

岩石与地热井水泥表面湿度对热传导效率的影响

薛梦雅, 张 格, 吴楚天, 赵子昂

西京学院土木工程学院, 陕西 西安

收稿日期: 2024年12月20日; 录用日期: 2025年1月11日; 发布日期: 2025年1月23日

摘 要

岩石与地热井水泥表面之间的热传导效率对地热能的热传导性能起着至关重要的作用。在施工过程中, 表面处始终存在一层水膜, 虽然由于其尺度较小而常常被忽视, 但它对表面的热传导效率有着显著影响。因此, 本文从原子尺度深入探讨了水分对岩石与地热井水泥表面热传导效率的影响。我们讨论了不同厚度水膜影响下的热传导效率, 并从表面官能团的角度进一步分析了这种效率。氢键的引入揭示了表面热传导减弱的原因。本研究旨在揭示地热井热传导效率低下的内在原因, 并为施工过程中的控制指标提供指导, 从而为实现高效的热传导奠定理论基础。

关键词

表面湿度, 岩石, 水泥, 热导率, 分子动力学模拟

Effect of Interface Humidity on the Thermal Transfer Efficiency between Rock Mass and Geothermal Well Cement

Mengya Xue, Ge Zhang, Chutian Wu, Ziang Zhao

College of Civil Engineering, Xijing University, Xi'an Shanxi

Received: Dec. 20th, 2024; accepted: Jan. 11th, 2025; published: Jan. 23rd, 2025

Abstract

The heat transfer efficiency at the interface between rock masses and geothermal well cement plays a crucial role in determining the heat transfer properties of geothermal energy. During construction, a water film invariably exists at this interface, often overlooked due to its small scale,

文章引用: 薛梦雅, 张格, 吴楚天, 赵子昂. 岩石与地热井水泥表面湿度对热传导效率的影响[J]. 土木工程, 2025, 14(1): 111-116. DOI: 10.12677/hjce.2025.141014

yet it significantly impacts the interface's thermal transfer efficiency. Thus, this paper delves into the influence of moisture on the interface between rock masses and geothermal well cement at the atomic scale. We discuss the thermal transfer efficiency under the influence of water films of varying thicknesses and further analyze this efficiency from the perspective of interface functional groups. The introduction of hydrogen bonding sheds light on the reasons behind the weakened interface thermal transfer. This study aims to unveil the underlying reasons for the low thermal transfer efficiency of geothermal wells, and to provide guidance for controlling indicators during the construction process, thereby establishing a theoretical foundation for achieving efficient geothermal conduction.

Keywords

Interface Humidity, Rock Mass, Cement, Thermal Conductance, Molecular Dynamics Simulation

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

地热资源作为一种清洁能源,在全球能源格局中日益重要[1][2]。地热能的开发主要依赖于地热井,而这些井的固井过程对于确保其高效稳定运行至关重要。水泥作为地热井的重要组成部分,直接影响这些系统的热传导效率。因此,研究地热井水泥的热导率对地热能的开发和利用具有重要意义[3][4]。通过全面研究水泥的热导率及其影响因素,本研究旨在为地热井的开发和利用提供更科学合理的指导。

在地热井的开采过程中,井筒内流体与地层之间的温差会导致通过套管(包括水泥和套管)的热量传递,从而造成热量损失[5]-[7]。水泥石的热导率是影响井筒热传导能力的关键因素[8]。在实际应用中,水泥石的热导率不仅受其内部组成和结构的影响,还受外部环境条件,特别是湿度的显著影响[9][10]。湿度的变化会改变岩石和水泥石内部的水分分布。地热井完工后,井筒内流体与地层之间的温差会导致水泥内部水分分布发生变化[11][12]。这种变化不仅影响水泥石的热导率,还影响其与岩石之间的热传导效率[13][14]。表面湿度升高可能会由于水分子的存在而形成“水膜”,阻碍热量传递,导致热传导效率降低。此外,湿度的变化还会影响水泥石的微观结构和性能。水泥石是一种多孔材料,具有许多孔隙和通道,在湿度波动过程中可能会发生吸湿或解吸,导致其体积和形状发生变化,从而影响其热导率[15]。

