



艰苦朴素
求真务实

MPLBM-UT

基于X-ray扫描的孔隙介质的复杂流动LBM模拟

Li

Javier E. Santos, et al. MPLBM-UT: Multiphase LBM library for permeable media analysis. SoftwareX 18 (2022) 101097



多孔介质流动在自然科学和工业应用中有其独特性。地下场景如hydrocarbon回收、CO₂封存、地下水含水层取水。另外，还比如：通过岩石的卤水、冰川中的冰雪融化穿过、海洋沉积物中的甲烷迁移等。

使用不同的实验和数值方法评估多孔材料样品中的物质输移特性。



(1) Micromodel试验，动态可视化2D透明多孔介质中微米量级上的运动；

(2) X-ray microtomography可实现3D观测孔隙尺度上的流动。

另外，基于拟合岩石裂缝与几何描述（porosity, tortuosity, 孔隙分布）评估函数关系。

从3D image获取流动特性，可使用FVM, SPH, FEM, LBM，这些方法用来描述流体如何穿过在微米（甚至更小）尺度上的复杂几何。

岩石的图像处理方法，可从Digital Rocks Portal下载数字化的多孔介质的图像数据。



LBM模型

基于动理学理论，Boltzmann方程在分子尺度上类比Navier-Stokes方程。Boltzmann方程如下：

$$\underbrace{\frac{\partial f}{\partial t}}_{\text{Change in PDF}} + \underbrace{\underline{v} \frac{\partial f}{\partial \underline{x}}}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{\underline{F} \frac{\partial f}{\partial \underline{v}}}_{\text{External Forces}} = \underbrace{\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}}}_{\text{Collision Term}}$$

式中， f 为分子团的概率密度函数（PDF）， \underline{x} 是位置向量， \underline{v} 是分子速度， \underline{F} 是外部力向量， t 为时间， $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}}$ 为分子碰撞项。



LBM依靠Boltzmann方程中的PDF表征模拟域中的流体。计算域的各节点包含流体粒子，由一个PDF描述，基于LBM实施类型，粒子传播并于周围粒子相互作用。从PDF，计算得到流体的宏观特征，如密度和速度。

单相流模拟，MPLBM-UT可选择Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) collision term或者Multi-Relaxation-Time (MRT) collision term。

两相流模拟，MPLBM-UT可使用Shan-Chen LBM框架。



MPLBM-UT使用Palabos平台作为LBM后端。Palabos使用C++语言编程，基于MPI集群并行。

- Palabos与离散元模型LIGGHTS耦合，模拟河床泥沙起动
- Palabos与离散元模型LAMMPS耦合，模拟动脉中的红细胞运动

MPLBM-UT支持3种模拟设置：

- Single-phase flow: permeability and preferential path assessment
- Unsteady-state multiphase-phase flow: drainage and imbibition, capillary pressure curves, unsteady relative permeability
- Steady-state multiphase-phase flow: relative permeability, contact angle studies



