

# 月壤多孔介质中水分子原位扩散规律研究进展

徐克\*, 周孙鹏, 杨阳, 段慧玲  
(北京大学, 北京 100871)

**摘要:** 建设月球永久基地是人类探索太空的一大使愿。美国、中国和欧洲地区先后提出了在2030年前后建立月球永久基地的路线图和具体计划, 而安全、稳定、可靠的水资源补给是建立月球永久基地关键前提。据近期探测分析, 月球极地的永久阴影区可能存在含量较高的天然水冰赋存。然而, 我们目前对水冰藏在地质时间尺度的演变规律了解甚少, 导致目前针对水冰规模化开发的研究缺乏可靠的初始条件和边界条件, 因此阐明稀薄水汽在月壤中的扩散规律对厘清水资源的赋存演变模式至关重要。然而, 月球永久阴影区的水冰处于深低温、极高真空度和月壤混杂的复杂极端环境, 地球条件下的扩散理论不再适用。具体而言, 极端稀薄条件下月壤多孔介质内水汽分子的热力学描述方法缺失、月壤-水汽分子的相互作用数据缺乏、月壤原位堆积结构不明、无穷大努森数下多孔介质内的扩散理论尚不健全。为了解决上述问题, 为进一步探测和开采月球水冰资源建立扎实的理论基础, 有必要加强理论方面的研究, 同时对未来的月球样品进行更多、更有针对性的分析和测试。

**关键词:** 月球; 水资源; 月壤; 多孔介质; 扩散

中图分类号: P184 文献标识码: A 文章编号: 2097-4302(2024)03-0006-11

DOI: 10.19963/j.cnki.2097-4302.2024.03.002

## Research Progress on In-Situ Water Vapor Diffusion in Lunar Regolith

XU Ke\*, ZHOU Sunpeng, YANG Yang, DUAN Huiling  
(Peking University, Beijing 100871, China)

**Abstract:** A major aspiration in human space exploration is to establish a permanent lunar base. Europe, the United States, and China have successively proposed roadmaps and specific plans for construction of permanent lunar bases around 2030, with a key prerequisite of a safe, stable, and reliable water resource supply. Recent exploration and analysis suggests that the Permanent Shadow Regions (PSRs) at the lunar poles may contain adequate amount of natural water ice. However, our understanding of the evolution of water ice in geological timescale is largely limited, leading to a lack of reliable initial and boundary conditions for research on the large-scale recovery of lunar water ice. Elucidating the diffusion mechanics of rarefied water vapor in lunar regolith is crucial for clarifying formation and evolution of lunar water ice reservoirs. However, water ice in lunar PSRs is in extreme environment of extremely low temperatures, high vacuum, and is mixed with lunar regolith, that makes the diffusion models adopted for Earth conditions inapplicable. Specifically, there is lack of rigorous thermodynamic description for extremely sparse water vapor molecules within the microstructure of porous media, lunar regolith-water interaction data, in-situ packing structure of lunar regolith, and theory for diffusion in porous media under infinitely large Knudsen number. To address the aforementioned issues and thus establish a solid theoretical foundation for further exploration and recovery of lunar water resources, it is necessary to strengthen theoretical research, and to design more targeted analysis and testing of lunar samples in the future.

**Key words:** lunar; water resources; regolith; porous media; diffusion

基金项目: “十三五”国家重点研发计划变革性技术关键科学问题重点专项青年科学家项目《月球水冰资源规模化原位开采关键基础科学问题研究》(2021YFA0717200)

引用本文: 徐克, 周孙鹏, 杨阳, 等. 月壤多孔介质中水分子原位扩散规律研究进展 [J]. 空间科学与试验学报, 2024, 1(3): 6-16.

XU K, ZHOU S P, SUN Y, et al. Research progress on in-situ water vapor diffusion in lunar regolith [J]. *Journal of Space Science and Experiment*, 2024, 1(3): 6-16.

## 0 引言

月球作为距离地球最近的天体,以其独特的空间位置、广阔的科学探索前景,成为人类地外天体探测和资源利用的首选目标。从20世纪50年代开始,月球探测一直是深空探测活动的热点。2021年6月,中国国家航天局正式发布了《国际月球科研站路线图V1.0》,提出在2030年前后集中开展国际月球科研站建设,完成月球资源原位利用、研究探索和验证的设施。美国国家航空航天局提出了旨在重返月球的Artemis计划<sup>[1]</sup>,计划于2024年前后实现载人重返月球,并将在此基础上,推进月面科研站建设任务。欧洲航天局也提出了将于2025年开发利用月球资源的计划。

月球的永久基地建设面临基本的水资源需求,如果依赖地球进行水资源补给,面临着周期长、风险大、成本高的问题,难以支持大规模的人员长期驻扎或工业需求。资源循环系统<sup>[2]</sup>可以在很大程度上降低对水资源补给的需求,但是仍需循环系统故障或泄漏情况下的可靠水资源来源。如果能在月球上找到天然的水资源并进行开发,则可以支撑安全、稳定、可靠的水资源补给,为建造大型月球基地甚至“月球城市”提供最基础的物质保障,释放月球作为人类进一步探索太空的中转站的巨大潜力。

许多观测证据<sup>[3-4]</sup>已经表明月壤中具有一定的水含量。一般认为,月球的赤道和中低纬度地区月壤中水含量很少,最多在100 ppm<sup>①</sup>量级,难以支撑规模化开采。嫦娥五号样品的测试结果也支撑这一论断:原位光谱观测表明,着陆点风化层的含水量从几乎无法检测到大约120 ppm不等<sup>[5]</sup>,着陆点的月壤羟基含量平均值为28.5 ppm<sup>[6]</sup>。对月壤样品矿物颗粒的分析表明,目前已经采样的月壤中的平均含水量约为170 ppm<sup>[7]</sup>。

但是,近期的大量证据表明,在月球极地环形山的永久阴影区中很可能有着大量的水冰赋存。由于地形原因,某些高纬度环形山内部存在阳光无法直射的永久阴影区(Permanent Shadow Regions, PSRs)<sup>[8]</sup>,如图1所示。这些区域温度极低,常年在150 K以下。在极端低温条件下,水冰的蒸汽压极低,导致升华速率极慢。在110 K以下的区域,冰的热力学寿命甚至可能比太阳系的年龄更长。这些阴影坑被称

为“冷阱”<sup>[9]</sup>;另外,地下一定深度的冰<sup>[10]</sup>能够免受光电离和光解离的作用<sup>[11]</sup>。因此,在月球极地永久阴影区月壤和其附近的深层月壤内,水冰能够在地质时间尺度下保存,可能存在较高的水冰赋容量。美国国家航空航天局利用月球陨石坑观测与传感卫星的撞击实验数据证实月球南极存在平均含量约 $5.6 \pm 2.9\%$ 的水冰资源<sup>[12]</sup>。2018年,夏威夷大学根据“月船1号”探测器的红外光谱探测数据,确认了月球极区存在大量含冰层<sup>[4]</sup>。2021年,Hayne等利用来自月球轨道勘测器的数据,考察了从1 cm到1 km范围的微小地形尺度阴影区对月球冷阱数量的贡献<sup>[8]</sup>。微型冷阱总面积约为4万平方千米,其中约60%位于月球南部,大多数位于纬度 $80^\circ$ 以上。美国在其重返月球计划中提到,要再次实现载人登月,并将在月球南极附近区域建立一个永久性基地。我国在“探月四期”任务计划中也准备在月球南极着陆,并建立长期无人值守、短期有人照料的科研基地基本型<sup>[13]</sup>。目前的理论分析认为水冰的成因可能包括<sup>[14]</sup>以下方面。

