

# 孔隙介质三维逾渗机制数值模拟研究

吕兆兴, 冯增朝, 赵阳升

(太原理工大学 采矿工艺研究所, 山西 太原 030024)

**摘要:** 论述三维孔隙介质的逾渗研究方法, 基于 VC++6.0 开发三维逾渗模拟软件。利用重正化群原理, 通过数值模拟的方法研究孔隙介质三维逾渗机制和逾渗团特性, 提出有效表面积率概念。研究结果表明: 团的数量随着孔隙率的增加先增加后减小, 在孔隙率为 0.20 时达到最大值; 随着孔隙率的增加, 最大团表面积在孔隙率大于阈值时开始快速增加, 然后呈减小趋势, 在孔隙率为 0.55 时达到最大值, 此时的有效表面积率达到 0.98; 当孔隙率为逾渗阈值 0.311 6 时, 发现逾渗团的大小是一种统计上的随机分形, 其分形维数  $D = 2.934$ 。

**关键词:** 土力学; 孔隙; 分形; 逾渗概率; 渗透性; 比表面积; 重正化群

**中图分类号:** TU 43

**文献标识码:** A

**文章编号:** 1000 - 6915(2007)增 2 - 4019 - 05

## NUMERICAL SIMULATION OF 3D PERCOLATION MECHANISM IN POROUS MEDIA

LU Zhaoxing, FENG Zengchao, ZHAO Yangsheng

(Institute of Mining Technology, Taiyuan University of Technology, Taiyuan, Shanxi 030024, China)

**Abstract:** The research methods of percolation in 3D porous media are presented. Based on VC++6.0, the software to simulate percolation is developed. The 3D percolation mechanism in porous media, the characteristics of percolation cluster by numerical simulation method, and the theory of renormalization are studied. The effective surface area rate is proposed, and the achieved results indicate: (1) the number of cluster increases with the increasing porosity in the beginning and decreases at a later time when the value of porosity is 0.20, and the number of cluster has the maximum value; (2) with the increasing of porosity, the surface area of the largest cluster increases, and the value fleetness increases as the value of porosity is larger than percolation threshold; and (3) when porosity is 0.55, the surface area of the largest cluster reaches the maximum value, and the value of effective surface area rate is 0.98. When the value of porosity is 0.311 6, the percolation cluster is a random fractal and the fractal dimension can be deemed as  $D = 2.934$ .

**Key words:** soil mechanics; pores; fractal; percolation probability; permeability; specific surface area; renormalization

## 1 引言

逾渗的概念是 1957 年由 S. K. Boradbent 和 J. M. Hammersley 提出的, 本质上是概率论的一个分支,

逾渗现象可形象地描述为: 一可渗透的孔隙介质, 当流体通过介质时, 其中的孔隙会被随机堵塞, 孔隙率下降, 当孔隙率下降到某一临界值时, 孔隙介质就会由导通变为不导通, 从渗透性的角度来讲, 这就是一种相变<sup>[1~3]</sup>。逾渗模型就是一种简单而又

**收稿日期:** 2007 - 03 - 20; **修回日期:** 2007 - 04 - 26

**基金项目:** 国家自然科学基金重大项目(50534030); 国家自然科学基金资助项目(50404017); 山西省自然科学基金资助项目(20051026)

**作者简介:** 吕兆兴(1977 - ), 男, 2001 年毕业于太原理工大学土木工程专业, 现为博士研究生, 主要从事逾渗理论及应用方面的研究工作。E-mail: alv - 1001@163.com

实用的相变理论模型，因其简单所以在很多领域都有广范的应用<sup>[4, 5]</sup>，如：森林火灾的传播、聚合物的凝胶化、传染疾病的传播、孔隙介质中的流体流动、硫化床的烧结过程、稀释磁体等。吕兆兴等<sup>[6]</sup>研究了二维结构的逾渗现象；冯增朝等<sup>[7, 8]</sup>详细研究了二维条件下孔隙裂隙介质的逾渗机制。在研究方法上二维与三维的情况基本上是一致的，而实际上三维与二维情况下的逾渗有较大的不同，其所研究的对象有本质上的差别。如：就四方格子座逾渗而言，二维情况下座点的临近数为 4，而三维情况下的临近数为 6。本文主要通过数值模拟方法研究三维情况下四方格子逾渗机制、逾渗团的物理性质、孔隙率与逾渗团表面积间的相关规律。