多相流模型使用一些解析解做了验证，包括：Young-Laplace方程、Washburn方程和Brooks-Corey相对渗透模型。

MPLBM-UT库的目标：

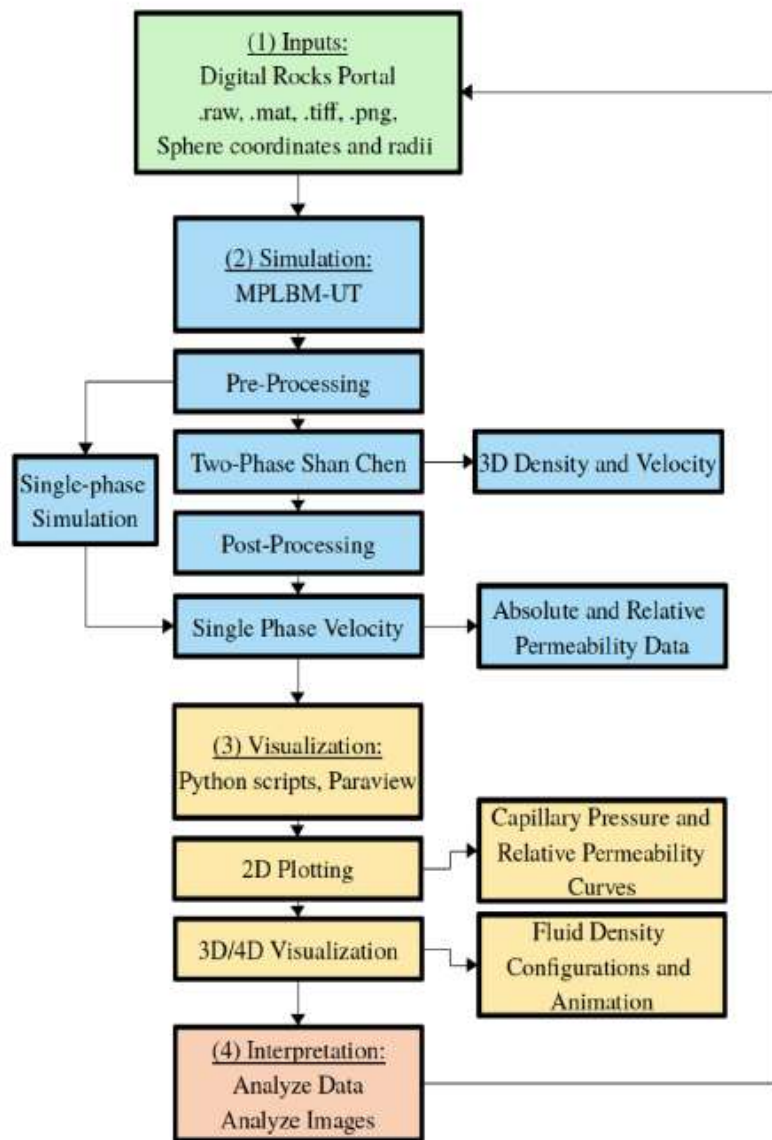
- provide user-friendly methods for LBM setup and simulation
- provide simulation methods to help understand the role of surface wetting phenomena
- provide plotting, visualization, and animation scripts for qualitative and quantitative interpretation
- help set-up parameter sweeps to develop better constitutive relationships (i.e., relative permeability) to upscale pore-scale processes
- help create massive amounts of data to train machine learning models [45,46].



分为4个主要模块：

- 参数输入
- 计算域构建
- 模拟
- 处理计算结果

mplbm_utils Python package





软件功能

- Geometry reading, cleaning and pre-processing
- Single- and multi-phase simulation setups with a variety of boundary conditions used in porous media problems
- Output reading and post-processing

还包含一些工具实现以下功能：

- Capillary pressure-saturation behavior calculations
- Absolute and relative permeability calculations and plotting
- Percolation path analysis
- Contact angle studies
- Visualization and animation of flow simulation outputs



软件架构

输入

流体模拟的第一步是输入**binary image**，做优化。输入文件及格式见表1

几何体存储于Digital Rock Portal，可从网站下载。

Table 1

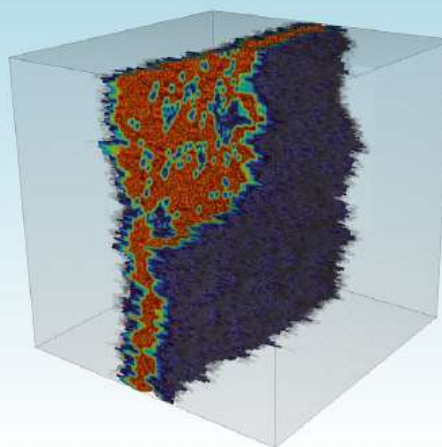
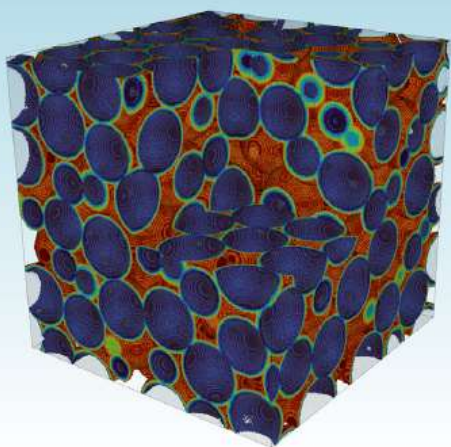
Allowed input file-formats.

Input Format	File Contents
.txt/.csv	Sphere coordinates
.tiff/.png stack	2D cross-sections
.raw/.h5	3D image
Digital Rock Portal url	Downloaded files



Digital Rock Portal

以HDF5格式存储的3D数组



```
import urllib, hdf5storage, scipy.ndimage, vedo # import libs

# download image from the Digital Rocks Portal
drp = 'https://www.digitalrockportal.org/'
url = drp + 'projects/374/images/309544/download/'
urllib.request.urlretrieve(url, in_name='374_01_00_256.mat')

# read-in image
bin_in = hdf5storage.loadmat(in_name)['bin']

# obtain the Euclidean distance of the pore-space
edist = scipy.ndimage.morphology.distance_transform_edt(bin_in==0)

# remove upper corner
half_size = bin_in.shape[0]//2
edist[-half_size:, -half_size:, :half_size] = 0
bin_in[-half_size:, -half_size:, :half_size] = -1

# plot using Vedo
plot = vedo.Volume(edist).legosurface(vmin=1, vmax=5, cmap='turbo')
plot += vedo.Volume(bin_in).legosurface(vmin=1, vmax=2).c('lightgray').opacity(0.05)
vedo.plotter(plot)
```

