

三维微观孔隙模型中流体阻力的评估

郭 婷, 蔡旺锋, 辛 峰, 王 燕*
(天津大学化工学院, 天津 300350)

摘要:通过三维微观孔隙模型来评估碳纤维多孔介质中流体对材料结构和流体黏度的依赖性,并使用 Python 语言开发了一种新的多孔介质孔隙和骨架的分离方法。通过模拟发现,孔隙率对黏性阻力和惯性阻力起决定性的作用;黏度对惯性阻力的影响比对黏性阻力的影响大。

关键词:多孔介质;微观模型;宏观阻力;Fluent 模拟

中图分类号: O359

文献标志码: A

文章编号: 0253-4320(2019)11-0207-05

DOI: 10.16606/j.cnki.issn.0253-4320.2019.11.045

Evaluation of fluid resistance in three-dimensional microscopic pore model

GUO Ting, CAI Wang-feng, XIN Feng, WANG Yan*

(School of Chemical Engineering and Technology, Tianjin University, Tianjin 300350, China)

Abstract: In this paper, the dependence of high-speed fluid on material structure and fluid viscosity in carbon fiber porous media is evaluated by three-dimensional microscopic pore model, and a new method for separating pore and skeleton in porous media is developed by means of Python. It is found by simulation that porosity plays a decisive role in viscous resistance and inertial resistance. Viscosity has a greater impact on inertial resistance than viscous resistance.

Key words: porous media; microscopic model; macroscopic resistance; Fluent simulation software

碳纤维多孔材料作为一种新兴的碳材料,因比表面积更大、微孔丰富、活性强、质量更轻的优点广泛应用于航天热防护系统、气体分离、水分离、生物医用、储氢、吸波和吸附等领域^[1-3]。本文中目的在于研究碳纤维多孔介质孔隙内流体流动行为,并对系统内的阻力进行讨论。早期的达西定律认为多孔材料的压降对流体流速有线性依赖关系,并假定它只是物质结构的函数。但是有些研究表明,多孔介质的压降对流动有非线性依赖关系,因此形成了达西定律的扩展。Forchheimer 提出了包含一个二次项来解释这些非线性关系^[4], Ergun^[5]也验证了这个二次项可以描述填充床的压降。流体在多孔介质的流动阻力不仅取决于材料的结构,还取决于流体的性质。因此,研究多孔介质中相关流体的基础物理学可以推动更高效的多孔装置的设计和发展。

因为碳纤维多孔材料机械强度较差,且结构复杂,实验方法无法实现流体在碳纤维多孔材料孔隙内流动阻力的研究。在这方面,使用计算流体力学技术来模拟多孔介质内部的流动变得重要起来。有许多学者基于多孔介质 CT 图像进行了孔隙结构 2D/3D 模型的重建^[6-9]。这种方法可以对孔隙计算

域的流体直接进行数值模拟,即不需要任何建模假设的情况下求解 Navier-Stokes 方程,从而提供流动路径、湍流能量耗散等详细信息。本文将采用多孔介质孔隙微观模型来研究碳纤维多孔材料孔隙结构和流体特性对流体流动体系宏观黏性阻力和惯性阻力的影响。

1 数值模型

1.1 微观孔隙控制方程

以与空气不相溶的液体为研究主体,将空气和液体看成是不混相的连续统一体,分别处于流场中不同的位置,各相均遵守守恒方程,并且体积分数之和为 1。采用 VOF 模型,空气和液相的界面可以通过求解气液两相体积分数的连续性方程来实现:

$$(1/\rho)[(\partial/\partial t)(\alpha_i \rho_i) + \nabla(\alpha_i \rho_i \vec{v}_i)] = S_{\alpha_i} \quad (1)$$

式中, α_i 为单元中第 i 相流体的体积分数; ρ_i 为流体的密度; \vec{v}_i 为流体的速度; S_{α_i} 为质量源相,可以为用户定义的质量源相。

各相流体体积分数将基于以下约束条件求解:

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i = 1 \quad (2)$$

收稿日期:2019-03-25;修回日期:2019-09-13

基金项目:国家重点基础研究发展计划(973 计划)基金项目(2015CB655202)

