

一种基于物理化学基础分析的土水特征曲线模型

王 宇¹, 吴 刚²

(1. 索尔福特大学计算、科学及工程学院, 材料研究所, 曼彻斯特 英国; 2. 上海交通大学土木工程系, 上海 200240)

摘 要: 土水特征曲线是非饱和土的一个重要的本构特性。它对于研究非饱和土的物理力学特性至关重要, 同时也是非饱和土动态水力分析的一个必要条件。长期以来对这一特性的理论解释一直是对研究者的一个挑战。由于岩土内部结构的复杂多变性, 而非饱和土的含水状态又涉及到许多物理及化学的影响因素, 至今还未能有一个圆满的数学模型在描述这一特性时能够全面概括这些机理。首先综述了目前国际上的主要研究成果。之后, 在传统的孔隙介质分析方法的基础上, 利用现代表面科学的理论, 分析并存在于非饱和土孔隙中的水、汽两相的物理化学行为, 最后利用平均理论推导出一个宏观尺度下的土水特征曲线的理论表达式。这一理论表达式揭示了土水特征曲线背后的物理化学机理, 对该表达式的数学分析发现它能够很好地解释实验中所观察到的现象。最后根据这一理论表达式, 提出了一个简化的土水特征曲线拟合模型。通过对多种土壤以及其他孔隙材料的实验结果的模拟证明这一模型不仅能非常好地拟合实验结果, 而且优于其它现有的主要模型。

关键词: 非饱和土; 土水特征曲线; 模拟

中图分类号: TU411.91

文献标识码: A

文章编号: 1000-4548(2008)09-1282-09

作者简介: 王 宇(1965-), 男, 重庆人, 博士, Research Councils UK Academic Fellow, 长期从事孔隙流体计算研究及应用工作。E-mail: y.wang@salford.ac.uk。

Understanding and modelling soil-water characteristic curves

WANG Yu¹, WU Gang²

(1. Institute for Materials Research, School of Computing, Science & Engineering, University of Salford, Manchester, UK; 2. Department of Civil Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

Abstract: The soil-water characteristic curve (SWCC) is an important constitutive feature of unsaturated soils. Meanwhile it is also an indispensable requirement in hydraulic transport modelling and soil mechanics analysis. In this paper, at first, a review of the development in SWCC modeling was given, then the soil-water characteristics was explained according to the physical and chemical behaviours of the phases involved in unsaturated porous media. Using the traditional capillary theory, the volume averaging theorem and the advanced interfacial surface theory, a formula representing the soil-water characteristics of unsaturated porous media was derived. In this formula the internal linkage of the SWCC to the specific surface area of soil porosities was demonstrated, and agreed with the experimental observations mathematically. Based on this formula, a fitting model was proposed for the SWCC. Finally, this model was tested to fit the SWCC measurements of a wide range of porous materials, and compared with other main models.

Key words: unsaturated soil; soil-water retention curve; modelling

0 概 论

非饱和岩土以及其它孔隙介质中的流体流动是一个跨学科的基础研究课题, 特别是在农林水土、水利及岩土工程、石油钻井、化工以及材料等领域长期以来一直是研究者们不断探索的课题^[1-3]。液体在非饱和和孔隙介质中所承受的吸力随饱和度(液体含量)的变化关系是孔隙介质的一个重要的本构特性, 也是流动模拟和力学分析的一个必要条件。对非饱和和含水土而言, 这一特性习惯上被称为土的含水特性(Water retention characteristic), 在岩土工程领域, 其通常用

土水特征曲线(Soil-water characteristic curve, SWCC)来代表。由于它的重要性, 在过去的一个多世纪里, 研究者们对孔隙介质的这一特性进行了深入和广泛的研究。特别是在水土领域, 研究者们提出了许多模型去模拟土壤的土水特征曲线^[4-6]。同时, 这些模型也被应用到其他的孔隙材料上, 如混凝土^[7]和纤维复合材料^[8]。笼统而言, 这些模型可以划分为两大类, 即: 唯象(Phenomenological)模型或经验(Empirical)模

型和物理概念 (Physical conceptual) 模型。

在第一类模型中, 最成功也是目前国际上最广泛应用的是 Van Genuchten 模型^[9]。但是研究者们已经发现 Van Genuchten 模型在拟合土水特征曲线时会产生不符合实际的情况, 有的时候甚至是负值的残留饱和度^[10]。第二类模型首先是对实际的孔隙结构进行简化。如用一组圆柱形的毛细管 (A bundle of cylindrical capillaries, BCC) 来代表实际孔隙。它们假设孔隙介质 (如土壤) 中的颗粒尺寸大小的分布 (Particle size distribution, PSD) 决定了其孔隙尺寸大小的分布 (Void size distribution, VSD)^[5], 而正是孔隙尺寸大小的分布决定了该孔隙介质的含水特性以及土水特征曲线。实验发现对某些土壤来说, 它们的颗粒尺寸分布可以用一个幂函数来表示^[5]。而颗粒尺寸分布的幂函数形式也被拓扑分形 (Fractal) 模型所支持^[11]。然而在许多情况下拓扑分形模型被发现无法体现土水特征曲线中通常存在的拐点^[12]。在拐点处土水特征曲线的曲率的方向会发生变化, 或者不连续。工程实际中, 土水特征曲线的拐点具有非常重要的意义, 它决定了曲线的斜率变化和形状, 而这些又代表了土壤的物理特性^[13]。同时研究者也指出, 拓扑分形函数在某些情况下能够拟合土水特征曲线并不证明土壤结构就具有拓扑分形的形态^[14]。另外还有一种统计模型假设土壤中的颗粒尺寸分布是一个对数形式的函数, 从而对应地得到一个对数形式的孔隙尺寸分布函数^[15-18]。对这一类模型而言一个关键的问题是颗粒尺寸分布函数与孔隙尺寸分布函数之间的关系不是确定的, 例如: 它们可以是线性的, 用以反映它们之间的相似性^[19], 也可以是非线性的^[5]。另一方面, 这类形式的模型还没有在其他非颗粒孔隙介质上得到验证。例如, 以前的试验研究已经发现岩土工程中采用的聚酯纤维纺织布就具有与土壤完全相似的含水特征曲线^[20]。

深入的研究已经发现土壤的含水特性不仅仅与孔隙尺寸分布有关, 而且还与孔壁介质、孔壁表面有直接的联系^[11], 与表面的吸附力、可湿 (可黏) 性以及温度都有关^[6]。最近, 研究者们提出了一种考虑了液体在孔隙中的布局形态的新模型^[22-23]。这一模型使用一个带有锐角的几何孔再加上两个细长的对称裂缝来模拟实际的孔隙结构。当几何孔内的含水率变化时, 即: 不同的饱和度下, 几何孔内的月牙形的液面的半径也会相应地变化, 从而产生不同的毛细管压力 (吸力)。与此同时, 两个细长的对称裂缝表面上吸附的液体厚度也会变化, 从而反映表面吸附力对含水特性的影响。尽管取得了这样大的进展, 但有研究者指出, 用这样一种简化的几何孔模型并不能真实地反映复杂的实际孔隙结构^[24]。另一方面, 这一模型中所采用的评估表面吸附力的子模型与试验结果并不吻合, 因为