Python脚本可视化多孔介质材料

基于自己的实验，制作数字化的多孔介质材料的数据文件？

Javier E. Santos, Michael J. Pyrcz, Maša Prodanovic. 3D Dataset of binary images: A collection of synthetically created digital rock images of complex media. Data in Brief 40 (2022) 107797



输入

加载计算域后，**没有连接的**区域将被删除，保证流动方向上的贯通性。

还可以使用PoreSpy水系模拟工具（在mplbm_utils Python工具包中实施），创建初始的两相流配置文件。

最后，binary image转换为具有3个标记的图像：

pore-space (or wetting fluid) non-wetting fluid,

bounce-back boundaries,

inner solids.



软件架构

模拟

当处理完成输入几何体后，需要为单相流或两相流模拟创建输入文件。

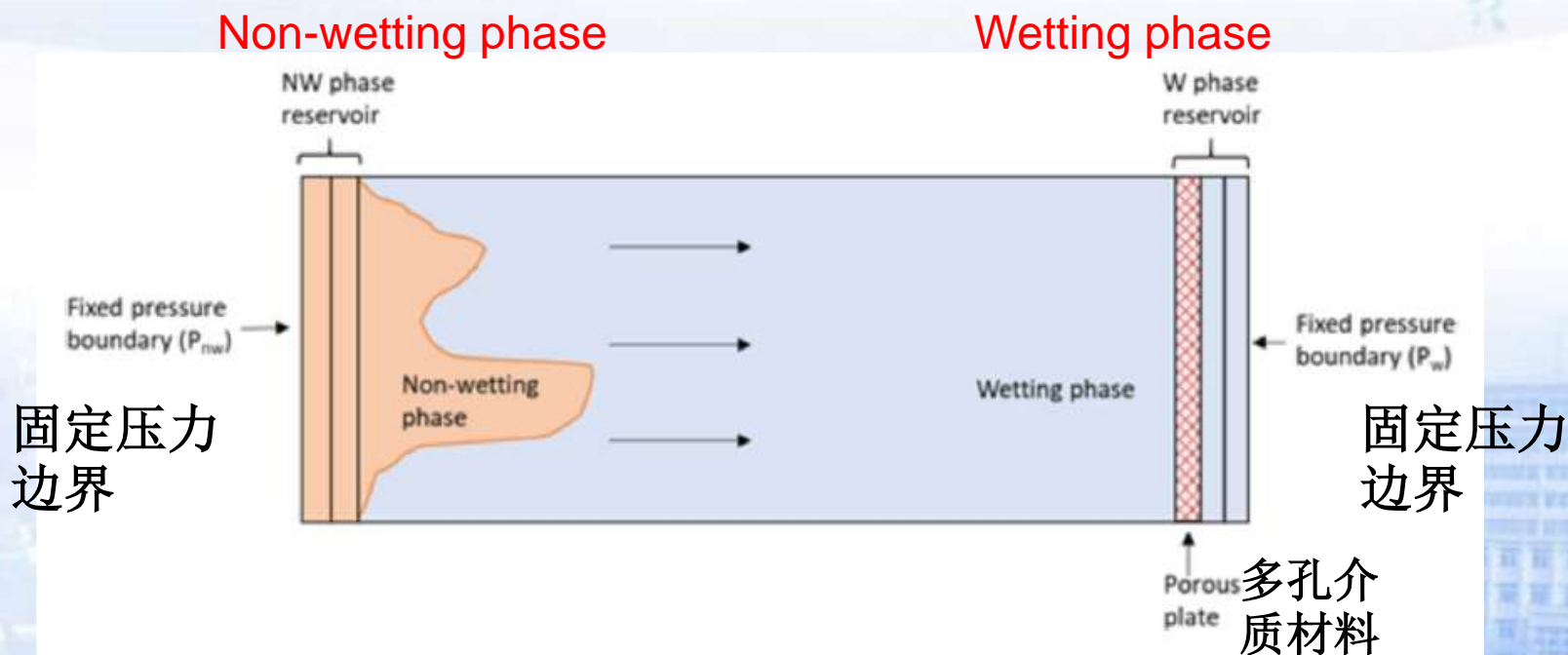


Fig. 2. Unsteady-state simulation schematic.



