

An Example of Network Structure Model Applied to the Infiltration Process in Porous Medium

Qingyu Li, Qian Wang, Xianzhi Xu

University of Science and Technology of China, Hefei
Email: liqy@mail.ustc.edu.cn, wqwq90@mail.sutc.edu.cn, xuxz@ustc.edu.cn

Received: Aug. 20th, 2013; revised: Sep. 3rd, 2013; accepted: Sep. 7th, 2013

Copyright © 2013 Qingyu Li et al. This is an open access article distributed under the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

Abstract: Based on the infiltration process in porous medium, with photographs of the gas diffusion electrode in electron microscope as an example, the real porous medium is grid-divided. With certain principles, the meshing porous medium is turned into topology network model, namely artificial assignment technology. And the infiltration process is simulated in porous medium with the low pressure condition.

Keywords: Porous Medium; Gas Diffusion Electrode; Topology Network; Artificial Assignment; Low Pressure Condition

拓扑网络技术应用于多孔介质浸润过程的一个算例

李清宇, 王 乾, 徐献芝

中国科学技术大学, 合肥
Email: liqy@mail.ustc.edu.cn, wqwq90@mail.sutc.edu.cn, xuxz@ustc.edu.cn

收稿日期: 2013 年 8 月 20 日; 修回日期: 2013 年 9 月 3 日; 录用日期: 2013 年 9 月 7 日

摘 要: 基于多孔介质的浸润过程, 以电镜下所得气体扩散电极照片为例, 将实际多孔介质进行网格划分, 并按照一定的原则将网格化多孔介质转化为拓扑网络模型, 即人工赋值构造拓扑网络技术。在小压力情况下模拟液体在多孔介质中的浸润过程。

关键词: 多孔介质; 气体扩散电极; 拓扑网络; 人工赋值; 小压力情况

1. 引言

1.1. 多孔介质的浸润过程

多孔介质是由固体物质组成的骨架和由骨架分隔成大量密集成群的微小空隙所构成的物质^[1]。多孔介质的浸润是指在固体和两种流体(两种非互溶液体或液体与气体)的三相接触面上三相分子层保持能量平衡过程^[2]。目前对多孔介质的浸润过程的研究分为两种: 一为多从逾渗理论出发, 研究液体渗透概率等

问题^[3], 二为对于浸润过程中具体的两相分布及流动过程的研究。对后者的研究大多采用两种方法: 1) 通过对外貌的观察进而对内部的变化进行分析^[4]; 2) 通过示踪离子或高效液相色谱(HPLC)和 X 射线电子能谱(XPS)直接得出每个时刻的两相界面分布^[5]。

上述两种方法各有千秋, 但是都存在一些制约条件: 外貌分析法简单易行, 但是不够精确, 不能得出具体时刻的两相分布; 而示踪粒子和色谱分析法十分精确, 但是过程复杂, 限制较大, 难以应用到对象较

大的环境中,如油田开发、水文地质等领域中。

1.2. 拓扑网络模型

本文采取了拓扑网络模型方法对多孔介质的浸润过程进行描述。拓扑网络模型^[6]将实际多孔介质中不参与流动的骨架部分简化为网络以外的部分,孔隙部分简化为节点和管道,并赋予一定物理特性,以此构成拓扑网络结构。液体在网络中的流动可以用液体在管道和节点中的流动表达。

比如只在表面张力作用下,液体通过一定分布的亲憎水管道时,就可以简化为简单的通或不通,通过逐行扫描,就可以对每个节点进行含水判断,以此反复,最终得到具体的气液分布图形。

1.3. 气体扩散电极

气体扩散电极^[7]是一种典型的多孔介质,广泛地应用于燃料电池中。

气体扩散电极的制作过程是将亲水介质石墨、活性炭等和憎水介质聚四氟乙烯等混合搅拌,再涂抹压制进泡沫镍骨架中。电极成型后,其微米尺度上每个孔隙所呈现的亲憎水性以及形状、管径是不同的、随机的。正因为孔隙的随机性,在气体扩散电极工作时,液体在表面张力的作用下发生浸润现象并形成复杂的气液固三相交界线。