它忽略了分子间远距离的相互作用 (Long range interactions) 的影响因素^[25]。事实上, 吸附层流体的化学势能的变化不仅取决于该吸附层的厚度 h , 而且还与整个固体吸附表面的面积有关^[40]。

过去的实验表明: 在非饱和土中, 水、汽两相的接触面积与饱和度呈现出一种线性的关系^[26-27]。类似的关系也被发现存在于其它的气、液并存, 或者有两种液相并存的孔隙介质中^[28-29]。Petersen 等研究者^[30]发现: 土水特征曲线与土壤中空隙的“特征表面积”有非常明显的关系。所谓“特征表面积” (Specific surface area) 是指孔隙介质中孔壁的表面积与它所包围的空间的容积 (即孔隙的容积) 或与整个孔隙介质体积的比值。但是到目前为止, 还没有有关这两种现象与孔隙介质的含水特性或土水特征曲线之间内在关系的详细的分析报道。本文的目的是尝试用现代表面科学的观点和理论来研究这一问题。首先, 本文仍然采用传统的 BCC 毛细管组管方法来简化实际的孔隙结构。在此基础上, 利用现代表面科学的理论来分析同时存在于非饱和孔隙中的水、汽两相的物理和化学行为。最后利用体积平均理论得到一个代表含水特性和土水特征曲线的表达式。并且发现对这一表达式的数学分析的结果与在实验中观察到的现象是一致的。在这一表达式的基础上, 本文提出一个简化的模型去模拟土水特征曲线。最后, 对这一模型进行了广泛的测试, 并与现有的主要模型进行了对比。

1 理论及模型

传统上认为孔隙介质中的流体比之在开放自由的大气环境下所具有的势能要小, 因为将孔隙介质中的流体吸出需要消耗功。流体在这两种状态下的势能差是由于重力、静水压力、毛细孔效应以及其他一些因素 (比如溶液浓度不均引起的压力差) 的结果^[1]。在这些因素中, 毛细孔效应所造成的势能差传统上又被称为毛细孔势能 (Capillary potential) 或在土壤物理学里笼统地被称为基质势 (Matric potential), 工程习惯上又称其值为吸力 (Suction)。由于习惯把开放自由的大气环境设置为参考状态 (流体在此状态下所具有的势能为零), 所以毛细孔势能是负值。现代表面科学的研究证明, 固体表面的吸附力会改变其上吸附的流体层的化学势能 (Chemical potential)^[23]。同时, 对非饱和土的干湿循环过程的研究发现, 在吸湿过程的初始和脱湿过程的终止时刻, 土壤中孔隙的壁表面上存在着一层薄薄的均匀的水膜将孔隙中的汽相与壁面分离, 而且这时水、汽两相的接触面积达到最大值。之后, 随着孔隙中的含水率的增加, 水、汽两相的接触面积会逐渐减少直到饱和状态其值为零^[27]。

在非饱和孔隙介质中, 水和水蒸汽两相并存于孔

隙中。在微观毛细孔尺度下观察,在这两相共存的界面处存在着一个凹液面(Meniscus)将水、汽两相明确分开。这时,共存于孔隙中的水、汽两相都具有各自的压力。在平衡状态下,它们的压力差就被凹液面上的表面张力所平衡,并满足拉氏方程(Laplace's equation)^[31],即

$$P_c = P_w - P_v = -\frac{2\sigma_{wv}}{r_m} \quad (1)$$

式中 P_w 代表水相压力; P_v 代表汽相压力; σ_{wv} 代表凹液面单位长度上的表面张力; r_m 代表凹液面半径。

方程式(1)中的压力差习惯上又被定义为单位体积的毛细孔势能或基质势,或毛细压力或吸力。在以下的叙述中我们将一致采用毛细压力(Capillary pressure)这一定义,并以 P_c 来表示。凹液面上的表面张力是由于水、汽两相在它们的界面上分子间相互作用的结果。在非饱和介质中,除了它们之间的分子相互作用外,水、汽两相分别还与孔壁(固体相)存在着相互作用。在平衡状态下,这三相间的相互作用满足杨氏方程(Young's equation),即

$$\sigma_{wv} \cos \theta = \sigma_{vs} - \sigma_{ws} \quad (2)$$

式中 σ_{vs} 代表汽相与孔壁相互作用产生的表面张力; σ_{ws} 代表水相与孔壁相互作用产生的表面张力; θ 代表液面接触角。

将式(2)代入式(1),得到如下的杨氏-拉氏方程(Young-Laplace's equation):

$$P_c = P_w - P_v = \frac{2\sigma_{ws}}{r} - \frac{2\sigma_{vs}}{r} \quad (3)$$

式(3)可以这样理解:在非饱和介质中,水、汽两相各自的压力是它们与孔壁相互作用的结果,同时与凹液面处的孔的尺寸大小($r = r_m \cos \theta$)有关。换句话说,凹液面所处的位置正好平衡了水、汽两相的压力差。正是这一机理决定了该孔隙介质的含水特性或土水特征曲线。

方程式(3)所描述的是微观孔隙内的平衡状态。因为实际工程测量都是在宏观尺度下进行,因此,方程式(3)所定义的毛细压力需要被转换到宏观尺度。利用体积平均理论(Volume averaging theorem)^[32],宏观尺度下的平均毛细压力应定义为

$$\langle P_c \rangle = \frac{1}{V_{\text{pore}}} \int_{V_{\text{pore}}} P_c dV \quad (4)$$

式中, V_{pore} 代表孔隙介质的特征单元体(Representative elementary volume, REV)内全部的孔隙容积。

将式(3)代入式(4)得到

$$\langle P_c \rangle = \frac{1}{V_{\text{pore}}} \int_{V_{\text{pore}}} P_w dV - \frac{1}{V_{\text{pore}}} \int_{V_{\text{pore}}} P_v dV \quad (5)$$

因为这里考虑的是静止的平衡状态,在该状态下孔隙内的任意一点处的任意一相流体压力要么是一常值,

要么是0,于是式(5)可重新写为

$$\begin{aligned} \langle P_c \rangle &= \frac{1}{V_{\text{pore}}} \int_{V_{\text{water}}} \bar{P}_w dV - \frac{1}{V_{\text{pore}}} \int_{V_{\text{vapour}}} \bar{P}_v dV \\ &= \int_0^S \bar{P}_w dS - \int_0^{1-S} \bar{P}_v d(1-S) \end{aligned} \quad (6)$$

式中 V_{water} 和 V_{vapour} 分别代表全部的孔隙容积内水、汽两相各自所占有的那部分容积; $\bar{P}_w$ 和 $\bar{P}_v$ 分别代表水、汽两相各自的内在平均值(Intrinsic phase average); S 为孔隙内水的饱和度。