## 2 逾渗理论及模拟试验

### 2.1 孔隙介质逾渗理论和研究方法

孔隙介质由固体骨架和孔隙构成，随机分布的孔隙互相连通从而构成许多连通的孔隙团，其中最大的称为最大团，随着孔隙率的增加，最大团所包含的孔隙数在某一临界值时会有一个剧烈的增加，这一临界孔隙率称为逾渗阈值( $P_c$ )，此时的最大团称为逾渗团(percolation cluster)。二维四方格子中的逾渗阈值为 0.592 75<sup>[9]</sup>，三维四方格子中的逾渗阈值为 0.311 6<sup>[10, 11]</sup>。

阈值的确定方法如下：为了精确确定逾渗阈值，引入了关联长度 $\xi$ 的概念， $\xi$ 用于描述团的平均尺寸，把关联长度最大值所对应的逾渗概率值定义为逾渗阈值，在有限系统中关联长度可表示为

$$\xi = \begin{cases} \frac{\sum_m i_m m^2}{\sum_m i_m m} & (n \leq n_c) \\ \frac{\sum_m i_m m^2 - m_{\max}^2}{\sum_m i_m m} & (n > n_c) \end{cases} \quad (1)$$

式中： $m$ 为团的大小， $i_m$ 为大小为 $m$ 的团的数量， $m_{\max}$ 为最大团的大小。

三维情况下关联长度 $\xi$ 与孔隙率的关系曲线见图 1。

定义区域中任意孔隙属于最大团的概率为逾渗概率 $P_\infty(p)$ ，在有限大尺度的网格中，用下式来表示逾渗概率：

$$P_N(P) = M(L) / L^3 \quad (2)$$

式中： $M(L)$ 为最大团包含的孔隙数量， $L^3$ 为有限尺

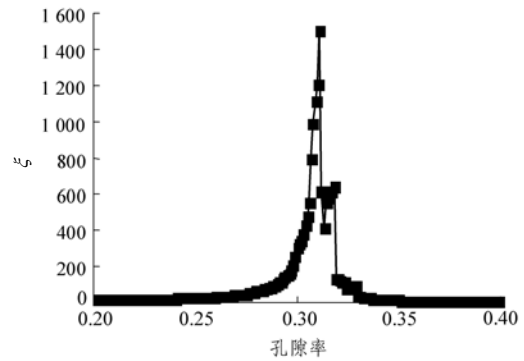


图 1 关联长度  $\xi$  与孔隙率的关系曲线

Fig.1 Relation curve between correlation length and porosity

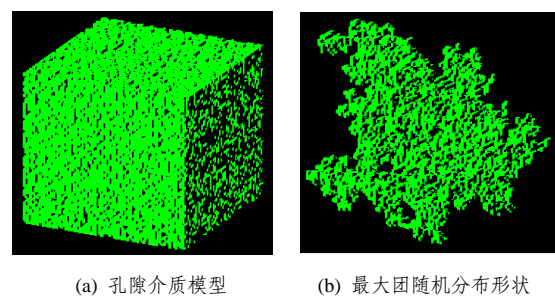
度内正方形单元总数。在无限大尺度中，逾渗概率为

$$P_\infty(p) = \lim_{N \rightarrow \infty} P_N(p) \quad (3)$$

临界孔隙率被定义为 $P_\infty(p)$ 时孔隙率的最大值，可用下式表示：

$$P_c = \sup\{p, P_\infty(p) = 0\} \quad (4)$$

三维孔隙介质的逾渗模拟研究方法为：假设孔隙的分布服从随机分布，孔隙形状为正方体。在一个正方体区域内，划分 $L \times L \times L = L^3$ 个网格，每个网格为一个单元，单元可以为孔隙或者固体颗粒。将孔隙单元随机分布于正方体区域内，编写计算机程序，搜索网格中所有的孔隙集团，统计出每个团所包含的单元数量，进而找出最大团，根据式(2)可计算逾渗概率。图 2 给出了三维孔隙介质模型与最大团随机分布形状。