K. Gorgulu 等研究了岩石热导率随单轴应力和含水量变化的影响。研究表明,岩石的热导率随着单轴应力和含水量的增加而增加,并在所有考虑的岩石类型中显示出退化行为[16]。孟一卓等为提高传热效率同时减少流动损失,选择合适的流体介质、设置科学的流动条件,分析了流体介质的物理性质和管径、管数、流速 3 个设计参数对传热效率和流动损失的影响[17]。张杰等为提高中深层地热井取热效率,设计了一种水平井同轴套管换热器,考虑地下渗流场作用,研究了渗流速度、渗流方向、水平段长度等因素对水平井同轴套管换热器取热性能的影响[18]。目前湿度表面湿度对岩石与地热井水泥之间热传导效率的影响的研究相对较少。

本研究探讨了水层厚度对纳米尺度表面热传输性能的影响。此外,它还从氢键的角度阐明了表面热传导的关键因素。这不仅有助于阐明湿度影响材料表面热导率的机理,还为地热井固井的设计和施工提供了理论指导和技术支持,从而促进地热能的可持续开发和利用。

2. 模型与方法

C-S-H 凝胶模型的构建主要基于 Pellenq 等人的研究,并以托贝莫来石 11 晶体为初始构型。删除模型中所有的水分子后,构建了一个 $4 \times 3 \times 1$ 超胞,并随机删除超胞中的中性硅酸盐基团,以达到 1.7 的目标 Ca/Si 比。最终模型包含 144 个钙原子、85 个硅原子和 311 个氧原子。此时,模型的密度为 1.94 g/cm^3 ,聚合度 Q 的分布为: $Q_0 = 1.2\%$, $Q_1 = 63.5\%$, $Q_2 = 35.3\%$ 。随后,采用蒙特卡罗(GCMC)方法将密度为 1.00 g/cm^3 的水分子吸附到干燥的 C-S-H 凝胶模型中,如图 1 所示。吸附后, C-S-H 凝胶模型的密度为 2.33 g/cm^3 。通过上述方法获得的 C-S-H 凝胶的化学式为 $(\text{CaO})_{1.7} (\text{SiO}_2) (\text{H}_2\text{O})_{1.75}$ 。尽管围绕 C-S-H 模型的争议很大,但它仍在推动 C-S-H 模型的研究。

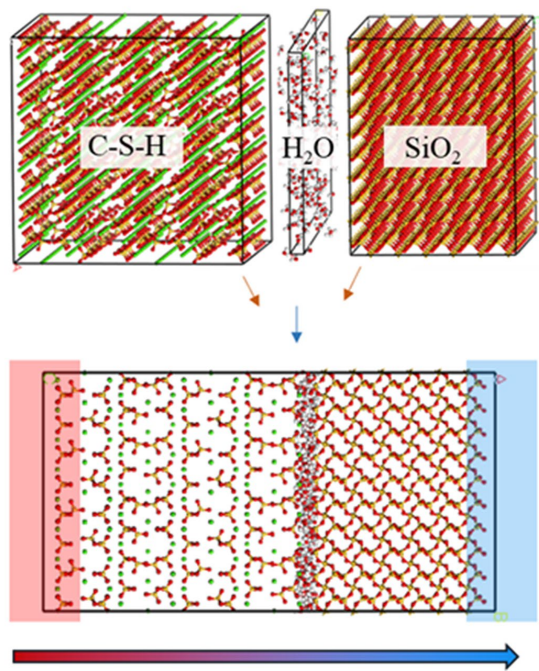


Figure 1. A simulation model diagram, including SiO_2 、 H_2O 、C-S-H and a combination model of the above three. C-S-H serves as the heat source, and SiO_2 acts as the cold source
图 1. 模拟模型示意图,包括 SiO_2 、 H_2O 、C-S-H 以及上述三者的组合模型。C-S-H 作为热源部分, SiO_2 作为冷源

如图 1 所示, SiO_2 、水分子和 C-S-H 结合成一个夹层模型。该模型还基于水箱整体受力与受限空间之间的关系,即固定右侧最外层 C-S-H,并对左侧最外层 SiO_2 施加恒定的向上速度,输出最左侧水箱在移动(加压)过程中的整体受力情况。根据压力低于 0 的变化,可以推断出水箱在自然状态下的模型尺寸。对于不同水膜厚度的模型,需要重复此方法以确认最佳模型状态。

