

多孔介质中流体流动及扩散的耦合格子 Boltzmann 模型

刘高洁 郭照立 施保昌

A coupled lattice Boltzmann model for fluid flow and diffusion in a porous medium

Liu Gao-Jie Guo Zhao-Li Shi Bao-Chang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 014702 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.014702

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.014702>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I1>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

流体力学拉氏守恒滑移线算法设计

[Conservative sliding algorithms for hydrodynamics](#)

物理学报.2015, 64(19): 194701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.194701>

干斜压大气拉格朗日原始方程组的半解析解法和非线性密度流数值试验

[Semi-analytical solution of the dry baroclinic Lagrange primitive equation and numerical experiment of a non-linear density current](#)

物理学报.2015, 64(19): 194702 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.194702>

疏水表面减阻的格子 Boltzmann 方法数值模拟

[Numerical investigation on drag reduction with hydrophobic surface by lattice Boltzmann method](#)

物理学报.2015, 64(18): 184702 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.184702>

燃烧系统的离散 Boltzmann 建模与模拟研究进展

[Progress of discrete Boltzmann modeling and simulation of combustion system](#)

物理学报.2015, 64(18): 184701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.184701>

自由上浮气泡运动特性的光滑粒子流体动力学模拟

[Numerical simulation on the motion characteristics of freely rising bubbles using smoothed particle hydrodynamics method](#)

物理学报.2015, 64(17): 174701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.174701>

多孔介质中流体流动及扩散的耦合格子 Boltzmann 模型*

刘高洁¹⁾²⁾ 郭照立^{2)†} 施保昌²⁾

1) (华东理工大学, 煤气化及能源化工教育部重点实验室, 上海 200237)

2) (华中科技大学, 煤燃烧国家重点实验室, 武汉 430074)

(2015 年 6 月 23 日收到; 2015 年 8 月 20 日收到修改稿)

多孔介质中高 Péclet 数和大黏性比下混溶流体的流动和扩散广泛存在于二氧化碳驱油、化工生产等工业过程中. 用数值方法对该问题进行研究时, 关键在于如何正确描述高 Péclet 数和大黏性比下多孔介质内流体的行为. 为此, 提出了一种基于多松弛模型和格子动理模型的耦合格子 Boltzmann 模型. 通过 Chapman-Enskog 分析, 证明该模型能有效求解不可压 Navier-Stokes 方程和对流扩散方程. 数值结果表明, 该模型不仅具有二阶精度和良好的稳健性, 而且对于高 Péclet 数和大黏性比的问题具有良好的数值稳定性, 为模拟此类问题提供了有效工具.

关键词: 格子 Boltzmann 模型, 多孔介质, 流动与扩散, 高 Péclet 数和大黏性比

PACS: 47.11.-j, 47.56.+r, 47.20.Gv

DOI: 10.7498/aps.65.014702

1 引言

多孔介质中混溶流体的流动和扩散在诸如二氧化碳埋存、石油开发、微机电系统等工程实际中有着广泛的应用^[1-4]. 由于多孔介质孔隙结构和内部流体行为的复杂性, 利用实验和理论方法对其进行研究时受到一定限制. 随着计算机技术和数值计算方法的发展, 数值模拟方法已成为研究此类问题的重要手段. 用数值方法模拟孔隙尺度下多孔介质中混溶流体的流动与扩散时, 获取复杂多孔介质系统中流体的信息是成功求解此类问题的关键. 作为一种有效的数值计算方法, 格子 Boltzmann (LB) 方法在处理复杂固体边界和多组分流体时具有天然优势, 能非常方便地模拟孔隙尺度多孔介质中流体的行为. 近年来, LB 方法已在诸多问题中得到成功应用, 例如, 利用 LB 方法, Ghassemi 和 Pak^[5]

对多孔介质结构参数进行了测定; Song 等^[6]对气液固多相流进行了模拟; 此外, 研究人员还对多组分反应流^[7]、湍流^[8]、微通道流动^[9]等问题进行了 LB 模拟. 尽管研究人员提出了各种 LB 模型来模拟不同的问题^[10,11], 但值得注意的是, 对于多孔介质中高 Péclet (Pe) 数和大黏性比下混溶流体的流动和扩散这一类具体问题, 现有数值方法在模拟此类问题时还存在一些困难 (如数值不稳定). 所以, 亟需发展一个能有效解决该类问题的模型.

在孔隙尺度下, 多孔介质中两种混溶流体的流动与扩散问题可用不可压 Navier-Stokes 方程耦合对流扩散方程来描述. 在求解此方程组时, 可将流动方程和浓度方程单独处理, 分别对其建立相应的格子 Boltzmann 方程 (LBE). 具体地, 对于流动方程, 由于在工程应用中常遇到两混溶流体间黏性比很大的情况 (如超临界 CO_2 和原油), 用数值方

* 国家杰出青年科学基金 (批准号: 51125024) 和国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2011CB707305) 资助课题.

† 通信作者. E-mail: zlguo@hust.edu.cn

法求解时要求模型具有很好的数值稳定性. 用LB方法模拟此类问题时最常用的是格子Bhatnagar-Gross-Krook (LBGK) 模型, 流体与固体骨架的无滑移边界采用反弹格式. 但是, LBGK模型有两个缺陷, 即数值不稳定和渗透率依赖于流体黏性. 多松弛时间 (multiple-relaxation-time, MRT) 模型能有效克服这种缺陷^[12]. 一方面, MRT模型通过构造适当的碰撞算子, 能准确实现流固边界与流体黏性的无关性^[13], 显著降低多孔介质模拟时渗透率对流体黏性的依赖. 另一方面, 因为MRT模型包含可独立调节的松弛时间, 数值稳定性更高^[14,15].

