

多孔介质内颗粒迁移和沉积的孔隙尺度模拟

——基于LBM-DEM-IMBM耦合模型

周彦杰 杨颖

盐城工业职业技术学院

DOI:10.12238/bd.v6i6.3995

[摘要] 在地下水源热泵运行过程中,回灌过程会导致土壤渗透性的损害,导致系统失效。采用耦合格子Boltzmann方法、离散单元法和浸没移动边界法(LBM-DEM-IMBM)研究了颗粒在多孔介质中的迁移。采用DKT现象来验证了程序的准确性。分析了浓度、入口流速和pH对多孔介质堵塞过程的耦合影响。结果表明,pH的变化主要影响排斥屏障,排斥势垒的降低促进了颗粒的沉积,尤其当入口流速较低时。对于中性悬浮液,存在临界速度具备最高的沉积率。当入口流速较低,浓度增加促进颗粒沉积。当入口流速较高时,随着浓度增长,颗粒滞留率先降低后增长。入口流速的增加有助于保持多孔介质的渗透率。

[关键词] 流-固耦合; 格子Boltzmann方法; 离散单元法; 浸没移动边界法

中图分类号: TN751.1 **文献标识码:** A

Pore-scale Simulations of Particle Migration and Deposition in Porous Media

—Based on LBM-DEM-IMBM Coupling Model

Yanjie Zhou Ying Yang

Yancheng Polytechnic College

[Abstract] During the operation of underground water source heat pumps, recharging process will contribute to impairment of soil permeability and lead to the failure of the system. The coupled lattice Boltzmann method, discrete element method and immersion moving boundary method (LBM-DEM-IMBM) were used to study the particle migration in porous media. DKT phenomenon is used to verify the accuracy of the program. Coupling effects of concentration, inlet flow rate and pH on the clogging process of porous media are analyzed. As a result, the change of pH mainly affects the repulsive barrier, and the decrease of repulsive barrier promotes the deposition of particles, especially when the inlet flow rate is low. For neutral suspensions, the critical velocity has the highest deposition rate. When the inlet flow rate is slow, the increase of concentration promotes particle deposition. When the inlet flow rate is high, the particle retention ratio decreases first and then increases with the increase of concentration. The increase of inlet flow rate helps to maintain the permeability of porous media.

[Key words] flow-solid coupling; lattice Boltzmann method; discrete element method; immersion moving boundary method

引言

地下水源热泵技术作为地源热泵的分支以其环保、节能、运行建造成本低廉等优点得到了广泛关注^[1]。在地下水源热泵系统工程中,为保护地下水资源,确保地下水源热泵系统长期可靠的运行,一般采取回灌措施。然而回灌过程中,含水层内部堵塞问题降低了回灌的效率,从而制约了地下水源热泵的运行^[2]。因此,了解颗粒的迁移和沉积机理,预测多孔介质中的堵塞形成具有重要的学术价值和现实意义。

国内外学者进行了一系列研究。目前主流的方法还是以土柱实验为主。Alem等人研究了水动力对多孔介质中颗粒迁移的影响^[3]。结果表明,随着注入体积的增加,较大的颗粒更深处渗透到多孔介质中,出水中观察到的颗粒尺寸逐渐增大。部分学者建立了一些理论模型预测颗粒迁移行为^[4,5]。然而,将多孔介质特征如渗透率值估计为孔隙度、晶粒尺寸和孔隙空间结构的函数是具有挑战性的,这限制了理论模型的应用。

在实验方法和经典建模中观察颗粒迁移、沉积和滞留的微

观过程仍然存在挑战。颗粒迁移和沉积现象发生在孔隙尺度。从孔隙尺度再现这一现象有助于理解堵塞机制。随着计算流体力学的快速发展,数值模拟为理解这些过程提供了一种潜在的途径。计算流体动力学(CFD)耦合离散单元法(DEM)方法是研究颗粒输运的有效工具。在介观尺度模拟上,由于简化的控制方程和并行计算性能,格子Boltzmann方法(LBM)耦合DEM在处理大量移动颗粒边界时比CFD-DEM效率更佳。

