

计算力学学报
Chinese Journal of Computational Mechanics
ISSN 1007-4708, CN 21-1373/O3

《计算力学学报》网络首发论文

题目：基于相场格子 Boltzmann 方法的相间传质模拟
作者：崔嘉，秦妍，董波，周训，张雅瑾，李维仲
收稿日期：2023-10-26
网络首发日期：2024-04-19
引用格式：崔嘉，秦妍，董波，周训，张雅瑾，李维仲. 基于相场格子 Boltzmann 方法的相间传质模拟[J/OL]. 计算力学学报.
<https://link.cnki.net/urlid/21.1373.O3.20240418.1551.002>



网络首发：在编辑部工作流程中，稿件从录用到出版要经历录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿等阶段。录用定稿指内容已经确定，且通过同行评议、主编终审同意刊用的稿件。排版定稿指录用定稿按照期刊特定版式（包括网络呈现版式）排版后的稿件，可暂不确定出版年、卷、期和页码。整期汇编定稿指出版年、卷、期、页码均已确定的印刷或数字出版的整期汇编稿件。录用定稿网络首发稿件内容必须符合《出版管理条例》和《期刊出版管理规定》的有关规定；学术研究成果具有创新性、科学性和先进性，符合编辑部对刊文的录用要求，不存在学术不端行为及其他侵权行为；稿件内容应基本符合国家有关书刊编辑、出版的技术标准，正确使用和统一规范语言文字、符号、数字、外文字母、法定计量单位及地图标注等。为确保录用定稿网络首发的严肃性，录用定稿一经发布，不得修改论文题目、作者、机构名称和学术内容，只可基于编辑规范进行少量文字的修改。

出版确认：纸质期刊编辑部通过与《中国学术期刊（光盘版）》电子杂志社有限公司签约，在《中国学术期刊（网络版）》出版传播平台上创办与纸质期刊内容一致的网络版，以单篇或整期出版形式，在印刷出版之前刊发论文的录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿。因为《中国学术期刊（网络版）》是国家新闻出版广电总局批准的网络连续型出版物（ISSN 2096-4188，CN 11-6037/Z），所以签约期刊的网络版上网络首发论文视为正式出版。

基于相场格子 Boltzmann 方法的相间传质模拟

崔 嘉¹, 秦 妍¹, 董 波^{1*}, 周 训², 张雅瑾¹, 李维仲¹

(1. 大连理工大学, 海洋能源利用与节能教育部重点实验室, 能源与动力学院, 大连 116024; 2. 河南科技大学, 车辆与交通工程学院, 洛阳 471003)

摘 要: 相间传质在科学、工程和技术领域广泛存在。为了研究静态和动态情况下不混溶两相之间的相间传质过程, 本文将连续组分传输模型与相场格子玻尔兹曼方法结合, 构建了一个适用于模拟具有大密度比两相流系统相间传质过程的格子 Boltzmann 多相模型。该模型通过在碰撞过程引入源项和相界面处引入传质通量, 保证相界面上的通量连续性。随后通过模拟静止相界面传质问题和毛细管驱替与传质过程验证了传质模型的正确性。和现有模型相比, 本文提出的模型在模拟相间传质过程中可以保证相界面传质通量具有较高的精度。随后, 本文模拟了多孔介质内相间传质过程, 并对多孔介质内两相传质通量的变化原因和影响因素进行深入研究。研究结果表明根据相界面传质通量的变化可以将多孔介质中相间传质过程划分为两个阶段。第一阶段相界面总传质通量随界面处浓度梯度迅速减小。第二阶段的总传质通量曲线与单位相界面速度曲线的变化趋势高度一致。

关键词: 相间传质; 两相流; 格子玻尔兹曼方法; 相场模型; 多孔介质

中图分类号: TQ021.4

文献标识码: A

文章编号: 1007-4708(2017)00-0000-00

Phase-field-based lattice Boltzmann simulation of interphase mass transfer

CUI Jia¹, QIN Yan¹, DONG Bo^{1*}, ZHOU Xun², ZHANG Ya-jin¹, LI Wei-zhong¹

(1. Key Laboratory of Marine Energy Utilization and Energy Conservation of the Ministry of Education, School of Energy and Power Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China; 2. School of Vehicle and Transport Engineering, Henan University of Science and Technology, Luoyang 471003, China)

Abstract: Interphase mass transfer is widespread in the fields of science, engineering, and technology. By coupling the continuum species transfer model and the phase-field-based lattice Boltzmann method, a lattice Boltzmann multiphase model is proposed in the current study for investigating interphase mass transfer between immiscible phases in static and dynamic conditions. The model is suitable for modeling the two-phase flow systems with a large density ratio. The mass transfer continuity at the interface is maintained by introducing source terms in the collision process and mass transfer flux at the interface. The mass transfer model is validated through simulations of stationary interphase mass transfer and capillary displacement with mass transfer. Compared to existing models, our model ensures a high level of accuracy in predicting mass transfer flux across phase boundaries in the simulations of interphase mass transfer processes. Then, interphase mass transfer in porous media is studied, and the mass transfer flux variation and its affecting factors are analyzed. The results reveal that the interphase mass transfer process within porous media can be divided into two stages according to the variation of mass transfer flux across phase interfaces. In the first stage, the total mass transfer flux across the phase interface rapidly decreases with the concentration gradient

收稿日期: 2023-10-26; 修改稿收到日期: 2023-12-09.