(1)高含冰彗星和陨石对月球两极的撞击<sup>[15-16]</sup>。陨石撞击能够带来水冰,也可能使已有的水冰升华损失或者埋藏在更深处,有模型显示可能导致数百米深的埋藏水冰<sup>[17]</sup>。如果能够确定高含水小天体的撞击事件,则有望发现相应的水冰藏<sup>[18]</sup>。这一来源往往可以形成局部高丰度水冰藏。此类撞击本身可以形成环形山,从而营造进一步赋存的条件。此类水冰的赋存可以通过撞击事件进行部分推测,水冰赋存深度目前难以直接探测。

(2)中低纬度跳跃迁移而来。太阳风会导致中低纬度月壤氧化物表面产生化学反应生成水分子<sup>[19-20]</sup>。在太阳照射条件下,这些水分子无法稳定附着在月壤表面,会脱附逸散到空间中。然而,在月球引力的作用下,绝大多数分子的速度无法达到逃逸条件,因此会沿着抛物线重新落回月面并再次吸附-脱附-跳跃。在这一过程中,部分水分子由于光解损失,成功达到逃逸速度并进入太空,剩下的水分子被永久阴影区的冷阱捕获。较低纬度的永久阴影区中的水分子可能含量更高<sup>[21]</sup>,此类水冰往往会形成月表的一层冰(霜)膜,难以进入月壤深处。

(3)月球早期地质活动带来。月球在其早期熔

① 1 ppm=10<sup>-4</sup>%

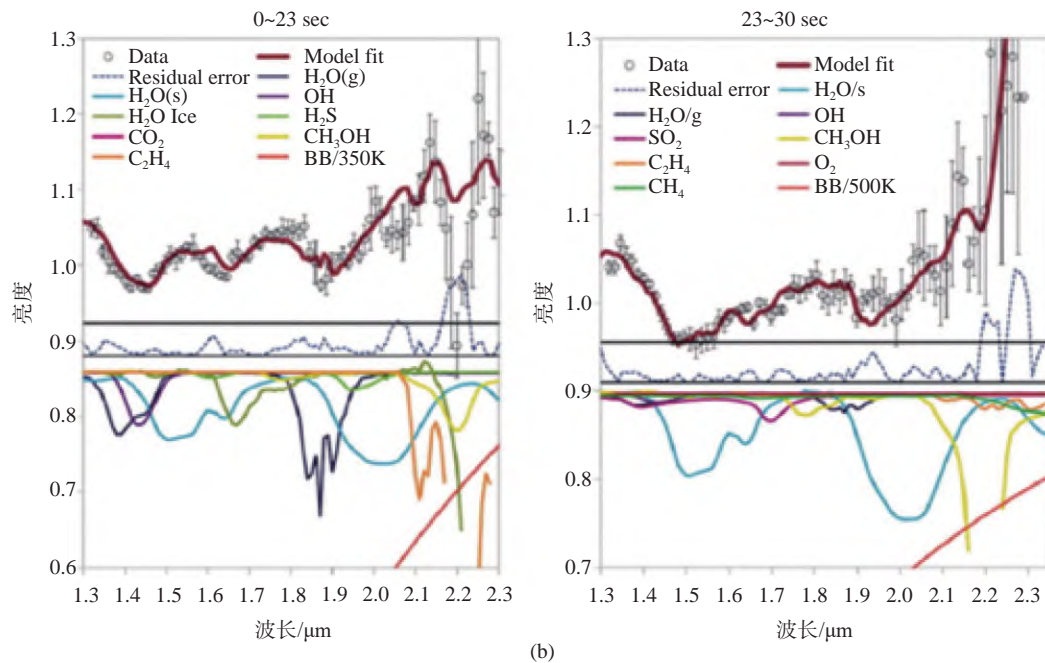
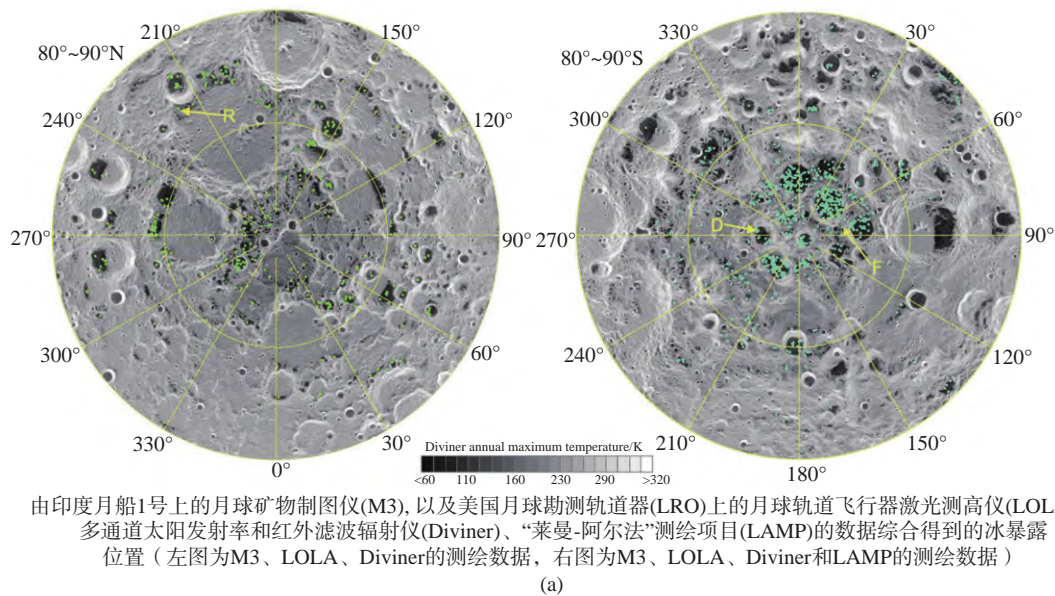


图 1 月球两极水冰分布预测图<sup>[4]</sup>(a)和月壤中水冰存在的遥感证据<sup>[12]</sup>(b)

Fig. 1 Prediction map of water and ice distribution at lunar poles<sup>[4]</sup>(a) and remote sensing evidence of water ice in lunar soil<sup>[12]</sup>(b)

融状态就含水<sup>[22]</sup>, 20 亿~40 亿年前月球地质相对活跃, 月球的火山喷发会释放岩浆的水分子, 释放出的挥发物甚至可能形成短暂的大气层<sup>[23]</sup>。这些水分子多数逃逸至宇宙空间, 但少数可以被冷阱捕获保存下来<sup>[24]</sup>。但是, 由于月球地质历史中的自转轴偏转事件, 早期捕获水的冷阱可能已经失去了赋存条件, 导致这部分来源的水冰总量大幅降低。

目前, 美国、中国和欧洲地区已经开展了一些对月球水冰进行开发的技术探索。Ethridge 等<sup>[25]</sup>

和 Cole 等<sup>[26]</sup> 通过微波加热规避了月壤导热率低的局限, 设计了一种小规模冰月壤模提取水的方案。Purrington 等<sup>[27]</sup> 提出使用直接表面加热的方案有效地开采月球风化层顶部 2 cm 处的冰。针对规模化水冰开采, 2014 年, Walton 等<sup>[28]</sup> 提出了一种类似于石油采集井的想法, 如图 2(a) 所示, 用以从月球地下原位提取冷冻挥发物。2019 年, 科罗拉多矿业大学<sup>[29]</sup> 提出了一种主体为热提取帐篷的月球水冰开采方案, 如图 2(b) 所示。钱学森空间技术实验室<sup>[30]</sup>