软件架构

可视化

默认，Palabos输出VTK文件，包含**3D密度和速度**数据。

为增加可视化的灵活性，可使用PyVista和Vedo模块的Python脚本创建**密度**等值面可视化。也可创建动画。

还有作图脚本可创建快速可视化的**毛细压力和相对渗透率曲线**。



软件架构 可视化

Finney Pack Two-Phase MPLBM-UT Results

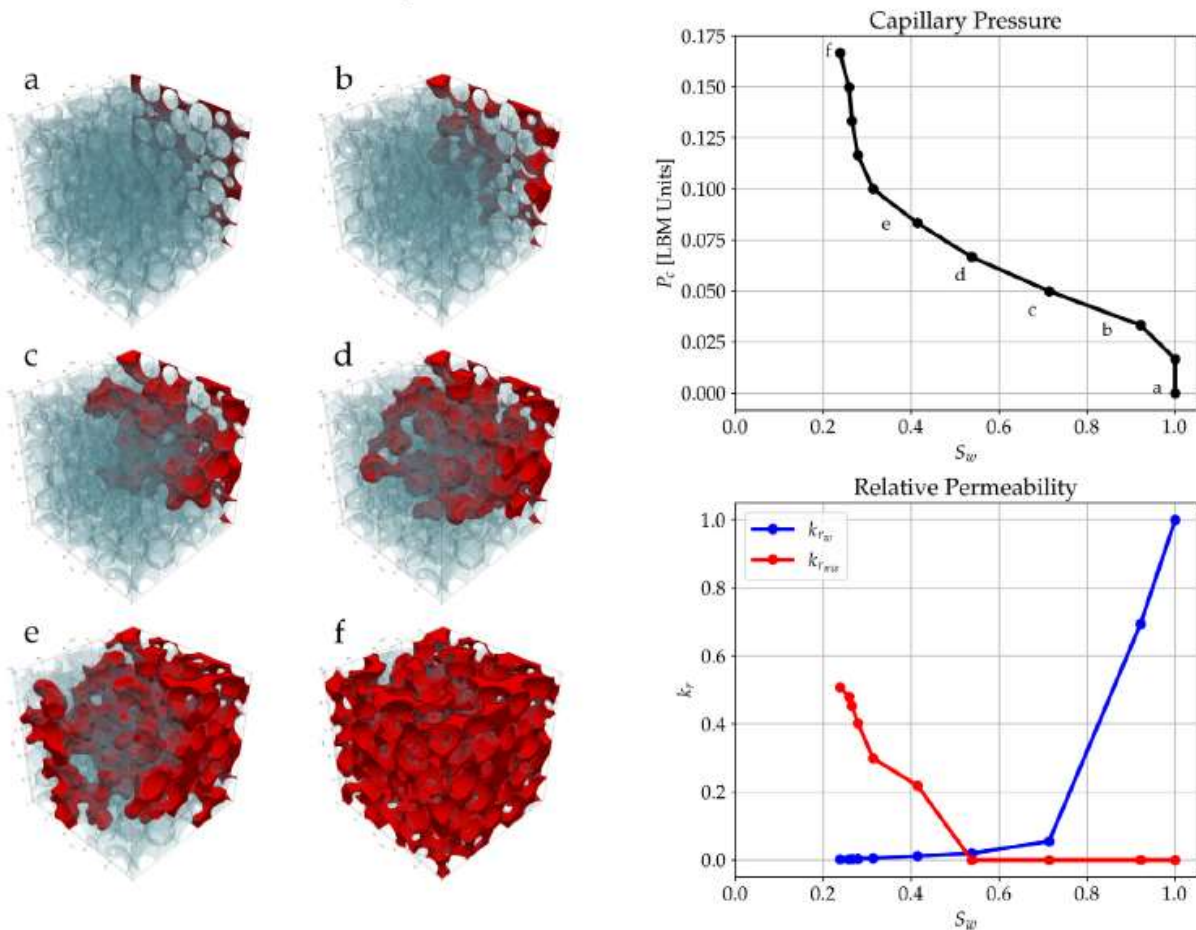


图3: sphere pack LBM模拟。Wetting-phase表征为蓝色, non-wetting phase表示为红色。图像(a)为初始条件, 图像(f)是模拟终点。展示了毛细孔压力曲线及对应的饱和值。



优势：

一行代码安装MPLBM-UT

示例提供常见的模拟情景，仅需修改一些参数

提供了2D，3D和4D可视化工具

艰苦朴素
求真务实

中国地质大学