量相等。在稳态导热模拟前, 为节省计算代价并保持模拟稳定性, 有必要对单向网格数量进行优化(图6)。

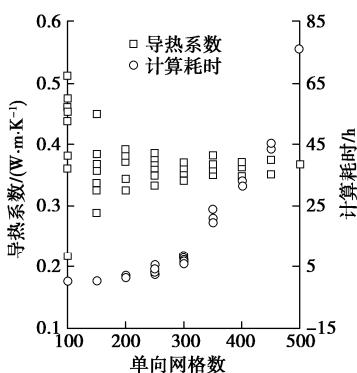


图 6 单向网格数优化分析

Fig. 6 Optimization analysis of grid number

由图6可知, 导热系数计算值的波动幅度随单向网格数增加而迅速减小, 而计算耗时快速上升。当单向网格数超过200后, 导热系数波动较小, 而模拟耗时即达2 h以上, 计算代价较高。因此综合考虑本文选取单向最佳网格数为200。可见, 在双孔隙结构和有偏水分布精细化建模的基础上, 通过稳态导热模拟即可计算压实膨润土导热系数。至此基于数值模拟初步构建了双孔隙压实膨润土的细观导热模型。

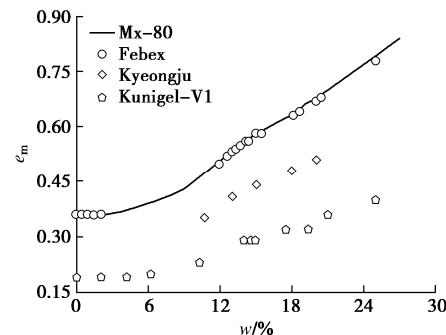
3 模型验证

与大多数导热预测模型一样, 有必要验证导热模型的可靠性及精度, 通常需要与压实膨润土实测导热数据进行比较分析。回顾既有压实膨润土导热研究^[11, 22-24], 本文选取Mx-80、Febex、Kyeongju、Kunnigel-V1和GMZ-07五种典型膨润土的实测导热数据与模拟数据进行比较。模拟中参数取值如下: 水和空气的导热系数一般是不变的, 因此孔隙水导热系数 λ_w 取值为0.5974 W/m·K, 而孔隙气导热系数 λ_g 为0.0243 W/m·K。固相骨架的导热系数与土体矿物组成有关, 通常石英含量 ζ 越多, 固相颗粒导热系数越大, 可采用固相颗粒的导热系数 λ_s 的表达式为

$$\lambda_s = 7.7^\zeta \cdot 2.0^{1-\zeta} \quad (4)$$

Mx-80、Febex、Kyeongju、Kunnigel-V1和GMZ-07膨润土中石英含量分别为3%, 2%, 1%, 0.6%, 10%^[11, 17, 25]。固相颗粒导热系数分别为2.0825, 2.0547, 2.0271, 2.0162和2.2886 W/m·K。

导热系数计算结果不仅与模拟中固、液、气三相的导热系数相关, 土体结构和水分分布建模的精度更直接关系到导热系数的模拟结果。膨润土属膨胀性黏土, 不同含水率下的 e_m 取值不同, 建模过程中需特别注意。文献[17]给出了部分压实GMZ-07膨润土在不同含水率下的 e_m , 对于Mx-80膨润土, Tang等^[26]通过压汞试验获得了基质吸力与 e_m 之间的关系和土水特征曲线。通过基质吸力换算即可得到不同含水率下Mx-80压实膨润土的 e_m 值。Febex、Kyeongju以及Kunnigel-V1膨润土的 e_m 取值未知。根据3种膨润土中蒙脱石含量的相对大小, 本文采用一种基于比较策略的 e_m 预估方法。即以92%蒙脱石含量的Mx-80膨润土 e_m 作为基准值, Febex、Kyeongju和Kunnigel-V1膨润土各自蒙脱石含量分别为92%, 70%和47%。则相同含水率下3种膨润土 e_m 可根据其蒙脱石含量差异等比例换算求得(图7)。

图 7 基于Mx-80膨润土的其他三类膨润土 e_m 估计Fig. 7 Estimation of e_m for other three compacted bentonites based on Mx-80 bentonite

共统计了 5 种膨润土不同含水率和孔隙比下实测导热数据 160 个, 根据其结构和矿物组分分别建模、模拟并计算相应的导热系数。最后将模型预测结果与实测导热值进行比较, 结果如图 8 所示。可见, 大部分模型预测值都在实测值±20% 范围内, 表明本文模型对压实膨润土导热性能具有较好的预测效果。

