

# 用格子玻尔兹曼方法研究流动-反应耦合的 非线性渗流问题<sup>\*</sup>

许友生<sup>1)†</sup> 李华兵<sup>3)‡</sup> 方海平<sup>3)</sup> 黄国翔<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup> 华东师范大学物理系, 上海 200062)

<sup>2)</sup> 浙江师范大学物理系, 金华 321004)

<sup>3)</sup> 中国科学院上海应用物理研究所, 上海 201800)

<sup>4)</sup> 桂林电子工业学院计算科学与应用物理系, 桂林 541004)

(2003 年 10 月 28 日收到 2003 年 12 月 1 日收到修改稿)

根据格子玻尔兹曼计算技术以及相应渗流理论, 对多孔介质内流动-反应(矿物介质的溶解等)耦合这一非线性渗流问题进行了数值研究, 计算结果与解析解基本符合. 数字图像重构技术反映的结果表明流体流动和反应之间可以发生强烈的耦合和反耦合作用, 同时可以形成条带结构这一自组织现象, 与实验和其他理论分析结果符合也很好.

关键词: 非线性渗流, 耦合反应, 数值模型

PACC: 4755M, 0340

## 1. 引 言

流动-反应(矿物介质的溶解等)耦合渗流是伴有化学反应和复杂物理过程的动力学问题, 其研究领域涉及多孔介质中流体的对流、扩散、弥散、吸附、浓缩、分离、互溶、传热、传质、相变、离子交换、中和、氧化等过程, 应用范围主要包括地下资源开采、地球物理、生物渗流、工程渗流等领域. 这类问题具有非平衡性、多尺度性、随机性等非线性特征, 可以视为一个复杂的巨系统. 研究这类问题通常采用以下两种方法.

1) 理想化模型 用一个通过适当简化的模型替代实际的多孔介质, 从而对体系中发生的流动-反应耦合现象可以很方便地用数学方法进行精确的理论分析<sup>[1]</sup>. 值得注意的是, 尽管这类模型比较简单, 却仍然可以把影响流动-反应耦合现象的主要因子考虑在内.

2) 微观统计模型 运用统计物理理论, 构造出一个孔隙内流体质点可分辨的微观运动统计模型,

对质点的各类运动加以平均后得到流体的宏观描述<sup>[2]</sup>.

用上述两种模型得到的结果正确与否, 需要靠实验来检验, 尽管利用数学分析可以将某些问题考虑得更细致一些, 但把数据与介质之间的基本性质联系起来, 仍然需要实验加以确定. 这些传统的方法在计算流体速度、压力等物理量时, 一般都在宏观 Navier-Stokes 方程基础上做有限差分离散后, 得到代数方程, 从而得到数值结果. 这种数值处理方法, 由于其表面上的复杂性往往掩盖了渗流问题在微观上的简单性, 比如空隙介质中多相流的相互驱替等现象只是大量流体粒子之间以牛顿方程的规则相互作用的动力学集中表现, 而统计力学认为流体是由大量的微观粒子组成的, 粒子的运动遵守经典力学定律的同时, 还服从微观统计定律. 近几年逐渐兴起的格子玻尔兹曼方法(lattice Boltzmann method, 即 LBM)<sup>[3,4]</sup>正是这样一种简单化的微观数值分析体系, 通过运用统计物理方法讨论多孔介质内流体的宏观性质. 这种方法在流体速度空间中的传播算子(演化步骤)是线性的, 配合碰撞算子(弛豫过程)和

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号: 10372094 和 10274021)、浙江省自然科学基金(批准号: M103082)及浙江省教育厅科研基金(批准号: 20020871)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: XYS.001@163.com

多重尺度展开技术可以恢复宏观上的非线性行为. 这种方法继承了格子气自动机(lattice gas automata 即 LCA)方法<sup>[5]</sup>的优点, 同时又去除了统计噪声、伽利略不变性、压强依赖于流体速度等缺陷, 具有运算精度高、速度快、并行计算性能好等特点.

