

文章编号: 1000_0887(2002) 04_0353_06

多孔介质中两相驱离的格子 Boltzmann 模型新研究*

许友生¹, 刘慈群², 俞慧丹³

(1 浙江师范大学 数理与信息科学学院, 浙江金华 321004;

2 中国科学院 渗流力学研究所, 河北廊坊 065007;

3 宾夕法尼亚大学 物理系, 美国费城 19104)

(我刊编委刘慈群来稿)

摘要: 利用粒子之间相互作用, 即同种物质粒子相互吸引, 异种物质粒子相互排斥这一物理化的原理研究并提出了一个新型的模拟多孔介质中二相驱离的格子玻耳兹曼模型, 结果表明它能有效地模拟多孔介质中的二相驱离问题, 且节省机时, 分界面上涨落也小, 不必采取任何平均措施

关键词: 多孔介质; 二相驱离; 格子 Boltzmann 法(LBM)

中图分类号: O357.3 **文献标识码:** A

引 言

多孔介质中两相驱离在石油工业、地下水文、化学工程等领域中, 是一个重要的课题。若采用数值积分法来模拟这类多相多组分渗流, 困难非常大, 关键的一点是难以表示粒子间的相互作用, 尤其是对地层结构复杂的不规则流场。对比之下, 格子 Boltzmann 法(以下均称 LBM)却是运行在分子层次上, 通过粒子分布函数演化来得到宏观渗流动力学的解的一种有效方法。伴随着 LBM 的发展, 人们已经普遍公认其最有竞争力的领域在于多孔介质的渗流^[1], 因为边界的复杂与否, 对于格气算法来说没有很大区别。我们和很多研究者一样, 将这种方法应用于多孔介质中两相驱离的微观机理模拟, 这类研究对阐明多相多组分渗流机理是有意义的。

1 模型的引入

物理上用简单离散模型来捕捉真实世界的复杂性是有先例的, 自从李政道、杨振宁在 1952 年首先提出了格气思想以来^[2], 先后已经有诸如 HPP^[3]、FHP^[4] 等格气模型陆续发表和应用, 而 LBM 是从格气演化而来, 后经碰撞算子线性化和 BGK 近似^[5]而得到的。我们借助于多孔介质中流体的宏观动力学是由大量微观粒子运动的集结, 粒子的微观相互运动满足基本守

* 收稿日期: 2001_05_08; 修订日期: 2002_01_07

作者简介: 许友生(1963—), 男, 浙江人, 讲师, 硕士研究生;
刘慈群(1930—), 男, 江苏人, 研究员, 博士生导师;
俞慧丹(1965—), 女, 浙江人, 博士。

恒律和必要的对称性,而不改变宏观动力学这一力学特性,不失一般性,考虑一个时间、空间和速度全部离散的假想空间,由规则的六角网格(FHP7_Bit 模型^[6])组成,它是一个二维六角网格,有6个速度矢量 $e_i (i = 1, 2, \dots, 6)$ 和一个 $i = 0$ 的静正粒子。取 $\Delta t = 1$, 得到BGK型迭代式为^[6]:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + 1) = f_i(\mathbf{x}, t) + \Omega_i, \quad (1)$$

$$\Omega_i = -\frac{1}{\tau}(f_i - f_i^{\text{eq}}) = -\omega(f_i - f_i^{\text{eq}}), \quad (2)$$

其中, f_i 为流体粒子的分布函数, f_i^{eq} 为平衡分布函数, τ 和 ω 分别为弛豫时间和碰撞频率。当 $u \ll 1$ 时, 对(1)作Taylor展开, 略去3阶以上的高次项, 得粒子分布函数 f_i 演化的动理学方程为

