

在 COMSOL Multiphysics 6.1 版本中创建



在微观尺度上分析多孔结构

简介

由于结构本身的复杂性，很难对实际多孔结构中的流动进行建模。在实际应用中，详细求解流场不可行。因此，使用了利用多孔结构平均物理量（如孔隙率和渗透率）的宏观方法。本例详细分析孔隙尺度的流场，结果用于验证和调整宏观描述，后者用于对大型多孔几何模型进行建模。

模型定义

图 1 所示的模型几何是一个代表性的体积单元 (REV)，其属性代表整个系统。

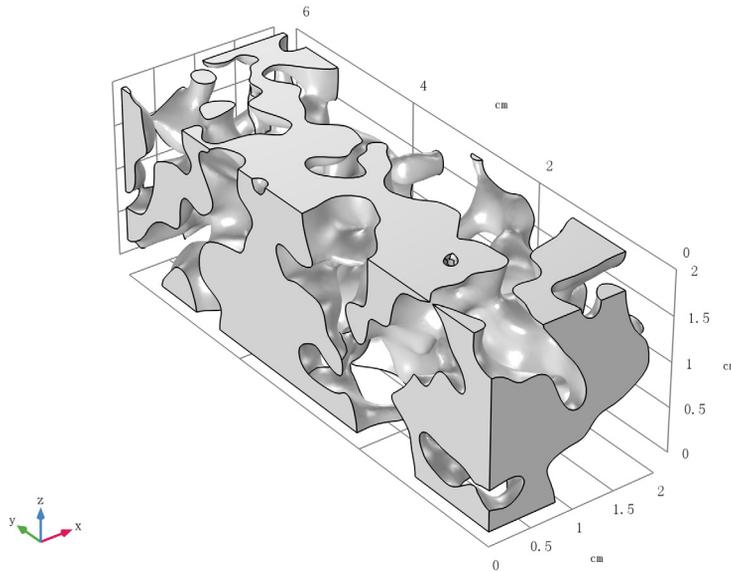


图 1: REV 孔隙体积的几何形状。

由于仅需要孔隙空间的区域即可进行建模，因此不需要明确解析多孔基体。REV 的横截面为边长 2 cm 的正方形、宽 6 cm。水流的速度为 $u = 0.1 \text{ mm/s}$ ，并且可以在另一端沿法向自由流出。假定其他边界是对称边界。这并不符合实际情况，但是对于 REV 建模，对称边界条件非常适合。

为了描述多孔结构内部的流动，可以根据以下公式估计雷诺数

$$\text{Re} = \frac{\rho u L}{\mu}$$

其中水密度 $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ ，黏度 $\mu = 10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ 。横截面边长用作特征长度尺度， L 。这得出 $\text{Re} = 2$ ，斯托克斯方程可用于描述忽略惯性项的流动。

最后，模型的目标是获得孔隙率和渗透率的平均值，以使用达西定律或 Brinkman 方程等描述宏观模型。孔隙率定义为孔隙空间体积 V_{fluid} 占总体积 V_{tot} 的比例

$$\varepsilon = \frac{V_{\text{fluid}}}{V_{\text{tot}}}.$$

使用以下关系式计算渗透率 $\kappa \text{ (m}^2\text{)}$:

$$\mathbf{u} = -\frac{\kappa}{\mu} \nabla p$$

用入口和出口之间的压差 Δp 除以边长 L 来近似得出压力梯度 ∇p ，并用出口速度 u_{out} 在流动方向上代替速度矢量 \mathbf{u} ，得出以下表达式