过去的研究表明,固体表面的吸附作用对其上吸附的流体层的化学势能大小的改变可以用开尔文方程(Kelvin's equation)来评估^[23, 25],即

$$\Delta u_f = RT \ln \left(\frac{P}{P_0} \right) \quad (7)$$

式中 Δu_f (< 0) 是被吸附的流体层内每摩尔流体的势能的变化(J/mol); R 是理想气体常数; T 是开尔文温度; P 是被吸附的流体周围与之平衡的处于理想气体状态下的汽相的压力; P_0 是标准状态下的汽相压力。

根据简单的力平衡条件,被吸附的流体层的绝对压力应等于它周围与之平衡的处于理想气体状态下的汽相压力再加上流体层由于固体表面吸附导致的化学势能的变化,即

$$P_f = \frac{\Delta u_f}{V_f} + P_0 \exp \left(\frac{\Delta u_f}{RT} \right) \quad (8)$$

式中下标 f 指示被吸附的流体; P_f 代表被吸附的流体层的绝对压力; V_f 代表该流体的摩尔体积。

逻辑上,方程(8)既适用于孔隙中的水相,也适用于孔隙中的汽相。因此,在非饱和孔隙介质中水、汽两相的压力可以分别表达为如下形式

$$P_w = \frac{\Delta u_w}{V_w} + P_0 \exp \left(\frac{\Delta u_w}{RT} \right) \quad (9a)$$

$$P_v = \frac{\Delta u_v}{V_v} + P_0 \exp \left(\frac{\Delta u_v}{RT} \right) \quad (9b)$$

式中,下标 w 和 v 分别代表水、汽两相。

根据这样的理解,式(6)中水、汽两相各自的内在平均值可以表达成为

$$\bar{P}_w = \frac{\langle \Delta u_w \rangle}{V_w} + P_0 \exp \left(\frac{\langle \Delta u_w \rangle}{RT} \right) \quad (10a)$$

$$\bar{P}_v = \frac{\langle \Delta u_v \rangle}{V_v} + P_0 \exp \left(\frac{\langle \Delta u_v \rangle}{RT} \right) \quad (10b)$$

式中, $\langle \Delta u_w \rangle$ 和 $\langle \Delta u_v \rangle$ 分别为水、汽两相各自的摩尔化学能变化的平均值,即

$$\langle \Delta u_w \rangle = \frac{1}{V_{\text{pore}}} \int_{V_{\text{pore}}} \Delta u_w dV = \frac{1}{V_{\text{pore}}} \int_{V_{\text{water}}} \Delta \bar{u}_w dV \quad (11a)$$

$$\langle \Delta u_v \rangle = \frac{1}{V_{\text{pore}}} \int_{V_{\text{pore}}} \Delta u_v dV = \frac{1}{V_{\text{pore}}} \int_{V_{\text{vapour}}} \Delta \bar{u}_v dV \quad (11b)$$

式中, $\Delta\bar{u}_w$ 和 $\Delta\bar{u}_v$ 分别为水、汽两相各自的摩尔化学能变化的内在平均值。

根据现代表面科学研究的成果, 被吸附的流体层的化学势能的变化是与该流体层的厚度 h 密切相关的。它包括了多种因素^[23, 25], 即

$$\Delta u_f(h) = V_f \left(\Pi^m(h) + \Pi^e(h) + \Pi^s(h) + \Pi^a(h) \right) \quad (12)$$

式中 $\Pi^m(h)$ 是由于分子间的范德瓦耳力, 它正比于 $1/h^3$; $\Pi^e(h)$ 是由于静电场的作用, 正比于 $1/h^2$; $\Pi^s(h)$ 是由于表面结构因素的影响, 正比于 $1/h$; $\Pi^a(h)$ 是由于流体层内溶质、溶剂的浓度分布不均匀的影响, 下文将不讨论这一因素。

用一组毛细管来代表实际的孔隙结构, 毛细管之间由线状的喉管相连。孔隙中的流体可以视为被孔壁所吸附。吸附层的厚度 h 可以视为就等于毛细管的半径。如保持孔壁表面积不变, 这一组毛细管又可以再进一步等效为一个半径为“水力半径”的单一毛细管。这里“水力直径”定义为毛细管容积与它的管壁表面积之比。这一方法又称为 Carmen-Kozeny 方法^[31]。因为“水力半径”与“特征表面积”正好成反比, 因此, 被吸附的流体层的化学势能的变化就可以表达成为“特征表面积”的函数。对共存于非饱和孔隙介质中的水、汽两相, 根据方程式 (12) 可以分别写出如下式子:

$$\Delta u_w = A_w^m V_w \bar{s}_w^3 + A_w^e V_w \bar{s}_w^2 + A_w^s V_w \bar{s}_w \quad (13a)$$

$$\Delta u_v = A_v^m V_v \bar{s}_v^3 + A_v^e V_v \bar{s}_v^2 + A_v^s V_v \bar{s}_v \quad (13b)$$

式中 A 是一组比例常数; $\bar{s}_w$ 和 $\bar{s}_v$ 分别是介质中水相和汽相各自所占据的那部分孔隙结构的“特征表面积”, 即

$$\bar{s}_w = \frac{S_{ws}}{SV_{\text{bulk}}} \quad (14a)$$

$$\bar{s}_v = \frac{S_{vs}}{(1-S)V_{\text{bulk}}} \quad (14b)$$

式中 S_{ws} 代表水相与孔壁的接触面积; S_{vs} 代表汽相与孔壁的接触面积; S 代表整个孔隙中的水的饱和度; V_{bulk} 代表整个孔隙介质材料的体积。

因为在孔隙介质的任何一个干、湿过程中, 未含水的孔的壁面始终覆盖着一层薄薄的水膜。而考虑到连接孔与孔之间的喉管的截面积非常小可以忽略不计, 因此汽相与孔壁的接触面积 (S_{vs}) 可以近似等于孔隙中水汽两相的接触面积 (S_{vw})。而过去的实验^[26-27, 33]和模拟计算^[29, 34-35]都已证明, 在非饱和的孔隙介质中, 水、汽两相的接触面积与饱和度存在着如下的一般性的线性关系:

$$\frac{S_{vs}}{V_{\text{bulk}}} \div \frac{S_{vw}}{V_{\text{bulk}}} = \bar{s}(1-S) \quad (15)$$

式中, $\bar{s}$ 代表孔隙介质内孔隙的“特征表面积”, 即

$$\bar{s} = \frac{S_{vs} + S_{ws}}{V_{\text{bulk}}} \quad (16)$$

将式 (15) 代入 (16), 得到如下方程:

$$\frac{S_{ws}}{V_{\text{bulk}}} = \bar{s}S \quad (17)$$

由于式 (14), (15) 和 (17), 方程式 (13) 可以重新写成如下形式:

$$\Delta u_w = A_w^m V_w \bar{s}^3 + A_w^e V_w \bar{s}^2 + A_w^s V_w \bar{s} \quad (18a)$$

$$\Delta u_v = A_v^m V_v \bar{s}^3 + A_v^e V_v \bar{s}^2 + A_v^s V_v \bar{s} \quad (18b)$$