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla \right] f_i + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla \right]^2 f_i = \Omega_i. \quad (3)$$

f_i 与宏观参量 ρ 和 \mathbf{u} 之间满足

$$\sum_i f_i = \rho, \quad (4)$$

$$\sum_i \mathbf{e}_i f_i = \rho \mathbf{u}. \quad (5)$$

我们知道, 多孔介质中流体力学的特征时空尺寸要比微观动理学的特征时空尺度弛豫时间 τ 和平均自由程 λ 大得多, 两尺度之比 ε 称为 Kundsens 数 ($\varepsilon \ll 1$)。将方程(3)式中所有物理量和微分算符都按小参量 ε 的幂次展开:

$$f_i = f_i^{(0)} + \mathcal{G}_i^{(1)} + O(\varepsilon^2), \quad (6a)$$

$$\partial_t = \varepsilon \partial_t^{(1)} + \varepsilon^2 \partial_t^{(2)} + O(\varepsilon^3), \quad (6b)$$

$$\nabla = \varepsilon \nabla^{(1)} + \varepsilon^2 \nabla^{(2)} + O(\varepsilon^3), \quad (6c)$$

$$\Omega_i = \Omega_i^{(0)} + \varepsilon \Omega_i^{(1)} + \varepsilon^2 \Omega_i^{(2)} + O(\varepsilon^3). \quad (6d)$$

选 $f_i^{(0)} = f_i^{\text{eq}}$, 将(6)代入(2)中, 得

$$\Omega_i^{(0)} = 0, \quad (7)$$

$$\Omega_i^{(1)} = -\mathcal{G}_i^{(1)}. \quad (8)$$

将(6)代入(3)式中并逐次展开后得到

ε^1 级近似

$$(\partial_t^{(1)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla^{(1)}) f_i^{\text{eq}} = \Omega_i^{(1)} = -\mathcal{G}_i^{(1)}; \quad (9)$$

ε^2 级近似

$$(\partial_t^{(2)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla^{(2)}) f_i^{\text{eq}} + (\partial_t^{(1)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla^{(1)}) \mathcal{G}_i^{(1)} + \frac{1}{2} (\partial_t^{(1)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla^{(1)})^2 f_i^{\text{eq}} = \Omega_i^{(2)}. \quad (10)$$

f_i 与宏观量 ρ 和 \mathbf{u} 之间关系(4)和(5)也可分解为

$$\sum_i f_i^{\text{eq}} = \rho, \quad (11)$$

$$\sum_i \mathbf{e}_i f_i^{\text{eq}} = \rho \mathbf{u}, \quad (12)$$

和

$$\sum_i \mathcal{G}_i^{(1)} = 0, \quad (13)$$

$$\sum_i \mathbf{e}_i \mathcal{G}_i^{(1)} = \mathbf{0}. \quad (14)$$

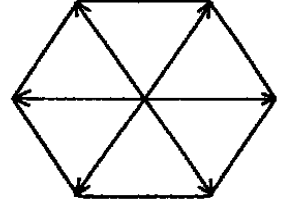


图1 六角形网格
(FHP7_bit 模型)

利用质量和动量守恒原理:

$$\sum_i \Omega_i = 0, \tag{15}$$

$$\sum_i \mathbf{e}_i \Omega_i = \mathbf{0}. \tag{16}$$

将(9)和(10)分别对 i 求和, 以及乘 \mathbf{e}_i 后对 i 求和, 同时注意到式(11)至(16), 得 ε^1 级方程

$$\partial_t^{(1)} \rho + \nabla^{(1)} \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \tag{17}$$

$$\partial_t^{(1)} (\rho u_\alpha) + \nabla_\beta^{(1)} \cdot \pi_{\alpha\beta}^{(0)} = 0; \tag{18}$$

ε^2 级方程

$$\partial_t^{(2)} \rho + \nabla^{(2)} \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \tag{19}$$

$$\partial_t^{(2)} (\rho u_\alpha) + \nabla_\beta^{(2)} \cdot \pi_{\alpha\beta}^{(0)} + \nabla_\beta^{(1)} \cdot (\pi_{\alpha\beta}^{(1)} + \tilde{\pi}_{\alpha\beta}^{(1)}) = \mathbf{0}. \tag{20}$$

上述式子中,

$$\pi_{\alpha\beta}^{(0)} = \sum_i \mathbf{e}_{i\alpha} \mathbf{e}_{i\beta} f_i^{\text{eq}}, \tag{21}$$

$$\pi_{\alpha\beta}^{(1)} = \sum_i \mathbf{e}_{i\alpha} \mathbf{e}_{i\beta} f_i^{(1)}, \tag{22}$$

$$\tilde{\pi}_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{1}{2} \sum_i \mathbf{e}_{i\alpha} \mathbf{e}_{i\beta} (\partial_t^{(1)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla^{(1)}) f_i^{\text{eq}}, \tag{23}$$

