

# 多孔碳渗流不同介质的模拟研究

巩剑南, 王启立\*, 高晓峰, 张锋涛

中国矿业大学化工学院, 江苏 徐州  
Email: \*wqlcumt@126.com

收稿日期: 2020年10月29日; 录用日期: 2020年12月24日; 发布日期: 2020年12月31日

## 摘要

多孔碳性能优越而被广泛使用, 但其孔隙结构会使大量气孔存在而导致体积密度下降, 强度降低等性能缺陷, 这些缺陷大大的影响多孔碳的性能和应用。本文通过研究多孔碳渗流不同介质来提高其性能, 以多孔碳为材料, 利用CT扫描和三维重构技术建立多孔碳物理模型, 再用CFD对多孔碳渗流H<sub>2</sub>O和CO<sub>2</sub>分别进行模拟, 分析结果得出气体比液体渗流速度快并且所需要的启动压力和稳定压力也不同。渗流介质对多孔碳性能的提高有重要的影响。

## 关键词

多孔碳, 三维重构, 渗流模拟

# Simulation Study of Porous Carbon Infiltration in Different Media

Jiannan Gong, Qili Wang\*, Xiaofeng Gao, Fengtao Zhang

School of Chemical Engineering and Technology, China University of Mining & Technology, Xuzhou Jiangsu  
Email: \*wqlcumt@126.com

Received: Oct. 29<sup>th</sup>, 2020; accepted: Dec. 24<sup>th</sup>, 2020; published: Dec. 31<sup>st</sup>, 2020

## Abstract

Porous carbon has excellent properties and is widely used, but its pore structure will cause a large number of pores to exist, resulting in a decrease in bulk density and strength. These defects greatly affect the performance and application of porous carbon. This paper uses porous carbon as the material to improve its performance by studying different media of porous carbon infiltration, using CT scanning and three-dimensional reconstruction technology to establish a physical model

\*通讯作者。

of porous carbon, and then using CFD to simulate the porous carbon infiltration  $H_2O$  and  $CO_2$  respectively. The analysis results showed that the outgoing gas has a faster percolation rate than the liquid, and the required pressure for starting and the stable stage are different. The seepage medium has an important influence on the improvement of the performance of porous carbon.

## Keywords

Porous Carbon, Three-Dimensional Reconstruction, Seepage Simulation

Copyright © 2020 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 前言

多孔介质具有较大的比表面积、良好的均匀透过性和耐高温、耐气候性、抗腐蚀等性能,使多孔材料具有其它材料难以取代的优异性质,它可以用于冶金、化工、环保、能源、生物等行业中的气体分离、液体分离、液相色谱柱填充剂、离子选择性电极、放射性废弃物的处理、催化剂或酶的载体等方面[1]。多孔碳材料种类繁多包括活性炭、介孔碳、活性炭纤维、碳纳米管、多孔碳分子筛等,多孔碳材料具有大量纳米孔道,巨大的比表面积,在吸附、催化、储能、电容等方面潜在巨大应用价值[2]。基于碳材料的制备方法有两种:活化法和模板法。它的制法简单,与此同时,它也具有比表面积大、导电传热性好、质量轻、化学稳定性好等特点[3]。而单位体积的多孔介质中最大孔隙团体积所占的比率反映了多孔介质中流体的运动与扩散现象[4] [5],表示孔隙的连通状态可以决定多孔介质的主要性质。

通过研究流体在多孔介质内的渗流问题进而可以提高多孔介质的性能,国内外学者取得了较多成果。十九世纪五六十年代,Darcy 研究城市地下水问题得出达西定律,渗流力学从此蓬勃发展;Pascal 研究发现当流体处于低速流动时压力梯度克服流体主要的力是粘性阻力[6];Brinkman 将 Darcy 流与 Stokes 流结合起来,对达西定律引入有限黏度并用于高孔隙率多孔介质;十九世纪八十年代初,Vafai 和 Tien 假设流体连续流动,获得了应用较广的广义达西定律。这些在渗流模拟方面目前常用的方法有:格子法[7]、有限元法[8]与逾渗法[9]等。

诸多研究表明[10] [11] [12],多孔介质的渗透效果由孔隙结构参数共同决定,并不是某一孔隙结构参数的单值函数,也不随某一结构参数发生简单的递增或递减变化,定量描述这种多值函数和对多孔介质孔隙精确取值是当前需要解决的一大难题,随着计算机断层扫描(CT)技术分辨率和精度的提高,CT 技术逐渐应用于分析散体孔隙特征[13] [14] [15] [16] [17]。在国内,利用 CT 扫描方法获取多孔介质孔隙参数工作开展较晚,Lin 等[18]学者借助 CT 技术揭示了矿岩散体在浸出过程中孔隙率随浸柱高度的空间变化规律。Miller 等人[19]通过  $\mu$ -CT 扫描微型浸柱,分析了矿物揭露程度与矿石颗粒径的关系。杨保华[20]通过医学 CT 扫描浸柱,分析了二维孔隙率与浸柱断层的分形关系,同时也研究了矿石间孔隙的空间分布特征。CT 技术在模拟的研究取得了重大的成果[21]-[27],具有丰富的理论指导。它和三维重构模型方法相结合,建立微观孔隙结构模型,为其渗流模拟奠定基础。