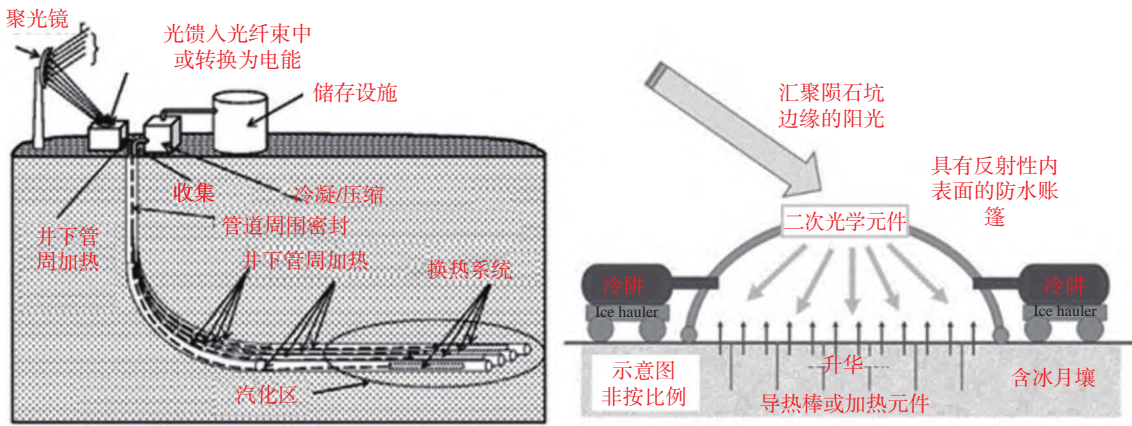


图 2 井的一种可能构造图<sup>[28]</sup>(a)和二次聚光镜聚光加热提取亚表层水资源的热提取帐篷(b)<sup>[29]</sup>  
 Fig. 2 A possible structural map of the well<sup>[28]</sup>(a) and a heat extraction tent (b) for extracting subsurface water resources by condensing and heating with a secondary condenser<sup>[29]</sup>

提出了光能供热、钻取加热一体化的理论设计,如图 3 所示,在含水率为 5% 的样品中获得了每小时 30 g 以上的水提取速率,每立方米每小时能提取 4 kg 的水,并在后续成功优化了水冰提取效率<sup>[31-32]</sup>。

然而,由于目前对水冰原位赋存分布还没有明确的结论,上述的开采方案都基于一些假设性的初始条件和边界条件展开。水冰成藏后因暴露在高真空、深低温环境中,会一方面逐渐向太空逸散,另一方面通过升华-扩散-再结晶的方式向周围月壤运移,

扩展赋存范围、降低局部赋存丰度。在漫长的地质时间后,水冰分布会和刚刚成藏时非常不同。因此,尽管可以根据彗星撞击的时间和强度等数据推测水冰初始的空间分布,但是仍然需要建立适用的数学模型,对水冰在月壤中空间分布的地质时间尺度演化规律进行刻画,从而获得当前的水冰空间分布,包括其深部丰度、赋存范围等信息。这需要阐明水汽在月壤多孔介质的扩散规律、刻画其热力学状态,并建立其地质时间尺度演化的基本控制方程。

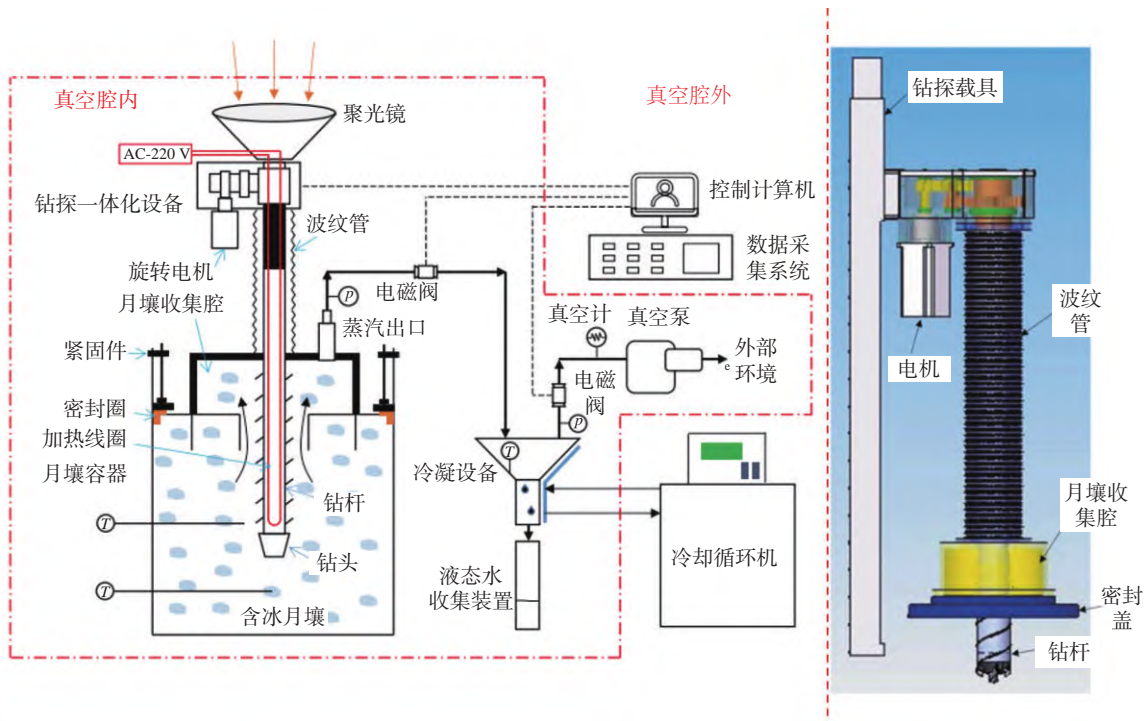


图 3 钱学森空间技术实验室光热钻探一体化实验系统<sup>[32]</sup>  
 Fig. 3 Integrated experimental system of photothermal drilling in China Academy of Space Technology<sup>[32]</sup>

月球的水冰资源主要分布在极区环形山的永久阴影区内,该区域主要的赋存环境为:深低温(40 K)、高真空( $10^{-9}$  Pa)和月壤混杂或深埋于月壤下(有一定争议,但符合主流的水冰来源假说)。这样的极端环境打破了现有水冰资源规模化开采的成熟理论和技术的适用前提。因此,阐明稀薄水汽在月壤中的传输机理,是实现月球水冰资源规模化开采的关键前提。基于此,本文将从稀薄水汽运移机理出发,对当前的研究进展进行简要的综述。

## 1 月球极区水冰赋存状况

水冰在月壤中的演化和地球上类似的地质资源不同。地球上地质活动较多,地下岩土多孔介质中的流体常常处于流动状态甚至经历较为剧烈的环境变化,因此油气、可燃冰等地质资源的再分布往往和流动、反应息息相关。然而,在月球极区永久阴影区的环境内,月壤中没有流动介质,月球在最近 20 亿年也缺乏地质活动,因此水冰只能依靠升华-扩散-再凝结的方式进行缓慢的再分布。针对这种过程,国内外部分课题组近几年在碳封存场景的研究中有所涉及<sup>[33-36]</sup>,但地下环境的基本控制方程不同于月球场景。