进一步地, 为了更清楚地展示本文模型对压实膨润土导热系数的预测精度, 定义模型相对误差 D 如下:

$$D = \frac{|\lambda_{\text{mod}} - \lambda_{\text{exp}}|}{\lambda_{\text{exp}}} \quad , \quad (5)$$

式中, λ_{mod} 为模型预测值, λ_{exp} 为实测导热值。

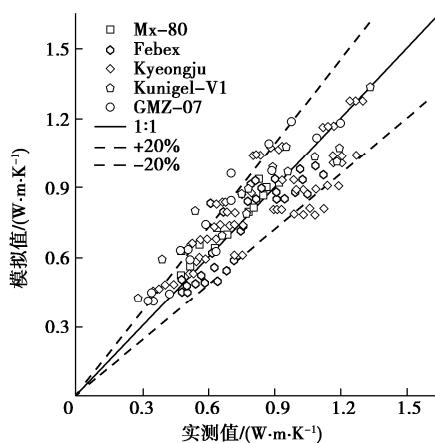


图 8 5 种膨润土导热系数模拟值与实测值对比图

Fig. 8 Comparison between experimental and modeled thermal conductivities of five compacted bentonites

表 1 为本文模型对 5 种典型压实膨润土 160 个实测导热值与预测结果间相对误差的置信度分析。

表 1 不同相对误差下压实膨润土导热系数预测的置信度

Table 1 Confidence degrees of predictive thermal conductivity of compacted bentonite under different relative errors

膨润土	Mx-80	Febex	Kyeongju	Kunigel-V1	GMZ-07
样本个数	22	37	71	14	16
$D \leq 5\%$	41%	24%	21%	29%	25%
$D \leq 15\%$	91%	81%	53%	71%	81%
$D \leq 25\%$	95%	97%	86%	79%	88%

由表 1 可知, 当相对误差 $D \leq 15\%$ 时, 模型对于 Mx-80 和 Febex 和 GMZ-07 膨润土, 有 81% 以上模型预测值满足此要求; 而对于 Kyeongju 和 Kunigel-V1 膨润土, 满足此要求的模型预测值不足总数 71%。当 $D \leq 25\%$ 时, 同样地, 模型对 Mx-80 和 Febex 和 GMZ-07 膨润土的预测结果也要优于 Kyeongju 和 Kunigel-V1 膨润土。可见, 本文所建模型对 Mx-80、Febex 和 GMZ-07 压实膨润土导热系数的预测精度较 Kyeongju 和 Kunigel-V1 膨润土更高。

对于本文模型在 5 种典型膨润土导热系数预测精度上的差异, 这与建模过程中所采用的 e_m 取值方式及其估计误差密切相关。不同含水率下 Mx-80 和 GMZ-07 膨润土 e_m 数据是通过压汞试验直接计算得到的, 故对 Mx-80 和 GMZ-07 压实膨润土结构建模最接近实际。而对于不同含水率下其他 3 种压实膨润土 e_m , 都是通过 Mx-80 膨润土间接求取的: 以 e_m 为基准值, 并默认 e_m 与蒙脱石含量成正比, 然后通过比较其他膨润土与 Mx-80 膨润土之间的蒙脱石相对含量估计其 e_m 大小。显然, 在 Febex、Kyeongju 和 Kunigel-V1 3 种膨润土中, Febex 膨润土的矿物组成与 Mx-80 最接近, 因此 Febex 膨润土的建模效果是最好的, 相应的模型预测精度也较好。而 Kyeongju 和 Kunigel-V1 膨润土, 其矿物组成与 Mx-80 膨润土差异更大, 采用线性估计得到的 e_m 值可能与实际偏离较大, 因而模型预测精度有所降低。

4 讨 论

预测模型是压实膨润土导热研究的重要议题之一。过去主要以经验模型为主^[5, 8], 难以考虑压实膨润土中双孔隙这一重要结构特征。实际上, 基于土体结构的细观导热模型构建难度较大, 该类导热模型数量明显少于经验模型。这方面当前最好的是 Chen 等^[19]基于“夹杂理论”构建的理论计算模型: 通过将不同孔径孔隙等效为不同大小的椭球夹杂, 以此反映双孔隙结构对土体导热的影响。作为联系微观结构和宏观性能的有效桥梁, 基于细观建模的导热模拟也可计算土体导热系数。然而由于双孔隙结构的复杂性, 压实膨润土细观结构的精细化建模较为困难, 因而难以通过导热模拟构建双孔隙压实膨润土的细观导热模型。在本文中, 通过对压实膨润土双孔隙结构和有偏水分布的精细化建模, 进一步结合细观导热模拟, 顺利构建了双孔隙压实膨润土导热系数的数值预测模型。在此基础上, 通过与 5 种典型压实膨润土 160 个实测导热系数的比较, 检验了模型的可靠性, 为预测压实膨润土导热系数提供了新的途径与方法。

