

研究土壤热湿迁移特性的非平衡 热力学方法*

陈振乾 施明恒 虞维平

(东南大学, 南京 210018)

摘 要 运用非平衡热力学理论分析了土壤非饱和区热湿迁移的热力学“力”和“流”,建立了迁移过程的热力学唯象方程。通过对土壤非饱和区热湿迁移机理的分析,利用扩散定律和气体状态方程推导了热湿迁移唯象方程中的有关唯象系数的数学表达式,分析了温度、含水率及蒸汽分压力对唯象系数的影响。

关键词 热湿迁移,唯象系数,非平衡热力学

土壤非饱和区热湿迁移特性的研究,对农业生产、水资源的调控、地下水污染的预测控制,以及地下储能等方面都有重要的意义。土壤中热湿迁移,除受土壤结构特性的影响外,还与土壤中温度分布有很大的关系。土壤非饱和区湿分的迁移包含了以液态水形式的迁移和以水蒸汽形式的迁移。同时由于温度场的作用,在迁移过程中还不断发生着液相—汽相—液相的多次转变,使得在温度梯度作用下土壤非饱和区的热湿迁移过程变得十分复杂。对非饱和区液态水的迁移过程, Richards^[1]首先将 Darcy 定律引入作出定量描述。后来 Philip 和 De Vries^[2]考虑到温度梯度的影响,对它进行了修正, Nakano^[3]又引入了蒸汽密度随温度的变化关系。实际上土壤中热湿迁移是一个相互耦合的过程,这一问题至今尚未很好的解决。本文利用非平衡热力学理论,分析土壤非饱和区热湿迁移在温度梯度下的相互作用。推导热湿迁移的唯象方程以及唯象系数的表达式,以探讨解决这个问题的方法。

1 热湿迁移的线性唯象方程组

土壤非饱和区热湿迁移是在温度场、浓度场、压力场和速度场等交叉作用下发生的物质与能量的迁移过程。一般来说,土壤中的热湿迁移过程离开平衡态不远,因此可以采用线性非平衡热力学理论来描述其相互耦合的热质迁移过程。根据非平衡热力学理论,分子迁移的热湿传递的“流”和“力”均为矢量。按照居里原理^[4],它们之间可以耦合。在仅考虑土壤中纯水、水蒸汽和热量传递情况下,土壤中热湿迁移的线性唯象方程可以表达为:

* 国家自然科学基金资助课题(批准号:39570410)。

收稿日期:1996-10-08;收到修改稿日期:1997-10-23

$$\mathbf{J}_q = -\frac{L_{qq}}{T^2} \text{grad}T - \frac{L_{qL}}{T} \text{grad}\theta - \frac{L_{qv}}{T} \text{grad}P_v \quad (1)$$

$$\mathbf{J}_L = -\frac{L_{Lq}}{T^2} \text{grad}T - \frac{L_{LL}}{T} \text{grad}\theta - \rho_L K \mathbf{k} \quad (2)$$

$$\mathbf{J}_v = -\frac{L_{vq}}{T^2} \text{grad}T - \frac{L_{vL}}{T} \text{grad}P_v \quad (3)$$

式中 \mathbf{J}_q 、 \mathbf{J}_L 和 \mathbf{J}_v 分别为热流、流体质流和蒸汽质流^[5];

$\lambda = \frac{L_{qq}}{T^2}$, 为表现导热系数; $\lambda_p^1 = \frac{L_{qv}}{T}$, 为迁移系数;

$\lambda_p = \frac{L_{vL}}{T}$, 为渗透系数; $\lambda_p^{11} = \frac{L_{vq}}{T^2}$, 为热渗透系数;

$\lambda_m = \frac{L_{LL}}{T}$, 为导质系数; $\lambda_m^1 = \frac{L_{qL}}{T}$, 为质导热系数;

$\lambda_m^{11} = \frac{L_{Lq}}{T^2}$, 为热导质系数。

据此, (1—3) 式可表示为:

$$\mathbf{J}_q = -\lambda \text{grad}T - \lambda_m^1 \text{grad}\theta - \lambda_p^1 \text{grad}P_v \quad (4)$$

$$\mathbf{J}_L = -\lambda_m^{11} \text{grad}T - \lambda_m \text{grad}\theta - \rho_L K \mathbf{k} \quad (5)$$

$$\mathbf{J}_v = -\lambda_p^{11} \text{grad}T - \lambda_p \text{grad}P_v \quad (6)$$