本文将基于介观层面, 运用并改进格子玻尔兹曼方法, 结合相应渗流理论以及数字图像重构理论, 建立起一套新的分析流动-反应耦合渗流问题的数值分析模型. 这类研究对进一步阐明复杂性渗流运动的规律有一定的指导意义.

## 2. 数值理论与模型

通常情况下, 描述由易溶物质和难溶物质组成的孔隙介质中的流体运动时, 需要注意一个重要特点: 孔隙度大的地方促使流体的流量增大, 流量增大又有利于易溶物质的溶解, 而物质溶解又使得介质孔隙度不断增大. 处理这类由流动-反应耦合产生的正反馈系统, 一般用到下面关系:

$$\partial_x P = f(\text{geometry}, \text{fluid}, \text{flow}), \quad (1)$$

其中 geometry 为多孔介质的孔隙度、特定表面等几何因子, fluid 为流体的密度、黏度等参量, flow 为流体的速度. 目前比较流行的是 Kozeny-Darcy 的“毛细管理论”模型<sup>[6]</sup>, 认为流体在多孔介质中的运动可以看作流体通过一束横截面形状保持不变的毛细孔道的运动. 在每个孔道中, 流体的运动满足 Navier-Stokes 方程以及响应的边界条件. 孔道内流体的平均速度  $\bar{v}_x$  与压力梯度的关系为

$$\bar{v}_x = -\frac{1}{2\mu} \left( \frac{dP}{dx} \right) R_h^2, \quad (2)$$

其中  $\mu$  为流体的黏度,  $x$  为流体运动平均坐标,  $R_h$  为液压半径, 数值上等于流体体积与润湿面的比率. 设毛细孔道的半径为  $R$ , 通过简单计算可得

$$R_h^2 = \frac{\pi R^2}{2\pi R} = \frac{R}{2}. \quad (3)$$

设全部毛细孔道的平均液压半径为  $\bar{R}_h$ , 长度为  $L$ , 则方程(2)变为

$$\bar{v}_x = -\frac{1}{2\mu} \left( \frac{\Delta P}{\Delta L} \right) \bar{R}_h^2. \quad (4)$$

对于毛细管束的任一横截面以及任意一个时刻, 在考虑分子扩散情况下, 根据文献[7]可以推导出近似公式为

$$R^2 \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + r \frac{\partial C}{\partial r}$$

$$= \left( \frac{R^2}{D_d} \right) \frac{\partial C}{\partial t} + 2 \left( \frac{\bar{v} R^2}{D_d} \right) \left( \frac{1}{2} - \frac{r^2}{R^2} \right) \frac{\partial C}{\partial \xi}, \quad (5)$$

其中  $C$  为孔隙内流体中所讨论溶质组分的饱和浓度,  $\xi = x - \bar{v}t$ ,  $D_d$  为分子扩散系数(假定该系数与  $C$  无关),  $r$  为从毛细孔道的轴心出发测量的距离. 求解方程(5)时, 除了一定的初始条件与边界条件以外, 需要求得流体的运动速度. 本文假设流体在多孔介质内作等温不可压流动时, 控制方程为 Nithiarasu 等人提出的推广的 Navier-Stokes 方程组<sup>[8]</sup>

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (6)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \left( \frac{\mathbf{v}}{\phi} \right) = -\frac{1}{\rho} \nabla(\phi P) + \nu_e \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{F}, \quad (7)$$

其中  $\rho$  为流体密度,  $\mathbf{v}$  和  $P$  分别为流体的平均速度和压强,  $\nu_e$  为有效参数,  $\mathbf{F}$  为流体在介质中所受的合力, 其表达式为

$$\mathbf{F} = \frac{\phi \nu}{K} \mathbf{v} - \frac{\phi \mathbf{F}_\phi}{\sqrt{K}} |\mathbf{v}| \mathbf{v} + \phi \mathbf{G}, \quad (8)$$

其中  $\nu$  为黏滞系数,  $\mathbf{G}$  为流体粒子之间相互作用等引起的内力. 多孔介质的几何形状函数  $F_\phi$  和  $K$  与孔隙度  $\phi$  之间的关系可以求得<sup>[9,10]</sup>

$$F_\phi = \frac{1.75}{\sqrt{150\phi^3}}, \quad (9)$$

$$K = \frac{\phi^3 d_p^2}{150(1-\phi)^2}, \quad (10)$$

其中  $d_p$  为介质固体颗粒有效半径.