因此,本文以气体扩散电极为例,借助拓扑网络模型,对多孔介质的浸润过程进行研究。

1.4. 随机赋值与人工赋值

之前所做的拓扑网络模型研究采取的随机赋值,即每个管道的亲憎水性是随机的,重点研究液体在网络模型中的流动趋势与渗透概率问题。

实际的多孔介质可以通过很多方法(电镜扫描,X射线,核磁共振等)得到内部孔隙的分布。人工赋值过程就是将多孔介质内部实际的孔隙分布转化为拓扑网络中的节点与管道。在拓扑网络中,液体的流动模拟过程可以在一定程度上代表实际液体在多孔介质中的流动。

本文在对多孔介质的浸润过程进行研究时,以气体扩散电极为例,借助拓扑网络模型,对实际的多孔介质进行人工赋值,描述了液体在气体扩散电极中的流动过程以及气液界面分布,并对饱和度随时间的变

化进行了计算。

2. 人工赋值技术流程

选取一张电镜图片下的气体扩散电极区域,采用人工赋值方法,将这块区域转化为拓扑网络。

图1截取自气体扩散电极的电镜照片,可以看出图中的孔隙与固体骨架。白色区域是泡沫镍骨架,黑色凹陷区域是孔隙,黑色充实区域可以认为是在该尺度下无空隙区域。

对上述图片进行网格划分,其中每个网格大小为 $5\ \mu\text{m} \times 5\ \mu\text{m}$ 。拓扑网络的比例为 43×29 。

划分网格后,需要将网格化气体扩散电极转化为拓扑网络模型。拓扑网络中的节点即为图2中的网格节点,管道的通透性由以下原则判定:

通过观察,将连接节点的管道的通透性分为三种情况:

- 1) 大管道,电镜图中,节点之间区域存在孔隙且孔隙管径 $\geq 5\ \mu\text{m}$;
- 2) 中管道,电镜图中,节点之间区域存在孔隙且孔隙管径 $< 5\ \mu\text{m}$;
- 3) 小管道,电镜图中,节点之间区域在该尺度下无可观察到的孔隙。

这样,通过人工识别,判断每个管道的通透性并对其赋值,转化后的网格即为如图3所示的转化后的拓扑网络。

3. 模拟流动过程

模拟流动过程是在图3所示网络中,下方为液体,上方为气体,液体在设定情况下,逐层寻找通过多孔介质的通道。

3.1. 虚拟时间步 t

在流动过程中,加入了一个虚拟时间步 t ,一个虚拟时间步代表液体通过一个管道的的时间,即液体从一个节点流动到另一个相邻节点所需时间。

这个虚拟时间步并不是真正意义上的物理时间,但它表达了正确的物理时间次序。因为多孔介质内液体流动的速率各有不同,主要受管道的曲率半径,形状因子影响。虚拟时间步的设定是为液体的流动提供了一个简单的度量,并便于观察与计算。

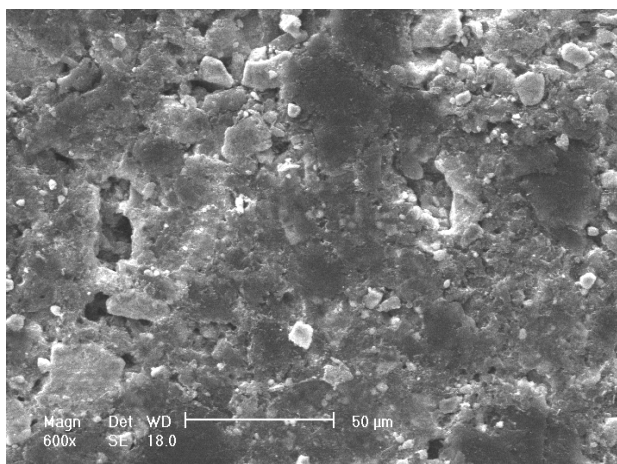


Figure 1. The electron microscope image of gas diffusion electrode
图 1. 电镜下的气体扩散电极