以上公式中, T 、 θ 和 P_v 分别代表温度、含水率和蒸汽分压力, ρ_L 和 K 分别代表液态水密度和非饱和土水力传导系数。

2 热湿迁移物理机制和热力学“流”

虽然定义了各个线性唯象系数, 但是仍无法计算它们。为建立各唯象系数的具体表达式, 需要从各类迁移过程物理机制出发, 对各个热力学“流”进行分析, 求出各唯象系数表达式。

2.1 热迁移机制

在温度梯度的作用下土壤中的热量的传输有热传导、渗透对流传热、辐射传热和相变换热多种方式。它们之间是相互联系、相互作用的。但由于土壤相近部分间温差不会很大, 因而辐射换热量可以忽略。其中, 渗流对流和相变传热是质流渗流引起。

根据以上分析, 热流包括导热热流 (\mathbf{J}_{qd}) 和渗流质流引起热流 (\mathbf{J}_{qc}), 它们分别为:

$$\mathbf{J}_{qd} = -\lambda_c \text{grad}T \quad (7)$$

$$\mathbf{J}_{qc} = \mathbf{J}_L h_L + \mathbf{J}_v h_v + \mathbf{J}_d h_d \quad (8)$$

因而总热流 \mathbf{J}_q 为:

$$\mathbf{J}_q = \mathbf{J}_{qd} + \mathbf{J}_{qc} = -\lambda_c \text{grad}T + (\mathbf{J}_L h_L + \mathbf{J}_v h_v + \mathbf{J}_d h_d) \quad (9)$$

2.2 湿迁移机制

土壤非饱和区湿分迁移有扩散迁移(包括一般分子扩散、Knudsen 扩散和表面扩散)、渗流和相变引起的湿迁移。

2.2.1 液态水质流 在液态水迁移中,土壤非饱和区的质流主要是在浓度梯度和温度梯度下的渗流 J_{LC} 和非等温条件下表面扩散 J_{LD} 。其渗流可表述为^[6]

$$J_{LC} = -\rho_L(D_{\theta L}\text{grad}\theta + D_{TL}\text{grad}T + K\mathbf{k}) \quad (10)$$

$$\text{式中, } D_{\theta L} = K \frac{\partial \psi}{\partial \theta}, \quad D_{TL} = K \frac{\partial \psi}{\partial T}$$

其中, ψ 为土水势。而在非等温条件下由于吸附和解吸产生的表面扩散质流 J_{LD} 为^[7]:

$$J_{LD} = -\rho_L D_{TD} \text{grad}T \quad (11)$$

其中, D_{TD} 为非等温条件下吸附扩散系数。

因而,液态水质流 J_L 为:

$$J_L = J_{LC} + J_{LD} = -[D_{\theta L}\text{grad}\theta + (D_{TL} + D_{TD})\text{grad}T + K\mathbf{k}] \quad (12)$$

2.2.2 水蒸汽质流 土壤非饱和区水蒸汽质流包括内部对流质流 J_{VV} 以及在水蒸汽分压力和温度梯度作用下产生的扩散质流 J_{VD} 。在非等温条件下,设水蒸汽对流速度为 V , 则对流质流为:

$$J_{VV} = \rho_V V \quad (13)$$

由于土壤是细微多孔介质,一般分子扩散和 Knudsen 扩散共同起作用,此时蒸汽扩散质流 J_{VD} 为:

$$J_{VD} = -D_e \text{grad}\rho_V \quad (14)$$

于是,蒸汽迁移质流 J_V 为:

$$J_V = \rho_V V - D_e \text{grad}\rho_V \quad (15)$$

2.2.3 空气质流 空气质流也包括对流质流 J_{aV} 和扩散质流 J_{aD} 。由于空气质流与蒸汽质流对流速度相同^[3],故空气迁移质流为:

$$J_a = \rho_a V - D_e \text{grad}\rho_a \quad (16)$$

上面公式中, ρ_V 和 ρ_a 分别为蒸汽和空气密度, D_e 为等效扩散系数。

3 热湿迁移唯象系数

根据以上对热力学“流”的分析,在前人研究的基础上,结合湿分在土壤中迁移的物性参数,并引入气体和蒸汽的状态方程,下面将近似地推导出非饱和区热湿迁移的唯象系数具体表达式。