预测精度是土体导热模型研究的核心问题, 而模型参数的选取是决定其精度的关键。对于经验模型, 模型参数直接由实测导热数据拟合得到: 通常拟合数据越多, 参数取值越合理, 预测精度也越高。但这些经验参数本身缺乏物理意义, 难以与土体的本质特征相联系; 同时, 参数拟合前需要预先开展土体导热测试, 耗时也较大。Chen 等^[19]基于“夹杂理论”将团聚体内孔隙和团聚体间孔隙分别等效为不同大小、形状

的随机椭球体, 同时通过预先指定夹杂椭球的导热系数反映孔隙所含流体类型: 若孔隙内为水, 则椭球导热系数与水相同; 若为空气, 则椭球导热系数与空气相等。然后通过细观均匀化方法计算双孔隙压实膨润土导热系数。该理论模型物理概念清晰、预测精度较高, 且能更清楚地揭示双孔隙结构的作用机理, 相对于传统模型具有显著优势。

Chen 等^[19]提出的模型中, 代表孔隙的椭球体导热系数只有两个参考值, 分别为水和空气的导热系数, 分别反映孔隙干燥与饱和两种极端状态(图 9 (a))。遗憾的是, 难以满足单一孔隙非饱和状态的表征问题。而本文中, 压实膨润土孔隙内可以呈现非饱和状态(图 4, 9 (b)), 更接近压实膨润土孔隙内实际的水分分布。可见, 本文模型不仅可反映压实膨润土双孔隙结构特征, 继承了 Chen 等^[19]模型的优势; 同时在孔隙水分布方面又有所改进, 有助于提高模型的物理精度。

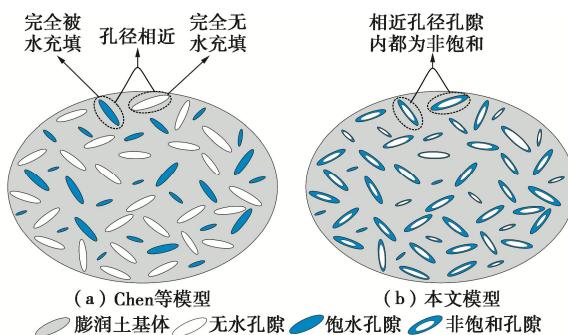


图 9 Chen 等模型与本文模型水分布比较

Fig. 9 Comparison of water distribution between Chen et al. model and proposed model

此外, 当前国际上核废料处置库中所用的膨润土规格都是一定的: 其矿物组成已知, 在模拟中可根据式(4)方便地计算固相颗粒导热系数; 同时, 关于膨润土双孔隙结构方面的研究成果日益增多, 有利于开展压实膨润土的细观精细化建模。可见, 由于在矿物和结构组成上的便利, 本模型在预测压实膨润土导热系数方面具有很大的优势, 通过模型计算可方便地求得不同状态下多类压实膨润土导热系数值。需要指出的是, 除了压实膨润土外, 对于其他复杂双孔隙结构土体(如红黏土^[27]), 本模型同样能反映双孔隙结构的影响, 但有偏水分布的适用性值得商榷。实际上, 在最优含水率干侧压实的黏性土都具有双孔隙特征, 但并非所有黏性土压实后水分都偏向于优先饱和团聚体内孔隙。例如, 在某些低塑性粉质黏土中, 压实后团聚体内孔隙和团聚体间孔隙很可能都处于非饱和状态。而对于膨润土, 在蒙脱石矿物强烈水化潜能驱动

下, 压实后团聚体间孔隙水还会继续向团聚体内孔隙迁移, 使得团聚体内孔隙优先饱和。可见, 相对于普通压实黏性土, 压实膨润土内水分分布更加接近本文提出的有偏水分布模式。实际上, 除了偏向于团聚体内孔隙这种极端有偏水分布外, 还有另一种偏向于团聚体间孔隙的极端有偏水分布。而对于常规压实黏性土, 双孔隙内水分布应在两种极端水分布之间, 相应地, 其导热系数也应在两种极端水分布模式下的模型预测值之间。可见, 本文针对压实膨润土的细观导热模型也可为常规压实黏性土导热系数的预测提供一定参考。总体而言, 本文模型可为复杂双孔隙土体(包含但不限于压实膨润土)导热系数的准确预测提供新的思路和方法。