本文以煤基多孔碳为研究对象,利用 CT 扫描技术获得多孔碳二维切片照片,通过三维图像处理技术处理二维照片重构得到多孔碳微观模型结构,再用 FLUENT 进行模拟。探究多孔碳渗流不同介质( $H_2O/CO_2$ )的模拟过程和影响因素,得出有利于多孔碳渗流的规律,最大化提高多孔碳的适用范围和性能。为后续多孔介质的研究提供基础。

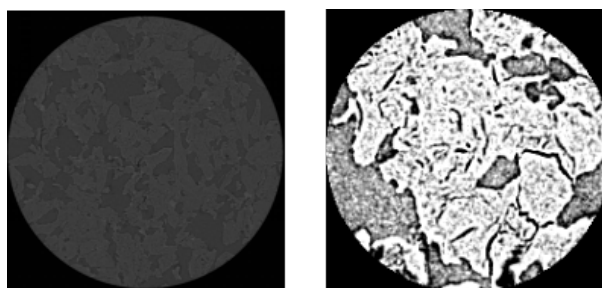
## 2. 模型与数值分析

### 2.1. 模型构建

在通过 CT 成像技术得到二维切片照片时由于操作环境和技术缺陷等的影响,使得在 CT 成像过程中存在噪音,得到的二维切片照片总体较暗、前后存在差异以及等问题,因此就需要对图像进行处理,包括:CT 图片的选取、亮度调节、滤波处理等步骤。

#### 2.1.1. CT 图片的选取和调节

本文选取尺寸为直径 8 mm 长度为 20 mm 的圆柱试样进行 CT 扫描,最终获得了 1000 张像素为  $986 \times 1014$  体素为  $2.033 \mu\text{m}$  的 16 位二维灰度切片图片,体素即就是所能识别的最小尺寸,这些 CT 图片总体比较暗,如图 1(a)展示了 CT 照片中第 400 张图处理前后照片。考虑计算机计算能力等的问题,图片过大需要千万级的网格数量,求解困难。在不改变灰度值的条件下,对这 1000 张照片进行亮度调节和选择,如图 1(b)。最终选取了 300~699 张像素为  $200 \times 200$  的连续照片。



(a) 第 400 张未处理前 CT 图 (b) 第 400 张处理后的照片

Figure 1. The 400th CT image before and after processing

图 1. 第 400 张处理前后 CT 图

#### 2.1.2. 三维重构

三维重构时多孔介质有限元模型构建至关重要的一步,它包括图片导入、体渲染、阈值分割、孔隙提取、骨架化等步骤。把经过处理的 CT 图片在三维可视化软件 AVIZO 中,设置 X、Y、Z 三方向的体素为  $2.033 \mu\text{m}$ ,由于设备的局限性造成了图片有锯齿状的条纹产生。如图 2(a)所示,亮的为基质暗的孔隙,略有模糊,为了进一步看清基质和孔隙的分布,随之对图 2(a)所示多孔碳进行体渲染如图 2(b)所示,图中黄色为基质绿色的孔隙。



(a) 多孔碳渲染前 YZ 面

(b) 多孔碳渲染后 YZ 面

Figure 2. Three-dimensional reconstruction of porous carbon before rendering and after rendering

图 2. 渲染前后的多孔碳三维重构

### 2.1.3. 网格划分

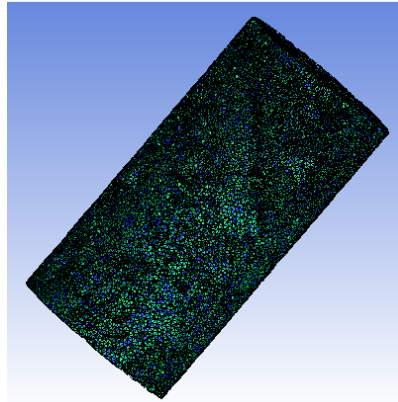


Figure 3. Three-dimensional grid division of porous carbon

图 3. 多孔碳三维孔隙网格划分

利用 ICEM 对三维重构的模型进行网格修复，采用非结构化网格，手动去除重复面、补孔、去除相交面等，修补好的网格如图 3 所示。在经过一系列网格处理后，总的网格数量为 45 万个，网格质量均大于零，可以进行模拟。