基金项目: 河南省重点研发与推广专项 (科技攻关) No. 222102220033 资助项目

作者简介: 董 波* (1982-), 女, 博士, 副教授

(E-mail: bodong@dlut.edu.cn);

崔 嘉 (1999-), 女, 硕士.

at the interface. In the second stage, the trend in the total mass transfer flux curve closely follows the velocity of the unit phase interface.

Key words: Interphase Mass Transfer; Two-phase Flow; Lattice Boltzmann Method; Phase Field Model; Porous Media

1 引言

相间传质广泛存在于自然界和多种学科的工程应用中,如二氧化碳封存^[1]、水合物分解^[2]、油水驱替^[3]等。相间传质涉及到的相界面通常具有复杂的形态和动态行为,这使相间传质的观测和数值模拟面临一定的挑战。研究相间传质问题对于工业过程的优化及控制具有重要意义。

为了研究多相流中的相间传质过程,研究人员采用多种实验研究和数值模拟方法来实现传质过程中浓度场、流场的可视化及定量化。在实验方面,浓度场可视化研究方法包括阴影法^[4]、纹影法^[5]和干涉法^[6],而流场最有效的定量研究方法是粒子示踪法(即 PIV 法)^[7]。要深入研究相间传质规律,需要获取流体的速度场、浓度场等信息,然而实验方法通常会受到尺度效应、采样手段和时间分辨率的限制。因此,实现传质过程的精确定量和精准观测是一项具有挑战性的任务。

在数值模拟研究方面,Haroun 等人^[8]在流体体积法(Volume of Fluid, VOF)框架内推导了连续组分传输(Continuum Species Transfer, CST)模型。该模型描述了全局浓度的演化,同时满足气液界面处的亨利定律和界面上通量的连续性。由于克服了跨界面局部质量通量计算不准的问题,该模型广泛用于研究两相传质过程。例如,Graveleau 等人^[9]在孔隙尺度下模拟不同情况下跨界面的传质过程,包括气水驱替、薄膜中的传质以及在各种流动条件下多孔结构中的传质问题。

在两相流动中,相界面不规则且不断变化,而格子玻尔兹曼方法(Lattice Boltzmann Method, LBM)在处理复杂界面时具有明显优势^[10]。Yang 等人^[11]在伪势多相传质模型中通过将额外的碰撞项引入了 CST 公式,建立了 CST-LB 模型,用来模拟多相界面上的质量转移过程,并对该模型的边界条件处理进行了讨论。在他们的研究中,

受伪势 LB 模型的限制,流体系统的密度比为 100 左右。Tan 等人^[12]提出了一种基于守恒相场法和连续组分传输法相结合的 LBM 多相模型,但该模型在恢复的界面方程中包含一些人工项,这会影响到求解两相流的数值精度。此外,发生在多孔介质中的相间传质过程还受到孔隙结构和流体流动特性的影响^[13-15],因此和单通道内的相间传质过程相比,多孔介质中的两相传质过程更加复杂和多样化。

综上所述,目前研究者已从多方面开展了相间传质的实验和数值模拟研究。由于速度是影响相间传质的关键参数之一^[13,16,17],选择合适的两相流模型对于开展相间传质模拟研究至关重要。本文基于连续组分传输模型和相场格子 Boltzmann 模型,构建了一个适用于模拟具有大密度比两相流系统相间传质过程的格子 Boltzmann 多相模型。在此基础上,研究了多孔介质中的相间传质过程,分析了气液平均浓度差、相界面浓度梯度等参数的变化规律和两相传质通量的影响因素。

2 数值模型

本节对两相流模型、传质模型和界面传质边界条件进行了详细介绍,通过在传质模型的碰撞过程引入源项,并在相界面处引入传质通量,构建了一个适用于模拟具有大密度比两相流系统相间传质过程的格子 Boltzmann 多相模型。

2.1 两相流模型

流场采用基于 Liang 等人^[18]提出的相场 LB 模型来描述。该模型通过引入适当的源项来弥补界面方程与理论分析的不一致性问题。其优点在于能够保证模型的虚假速度极小,并且可以处理具有大密度比的多相流问题。

守恒 Allen-Cahn 方程的 LB 演化方程为:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t + \delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_f} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + \delta t F_i(\mathbf{x}, t) \quad (1)$$

式中 \mathbf{x} 表示格子位置; $f_i(\mathbf{x}, t)$ 是粒子分布函数; $f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$ 是平衡态分布函数; τ_f 是与迁移率相关的无量纲松弛时间; \mathbf{c}_i 是离散速度; δt 为时间步长。通过 Chapman-Enskog 分析, 演化方程可以恢复为守恒 Allen-Cahn 方程, 源项 $F_i(\mathbf{x}, t)$ 由下式给出^[18]:

$$F_i = \left(1 - \frac{1}{2\tau_f}\right) \frac{\omega_i \mathbf{c}_i \cdot [\partial_i(\phi \mathbf{u}) + c_s^2 \lambda \mathbf{n}]}{c_s^2} \quad (2)$$