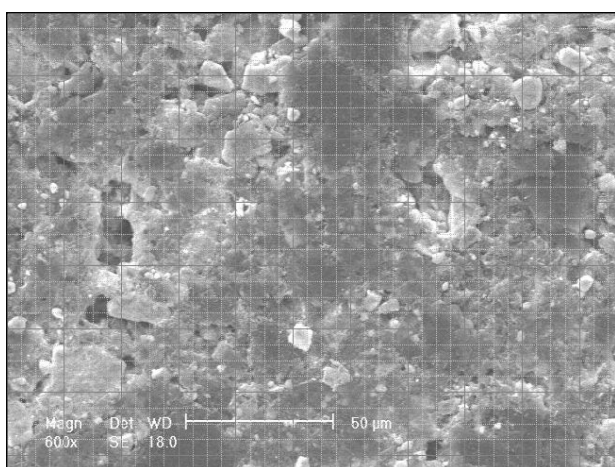


Figure 2. Divided electron microscope image of gas diffusion electrode
图 2. 划分网格后的气体扩散电极图

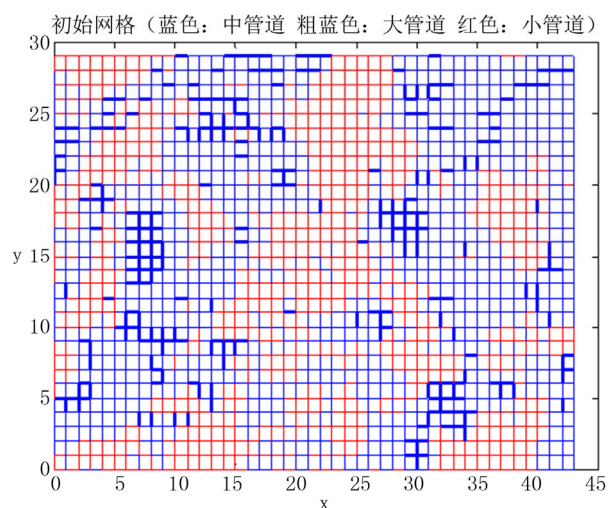


Figure 3. Transformed topology network diagram
图 3. 转化后的拓扑网络示意图

3.2. 小压力情况

因为气体扩散电极的亲憎水性是不能通过电镜图片得知，因此本文设定孔隙全部为憎水，只考虑管径的影响，采用了小压力设定。

这种设定即在液体一侧加入一定的压力，在压力的作用下，液体会向另一侧浸润。小管道的毛管力远大于大管道和中管道的，因此压力不会使液体通过小管道。当液体浸润至多孔介质另一端的任意一个节点时，计算终止。

3.3. 液体在网络中流动时的流动判据

在流动过程中，对于“人”字形的流动，即液体从一个管道分别流向两个管道时，如果两个管道的管径不同，管阻也不同。当管径比例相差较大时，小管道中管阻远大于大管道中的管阻，因此液体会优先从大管道中流动，如图 4 所示。

因此，当液体流动时，如果液体遇到小管道时，液体不会通过小管道；当管道是中管道且周围无大管道时，液体从中管道中流动；当管道为大管道时，液体从大管道中流动，周围的中管道中有水，但是不流动。

当液体从一个节点向另一个节点运动时，以此为流动判据，每经过一个虚拟时间步，液体最多流动一个管道的长度。随着虚拟时间步 t 的增加，可以得到一个液体运动的动态过程。