模拟使用大型原子/分子大规模并行模拟器(LAMMPS)进行。C-S-H 和 SiO_2 使用 Clayff 力场,该力场可以捕捉原子间相互作用的本质多体项,包括键伸缩、键角弯曲、范德华力和静电相互作用。该势能已成功应用于研究水泥基材料的热导率。对于 H_2O 和羟基,应用 SHAKE 算法对氧原子和氢原子之间的伸缩项进行处理,以减少需要较短时间步长的高频振动。层间相互作用包括范德华力和静电项。前者由氧原子和碳原子之间的 Lennard-Jones 势描述。范德华力在 1.2 nm 处截断,长程库仑相互作用使用粒子-粒子、粒子-网格(PPPM)算法计算。在本研究中,热导率通过 NVE 系综中的反向非平衡分子动力学模拟计算。该方法的关键是施加热流通过系统,并通过施加的通量确定温度跃变。如图 2 所示, C-S-H/ H_2O / SiO_2

组合模型的平衡温度曲线。

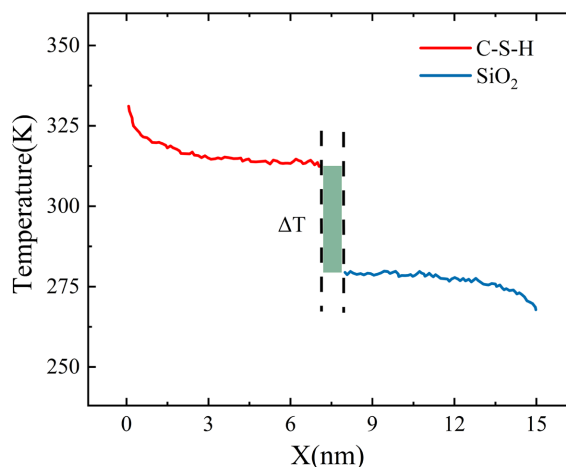


Figure 2. The equilibrium temperature curve of the C-S-H/H₂O/SiO₂ composite model. The temperature difference is obtained by averaging the common linear part between the surface temperature of C-S-H and the surface temperature of SiO₂

图 2. C-S-H/H₂O/SiO₂ 组合模型的平衡温度曲线。温度差是通过 C-S-H 表面温度和 SiO₂ 表面温度之间共同线性部分的平均值获得的

3. 结果与讨论

与固体材料(C-S-H、SiO₂)不同,液体分子的声音平均自由程非常短,因此其热导率没有明显的尺寸依赖性。如图 3(a)所示,当水层厚度超过 2 nm 时,模型表面的热导率不受水层厚度的影响。然而,在纳米尺度上,除了考虑水层厚度对 G 的尺寸效应外,还应考虑表面水结构的影响。如上所述,作用在固体表面的力通常会导致水在与其接触的表面上高密度甚至有序吸附。随着水层厚度的减小,体相水的受限程度增加,水结构的变化可能逐渐主导表面热传输。因此,对于水层厚度小于 2 nm 的情况,需要进一步考虑。

基于组合模型,我们讨论了当水层厚度小于 2 nm 时, G 与水层厚度的关系。当水层厚度超过 1.0 nm 时, G 没有显著变化。当水层厚度仅为 0.8 nm 时, G 增加了约 20%, 这与固体 G 随模型长度减小而降低的结果相反。两者的差异是由于它们热导率的主要因素不同。氧化石墨烯和水之间的 G 随水层厚度减小而异常增加,可以归因于受限空间中表面水的结构变化。

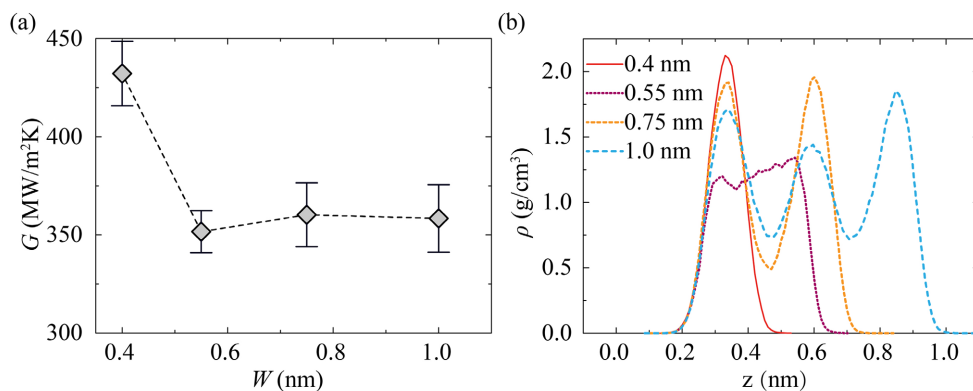


Figure 3. (a) The variation of surface thermal conductivity (G) with the thickness of the water layer (W); (b) Density distribution of water layers of different thicknesses