式中 \mathbf{u} 为速度; ω_i 为权重因子; $\mathbf{n} = \nabla \phi / |\nabla \phi|$ 是垂直于界面的单位向量; ϕ 是序参数; c_s 为格子声速; λ 是 ϕ 的函数, 定义为 $\lambda = 4\phi(1-\phi)/W$; W 是界面厚度。

序参数的计算式为:

$$\phi = \sum_i f_i \quad (3)$$

Navier-Stokers 方程的 LB 演化方程为:

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t + \delta t) - g_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_g} [g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + \delta t G_i(\mathbf{x}, t) \quad (4)$$

式中 $g_i(\mathbf{x}, t)$ 是密度分布函数; $g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$ 是平衡态分布函数; τ_g 是与粘度有关的无量纲松弛时间。作用力分布函数 $G_i(\mathbf{x}, t)$ 由下式给出:

$$G_i = \left(1 - \frac{1}{2\tau_g}\right) \omega_i \left[\frac{\mathbf{c}_i \cdot (\mu_\phi \nabla \phi + \mathbf{G})}{c_s^2} + \frac{(\rho_l - \rho_g) \mathbf{u} \nabla \phi \cdot \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i}{c_s^2} \right] \quad (5)$$

式中 $\mu_\phi = \frac{48\sigma}{W} \phi(\phi-1)(\phi-0.5) - \frac{3}{2} \sigma W \nabla^2 \phi$ 是化学势, 其中 σ 是表面张力; \mathbf{G} 为体积力。序参数的梯度 $\nabla \phi$ 和拉普拉斯算子 $\nabla^2 \phi$ 分别通过二阶各向同性中心差分格式计算。

密度和粘度通过线性插值计算, 其计算式为:

$$\rho = \phi(\rho_l - \rho_g) + \rho_g \quad (6)$$

$$\nu = \phi(\nu_l - \nu_g) + \nu_g \quad (7)$$

式中 下标 l 和 g 分别代表两种流体。

宏观量速度 \mathbf{u} 和压力 p 的计算式如下:

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \left[\sum_i \mathbf{c}_i g_i + \frac{\delta t}{2} (\mu_\phi \nabla \phi + \mathbf{G}) \right] \quad (8)$$

$$p = \frac{c_s^2}{1 - \omega_0} \left[\sum_{i \neq 0} g_i - \omega_0 \rho \frac{|\mathbf{u}|^2}{2c_s^2} + \frac{\delta t}{2} (\rho_l - \rho_g) \mathbf{u} \cdot \nabla \phi \right] \quad (9)$$

2.2 传质模型

在多相系统中, 组分 A 存在于两种流体相中。它在每个相中的浓度 C_A 由经典的平流扩散方程描述:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} C_A) = \nabla \cdot (D_A \nabla C_A) \quad (10)$$

式中 D_A 是组分 A 的分子扩散系数, 可以表示为 $D_A = D_l D_g / [D_l(1-\phi) + D_g \phi]$; C_A 是组分 A 的浓度, 定义为 $C_A = \phi C_{l,A} + (1-\phi) C_{g,A}$ 。

Haroun 等人^[8]推导了连续组分传输 (CST) 模型。该模型用来描述浓度的演化过程。其核心思想是在平流-扩散方程中引入一个源项 Φ_{CST} , 其表达式:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} C_A) = \nabla \cdot [D_A (\nabla C_A + \Phi_{\text{CST}})] \quad (11)$$

在相场 LB 模型中, 源项的表达式为:

$$\Phi_{\text{CST}} = -\frac{C_A(H-1)}{(1-\phi)H + \phi} \nabla \phi \quad (12)$$

式中 H 是亨利系数。

本文将 Yang 等人^[11]的传质 LB 模型与基于相场的 LB 模型耦合, 通过添加 CST-LB 的碰撞项来模拟多相系统中浓度场的演变过程, 其演化方程为:

$$h_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t + \delta t) - h_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_D} [h_i(\mathbf{x}, t) - h_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + \Omega_{\text{CST},i} \quad (13)$$

式中 松弛时间 τ_D 与扩散系数 D 的关系为

$$\tau_D = \frac{2D}{(1-J_0)} \frac{\delta t}{\delta x^2} + 0.5; \quad h_i(\mathbf{x}, t) \text{ 是浓度分布函数;}$$

$h_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$ 是平衡态分布函数, 计算式如下:

$$h_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = C \cdot (J_i + 0.5 \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}) \quad (14)$$

$$J_i = \begin{cases} J_0 & i=0 \\ (1-J_0)/4 & i=1,2,3,4 \end{cases} \quad (15)$$