$$\kappa = u_{\text{out}} \mu \frac{L}{\Delta p}.$$

结果与讨论

首先网格或者说网格质量非常有趣。尽管网格质量本身并不能说明结果的质量，但良好的网格质量有助于收敛。如图 2 所示的整体网格质量非常好。

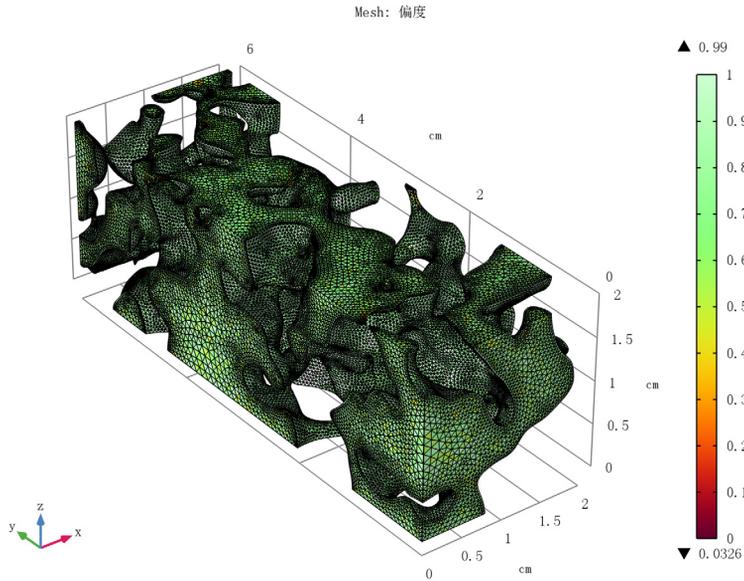


图 2：网格质量图。

REV 中的速度场如图 3 所示。多孔材料中流动的特征是有高速区和低速区。也有一些区域的流动停滞不前，这种现象的特性在于渗透性。

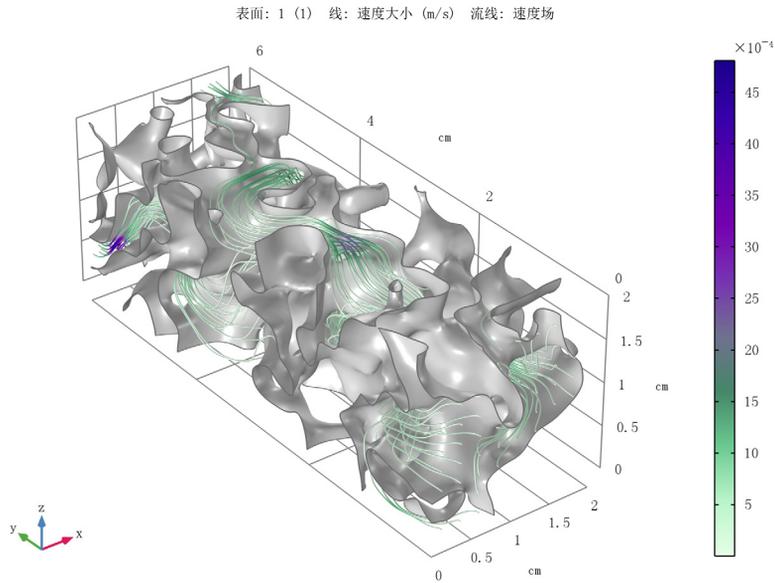


图3: Rev 中的速度。

根据仿真得出孔隙率和渗透率的值， $\varepsilon = 0.373$ ， $\kappa \approx 3 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2$ 。

COMSOL 软件功能实现说明

多孔结构的 STL 文件被导入并直接在网格划分序列中重新划分网格，这意味着几何序列保持为空。为了求解多孔基体边界上的速度梯度，请添加边界层网格。

案例库路径: Subsurface_Flow_Module/Fluid_Flow/pore_scale_flow_3d

建模操作说明

从文件菜单中选择**新建**。

新建

在**新建**窗口中，单击  **模型向导**。

模型向导

- 1 在**模型向导**窗口中，单击  **三维**。
- 2 在**选择物理场**树中选择**流体流动 > 单相流 > 蠕动流 (spf)**。
- 3 单击**添加**。
- 4 单击  **研究**。
- 5 在**选择研究**树中选择**一般研究 > 稳态**。
- 6 单击  **完成**。

几何 1

- 1 在**模型开发器**窗口的**组件 1 (comp1)**节点下，单击**几何 1**。
- 2 在**几何**的**设置**窗口中，定位到**单位**栏。
- 3 从**长度单位**列表中选择 **cm**。