方程式 (18) 表明, 在非饱和的孔隙介质中, 水、汽两相的摩尔化学势能的变化是常数, 并取决于该介质中孔隙的“特征表面积”。

以上的分析表明, 前面式 (11) 中的水、汽两相各自的摩尔化学能变化的内在平均值 $\Delta\bar{u}_w$ 和 $\Delta\bar{u}_v$ (沿孔的直径方向上的平均值) 可视为常数, 于是该式可以进一步写为

$$\langle \Delta u_w \rangle = \frac{1}{V_{\text{pore}}} \int_{V_{\text{water}}} \Delta\bar{u}_w dV = \Delta u_w^0 + \Delta\bar{u}_w S \quad (19a)$$

$$\langle \Delta u_v \rangle = \frac{1}{V_{\text{pore}}} \int_{V_{\text{vapour}}} \Delta\bar{u}_v dV = \Delta u_v^0 + \Delta\bar{u}_v (1-S) \quad (19b)$$

如前所述, 当任何流体从自由状态到开始在孔隙中存积时, 首先会在孔的壁面上形成一层分子膜, 因此已有一个初始的能量变化。上式中, Δu^0 就代表初始化学势能的变化。

将方程 (19) 代入方程 (10), 再代入方程式 (6), 得到如下方程:

$$\begin{aligned} \langle P_c \rangle &= \int_0^S \left(\frac{\Delta u_w^0 + \Delta\bar{u}_w S}{V_w} + P_0 \exp\left(\frac{\Delta u_w^0 + \Delta\bar{u}_w S}{RT}\right) \right) dS - \\ &\int_0^{1-S} \left(\frac{\Delta u_v^0 + \Delta\bar{u}_v (1-S)}{V_v} + P_0 \exp\left(\frac{\Delta u_v^0 + \Delta\bar{u}_v (1-S)}{RT}\right) \right) d(1-S) \\ &= \left(\frac{\Delta u_w^0}{V_w} S + \frac{\Delta\bar{u}_w}{2V_w} S^2 + \frac{P_0 \exp\left(\frac{\Delta u_w^0}{RT}\right)}{\frac{\Delta\bar{u}_w}{RT}} \left(\exp\left(\frac{\Delta\bar{u}_w S}{RT}\right) - 1 \right) \right) - \\ &\left(\frac{\Delta u_v^0}{V_v} (1-S) + \frac{\Delta\bar{u}_v}{2V_v} (1-S)^2 + \right. \\ &\quad \left. \frac{P_0 \exp\left(\frac{\Delta u_v^0}{RT}\right)}{\frac{\Delta\bar{u}_v}{RT}} \left(\exp\left(\frac{\Delta\bar{u}_v (1-S)}{RT}\right) - 1 \right) \right), \quad (20) \end{aligned}$$

最后方程式 (20) 可整理为

$$\begin{aligned} \langle P_c \rangle &= \left(-\frac{\Delta u_v^0}{V_v} - \frac{\Delta\bar{u}_v}{2V_v} + \frac{P_v^0}{\beta} - \frac{P_w^0}{\alpha} \right) + \left(\frac{\Delta u_w^0}{V_w} + \frac{\Delta u_v^0}{V_v} + \frac{\Delta\bar{u}_v}{V_v} \right) S + \\ &\left(\frac{\Delta\bar{u}_w}{2V_w} - \frac{\Delta\bar{u}_v}{2V_v} \right) S^2 + \frac{P_w^0}{\alpha} \exp(\alpha S) - \frac{P_v^0}{\beta} \exp(\beta(1-S)), \quad (21) \end{aligned}$$

式中, $P_w^0 = P_0 \exp(\frac{\Delta u_w^0}{RT})$, $P_v^0 = P_0 \exp(\frac{\Delta u_v^0}{RT})$, $\alpha = \frac{\Delta \bar{u}_w}{RT}$, $\beta = \frac{\Delta \bar{u}_v}{RT}$ 。

理论上, 式 (21) 代表了孔隙介质的含水特性。实际应用中考虑到存在着封闭的孔隙, 该式中的饱和度 S 可以用有效饱和度 (Effective saturation) 来代替。有效饱和度被定义为 $S_e = \frac{S - S_r}{S_s - S_r}$, 其中, S_r 是全干状态下的残留饱和度; S_s 是全湿状态下的最大饱和度。

方程式 (21) 可以解释两种在实验中观察到的现象。首先, 它揭示出土水特征曲线可能存在两种拐点, 即: 连续拐点和非连续拐点。因为式 (21) 中存在两个指数函数项, 而且它们的二阶导数的符号正好相反。这就意味着这两项所代表的曲线的斜率的变化趋势正好相反, 因此, 当这两条曲线叠加在一起时就会出现一个连续的拐点。另一方面, 式 (21) 代表一个具有特定的“特征表面积”值的土水特征曲线。如果某一孔隙介质内存在着两种不同尺度的孔隙系统, 这两种孔隙系统的“特征表面积”值不同, 因此, 式 (21) 中对应的参数 u^0 和 $\Delta \bar{u}$ 的值就会变化。当该孔隙介质内的含水率增加或减少到某一值时, 水从某一孔隙系统进入另一孔隙系统, 土水特征曲线就会出现不连续的变化。另外, 方程式 (21) 还能够解释水力扩散系数 (Hydraulic diffusivity) 的指数函数形态。根据水力扩散系数的定义^[9], 即 $D = K \frac{\partial P_c}{\partial S}$, 这里 K 代表水力

传导系数 (Hydraulic conductivity), 将方程式 (21) 直接代入该定义式求得的水力扩散系数具有指数函数的形态。而水力扩散系数的指数函数形态早已被研究者发现^[2, 36-37], 但一直还没有一个物理的解释。这里它可以被解释为是由于非饱和介质中水、汽两相压力的变化的开尔文特性。理论上, 方程式 (21) 可以直接用于去拟合土水特征曲线^[38], 但它使用起来很不方便。它具有太多的未知常数, 而且必须事先知道 V_w , V_v 和 RT 的值。为了克服以上不便, 本文提出用下面经过简化和折衷的模型去模拟拟合土水特征曲线:

$$P_c = \phi_0 + P_0 (\exp(\alpha S_e) - \exp(\beta(1 - S_e))) \quad (22)$$

式中, ϕ_0 , P_0 , α 和 β 是 4 个新的拟合参数。必须指出的是它们已经不再具有准确的物理意义。

下节作为检验, 用式 (22) 去模拟不同孔隙介质的含水曲线, 包括土壤的土水特征曲线, 并与目前主要的模型进行对比。所采用的拟合工具是 MATLAB CURVE FITTING TOOL。