其中 $\pi_{\alpha\beta}^{(0)}$ 是 0 级应力张量, $\pi_{\alpha\beta}^{(1)}$ 是 1 级应力张量, $\tilde{\pi}_{\alpha\beta}^{(1)}$ 与 $\pi_{\alpha\beta}^{(1)}$ 同量级, 是网格尺寸效应引起的修正项。

我们知道, 由普通粘性流体的动量守恒方程出发推导出的渗流运动方程中有一个二阶的非线性项^[7], 所以对平衡函数我们通常展成多孔介质中流体宏观速度的多项式, 最高到二次项, 对于 FHP7_bit 模型, 我们有:

$$f_i^{\text{eq}} = A_0 + A_1 \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u} + A_2 (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 + A_3 u^2 \quad (i = 1, \dots, 6), \tag{24}$$

$$f_i^{\text{eq}} = B_0 + B_1 u^2 \quad i = \mathbf{0} \tag{25}$$

6 个系数 $A_0, A_1, A_2, A_3, B_0, B_1$ 待定, 注意到 FHP7_bit 模型中几个常用的式子

$$\sum_i \mathbf{e}_{i\alpha} \mathbf{e}_{i\beta} = 3 \delta_{\alpha\beta}, \tag{26}$$

$$\sum_i \mathbf{e}_{i\alpha} \mathbf{e}_{i\beta} \mathbf{e}_{i\gamma} \mathbf{e}_{i\delta} = \frac{3}{4} \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta}, \tag{27}$$

其中

$$\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta} = \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} + \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta}. \tag{28}$$

将(24)、(25)代入(11)、(12), 比较 u 的同幂次项, 得

$$B_0 + 6A_0 = \rho, \tag{29}$$

$$3A_1 = \rho, \tag{30}$$

$$B_1 + 3A_2 + 6A_3 = 0, \tag{31}$$

同时计算 0 级应力张量

$$\pi_{\alpha\beta}^{(0)} = \sum_i \mathbf{e}_{i\alpha} \mathbf{e}_{i\beta} f_i^{\text{eq}} = 3 \left[A_0 + \left(\frac{1}{4} A_2 + A_3 \right) u^2 \right] \delta_{\alpha\beta} + \frac{3}{2} A_2 u_\alpha u_\beta. \tag{32}$$

为了保证各向同性, 平衡态函数必须满足: ① 有伽利略不变性, ② 没有压强中的非物理项, 因此,

$$\frac{3}{2}A_2 = \rho, \quad (33)$$

$$\frac{1}{4}A_2 + A_3 = 0. \quad (34)$$

式(29)、(30)、(31)、(33)、(34) 5个条件确定6个系数, 可以有一个系数任意选定, 诸多文献包括渗流力学问题^[8]中把这个自由度留给了声速。但是, 在渗流力学中, 往往不须特别关心速度值, 而是将连续性方程和 Darcy 定律联合起来消去速度 V , 而表示成压力 P 与密度 ρ 的关系式。同时, 当多孔介质的孔隙空间被两种或两种以上的流体所占据时, 每一种流体所占的空隙的比例是非常重要的参数。根据这些特点, 我们经过反复比较筛选, 最后把这个自由度给了多相渗流中一个很重要的参数毛细力 P_C , 该参数可以通过简单的实验测定^[7], 因此有 $A_0 = P_C$, 于是得到6个系数分别为

$$A_0 = P_C, A_1 = \frac{1}{3}\rho, A_2 = \frac{2}{3}\rho, A_3 = -\frac{\rho}{6}, B_0 = \rho - 6P_C, B_1 = -\rho$$