网格 1

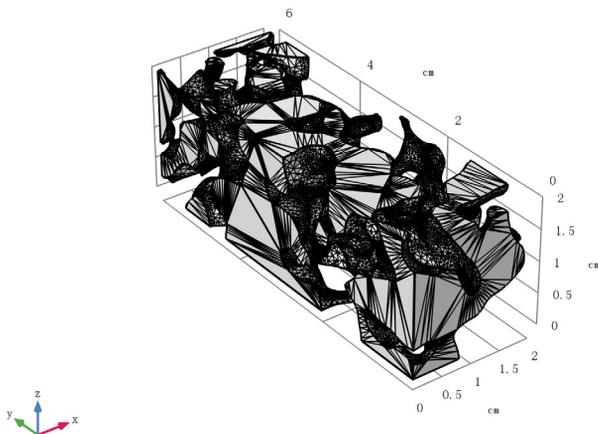
导入 STL 文件并直接在网格划分序列中重新划分网格，这意味着几何序列将保持为空。

网格序列将定义用于定义物理场的几何模型，因此将在分配材料和物理场之前完成设置。

导入 1

- 1 在**网格**工具栏中单击  **导入**。
- 2 在**导入**的**设置**窗口中，定位到**导入**栏。
- 3 单击  **浏览**。
- 4 浏览到该 App 的“案例库”文件夹，然后双击文件 pore_scale_flow_3d.stl。
- 5 从**边界分割**列表中选择**检测边界**。
增加折叠小和细长网格单元的容差，这可以避免产生小边界。
- 6 从**修复容差**列表中选择**绝对**。
- 7 在**绝对容差**文本框中键入 “1e-5”。
- 增大**最大相邻角度**将有助于算法在识别平面时生成尽可能少的边界。
- 8 定位到**检测面**栏。在**最大相邻角度**文本框中键入 “62”。

9 定位到导入栏。单击  导入。



连接实体 1

合并所有自由面的边界为一个边界。

- 1 在**网格**工具栏中单击  **连接实体**。
- 2 在**连接实体**的设置窗口中，定位到**几何实体选择**栏。
- 3 从**几何实体**层列表中选择**边界**。
不必单击**图形**窗口中的边界，而是直接从本文档中复制粘贴或者手动键入数字。
- 4 单击  **粘贴选择**。
- 5 在**粘贴选择**对话框中，在**选择**文本框中键入“14-20”。
- 6 单击**确定**。
- 7 在**连接实体**的设置窗口中，单击  **构建选定对象**。

查看**信息**窗口中的日志，确认网格现在包含一个域和 37 个边界。

接下来，通过使用**自由三角形网格**操作重新划分面网格，提高三角形网格的质量，这还将会产生大小更均匀的三角形。

自由三角形网格 1

- 1 在**网格**工具栏中单击  **边界**，然后选择**自由三角形网格**。
- 2 在**自由三角形网格**的设置窗口中，定位到**边界选择**栏。
- 3 从**选择**列表中选择**所有边界**。

大小

- 1 在**模型开发器**窗口中展开**自由三角形网格 1**节点，然后单击**大小**。
- 2 在**大小**的**设置**窗口中，定位到**单元大小**栏。
- 3 从**校准**为列表中选择**流体动力学**。
- 4 从**预定义**列表中选择**细化**。