4. 模拟渗透过程

设定网络下方为液体，上方为气体，液体在小压力的作用下在此区域内进行运动，当液体突破网络最上层任意一点时，计算停止。

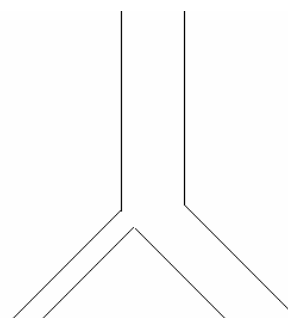


Figure 4. Herringbone pipeline, flow of the right pipeline far outweigh the left
图 4. “人”字形管道分布，右侧管道流量远大于左侧管道

渗透过程:

从图 5 中可以发现, 当 $t = 30$ 时, 液体已经有一

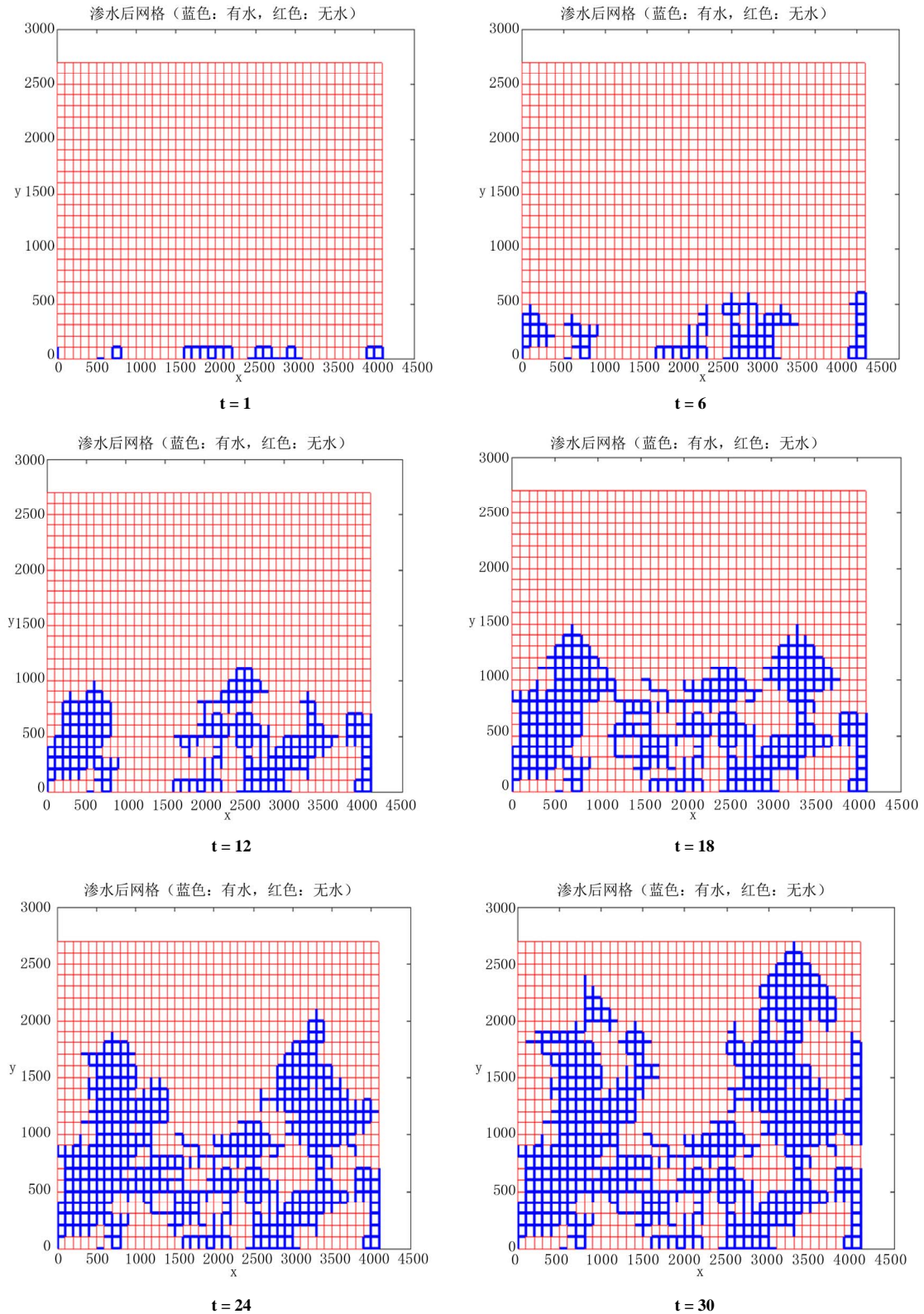


Figure 5. The infiltration process from 1 to 30 time steps
图 5. 时间步 1-30 的渗透过程

点突破了多孔介质，达到了最上方，此时液体压力会因为液体突破后产生的流量而开始改变，即压力有一个骤变，故 $t = 30$ 之后的情形没有继续画出。

5. 结果与分析

本算例成功模拟了多孔介质内液体的具体流动图形，同时还可以给出饱和度与时间步的关系。

5.1. 多孔介质饱和度与时间步的关系