由于浓度的存在梯度,水汽一方面逐渐向太空逸散,另一方面通过升华/脱附-扩散-再结晶/吸附的方式向周围月壤运移,扩展赋存范围、降低局部赋存丰度。在漫长的地质时间后,水冰分布会和刚刚成藏时不同。在低温下,月壤内的水分子绝大多数时间都停留在月壤表面,存在形态可能有三种:冰、物理或化学吸附在月壤表面以及吸附在该分子层之上的冰簇。水分子的停留时间随温度升高而有数量级的降低,甚至在温度足够低时,水冰在地质时间尺度稳定。基于这个特点,现有的研究建立了温度梯度主导的月壤内水冰运移模型,并揭示了冰泵效应<sup>[37]</sup>——由于阳光的反射与地热<sup>[38]</sup>,永久阴影区存在随深度衰减的温度昼夜振荡,这导致水冰不断向更深的地层泵送,最后富集于某地层。

现有月壤水冰运移模型重点研究升华-扩散-再结晶的相变环节而对扩散环节缺乏研究。但考虑到月壤颗粒不同位点固有的吸附热差别会带来停留时间指数级别的变化<sup>[39]</sup>,以及研究的时间尺度,这一扩散机制可能很重要。阐明月球水冰通过稀薄水汽扩散方式在地质时间尺度进行运移的规律,对于建立水冰成藏和演化的模型至关重要。

## 2 月壤中稀薄水汽分子扩散的极端条件和研究方法

### 2.1 极高真空度的多孔介质扩散环境

阿波罗飞船测量的数据表明<sup>[40]</sup>,月球大气非常稀薄,测量的分子数密度在 $10^4\sim 2\times 10^5/\text{cm}^3$ ,比地球低了约 14 个数量级,而水分子是其中的一部分。在如此稀薄的条件下,气体在月壤中的运移规律和在地球土壤中大不相同。在月球的环境下,式(1)可以计算大气分子的平均自由程约为 $7\times 10^6\sim 1.4\times 10^8\text{ m}$ <sup>[41]</sup>。

$$\bar{\lambda} = \frac{1}{\sqrt{2}\pi d^2 n} \quad (1)$$

式中, $\bar{\lambda}$ 为平均自由程; $d$ 为分子直径; $n$ 为分子数密度。

阿波罗飞船测量的数据表明<sup>[40]</sup>,月壤的粒径中位数为 100  $\mu\text{m}$ 。一般用无量纲数  $Kn$  数,即自由分子的平均自由程与运动特征尺度之比衡量气体的特征,于是得到  $Kn$  值为 $7\times 10^{10}\sim 1\times 10^{12}$ 。这一极端  $Kn$  数已经大大超过了地球上相关高  $Kn$  场景,如页岩气开发<sup>[42]</sup>、航天器<sup>[43]</sup>等。

月壤中趋于无穷大的  $Kn$  数意味着气体分子之间几乎完全没有碰撞,水分子-月壤表面的相互作用完全决定了其扩散系数和其他传递性质,基于自由分子碰撞的经典热物性理论失效。然而在深低温、高真空条件下,气体和星壤颗粒表面的碰撞和吸附-脱附作用以及多孔介质复杂几何结构对扩散的影响仍然没有明确的模型和结论。

### 2.2 测试粒子蒙特卡罗方法

当气体稀疏到一定程度时,剪切应力和热通量无法用更低阶的物理量表示,守恒方程不封闭。当宏观变量梯度尺度与分子平均自由程处于同一数量级甚至更小时,连续介质假设失效,不能应用连续介质方程。因此,对于月壤介质中挥发分扩散的问题,目前只能依赖基于粒子的方法。基于分子运动的混沌性假设,可以将使用蒙特卡罗方法求解稀薄气体流动问题等价于求解随机变量的期望<sup>[44]</sup>。处于  $Kn$  趋于无穷的流动是最简单的稀薄气体流动,分子间不会相互碰撞,彼此影响,因此可以逐个随机抽样气体分子,跟踪其轨迹,最后对大量抽样分子进行统计,实现对气体集体的描述。这就是测试粒子蒙特卡罗方法(Test Particle Monte Carlo method, TPMC),它能够很好地模拟极端真空度下的稀薄气体。

TPMC 方法早在 1960 年就有学者用以计算管道的分子流速<sup>[45]</sup>。它在真空元件<sup>[46]</sup>、航空航天<sup>[47]</sup>、

微机电系统<sup>[48]</sup>、化工生产<sup>[49]</sup>等涉及真空系统稀薄流的领域被广泛使用。具体来说,TPMC方法需要给定气体通过的容器几何形状,计算大量虚拟气体分子的轨迹,从而计算需要的物理量,比如直接得到毛细管出口分子速度的角度分布<sup>[48]</sup>、得到沸石中气体的扩散系数以及微通道迂曲度<sup>[50]</sup>、通过分析轨迹计算卫星因分子碰撞的阻力系数<sup>[47]</sup>、预设壁面吸附概率后,追踪管道内能够计算气体分子通过真空元件管道的传输几率,进而计算流导<sup>[46]</sup>。欧洲核子研究中心开发了一套基于TPMC方法的程序Molflow+用于粒子加速器<sup>[51]</sup>,追踪虚拟气体分子从源(气体注入或热放气位置)到吸收(通常是真空泵)的轨迹,通过放置在不同位置的计数器,计算整个流场中诸如压力、密度和碰撞率等物理量。

综上所述,TPMC方法能够通过模拟稀薄气体分子的运动轨迹,为极端真空条件下的气体流动和扩散问题提供有效的计算手段,可以被用于多孔介质内高 $Kn$ 扩散的研究。

### 3 月壤中极端稀薄水汽扩散的理论挑战

在气体扩散的非克第二定律<sup>[52]</sup>中,有:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \nabla^2 c \quad (2)$$

式中, $c$ 为气体浓度(正比于分子数密度 $n$ ); $t$ 为时间; $D$ 为扩散系数。

对于极端真空度下多孔介质内的气体扩散过程,扩散系数 $D$ 和分子数密度 $n$ 这两个物理量都缺乏准确描述模型。

#### 3.1 极高真空度下多孔介质内气体分子的热力学描述

热力学层面,单孔隙内极低的分子数导致平衡分布规律在孔隙尺度失效。月球环境下数百微米尺寸的月壤孔隙中,气态的水分子个数约有10~100数量级。分子数量之低,导致基于热力学平衡和连续介质假设的很多理论失效。目前常用DSMC等粒子法描述高 $Kn$ 数稀薄气体的热力学状态。这对于开放空间(如航天器外壳附近<sup>[53]</sup>)或者 $Kn < 10$ 的情形(如页岩纳米孔隙结构<sup>[54]</sup>)是适用的,且对于真空度极高的环境,DSMC中的碰撞项可以省去<sup>[55]</sup>。但是月壤环境中每个受限孔隙空间内只有极少量自由分子,由于热力学系统的某个物理量 $B$ 的涨落, $\sigma_B^2/B^2$ 与粒子数 $N$ 成反比<sup>[56]</sup>,其中, $\sigma_B^2$ 为 $B$ 的方差,单个孔中如此少的粒子系统拥有非常大的涨落,由此