图 3. (a) 表面热导率(G)随水层厚度(W)的变化; (b) 不同厚度水层的密度分布

晶格引起的不同水层结构对固液热传输的影响显著,有序水层可以在一定程度上促进热传输。如图3(b)所示,厚度为2 nm的体相水的密度分布显示出三个不同的密度峰值。随着水模型厚度的减小,水层中的层数从三层减少到一层。如图4所示,当水层厚度不同时,相应表面水层中水分子的偶极角概率分布表明,水层的规整性随着其厚度的减小而逐渐增加。尤其是对于单层水,水分子的规整性显著提高。由于单层水在表面处的高度受限,氧化石墨烯的层间相互作用使水分子的分布相对稳定。此外,由于表面官能团的增加,石墨烯表面的粗糙度增强,与水形成部分氢键会破坏表面水层中氢键的形成,导致表面处的水规整性低于钯金属表面的水层。固液表面热导率对固体和液体层厚度的依赖性差异归因于它们不同的作用机制:固体层厚度决定了参与热传输的低频声子的数量,其尺寸效应由其声子平均自由程决定。当材料尺寸小于平均自由程时,热导率随模型尺寸的增大而增大;液体本身的声子平均自由程极小,导致其热性质对厚度的尺寸依赖性不显著。然而,厚度减小引起的规整性增加可以增强表面热交换。

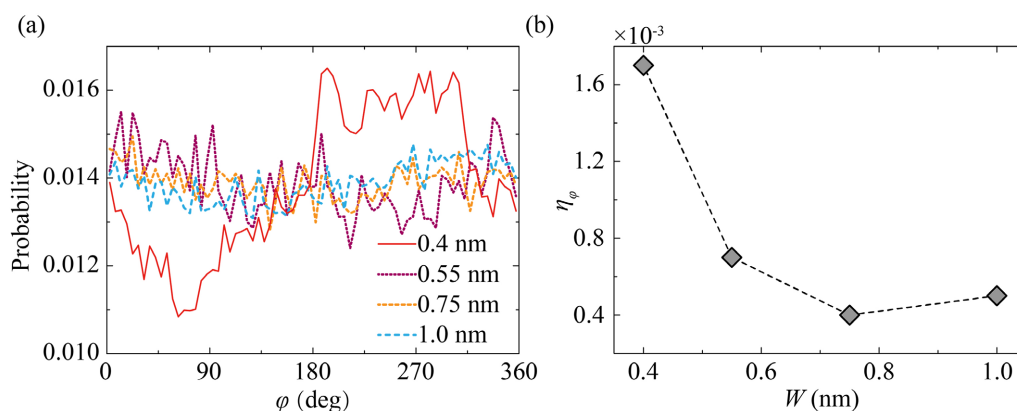


Figure 4. (a) The probability distribution of the dihedral angle θ in water layers of different thicknesses; (b) The variation of the probability distribution fluctuation value σ with the thickness of the water layer W

图 4. (a) 不同厚度水层中偶极角 θ 的概率分布; (b) 概率分布波动值 σ 随水层厚度 W 的变化

4. 结论

本研究对 CSH-水-SiO 模型进行了研究,并基于 NEMD 模拟探讨了水膜厚度和表面官能团(羟基化)对固液界面热导率的影响,得出以下结论:

(1) 水层厚度小于 2 nm 时,界面热导率受水层厚度和表面水结构的影响显著,特别是当水层厚度减至 0.8 nm 时,热导率 G 增加了约 20%。

(2) 随着水层厚度的减小,水分子的规整性增加,有序水层在一定程度上促进了热传输,尤其是在单层水情况下。

(3) 固体层厚度对热导率有显著影响,而液体(水)的热导率对厚度的依赖性不显著,但厚度减小引起的规整性增加可以增强表面热交换。

(4) 界面热导率与界面氢键密度之间存在关系,氢键密度的饱和导致界面热导率随着羟基浓度的增加而收敛,均匀分布的羟基更有利于氢键的形成,并促进热传导。

参考文献

- [1] Lin, W.J., Liu, Z.M., Wang, W.L. and Wang, G.L. (2013) The Assessment of Geothermal Resources Potential of China. *Geology in China*, **40**, 312-321.
- [2] Scott, S., Driesner, T. and Weis, P. (2015) Geologic Controls on Supercritical Geothermal Resources above Magmatic Intrusions. *Nature Communications*, **6**, Article No. 7837. <https://doi.org/10.1038/ncomms8837>