自由三角形网格 1

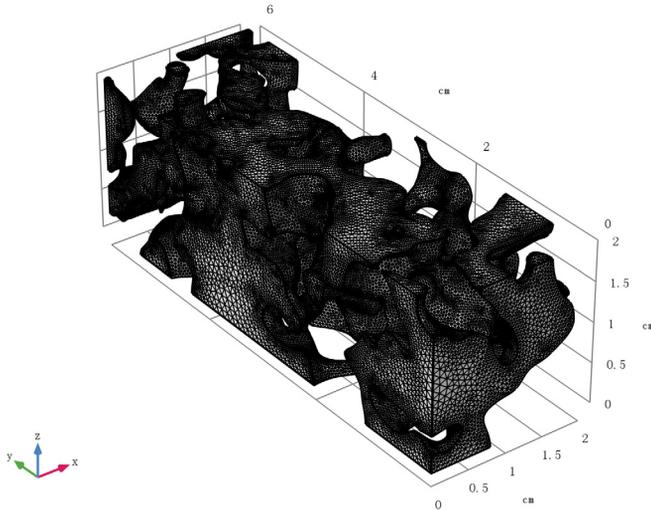
设置自由表面使用更加细化的网格大小。

大小 1

- 1 在**模型开发器**窗口中，右键单击**网格 1**并选择**大小**。
- 2 在**大小**的**设置**窗口中，定位到**几何实体选择**栏。
- 3 单击  **清除选择**。
- 4 单击  **粘贴选择**。
- 5 在**粘贴选择**对话框中，在**选择**文本框中键入“14 36 37”。
- 6 单击**确定**。
- 7 在**大小**的**设置**窗口中，定位到**单元大小**栏。
- 8 单击**定制**按钮。
- 9 定位到**单元大小**参数栏。
- 10 选中**最大单元大小**复选框。在关联文本框中键入“0.04[cm]”。

11 单击  构建选定对象。

面网格现在具有较高的质量。



接下来，在多孔结构域生成四面体网格。

自由四面体网格 1

在**网格**工具栏中单击  自由四面体网格。

大小

- 1 在**模型开发器**窗口中展开**自由四面体网格 1**节点，然后单击**大小**。
- 2 在**大小**的**设置**窗口中，定位到**单元大小**栏。
- 3 从**校准为**列表中选择**流体动力学**。
- 4 从**预定义**列表中选择**细化**。
- 5 单击  构建选定对象。

边界层 1

为了解析多孔介质的边界附近较大的速度梯度，添加边界层网格。

在**网格**工具栏中单击  边界层。

边界层属性

- 1 在**模型开发器**窗口中，单击**边界层属性**。
- 2 在**边界层属性**的**设置**窗口中，定位到**几何实体选择**栏。
- 3 单击  粘贴选择。
- 4 在**粘贴选择**对话框中，在**选择**文本框中键入“14 36 37”。

- 5 单击**确定**。
- 6 在**边界层属性**的**设置**窗口中，定位到**层**栏。
- 7 在**层数**文本框中键入“1”。
- 8 在**厚度调节因子**文本框中键入“10”。
- 9 单击  **构建选定对象**。
- 10 在**网格**工具栏中单击  **绘制**。

结果

网格 1

与图 2 进行比较。总体网格质量非常好，低质量网格单元（偏度）的数量很少。网格质量不是解精度的指标，但会影响收敛特性。

全局定义

添加一些用于设置模型的参数。

参数 1

- 1 在**模型开发者**窗口的**全局定义**节点下，单击**参数 1**。
- 2 在**参数**的**设置**窗口中，定位到**参数**栏。
- 3 在表中输入以下设置：

名称	表达式	值	描述
rho_f	1000[kg/m^3]	1000 kg/m ³	流体密度
mu_f	1e-3[Pa*s]	0.001 Pa·s	流体黏度
u_in	1e-4[m/s]	1E-4 m/s	入口速度
width	2[cm]	0.02 m	REV 宽度
length	6[cm]	0.06 m	REV 长度
V_tot	width^2*length	2.4E-5 m ³	总 Rev 体积

材料

水

- 1 在**模型开发者**窗口的**组件 1 (comp1)**节点下，右键单击**材料**并选择**空材料**。
- 2 在**材料**的**设置**窗口中，在**标签**文本框中键入“水”。

3 定位到**材料属性明细**栏。在表中输入以下设置：

属性	变量	值	单位	属性组
密度	rho	rho_f	kg/m ³	基本
动力黏度	mu	mu_f	Pa·s	基本

蠕动流 (SPF)