## 2.2. 数值分析

### 2.2.1. 数值计算

本文选取多孔碳建立有限元模型，假定流体为连续流体，其流动规律可用无滑移边界条件的 N-S 方程进行阐述。流体遵循质量、能量以及动量守恒。

#### 1) 质量守恒方程

质量守恒方程是单位时间内流体微元的质量变化率为 0，其关系式如式 1 所示：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w_z)}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

式中， $\rho$  为流体的密度； $u_x$ 、 $v_y$ 、 $w_z$  表示流体速度分量。

#### 2) 动量守恒方程

动量守恒方程(N-S)流体微元动量对时间的变化率与外界作用力矢量和。如式 2 示：

$$\frac{\rho \partial u_i}{\partial t} + \frac{\rho \partial u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i + F_i \quad (2)$$

式中， $p$  为流体微元受到的压力； $\tau_{ij}$  为由于分子之间的粘性力分量； $F_i$  为作用在流体微元上的质量力。

#### 3) 能量守恒方程

能量守恒方程也称为能量守恒定律，它的基本表述关系如式 3：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_j}(u_j(\rho E + p)) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} - \sum_j h_j J_j + u_j \tau_{ij} \right) + S_h \quad (3)$$

式中， $\lambda$  代表传热系数； $J_j$  代表组分  $j$  的扩散流量； $S_h$  指代的是流体粘性热耗散项； $E$  代表流体的内能、动能、势能的总和。 $E$  表达关系如式 4：

$$E = i + \frac{p}{\rho} + \frac{u_i^2}{2} = h - \frac{p}{\rho} + \frac{u_i^2}{2} \quad (4)$$

### 2.2.2. 边界条件设置

压力进口、压力出口并采用不同流体介质进行渗流模拟，模拟不同介质 CO<sub>2</sub> 和 H<sub>2</sub>O 来对多孔碳渗流进行分析，进口压力范围为 1.01 × 10<sup>2</sup>~1.01 × 10<sup>7</sup> Pa (小于多孔碳的最大抗压强度 12.17 MPa)，出口压力为 0 Pa，再选取不同进口流速分别模拟。这里假设介质和多孔碳模型孔隙都是稳态情况下进行。

## 3. 不同流体结果分析

本文研究了以 H<sub>2</sub>O、CO<sub>2</sub> 为流体介质，在不同压力作用下通过多孔材料时的渗流情况。图 4 分别为以 H<sub>2</sub>O(a)和 CO<sub>2</sub>(b)为流体介质，进口压力 101 kPa 下多孔介质整体压力分布云图。图 5 分别为以 H<sub>2</sub>O(a)和 CO<sub>2</sub>(b)为流体介质，进口压力 101 kPa 下多孔介质整体速度分布云图。

图 4 可得出：H<sub>2</sub>O、CO<sub>2</sub> 的压力云图在整体规律上呈现出一致性，但在出口面以及压力最小值方面存在差异，以水为流体介质时，红色部分(高压)较少，浅绿色(低压)较多。图 5 可看出：H<sub>2</sub>O、CO<sub>2</sub> 的速度云图在整体规律上也呈现出相似性，但是在局部存在差别，其中以水为流体介质时，蓝色部分(低速)最多，黄色部分(高速)最少，以二氧化碳为流体介质时较少，这反映了其多孔碳的渗流速度。