式中 C 为浓度; J_0 的取值范围为 0~1; 碰撞项 $\Omega_{\text{CST},i}$ 由下式给出:

$$\Omega_{\text{CST},i} = \left(1 - \frac{1}{2\tau_D}\right) J_i C \frac{H-1}{(1-\phi)H + \phi} (\mathbf{c}_i \cdot \nabla \phi) \delta t \quad (16)$$

2.3 界面传质边界条件

在涉及到移动相界面的情况下，界面传质通量是决定传质和流动能否耦合成功的关键。本文充分考虑了界面边界条件的影响。下面给出界面传质边界条件的确定方法。

浓度分布函数的表达式由 Kang 等人^[19]根据相应的浓度及其梯度给出：

$$\sum h_i c_i = \mathbf{C} \mathbf{u} - D \nabla C \quad (17)$$

根据公式(11)和公式(17)，本文构建的模型中局部相界面传质通量 F_M 的表达式如下：

$$F_M = \mathbf{c}_i h_i (\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t) + \mathbf{c}_i h_i (\mathbf{x}, t) = [\mathbf{C} \mathbf{u} - D(\nabla C + \Phi_{\text{CST}})]_{\mathbf{n}} \quad (18)$$

式中 \bar{i} 是 i 的相反方向。相界面位置根据序参数 ϕ 判断。公式右侧为相界面法向方向上的界面传质通量，此处浓度 C 等参数由相界面两侧格点 $\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t$ 和 \mathbf{x} 处的值线性插值后得到。已知传质通量后，可进一步计算等式(18)左侧的未知浓度分布函数 h_i 和浓度场。本文构建的模型通过采用上述界面传质边界处理方式以保证在模拟移动相界面传质问题时相界面两侧浓度的准确性。

3 模型验证

本节通过模拟分层泊肃叶流、相界面处的浓度跳跃现象和毛细管中的传质与驱替三个算例来验证模型的有效性。

3.1 分层泊肃叶流

首先，本文通过模拟经典的分层泊肃叶流来验证两相流模型的准确性。如图1所示，两种流体被上下放置于 $-h \leq y \leq h$ 的无限长通道中， h 取值为 50。设置计算域的左右边界为周期边界，上下边界采用半步长反弹边界。

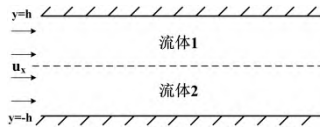


图1 分层泊肃叶流示意图

Fig.1 Schematic diagram of layered Poiseuille flow

两个平板之间施加恒定外力 $\mathbf{F} = (F_x, 0)$ 驱动两相流动，水平力 $F_x = u_x(\mu_1 + \mu_2)/h^2$ ， u_x 取值为 0.0001；本节的参数取值均为格子单位下的无量纲数，忽略重力的影响。密度比 ρ_2/ρ_1 分别取 10 和 1000，动力粘度比 μ_2/μ_1 设定为 10 和 100，表

面张力 $\sigma=0.0001$ ，相界面厚度 $W=5$ ，迁移率 $M=0.1$ 。

图2是利用本模型和 Fakhari 模型^[20]模拟分层泊肃叶流 y 方向剖面水平速度和解析解的对比。如图所示，在不同密度比下，分层泊肃叶流剖面水平速度模拟结果和解析解吻合良好。与同为基于 Allen-Cahn 方程的 Fakhari 等人提出模型^[20]计算结果相比，速度误差更小。结果表明本文中两相流模型可以更精准模拟两相流动过程。

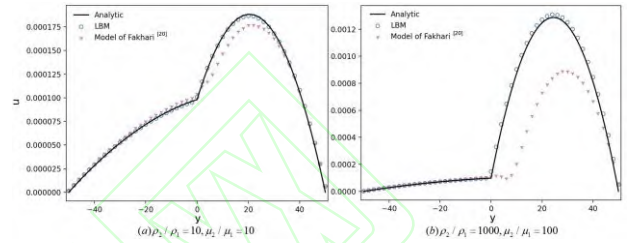


图2 本模型和 Fakhari 模型^[20]模拟分层泊肃叶流剖面水平速度和解析解的对比

Fig.2 Comparison of the simulated horizontal velocity profile of layered Poiseuille flow and the analytical solution between the present model and the Fakhari model^[20]

3.2 相界面处的浓度跳跃现象

在研究移动相界面传质之前，首先通过静止界面的两相流传质对上述相间传质模型的准确性进行验证。本节模拟了静止且不混溶两种流体之间的传质过程，并将截面浓度与解析解比较，来验证本模型可以准确处理界面处的浓度跳跃。如图3所示，流体1和流体2被上下静置于尺寸为 $L_x \times L_y = 100 \times 400$ 的矩形计算域内。在模拟过程中，忽略重力影响并设置计算域的左右边界为周期边界，上下边界为非平衡外推边界。溶解在流体1中的组分 A 浓度 C_1 为 1.0 mol/L，流体2中组分 A 浓度为 0 mol/L。溶解遵循亨利定律： $C_1 = H C_2$ 。其它相关模拟参数定为：密度比 $\rho_2/\rho_1 = 100$ ，运动粘度为 $\nu_1 = \nu_2 = 0.1$ ，扩散系数为 $D_1 = D_2 = 0.01$ 。相界面厚度 $W=4$ ，亨利系数 $H=2$ 。