最后, 需要注意的是, 任何模型都不是完美的, 本文针对压实膨润土提出的细观导热模型还存在以下不足之处。首先是本文模型对蒙脱石晶层间孔隙考虑不足, 难以反映晶层孔隙水化对膨润土固相密度、体积以及导热系数的影响。此外, 本文模型考虑的都是常温条件, 只能反映双孔隙结构对纯热传导的影响。实际上还需考虑孔隙水蒸发冷凝对膨润土导热系数的贡献, 与实际处置库内的温度条件和传热过程有较大差异。因此, 在今后工作中还应加强以上两方面工作。

5 结 论

压实膨润土导热系数是核废料处置库散热设计的关键指标, 准确预测其导热系数对于处置库散热安全和温度场分布具有重要意义。基于精细化建模和细观导热模拟, 本文提出了一种针对双孔隙压实膨润土的细观导热模型, 并与多种压实膨润土 160 个实测导热系数进行比较, 对模型的可靠性进行验证, 得到以下 4 点结论。

(1) 基于对双孔隙和有偏水分布的精细化建模, 结合细观稳态热传导模拟, 系统提出了压实膨润土导热系数的数值预测模型。并与 160 个典型压实膨润土实测导热结果进行比较, 验证了该模型在压实膨润土导热系数预测方面的可靠性。

(2) 本文模型是在 Chen 等^[19]模型上的进一步优化, 不仅继承了该模型考虑双孔隙结构的优势, 而且对 Chen 等模型中单一孔隙非饱和状态进行了细化表征, 其水分分布更加接近实际。

(3) 本文模型适用于复杂双孔隙土体导热系数的预测。然而由于压实膨润土内水分分布更加接近有偏水分布这种极限状态, 相对于其他双孔隙压实黏性土, 本模型在压实膨润土导热系数预测上的潜力更大。

(4) 本文模型对膨润土内晶层孔隙考虑不足, 难以反映晶层孔隙水化对膨润土颗粒固相密度、体积和导热系数的影响。此外, 模型主要针对常温热传导过程, 与实际处置库中膨润土温度条件和传热过程有一定差异, 在今后工作中应着重补充这两方面的工作。

参考文献:

- [1] 王 驹. 中国高放废物地质处置 21 世纪进展[J]. 原子能科学技术, 2019, 53(10): 2072 – 2082. (WANG Ju. Progress of geological disposal of high-level radioactive waste in China in the 21st century[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2019, 53(10): 2072 – 2082. (in Chinese))
- [2] 陈 宝, 张会新, 陈 萍. 高碱溶液对高庙子膨润土侵蚀作用的研究[J]. 岩土工程学报, 2013, 35(1): 181 – 196. (CHEN Bao, ZHANG Hui-xin, CHEN Ping. Erosion effect of hyper-alkaline solution on gaomiaozi bentonite[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2013, 35(1): 181 – 186. (in Chinese))
- [3] 刘月妙, 蔡美峰, 王 驹. 内蒙古高庙子钠基膨润土导热性能研究. 全国岩土与工程学术大会[C]// 全国岩土与工程学术大会. 2006, 武汉. (LIU Yue-miao, CAI Mei-feng, WANG Ju. On the thermal conductivity of GMZ bentonite[C]// Proceedings of Rock and Engineering Conference. 2006, Wuhan. (in Chinese))
- [4] 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 GMZ01 bentonite[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2010, 32(6): 821 – 826. (in Chinese))
- [5] KAHR G, MÜLLER-VONMOOS M. Wärmeleitfähigkeit von Bentonite MX80 und von Montigel nach der Heizdrahtmethode[R]. Zurich: Swiss National Cooperative for the Disposal of Radioactive Waste, NAGRA Technisher Bericht, 1982. (KAHR G, MULIER-VON M. Thermal Conductivity of MX80 Bentonite and Montigel after Hot-Wire[R]. Zurich: Swiss National Cooperative for the Disposal of Radioactive Waste, NAGRA Technisher Bericht, 1982. (in German))
- [6] KNUTSSON S. On the Thermal Conductivity and Thermal Diffusivity of Highly Compacted Bentonite[R]. Stockholm: Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co, 1983.
- [7] 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.
- [8] ROMERO E. A microstructural insight into compacted clayey soils and their hydraulic properties[J]. Engineering Geology, 2013, 165(20): 3 – 19.
- [9] 叶为民, 赖小玲, 刘 毅, 等. 高庙子膨润土微观结构时效性试验研究[J]. 岩土工程学报, 2013, 35(12): 2255 – 2261. (YE Wei-min, LAI Xiao-ling, LIU Yi, et al. Experimental study on ageing effects on microstructure of unsaturated GMZ01 bentonite[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2013, 35(12): 2255 – 2261. (in Chinese))
- [10] LLORET A, VILLAR M V. Advances on the knowledge of the thermo-hydro-mechanical behaviour of heavily compacted “FEBEX” bentonite[J]. Physics and Chemistry of the Earth, 2007, 32(8): 701 – 715.
- [11] TANG A M, CUI Y J, LE T T. A study on the thermal conductivity of compacted bentonites[J]. Applied Clay Science, 2008, 41(3/4): 181 – 189.
- [12] CHEN Y F, WANG M, ZHOU S, et al. An effective thermal conductivity model for unsaturated compacted bentonites with consideration of bimodal shape of pore size distribution[J]. Science China Technological Sciences, 2015, 58(2): 369 – 380.
- [13] CAI S S, ZHANG B X, CUI T F, et al. Mesoscopic study of the effective thermal conductivity of dry and moist soil[J]. International Journal of Refrigeration, 2019, 98(6): 171 – 181.
- [14] 周殷康, 阎长虹, 谢胜华, 等. 基于细观模拟的软土导热系数数值预测模型[J]. 工程地质学报, 2019, 27(5): 1070 – 1078. (ZHOU Yin-kang, YAN Chang-hong, XIE Sheng-hua, et al. A numerical model for thermal conductivity of soft soils based on mesoscopic simulation[J]. Journal of Engineering Geology, 2019, 27(5): 1070 – 1078. (in Chinese))
- [15] JIANG Z, DIJKE M I J, WU K, et al. Stochastic pore network generation from 3D rock images[J]. Transport in Porous Media, 2012, 94(2): 571 – 593.
- [16] JIANG Z, VAN DIJKE M I J, SORBIE K S, et al. Representation of multiscale heterogeneity via multiscale pore networks[J]. Water Resources Research, 2013, 49(9): 5437 – 5449.
- [17] 徐云山, 孙德安, 曾召田, 等. 膨润土热传导性能时效性试验研究[J]. 岩土力学, 2019, 40(11): 4324 – 4330. (XU