作者简介:郭婷(1993-),女,硕士,研究方向为化学工程,guoting@tju.edu.cn;王燕(1972-),女,博士,副教授,研究方向为化学工程,通讯联系人,zhuwangyan@tju.edu.cn。

控制方程的参数由每种元素组分的体积分数确定,例如密度和黏度:

$$\rho = \sum_{i=1}^n \alpha_i \rho_i \quad (3)$$

$$\mu = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mu_i \quad (4)$$

整个流体域内受单一动量方程控制,数值求解得到的速度场被各相利用。

$$(\partial/\partial t)(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)] + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (5)$$

式中, g 为重力加速度; p 为压力。

Brackbill 等^[10]提出的连续表面力(CSF)模型,界面上的压降取决于表面张力系数,以及通过正交方向上的 2 个半径测量的表面曲率,即:

$$\nabla p = \sigma(1/R_1 + 1/R_2) \quad (6)$$

在 ANSYS Fluent 中,CSF 模型中的表面曲率是根据界面处法线的局部梯度计算的。

$$n = \nabla \alpha_i \quad (7)$$

式中, n 为界面法线; α_i 为界面法线的局部梯度。

表面张力可以由表面上的压力跃迁来写出。可以使用发散定理将表面的力表示为体积力,这个体积力正是增加到动量方程中的源项,具有以下形式:

$$F_{\text{vol}} = \sum_{\text{pairs } j, i < j} \rho_{ij} \{ (\alpha_i \rho_i \kappa_i \nabla \alpha_j + \alpha_j \rho_j \kappa_j \nabla \alpha_i) / [(1/2)(\rho_i + \rho_j)] \} \quad (8)$$

式中, ρ_{ij} 为表面张力系数。

曲率 κ 是根据单位法线的发散来定义的:

$$\kappa = \nabla \cdot \hat{n} \quad (9)$$

考虑到壁面黏附效应,采用固体表面和流体之间的接触角来修正壁面与流体的相界面。

$$\hat{n} = \hat{n}_w \cos \theta_w + \hat{t}_w \sin \theta_w \quad (10)$$

其中,单位矢量 \hat{n}_w 和 \hat{t}_w 与墙壁相切; $\theta_w < 90^\circ$ 代表亲水壁面,而 $\theta_w > 90^\circ$ 代表疏水壁面。

1.2 宏观流动机理

当流体在多孔材料中低速流动时,压降可用达西定律的线性函数来表示。该体系通常对应于 1~10 范围的雷诺数,即黏性阻力起绝对性作用:

$$-\nabla p = (\mu/K)v \quad (11)$$

式中, ∇p 为压力梯度; K 为多孔介质的渗透率; μ 为液体动态黏度; v 为液体流过孔隙的速度矢量;渗透率的倒数 $1/K$ 通常被称为多孔介质内流体流动的黏性阻力。

然而,雷诺数高于 10 时,这是多孔介质实际应用中非常常见的情况,因此孔隙尺度上的惯性力变得重要,并且流体速度对压降的非线性影响变得明

显。这种情况通常用 Forchheimer 定律来描述:

$$-\nabla p = (\mu/K)v + \rho\beta v^2 \quad (12)$$

式中, β 为多孔介质的惯性流动系数; ρ 为流体密度。

根据有限的压力差 Forchheimer 定律可以表示为:

$$-\Delta p = (\mu l/K)v + \rho\beta l v^2 \quad (13)$$

此外,值得强调的有限的 Forchheimer 定律也可以写为:

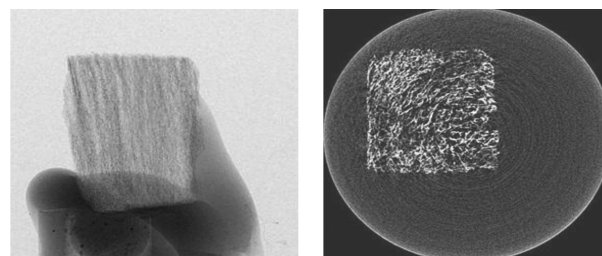
$$-\Delta p = av + bv^2 \quad (14)$$

考虑到黏性阻力和惯性阻力可以假定为常数,通过微观孔隙模型模拟得出不同压差下的速度来确定黏度阻力和惯性阻力。

2 微观孔隙网格的划分

目前,孔隙尺度模型构建方法主要分为重建模型和非重建模型 2 大类。非重建模型主要利用理想化的几何体来描述多孔介质的内部结构,但这类模型无法反映多孔介质的真实孔隙。后来,有些学者通过医学三维重构软件 Mimics 重建多孔介质的几何模型^[11-12],但在实际应用中,发现该模型存在无法完美再现孔隙复杂结构特征、网格质量较差的缺点。基于此,本文中在 Song 等^[13]的工作基础上,提出了一种新的碳纤维多孔介质孔隙结构化网格模型。