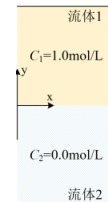


图3 两种流体上下静置示意图

Fig.3 Schematic diagram of two fluids in a stationary top and bottom arrangement

此情况下，浓度变化位于界面附近。不同时刻组分 A 界面法向浓度的数值结果与解析解^[11]

的对比如图 4 所示。可以发现相界面附近出现浓度跳跃现象, 模拟结果与解析解吻合良好。流体 1 中组分平均浓度为 0.76 mol/L 时, $y=400$ 处的浓度最大相对误差为 0.91% 。在同样条件下, Yang 等相关研究^[11]中组分平均浓度为 0.76 mol/L 时相对误差为 3.09% 。由此可见, 本模型具有精确模拟静止界面两相传质的能力。

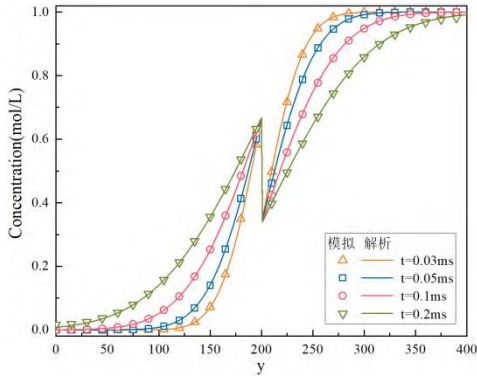


图 4 不同时刻组分 A 界面法向浓度模拟结果和解析解的对比

Fig.4 Comparison between the simulated results of the normal concentration profile of component A at different time intervals and the analytical solution

3.3 毛细管中的传质与驱替

为了考虑流动特性对相间传质过程的影响, 本节对流动时移动界面传质进行模拟。初始毛细管中充满不含组分 B 的流体 2, 携带组分 B 浓度为 $C_{B,1}=1 \text{ mol/L}$ 的流体 1 从左侧以初速度 $u_x=0.002$ 进入毛细管。计算域尺寸为 $L_x \times L_y=200 \times 25$ 。上下管壁设置为无滑移的半步长反弹边界, 进出口边界为非平衡态外推边界, 相界面采用式 (18) 中的通量边界条件。其它相关模拟参数定为: 亨利系数 $H=0.7$, 密度 $\rho_1=\rho_2=1$, 运动粘度 $\nu_1=\nu_2=0.1$, 表面张力 $\sigma=0.001$, 扩散系数设为 $D_1=1$, $D_2=0.3$ 。为使序参数在界面处连续且平滑过渡, 设置初始状态流体 1 分布在左侧 $0 \leq x \leq 0.025L_x$ 位置, 初始序参数分布为:

$$\phi(x, y) = 0.5 + 0.5 \tanh \frac{2(x - 0.025L_x)}{W} \quad (19)$$

不同时刻浓度场和相界面的分布如图 5 所示, 相界面以黑色线条表示。随着驱替的进行, 毛细管中的流体 2 被入口流体 1 推动, 流体 1 里的组分 B 逐渐溶解到流体 2 中, 相界面前沿处流体 1 的浓度逐渐降低, 流体 2 中组分 B 的浓度升高。图 5 还给出了驱替过程中不同时刻浓度跳跃位置和相界面位置, 相界面以黑色线条表示。可以看出, 不同时刻的相界面位置和浓度跳跃位置

吻合良好。

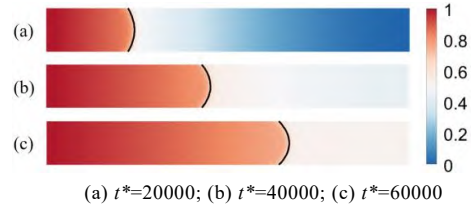


图 5 不同时刻浓度场和相界面的分布

Fig.5 Distribution of the concentration field and phase interface at different times

图 6 为不同时刻沿毛细管水平轴线的截面浓度分布。如图所示, 流体 1 中的浓度分布呈线性, 在浓度发生跳跃的界面两侧始终满足亨利定律 $C_{B,2} = HC_{B,1}$ 。模拟得到的两相浓度变化特点与 Yang 的研究^[11]中的结论一致。结果证明本模型具有模拟移动相界面传质的能力。

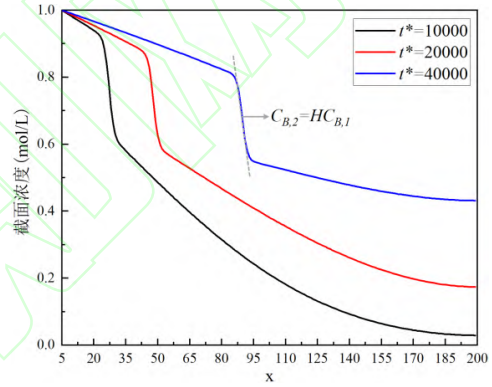


图 6 沿毛细管水平轴线的截面浓度分布

Fig.6 Cross-sectional concentration distribution along the horizontal axis of the capillary