3.1 液态水迁移唯象系数

液态水迁移唯象系数包括导质系数 λ_m 和热导质系数 λ_m^{11} , 根据式(12), 它们分别为:

$$\lambda_m = \rho_L D_{\theta L} = \rho_L K \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \quad (17)$$

$$\lambda_m^{11} = \rho_L (D_{TL} + D_{TD}) = \rho_L \left(K \frac{\partial \psi}{\partial T} + D_{TD} \right) \quad (18)$$

3.2 水蒸汽迁移唯象系数

土壤多孔介质中空气与大气环境质交换量为零^[1], 故空气质流 $J_a = 0$, 将 $J_a = 0$ 代入式(16)得:

$$V = \frac{D_c}{\rho_a} \text{grad} \rho_a \quad (19)$$

将 V 表达式代入式(15)得:

$$J_v = D_c \rho_v \left(\frac{1}{\rho_a} \text{grad} \rho_a - \frac{1}{\rho_v} \text{grad} \rho_v \right) \quad (20)$$

假定在土壤非饱和区内, 空气和水蒸汽遵守理想气体定律, 于是将蒸汽和空气理想气体状态方程代入式(20), 可整理得到蒸汽质流为:

$$J_v = - \frac{D_c P}{R_v T (P - P_v)} \text{grad} P_v \quad (21)$$

于是水蒸汽迁移唯象系数——渗透系数 λ_p 和热渗透系数 λ_p^{II} 由式(6)和式(21)得:

$$\lambda_p = \frac{D_c P}{R_v T (P - P_v)} \quad (22)$$

$$\lambda_p^{II} = 0 \quad (23)$$

式中, D_c 为有效扩散系数, P 为土壤内气体总压力, R_v 为水蒸汽气体常数, P_v 为水蒸汽分压力。

3.3 热迁移唯象系数

土壤非饱和区液态水、水蒸汽和空气焓分别为:

$$\text{液态水焓 } h_L = C_L T \quad (24)$$

$$\text{水蒸汽焓 } h_v = C_{pv} T + H_C \quad (25)$$

$$\text{空气焓 } h_a = C_{pa} T \quad (26)$$

将上式及液态水、水蒸汽迁移质流代入热流质流方程式(9)中并整理得:

$$J_q = - (\lambda_e + \lambda_m^{II} C_L T) \text{grad} T - \lambda_m C_L T \text{grad} \theta - \lambda_p H_c + C_{pv} T \text{grad} P_v - \rho_L C_L T K \mathbf{k} \quad (27)$$

于是热迁移唯象系数——表观导热系数 λ 、迁移系数 λ_p^I 和质导热系数 λ_m^I 由式(4)和式(27)得:

$$\text{表现导热系数 } \lambda = \lambda_e + \lambda_m^{II} C_L T \quad (28)$$

$$\text{迁移系数 } \lambda_p^I = (C_{pv} T + H_C) \lambda_p \quad (29)$$

$$\text{质导热系数 } \lambda_m^I = \lambda_m C_L T \quad (30)$$

4 温湿度对迁移唯象系数的影响

由上面分析可知, 热湿迁移唯象系数是温度和含水率(或水蒸汽分压力)的函数。下面以平均粒径为 0.3mm 的湿砂土为例分析温度、含水率(或水蒸汽分压力)对热湿迁移唯象系数的影响。在分析前先对几个主要参数进行分析和讨论。

4.1 热力学参数和物性参数分析

4.1.1 土水势 ψ 和水力传导系数 K 土水势是温度和含水率的函数, 对 0.3mm 的湿砂

土,它的表达式为¹⁾:

$$\psi = -0.0315 \left(\frac{\theta}{\varepsilon} \right)^{-4} \exp(\gamma T) \quad (31)$$

上式中, ε 和 γ 分别为孔隙率和张力系数,其值为 0.36 和 $-2.189 \times 10^{-3} \text{C}^{-1}$ 。

水力传导系数 K 为¹⁾

$$K = K_s \left(\frac{\psi_s}{\psi} \right)^{2.75} \quad (32)$$

式中, K_s 和 ψ_s 分别为饱和水力传导系数和饱和土水势, K_s 值为 $1.76 \times 10^{-5} \text{m} \cdot \text{S}^{-1}$