长江中下游地区地势平坦,且雨水充沛,大面积覆盖着大厚度的松散层,具有丰富的、易于开采的浅层地热资源,若能高效开发利用,将形成巨大的经济效益和环境效益。然而目前的回灌技术仍无法满足地下水源热泵日常运行的需要。因此需要进一步对回灌堵塞行为开展研究。本文主要研究多孔介质中的颗粒迁移和沉积过程以及多孔介质的渗透率损伤。我们试图将LBM-DEM耦合起来,进一步理解颗粒在孔隙空间中迁移和沉积的机理。本研究提供了地下水源热泵回灌堵塞的微观过程观察和理解过程。

1 数值方法

本文采用LBM模拟流体流动;采用DEM软球模型处理固相碰撞问题。在处理流固相互作用时,采用浸没移动边界法(IMB)与LBM-DEM模型进行耦合。

1.1 基于DEM的颗粒控制方程

颗粒在DEM中的运动由牛顿第二定律决定。颗粒运动有两种类型:平移和旋转。每个颗粒的运动由线性动量和角动量守恒定律决定。用有限差分法对运动方程进行数值积分。

$$x_p^{t+\Delta t} = v \cdot \Delta t + x_p^t, \quad v_p^{t+\Delta t} = \frac{F_p}{m_p} \cdot \Delta t + v_p^t, \quad \omega_p^{t+\Delta t} = \frac{T_p}{I_p} \cdot \Delta t + \omega_p^t \quad (1)$$

式中 x_p 表示颗粒的位置; v_p 表示颗粒的速度; ω_p 表示颗粒的角速度; m_p 表示颗粒质量; I_p 表示转动惯量; Δt 表示时间步长。每个颗粒轨迹都由以下力平衡显式求解:

$$F_p = F_f + F_c + F_{ad} + F_{re} + F_g \quad (2)$$

$$T_p = T_f + T_c \quad (3)$$

式中 F_f 和 T_f 分别表示流体流动引起的阻力和扭矩; F_c 和 T_c 分别表示接触力和接触力产生的扭矩; F_{ad} 和 F_{re} 分别表示粘着力和排斥力; F_g 表示重力。本文采用软球DEM模型计算接触力 F_c 。软球模型将颗粒接触相互作用过程简化为弹簧阻尼器过程。接触力可表示为:

$$F_c = F_c^n + F_c^t \quad (4)$$

$$F_c^n = -(k_n \delta_n + \eta^n V_{ij}^n n_{ij}) n_{ij} \quad (5)$$

$$F_c^t = -\min(\zeta \cdot |F_{c_{ij}}^n|, k_t \delta_{ij} + \eta^t V_{ij}^t t_{ij}) t_{ij} \quad (6)$$

式中 n 和 t 分别是法向和切线单位向量; F_c^n 和 F_c^t 分别表示法向和切线接触力。当两个颗粒碰撞时,界面的变形被两个重叠量所取代。 δ_n 和 δ_t 分别表示法向和切线重叠长度; V_{ij}^n 和 V_{ij}^t 分别表示法向和切线接触点处的相对速度; k_n 和 k_t 分别表示法向和切线刚度系数。 η^n 和 η^t 分别表示法向阻尼常数和切线阻尼常数, ζ 表示摩擦系数。弹簧系数与杨氏模量和泊松比有关。此外 η 与恢复系数 σ 和相对质量 $m_{ij} = m_i \cdot m_j / (m_i + m_j)$ 相关,在模拟中,我们总是选择 $\eta^n = \eta^t$:

我们总是选择 $\eta^n = \eta^t$:

$$\eta^n = \eta^t = \frac{-2 \ln \sigma \sqrt{m_{ij} k_{nij}}}{\sqrt{\pi^2 + \ln^2 \sigma}} \quad (7)$$

在静摩擦阶段,切向力是由颗粒的切向位移和阻尼导出的。切向力超过阈值时,摩擦力转为动摩擦。此时切向力是法向力绝对值的函数。此外,模型考虑摩擦产生的扭矩:

$$T_c = r_i \cdot (F_c^t \times n) \quad (8)$$

1.2 基于LBM的流体控制方程

LBM是一种基于分子运动理论和统计力学的流体力学数值解。由于单弛豫时间理论的Bhatnagar Gross Krook模型(BGK)良好的计算效率,本文采用BGK模型来计算流场。在BGK中,LBM碰撞方程为:

$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(x, t) - \frac{\Delta t}{\tau_{BGK}} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)) \quad (9)$$