如上所述, 通过对三个不同的算例模拟验证本文提出的模型有效性, 同时, 还可以发现本文所构建的两相流模型和传质模型在准确性上更具优势, 为进一步研究多孔介质内相间传质问题提供了有效手段。

4 多孔介质中相间传质模拟

本节模拟多孔介质内相间传质过程, 进一步探究界面形态更复杂的两相流动和相间传质规律。多孔介质由一些随机排列且位置固定的骨架组成, 计算域大小为 $2 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$, 格子尺寸为 $L_x \times L_y=400 \times 200$ 。初始计算域中 $0 \leq x \leq 30$ 充满气体, 携带组分 D 浓度为 $C_{D,1}=1 \text{ mol/L}$ 的气体在左侧以入口速度 $u_x=0.002$ 注入。其余部分由固体骨架和不含组分 D 的液体组成。出口和入口的边界条件采用非平衡态外推边界; 上下边界和固体表面采用半步长反弹边界。其他相关参数设定

如下：亨利系数 $H=0.5$ ，密度 $\rho_l=100$ ， $\rho_g=1.25$ ，运动粘度 $\nu_l=\nu_g=0.153$ ，表面张力 $\sigma=0.002$ ，扩散系数为 $D_g=0.2$ ， $D_l=0.02$ 。

图 7 为多孔介质内相间传质过程中不同时刻的浓度场和相界面分布情况，图中气液相界面用白色线条表示。图 8 为多孔介质内相间传质过程中的速度场分布。如图 7 所示，浓度场跳跃和气液界面位置吻合良好。随着气体的注入，在流动早期 ($t^*=10000$ 、 $t^*=20000$)，相界面处浓度与入口浓度相差不大，这是由于液相比气相的扩散系数小很多。图 8(a)中可以看出，气体未流入孔隙时流速较慢，相界面右侧液相浓度增加至饱和后气相中溶质不再继续向液相溶解。在流动中期 ($t^*=40000$)，气体流入多孔介质的孔隙内部，出现指进现象，流速加快的同时气液接触界面也迅速增大，气相前端浓度下降明显。在流动后期 ($t^*=60000$)，气液接触界面进一步增大，气体速度大于浓度扩散速度，部分气体流入计算域右侧，计算域右侧液体浓度较低。

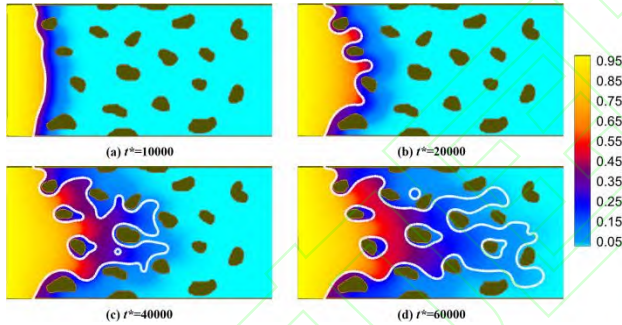


图 7 不同时刻多孔介质内的浓度场和相界面分布

Fig.7 Distributions of the concentration field and phase interface in porous media at different moments

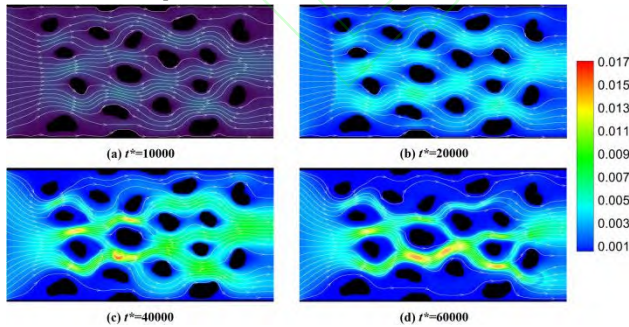


图 8 不同时刻多孔介质内的速度场分布

Fig.8 Distributions of the velocity field in porous media at different moments

图 9 为不同时刻气液两相平均浓度的变化。如图所示，液相平均浓度 \bar{C}_l 随气相平均浓度 \bar{C}_g 的降低而升高，相平均浓度与时间近似呈线性相关。