1 在**模型开发器**窗口的**组件 1 (comp1)**节点下，单击**蠕动流 (spf)**。

2 在**蠕动流**的**设置**窗口中，单击以展开**离散化**栏。

3 从**流体离散化**列表中选择**P1+P1**。

线性单元减少了要求解的自由度数。由于几何形状已经需要细化网格，因此使用线性单元可以减少计算时间和内存需求，同时保持足够的精度。

入口 1

1 在**物理场**工具栏中单击  **边界**，然后选择入口。

2 选择“边界” 2。

3 在入口的**设置**窗口中，定位到**速度**栏。

4 在 U_0 文本框中键入“u_in”。

5 定位到**边界选择**栏。单击  **创建选择**。

6 在**创建选择**对话框中，在**选择名称**文本框中键入“入口”。

7 单击**确定**。

出口 1

1 在**物理场**工具栏中单击  **边界**，然后选择出口。

2 选择“边界” 16 和 21。

3 在出口的**设置**窗口中，定位到**压力条件**栏。

4 选中**法向流**复选框。

5 定位到**边界选择**栏。单击  **创建选择**。

6 在**创建选择**对话框中，在**选择名称**文本框中键入“出口”。

7 单击**确定**。

再创建几个选择，以便在整个模型设置中使用。

定义

壁

1 在**模型开发器**窗口中展开**组件 1 (comp1)**>**定义**节点。

2 右键单击**定义**并选择**选择**>**显式**。

- 3 在**显式**的**设置**窗口中，在**标签**文本框中键入“壁”。
- 4 定位到**输入实体**栏。从**几何实体层**列表中选择**边界**。
- 5 选择“边界”4、10和30。

使用**选择列表**窗口可以更轻松地选择正确的边界。要打开此窗口，请在**主屏幕**工具栏中单击**窗口**，然后选取**选择列表**。（如果您正在运行跨平台桌面，可以在主菜单中找到**窗口**。）

请注意，边界编号与网格划分序列中的编号不同，这是由于在构建“定型”节点时运行的关联更新造成的。

所有边界

- 1 在**定义**工具栏中单击  **显式**。
- 2 在**显式**的**设置**窗口中，定位到**输入实体**栏。
- 3 从**几何实体层**列表中选择**边界**。
- 4 选中**所有边界**复选框。
- 5 在**标签**文本框中键入“所有边界”。

对称

- 1 在**定义**工具栏中单击  **差集**。
- 2 在**差集**的**设置**窗口中，在**标签**文本框中键入“对称”。
- 3 定位到**几何实体层**栏。从层列表中选择**边界**。
- 4 定位到**输入实体**栏。在**要添加的选择**下，单击 **+** **添加**。
- 5 在**添加**对话框中，从**要添加的选择**列表中选择**所有边界**。
- 6 单击**确定**。
- 7 在**差集**的**设置**窗口中，定位到**输入实体**栏。
- 8 在**要减去的**选择下，单击 **+** **添加**。
- 9 在**添加**对话框中，从**要减去的**选择列表中选择**入口、出口和壁**。
- 10 单击**确定**。

蠕动流 (SPF)

对称 1

- 1 在**物理场**工具栏中单击  **边界**，然后选择**对称**。
- 2 在**对称**的**设置**窗口中，定位到**边界选择**栏。
- 3 从**选择列表**中选择**对称**。

研究 1

- 1 在**模型开发器**窗口中，单击**研究 1**。

- 2 在**研究**的**设置**窗口中，定位到**研究设置**栏。
- 3 清除**生成默认绘图**复选框。
- 4 在主屏幕工具栏中单击  **计算**。

结果

创建如图 3 所示的图。

表面 1

- 1 在**结果**工具栏中单击  **更多数据集**，然后选择**表面**。
- 2 在**表面**的**设置**窗口中，定位到**选择**栏。
- 3 从**选择**列表中选择**壁**。

速度

- 1 在**结果**工具栏中单击  **三维绘图组**。
- 2 在**三维绘图组**的**设置**窗口中，在**标签**文本框中键入“速度”。
- 3 定位到**绘图设置**栏。清除**绘制数据集的边**复选框。

表面 1

- 1 右键单击**速度**并选择**表面**。
- 2 在**表面**的**设置**窗口中，定位到**数据**栏。
- 3 从**数据集**列表中选择**表面 1**。
- 4 定位到**表达式**栏。在**表达式**文本框中键入“1”。
- 5 定位到**着色和样式**栏。从**着色方式**列表中选择**均匀**。
- 6 从**颜色**列表中选择**灰色**。