对于浓度方程, 由于在实际问题中往往会遇到 Pe 数较大的情况 (如超临界 CO_2 驱替原油过程, Pe 数可达 10^4 以上), 这时LBGK模型会发生数值不稳定. 格子动理格式 (lattice kinetic scheme, LKS) 模型^[16]在平衡态分布函数中加入修正项, 可以通过调整修正项中的参数, 使得松弛因子仍可保持在合适的范围内, 获得较好的数值稳定性. Yang等^[17]在LKS模型的基础上发展了一种可求解不可压Navier-Stokes方程和对流扩散方程的模型, 该模型也有良好的数值稳定性. 由此可见, LKS模型和基于LKS发展的模型, 其数值稳定性相较于LBGK模型有了很大的改进.

为了克服现有模型在模拟多孔介质内高Péclet数和大黏性比的混溶流体的流动和扩散问题时的不足, 本文基于MRT模型和LKS模型建立了一个可以用于模拟该类问题的耦合LB模型, 通过一系列数值模拟, 检验了该模型的正确性.

2 耦合LB模型

多孔介质中混溶流体的流动和扩散问题可由不可压Navier-Stokes方程耦合对流扩散方程来描述. 在此体系中, 流体的流动遵循不可压Navier-Stokes方程, 而扩散过程可采用一种流体浓度变化的对流扩散方程来描述. 下面将分别介绍求解不可压Navier-Stokes方程的MRT模型和求解对流扩散方程的LKS模型.

2.1 求解流动方程的MRT模型

MRT模型的演化方程为

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{x}, t)$$

$$= -\mathbf{M}^{-1} \mathbf{S} [\mathbf{m}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{m}^{(eq)}(\mathbf{x}, t)] + \delta_t \mathbf{F}_i, \\ i = 0, 1, \dots, q-1, \quad (1)$$

其中 q 是离散速度的个数, $f_i(\mathbf{x}, t)$ 是粒子在 t 时刻 $\mathbf{x}$ 处离散速度为 $\mathbf{c}_i$ 的分布函数, δ_t 为时间步长, $\mathbf{M}$ 是将分布函数映射到矩空间的 $q \times q$ 的变换矩阵, $\mathbf{m}$ 和 $\mathbf{m}^{(eq)}$ 分别是矩向量和矩空间中的平衡态, $\mathbf{m} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{f}$, $\mathbf{S} = \text{diag}(s_0, s_1, \dots, s_{q-1})$ 为松弛矩阵, $\mathbf{F}_i(\mathbf{x}, t)$ 为外力项. 流体的密度和浓度可通过分布函数而求得

$$\rho = \sum_i f_i, \quad \mathbf{u} = \sum_i \mathbf{c}_i f_i + \frac{\delta_t}{2} \mathbf{F}. \quad (2)$$

本文考虑二维问题时采用二维九速(D2Q9)模型, 离散速度定义为 $\mathbf{c}_0 = (0, 0)$, $\mathbf{c}_1 = -\mathbf{c}_3 = (1, 0)$, $\mathbf{c}_2 = -\mathbf{c}_4 = (0, 1)$, $\mathbf{c}_5 = -\mathbf{c}_7 = (1, 1)$, $\mathbf{c}_6 = -\mathbf{c}_8 = (-1, 1)$, 其中 $\mathbf{c} = \delta_x / \delta_t$, δ_x 为网格步长, 本文中取 $c = 1$. 变换矩阵 $\mathbf{M}$ 见文献^[12], 其对应的矩向量为

$$\mathbf{m} = (\rho, e, \varepsilon, j_x, q_x, j_y, q_y, p_{xx}, p_{xy})^T, \quad (3)$$

其中 T 表示转置变换. 上式中的各个矩有着清晰的物理含义, 分别为: ρ 是流体密度; e 和 ε 分别是总能和能量的平方; j_x 和 j_y 为 x 和 y 分量上的动量, $j_x = \rho u_x$, $j_y = \rho u_y$; q_x 和 q_y 是 x 和 y 分量上的能量通量; p_{xx} 和 p_{xy} 分别为应力张量的对角线和非对角线上的元素. 对于不可压流体, 流体密度近似为常数, 记作 ρ_0 , 而密度波动为 $\delta\rho$, 从而有 $\rho = \rho_0 + \delta\rho$. 矩空间中的相应平衡态如下:

$$\mathbf{m}^{(eq)} = (\rho, -2\rho + 3\rho_0 u^2, \rho - 3\rho_0 u^2, \\ \rho_0 u_x, -\rho_0 u_x, \rho_0 u_y, -\rho_0 u_y, \\ \rho_0 u_x^2 - \rho_0 u_y^2, \rho_0 u_x u_y)^T, \quad (4)$$

其中, 流体密度 ρ 和动量 $\mathbf{j} = \rho_0 \mathbf{u} = (j_x, j_y)$ 是碰撞守恒量, 其他非守恒量 (如 e, ε 等) 的平衡态是守恒量的函数. 此模型的松弛参数为

$$\mathbf{S} = \text{diag}(s_\rho, s_e, s_\varepsilon, s_j, s_q, s_j, s_q, s_\nu, s_\nu). \quad (5)$$

注意到流体密度和动量在碰撞过程中是守恒的, 这些矩所对应的松弛率 s_ρ 和 s_j 可取任意值. 其他松弛率为 $s_e = s_\varepsilon = s_\nu = 1/\tau$, $s_q = 8(2 - s_\nu)/(8 - s_\nu)$, 其中 τ 与流体动力黏性 ν 相关,

$$\nu = \frac{1}{3} \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \delta_t. \quad (6)$$

在MRT模型中, 矩空间中的外力项为 $\left(I - \frac{1}{2}S\right)\hat{\mathbf{F}}$, 其中 $\hat{\mathbf{F}} = (0, 6\mathbf{u} \cdot \mathbf{F}, -6\mathbf{u} \cdot \mathbf{F}, F_x, -F_x, F_y, -F_y, 2(u_x F_x - u_y F_y), u_x F_y + u_y F_x)^T$.

通过Chapman-Enskog展开^[18]对上述MRT模型进行分析, 可以导出对应的宏观流动方程:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (7)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{u}) + \mathbf{F}, \quad (8)$$

其中 $p = c_s^2 \rho$ 为压力, $c_s^2 = 1/3$ 为模型参数.