得到的分子数密度并没有统计意义,此时传统理论不具备统计意义的有效性。

而一个包含具有统计意义数量分子的系统,则必然包含具有统计意义数量的孔隙,即气体分子的“连续介质尺度”和多孔介质的“表征单元体”(Representative Elementary Volume,REV)尺度<sup>[57]</sup>紧密耦合在了一起。因此,孔隙几何结构对高度稀薄的气体系统的平衡会产生影响,其热力学量的理论表达可能会和开放空间中存在较大差别。例如,在高真空容器中,从器壁发出的气体分子在空间中形成的压力分布是非均匀的,空间压力分布取决于真空容器形状,放在不同位置的工件受到来自容器壁分子碰撞数并不相同<sup>[58]</sup>。因此,有必要对月壤中极端稀薄挥发分的热力学刻画理论进行重新探讨,建立对其进行升尺度等效描述方法的理论探索。

#### 3.2 月壤表面-水汽分子微观相互作用

由于气体在多孔介质内的扩散由气体-壁面相互作用决定,表面粗糙度、反射规律、表面吸附、表面电荷等与扩散系数息息相关。

(1)表面粗糙度。如图4(a)所示,管道表面设置为某种分形形状,通过改变分形维数改变粗糙度,通过蒙特卡罗模拟分析表面粗糙度对扩散的影响。结果表明,粗糙表面会降低扩散系数,但对自扩散系数与输运扩散系数存在差别<sup>[49]</sup>,对不同维度的扩散系数也存在差别<sup>[59]</sup>。

(2)反射规律。粒子与壁面碰撞后,与壁面相互作用,交换动量和能量,可能会吸附在其上,而后反

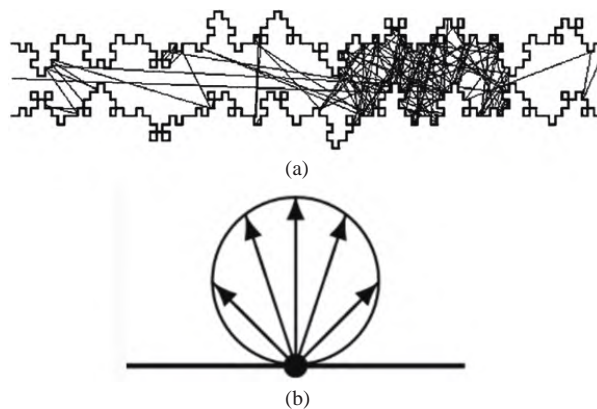


图4 粒子在分形表面管道的轨迹(a)<sup>[49]</sup>和脱附分子速度方向角的余弦分布(b)<sup>[69]</sup>

Fig. 4 Trajectory of particles on a fractal surface pipeline (a)<sup>[49]</sup> and desorption molecular velocity square Cosine distribution of azimuth angle (b)<sup>[69]</sup>

射。该过程非常复杂,最常见的两种模型是镜面反射模型与漫反射模型,也可以将两种模型以某种比例结合在一起。通过蒙特卡罗模拟发现,粒子扩散系数与该比例有关<sup>[60]</sup>。对于高温场景,如电离层大气等,镜面反射比例较高。然而,对于月球高纬度冷阱区极端低温的环境而言,水蒸气分子接触冰表面后,几乎一定会被表面捕获<sup>[61]</sup>,因此可假设气体分子会与固体表面达到热平衡。这种情况下,分子脱附速度与分子接近表面的入射速度无关,符合漫反射的假定。漫反射情形下分子的速度方向角(与 $z$ 轴的夹角)分布如图 4(b)所示,称为 Knudsen 余弦分布<sup>[62]</sup>。

(3)表面吸附。分子与壁面的吸附时间与吸附概率将在相当程度上影响扩散时间。当气体分子在壁面的停留时间远大于运动时间时,粒子运动时间将主要由吸附时间决定。在这种情况下,粒子的停留时间分布甚至会决定扩散的标度率<sup>[63]</sup>。吸附时间与温度、表面矿物化学性质等息息相关,吸附时间往往服从指数分布<sup>[64]</sup>。

(4)表面电荷。月壤由大量形状不规则的颗粒组成,在太阳风和太阳辐射的作用下带静电<sup>[65]</sup>。静电场能够改变气体在固体表面的吸附量与解吸速率等性质<sup>[66]</sup>。另外,静电作用能够通过改变分子轨迹,改变有效扩散系数,如带电多孔材料中的电解质溶液、阴离子和阳离子的有效扩散系数相比不带电的情况可以增加多达 20%~30%<sup>[67]</sup>。

为了明确上述气体-壁面微观相互作用对月壤中水分子扩散的影响,非常有必要加强对月壤表面物理化学性质<sup>[68]</sup>的直接实验检测和分析。

### 3.3 多孔介质结构对稀薄气体扩散的影响

月壤堆积形成多孔介质,内部空间由大量连通的孔隙和喉道构成<sup>[70]</sup>。一般而言,多孔介质内不同位置的孔隙尺寸、吸附性质等有所不同,其孔隙结构极大程度上规范了其中的物质和能量运移规律<sup>[71]</sup>。研究多孔介质结构对其中流动、物质运移和反应的影响规律已经逐渐成为一门独立的学科:渗流力学或渗流物理学<sup>[72]</sup>。理论和数值研究中,常常使用计算流体力学模拟<sup>[73]</sup>或离散化的孔隙网络模型<sup>[74]</sup>(见图 5)对微观的物质运移进行研究,并通过理论<sup>[75-76]</sup>、实验<sup>[77]</sup>等方法将其上升到可以进行地质过程直接模拟的“表征单元体”尺度<sup>[57]</sup>,从而进一步加以应用。

稀薄气体在多孔介质中的运移扩散在星际资源开发之外也存在于许多场景中,如在机电系统的

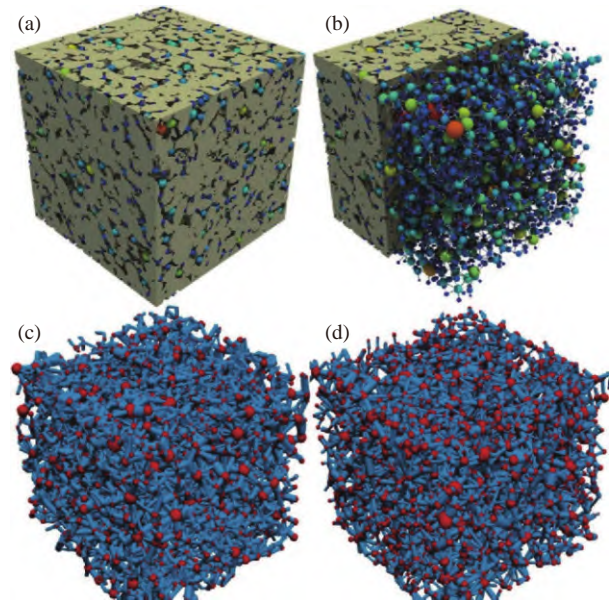


图 5 对典型岩土多孔介质的孔隙网络建模<sup>[78]</sup>

Fig. 5 Modeling the pore network of typical geotechnical porous media<sup>[78]</sup>