多孔介质的饱和度为多孔介质内的液体总体积与多孔介质内孔隙总体积之比。在本算例中，设定中管道的管径平均为 $2.5 \mu\text{m}$ ，大管管径平均为 $7.5 \mu\text{m}$ ，通过统计计算得出多孔介质饱和度与时间步的关系如图 6 所示。

从上图可以看出，饱和度在液体突破多孔介质前，大致呈现类似线性变化。

5.2. 拓扑网络中任意一行的饱和度变化规律

取拓扑网络中的第 10 行区域为例，该区域包括 44 个横向管道与 44 个纵向管道，统计该区域的饱和度变化曲线，如图 7。

通过对图 7 的观察，可以看到第 10 行的饱和度在时间步为 10 时开始增加，在时间步 10~20 内增加速度很快，接近线性增加；在时间步 20~30 内增加缓慢，30 之后不再增加，维持在 0.83。饱和度最终数值小于 1，说明第 10 行的孔隙并未全部充满水，即存在“死气区”。

如图 7 所示，拓扑网络第 10 行饱和度变化并不像图 6 所示的多孔介质整体饱和度一样呈现类似线性增加，原因可能为：时间步 10 之前，液体还未到达该区域；在拓扑网络第 10 行区域内，分为纵向管道与横向管道，在时间步 10~20 时，液体到达该区域，纵向与横向管道同时开始充水，而时间步从 20 开始，纵向管道已经接近饱和，此时饱和度的增加主要是横向管道的充水，当时间步到达 28 时，饱和度已经稳定，即该区域内的管道已经全部饱和。