2.2 求解扩散方程的LKS模型

下面介绍用于求解对流扩散方程的LKS模型^[16]. 浓度分布函数 $g_i(\mathbf{x}, t)$ 的演化方程可以写为

$$\begin{aligned} & g_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta_t, t + \delta_t) \\ &= g_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_D} \left[g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{(\text{eq})}(\mathbf{x}, t) \right], \\ & i = 0, 1, \dots, 8, \end{aligned} \quad (9)$$

其中离散速度和上节中用于描述速度场的LBE模型中的离散速度一致, τ_D 是相应的松弛时间, 平衡态分布函数 $g_i^{(\text{eq})}$ 为

$$g_i^{(\text{eq})} = \omega_i C \left[1 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} \right] + \omega_i A \delta_t (\mathbf{c}_i \cdot \nabla C), \quad (10)$$

其中权重系数 $\omega_0 = 4/9$, $\omega_{1-4} = 1/9$, $\omega_{5-8} = 1/36$, $c_s^2 = c^2/3$, 参数 A 与扩散系数 D 相关,

$$D = c_s^2 \left(\tau_D - \frac{1}{2} - A \right) \delta_t. \quad (11)$$

模型中, 浓度定义如下:

$$C(\mathbf{x}, t) = \sum_i g_i(\mathbf{x}, t). \quad (12)$$

当 τ_D 趋近于0.5时, 将会出现数值不稳定现象. 而(11)式表明, 扩散系数由参数 A 和 τ_D 共同确定, 因此可通过调整参数 A , 使 τ_D 在一个合适的范围, 避免扩散系数较小(或 Pe 数较大)时的数值不稳定. 本文中固定 $\tau_D = 1$, 而 A 根据扩散系数 D 确定.

通过Chapman-Enskog展开方法可以得到LKS模型对应的宏观方程:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C = D \nabla^2 C, \quad (13)$$

浓度梯度的计算如下:

$$\nabla C = - \frac{\sum_i \mathbf{c}_i g_i - \sum_i \mathbf{c}_i g_i^{(\text{eq})}}{c_s^2 \tau_D \delta_t}. \quad (14)$$

至此, 将MRT模型和LKS模型结合起来, 得到求解不可压Navier-Stokes方程和对流扩散方程的耦合LB模型. 该模型可用来计算多孔介质内混溶流体流动和扩散现象.

2.3 边界处理

多孔介质固体基体上的无滑移边界条件可由半反弹格式^[19]来实现, 形式如下:

$$f_i(\mathbf{x}_f, t + \delta_t) = f'_i(\mathbf{x}_f, t), \quad (15)$$

其中 f'_i 对应的 $\mathbf{c}'_i = -\mathbf{c}_i$ ($\mathbf{c}_i$ 指向壁面), $f'_i(\mathbf{x}_f, t)$ 为 $f_i(\mathbf{x}_f, t)$ 碰撞后的值. 可以证明, 当 $s_e = s_\varepsilon = s_\nu = 1/\tau$, $s_q = 8(2 - s_\nu)/(8 - s_\nu)$ 时, 可准确实现无滑移边界条件^[13], 其中 τ 与流体动力黏性 ν 的关系见(6)式.

对于浓度场, 有两种类型的边界条件: 无渗透边界和恒定浓度边界. 对前者我们用一种类反弹格式来实现^[20]:

$$g_i(\mathbf{x}_f, t + \delta_t) = g'_i(\mathbf{x}_f, t), \quad (16)$$

其中 g'_i 是 g_i 碰撞后的分布函数, 定义见方程(9)等号右边. 而对于边界上的浓度为恒定值 C_w 的情况, 采用一种“反”反弹格式^[20]:

$$g_i(\mathbf{x}_f, t + \delta_t) = -g'_i(\mathbf{x}_f, t) + 2\omega_i C_w. \quad (17)$$

3 模型验证

本节通过一系列数值试验, 验证上节建立的耦合LB模型的精度、稳健性和数值稳定性.

3.1 模型精度

首先对带浓度梯度的多孔板流问题进行模拟, 以验证模型的精度. 该问题描述如下: 一条无限长的水平管道, 其上板以恒定水平速度 u_0 运动, 下板固定不动. 流体从下板以恒定的竖直速度注入, 并以同样的速率从上板流出. 上下边界的浓度分别为 C_h 和 C_l ($C_h > C_l$). 该问题的控制方程为

$$v_0 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} = \nu \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial y^2}, \quad (18)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = g\beta_c(C - C_0), \quad (19)$$

$$v_0 \frac{\partial C}{\partial y} = D \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}, \quad (20)$$