4.1.2 非饱和区水蒸汽分压力 P_v 含湿非饱和蒸汽分压力满足以下热力学关系^[3]:

$$P_v = P_s \exp\left(\frac{g\psi}{R_v T}\right) \quad (33)$$

式中, P_s 为饱和蒸汽分压力, g 为重力加速度。

4.1.3 有效导热系数 λ_e 土壤非饱和区的有效导热系数可近似表示为¹⁾:

$$\lambda_e = \lambda_s \theta_s + \lambda_L \theta + \lambda_g (e - \theta) \quad (34)$$

式中, θ_s 为固体骨架所占比例, λ_s 、 λ_L 和 λ_g 分别为固体、液态水和气体导热系数。

4.1.4 有效扩散系数 D_e 有效扩散系数可表示为²⁾: $D_e = \frac{D_{am} D_{kn}}{D_{am} + D_{kn}}$ (35)

式中,一般分子扩散系数 $D_{am} = 4.942 \times 10^{-4} \varepsilon T^{1.5} / (P f_0)$ (36)

$$\text{Knudsen 扩散系数 } D_{kn} = \frac{8 \varepsilon^2}{3 f_0 S_g} \left(\frac{2 R_1 T}{\pi M_1} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (37)$$

其中, f_0 为曲折因子, S_g 为每单位体积 BET 表面积, M_1 为蒸汽克分子量。

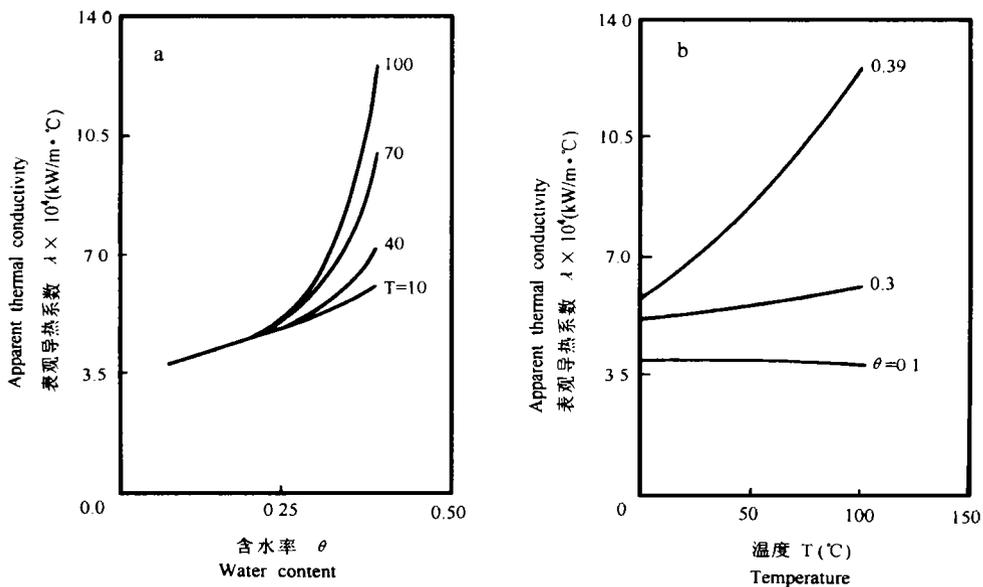
4.2 温湿度对唯象系数影响

图 1~4 分别示出了计算得到的表观导热系数 λ 、质导热系数 λ_m^1 、导质系数 λ_m 和热导质系数 λ_m^{11} 随含水率 θ 和温度 T 的变化曲线,他们都随含水率和温度的增大而增大。但质导热系数 λ_m^1 、导质系数 λ_m 和热导质系数 λ_m^{11} 在含水率 θ 很小时,均近似为零。由于质导热系数 λ_m^1 和热导质系数 λ_m^{11} 是热质传递相互耦合的交叉系数,因而在含水率很小时热质耦合交叉影响很小,可忽略;又由于导质系数 λ_m 是液态水在含水率梯度下的传递系数,故在含水率很小时,液态水质流很小。

图 5~6 分别示出了迁移系数 λ_p^1 和渗透系数 λ_p 随蒸汽分压力 P_v 和温度 T 的变化。由于蒸汽分压力 P_v 在空气中所占比例较少,因而蒸汽分压力 P_v 对迁移系数 λ_p^1 和渗透系数 λ_p 的影响不很明显;而温度的影响比较明显。