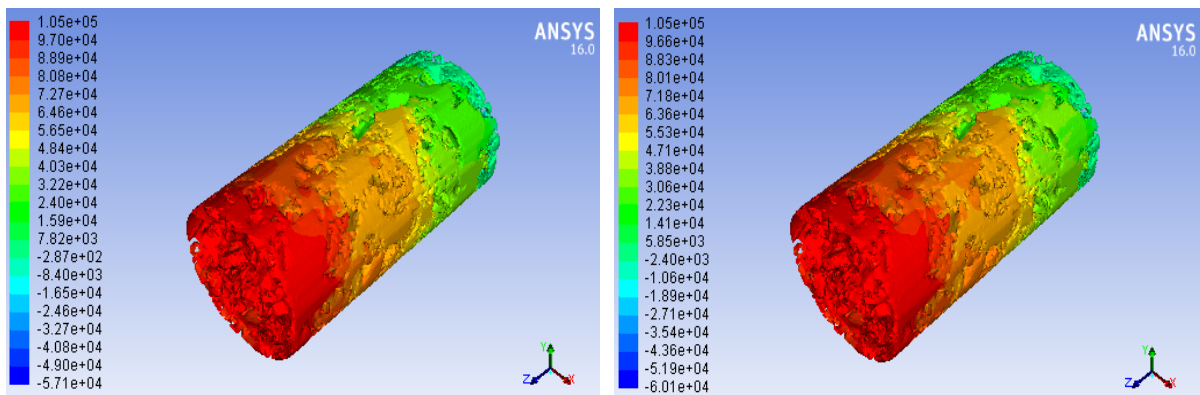


Figure 4. Overall pressure distribution of porous carbon at 101 kPa

图 4. 101 kPa 下多孔碳整体压力分布

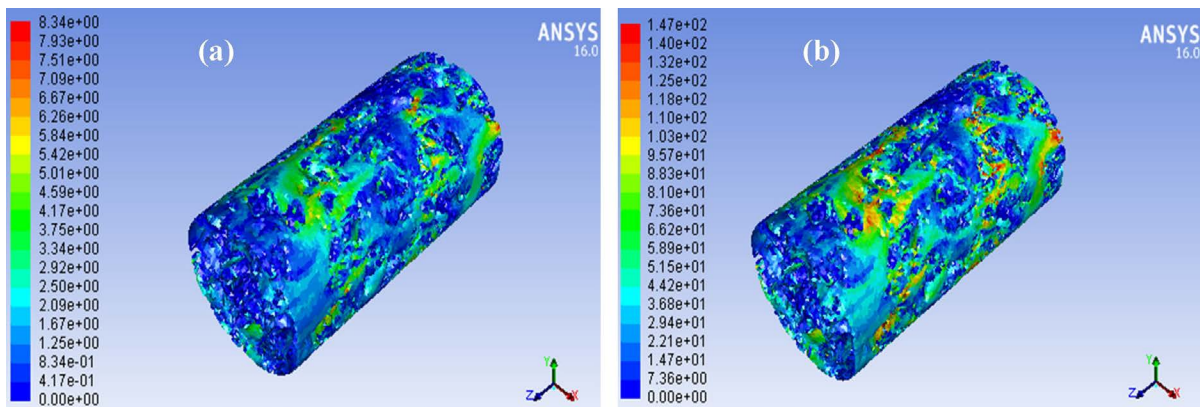


Figure 5. Overall velocity distribution of porous carbon at 101 kPa

图 5. 101 kPa 下多孔碳整体速度分布

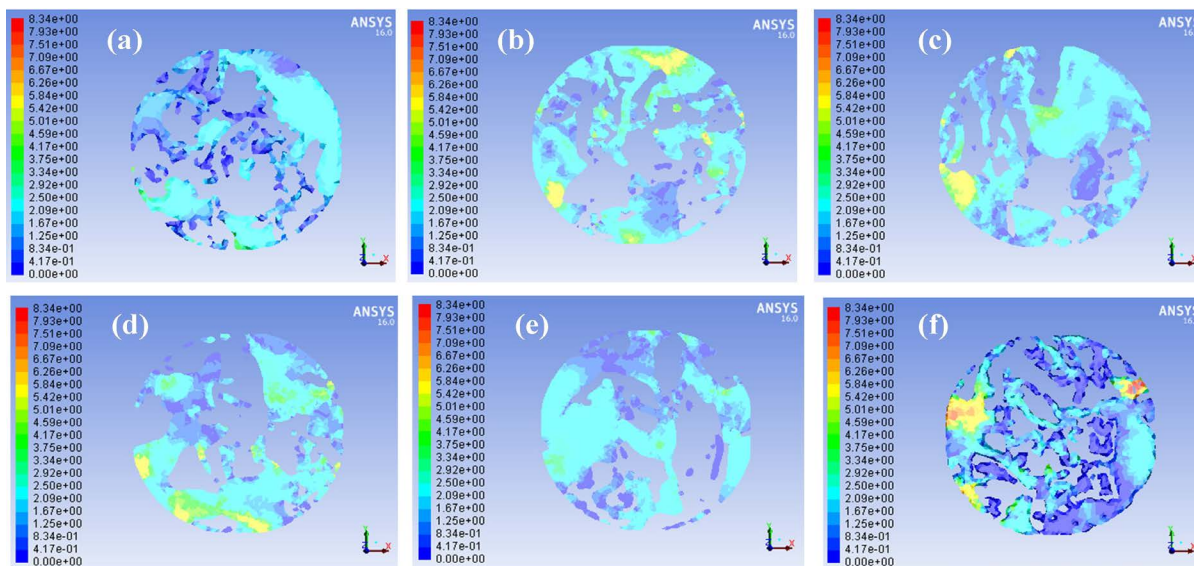


Figure 6. Velocity distribution (H<sub>2</sub>O) of each section of porous carbon at 101 kPa

图 6. 101 kPa 下多孔碳各截面速度分布(H<sub>2</sub>O)