(a) 孔隙介质模型 (b) 最大团随机分布形状

图 2 三维孔隙介质模型与最大团随机分布形状

Fig.2 Three-dimensional model of porous media and the stochastic form of the largest cluster

### 2.2 三维孔隙介质逾渗数值模拟计算

选定区域为 5 mm×5 mm×5 mm，划分 50×50×50 = 125 000 个单元，给定不同的孔隙率，将孔隙随机分布于模型中。通过数值试验计算不同孔隙率时逾渗概率和连通团的分布特性，数值模拟结果见图 3, 4。

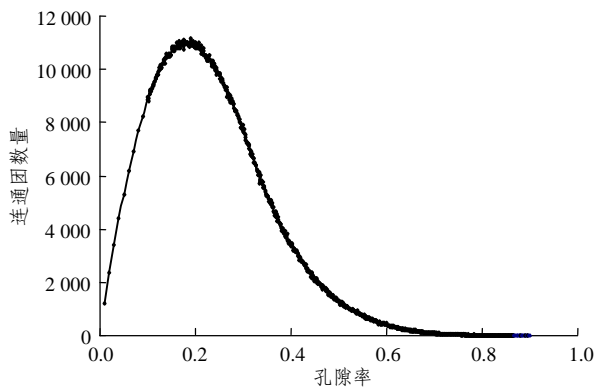


图 3 连通团数量随孔隙率的变化曲线

Fig.3 Relationship curve of cluster number and porosity

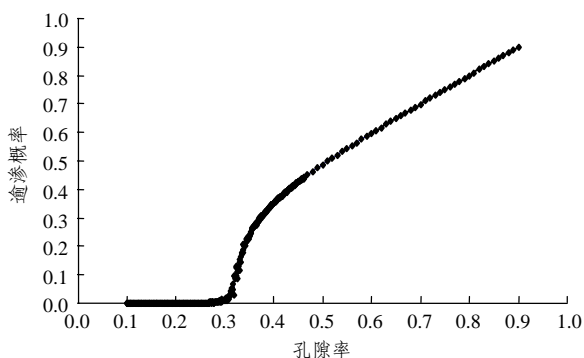


图 4 三维孔隙介质逾渗概率与孔隙率的关系曲线

Fig.4 Relationship curve of percolation probability and porosity in 3D porous media

从图 3 中可以看出, 连通团数量随孔隙率的增加先增加后减小, 在孔隙率为 0.20 附近连通团数量达到最大值。说明当孔隙率大于 0.20 时, 随着孔隙数量的增加, 大量的孔隙开始相互连通而合并成为更大的团, 从而导致连通团数量的显著减小。从图 4 中可以看出: 当孔隙率为 0.30~0.38 时, 曲线的斜率非常大, 也就是说在这一区域内随着孔隙率的增加, 逾渗概率快速增加, 渗透性提高; 当孔隙率大于 0.38 时逾渗概率随孔隙率线性增加, 这一区域的斜率较小, 也是逾渗概率的平稳增加阶段; 当孔隙率小于 0.30 时, 逾渗概率基本为 0.00。这一曲线有重要的应用价值, 要想使孔隙介质的渗透性明显提高, 就必须使孔隙率达到逾渗阈值, 只要大于逾渗阈值, 很小的增量也会显著提高渗透性能。

瓦斯生成并存储于煤层中很难抽放, 其根本原因是因为绝大部分煤的孔隙率低于 0.1, 远远低于孔隙介质的逾渗阈值 0.311 6, 导致孔隙连通性差, 从而使得煤的渗透率很低。

### 2.3 最大团表面面积的模拟计算

多孔介质有着优良的吸附特性, 如活性炭作为吸附剂被广泛应用于环境保护、食品、医药卫生等领域, 因为活性炭具有特别的表面活性和很大的比表面积, 所以有很强的吸附性能, 比表面积的大小也就成为衡量其品质的重要指标。所以对孔隙介质的孔隙表面积的研究和测定也就成为重要的研究课题。

从上面的研究可以看出, 零散分布的不连通孔隙因其是孤立的, 流体不能流通过这些孔隙中, 故其表面积不能对孔隙介质的吸附性能有所提高, 而最大团的表面积才是所需关注的重点。在此把最大团孔隙表面积与总孔隙表面积之比定义为有效表面积率。为了研究孔隙率与有效孔隙表面积的关系, 分别取不同的孔隙率, 计算相应的最大团孔隙表面积和有效表面积率。这里模拟了边长为 5 mm 的孔隙介质立方体, 其数值模拟结果见图 5, 6。