总的来说,温度和含水率(或蒸汽分压力)对唯象系数有一定影响,多数唯象系数随温度和含水率的增加而增大,这对于用非平衡热力学方法定量分析土壤湿热迁移过程有一定的参考价值。

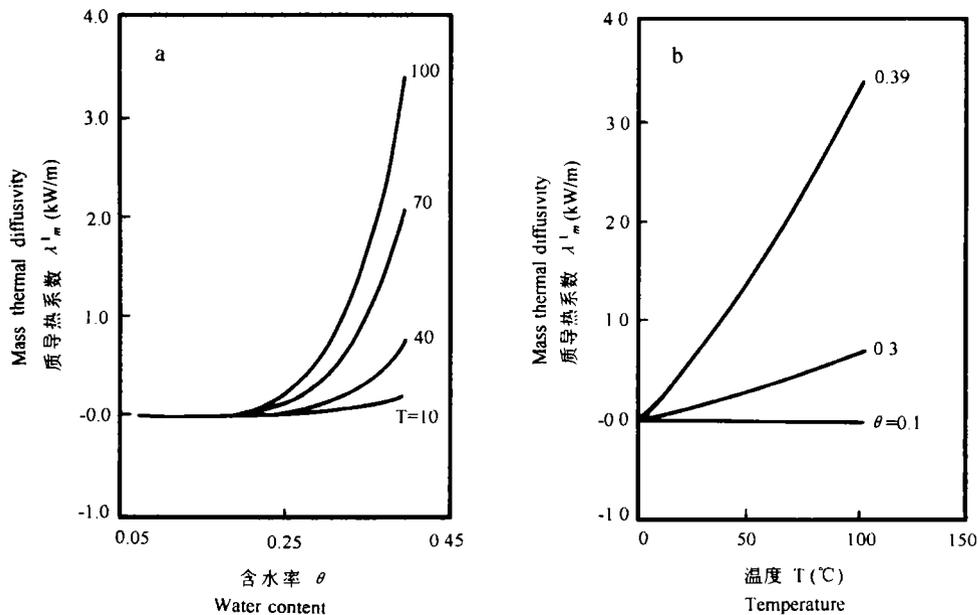
1), 2) 陈振乾, 1995: 复杂环境条件下土壤中热湿迁移规律的研究(东南大学学位论文)。



a. 表观导热系数随含水率变化 b. 表观导热系数随温度变化

图 1 表观导热系数 λ 曲线图

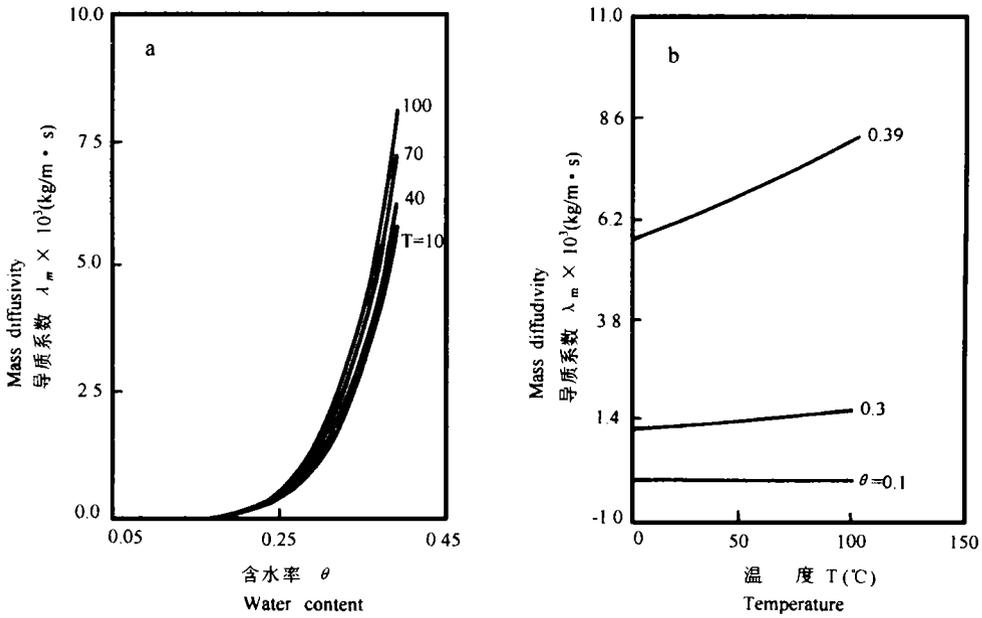
Fig.1 Apparent thermal conductivity curve