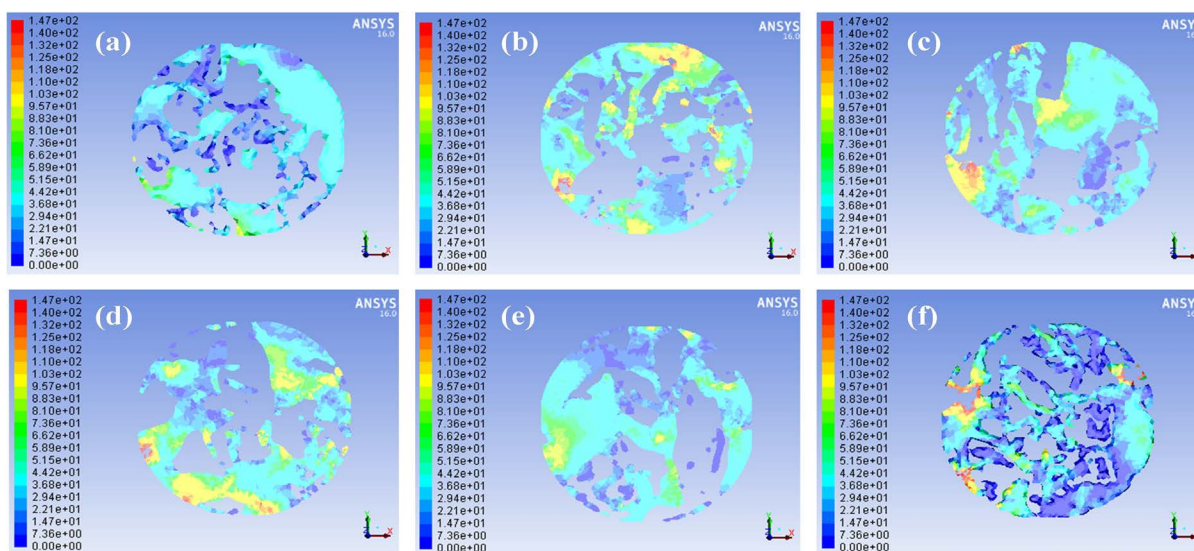


Figure 7. Velocity distribution (CO<sub>2</sub>) of each section of porous carbon at 101 kPa

图 7. 101 kPa 下多孔碳各截面速度分布(CO<sub>2</sub>)

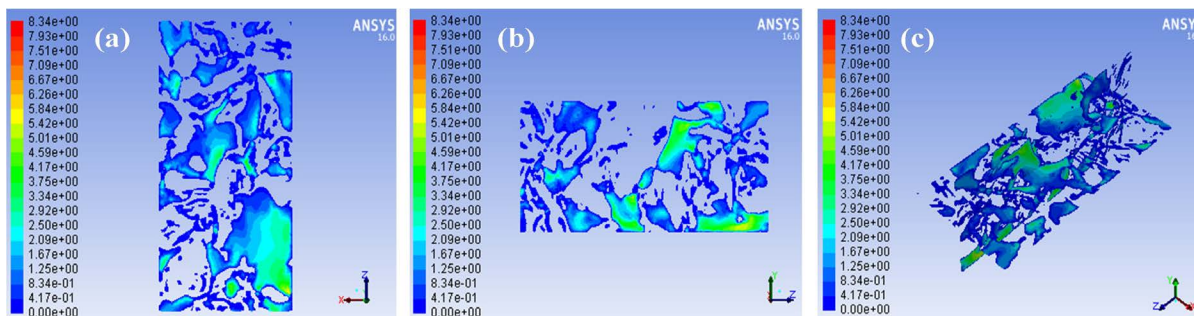
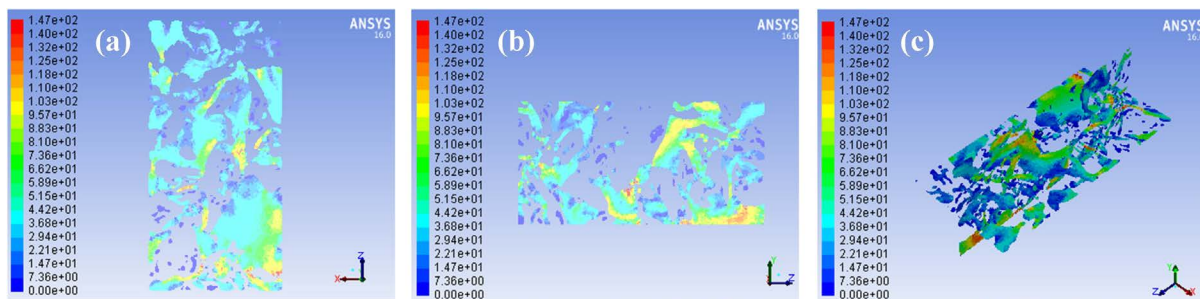