式中 c_i 表示离散晶格速度; $f_i(x, t)$ 表示流体节点在位置 x 和时间 t 时密度分布函数; Δt 表示时间步长; τ_{BGK} 是弛豫时间; $f_i^{eq}(x, t)$ 是 $f_i(x, t)$ 的局部平衡分布函数,通常表示为离散麦克斯韦分布函数:

$$f_i^{eq}(x, t) = w_i \rho \left[1 + \frac{c_i \cdot u}{c_s^2} + \frac{(c_i \cdot u)^2}{2c_s^4} - \frac{u^2}{2c_s^2} \right] \quad (10)$$

式中 w_i 表示权重因子; ρ 表示流体密度; u 表示流体速度; c_s 表示晶格声速。本文采用D2Q9模型。在这个模型中 $c_s = c / \sqrt{3}$,其中 $c = \Delta x / \Delta t$; Δx 表示晶格距离; Δt 是时间步长。

通过密度分布函数可以计算出流体的密度 ρ ,速度 u 和压力 P :

$$\rho = \sum_{i=0}^8 f_i, \quad \rho u = \sum_{i=0}^8 c_i f_i, \quad P = c_s^2 \rho \quad (11)$$

2 结果和讨论

2.1 模拟方法和条件

地下水源热泵工程中人工回灌水具有低营养、低离子强度和离子组成差异大等特点^[6]。首先按一定孔隙率随机生成多孔介质骨架,然后通过图像处理技术导入LBM计算模型。这些骨架晶粒在随后的数值计算中保持固定。图1显示,模型的长度为750 μm ,宽度为400 μm 。仿真域划分为750 \times 400个网格。左侧入口是一个恒定的速度边界,右侧出口是一个恒定的压力边界,上边界和下边界是周期边界。多孔介质模型孔隙度为0.45,初始渗透率为5.5 μm^2 。为了加速颗粒聚集和沉积的过程,选择了较小的粒径比。粒径比 $d_p/d_{50} = 0.06$ (d_p 是颗粒的直径, d_{50} 是多孔颗粒的平均直径)。

式中 V_{in} 表示注入液体的体积; V_p 表示孔隙空间的体积。利用PV代替时间,可以消除孔隙体积和速度差对实验结果的影响。在模拟开始时,流体通过多孔介质流动,直到流场稳定,时间设置为初始时间(PV=0)。颗粒从入口持续添加,直到PV=3。继续让流体流过多孔介质,直至出口边界无颗粒流出。数值模拟的基本参数总结见表1。

表1 LBM-DEM 模型基本参数

LBM 及流体参数		DEM 及颗粒参数	
格子间距, Δx	$1 \times 10^{-6} \text{ m}$	法向刚度系数, k_n	$2 \times 10^6 \text{ N/m}$
LBM 时间步长, Δt	$5 \times 10^{-8} \text{ s}$	切向刚度系数, k_t	$0.8 k_n$
弛豫时间, τ_{BGK}	0.65	碰撞恢复系数, σ	0.8
流体密度(H_2O), ρ_f	$1 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$	摩擦系数, ζ	0.5
格子流体密度, ρ_{lbm}	1	颗粒密度, ρ_p	$2.6 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$
离子价, z	1	Hamaker 常数, $A_H^{\text{wall-p}} / A_H^{\text{p-p}}$	$0.9 \times 10^{-20} \text{ J} / 2.9 \times 10^{-20} \text{ J}$
温度, T	280K	DEM 时间步长, Δt_{dem}	$5 \times 10^{-8} \text{ s} / 5 \times 10^{-10} \text{ s}$
流体黏度, μ_f	$1 \times 10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$	界面能, w_{ij}	1 mJ/m^2
离子强度, I	5mM	颗粒粒径, d_p	$4 \mu\text{m}$