求解(6)和(7)式所示的 Navier-Stokes 方程组绝非易事, 原因是多孔介质内部边界条件极为复杂. 注意到以分子运动论为基础的格子玻尔兹曼计算方法近几年在模拟复杂性流动<sup>[4,11-13]</sup>尤其在渗流领域取得了不小进展<sup>[14-16]</sup>, 本文从 D2Q9<sup>[4]</sup>模型出发, 在考虑介质对流体线性及非线性牵制效应的情况下, 应用统计平均原理, 将格子玻尔兹曼方程写成平均意义上的形式:

$$\begin{aligned} & \bar{f}_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) \\ &= \bar{f}_i(\mathbf{x}, t) - \frac{\bar{f}_i(\mathbf{x}, t) - \bar{f}_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)}{\tau} + F_i \delta_t, \end{aligned} \quad (11)$$

其中  $\delta_t$  为时间步长,  $\bar{f}_i(\mathbf{x}, t)$  和  $\bar{f}_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)$  分别为整个多孔介质体积概念上的平均分布函数和平均平衡分布函数(为了方便, 下文将省略所有的平均符号“ $\bar{\quad}$ ”),  $\tau$  为弛豫时间,  $F_i$  为第  $i$  个流体质点所受的力, 粒子速度为

$$e_i = \begin{cases} 0, & \text{当 } i = 0 \text{ 时;} \\ \left( \cos \frac{(i-1)\pi}{2}, \sin \frac{(i-1)\pi}{2} \right), & \text{当 } i = 1-4 \text{ 时;} \\ \sqrt{2} \left( \cos \left[ \frac{(i-5)\pi}{2} + \frac{\pi}{4} \right], \sin \left[ \frac{(i-5)\pi}{2} + \frac{\pi}{4} \right] \right), & \text{当 } i = 5-8 \text{ 时.} \end{cases} \quad (12)$$

平衡分布函数为

$$f_i^{\text{eq}} = A_i \rho \left[ 1 + \frac{e_i \cdot v}{RT} + \frac{(e_i \cdot v)^2}{2\phi(RT)^2} - \frac{v^2}{2\phi RT} \right], \quad (13)$$

其中  $R$  为气体普适常数,  $T$  为温度, 平衡权重系数  $A_i$  分别为  $A_0 = 4/9$ ,  $A_i = 1/9$  ( $i = 1, 2, 3, 4$ ),  $A_i = 1/36$  ( $i = 5, 6, 7, 8$ ). 要得到准确的由格子玻尔兹曼方法出发导出的渗流动力学方程, 可根据文献 [17—19], 结合(6)和(7)式, 先导出  $F_i$  的表达式, 结果为

$$F_i = A_i \rho \left( 1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left( \frac{e_i \cdot F}{RT} + \frac{(e_i \cdot v)(e_i \cdot F)}{\phi R^2 T^2} - \frac{v \cdot F}{\phi RT} \right). \quad (14)$$

根据质量守恒和动量守恒规则, 流体的密度  $\rho$  以及速度  $v$  与分布函数之间的关系为

$$\rho = \sum_i f_i, \quad v = \sum_i f_i e_i / \rho + \frac{\delta_1}{2} F. \quad (15)$$

在格子玻尔兹曼理论中, 微观渗流动力学的特征时空尺度是弛豫时间和粒子平均自由程, 而宏观渗流动力学的特征时空尺度要比它们大得多, 两者之比是一个远小于 1 的数, 通常把它称为 Knudsen 数, 以  $\epsilon$  表示, 将格子玻尔兹曼方法中所有物理量以及积分算符都按这个小参数的幂次展开

$$f_i = f_i^0 + \epsilon f_i^1 + \epsilon^2 f_i^2 + O(\epsilon^3), \quad (16)$$

$$F = \epsilon F_1 + O(\epsilon^2), \quad (17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \epsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} + O(\epsilon^3), \quad (18)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \epsilon \frac{\partial}{\partial x_1} + O(\epsilon^2). \quad (19)$$