2 实验对比

因为, 文献中的单位不统一, 有的压力采用国际

单位制, 而水力学中又通常采用水头, 因此, 本文中压力 P_c 以及参数 ϕ_0 和 P_0 保持与所引文献中的单位一致。另外, 示图的形式也保持和原文一致, 以方便直观地进行对比。

图 1 是对一组水泥和混凝土材料的土水特征曲线的模拟。实验数据来自文献。4 种材料中, CO 和 CH 是水泥材料, BO 和 BH 是混凝土材料。四种材料试样采用不同的水灰比制成, 从而有不同的孔隙度。试样 BH 在饱和度 0.8 处的数据被忽略, 因为它明显偏离了整体数据变化的趋势。所有曲线的拟合参数值被列于表 1 中。如图所示, 对比原文所采用的修正的 van Genuchten 模型, 新模型展示了非常好的模拟结果, 特别是在高含水率一侧。

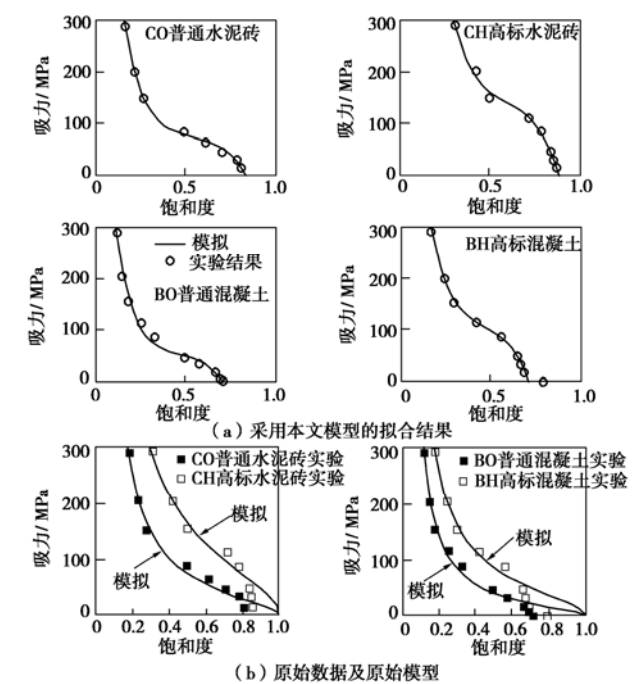


图 1 水泥和混凝土材料的土水特征曲线^[7]

Fig. 1 SWCCs for cement pastes and concretes

表 1 对水泥和混凝土材料的拟合参数值

Table 1 Fitting Parameters for cement pastes and concretes^[7]

材料	ϕ_0/MPa	P_0/MPa	α	β	S_r	S_s
CO	-74.01	4.287×10^{-2}	8.943	10.24	0.0	1.0
CH	-147.5	1.281×10^{-1}	8.029	10.19	0.0	1.0
BO	-49.59	1.44×10^{-2}	11.61	11.01	0.0	1.0
BH	-101.2	7.523×10^{-2}	10.17	9.526	0.0	1.0

图 2 展示了对 5 种土壤的土水特征曲线的拟合。拟合参数值被列于表 2 中。从与 Van Genuchten 模型的对比可以看到, 两种模型都给出了很好的模拟结果。但同时, 也能够看到, 对 Beit Netofa 黏土而言, 在曲线的两端, 新模型的结果更好。除了 Beit Netofa 黏土以外, 其它 4 种土壤的曲线都存在着一个明显的拐点。仔细研究 Beit Netofa 黏土的实验数据, 可以发现, 该曲线在中间处明显不连续, 存在着一个凹点。这一结

果与另外一个具有多尺度孔隙系统的土壤的实验结果类似^[39]。该多尺度孔隙系统土壤的土水特征曲线在中部也存在一个不连续的凹点。于是, 可以推测, 在 BeitNetofa 黏土中有可能存在两种不同尺度的孔隙系统, 例如, 黏土中有可能存在裂缝。根据多尺度孔隙系统的理论, 不同尺度孔隙的土水特征曲线可以分别用式 (22) 来模拟。

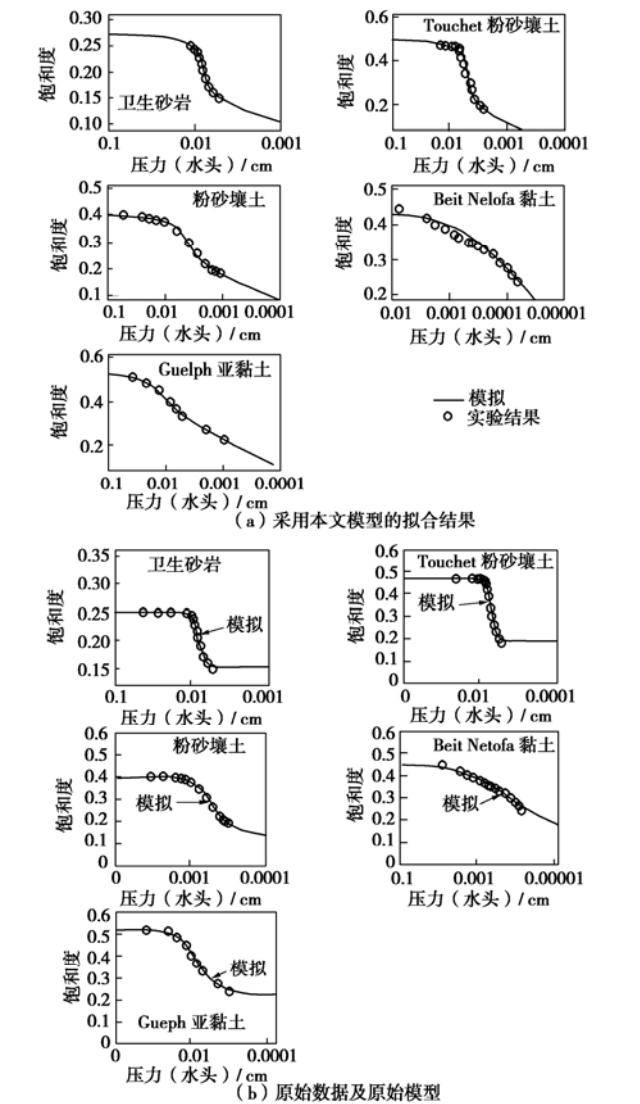


图 2 五种土壤的土水特征曲线^[9]
Fig. 2 SWCCs for soils

图 3 展示了与一个具有幂函数形式的拓扑分形模型的对比。为节省篇幅以下不再列出拟合参数值。如图所示, 新模型展示了非常好的模拟结果, 特别是曲线的形状。它反映出与实验结果一致的拐点。图 4 展示了与另外一个拓扑分形模型的对比。类似地, 新模型的结果基本上反映了实验结果的变化趋势。特别是对 soil 2 的模拟结果明显好于原模型, 它反映了土水特征曲线存在着拐点这一事实。图中也显示出有的实验数据明显偏离了模拟曲线。这一结果可以用多尺度孔隙的理论来解释。