于是方程(24)、(25)就可写为

$$f_i^{eq} = P_C + \frac{\rho}{3} \left[\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u} + 2(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{1}{2}u^2 \right] \quad (i = 1, \dots, 6), \quad (35)$$

$$f_i^{eq} = \rho(1 - u^2) - 6P_C \quad i = 0. \quad (36)$$

由式(1)、(2)、(35)、(36)就构成了多孔介质中流体的LBM迭代模型。

2 模拟试验

迄今为止, 所发表的多相多组分流LBM模型^[9, 10, 等], 都使用红色和蓝色两种粒子, 代表不同的相, 计算局域颜色通量和局域颜色场(颜色梯度)。令通量对场的功最小, 这时同种粒子相吸, 异种粒子相斥。我们在阅读有关这类文献时, 总感到有两个明显的不足:

①每一时间步每一格点上着色密度重新分布, 求出功的极值, 这一步骤很费时。

②着色分布函数重新分布带来的混乱, 会导致各向异性的表面张力, 而在交界面附近产生非物理涡。

我们认为这两点是由于所采取的步骤或多或少的人为因素所造成的, 因此提出一个更符合物理实际的模型来改善这些缺点。为方便区分, 采用文献[9]中的R_K模型的红兰标记, 多孔介质中两种流体的LBM方程可统一写为

$$f_i^k(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + 1) = f_i^k(\mathbf{x}, t) + \Omega_i^k(\mathbf{x}, t), \quad (37)$$

k 可取r(red)和b(blue)两种形式。同样还有

$$\Omega_i^k = -\frac{1}{\tau^k} (f_i^k - f_i^{keq}) = -\omega (f_i^k - f_i^{keq}), \quad (38)$$

$$\sum_i f_i^k = e^k, \quad (39)$$

$$\sum_i \mathbf{e}_i f_i^k = \rho \mathbf{u}, \quad (40)$$

其中 ρ , ρ^r 和 ρ^b 分别为流体总密度、红流体密度和兰流体密度, 且 $\rho = \rho^r + \rho^b$ 。

为使同种粒子产生和保持相互吸引, 异种粒子之间相互排斥, 以达到二相驱离的目的, 我们在粒子之间加上相互作用项, 使同种粒子的压强梯度效应增强, 表现为吸引作用, 异种粒子的压强梯度效应削弱, 表现为排斥作用。定义局域颜色梯度

$$\mathbf{F} = P_C \sum_i \mathbf{e}_i [\rho^r(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i) - \rho^b(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i)] \quad (41)$$

并把它充分体现在平衡分布函数中

$$f_i^{keq} = P_C + \frac{1}{3} \left[\mathbf{e}_i \cdot \rho^k \mathbf{u}^k + \frac{2}{\rho^k} (\mathbf{e}_i \cdot \rho^k \mathbf{u}^k)^2 - \frac{1}{2\rho^k} (\rho^k \mathbf{u}^k)^2 \right] \quad (i = 1, \dots, 6), \quad (42)$$

$$f_i^{keq} = \rho^k - \frac{1}{\rho^k} (\rho^k \mathbf{u}^k)^2 - 6P_C \quad i = 0, \quad (43)$$

其中

$$\rho^f \mathbf{u}^f = b_f \mathbf{F} + \rho^f \mathbf{u}, \quad (44)$$

$$\rho^b \mathbf{u}^b = -b_f \mathbf{F} + \rho^b \mathbf{u}, \quad (45)$$

b_f 为相互作用强度的调节参数。

为了验证这个模型的实用性,我们在计算机上做了一个多孔介质中两相驱离的模拟。设初始时刻红蓝两种流体按 6.5 : 3.5 的比例随机分布在一个方形多孔介质流场中,为便于分析,介质空隙是由计算机在统计意义下均匀地自动产生,假设两种流体为油和水,其毛管力 P_C 可根据不同多孔介质样本由实验或资料得到,我们这里选定为 $0.101325 \text{ MPa}^{[7]}$,上下左右均为周期性边界,取 $\tau^r = \tau^b = 1.15$, $b_f = 0.107$ (图 2) 用不同时刻 ρ^r/ρ^b 的灰度图描写系统的演化(深颜色为红,浅颜色为蓝),明显显示了多孔介质中两种流体的驱离过程,而且两种流体的分界面上没有采取任何边界光滑措施。