选择  $f_i^0 = f_i^{\text{eq}}$ , 类似于文献 [16], 将方程(16)–(19)代入方程(11), 并进行逐次近似展开(即 Chapman-Enskog 展开). 注意到分布函数  $f_i$  遵循的约束条件(15)式, 略去三阶以上的项后得到精确度达到  $O(\epsilon^3)$  的格子玻尔兹曼方法出发的宏观渗流控制方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) = 0, \quad (20)$$

$$\frac{\partial (\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \frac{\rho v v}{\phi} \right) = -\nabla P + \nabla \cdot [\rho v_e (\nabla v + v \nabla)] + F, \quad (21)$$

其中  $v_e = (\tau - 0.5)RT\delta_i$ . 注意到上述方程中, 如果

选取  $\phi = 1$  (21)式便退化为一般流体动力学方程. 另外当流体以较低速度流动时(21)式将还原为普通 Dracy 定律.

### 3. 实例模拟

现在考虑地下资源溶浸开采技术问题. 该问题的研究有利于保护环境和提高资源采收率. 数值模拟以高度非均匀孔隙介质为例, 区域大小为  $300\text{m} \times 100\text{m}$  的长方形, 介质主要由石英和黄铁矿组成. 假设黄铁矿的含量在这个区域内保持不变, 均为 7%, 石英含量和初始孔隙度在区域内是变化的, 其分布关系分为 7 种情况:

$$\begin{cases} \text{case1 } 0.20\phi + 0.73\text{SiO}_2 + 0.07\text{FeS}_2, \\ \text{case2 } 0.18\phi + 0.75\text{SiO}_2 + 0.07\text{FeS}_2, \\ \text{case3 } 0.16\phi + 0.77\text{SiO}_2 + 0.07\text{FeS}_2, \\ \text{case4 } 0.14\phi + 0.79\text{SiO}_2 + 0.07\text{FeS}_2, \\ \text{case5 } 0.12\phi + 0.81\text{SiO}_2 + 0.07\text{FeS}_2, \\ \text{case6 } 0.10\phi + 0.83\text{SiO}_2 + 0.07\text{FeS}_2, \\ \text{case7 } 0.08\phi + 0.85\text{SiO}_2 + 0.07\text{FeS}_2. \end{cases} \quad (22)$$

模拟时选择 左边界:  $P = P_0, C = C_0, \frac{\partial P}{\partial x} = \text{const}$ . 右

边界:  $P = 0, C = C_m, \frac{\partial C}{\partial x} = \text{const}$ . 上下边界:  $\frac{\partial C}{\partial y} = \frac{\partial P}{\partial y} = 0$ ,

为了用上述的模型按(11)式模拟介质溶浸反应前锋的演化, 本文采用非均匀网格<sup>[14, 20, 21]</sup>, 选取  $X_{\alpha, \beta} = (X_{\alpha}, X_{\beta})$  作为计算区域内的任意一个格点在 Cartesian 坐标系统中的坐标, 每个网格大小用  $\Delta X_{\alpha} = X_{\alpha+1} - X_{\alpha}$  和  $\Delta X_{\beta} = X_{\beta+1} - X_{\beta}$  表示, 其与均匀网格的比率定义为

$$\gamma_x^{\alpha} = \frac{\Delta X_{\alpha}}{\delta_x}, \quad \gamma_y^{\beta} = \frac{\Delta X_{\beta}}{\delta_y}. \quad (23)$$

给定网格节点上的宏观量  $\rho, v$  以及分布函数的初试值  $f_i(x, 0)$ , 在 Cartesian 直角平面上  $f_i$  按方程(11)进行演化, 得到  $f_i(x_{\alpha, \beta} + e_i \delta_t, t + \delta_t)$ , 网格任意处的  $f_i(x_{\alpha, \beta}, t + \delta_t)$  将通过格点  $x_{\alpha, \beta} + e_i \delta_t$  上的  $f_i(x_{\alpha, \beta} +$