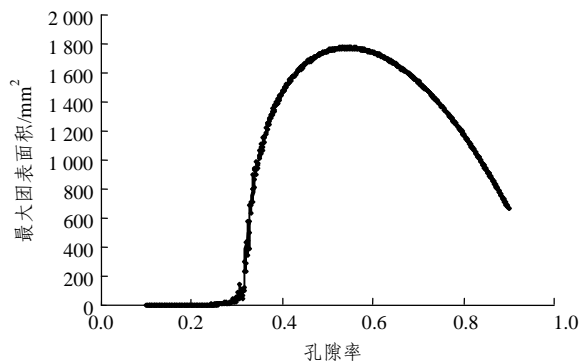


图 5 最大团表面积随孔隙率的变化曲线

Fig.5 Relationship curve of the largest cluster surface area and porosity

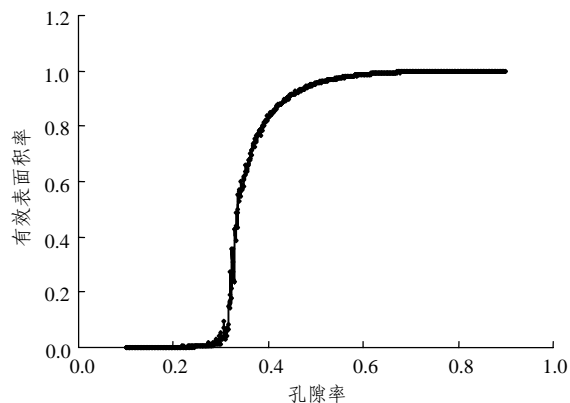


图 6 有效表面积率随孔隙率的变化曲线

Fig.6 Relationship curve of effective surface area rate and porosity

从图 5 中可以看出: 随着孔隙率的提高, 最大团表面积增加, 当孔隙率大于逾渗阈值 0.311 6 时,

最大团表面积开始急剧增大, 在孔隙率为 0.55 附近时其最大团表面积达到最大值, 然后随着孔隙率的增加而减小。从图 6 中可以看出, 当孔隙率为 0.30~0.40 时, 有效表面积率的值变化剧烈, 孔隙率大于 0.40 时, 有效表面积率变换趋于平缓; 当孔隙率为 0.55 时, 有效表面积率达到了 0.98; 当孔隙率大于 0.60 时, 有效表面积率基本不再发生变化。

### 3 重正化群法在逾渗中的应用

重正化群理论是由 Wilson 于 1974 年提出的。在取定的物理模型下, 将  $a$  取为点阵常数时。不同格子上的某个物理量为  $P_a$ , 改变  $a$  的值, 计算相应的物理量  $P_a$  的值。这个过程相当于引进标度变换  $T$ , 在变换  $T$  下物理量存在如下关系:

$$P_i = T^{i-1}(P) \quad (i=1, 2, \dots, n) \quad (5)$$

$T$  的逆变换  $T^{-1}$  不要求一定存在。设有某一原始图形  $F_0$  按照标度变换  $T$  迭代, 第  $n$  步的图形为  $F_n$ , 迭代后为  $F_{n+1}$ , 即

$$F_{n+1} = TF_n = T^{n+1}F_0 \quad (n=0, 1, 2, \dots, n) \quad (6)$$

如果依照  $1/b$  规律来改变长度标度, 相应的重正化变换记作  $T_b$ , 图形  $F_n$  的某种可测量用  $L(T_b F_n)$  来表示, 迭代式可表示为

$$T_b F_n = T_b(T_b F_{n-1}) = \dots = (T_b)^n F_0 \quad (7)$$

据自相似性, 有

$$L(T_b F_{n+1}) = b^D L(F_n) \quad (8)$$

式中:  $D$  为分形维数, 由于只有当  $F_n$  进入一定层次后式(8)才能成立, 故  $D$  可表示为

$$D = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\lg[L(T_b F_n)/L(F_n)]}{\lg b} \quad (9)$$