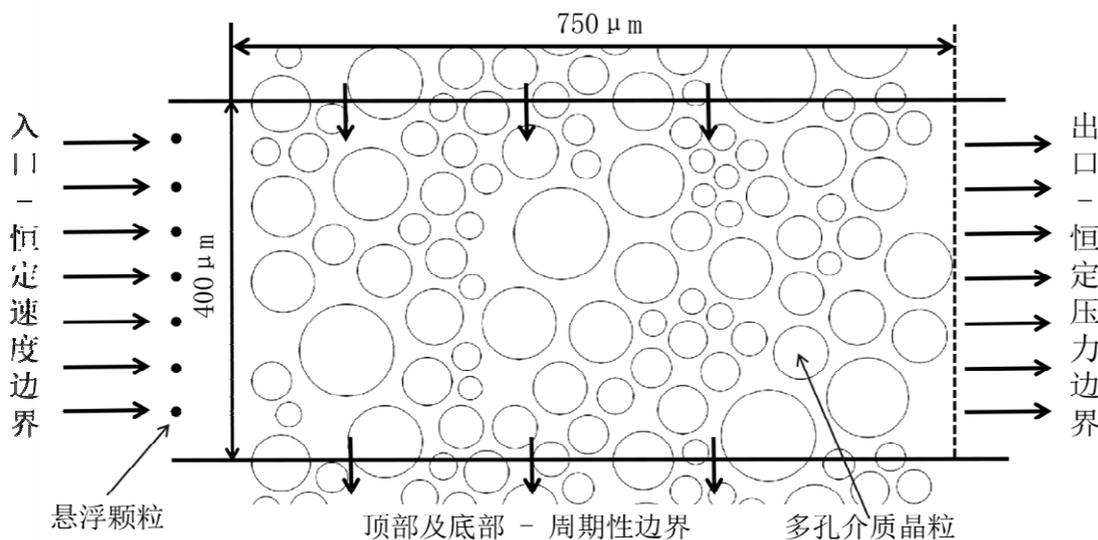


图1 多孔介质二维模型

2.2 pH和进口流速的耦合影响

本节主要讨论pH和流速对颗粒的滞留特性和多孔介质的渗透性损伤的耦合影响。在悬浮液中，悬浮颗粒和多孔介质表面都带有负电荷，产生电双层斥力。当颗粒接近晶粒时，DLVO势能依次出现为次级势阱、排斥势垒和初级势阱。由于离子强度低，电双层排斥力具有较长的作用范围，静电屏蔽作用较弱，次级势阱在水动力作用下可以忽略。颗粒沉积主要发生在初级势阱，颗粒沉积在初级势阱需要克服排斥势垒。人工回灌水往往呈中性。然而在微生物等因素的干扰下，悬浮液可能显微酸性或者微碱性。pH变化主要改变颗粒和多孔介质表面电位。当pH分别为5.5, 7, 9时，颗粒与多孔介质的排斥势垒为1400KT, 2800KT, 5300KT。我们对不同悬浮液pH(pH=5.5, 7, 9)及不同入口流速($V_{in}=4, 7, 12, 24\text{mm/s}$)进行数值模拟。

图2显示了不同情况下颗粒的百分比滞留率变化。当悬浮液微酸性(pH=5.5)，排斥势垒较低时，随着入口流速从4增加到

24mm/s，保留率分别为69%、66%、60%、55%。沉积在初级势阱的颗粒受到水动力的影响从多孔介质表面被剥离。随着流速增大，颗粒受到的剪切力作用更明显，所以颗粒的滞留率随着流速增大而减小。当悬浮液呈微碱性(pH=9)时，随着入口流速从4mm/s增加到24mm/s，滞留率分别为2%、34%、40%、45%。较高的排斥势垒阻碍悬浮颗粒在多孔介质表面的沉积。此时，由于流速较低，颗粒无法突破势垒使得滞留率大幅降低。在中性悬浮液中，滞留率随着流速的增加先增长后降低。存在着临界流速，具有较高的滞留率。pH的降低对颗粒的沉积有着促进作用。当入口流速较低时($V_{in}=4\text{mm/s}$)，pH的减小对促进颗粒沉积有着明显的促进作用，沉积率从2%提高到69%。当对于流速较高的场合($V_{in}=24\text{mm/s}$)，颗粒受水动力作用更显著，pH减小对滞留率提高的幅度有限，提高幅度仅有10%。图3显示了不同情况下多孔介质的剩余渗透率变化。从流场图中可以发现，颗粒往往沉积在多孔介质晶粒下游侧。颗粒在沉积至多孔介质表面后，随着水流在

多孔介质表面滚动至下游区,并在下游区累积。在部分实验中,研究者观察颗粒分布时,也发现了类似的现象。在光滑的多孔介质或者沉积在次级势阱的颗粒会随着水流作用迁移至多孔介质下游端。由于颗粒沉积并未产生桥接而改变渗流通道,所以对喉道渗透性产生影响较为有限,所以各算例渗透率保持在90%以上。