$e_i \delta_i$  进行插值计算后得到, 然后格点间继续发生碰撞, 直到获得要求精度的运算结果. 整个计算过程结合方程(5)同步算出所讨论溶质组分的饱和浓度  $\alpha(x, t)$ , 并按照我们以前的思路<sup>[16]</sup>将平均流速为 2.592m/d, 演化时间分别为  $t_1 = 20d$ ,  $t_2 = 40d$ ,  $t_3 = 60d$ ,  $t_4 = 80d$ ,  $t_5 = 100d$  5 个时间段, 所得数值解与 Laplace 解析解同时示于图 1. 比较后可发现两者符合较好, 说明本文提供的模型是合理的.

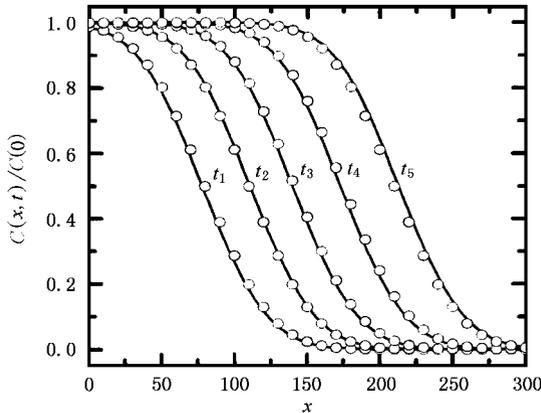


图 1 流速为 2.592m/d 经过时间  $t_1, t_2, t_3, t_4, t_5$  孔隙介质中反应前锋演化的数值解与解析解的比较 ( $C(0)$  为溶质组分的初始浓度,  $\circ$  为 LBM 数值解, — 为 Laplace 解析解)

为便于讨论, 本文利用最新的数值结果可视化技术<sup>[22, 23]</sup>, 将平均流速为 2.592m/d、最终演化时间为 100d, 以及平均流速为 17.28m/d、最终演化时间



图 2 平均流速为 2.592m/d 经过最终演化时间为 100d 后孔隙介质中反应前锋演化的数值模拟图

为 200d 的计算结果重构为可供显示的图像(见图 2 和图 3). 从图 2 和图 3 可以看出, 在高度非均匀孔隙介质中, 溶浸反应前锋的形态是高度复杂的. 当流速增大时, 其复杂程度也增大, 反应前锋扩展到的区域面积变小, 亦即速度越大, “溶浸死区”的面积也增大.

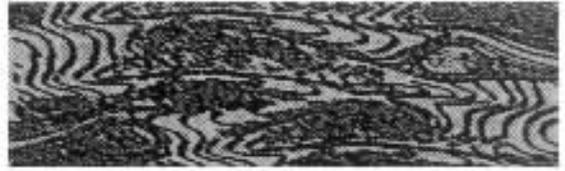


图 3 平均流速为 17.28m/d 经过最终演化时间为 200d 后孔隙介质中反应前锋演化的数值模拟图

## 4. 结 语

本文用格子玻尔兹曼方法研究了流动-反应耦合的非线性渗流问题. 利用数字图像重构技术得到的结果表明, 在非均匀孔隙介质中, 由于流体流动与化学反应的耦合与反耦合作用, 可导致十分丰富的溶浸反应前锋形态, 同时可以形成条带结构这一自组织现象, 可见地下资源溶浸开采技术是一个复杂的非线性动力学过程, 可具有各种各样的溶浸反应前锋的扩张形态, 某些区域可能形成溶浸不到的“溶浸死区”, 影响到生产效率和资源回收率. 本文采用的方法可望用于多孔介质内流动-反应(矿物物质的溶解等)耦合这一非线性渗流问题开展进一步的研究, 有助于在实际工作中将确定合理的流体速度、注液孔与抽液孔的分布以及溶浸区域大小, 也将拓展渗流力学的应用研究空间.

第一作者感谢南华大学教授谭凯旋博士在第一届海峡两岸统计物理会议期间所给予的有益的指导.