(1) 多孔介质图像的预备。选取标准的碳纤维多孔材料,由 CAS 高能物理研究所的 CT 扫描机(分辨率为 5 μm)扫描。对 CT 图像进行格式处理和筛选,以去除具有大缺陷的 CT 图像。图 1 展示了碳纤维多孔材料的 CT 扫描图和扫描切面图。



(a) CT 扫描图

(b) 扫描切面图

图 1 多孔材料的 CT 扫描图和扫描切面图

(2) CT 图像基本处理。分别采用平滑处理、增强对比度和图像去噪等图像增强技术对 CT 图像进行基本处理,从而减少噪声数据对后续图像的影响,使界面更平滑、更清晰,灰度分布区间化更加明显,有利于区分孔隙和碳纤维骨架,处理前后对比如

图2所示。

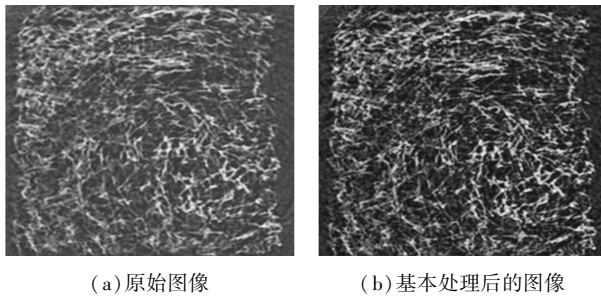


图2 图像的基本处理

(3) 图像二值化。使用 MATLAB 软件进行二值图像处理,并将孔隙、骨架信息存储在 3D 数据矩阵中,“0”表示孔隙空间,“1”表示碳纤维。在矩阵中寻找孔“0”的位置并导出相应的孔隙数据文件,该孔隙数据文件将用作孔隙骨架分离的索引文件。

(4) 结构化网格重建。在 Abaqus 软件中生成包含多孔材料模型元素和节点的网格文件,并导出一个带有.inp 后缀的文件,元素文件可以作为源文件从该文件中分离。使用 Python 代码重构孔隙空间网格,以孔隙数据文件为索引,以带有.inp 后缀的元素文件为源文件,在程序结束后生成带有.inp 后缀的孔隙空间网格文件。网格文件中的网格单元由 1 个元素和围绕该元素的 8 个节点组成,程序代码仅用于检索元素。通过合并孔隙元素文件和节点文件,可以得到一个带有.inp 后缀的结构化网格文件。

(5) 覆盖面网格和去除孤立孔隙。将带有.inp 后缀的结构化空间网格导入 ICEM 软件并使用检查网格功能,在最外层的体积元素表面生成表面网格,定义不同的边界条件应用于数值模拟。孤立的孔隙经常存在于重建的模型中,在计算过程中可能导致计算发生错误或不收敛的问题。flood fill/Make consistent 功能可以识别网格流体不连续和表面网格未连接到的部分,从而将其从整体上移除,如图 3 所示。最后生成碳纤维多孔材料孔隙模型如图 4 所示。