分形<sup>[12]</sup>是指构成整体的各组成部分以某种方式与整体相似, 可以同时具有形态、功能和信息 3 个方面的自相似性, 也可以只有其中某一方面的自相似性。从统计意义上来说, 对于随机分布的有自相似性的团簇或者系统, 称为随机分形。重正化群法要求所研究的系统具有自相似性, 它是通过改变物体的粗视化程度来研究观测物理量变化规律的方法。从分形概念与重正化群法原理的表述中就能自然的将二者联系起来。

在逾渗研究中最关注的是最大团的变化, 所以最大团的各种特性也成为研究的重点, 而重正化群法正好是研究逾渗团这种随机结构的有力工具。

### 4 三维逾渗团的模拟研究

为了研究逾渗团的特性, 根据重正化群法原理, 在不同尺度下(粗视化程度)对三维逾渗团进行数值模拟试验。数值模拟试验方案为: 在三维四方格子座逾渗情况下, 建立正方体并将其剖分为  $L \times L \times L=L^3$  个单元, 取孔隙率为逾渗阈值 0.311 6, 使孔隙单元随机分布于立方体中, 计算逾渗团包含的  $M(L)$ 。不断改变  $L$  值, 孔隙率仍取逾渗阈值 0.311 6, 就会得到一系列的逾渗团单元数量。本文模拟了  $L$  值分别为 70, 80, 90, 100, 110 时的 5 种情况, 三维逾渗数值模拟数据见表 1。因逾渗团是一种随机结构, 为提高模拟试验的精度, 试验结果取多次试验的平均值。

表 1 三维逾渗数值模拟数据(孔隙率: 0.311 6)

Table 1 Three-dimensional simulation data of percolation (porosity ratio: 0.311 6)

$L^3/(10^4 \text{个})$	计算次数	$M(L)/\text{个}$	逾渗概率
34.3	50	7 536	0.021 971
51.2	38	10 085	0.019 697
72.9	45	15 427	0.021 162
100.0	48	20 632	0.020 632
133.1	26	27 641	0.020 767

图 7 为三维逾渗中  $M(L)$  随  $L$  的变化曲线, 由曲线的形状可以看出,  $M(L)$  与  $L$  之间服从幂律关系。用幂函数拟合曲线可得

$$M(L) = 0.028 L^{2.934} \quad (R^2 = 0.994 8) \quad (10)$$

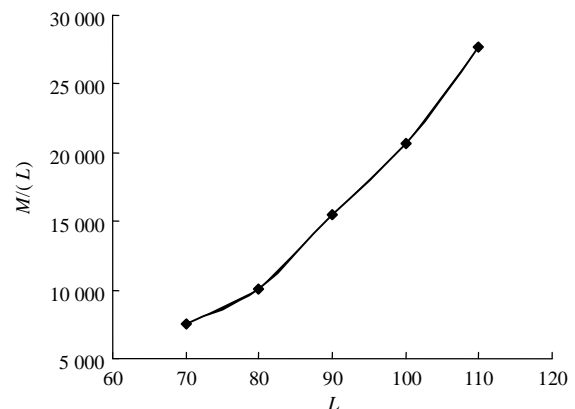


图 7 三维逾渗中  $M(L)$  随  $L$  的变化曲线

Fig.7 Relationship curve between  $M(L)$  and  $L$  in the three-dimensional simulation

式(10)表明: 在逾渗阈值处的逾渗团的大小是一种分形, 其分形维数  $D = 2.934$ , 此值可能会有一个很小的误差, 这是因为逾渗团是随机团簇, 是一种统计上的随机分形, 而这里的模拟结果也是取多次试验结果的均值。

## 5 结 论

本文详细论述了三维孔隙介质的逾渗研究方法, 基于 VC++6.0 编制了计算程序, 模拟研究了三维孔隙介质的逾渗机制, 得出了如下几点结论:

(1) 三维孔隙介质中, 孔隙率在大于逾渗阈值 0.311 6 时, 最大团所包含的孔隙数量随孔隙率的增加而急剧增加, 当孔隙率大于 0.38 时, 最大团孔隙数量的增速度会趋于平缓, 随孔隙率线性增加。