微通道<sup>[48]</sup>和化工生产需要的沸石<sup>[49]</sup>,彗星受热导致彗核水冰升华并通过表层外逸<sup>[79]</sup>等场景。相关研究关注稀薄流在多孔介质中的等效传质性质,比如扩散系数与等效渗透率<sup>[79]</sup>。具体来说,文献往往讨论几何结构<sup>[39,50]</sup>和气体-壁面相互作用<sup>[49,59-60]</sup>对传质性质的影响。为了得到对多孔介质传质性质的描述,研究者常常将复杂的多孔介质抽象为简单形状<sup>[50]</sup>。比如,有些学者直接使用直管来模拟多孔介质中的孔隙,从而能够用数学手段解析地表示其中稀薄流的扩散系数<sup>[80-82]</sup>。然而,多孔介质中不同的微观结构内存在不同的尺度。稀薄气体分子在多孔介质中的轨迹就是多段与壁面碰撞点之间的连线,因此多孔介质的几何结构会影响稀薄气体的传质过程,简单的直通道模型存在较大局限。对于更复杂的结构,可以使用 TPMC 方法模拟扩散,并通过爱因斯坦关系求出扩散系数<sup>[50]</sup>。

对于多孔介质内非稀薄气体的菲克扩散,一般使用“迂曲度”, $\tau$ (实际扩散路径长度与宏观扩散路径长度之比),来表征几何结构对扩散路径的影响<sup>[83]</sup>,如式(3)所示。

$$D/D_0 = \phi/\tau^2 \quad (3)$$

式中, $D$ 为多孔介质的宏观扩散系数; $D_0$ 为微观尺度扩散系数,其取决于分子自由程<sup>[84]</sup>; $\phi$ 为孔隙度。

然而,对于稀薄气体,由于实际分子自由程取决

于多孔介质内的孔隙,而孔隙是多尺度的,因此微观尺度扩散系数以及迂曲度不存在清晰的定义。Zalc等<sup>[85]</sup>指出,对于堆积球体系中的稀薄气体扩散,不同定义下的迂曲度能够相差1.4倍,且与非稀薄扩散的迂曲度不同。Gao等<sup>[86]</sup>对无序纳米多孔材料的稀薄气体进行输运建模,发现相比迂曲度,配位数是更鲁棒的参数。这些研究表明,迂曲度不适合用于表征稀薄状态下多孔介质几何结构对扩散的影响,需要建立物理意义更为扎实明确的新表征方法。

此外,目前我们虽然已经获得了较多来自阿波罗任务和嫦娥任务的月壤样本<sup>[40,87]</sup>,但这些样本都经历了挖掘/钻取后带回的过程,原本的堆积状况已经改变,使得我们尚未得到月球表面月壤的原位多孔结构。由于月壤存在表面电荷等特殊性质,我们无法确认套用地球上的无电荷堆积情形的结论<sup>[88]</sup>是否可行。

#### 4 结论和展望

月球中高纬度永久阴影区内可能赋存着来源于小天体撞击、太阳风和月球早期地质活动带来的水冰赋存,有可能支持水的规模化开发。明确月壤中的水汽扩散规律,是正确推演地质时间尺度的水冰藏演化规律前提,并最终为月球水冰资源规模化开发的技术研究提供准确的初始条件、边界条件和控制方程。

水冰赋存目标区域的水冰处于高真空、深低温、和月壤混杂的环境。在这样的极端特殊条件下,水分子的自由程远远大于月壤孔隙尺度( $Kn$ 趋于无穷大),水分子和其他挥发分的扩散完全是由其与月壤复杂多孔结构和表面相互作用决定的。单元几何结构内极其稀少的水分子总量带来体系的大涨落和非平衡。气体分子在月壤表面的反射、吸附、相变、化学反应决定了微观上每一次相互作用的规律。复杂孔隙网络结构影响了气体在月壤复杂介质中的宏观的等效扩散性质。针对月壤中的稀薄气体输运,未来还需要进一步探索其物理规律、建立具有更清晰物理意义的新模型。目前,对月壤中水分子扩散的研究主要受到如下局限:

(1)尚缺乏目标区月壤的几何结构、表面形态、表面物理化学性质等的直接信息,因此难以获得水分子-月壤表面微观相互作用的参数,如反射规律和吸附规律等。这一局限将会随着未来嫦娥任务逐渐接近水冰开发目标区而得到改善。

(2)尚缺乏目标区月壤自然堆积状态下的结构信息,因此难以获得准确的月壤多孔介质的拓扑特征,进行升尺度的研究,需要对月壤结构进行原位的观测和表征。

(3)对于多孔介质内极稀薄气体的热力学描述方式,目前还没有很好的理论框架。

(4)对于多孔介质复杂结构对稀薄气体扩散的规范模式,目前只有针对极特殊结构(如圆管)的理论。然而,现有简单模型并不能体现多孔介质的复杂几何结构以及气体-壁面的相互作用对稀薄气体扩散的影响。而对于更一般的结构往往局限于使用TPMC方法进行具体案例的数值研究,缺乏公认可靠和高效的研究框架。对于经验性的描述方法而言,经典的多孔介质迂曲度概念在物理上不适用于极端稀薄情形。

为了克服上述局限,一方面需要加强对于稀薄挥发分在多孔介质中的热力学表征与扩散规律方面的理论研究,另一方面需要更有针对性地开展月球探测和月球样品研究。相关理论和实验研究将极大助力我国月球科研站、载人登月和地月经济圈建设的安全、稳定水资源供应。此外,相关针对月球水资源的研究成果还可以拓展到其他无大气星体,如水星、小行星、柯伊伯带星体等场景,为更大范围内研究太阳系演化和资源分布提供理论基础。

#### 致谢

感谢2024年7月19日中国宇航学会空间科学与试验专委会“太空资源开发与利用”专题研讨会上王巍院士和其他在场院士专家的指导和鼓励。感谢中国空间技术研究院钱学森空间技术实验室姚伟团队在本文诸多思考成型过程中的研讨和在项目推进上的大力支持。感谢北京大学王圣凯研究员、上海交通大学吴睿副教授在合作项目推进上的高效配合和富有启发性的讨论。

#### 参 考 文 献

- [1] SMITH M, CRAIG D, HERRMANN N, et al. The Artemis program: An overview of NASA's activities to return humans to the moon[C]. Proceedings of the 2020 IEEE Aerospace Conference, F, 2020.
- [2] ELLERY A. Sustainable in-situ resource utilization on the moon[J]. Planetary and Space Science, 2020, 184: 104870.
- [3] FELDMAN W C, MAURICE S, BINDER A B, et al. Fluxes of fast and epithermal neutrons from lunar prospector: Evidence for water ice at the lunar poles[J]. Science, 1998, 281(5382):