-
- [3] Yang, Y., Li, B., Che, L., Li, M., Luo, Y. and Han, H. (2024) Calculation Model and Influence Factors of Thermal Conductivity of Composite Cement-Based Materials for Geothermal Well. *Geothermal Energy*, **12**, Article No. 3. <https://doi.org/10.1186/s40517-024-00282-w>
- [4] Won, J., Lee, D., Na, K., Lee, I. and Choi, H. (2015) Physical Properties of G-Class Cement for Geothermal Well Cementing in South Korea. *Renewable Energy*, **80**, 123-131. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2015.01.067>
- [5] Hasan, A.R. and Kabir, C.S. (2010) Modeling Two-Phase Fluid and Heat Flows in Geothermal Wells. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, **71**, 77-86. <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2010.01.008>
- [6] Gould, T.L. (1974) Vertical Two-Phase Steam-Water Flow in Geothermal Wells. *Journal of Petroleum Technology*, **26**, 833-842. <https://doi.org/10.2118/4961-pa>
- [7] Yehia, T., Gasser, M., Ebaid, H., Meehan, N. and Okoroafor, E.R. (2024) Comparative Analysis of Machine Learning Techniques for Predicting Drilling Rate of Penetration (ROP) in Geothermal Wells: A Case Study of FORGE Site. *Geothermics*, **121**, Article 103028. <https://doi.org/10.1016/j.geothermics.2024.103028>
- [8] Raymond, J., Langevin, H., Comeau, F. and Malo, M. (2022) Temperature Dependence of Rock Salt Thermal Conductivity: Implications for Geothermal Exploration. *Renewable Energy*, **184**, 26-35. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2021.11.080>
- [9] Raymond, J., Therrien, R., Gosselin, L. and Lefebvre, R. (2011) Numerical Analysis of Thermal Response Tests with a Groundwater Flow and Heat Transfer Model. *Renewable Energy*, **36**, 315-324. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2010.06.044>
- [10] Murphy, H.D. and Lawton, R.G. (1977) Downhole Measurements of Thermal Conductivity in Geothermal Reservoirs. *Journal of Pressure Vessel Technology*, **99**, 607-611. <https://doi.org/10.1115/1.3454580>
- [11] Kim, K., Jeon, S., Kim, J. and Yang, S. (2003) An Experimental Study on Thermal Conductivity of Concrete. *Cement and Concrete Research*, **33**, 363-371. [https://doi.org/10.1016/s0008-8846\(02\)00965-1](https://doi.org/10.1016/s0008-8846(02)00965-1)
- [12] Schiller, P., Wahab, M., Bier, T. and Mögel, H.-J. (2022) A Model for Elucidating the Contributions of Meso- and Macropores to Water Sorption and Strain in Cementitious Materials. *Cement and Concrete Research*, **151**, Article 106589. <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2021.106589>
- [13] Zhang, K., Yuan, Q., Zuo, S., Huang, T. and Wang, Y. (2023) Pullout Behavior of Steel Fiber Embedded into Cement Matrix under Low Humidity Curing. *Cement and Concrete Research*, **172**, Article 107217. <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2023.107217>
- [14] Zhang, Z. and Angst, U. (2022) Microstructure and Moisture Transport in Carbonated Cement-Based Materials Incorporating Cellulose Nanofibrils. *SSRN Electronic Journal*. <https://doi.org/10.2139/ssrn.4040765>
- [15] Bentz, D.P., Garboczi, E.J., Haecker, C.J. and Jensen, O.M. (1999) Effects of Cement Particle Size Distribution on Performance Properties of Portland Cement-Based Materials. *Cement and Concrete Research*, **29**, 1663-1671. [https://doi.org/10.1016/s0008-8846\(99\)00163-5](https://doi.org/10.1016/s0008-8846(99)00163-5)
- [16] Görgülü, K., Durutürk, Y.S., Demirci, A. and Poyraz, B. (2008) Influences of Uniaxial Stress and Moisture Content on the Thermal Conductivity of Rocks. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, **45**, 1439-1445. <https://doi.org/10.1016/j.ijrmms.2008.02.004>
- [17] 孟卓, 赵党花, 王怡. 管道流体流动与传热效能多目标优化[J]. 化工机械, 2023, 50(6): 824-830+839.
- [18] 张杰, 王贵洋, 尹文锋, 等. 地下渗流场对中深层水平井同轴套管取热性能的影响[J]. 断块油气田, 2024, 31(3): 526-532.