(2) 连通团数量随着孔隙率的增加先增加后减小, 在孔隙率为 0.20 时达到最大值。

(3) 随着孔隙率的增加, 最大团表面积在孔隙率大于阈值时开始快速增加, 在孔隙率为 0.55 时达到最大值, 然后开始呈减小趋势。

(4) 当孔隙率大于逾渗阈值时, 有效表面积率开始急剧增加, 在孔隙率达到 0.55 时, 有效表面积率达到 0.98。

(5) 当孔隙率为逾渗阈值 0.311 6 时, 逾渗团的大小是一种统计上的随机分形, 其分形维数  $D = 2.934$ , 这一分形维数对三维逾渗具有普适性。

岩石类材料多为由孔隙、裂隙和固体材料构成的孔隙裂隙双重介质, 本文的研究为进一步研究孔隙裂隙双重介质做了一些基础性的工作, 是对孔隙裂隙双重介质研究的重要铺垫。

### 参考文献(References):

[1] ROUX S, HANSEN A, HINRICHSEN E L. Percolation in gradient[J]. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 1990, 23(8): 1 253 - 1 258.

[2] VIDALES A M. Difference percolation on a square lattice[J]. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, 2000, 285(3): 259 - 266.

[3] SUKOP M C, DIJK G-J V, PERFECT E, et al. Percolation thresholds in two-dimensional prefractal models of porous media[J]. *Transport in*

*Porous Media*, 2002, 48(2): 187 - 208.

[4] 齐共金, 张长瑞, 曹英斌, 等. 逾渗模型在计算材料学中的研究进展[J]. *材料科学与工程学报*, 2004, 22(1): 123 - 127.(QI Gongjin, ZHANG Changrui, CAO Yingbin, et al. Research progress of percolation model in computational materials science[J]. *Journal of Materials Science and Engineering*, 2004, 22(1): 123 - 127.(in Chinese))

[5] 张东辉, 金 峰, 施明恒, 等. 多孔介质渗流随机模型[J]. *应用科学学报*, 2003, 21(1): 88 - 92.(ZHANG Donghui, JIN Feng, SHI Mingheng, et al. A random simulation model in porous media[J]. *Journal of Applied Sciences*, 2003, 21(1): 88 - 92.(in Chinese))

[6] 吕兆兴, 冯增朝, 赵阳升. 孔隙介质中渗流团分形维数的模拟计算方法[J]. *地下空间与工程学报*, 2005, 1(6): 870 - 873.(LU Zhaoxing, FENG Zengchao, ZHAO Yangsheng. Numerical simulation method of fractal dimension of percolation cluster in porous media[J]. *Chinese Journal of Underground Space and Engineering*, 2005, 1(6): 870 - 873.(in Chinese))

[7] 冯增朝, 赵阳升, 文再明. 煤岩体孔隙裂隙双重介质逾渗机制研究[J]. *岩石力学与工程学报*, 2005, 24(2): 236 - 240.(FENG Zengchao, ZHAO Yangsheng, WEN Zaiming. Percolation mechanism of fractured coal rocks as dual-continua[J]. *Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering*, 2005, 24(2): 236 - 240.(in Chinese))

[8] 冯增朝, 赵阳升, 吕兆兴. 强随机分布裂隙介质的二维逾渗规律研究[J]. *岩石力学与工程学报*, 2006, 25(增 2): 3 904 - 3 908.(FENG Zengchao, ZHAO Yangsheng, LU Zhaoxing. Research on laws of 2D percolation of fully random distribution fracture media[J]. *Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering*, 2006, 25(Supp.2): 3 904 - 3 908.(in Chinese))

[9] STAUFFER D, AHARONY A. *Introduction to percolation theory*[M]. London: [s. n.], 1985: 15 - 18.

[10] CONNELLY R, RYBNIKOV K, VOLKOV S. Percolation of the loss of tension in an infinite triangular lattice[J]. *Journal of Statistical Physics*, 2001, 105(1/2): 143 - 171.

[11] XU K, DAIAN J F, QUENARD D. Multiscale structures to describe porous media part I: theoretical background and invasion by fluids[J]. *Transport in Porous Media*, 1997, 26(1): 51 - 57.

[12] MENDELBROT B B. *Fractal geometry of nature*[M]. [S. l.]: [s. n.], 1982.