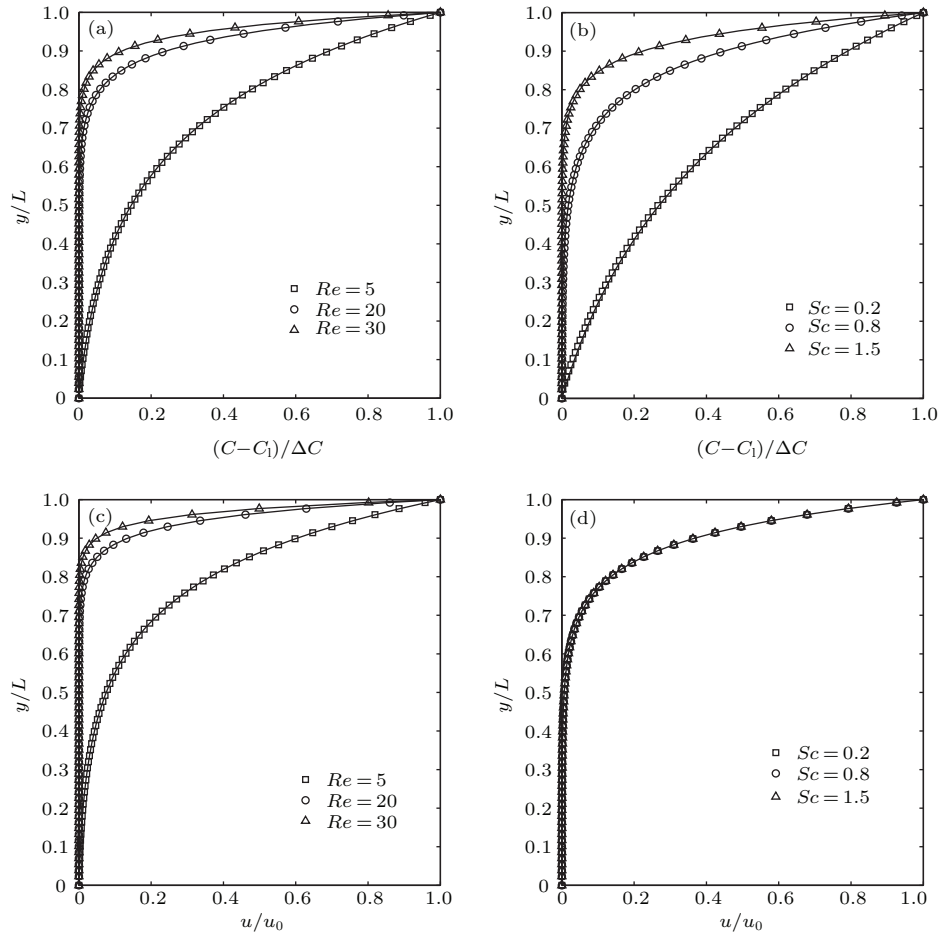


图1 (a) 不同 Re 时的平板流浓度分布 ($Sc = 0.71$, $Ra_c = 100$); (b) 不同 Sc 时平板流浓度分布 ($Ra_c = 100$, $Re = 10$); (c), (d) 为与 (a), (b) 对应的速度分布; 其中实线是解析解, 符号为数值结果
Fig. 1. (a) Concentration profiles at different Re ($Sc = 0.71$, $Ra_c = 100$); (b) concentration profiles at different Sc ($Ra_c = 100$, $Re = 10$); panels (c) and (d) are the corresponding velocity profiles of panels (a) and (b). Solid lines are analytical solutions and symbols are numerical results.

其中, v_0 是注入速度, $\mathbf{u} = (u, v)$ 是流体速度, g 是重力加速度, $\beta_c = (\partial\rho/\partial C)$ 是溶质膨胀系数, $C_0 = (C_h + C_l)/2$ 是平均浓度. 该问题的解析解为^[21]

$$u = u_0 \left(\frac{e^{Rey/L} - 1}{e^{Re} - 1} \right), \quad (21)$$

$$v = v_0, \quad (22)$$

$$C = C_0 + \Delta C \left(\frac{e^{Sc \cdot Re y/L} - 1}{e^{Sc \cdot Re} - 1} \right), \quad (23)$$

其中, L 是管道宽度, 雷诺数 $Re = v_0 L / \nu$, $\Delta C = C_h - C_l$ 是两板间的浓度差, 斯科密特数 $Sc = \nu / D$. 另一个无量纲参数瑞利数的定义为 $Ra_c = g\beta_c \Delta C L^3 / (\nu D)$.

我们模拟了不同 Re 和 Sc 的情况. 在数值模拟中, 网格大小为 $N_x \times N_y = 32 \times 64$, 网格步长是

$\delta_x = L/N_y$, 注入速度 $v_0 = 0.01$, 而其他参数的选取则和 Re 数、 Sc 数和 Ra_c 数相关. 管道出入口采用周期性边界条件, 上、下板的速度和浓度则满足如下条件:

$$u(x, y = 0, t) = 0, \quad u(x, y = 1, t) = u_0,$$

$$v(x, y = 0, t) = v_0, \quad v(x, y = 1, t) = v_0,$$

$$C(x, y = 0, t) = 0, \quad C(x, y = 1, t) = 1.$$

经过一段时间的迭代, 计算会达到稳态, 此处达到稳态的准则是

$$\frac{\sum_x \|C(\mathbf{x}, t) - C(\mathbf{x} - 100\delta_t)\|}{\sum_x \|C(\mathbf{x}, t)\|} < 10^{-6}. \quad (24)$$

其中求和是对所有计算格点进行的.

为了验证耦合LB模型的有效性,我们将采用本模型得到的计算结果与解析解进行对比. 图1(a)给出了 $Sc = 0.71$, $Ra_c = 100$ 时 $Re = 5, 20$ 和 30 的情况下的浓度场分布, 图1(b)给出了 $Ra_c = 100$, $Re = 10$ 下, $Sc = 0.2, 0.8$ 和 1.5 时的浓度场分布. 图1(c)和图1(d)给出了与图1(a)和图1(b)对应的速度分布图. 可以发现无论是浓度场还是速度场, 数值结果与解析解都符合良好.

接下来分析耦合LB模型在计算多孔板流问题时所具有的精度. 固定 $Sc = 0.71$, $Re = 10$, $Ra_c = 100$, 令格子步长 δ_x 从 $1/128$ 到 $1/32$ 之间变化, 通过计算平均相对误差随格子间距改变的收敛速度可以估计本模型的精度. 其中, 速度场和浓度场的平均相对误差定义如下:

$$Err_u = \frac{\sqrt{\sum_i |u(x_i) - u_a(x_i)|^2}}{\sqrt{\sum_i u_a(x_i)^2}},$$

$$Err_C = \frac{\sqrt{\sum_i |C(x_i) - C_a(x_i)|^2}}{\sqrt{\sum_i C_a(x_i)^2}}, \quad (25)$$

其中 $u(x_i)$, $u_a(x_i)$ 分别是数值计算结果和解析解. 图2给出了不同格子步长下速度场和浓度场的平均相对误差. 对于速度场, 误差斜率为 1.85 ; 对于浓度场, 误差斜率为 1.92 , 表明耦合LB模型近似具有二阶精度.