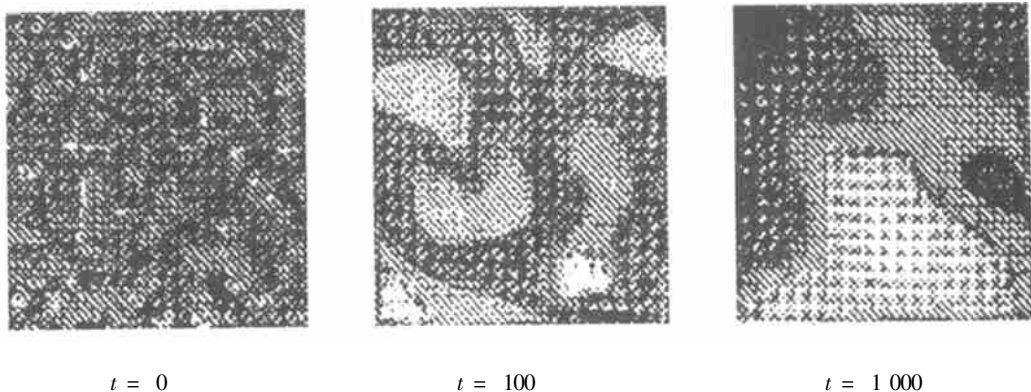


图 2 多孔介质中两相驱离过程模拟, t 为时间步

3 结 语

本文中我们用一个描述粒子相互作用的附加项来取代 R_K 模型中的着色密度重新分布并求功的极值的过程,取得了同样的多孔介质中两相驱离的效果,即避免了一些非物理副产品的产出,也大大节省了机时,因此该方法可以进一步推广,如用来模拟更复杂的多相多组分渗流问题。

[参 考 文 献]

- [1] Rothman D H, Keller J M. Immiscible cellular_automation fluids[J]. Journal of Statistical Physics, 1988, 52(4): 1119—1127.
- [2] Lee T D, Yang C N. Statistical theory of equations of state and phase transition II: lattice gas and using model[J]. Physics Review, 1952, 87(2): 410—419.
- [3] Hardy J, Pomeau Y, de Pazzis O. Time evolution of a two_dimension model system I: Invariant states and time correlation functions[J]. Journal Mathematical Physics, 1973, 14(12): 1746—1759.

- [4] Frish U, Hasslacher B, Pomeau Y. Lattice_gas automata for the Navier_Stokes equation[J]. Physical Review Letters, 1986, **56**(14): 1505—1508.
- [5] Bhatnagar P, Gross E P, Krook M K. A model for collision processes in gases I: Small amplitude processes in charged and neutral one_component systems[J]. Physics Reviews, 1954, **94**(3): 515—525.
- [6] Frish U, d'Humières D, Hasslacher B, et al. Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions [J]. Complex Systems, 1987, **1**(2): 649—707.
- [7] 孔祥言. 高等渗流力学[M]. 合肥: 中国科技大学出版社, 1999, 38—39; 298.
- [8] 阎广武, 胡守信, 施卫平. 用 Lattice Boltzmann 方法确定多孔介质的渗流率[J]. 计算物理, 1997, **14**(1): 63—67.
- [9] Shan X, Chen H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components [J]. Physical Review E, 1993, **47**(3): 1815—1819.
- [10] Gunstensen A K, Rothman, Zaleski S, et al. Lattice Boltzmann model of immiscible fluids[J]. Physics Review A, 1991, **43**(8): 4320—4327.

New Studying of Lattice Boltzmann Method for Two_Phase Driven in Porous Media

XU You_sheng¹, LIU Ci_qun², YU Hui_dan³

(1. Institute of Mathematics & Physics & Information Science,

Zhejiang Normal University, Jinhua, Zhejiang 321004, P R China;

2. Institute of Porous Flow and Fluid Mechanics, Academia Sinica, Langfang,
Hebei 065007, P R China;

3. Department of Physics, University of Pennsylvania, Philadelphia 19104, USA)

Abstract: By using the interaction of particles, such as the physical principle of the same attractive each other and the different repulse each other, a new model of Lattice Boltzmann to simulate the two-phase driven in Porous Media was discussed. The result shows effectively for the problem of two-phase driven in Porous Media. Furthermore, the method economizes on computer time, has less fluctuation on boundary surface and takes no average measure.

Key words: porous medium; two_phase driven; method of lattice Boltzmann(LBM)