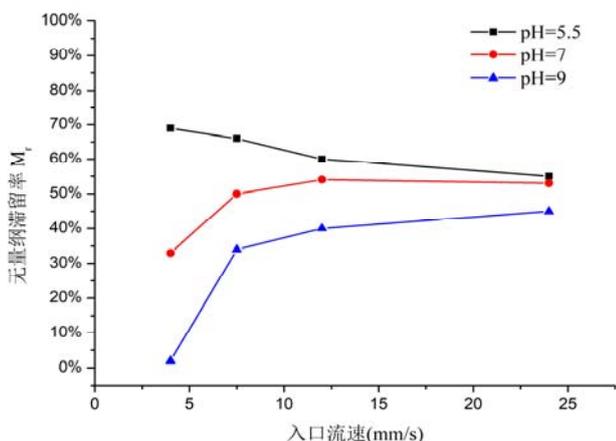


图2 不同pH和入口流速情况下悬浮颗粒的百分比滞留率

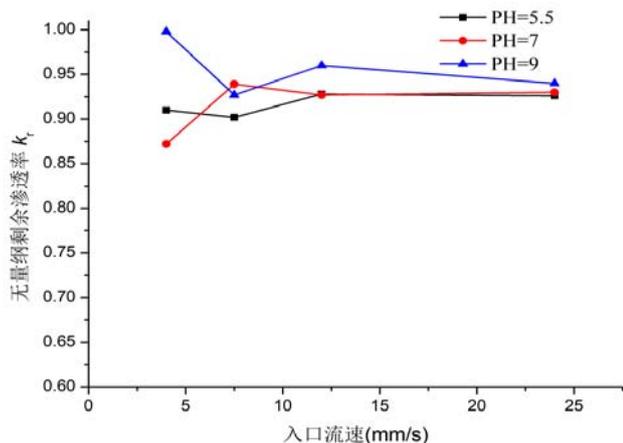


图3 不同pH和入口流速情况下多孔介质无量纲剩余渗透率

2.3 浓度和进口流速的耦合影响

本节主要讨论流速对颗粒的滞留特性和多孔介质的渗透性损伤的影响。在进行了不同入口流速 ($V_{in}=4, 7, 12, 24\text{mm/s}$) 及不同浓度 ($C_0=0.5\%, 1\%, 2\%$) 的数值模拟,背景悬浮液呈中性。图4显示了不同情况下颗粒的百分比滞留率变化。当入口流速为4mm/s时,随着浓度的增加,滞留率从4%提高到51%,滞留率增长明显。在低浓度下,由于颗粒动能无法突破势垒,滞留率较低。随着浓度的增加,颗粒间的相互作用使得颗粒突破势垒从而沉积在多孔介质表面。同时,颗粒间的频繁接触使得颗粒凝聚成更大的聚集体从而更易为多孔介质捕获。然而颗粒相互作用另一方面促进沉积颗粒释放。所以当流速为7mm/s和12mm/s时,随着浓度增大,滞留率先下降后增长。因此,在以往的研究中,浓度对颗粒迁移和沉积的影响往往并不明晰^[7,8]。

在上一节中,我们提到,由于水动力的作用以及忽略介质表

面的粗糙性,颗粒会随着水流沉积在多孔介质晶粒下游端。堵塞层主要是由于下游端沉积颗粒累积至侵占喉道后产生。颗粒的积累会在孔喉后端形成“桥”,在力链的作用下阻塞了喉道,改变了流场。然而随着入口流速增高,喉道中心处的颗粒会受到强烈的剪切力作用,使“桥”断裂。图5显示了不同情况下多孔介质的剩余渗透率变化。可以发现,当 $C_0=0.02$ 时,即使流速较低时具有更低的滞留率,但是渗透率损坏却更严重。入口流速的提高有助于保持多孔介质渗透性能。