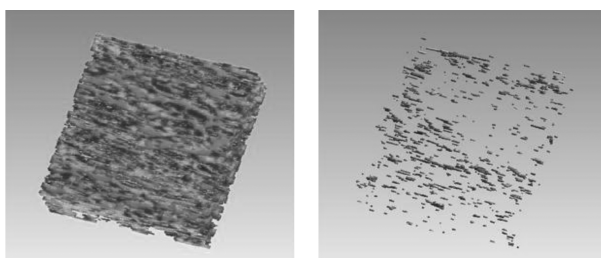


图3 重建模型中的孤立孔隙

图3 重建模型中的孤立孔隙

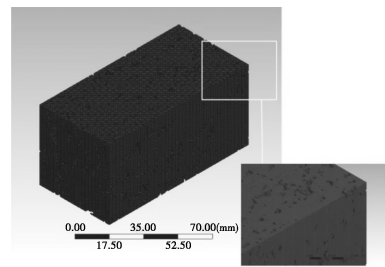


图4 多孔介质孔隙结构化网格

将 100×100 个像素大小的 200 张二值化图像的像素以一定比例收缩和放大,即赋予不同的缩放因子,使得获得的网格具有不同的密度。以液相贯穿整个多孔介质模型所需要的时间作为参考,得到的网格独立性验证如图 5 所示。网格中元素数量的增加使液相穿透多孔介质计算域中的时间指向恒定值,即添加更多元素并不代表精确度的真实增益。因此在本文中将 $0.5 \text{ mm} \times 0.5 \text{ mm} \times 1.0 \text{ mm}$ 大小的物理模型划分为具有 1 729 800 个元素大小的网格。

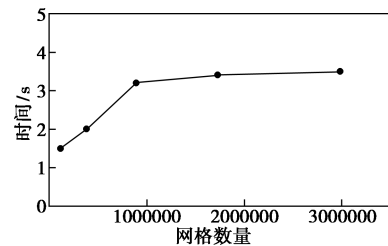


图5 网格无关性验证

在本研究体系中,对几何模型的边界条件设置为:多孔介质模型上部设置速度进口边界条件,在下部设置为压力出口和“回流”条件。其他 4 个面被定义为无滑移、不可渗透边界。采用商业软件 ANSYS 18.0 (Fluent) 进行数值模拟。本文中模拟研究采用 SIMPLE 算法求解具有假定压力场的动量方程,以此来得到边界节点处的物理通量。对于所有方程绝对收敛标准设置为 1×10^{-5} 。

3 模拟结果及分析

3.1 流速的影响

通过模拟计算发现,惯性阻力在 $0.01 \sim 0.09 \text{ m/s}$ 的流速下可以忽略不计,如表 1 所示。由此可以判断,在碳纤维多孔介质中一般情况下的渗流问题,惯性阻力可以忽略不计,例如航天热防护材料的涂层工艺。但在某些加压工艺中,必须考虑惯性阻力对整个流动体系的影响。下面将对高速流体的黏性阻力和惯性阻力进行研究。

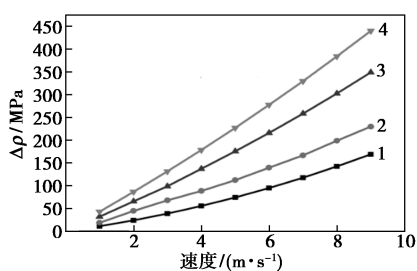
表 1 不同流速下的黏性阻力和惯性阻力

流速/(m·s ⁻¹)	黏性阻力/m ⁻²	惯性阻力/m ⁻²
0.01~0.09	7.62×10 ⁹	162
0.1~0.9	7.20×10 ⁹	6.81×10 ³
1~9	6.90×10 ⁹	8.15×10 ³

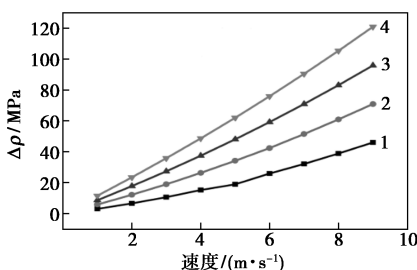
注:流体黏度为 0.1 poise,孔隙度为 0.84。

3.2 高速流体阻力的影响因素

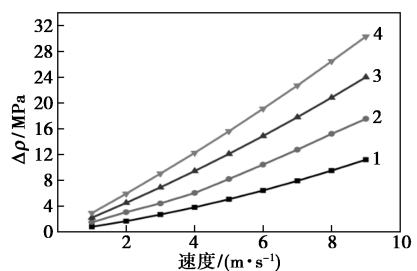
通过模拟计算,得出了不同黏度的液体流过不同孔隙度多孔介质产生的压降,如图 6 所示。图 6 清楚地表明材料的孔隙度和流体的黏度、速度对整个流域产生的压降有很大影响。随着流体黏度的增大,通过材料的压降增大,特别是对孔隙度较小的多孔介质模型。这种行为表明,由于孔隙度变小而改变了材料的微观结构,从而导致压降差异变大。然而对于较高的孔隙度,这种不同黏度和流速引起压降的差异逐渐减小。