Figure 8. XOZ and YOZ surface velocity distribution (H<sub>2</sub>O) at 101 kPa

图 8. 101 kPa 下 XOZ 与 YOZ 面速度分布(H<sub>2</sub>O)

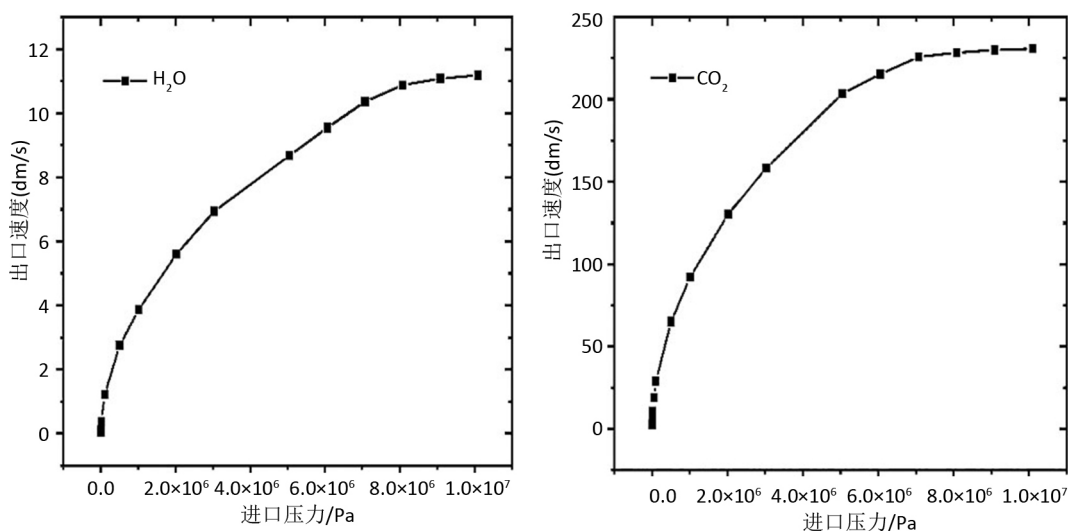


**Figure 9.** XOZ and YOZ surface velocity distribution ( $\text{CO}_2$ ) at 101 kPa  
**图 9.** 101 kPa 下 XOZ 与 YOZ 面速度分布( $\text{CO}_2$ )

为了研究多孔碳内部在不同渗流介质下的渗流规律，依次模拟了在 101 kPa 下  $h = 100、80、60、40、20、0 \text{ mm}$  处各 XOY 面以及 XOZ 面与 YOZ 面速度分布。图 6 与图 7 分别为以  $\text{H}_2\text{O}$  和  $\text{CO}_2$  为流体介质在 101 kPa 下截面高度为 100、80、60、40、20、0 mm 处的各截面速度分布云图，图 8 与图 9 分别为以  $\text{H}_2\text{O}$  和  $\text{CO}_2$  为流体介质在 101 kPa 下在 XOZ 面、YOZ 面以及 XOZ 与 YOZ 正交面的渗流速度分布云图。

分析图 6~9 的各截面速度云图可看出：在这两种介质下，平均速度整体呈现从进口先增大再平缓变化再减小再增大的规律，流体局部出现回流，从图 6 与图 7 可看出，进口面(a)速度变化范围最小，出口面(f)速度变化范围最大，截面在 80(b)、60(c)、40(d) mm 的 3 个截面处速度整体大于进口，比较平稳，这说明该多孔碳中部位置孔隙较多分布相对规律。这说明该多孔材料边缘孔隙较多，截面中间位置孔隙较少，根据速度云图整体来看具有平稳的渗流效果。

进一步对  $\text{H}_2\text{O}$  和  $\text{CO}_2$  在不同压力下进行模拟的结果如图 10 和图 11。两幅图展示如下的特点：两种流体介质的在不同压力下，进口压力与出口流速呈现非线性递增的关系，随着进口压力的增加，出口流速先快速再缓慢增加，然后逐渐趋于平缓。其中，液态水的增长较为平缓，气体的介质二氧化碳的增长曲线较陡峭。而进口压力与稳态时间呈现反比例函数关系，液态水所需的稳定时间较长，下降比较缓慢，气态二氧化碳所需的稳定时间较短，曲线急速下降后，稳定时间不随进口压力而变化。此外， $\text{H}_2\text{O}$  和  $\text{CO}_2$  两种介质在该多孔介质内的存在启动压力与稳定压力，并且水的启动压力在 3 MPa 左右，二氧化碳的启动压力在 0.5 MPa 左右，水的稳定压力在 9 MPa 左右，二氧化碳的稳定压力在 6 MPa 左右，从而得出液



**Figure 10.** Relationship between inlet pressure and outlet flow rate of  $\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{CO}_2$   
**图 10.**  $\text{H}_2\text{O}$  和  $\text{CO}_2$  进口压力与出口流速关系图[28]