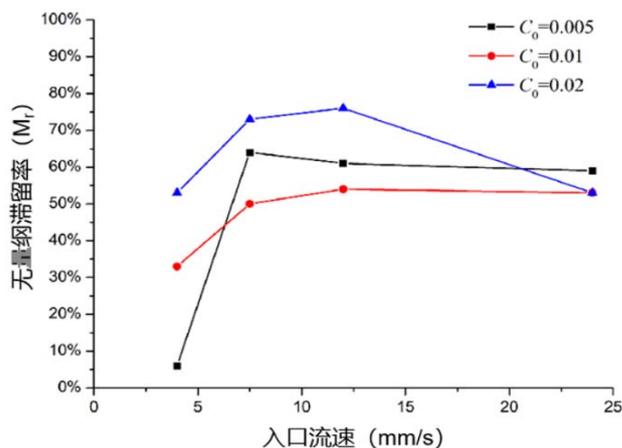


图4 不同流速及浓度情况下悬浮颗粒百分比滞留率

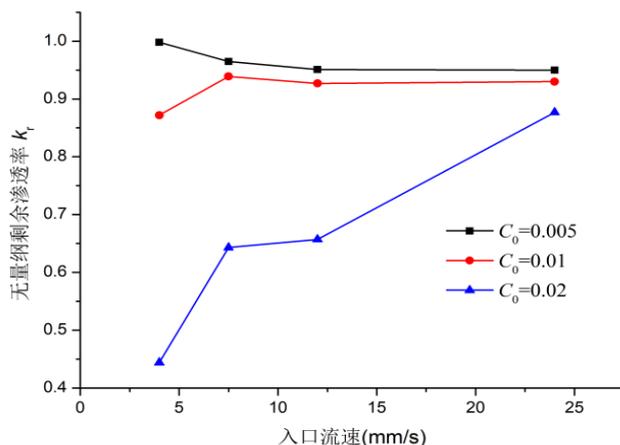


图5 不同浓度和入口流速情况下多孔介质无量纲剩余渗透率

3 结论

本文建立耦合LBM-DEM-IMBM模型,模拟了地下水回灌过程中颗粒在多孔介质中的迁移和滞留过程。分析了浓度、流量和pH对多孔介质堵塞机理的耦合影响,主要得出以下结论:

- (1) pH的变化主要影响排斥势垒的值。在酸性条件下,流速的增加降低了滞留率。在碱性条件下,流速降低使得颗粒动能难以突破排斥势垒而具有较低的滞留率。
- (2) 当流速较低时,pH的降低减小了排斥势垒,极大促进了颗粒的沉积。当流速较高时,颗粒受水动力的影响更明显,这使得pH对颗粒沉积的影响较小。
- (3) 对于浓度极低的情况下,颗粒沉降取决于多孔介质与颗粒本身的相互作用。由于颗粒与多孔介质之间的排斥势垒,所以存在临界速度。在临界速度以内,滞留率随速度的增加而增大。在临

界速度之外,由于较高的剪切力,滞留率随速度的增加而减小。

(4)浓度的增加使颗粒间的相互作用更加频繁。颗粒的相互作用促进了颗粒在低流速下的沉积,也促进了沉积颗粒在高流速下的释放。浓度的增加会增加所有流速条件下的渗透率损伤,而低流速条件下浓度的增加对渗透率损伤更明显。当浓度一定时,流速的增加有助于改善渗透率损伤,即使具有更高的滞留率。

[参考文献]

[1]Rybach L; Sanner B. Ground-Source Heat Pump Systems -The European Experience. Geo Heat Center Quarterly Bulletin. 2000;21(1):16-26.

[2]Sanner B; Karytsas C; Mendrinis D; Rybach L. Current status of ground source heat pumps and underground thermal energy storage in Europe. Geothermics. 2003;32(4-6):579-88.

[3]Alem A; Elkawafi A; Ahfir N-D; Wang H. Filtration of kaolinite particles in a saturated porous medium: hydrodynamic effects. Hydrogeology Journal. 2013;21(3):573-86.

[4]Fallah H; Fathi HB; Mohammadi H. The Mathematical Model for Particle Suspension Flow through Porous Medium.

Geomaterials. 2012;02(03):57-62.

[5]Ding Y; Wen D. Particle migration in a flow of nanoparticle suspensions. Powder Technology. 2005;149(2-3):84-92.

[6]Fan W; Li Q; Huo MX; Wang XY; Lin SS. Transport of bacterial cell (E. coli) from different recharge water resources in porous media during simulated artificial groundwater recharge. Front Env Sci Eng. 2020;14(4):13.

[7]Feng Q; Cha L; Dai C; Zhao G; Wang S. Effect of particle size and concentration on the migration behavior in porous media by coupling computational fluid dynamics and discrete element method. Powder Technology. 2020;360:704-14.

[8]Hou J; Xu X; Lan L; Miao L; Xu Y; You G, et al. Transport behavior of micro polyethylene particles in saturated quartz sand: Impacts of input concentration and physicochemical factors. Environmental Pollution. 2020;263.

作者简介:

周彦杰(1996--),男,汉族,江苏海门人,硕士研究生,助教,研究方向:多相流数值模拟。