- 1496-1500.
- [ 4 ] LI S, LUCEY P G, MILLIKEN R E, et al. Direct evidence of surface exposed water ice in the lunar polar regions[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2018, 115(36): 8907-8912.
- [ 5 ] LIN H, LI S, XU R, et al. In situ detection of water on the moon by the Chang'E-5 lander[J]. *Science Advances*, 2022, 8( 1 ) : eabl9174.
- [ 6 ] LIU J, LIU B, REN X, et al. Evidence of water on the lunar surface from Chang' E-5 in-situ spectra and returned samples[J]. *Nature Communications*, 2022, 13(1): 3119.
- [ 7 ] ZHOU C, TANG H, LI X, et al. Chang' E-5 samples reveal high water content in lunar minerals [J]. *Nature Communications*, 2022, 13(1): 5336.
- [ 8 ] HAYNE P O, AHARONSON O, SCHÖRGHOFER N. Micro cold traps on the Moon[J]. *Nature Astronomy*, 2020, 5(2): 169-175.
- [ 9 ] VASAVADA A R, PAIGE D A, WOOD S E. Near-surface temperatures on mercury and the Moon and the stability of polar ice deposits[J]. *Icarus*, 1999, 141(2): 179-193.
- [10] CAMPBELL D B, CAMPBELL B A, CARTER L M, et al. No evidence for thick deposits of ice at the lunar south pole[J]. *Nature*, 2006, 443(7113): 835-837.
- [11] BENNA M, HURLEY D M, STUBBS T J, et al. Lunar soil hydration constrained by exospheric water liberated by meteoroid impacts[J]. *Nature Geoscience*, 2019, 12(5): 333-338.
- [12] COLAPRETE A, SCHULTZ P, HELDMANN J, et al. Detection of water in the LCROSS ejecta plume[J]. *Science*, 2010, 330(6003): 463-468.
- [13] 中国探月工程四期任务获批复 [J]. *太空探索*, 2022, (2): 5.
- [14] STEPHANT A, ROBERT F. The negligible chondritic contribution in the lunar soils water[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2014, 111(42): 15007-15012.
- [15] KRING D A, KRAMER G Y, BUSSEY D B J, et al. Prominent volcanic source of volatiles in the south polar region of the Moon[J]. *Advances in Space Research*, 2021, 68(11): 4691-4701.
- [16] BADIYUKOV D D. Micrometeoroids: The Flux on the moon and a source of volatiles[J]. *Solar System Research*, 2020, 54( 4 ) : 263-274.
- [17] CANNON K M, DEUTSCH A N, HEAD J W, et al. Stratigraphy of ice and ejecta deposits at the lunar poles [J]. *Geophysical Research Letters*, 2020, 47(21).
- [18] SVETSOV V V, SHUVALOV V V. Water delivery to the moon by asteroidal and cometary impacts[J]. *Planetary and Space Science*, 2015, 117: 444-452.
- [19] XU Y, TIAN H C, ZHANG C, et al. High abundance of solar wind-derived water in lunar soils from the middle latitude[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2022, 119(51): e2214395119.
- [20] LI S, POPPE A R, ORLANDO T M, et al. Formation of lunar surface water associated with high-energy electrons in Earth's magnetotail[J]. *Nature Astronomy*, 2023, 7(12): 1427-1435.
- [21] MOORES J E. Lunar water migration in the interval between large impacts: Heterogeneous delivery to permanently shadowed regions, fractionation, and diffusive barriers[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2016, 121(1): 46-60.
- [22] 惠鹤九. 月球内部水的研究进展[J]. *矿物岩石地球化学通报*, 2017, 36(5): 706-713, 696.
- [23] NEEDHAM D H, KRING D A. Lunar volcanism produced a transient atmosphere around the ancient Moon[J]. *Earth and Planetary Science Letters*, 2017, 478: 175-178.
- [24] ALEINOV I, WAY M J, HARMAN C, et al. Modeling a transient secondary paleolunar atmosphere: 3-D Simulations and Analysis[J]. *Geophysical Research Letters*, 2019, 46( 10 ) : 5107-5116.
- [25] ETHRIDGE E C, KAUKLER W. Microwave extraction of water from lunar regolith simulant[J]. *AIP Conference Proceedings*, 2007, 880(1): 830-83.
- [26] COLE J D, LIM S, SARGEANT H M, et al. Water extraction from icy lunar simulants using low power microwave heating[J]. *Acta Astronautica*, 2023, 209: 95-103.
- [27] PURRINGTON C, SOWERS G, DREYER C. Thermal Mining of volatiles in lunar regolith simulant[J]. *Planetary and Space Science*, 2022, 222: 105550.
- [28] WALTON O. Wells for In-situ extraction of frozen volatiles from subsurface lunar ( or Planetary ) Regolith [C]//7th Symposium on Space Resource Utilization, 2014.
- [29] SOWERS G F, DREYER C B. Ice mining in lunar permanently shadowed regions[J]. *New Space*, 2019, 7(4): 235-244.
- [30] 姚伟, 王超, 李啸天, 等. 一种地外天体表面水资源获取钻具装置及钻取方法 [Z]. 2018
- [31] HE L, WANG C, ZHANG G, et al. A novel auger-based system for extraterrestrial in-situ water resource extraction[J]. *Icarus: International Journal of Solar System Studies*, 2021, 367: 114552.
- [32] LIU Y, WANG C, PANG Y, et al. Water extraction from icy lunar regolith by drilling-based thermal method in a pilot-scale unit[J]. *Acta Astronautica*, 2023, 202: 386-399.
- [33] XU K, MEHMANI Y, SHANG L, et al. Gravity - induced bubble ripening in porous media and its impact on capillary trapping stability[J]. *Geophysical Research Letters*, 2019, 46(23): 13804.
- [34] XU K, BONNECAZE R, BALHOFF M. Egalitarianism among bubbles in porous media: An ostwald ripening derived anticoarsening phenomenon[J]. *Physical Review Letters*, 2017, 119(26): 264502.
- [35] DE CHALENDAR J A, GARING C, BENSON S M. Pore-scale modelling of Ostwald ripening[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2018, 835: 363-392.
- [36] LI Y, GARING C, BENSON S M. A continuum-scale representation of Ostwald ripening in heterogeneous porous media[J]. *Breast Cancer Online*, 2022, 889: A14.
- [37] SCHORGHOFER N, AHARONSON O. The lunar thermal ice pump[J]. *The Astrophysical Journal*, 2014, 788(2): 169.
- [38] JIANG C, YAO S. 1D geothermal inversion of the lunar deep