(a) $\epsilon = 0.55$



(b) $\epsilon = 0.71$



(c) $\epsilon = 0.84$

1—0.1 poise; 2—0.2 poise; 3—0.3 poise; 4—0.4 poise

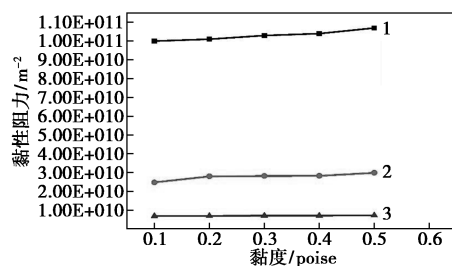
图 6 压降比较

随着黏度的减小, Δp 曲线的非线性增加。因

此,黏度对惯性流动系数 β 有很大的影响。对于更低的孔隙度来说,惯性项对整个体系的影响加强。在孔隙度 $\epsilon = 0.55$ 时,惯性项变得很重要,并且黏度的影响更明显。

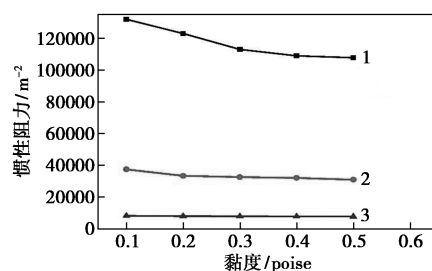
3.2.1 黏度的影响

通过拟合方程得到的黏性阻力 $1/K$ 和惯性阻力 β 如图 7、图 8 所示。在整个碳纤维多孔材料高速流体流动体系中,黏性阻力占主导作用,但是,对于不同黏度和不同孔隙度来说依然存在微小的差异。



1—0.55; 2—0.71; 3—0.84

图 7 黏度对黏性阻力的影响



1—0.55; 2—0.71; 3—0.84

图 8 黏度对惯性阻力的影响

随着黏度的增大,黏性阻力也有上升的趋势,但是这种趋势并没有超过 1 个数量级。然而,孔隙度对黏性阻力的影响更为显著,孔隙度越小影响越大。也就是说,一种大黏度的液体在孔隙度较小的多孔介质中流动时产生黏性阻力最大。

随着黏度的增大,惯性阻力有减少的趋势,孔隙度对惯性阻力的影响同样显著。但是,对于孔隙度较小的多孔介质模型来说,黏度对惯性阻力的影响明显增大。总的来说,一种小黏度的液体在孔隙率较小的多孔介质中流动时产生的惯性阻力最大。

3.2.2 孔隙度的影响

多孔介质中流动阻力的性质、依赖性是一个复杂的问题,特别是惯性阻力。正如达西定律、Forchheimer 修正方程中看到的那样,黏性和惯性阻力都与材料的内部结构紧密相关。孔隙度对黏性阻力和

惯性阻力的影响如图9、图10所示。高速流体在多孔介质中流动时孔隙率才是影响黏度阻力和惯性阻力的主要因素。也同样验证了,在同一多孔介质孔隙模型中,可以假定恒定的惯性系数和黏性系数^[14-15]。