a. 质导热系数随含水率变化 b. 质导热系数随温度变化

图 2 质导热系数 λ'_m 曲线图

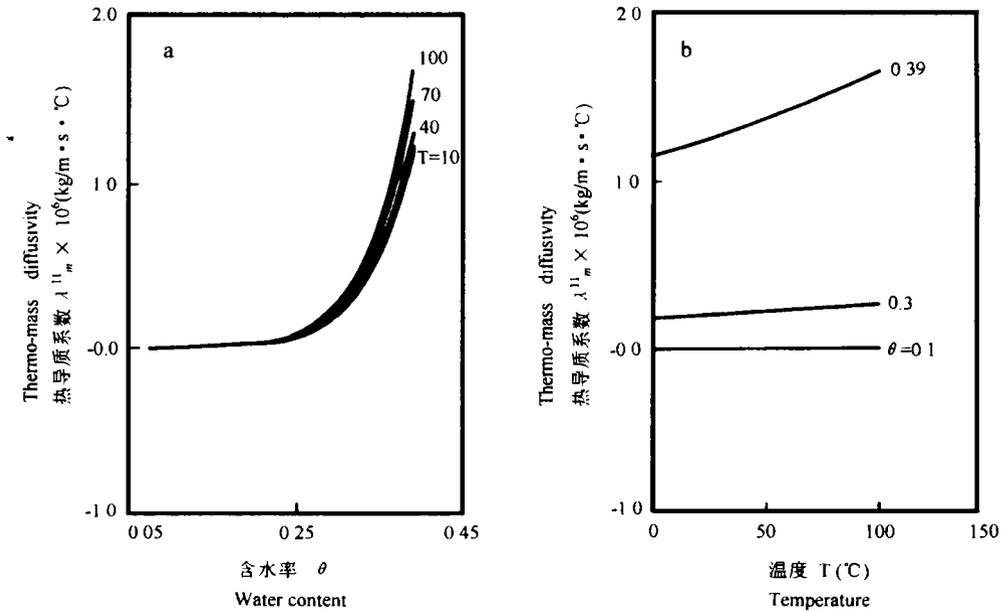
Fig.2 Mass thermal diffusivity curve



a. 导质系数随含水率变化 b. 导质系数随温度变化

图3 导质系数 λ_m 曲线图

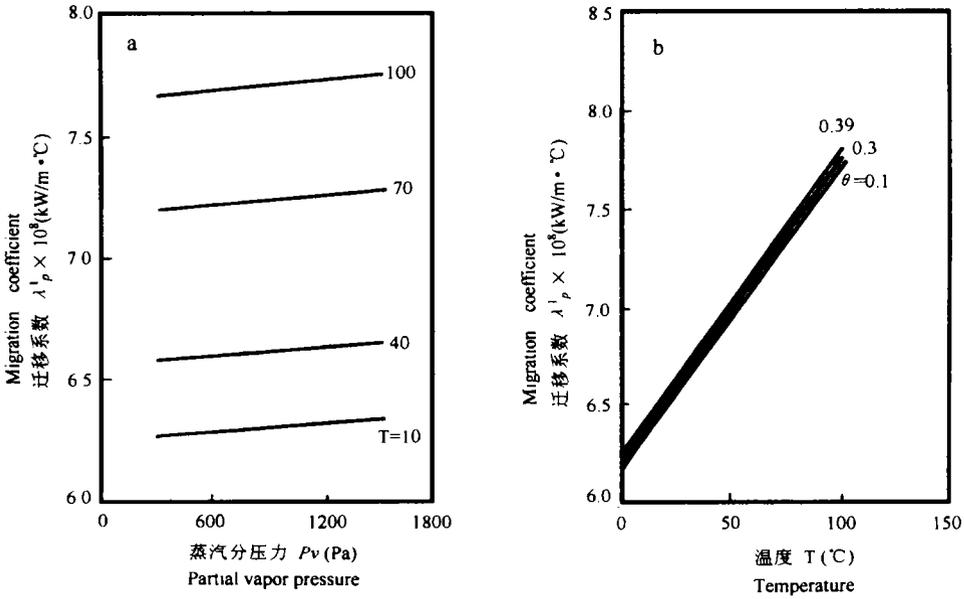
Fig.3 Mass diffusivity curve



a. 热导质系数随含水率变化 b. 热导质系数随温度变化

图4 热导质系数 λ_{II}^m 曲线图

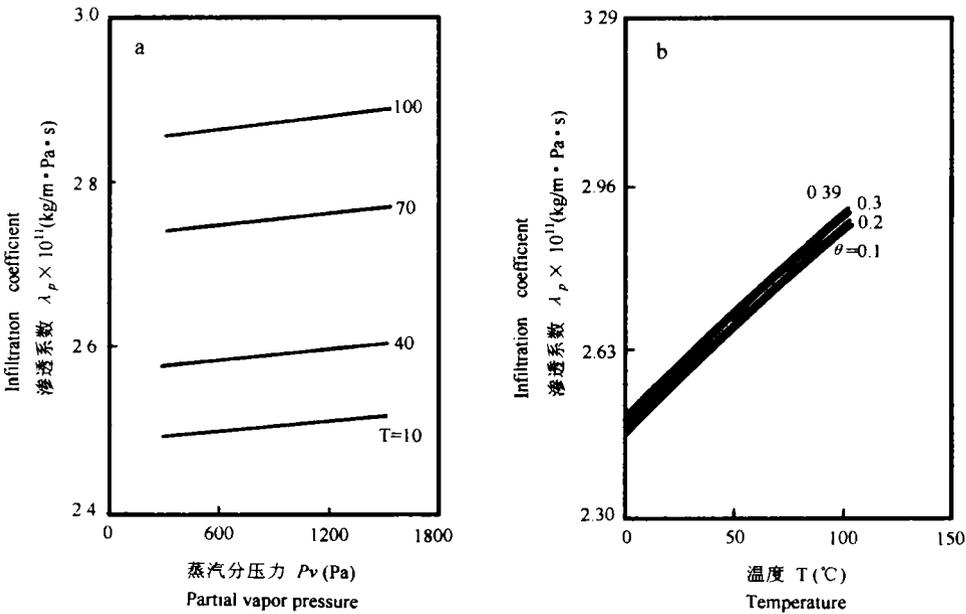
Fig.4 Thermo-mass diffusivity curve



a. 迁移系数随蒸汽分压力变化 b. 迁移系数随温度变化

图 5 迁移系数 λ_p^1 曲线图

Fig.5 Migration coefficient curve



a. 渗透系数随蒸汽分压力变化 b. 渗透系数随温度变化

图 6 渗透系数 λ_p 曲线图

Fig.6 Infiltration coefficient curve

参 考 文 献

1. Richards L A. Capillary conduction of liquids through porous media. *Physics*, 1931, 1:318~333.
2. Philip J R. Vries D E. Moisture movement in porous materials under temperature gradients. *Trans. Am. Geophy. Union*, 1957, 38:222~232
3. Nakano M, Miyazaki T. The Diffusion and nonequilibrium thermodynamic equations of water vapour in soils under temperature gradients. *Soil Sci-Ence*, 1979, 128:184~188
4. 杨东华. 不可逆热力学原理及工程应用. 北京: 科学出版社, 1989.
5. 施明恒. 毛细多孔介质中发生高强度热质交换的微分方程组. *南京工学院学报*, 1980, (2):1~7
6. 萧树铁. 土壤非线性扩散问题的研究及其应用. *自然杂志*, 1983, 6:823~826
7. Connell L D. etc. Model moisture movement in revegetating waste heaps. *Water Resour. Res.*, 1993, 29: 1435~1443,1993.

NON-EQUILIBRIUM THERMODYNAMICS METHOD OF HEAT AND MOISTURE TRANSPORT PROPERTIES IN UNSATURATED SOILS

Chen Zhen-qian Shi Ming-heng Yu Wei-ping

(*Department of Power Engineering, Southeast University, Nanjing 210018*)

Summary

Based on the non-equilibrium thermodynamic theory, the thermal driving forces and the fluxes in heat and mass transfer process for unsaturated soil were analyzed. The mechanics of heat and mass transfer in unsaturated soil were discussed and the phenomenological equations to describe the transport process in unsaturated soil were established. By means of the diffusion law and the equation of state for ideal gas, the expressions of the coefficients in the phenomenological equations were deduced. The effects of temperature, water content and partial vapor pressure on the phenomenological coefficients were also discussed.

Key words Heat and moisture transfer, Phenomenological coefficient,
Non-equilibrium thermodynamics