- interior temperature and heat production in the equatorial area[J]. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 2019, 289: 106-114.
- [39] LI Y, WEN Z, HE C, et al. The mechanism for the barrier of lunar regolith on the migration of water molecules[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2023, 128(3): e2022JE007254.
- [40] HEIKEN G H, VANIMAN D T, FRENCH B M. Lunar sourcebook: A user's guide to the Moon [M]. Cambridge University Press, 1991.
- [41] 向钢, 聂娅. 热学 [M]. 北京: 科学出版社, 2017.
- [42] JIANG L, SUN H, YANG S, et al. Investigation on multi-scale pore seepage model of shale gas reservoir considering diffusion and slippage effect[J]. *Microfluidics and Nanofluidics*, 2020, 24(11): 83.
- [43] NABAPURE D, K R C M. DSMC investigation of rarefied gas flow over a 2D forward-facing step: Effect of Knudsen number[J]. *Acta Astronautica*, 2021, 178: 89-109.
- [44] 吴其芬. 稀薄气体动力学 [M]. 长沙: 国防科技大学出版社, 2004.
- [45] DAVIS D H. Monte Carlo calculation of molecular flow rates through a cylindrical elbow and pipes of other shapes[J]. *Journal of Applied Physics*, 1960, 31(7): 1169-1176.
- [46] KIESEL S, TRÜTZSCHLER A, BERGNER K. Boosting sticking-dependent transmission studies to a single TPMC simulation[J]. *Vacuum*, 2023, 210: 111744.
- [47] JIN X, HUANG F, CHENG X, et al. Monte Carlo simulation for aerodynamic coefficients of satellites in low-earth orbit[J]. *Acta Astronautica*, 2019, 160: 222-229.
- [48] 雷敏. 基于直接仿真蒙特卡洛方法的微管道出口亚音速流场的研究 [D]. 武汉: 华中科技大学, 2018.
- [49] MALEK K, COPPENS M O. Effects of surface roughness on self- and transport diffusion in porous media in the knudsen regime[J]. *Physical Review Letters*, 2001, 87(12): 125505.
- [50] LIU J, WEI J. Knudsen diffusion in channels and networks[J]. *Chemical Engineering Science*, 2014, 111: 1-14.
- [51] KERSEVAN R, ADY M. Recent developments of Monte-Carlo codes molflow+ and synrad+ [C]//10th International Particle Accelerator Conference. 2019, 6.
- [52] BIRD R B, STEWART W E, LIGHTFOOT E N. Transport phenomena [M]. 2<sup>nd</sup> ed. US: John Wiley & Sons, 2002.
- [53] TANI H, OHMARU T. Hybrid continuum/rarefied flow simulations of plume interaction with full-sized spacecraft[J]. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 2022, 59(2): 660-673.
- [54] GENG L, LI G, ZITHA P, et al. A diffusion-viscous flow model for simulating shale gas transport in nano-pores[J]. *Fuel*, 2016, 181: 887-894.
- [55] GOLDSTEIN D B. Rarefied gas dynamics of water vapor on the Moon[J]. *AIP Conference Proceedings*, 2003, 663(1): 712-719.
- [56] 汪志诚. 热力学·统计物理. 第5版 [M]. 北京: 高等教育出版社, 2013.
- [57] BACHMAT Y, BEAR J. Macroscopic modelling of transport phenomena in porous media. 1: The continuum approach[J]. *Transport in Porous Media*, 1986, 1(3): 213-240.
- [58] 崔遂先, 王荣宗. 超高真空 [M]. 北京: 化学工业出版社, 2013.
- [59] RUSS S, ZSCHIEGNER S, BUNDE A, et al. Lambert diffusion in porous media in the Knudsen regime: Equivalence of self-diffusion and transport diffusion[J]. *Physical Review E*, 2005, 72(3): 030101.
- [60] ARYA G, CHANG H C, MAGINN E J. Knudsen Diffusivity of a hard sphere in a rough slit pore[J]. *Physical Review Letters*, 2003, 91(2): 026102.
- [61] HAYNES D R, TRO N J, GEORGE S M. Condensation and evaporation of water on ice surfaces[J]. *The Journal of Physical Chemistry*, 1992, 96(21): 8502-8509.
- [62] KNUDSEN M. The cosine law in the kinetic theory of gases [M]. United States of America : National Aeronautics and Space Administration, 1967.
- [63] FEDOTOV S, KIM S H, PITSCH H. Anomalous Knudsen diffusion and reactions in disordered porous media, F, 2008 [C].
- [64] HLUSHKOU D, GRITTI F, DANEYKO A, et al. How microscopic characteristics of the adsorption Kinetics impact macroscale transport in chromatographic beds[J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2013, 117(44): 22974-22985.
- [65] COLWELL J E, BATISTE S, HORÁNYI M, et al. Lunar surface: Dust dynamics and regolith mechanics [J]. *Reviews of Geophysics*, 2007, 45(2).
- [66] LEI D, WANG Y, MENG H, et al. Experimental study on response characteristics of coal adsorption and desorption under electric field enhancement[J]. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, 2002, 1: 1-14.
- [67] MOHAJERI A, NARSILIO G A, PIVONKA P, et al. Numerical estimation of effective diffusion coefficients for charged porous materials based on micro-scale analyses[J]. *Computers and Geotechnics*, 2010, 37(3): 280-287.
- [68] GUO J G, YING T, GAO H, et al. Surface microstructures of lunar soil returned by Chang'e-5 mission reveal an intermediate stage in space weathering process[J]. *Science Bulletin*, 2022, 67(16): 1696-1701.
- [69] SCHÖRGHOFER N. Statistical thermodynamics of surface-bounded exospheres[J]. *Earth, Moon, and Planets*, 2022, 126(2): 5.
- [70] DONG H, BLUNT M J. Pore-network extraction from micro-computerized-tomography images[J]. *Physical Review E*, 2009, 80(3): 036307.
- [71] BEAR J. Dynamics of Fluids in Porous Media[J]. *Soil Science*, 1975, 120: 162-163.
- [72] 孔祥言. 高等渗流力学. 第2版 [M]. 北京: 中国科学技术大学出版社, 2010.
- [73] SOULAINÉ C, MAES J, ROMAN S. Computational Microfluidics for Geosciences [J]. *Frontiers in Water*, 2021, 3.
- [74] BLUNT M J, JACKSON M D, PIRI M, et al. Detailed physics, predictive capabilities and macroscopic consequences for pore-network models of multiphase flow[J]. *Advances in Water Resources*, 2002, 25(8): 1069-1089.

- [75] PETERS E J. Advanced petrophysics: Dispersion, interfacial phenomena [M]. Greenleaf Book Group Press, 2012.
- [76] BAQER Y, CHEN X. A review on reactive transport model and porosity evolution in the porous media[J]. Environmental Science and Pollution Research, 2022, 29(32): 47873-47901.
- [77] GOGOI S, GOGOI S B. Review on microfluidic studies for EOR application[J]. Journal of Petroleum Exploration and Production Technology, 2019, 9(3): 2263-2277.
- [78] GOSTICK J T. Versatile and efficient pore network extraction method using marker-based watershed segmentation[J]. Physical Review E, 2017, 96(2): 023307.
- [79] SKOROV Y V, LIESHOUT R V, BLUM J, et al. Activity of comets: Gas transport in the near-surface porous layers of a cometary nucleus[J]. Icarus, 2011, 212(2): 867-876.
- [80] COLSON F, BARLOW D A. Statistical method for modeling Knudsen diffusion in nanopores[J]. Physical Review E, 2019, 100(6): 062125.
- [81] DAMMERS A J, COPPENS M O. Knudsen diffusion in finite-size channels from a first-passage point of view[J]. Soft Materials, 2012, 10(1/2/3): 369-386.
- [82] STEINER G. Two considerations concerning the free molecular flow of gases in porous ices[J]. Astronomy and Astrophysics, 1990, 240: 533-536.
- [83] SHEN L, CHEN Z. Critical review of the impact of tortuosity on diffusion[J]. Chemical Engineering Science, 2007, 62(14): 3748-3755.
- [84] BIRD R, STEWART W, LIGHTFOOT E. Chapter 17: Diffusivity and the mechanisms of mass transport [J]. Transport Phenomena, John Wiley and Sons, Inc, 1960, 505.
- [85] ZALC J M, REYES S C, IGLESIA E. The effects of diffusion mechanism and void structure on transport rates and tortuosity factors in complex porous structures[J]. Chemical Engineering Science, 2004, 59(14): 2947-2960.
- [86] GAO X, DINIZ DA COSTA J C, BHATIA S K. Understanding the diffusional tortuosity of porous materials: An effective medium theory perspective[J]. Chemical Engineering Science, 2014, 110: 55-71.
- [87] LI C, HZOU R P, YU A B, et al. Pore structure of the packing of fine particles [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2006, 299(2).
- [88] YANG R Y, ZOU R P, YU A B, et al. Pore structure of the packing of fine particles[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2006, 299(2): 719-725.

**通信作者:**

徐克(1989-),男,研究员,主要研究方向为多孔介质内的物质运输和地质能源开发。

通信地址:北京大学燕南园 60 号(100871)

电子邮箱:kexu1989@pku.edu.cn