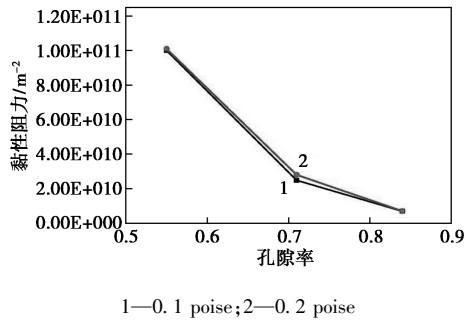


图9 孔隙率对黏性阻力的影响

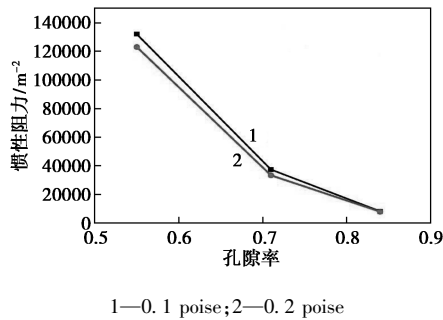


图10 孔隙度对惯性阻力的影响

4 结论

通过对多孔介质流体阻力的研究,得出了以下结论。

(1) 系统中压降和流速之间的关系满足 Forchheimer 方程,证明这种微观模型可以用来评估流体宏观流动阻力。

(2) 碳纤维多孔介质中一般情况下的渗流问题,惯性阻力可以忽略不计。

(3) 孔隙率是黏性阻力和惯性阻力的主要影响因素。所以,在基于体积平均宏观模拟体系中流体在一定速度范围内的黏性阻力和惯性阻力是恒定的这一假设是可接受的。

(4) 随着黏度的增大,体系中黏性阻力增大,惯性阻力减小。在低孔隙率的多孔介质模型中,黏度对惯性阻力的影响加深。

参考文献

[1] 邹军锋,李文静,刘斌,等.飞行器用热防护材料发展趋势[J].

宇航材料工艺,2015,45(4):10-15.

[2] 谢炜,程海峰,楚增勇,等.短切中空多孔碳纤维复合材料的吸波性能[J].无机材料学报,2008,23(3):481-485.

[3] Zhang Lv hong, Zhao Zongxian, Xiao Xiaoming. Computational fluid dynamics modeling of two-phase flows in vacuum transfer Lines[J]. Chemical Industry and Engineering, 2017, 34(4): 62-68.

[4] Mohsen Karimian S A, Anthony G Straatman. CFD study of the hydraulic and thermal behavior of spherical-void-phase porous materials[J]. International Journal of Heat and Fluid Flow, 2008, 29(1): 292-305.

[5] Ergun S. Fluid flow through packed columns[J]. Chem Eng Prog, 1952, 48: 89-94.

[6] Rui Wu, Xun Zhu, Qiang Liao, et al. Determination of oxygen effective diffusivity in porous gas diffusion layer using a three-dimensional pore network model[J]. Electrochimica Acta, 2010, 55(24): 7394-7403.

[7] Mohammadreza Fazeli, James Hinebaugh, Aimy Bazylak. Incorporating embedded microporous layers into topologically equivalent pore network models for oxygen diffusivity calculations in polymer electrolyte membrane fuel cell gas diffusion layers[J]. Electrochimica Acta, 2016, 216(20): 364-375.

[8] Brent Lindquist W, Sang-Moon Lee. Medial axis analysis of void structure in three-dimensional tomographic images of porous media[J]. Journal of Geophysical Research, 1996, 101(B4): 8297-8310.

[9] Anwar S, Al-Kharusi, Martin J. Network extraction from sandstone and carbonate pore space images[J]. Journal of Petroleum Science and Engineering, 56(4): 219-231.

[10] Brackbill J U, Kothe D B, Zemach C. A continuum method for method for modeling surface tension[J]. Journal of Computational Physics, 1992, 100(2): 335-354.

[11] Zhang J X, Zhang H M, Zhang L X. Large scale multiphase flow numerical simulation of individualized thoracic aortic dissection [C]//ACSR-Advances in Computer Science Research, 2018: 576-582.

[12] Boltcheva D, Yvinec M, Boissonnat J D. Mesh generation from 3D multi-material images, international conference on medical image computing and computer-assisted intervention[J]. Springer-Verlag, 2009, 12: 283-290.

[13] Song Rui, Liu Jianjun, Cui Mengmeng. A new method to reconstruct structured mesh model from micro-computed tomography images of porous media and its application[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2016, 109: 705-715.

[14] Cíntia Soares, Natan Padoin, Dalian Muller, et al. Evaluation of resistances to fluid flow in fibrous ceramic medium[J]. Applied Mathematical Modelling, 2015, 39(23/24): 7197-7210.

[15] Liu Liyan, Zhao Chenguang. Analyses of flow field and pressure drop in the wave-plate mist eliminator of new type[J]. Chemical Industry and Engineering, 2017, 34(2): 79-83