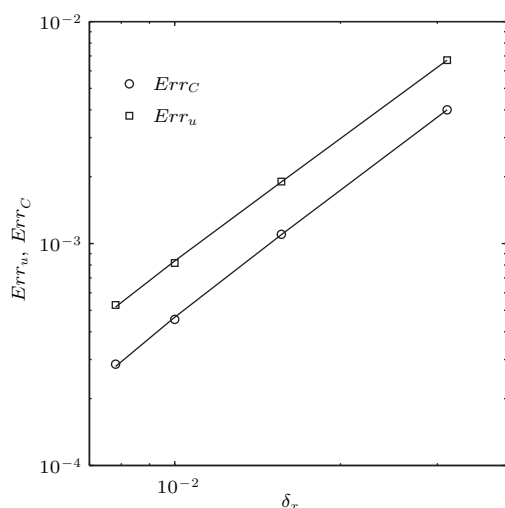


图2 速度场和浓度场的平均相对误差 Err_u 和 Err_C 与格子步长 δ_x 之间的关系($Sc = 0.71$, $Re = 10$ 和 $Ra_c = 100$)

Fig. 2. Velocity and concentration field average relative errors (Err_u , Err_C) at different mesh sizes ($Sc = 0.71$, $Re = 10$ and $Ra_c = 100$).

3.2 稳健性

现在验证耦合LB模型的稳健性, 即该模型能否实现多孔介质模拟中渗透率与流体黏性无关, 且在扩散系数 D 相同而松弛时间 τ_D 不同时的扩散一致. 所模拟的问题描述如下: 多孔介质中左半边充满了流体1, 右半边充满了能与左半边流体1互溶的流体2(如图3所示). 在水平外力 F_x ($F_y = 0$)的作用下两种流体流过不同工况的多孔介质, 流体间存在相互扩散. 为了验证模型在不同多孔介质结构下都具有稳健性, 我们选取了两种不同工况的多孔介质(见图3): 工况1中的多孔介质由一些大小不一的矩形基体随机排列组成, 其孔隙率为 0.773 ; 工况2则是由一些大小不一的圆形基体随机排列而成, 孔隙率为 0.785 . 注意到这里多孔介质的孔隙率比实际工程中所遇到的多孔介质的孔隙率要大一些, 这是由二维结构限制所决定的. 该系统由(7), (8)和(13)式组成的方程组来描述, 其中 $\mathbf{u} = (u, v)$, ρ 为流体密度, p 为压力, ν 为流体动力黏性, $\mathbf{F} = (F_x, F_y)$ 为外力, C 为流体1的浓度, D 为流体间的扩散系数, 假设 D 为常数. 此问题有两组无量纲参数, 即Reynolds数 $Re = u_0 W / \nu$ 和Péclet数 $Pe = u_0 W / D$, 其中 W 为多孔介质的宽度, $u_0 = \sqrt{W / F_x}$. 特征时间为 $T = L / u_0$. 该问题上下左右均采用周期边界, 在固体表面边界使用无滑移边界, 即 $u = v = 0$, $\partial C / \partial y = 0$. 模拟中固定多孔介质的高度 H 和宽度 W 都为 $1 \mu\text{m}$, 采用 400×400 的网格, 且取 $Re = 24$, $Pe = 10^4$.

流体的平均速度可由Darcy定律给出:

$$u_{\text{ave}} = -\frac{k_x}{\mu} (\nabla p + F_x), \quad (26)$$

其中, u_{ave} 为水平方向速度 u 的平均值; k_x 为水平方向渗透率; μ 为流体黏性, $\mu = \rho\nu$; p 为压力; F_x 为施加在水平方向的外力. 这里渗透率的值是由多孔介质的结构决定的, 与通过其中的流体的物理性质无关. 下面将分别用耦合LB模型和LBGK模型来计算黏性不同的流体流经多孔介质时的流量, 进而测得多孔介质的渗透率. 由于两种模型中的松弛时间 τ 是与流体的黏性相关的量, 所以可以通过改变其值来改变流体的黏性. 在LBGK模型中只有 τ 一个松弛时间, 在耦合LB模型中, 松弛参数的选取如下: $s_e = s_\varepsilon = s_\nu = 1/\tau$, $s_q = 8(2 - s_\nu)/(8 - s_\nu)$, $s_\rho = s_j = 1.6$.

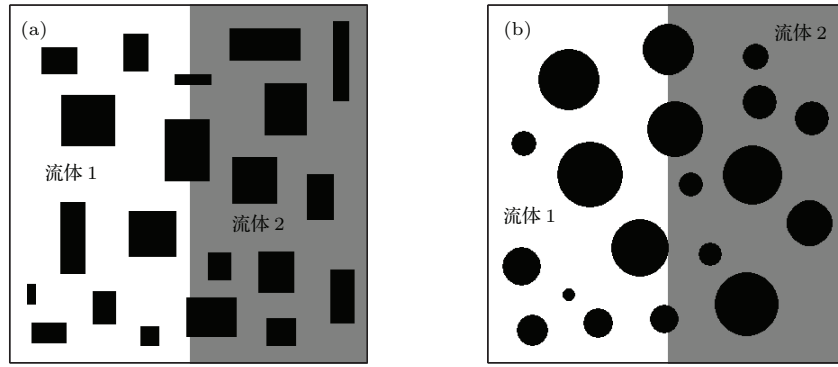


图3 多孔介质内流体流动与扩散示意图, 其中 (a), (b) 中黑色部分分别为工况 1, 2 的多孔介质

Fig. 3. Schematic diagram of flow and diffusion in porous medium. The black parts in panels (a) and (b) are the porous solid frame of case 1 and 2, respectively.