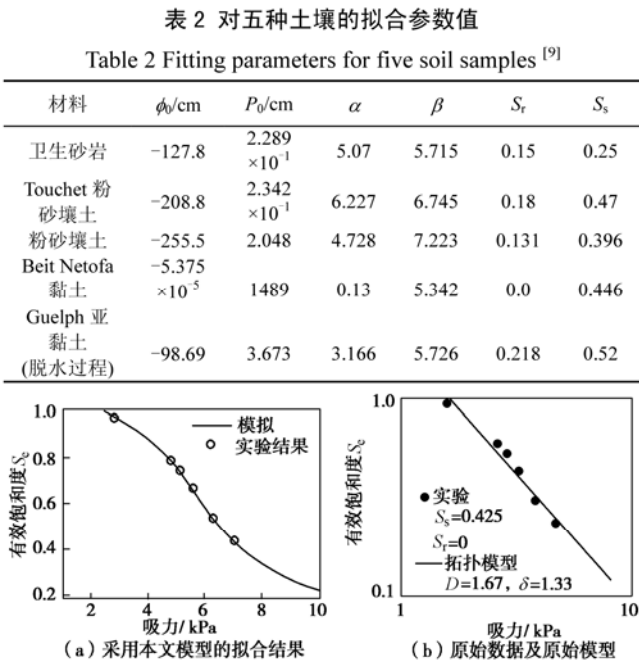


图 3 与拓扑分形模型的比较^[12]
Fig. 3 Comparison with a fractal model

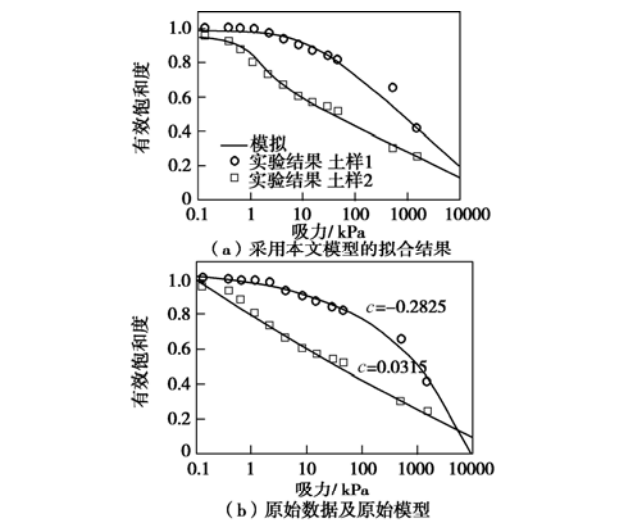


图 4 与拓扑分形模型的比较^[11]
Fig. 4 Comparison with a fractal model

图 5 展示了新模型与两个对数形式的 PSD 模型的比较。如图所示, 新模型比原模型展示了更好的模拟结果, 无论原模型是采用线性的 PSD-VSD 相关性, 或者是非线性的相关性。特别是在低饱和度一端, 新模型与实验数据非常的一致。因为, 压力纵坐标习惯采用对数值的形式, 因此, 在低饱和度 (即高毛细压力) 一端的拟合精度的改善, 对整体拟合精度的提高具有重要的意义。图 6 展示了与另外一个 PSD 模型的对比。新模型同样表现了很好的模拟结果。与原模型比较, 在对 Grignon 和 Machelainville 土的模拟中, 新模型对实验数据的拟合更好, 更准确地反映了土水特征曲线曲率的变化趋势。同时, 与 Van Genuchten 模

型比较, 对 Pachapa Fine Sandy Clay 和 Machelainville 两种土样的模拟显示, 新模型的结果在低饱和度一侧有明显的改善。

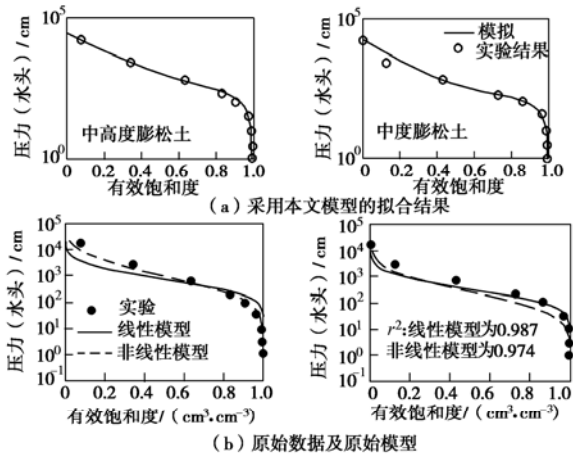


图 5 与对数函数形式的颗粒分布模型的比较^[18]

Fig. 5 Comparison with a lognormal PSD model

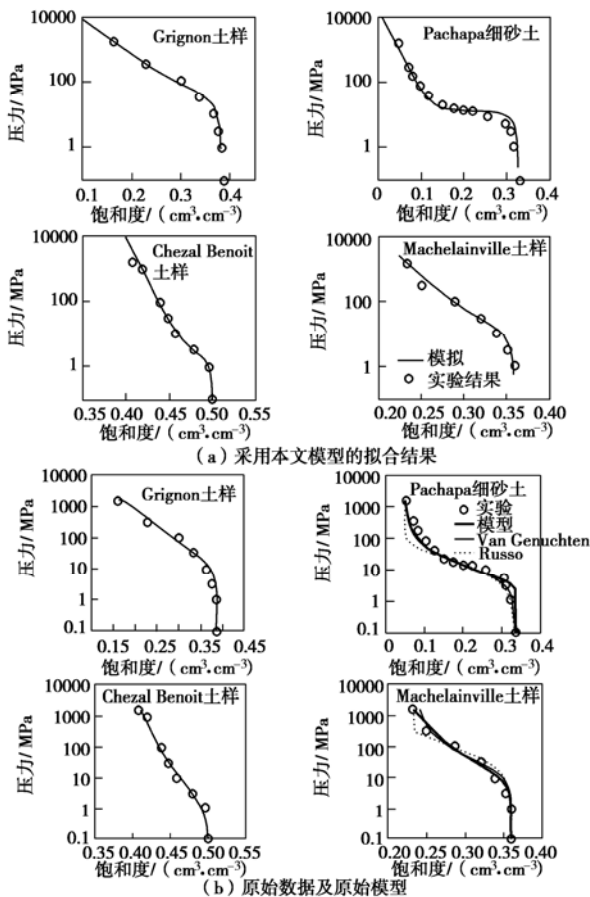


图 6 与一种颗粒分布概念模型的比较^[5]

Fig. 6 Comparison with a conceptual PSD model

图 7 和 8 展示了新模型与一个考虑了液体在孔隙中的布局形态的模型以及 Van Genuchten 模型的对比。对图 7 中的两种土壤的模拟显示, 新模型都给出了较好的模拟结果。对土壤 Palouse B 的模拟结果表明在低饱和度一侧, 新模型也优于 Van Genuchten (VG) 模型。对图 8 中的两种土而言, 新模型则明显优于原模型。