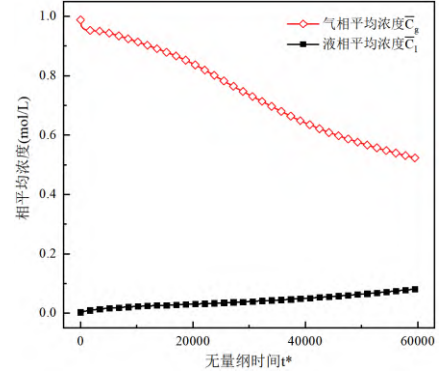


图 9 不同时刻的相平均浓度

Fig.9 Average phase concentration at different moments

图 10 为不同时刻单位相界面传质通量和气液平均浓度差 $H\bar{C}_g - \bar{C}_l$ 以及气液相界面面积的变化情况，其中 \bar{C}_g 、 \bar{C}_l 分别为气相和液相中的平均浓度，单位相界面传质通量 F_A 由局部通量的积分获得，计算式为：

$$F_A = \frac{\int [Cu - D(\nabla C + \Phi_{CST})] dA}{A_{g-l}} \quad (20)$$

式中 A_{g-l} 为气液相界面的面积。图中观察到气液平均浓度差 $H\bar{C}_g - \bar{C}_l$ 随时间的增加近似呈线性下降趋势。同时，气液相界面面积 A_{g-l} 不断增加。在流动早期 ($t^* < 20000$)， A_{g-l} 的变化较小。随后， A_{g-l} 快速增大。单位相界面传质通量在流动早期出现非线性波动。当气体逐渐流入孔隙后 ($t^* > 20000$)，单位相界面传质通量变化趋于稳定。对相界面传质通量变化的分析将在后面详细展开。

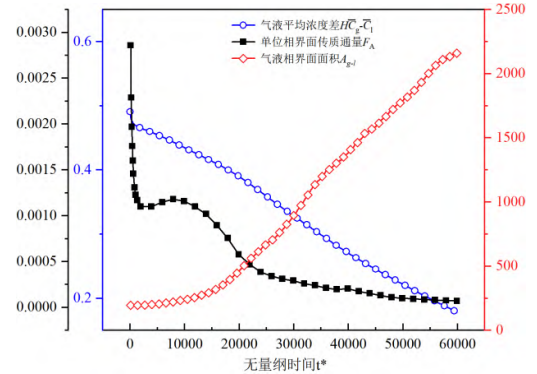


图 10 单位相界面传质通量、气液平均浓度差和气液相界面面积随时间的变化

Fig.10 Time variations of the mass flux per interfacial area and the gas-water average concentration difference and the phase-averaged concentration

现有研究表明速度对相间传质有着重要影响 [16,17]。本小节重点关注相界面传质通量的变化规

律。该通量不仅受到速度的影响, 同时还受到包括浓度和浓度梯度的综合影响。图 11 为相界面总传质通量、单位相界面速度、相界面总浓度梯度和相界面总浓度随时间的变化情况。由式(20)可知, 相界面总传质通量的变化由后三者决定。如图 11 所示, 根据相界面传质通量的变化, 可以将多孔介质中的传质过程划分为两个阶段。第一阶段 T_1 ($t^*=0\sim2000$) 非常短暂, 是相界面浓度梯度占主导作用的阶段。在这个阶段, 气相内的溶质开始向液相转移, 此时液相处于未饱和状态, 因此单位相界面传质通量数值较高。然后, 随着时间的推移, 靠近相界面处的液相浓度快速升高。由于液相的扩散系数相对较小, 这些溶质无法及时向右侧扩散, 导致界面处浓度梯度迅速减小, 因此单位相界面传质通量也迅速减小。随着传质过程的进行, 第二阶段 T_2 ($t^*=2000\sim60000$) 是单位相界面速度占主导作用阶段, 也是整个传质过程的主要阶段。在这个阶段, 单位相界面速度在气体流入孔隙时 ($t^*=20000$) 达到峰值, 然后逐渐下降。此外, 从图 11 还可以看出, 与图 10 中单位相界面传质通量在气体流入孔隙后变化趋于稳定不同, 总相界面传质通量曲线与单位相界面速度曲线的变化趋势高度一致, 而其他两个相关参数曲线则与总传质通量曲线的关联性较小。

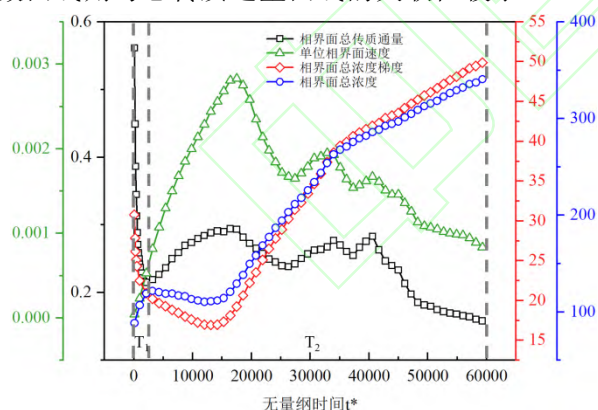


图 11 相界面总传质通量、单位相界面速度、相界面总浓度梯度和相界面总浓度随时间的变化

Fig.11 Time variations of the total mass transfer flux across the phase interface, unit phase interface velocity, total concentration gradient across the phase interface, and total concentration across the phase interface

5 结论

为了研究具有大密度比的多相系统内相间传质问题, 本文以连续组分传输 (CST) 模型为基

础, 通过修正碰撞源项和相界面边界条件, 并与相场 LB 模型耦合, 构建了基于相场的 CST-LB 相间传质模型。随后, 通过不同算例验证了模型的正确性。与现有模型相比, 本文提出的模型在模拟相间传质问题时可以保证相界面传质通量方面具有较高的精度。在此基础上, 本文研究了多孔介质中相间传质过程, 得到的主要结论如下:

(1) 根据相界面传质通量的变化可以将多孔介质中相间传质过程划分为两个阶段, 分别为相界面浓度梯度占主导作用阶段 (第一阶段) 和单位相界面速度占主导作用阶段 (第二阶段)。

(2) 第一阶段的初始时刻相界面总传质通量数值较高, 在短时间内相界面总传质通量伴随界面处浓度梯度迅速减小。第二阶段是整个传质过程的主要阶段。在这个阶段, 相界面总传质通量在气体流入孔隙时达到峰值, 然后波动下降。与单位相界面传质通量在气体流入孔隙后变化趋于稳定不同, 第二阶段的总传质通量曲线与单位相界面速度曲线的变化趋势高度一致。

参考文献(References):

- [1] Bakhshian S. Dynamics of dissolution trapping in geological carbon storage[J]. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 2021, 112: 103520.
- [2] Yang J Y, Xu Q H, Liu Z Y, et al. Upscaling methane hydrate dissociation kinetic model during depressurisation[J]. *Chemical Engineering Science*, 2023, 275: 118742.
- [3] Alizadeh M, M Fatemi. Pore-doublet computational fluid dynamic simulation of the effects of dynamic contact angle and interfacial tension alterations on the displacement mechanisms of oil by low salinity water[J]. *International Journal of Multiphase Flow*, 2021, 143: 103771.
- [4] Settles G S, Hargather M J. A review of recent developments in schlieren and shadowgraph techniques[J]. *Measurement Science and Technology*, 2017, 28 (4): 042001.
- [5] Kim S, Xu R, Lee W, et al. Mass transfer performance enhancement by nanoabsorbents during CO₂ absorption process[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 137: 1-11.
- [6] Ganzherli N M, Maurer I A, Granskiy P V. Investigation of protein mass transfer by real-time holographic

- interferometry[J]. *Technical Physics*, 2004, 49 (1): 67-70.
- [7] 陈俊. 互不相溶液-液两相间传质过程的 Rayleigh-Bénard-Marangoni 特性研究[D]. 东南大学, 2021.
- [8] Haroun Y, Legendre D, Raynal L. Volume of fluid method for interfacial reactive mass transfer: application to stable liquid film[J]. *Chemical Engineering Science*, 2010, 65(10): 2896-2909
- [9] Graveleau M, Soulaire C, Tchelepi H A. Pore-Scale Simulation of Interphase Multicomponent Mass Transfer for Subsurface Flow[J]. *Transport in Porous Media*, 2017, 120(2): 287-308.
- [10] 姚杰, 董波, 李维仲. 复杂微通道气体流动的格子 Boltzmann 模拟[J]. 计算力学学报, 2022, 39(05): 641-648.
- [11] Yang J Y, Dai X Y, Xu Q H, et al. Lattice Boltzmann modeling of interfacial mass transfer in a multiphase system[J]. *Physical Review E*, 2021, 104: 015307.
- [12] Tan Z K, Yan H J, Huang R Z, et al. Phase-field lattice Boltzmann method for the simulation of gas-liquid mass transfer[J]. *Chemical Engineering Science*, 2022, 253: 117539.
- [13] Agaoglu B, Coptly N K, Scheytt T, et al. Interphase mass transfer between fluids in subsurface formations: A review[J]. *Advances in Water Resources*, 2015, 79: 162-194.
- [14] Cho J, Annable M D, Suresh P, et al. Measured mass transfer coefficients in porous media using specific interfacial area[J]. *Environmental Science & Technology*, 2005, 39(20): 7883-7888.
- [15] Gao H, Tatomir A B, Karadimitriou N K, et al. Effect of pore space stagnant zones on interphase mass transfer in porous media, for two-phase flow conditions[J]. *Transport in Porous Media*, 2023, 146(3): 639-667.
- [16] Kennedy C A, W C Lennox. A pore-scale investigation of mass transport from dissolving DNAPL droplets[J]. *Journal of Contaminant Hydrology*, 1997, 24(3-4): 221-246.
- [17] Aminnaji M, Rabbani A, Niasar V J, et al. Effects of pore-scale heterogeneity on macroscopic NAPL dissolution efficiency: A two-scale numerical simulation study[J]. *Water Resources Research*, 2019, 55(11): 8779-8799.
- [18] Liang H, Xu J R, Chen J X, et al. Phase-field-based lattice Boltzmann modeling of large-density-ratio two-phase flows[J]. *Physical Review E*, 2018, 97: 033309.
- [19] Kang Q J, P C Lichtner, D X Zhang. An improved lattice Boltzmann model for multicomponent reactive transport in porous media at the pore scale[J]. *Water Resources Research*, 2007, 43(12).
- [20] Fakhari A, D Bolster. Diffuse interface modeling of three-phase contact line dynamics on curved boundaries: A lattice Boltzmann model for large density and viscosity ratios[J]. *Journal of Computational Physics*, 2017, 334: 620-638.