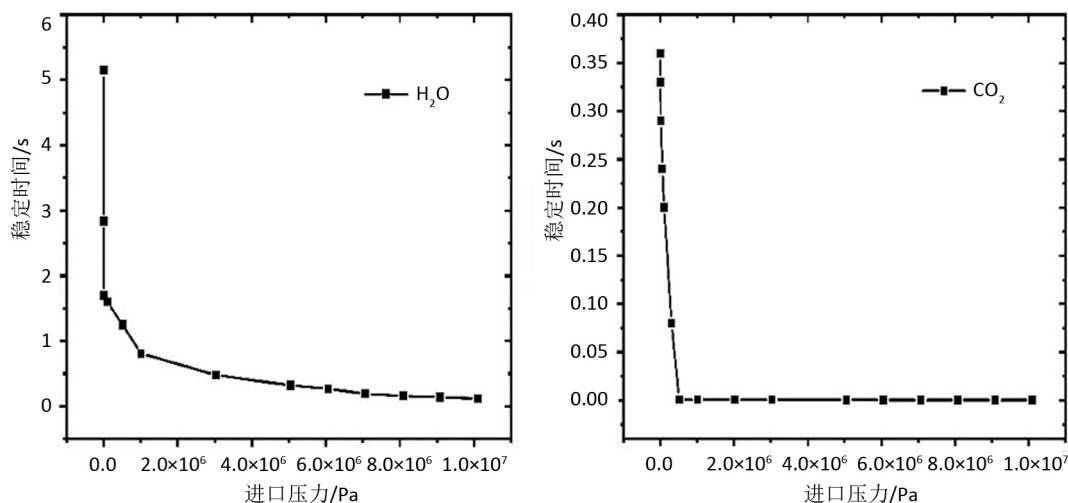


Figure 11. Relationship between H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> inlet pressure and stabilization time

图 11. H<sub>2</sub>O 和 CO<sub>2</sub> 进口压力与稳定时间关系图[28]

态的介质的启动压力与稳定压力均大于气态介质的稳定压力与启动压力，并且气态介质之间二者的数值也与气态介质的性质有关。

#### 4. 结论

1) 多孔碳的渗流过程是个复杂的过程，并非某一特定结构参数所决定，不同的渗流介质会有不同的渗流效果，多孔碳对某些渗流介质展现出了特定的吸附性能。

2) 多孔碳渗流不同介质总体上呈现相似规律，局部存在差异，相同条件下，气体在多孔介质内的流速远大于液体，并且不同的流体介质在多孔介质中渗流时存在不一样的启动压力与稳定压力，水、二氧化碳启动压力 3 MPa 和 0.5 MPa；稳定压力 9 MPa 和 6 MPa。

#### 基金项目

徐州市重点研发计划(KC19222)，中央高校基本科研业务费专项资金资助(2019GF02)。

#### 参考文献

- [1] 高文元, 孙俊才, 马铁成. 多孔无机材料的性质及用途[J]. 中国陶瓷工业, 2003(3): 49-52+48.
- [2] 郑经堂, 张引枝, 王茂章. 多孔炭材料的研究与开发[J]. 炭素技术, 1995(3): 13-18.
- [3] 聂玉静. 高性能炭材料生产用浸渍剂沥青的研究[D]: [硕士学位论文]. 武汉: 武汉科技大学, 2003.
- [4] Sahimi, M. (1998) Non-Linear and Non-Local Transport Processes in Heterogeneous Media: From Long-Range Correlated Percolation to Fracture and Materials Breakdown. *Physics Reports*, **306**, 213-395. [https://doi.org/10.1016/S0370-1573\(98\)00024-6](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(98)00024-6)
- [5] Stanleyh, E., Andradeijr, J.S. and Havlins, S. (1999) Percolation Phenomena: A Broad-Brush Introduction with Some Recent Applications to Porous Media, Liquid Water, and City Growth. *Physical A*, **266**, 5-16. [https://doi.org/10.1016/S0378-4371\(99\)00029-1](https://doi.org/10.1016/S0378-4371(99)00029-1)
- [6] Pascal, J.P. and Pascal, H. (1997) Non-Linear Effects on Some Unsteady Non-Darcian Flows through Porous Media. *International Journal of Non Linear Mechanics*, **32**, 361-376. [https://doi.org/10.1016/S0020-7462\(96\)00062-5](https://doi.org/10.1016/S0020-7462(96)00062-5)
- [7] 岳文正, 陶果, 朱克勤. 二维格子气自动机模拟孔隙介质的电传输特性[J]. 地球物理学报, 2005, 48(1): 189-195.
- [8] 宋怀玲. 几类地下渗流力学模型的数值模拟和分析[D]: [博士学位论文]. 济南: 山东大学, 2005.
- [9] 王克文, 关继腾, 范业活, 等. 孔隙网络模型在渗流力学研究中的应用[J]. 力学进展, 2005, 35(3): 51-58.
- [10] 李涛, 李敏, 景雪琪, 等. 孔隙尺度各向异性和孔隙分布非均质性对多孔介质渗透率的影响机理[J]. 石油勘探开