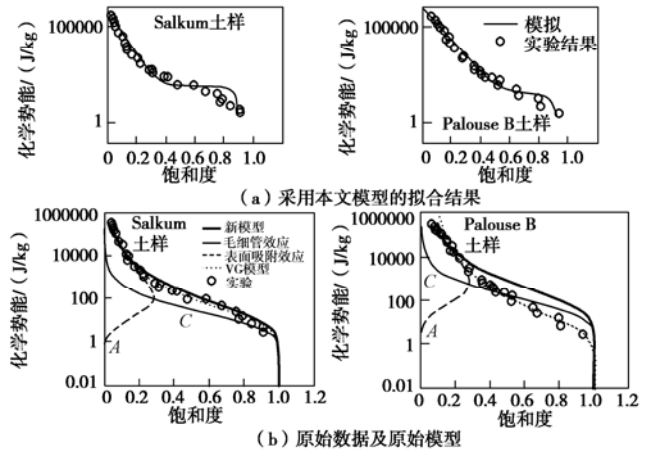


图 7 与一种考虑液体布局形态模型的比较^[22]

Fig. 7 Comparison with a unit cell model

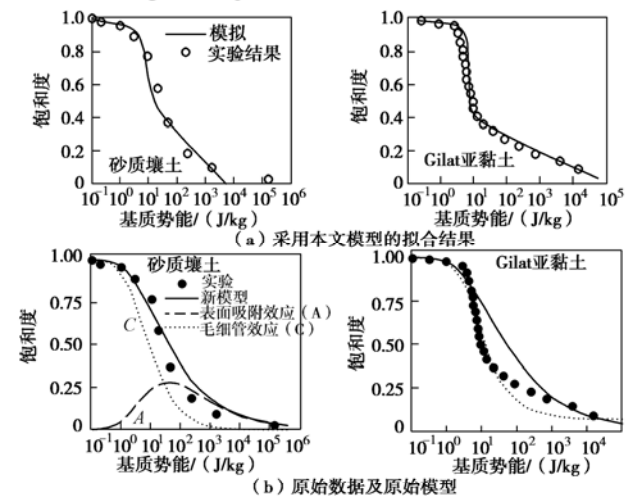


图 8 与一种考虑液体布局形态模型的比较^[21]

Fig. 8 Comparison with a unit cell model

为进一步测试本文提出的模型的通用性, 用它去模拟非颗粒介质的含水特征曲线。图 9 展示了对岩土工程中采用的聚酯纤维纺织布的含水特征曲线的模拟。如图所示, 本文模型同样显示了较好的结果。因为, 聚酯纤维纺织布料一般都具有双尺度孔隙的特性, 因此, 对它的模拟应该考虑这一因素。对多尺度孔隙介质的含水特征曲线的模拟将在另外的文章中专门讨论。

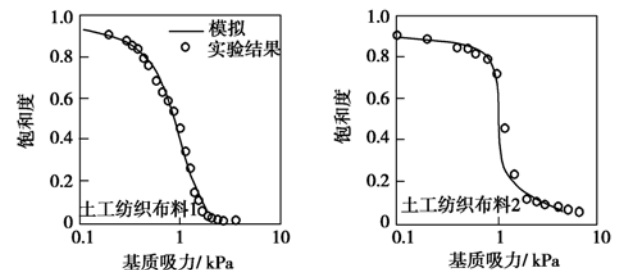


图 9 对两种岩土工程用纺织布料的含水特征曲线的模拟^[20]

Fig. 9 WRCs for geotextiles

最后, 用所提出的模型去模拟干、湿循环过程中土水特征曲线的滞后现象。一般认为, 土水特征曲线的滞后现象是由于在干、湿两个不同的过程中凹液面与孔壁

的接触角 θ 的变化, 以及未含水的孔壁上的水膜厚度随饱和度的变化而改变^[6]。本文认为, 后者是因, 而前者是果。如前所述, 在非饱和土中, 未含水的孔隙壁上存在着一层薄薄的水膜。对加湿过程而言, 在孔隙中的含水率明显增加之前, 水膜的厚度可能首先有所增加; 而对脱湿过程而言, 在孔隙中的含水率明显减少之前, 水膜的厚度可能首先有所减少。很可能正是水膜的这种预先变化导致了干湿循环的滞后现象。但是这一假设还有待试验验证。尽管如此, 水膜的厚度随饱和度的变化而改变的推断应该是合理的。对于干、湿循环过程中的任意一条子扫描曲线, 可以视之为一个完整的脱湿或加湿过程的土水特征曲线, 只是对应有不同的残留饱和度 S_r 和最大饱和度 S_s 。所以, 对于干、湿循环过程中的任意一条子扫描曲线都可以用式(22)去模拟。图10展示了用方程式(22)对一种土壤的干、湿循环过程的成功的模拟结果。详细的干、湿循环过程模拟介绍已超出本文内容, 将另文讨论。

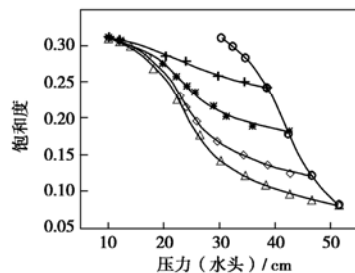


图10 对土水特征曲线在干、湿循环过程中的滞后现象的模拟^[41] (曲线为模拟结果, 符号为实验值)

Fig. 10 The modelling for the hysteretic behavior of SWCCs

3 结 论

本文在传统的孔隙介质分析方法的基础上, 利用现代表面科学的理论, 分析了并存于非饱和孔隙中的水、汽两相的物理化学行为, 最后利用体积平均理论推导出一个土水特征曲线的理论表达式。该表达式揭示了土水特征曲线与孔隙结构的“特征表面积”之间的内在关系。在该表达式的基础上, 又提出了一个简化的土水特征曲线模型。通过对较广范围的孔隙介质含水特性的模拟以及与目前主要的模型的对比证明, 该新模型能够更精确、更可靠、更大范围的模拟土水特征曲线, 可以更好地为工程研究服务。而这一理论表达式也更有助于进一步了解土水特征曲线的本质。

参考文献:

[1] HILLEL D. Environmental soil physics[M]. London: Academic Press, 1998.
[2] HALL C, HOFF W D. Water transport in brick, stone and concrete[M]. New York: Spon Press, 2002.