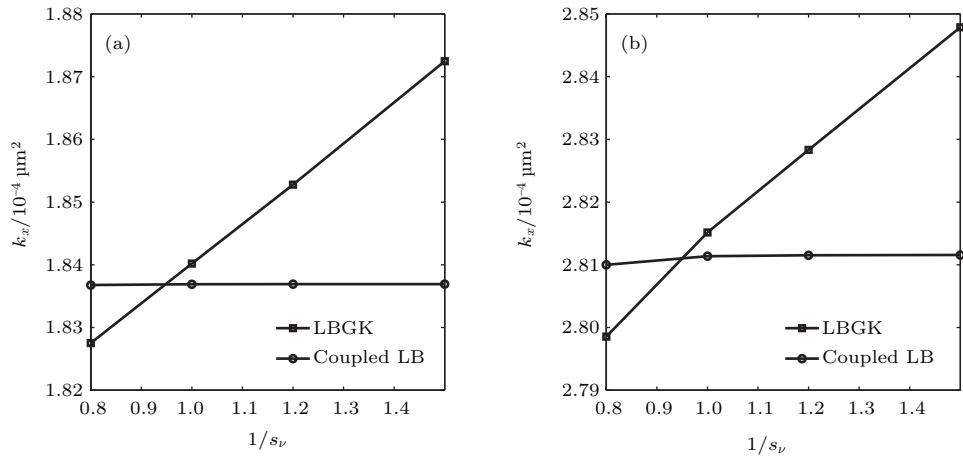


图4 不同 $1/s_v$ (即不同的流体黏性) 下的多孔介质渗透率 (a) 工况 1 的计算结果; (b) 工况 2 的计算结果

Fig. 4. The permeability of porous medium versus $1/s_v$ (viscosity). Panels (a) and (b) are the numerical results of case 1 and 2, respectively.

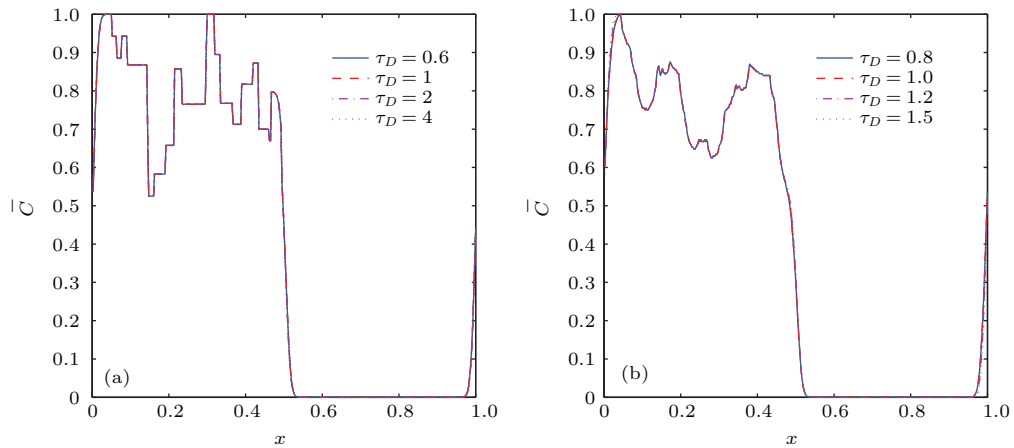


图5 (网刊彩色) 不同 τ_D 时流体的横向平均浓度 $\bar{C}(t=2)$ (a) 工况 1 的计算结果; (b) 工况 2 的计算结果

Fig. 5. (color online) The transverse-averaged concentration $\bar{C}$ versus τ_D ($t=2$). Panels (a) and (b) are the numerical results of case 1 and 2, respectively.

图4给出了不同流体黏性下所测得的两种工况的多孔介质的渗透率. 如图4所示, 对于两种工况下的多孔介质都有如下结果: LBGK模型计算得

到的多孔介质的渗透率与流体黏性相关, 且渗透率随着流体黏性的增加而变大; 而耦合LB模型计算所得的多孔介质渗透率的值几乎一致. 这些结果说

明耦合LB模型能保证渗透率与流体黏性无关,具有良好的稳健性.

接下来考察耦合LB模型能否实现在扩散系数 D 相同而松弛时间 τ_D 不同时流体间扩散的一致性. 由于在模拟时 Re 数和 Pe 数固定不变,所以流体间的扩散是固定的,此时可通过变化松弛时间 τ_D 来检验耦合LB模型的稳健性. 图5给出了 $t = 2$ 时不同松弛时间 τ_D 下所测得的两种工况中流体的横向平均浓度. 可以发现,两种工况中所测得的流体的横向平均浓度完全一致,表明耦合LB模型具有较好的稳健性.

3.3 数值稳定性

现在通过对二维两平板间混溶黏性驱替问题的模拟,来检验耦合LB模型的数值稳定性. 该问题描述如下: 在长为 L 、间隔为 W 的两平板间存在有两种混溶流体,两流体间的初始界面为平面,左侧驱替流体黏性为 μ_1 ,右侧被驱替流体黏性为 μ_2 ,且 $\mu_2 > \mu_1$,驱替流体以平均速度 u_0 向前注入. 该问题的控制方程为(7), (8)和(13)式组成的方程组. 该问题由三个无量纲参数控制,即为黏性比 $M = \mu_2/\mu_1$, $Re = u_{\max}W/\nu_2$ 和 $Pe = u_{\max}W/D$,其中 $u_{\max} = 3u_0/2$ 为入口处的最大速度. 特征时间 $T = W/u_{\max}$. 令驱替流体无量纲浓度为 $C = 1$,被驱替流体 $C = 0$. 在驱替过程中,混合流体的黏性将随着两种流体的混合不断变化,此时混合流体的黏性与浓度密切相关,假设流体黏性与浓度呈指数关系^[22],即 $\mu(C) = \mu_2 e^{R(1-C)}$,其中 $R = \ln M$.

此问题的计算区域取为 $L = 8$ 和 $W = 1$,两流体的初始界面位于 $x = L/10$ 处,采用网格大小为 800×100 . 图6给出了 $Re = 4.5$, $Pe = 512$ 下,黏性比为 $R = 1, 2, 3$ 和 4 时两板间的黏性驱替现象. 可以看到,在 Pe 相对较大的情况下,两流体间的界面形状受速度场的影响呈抛物线形,而随着黏性比的增加,驱替流体被纵向拉伸,以更为明显的指状向前推进,这种现象被称为黏性指进. 图6中与指进现象图对应的平均浓度图也很好地勾勒了流体间界面的形状. 可以发现,流体界面与抛物线型的偏差随着黏性比的增加而变大.