[1] Bear J and Todd D K 1960 *Water Resources Center Contrib.* **29** 325  
 [2] Fara H D and Hatch L P 1961 *J. Geophys.* **66** 3279  
 [3] Chen S *et al* 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 3776  
 [4] Qian Y H, d'Humières D and Lallemand P 1992 *Europhys. Lett.* **17** 479  
 [5] Hardy J, Pomeau Y and de Pazzis O 1973 *J. Math. Phys.* **14** 1746  
 [6] Kozeny J 1927 *Sitzungsber. Akad. Wiss. Wien.* **136** 271  
 [7] Bear J 1972 *Dynamics of Fluids in Porous Media* (New York: Dover)

[8] Nithiarasu P *et al* 1997 *Int. J. Heat Mass Transf.* **40** 3995  
 [9] Ergun S 1952 *Chem. Eng. Prog.* **48** 89  
 [10] Vafai K 1984 *J. Fluid Mech.* **147** 233  
 [11] Fang H P, Wan R Z and Fan L W 2000 *Chin. Phys.* **7** 515  
 [12] Feng S D, Zhang Q and Ren R C 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1207 [in Chinese] 冯士德、张琼、任荣彩 2001 物理学报 **50** 1207  
 [13] Li H B *et al* 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 837 [in Chinese] 李华兵等 2001 物理学报 **50** 837

- [ 14 ] Kang Q J ,Zhang D X and Chen S Y 2002 *Phys. Rev. E* **66** 56307
- [ 15 ] Guo Z L and Zhao T S 2002 *Phys. Rev. E* **66** 36304
- [ 16 ] Xu Y S 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 626 [ in Chinese ] 许友生 2003 物理学报 **52** 626 ]
- [ 17 ] Shan X and Chen H 1993 *Phys. Rev. E* **47** 1815
- [ 18 ] Freed D M 1998 *Int. J. Mod. Phys. C* **9** 1491
- [ 19 ] Ladd A J C and Verberg R 2001 *J. Stat. Phys.* **104** 1191
- [ 20 ] He X ,Liao L S and Dembo M 1996 *J. Comput. Phys.* **129** 357
- [ 21 ] Li M X *et al* 2003 *J. Eng. Thermophys.* **24** 73 [ in Chinese ] 李明秀等 2003 工程热物理学报 **24** 73 ]
- [ 22 ] Geromichalos D ,Mugele F and Hemminghaus S 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 104503
- [ 23 ] Xu Y S and Xu X Z 2002 *Chin. Phys.* **11** 583

## Lattice Boltzmann simulation for nonlinear flow in porous media with coupling reaction<sup>\*</sup>

Xu You-Sheng<sup>1,2)</sup> Li Hua-Bing<sup>3,4)</sup> Fang Hai-Ping<sup>3)</sup> Huang Guo-Xiang<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup> Department of Physics ,East China Normal University ,Shanghai 200062 ,China )

<sup>2)</sup> Department of Physics ,Zhejiang Normal University ,Jinhua 321004 ,China )

<sup>3)</sup> Shanghai Institute of Applied Physics ,Chinese Academy of Sciences ,Shanghai 201800 ,China )

<sup>4)</sup> Department of Computational Science and Applied Physics ,Guilin University of Electronic Technology ,Guilin 541004 ,China )

( Received 28 October 2003 ; revised manuscript received 1 December 2003 )

### Abstract

Based on the lattice Boltzmann method and theory of fluid flow in porous media ,a numerical model is discussed for the nonlinear flow in porous media with coupling reaction .The numerical simulation results agree well with the analytical solution ,and the reconstructed digital images show that there are strong coupling and anti-coupling effect between the fluid flow and the reaction ,which results in the self-organization cingulum forms .All these also agree well with the experimental and theoretical prediction .

**Keywords :** nonlinear flow in porous media , coupling reaction , numerical model

**PACC :** 4755M , 0340

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 10372094 and 10274021 ) ,the Natural Science Foundation of Zhejiang Province ,China ( Grant No. M103082 ) ,and the Science Foundation from the Education Bureau of Zhejiang Province ,China ( Grant No. 20020871 ) .