Yun-shan, SUN De-an, ZENG Zhao-tian, et al. Experimental study on ageing effect on bentonite thermal conductivity[J]. *Rock and Soil Mechanics*, 2019, **40**(11): 4324 – 4330. (in Chinese))

[18] DELAGE P, MARCIAL D, CUI Y J, et al. Ageing effects in a compacted bentonite: a microstructure approach[J]. *Géotechnique*, 2006, **56**(5): 291 – 304.

[19] CHEN Y F, ZHOU S, HU R, et al. A homogenization-based model for estimating effective thermal conductivity of unsaturated compacted bentonites[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2015, **83**: 731 – 740.

[20] WANG M R, WANG J K, PAN N, et al. Mesoscopic predictions of the effective thermal conductivity for microscale random porous media[J]. *Physical Review E*, 2007, **75**(3): 036702.

[21] WANG M R, PAN N. Predictions of effective physical properties of complex multiphase materials[J]. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 2008, **63**(1): 1 – 30.

[22] VILLAR M V. Caracterización termo-hidro-mecánica de una bentonita de Cabo de Gata[D]. Madrid: Universidad Complutense de Madrid, 2000. (VILLAR M V. Thermo-hydro-mechanical characterization of a bentonite from Cabo de Gata[D]. Madrid: Universidad Complutense of Madrid, 2000. (in Spanish))

[23] LEE J O, CHOI H, LEE J Y. Thermal conductivity of compacted bentonite as a buffer material for a high-level radioactive waste repository[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2016, **94**: 848 – 855.

[24] LEE J O, CHOI H, LEE J Y. Thermal conductivity of compacted bentonite as a buffer material for a high-level radioactive waste repository[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2016, **94**: 848 – 855.

[25] NAKASHIMA Y. Nuclear magnetic resonance properties of water-rich gels of kunigel-V1 bentonite[J]. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 2004, **41**(10): 981 – 992.

[26] TANG A M, CUI Y J. Modelling the thermo-mechanical volume change behaviour of compacted expansive clays[J]. *Géotechnique*, 2009, **59**(3): 185 – 195.

[27] 徐云山, 曾召田, 吕海波, 等. 高温下红黏土热导率的变化规律试验研究[J]. *工程地质学报*, 2017, **25**(6): 1465 – 1473. (XU Yun-shan, ZENG Zhao-tian, LÜ Hai-bo, et al. Experimental study on variation of thermal conductivity of red clay at high temperature[J]. *Journal of Engineering Geology*, 2017, **25**(6): 1465 – 1473. (in Chinese))