下面进一步考察指尖速度 u_{tip}/u_0 与黏性比 M 的关系. 此处,指尖速度为浓度等值线 $C = 0.5$ 的传播速度. 图7给出了 $Pe = 512$ 时,不同黏性比下的指头尖端速度 u_{tip}/u_0 . 可以看到,整体上

u_{tip} 随着黏性比 M 的增加而增加,当 $1 < M < 10$ 时, u_{tip} 增加较快;当 $M > 10$ 时, u_{tip} 增加放缓,在大黏性比($M \geq 100$)下趋于稳定, $u_{\text{tip}}/u_0 \approx 1.79$. 图7也给出了Rakotomalala等^[23]的计算结果. 如图所示,当 $1 < M \leq 100$ 时,耦合LB模型的计算结果与Rakotomalala等的计算结果符合得很好;当 $M = 1$ 时,尽管计算结果与文献值有一定出入,但相对误差小于2%. 以上结果再次验证了耦合LB模型的有效性.

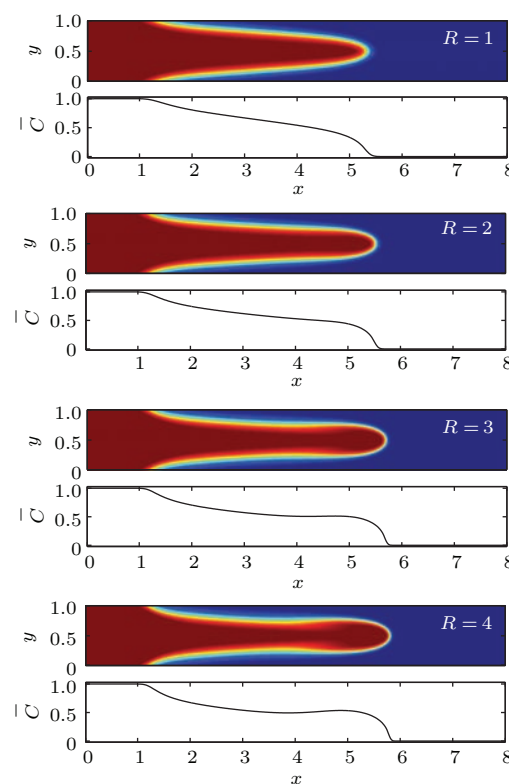


图6 (网刊彩色) 不同黏性比下两板间的黏性驱替现象及其平均浓度 $\bar{C}$ ($Pe = 512$, $t = 4.5$)

Fig. 6. (color online) The viscous fingering phenomenon and the transverse-averaged concentration $\bar{C}$ versus the viscosity ratio ($Pe = 512$, $t = 4.5$).

下面对耦合LB模型和LBGK模型在求解对流扩散方程时的稳定性进行比较. 我们固定 $Re = 4.5$, $R = 4$, 对不同网格下的单孔内黏性互溶驱替进行计算,通过测算计算稳定的最大 Pe 来确定耦合LB模型和LBGK模型的数值稳定性. 可以发现,在 $\delta_x = 1/32, 1/64$ 和 $1/100$ 时, LBGK模型计算稳定的最大 Pe 数分别为9000, 19000和31000. 而耦合LB模型在 Pe 数高达 10^{10} 时仍稳定. 这说明耦合LB模型在求解高Péclet数扩散问题时具有更好的数值稳定性.

现在对耦合LB模型和LBGK模型在求解不

可压 Navier-Stokes 方程时的稳定性进行比较. 固定 $Re = 0.9$ 和 $Pe = 1000$, 对不同网格下的两板间的黏性互溶驱替进行计算, 通过对比数值稳定时的最大黏性比来刻画耦合 LB 模型和 LBGK 模型的数值稳定性. 计算结果表明, 在 $\delta_x = 1/32, 1/64$ 和 $1/100$ 时, LBGK 模型计算处于稳定的最大黏性比分别为 800, 2100 和 3800, 而耦合 LB 模型在黏性比为 10^6 时仍稳定. 这说明耦合 LB 模型在求解不可压 Navier-Stokes 方程时也具有更好的数值稳定性.

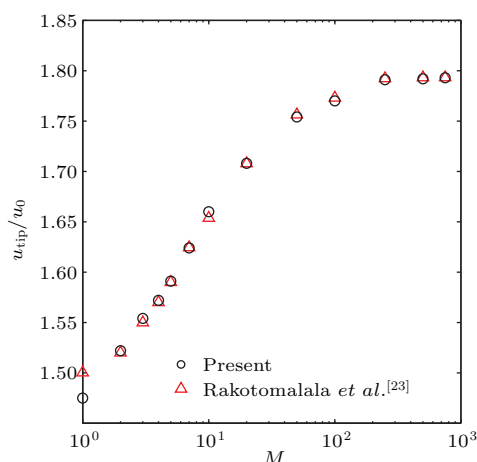


图7 (网刊彩色) 指尖速度 u_{tip}/u_0 与黏性比 M 的关系 ($Pe = 512$)

Fig. 7. (color online) Finger tip velocity u_{tip}/u_0 versus the viscosity ratio M ($Pe = 512$).

综合以上结果, 可以发现本文发展的耦合 LB 模型具有二阶精度, 且具有良好的稳健性及数值稳定性, 能够用于模拟多孔介质内高 Pe 数和大黏性比的流动与扩散现象.

4 结 论

本文提出了一种适用于模拟孔隙尺度高 Péclet 数和大黏性比下混溶流体的流动和扩散这一类问题的耦合 LB 模型. 该模型可正确地恢复出不可压 Navier-Stokes 方程和对流扩散方程, 理论上保证了此模型可用于模拟流体的流动与混合.