通过上述分析，可以将拓扑网络中任意区域的饱和度变化分为 4 个阶段：无有液体阶段、快速充满阶段、缓慢增长阶段、饱和阶段。

本算例成功模拟了时间步 1~30 的多孔介质两相分布与流动图形，并得到了多孔介质整体饱和度与部

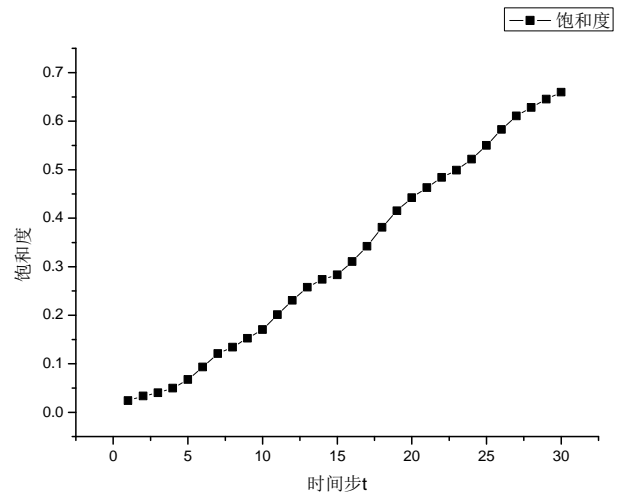


Figure 6. Change curve on the saturation with time step
图 6. 多孔介质饱和度随时间步的变化

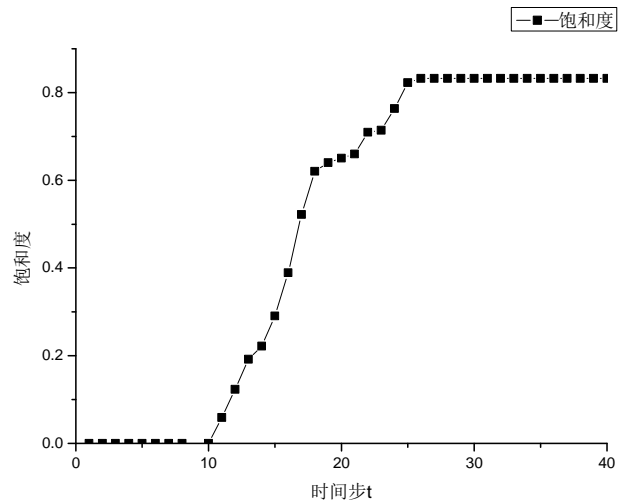


Figure 7. Change curve on the saturation with time step at 10th line
图 7. 拓扑网络第 10 行的饱和度变化

分区域饱和度随时间步的关系图。仍存在的问题有：当液体突破多孔介质后，压力产生了骤变，之后的液体运动趋势尚未解决。

6. 结论与展望

通过对多孔介质浸润过程中人工赋值构造拓扑网络模型的一个算例的计算，得到了小压力情况下，多孔介质浸润过程中饱和度随时间的变化，更重要的进展是可以得到浸润过程中具体的两相分布与流动图形。

本算例中人工赋值的对象是电镜照片下的一块气体扩散电极区域，对于实际的多孔介质，该技术可以向全尺度方向发展，模拟真实的流动。

下一步工作是以人工赋值技术为基础,完善实际多孔介质向拓扑网络模型转化的应用技术。从实际多孔介质向拓扑网络模型的转化包括:对实际多孔介质进行扫描,建立多孔介质图形数据库→建立转化原则,将多孔介质的孔隙部分转化为拓扑网络中的节点与管道(人工赋值过程)→在拓扑网络中模拟多孔介质内的流动过程。

参考文献 (References)

[1] Rionero, S. (2013) Triple diffusive convection in porous media.

- Acta Mechanica*, **224**, 447-458.
- [2] 薛定谔, A.E., 著 (1982) 王鸿勋, 张朝琛, 孙书琛, 译. 多孔介质中的渗流物理. 石油工业出版社, 北京.
- [3] 朱大勇, 范鹏贤, 郭志昆, 钱七虎 (2007) 裂隙岩体逾渗模型中渗透概率递推矩阵. *岩石力学与工程学报*, **26**, 262-267.
- [4] 章亚东, 段跃新, 左璐, 梁志勇, 谈亚飞, 张晨曙 (2004) 经编织物法制备连续纤维增强热塑性复合材料的微观形貌和浸润过程分析. *复合材料学报*, **21**, 63-69.
- [5] 王柏臣, 黄玉东, 陈平, 高禹 (2007) 溶剂对石英/酚醛复合材料 RTM 成型浸润过程及性能影响. *固体火箭技术*, **30**, 166-169, 180.
- [6] 王乾, 李清宇, 等 (2012) 气体扩散电极的拓扑网络模型数值研究. *应用物理*, **2**, 163-174.
- [7] 李芬 (2010) 锌空气电池之气体扩散电极性能研究. 博士论文, 中国科学技术大学, 合肥.