[3] LEIJ F J, SCIORTINO A, et al. Aggregation of vertical flow in the vadose zone with auto and cross-correlated hydraulic properties[J]. Journal of Hydrology, 2007, **338**: 96 - 112.
[4] BROOKS R H, COREY A T. Hydraulic properties of porous media[J]. Colorado State University Hydrology Paper, 1964, **3**: 27.
[5] ASSOULINE S, TESSIER D, et al. A conceptual model of the soil water retention curve[J]. Water Resources Research, 1998, **34**(2): 223 - 231.
[6] BACHMANN J, van der ploeg R R. A review on recent developments in soil water retention theory: interfacial tension and temperature effects[J]. J Plant Nutr Soil Sci, 2002, **165**: 467 - 478.
[7] BAROGHEL-BOUNY V, MAINGUY M, et al. Characterization and identification of equilibrium and transfer moisture properties for ordinary and high-performance cementitious materials[J]. Cement and Concrete Research, 1999, **29**: 1225 - 1238.
[8] WANG Y, GROVE S, MOATAMEDI M. Continuum dual-scale modelling of liquid composite moulding processes[J]. Journal of reinforced Plastics and Composites, 2008. (in press).
[9] VAN GENUCHTEN M T. A close-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils[J]. Soil Science Society American Journal, 1980, **44**: 892 - 898.
[10] IPPISCH O, VOGEL H J, et al. Validity limits for the Van Genuchten-Mulalem model and implications for parameter estimation and numerical simulation[J]. Advances in Water Resources, 2006, **29**: 1780 - 1789.
[11] GIMENEZ D, PERFECT E, et al. Fractal models for predicting soil hydraulic properties: a review[J]. Engineering Geology, 1997, **48**: 161 - 183.
[12] XU Y F, DONG P. Fractal approach to hydraulic properties in unsaturated porous media[J]. Chaos Solutions & Fractals, 2004, **19**: 327 - 337.
[13] DEXTER A R. Soil physical quality: Part I. theory, effects of soil texture, density, and organic matter, and effect on root growth[J]. Geoderma, 2004, **120**: 201 - 214.
[14] CRAWFORD J W, MATSUI N, et al. The relation between the moisture-release curve and the structure of soil[J]. Eur J Soil Sci, 1995, **46**: 369 - 375.
[15] KOSUGI K. Lognormal distribution model for unsaturated soil hydraulic properties[J]. Water Resources Research, 1996, **32**: 2697 - 2703.

- [16] TULI A, KOSUGI K, et al. Simultaneous scaling of soil water retention and unsaturated hydraulic conductivity functions assuming lognormal pore-size distribution[J]. *Advances in Water Resources*, 2001, **24**: 677 – 688.
- [17] HWANG S I, POWERS S E. Lognormal distribution model for estimating soil water retention curves for sandy soils[J]. *Soil Sci*, 2003, **168**: 156 – 166.
- [18] HWANG S IL, CHOI S IL. Use of a lognormal distribution model for estimating soil water retention curves from particle-size distribution data[J]. *Journal of Hydrology*, 2006, **323**: 325 – 334.
- [19] ARYA L M, PARIS J F. A physicoempirical model to predict the soil moisture characteristic from particle-size distribution and bulk density data[J]. *Soil Science Society American Journal*, 1981, **45**: 1023 – 1030.
- [20] BOUAZZA A, FREUND M, et al. Water retention of nonwoven polyester geotextile[J]. *Polymer Testing*, 2006, **25**: 1038 – 1043.
- [21] TULLER M, OR D. Unsaturated hydraulic conductivity of structured porous media: a review of liquid configuration-based models[J]. *Vadose Zone Journal*, 2002, **1**: 14 – 37.
- [22] OR D, TULLER M. Liquid retention and interfacial area in variably saturated porous media: upscaling from single-pore to sample-scale model[J]. *Water Resources Research*, 1999, **35**(12): 3591 – 3605.
- [23] TULLER M, OR D, et al. Adsorption and capillary condensation in porous media: liquid retention and interfacial configuration in angular pores[J]. *Water Resources Research*, 1999, **35**(7): 1949 – 1964.
- [24] CHERTKOV V Y. A physically based model for the water retention curve of clay pastes[J]. *Journal of Hydrology*, 2004, **286**: 203 – 226.
- [25] IWAMATSU M, HORII K. Capillary condensation and adhesion of two wetter surfaces[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 1996, **182**: 400 – 406.
- [26] KIM H, RAO P S. Determination of the effective air-water interfacial area in partially saturated porous media using surfactant adsorption[J]. *Water Resources Research*, 1997, **33**(12): 2705 – 2711.
- [27] COSTANZA-ROBINSON M S, BRUSSEAU M L. Air-water interfacial areas in unsaturated soils: Evaluation of interfacial domain[J]. *Water Resources Research*, 2002, **38**(10): 13.1 – 13.17.
- [28] SCHAEFER C E, DICARLO D A, et al. Determination of water-oil interfacial area during 3-phase gravity drainage in porous media[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2000, **221**: 308 – 312.
- [29] NORDHAUG H F, CELIA M, et al. A pore network model for calculation of interfacial velocities[J]. *Advances in Water Resources*, 2003, **26**: 1061 – 1074.
- [30] PETERSEN L W, MOLDRUP P, et al. Relations between specific surface area and soil physical and chemical properties[J]. *Soil Science*, 1996, **161**: 9 – 12.
- [31] DULLIEN F A L. Porous media fluid transport and pore structure[M]. USA, Academic Press Inc, 1991.
- [32] NORDBOTEN J M, CELIA M A, DAHLE H K, HASSANIZADEH S M. Interpretation of macroscale variables in Darcy's law[J]. *Water Resource Research*, 2007, **43**: W08430.
- [33] KARKARE M V, FORT T. Determination of the air-water interfacial area in wet 'unsaturated' porous media[J]. *Langmuir*, 1996, **12**(8): 2041 – 2044.
- [34] CARY J W. Estimating the surface area of fluid phase interfaces in porous media[J]. *J Comtam Hydrol*, 1994, **15**: 243 – 248.
- [35] BRADFORD S A, LEIJ F J. Estimating interfacial areas for multi-fluid soil systems[J]. *J Comtam Hydrol*, 1997, **27**: 83 – 105.
- [36] GARDENER W R, MAYHUGH M S. Solutions and tests of the diffusion equation for the movement of water in soil[J]. *Soil Science Society American Proceedings*, 1958, **22**: 197 – 201.
- [37] BRUTSAERT W. Universal constants for scaling the exponential soil water diffusivity[J]. *Water Resources Research*, 1979, **15**: 481 – 483.
- [38] WANG Y. Phase deterministic modelling of water retention in unsaturated porous media and its potential application in dynamic unsaturated flow modelling[J]. *Journal of Porous Media*, 2008, accept.
- [39] KOHNE J M, GERKE H H. Estimating the hydraulic functions of dual-permeability models from bulk soil data[J]. *Water Resources Research*, 2002, **38**: 26.1 – 26.11.
- [40] ADAMSON A W. Physical chemistry of surfaces, 5th ed[M]. Jone Wiley & Sons, Inc, USA, 1990.
- [41] POULOVASSILIS A, KARGAS G. A note on calculating hysteretic behavior[J]. *Soil Science Society American Journal*, 2000, **64**: 1947 – 1957.