为了验证耦合 LB 模型的精度、稳健性和数值稳定性, 本文对一系列流动与扩散问题进行了模拟. 首先, 对于多孔板流问题, 本模型的计算结果与解析解符合得很好, 验证了模型的有效性和精度. 其次, 为了验证模型的稳健性, 文中测算了两种工况下多孔介质的渗透率. 结果表明耦合 LB 模型在模拟复杂多孔介质内流体的流动时能保证渗透率与流体黏性无关. 此外, 本文还证明了不同松

弛时间下, 耦合模型预测的流体间扩散一致, 进一步验证了模型的稳健性. 最后, 为了验证模型的数值稳定性, 对两板间黏性互溶驱替问题进行了模拟, 验证了耦合 LB 模型在计算高 Péclet 数和大黏性比问题时具有良好的数值稳定性. 以上结果充分表明, 本文发展的模型可作为孔隙尺度下流动与扩散问题的有效和可靠的数值方法.

参考文献

- [1] Jayaraj S, Kang S, Suh Y 2007 *J. Mech. Sci. Technol.* **21** 536
- [2] Orr F 2009 *Science* **325** 1656
- [3] Zheng K C, Wen Z, Wang Z S, Lou G F, Liu X L, Wu W F 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 014401 (in Chinese) [郑坤灿, 温治, 王占胜, 楼国锋, 刘训良, 武文斐 2012 物理学报 **61** 014401]
- [4] Lin J, Trabold T, Walluk M, Smith D 2013 *Int. J. Hydrog. Energy* **38** 12024
- [5] Ghassemi A, Pak A 2011 *Int. J. Numer. Anal. Methods Geomech.* **35** 886
- [6] Song B W, Ren F, Hu H B, Huang Q G 2015 *Chin. Phys. B* **24** 014703
- [7] Kang Q, Lichtner P C, Zhang D 2006 *J. Geophys. Res.* **111** B05203
- [8] Sun D K, Xiang N, Jiang D, Chen K, Yi H, Ni Z H 2013 *Chin. Phys. B* **22** 114704
- [9] Esfahanian V, Dehdashti E, Dehrouye-Semnani A M 2014 *Chin. Phys. B* **23** 084702
- [10] Guo Y L, Xu H H, Shen S Q, Wei L 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 144704 (in Chinese) [郭亚丽, 徐鹤函, 沈胜强, 魏兰 2013 物理学报 **62** 144704]
- [11] Tao S, Wang L, Guo Z L 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 214703 (in Chinese) [陶实, 王亮, 郭照立 2014 物理学报 **63** 214703]
- [12] Lallemand P, Luo L S 2000 *Phys. Rev. E* **61** 6546
- [13] Pan C, Luo L S, Miller C T 2006 *Comput. Fluid* **35** 898
- [14] d'Humières D, Ginzburg I 2002 *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **360** 437
- [15] Premnath K N, Abraham J 2007 *J. Comput. Phys.* **224** 539
- [16] Inamuro T 2002 *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A* **360** 477
- [17] Yang X G, Shi B C, Chai Z H 2014 *Phys. Rev. E* **90** 013309
- [18] Chapman S, Cowling T G 1990 *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases* (Cambridge: Cambridge University Press) p359
- [19] Ladd A 1994 *J. Fluid Mech.* **271** 285
- [20] Wang J, Wang D, Lallemand P, Luo L S 2013 *Comput. Math. Appl.* **65** 262
- [21] Noble D R, Chen S, Georgiads J G, Buckius R O 1995 *Phys. Fluids* **7** 203
- [22] Homsy G M 1987 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **19** 271
- [23] Rakotomalala N, Salin D, Watzky P 1997 *J. Fluid Mech.* **338** 277

A coupled lattice Boltzmann model for fluid flow and diffusion in a porous medium*

Liu Gao-Jie¹⁾²⁾ Guo Zhao-Li^{2)†} Shi Bao-Chang²⁾

1) (Key Laboratory of Coal Gasification and Energy Chemical Engineering of Ministry of Education, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China)

2) (State Key Laboratory of Coal Combustion, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

(Received 23 June 2015; revised manuscript received 20 August 2015)

Abstract

The flow and diffusion of miscible fluid in a porous medium with a high Péclet number (Pe) and large viscosity ratio widely exist in industrial processes, such as oil recovery, geological sequestration of carbon dioxide, and chemical engineering process. When these problems are studied by numerical methods, the key point is to accurately describe the flow dynamics and diffusion process in a porous medium at the same time. As an alternative to conventional numerical methods, the lattice Boltzmann method based on kinetic theory is well suited to pore-scale simulations of miscible fluid flows and molecular diffusion. However, most of the existing lattice Boltzmann models have many difficulties (e.g. robustness and numerical stability) in simulating such systems at high Pe and large viscosity ratio. In this paper, in order to overcome the above difficulties, we propose a coupled lattice Boltzmann model based on the multiple-relaxation-time model and the lattice kinetic scheme for the fluid flow and diffusion, respectively. It can be shown that the incompressible Navier-Stokes equations and the convection-diffusion equation can be derived from the presented coupled model through the Chapman-Enskog procedure. The proposed model is validated by simulating a concentration gradient driven flow in a porous channel. Numerical results demonstrate that the model is of second-order accuracy in space. We further simulate a flow through two types of artificial porous media. The robustness of the presented model is investigated by measuring the permeability and diffusivity under different relaxation times. It is found that the model is insensitive to relaxation parameters. In addition, the miscible viscous displacement in two parallel plates is simulated to test the numerical stability of the model. It is observed that the results accord well with those reported in previous work, and the model is very stable at high Pe and large viscosity ratio in comparison with the standard lattice Bhatnagar-Gross-Krook model. Overall, the coupled lattice Boltzmann model can serve as an effective tool for directly simulating the fluid flow and diffusion at high Pe and large viscosity ratio in the pores of a porous medium.

Keywords: lattice Boltzmann model, porous media, fluid flow and diffusion, high Péclet number and large viscosity ratio

PACS: 47.11.-j, 47.56.+r, 47.20.Gv

DOI: 10.7498/aps.65.014702

* Project supported by the National Science Fund for Distinguished Young Scholars of China (Grant No. 51125024) and the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB707305).

† Corresponding author. E-mail: zlguo@hust.edu.cn