- 发, 2019, 46(3): 1-11.
- [11] 雷树业, 王利群, 贾兰庆, 等. 颗粒床孔隙率与渗透率的关系[J]. 清华大学学报, 1998, 38(5): 20-28.
- [12] Adler, P.M. and Thovert, J.F. (1995) Real Porous Media: Local Geometry and Macroscopic Properties. *Applied Mechanics Reviews*, **51**, 537-585. <https://doi.org/10.1115/1.3099022>
- [13] Videla, A.R., Lin, C.L. and Miller, J.D. (2007) 3D Characterization of Individual Multiphase Particles in Packed Particle Beds by X-Ray Microtomography (XMT). *International Journal of Mineral Processing*, **84**, 321-326. <https://doi.org/10.1016/j.minpro.2006.07.009>
- [14] Ohnishi, K., Suzuki, Y. and Watanabe, Y. (2014) Quantitative 3D Characterization of the Pore Space of Real Rocks: Improved  $\mu$ -CT Resolution and Pore Extraction Methodology. *Animal*, **8**, 1339-1348.
- [15] Knackstedt, M.A., Arns, C.H., Limaye, A., et al. (2004) Digital Core Laboratory: Properties of reservoir Core Derived from 3D Images. *SPE Asia Pacific Conference on Integrated Modelling for Asset Management*, 29-30 March, Kuala Lumpur, 66-68. <https://doi.org/10.2118/87009-MS>
- [16] Garcia, D., Lin, C.L. and Miller, J.D. (2009) Quantitative Analysis of Grain Boundary Fracture in the Breakage of Single Multiphase Particles Using X-Ray Micro-Tomography Procedures. *Minerals Engineering*, **22**, 236-243. <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2008.07.005>
- [17] Lin, C.L., Miller, J.D. and Garcia, C. (2005) Saturated Flow Characteristics in Column Leaching as Described by LB Simulation. *Minerals Engineering*, **18**, 1045-1051. <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2005.02.006>
- [18] Miller, J.D., Lin, C.L., Garcia, C., et al. (2003) Ultimate Recovery in Heap Leaching Operations as Established from Mineral Exposure Analysis by X-Ray Microtomography. *International Journal of Mineral Processing*, **72**, 331-340. [https://doi.org/10.1016/S0301-7516\(03\)00091-7](https://doi.org/10.1016/S0301-7516(03)00091-7)
- [19] Xu, W., Dhawan, N., Lin, C.L., et al. (2013) Further Study of Grain Boundary Fracture in the Breakage of Single Multiphase Particles Using X-Ray Microtomography Procedures. *Minerals Engineering*, **46-47**, 89-94. <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2013.03.016>
- [20] 杨保华. 堆浸体系中散体孔隙演化机理与渗流规律研究[D]: [博士学位论文]. 长沙: 中南大学, 2010.
- [21] Hambli, R. (2013) Micro-CT Finite Element Model and Experimental Validation of Trabecular Bone Damage and Fracture. *Bone*, **56**, 363-374.
- [22] Crocker, A., Smith, G., Flewitt, P., et al. (2013) Grain Boundary Fracture in the Cleavage Regime of Polycrystalline Metals. *American Journal of Botany*, **49**, 110-115.
- [23] 黄明清. 硫化铜矿生物堆浸气体渗流规律及通风强化浸出机制[D]: [博士学位论文]. 北京: 北京科技大学, 2015.
- [24] 吴华山, 陈效民, 陈粟. 利用 CT 扫描技术对太湖地区主要水稻土中大孔隙的研究[J]. 水土保持学报, 2007, 21(2): 175-178.
- [25] 赵冬, 许明祥, 刘国彬, 等. 用显微 CT 研究不同植被恢复模式的土壤团聚体微结构特征[J]. 农业工程学报, 2016, 32(9): 123-129.
- [26] 郭晓明, 马腾, 陈柳竹, 等. 污水灌溉下土壤孔隙特征的 CT 定量分析[J]. 地球科学-中国地质大学学报, 2015(11): 1896-1903.
- [27] 王宇, 李晓, 阙介民, 等. 基于 CT 图像灰度水平的孔隙率计算及应用[J]. 水利学报, 2015, 46(3): 357-365.
- [28] 巩剑南. 煤基多孔介质三维重构与渗流模拟研究[D]: [硕士学位论文]. 徐州: 中国矿业大学, 2020.