线 1

- 1 在**模型开发器**窗口中，右键单击**速度**并选择**线**。
- 2 在**线**的**设置**窗口中，定位到**数据**栏。
- 3 从**数据集**列表中选择**表面 1**。
- 4 定位到**着色和样式**栏。从**着色方式**列表中选择**均匀**。
- 5 从**颜色**列表中选择**黑色**。
- 6 在**速度**工具栏中单击  **绘制**。
- 7 从**颜色**列表中选择**定制**。
- 8 在 Windows 中，单击下方的颜色条；如果您运行的是跨平台桌面，则单击**颜色**按钮。选择较暗的灰色。

流线 1

- 1 右键单击**速度**并选择**流线**。
- 2 在**流线的设置**窗口中，定位到**选择**栏。
- 3 从**选择**列表中选择**入口**。
- 4 定位到**流线定位**栏。在**数量**文本框中键入“40”。
- 5 定位到**着色和样式**栏。找到**线样式**子栏。从**类型**列表中选择**管**。
- 6 选中**半径比例因子**复选框。在**关联**文本框中键入“0.0075”。

颜色表达式 1

- 1 右键单击**流线 1**并选择**颜色表达式**。
- 2 在**颜色表达式的设置**窗口中，定位到**着色和样式**栏。
- 3 单击 **更改颜色表**。
- 4 在**颜色表**对话框中，选择模型树中的 **Aurora>AuroraBorealis**。
- 5 单击**确定**。

接下来，确定 REV 的孔隙率和渗透率，以便在宏观层面上进行仿真。

定义

积分 1 (intop1)

- 1 在**定义**工具栏中单击 **非局部耦合**，然后选择**积分**。
- 2 在**积分的设置**窗口中，定位到**源选择**栏。
- 3 从**选择**列表中选择**所有域**。

入口平均值

- 1 在**定义**工具栏中单击 **非局部耦合**，然后选择**平均值**。
- 2 在**平均值的设置**窗口中，在**标签**文本框中键入“入口平均值”。
- 3 定位到**源选择**栏。从**几何实体层**列表中选择**边界**。
- 4 从**选择**列表中选择**入口**。

出口平均值

- 1 在**定义**工具栏中单击 **非局部耦合**，然后选择**平均值**。
- 2 在**平均值的设置**窗口中，在**标签**文本框中键入“出口平均值”。
- 3 定位到**源选择**栏。从**几何实体层**列表中选择**边界**。
- 4 从**选择**列表中选择**出口**。

变量 1

- 1 在**模型开发器**窗口中，右键单击**定义**并选择**变量**。

- 2 在变量的设置窗口中，定位到变量栏。
- 3 在表中输入以下设置：

名称	表达式	单位	描述
por	$\text{intop1}(1)/V_tot$		孔隙率
dPdL	$-(\text{aveop2}(p)-\text{aveop1}(p))/\text{length}$	N/m ³	压降
u_out	$\text{spf.out1.massFlowRate}/\rho_f/\text{width}^2$	m/s	表观出口速度
kappa	$u_out*\mu_f/dPdL$	m ²	渗透率

由于已经引入新变量，因此需要更新解，不必重新计算研究结果。

研究 1

在研究工具栏中单击  更新解。

结果

全局计算 1

- 1 在结果工具栏中单击  全局计算。
- 2 在全局计算的设置窗口中，单击表达式栏右上角的添加表达式。从菜单中选择组件 1 (comp1)> 定义 > 变量 > por - 孔隙率。
- 3 单击表达式栏右上角的添加表达式。从菜单中选择组件 1 (comp1)> 定义 > 变量 > kappa - 渗透率 - m²。
- 4 单击  计算。

结果显示在表格窗口中，其中孔隙率为 0.371，渗透率约为 3e-8m²。这些结果现在可以用于大型模型的计算。

流线 1

为了使结果更具描述性，请创建一个动画。

- 1 在模型开发器窗口的结果 > 速度节点下，单击流线 1。
- 2 在流线的设置窗口中，定位到着色和样式栏。
- 3 找到点样式子栏。从类型列表中选择交互箭头。
- 4 在额外释放时间文本框中键入“2000”。

动画 1

- 1 在速度工具栏中单击  动画，然后选择播放器。

您可以调整帧数来获得交互式箭头的平滑动画。该动画非常形象地显示多孔介质中存在速度非常慢和非常快的区域。