

行政院國家科學委員會專題研究計畫 期中進度報告

反演孔頸網絡模型參數、建構導水曲線與發展動態二相流傳
輸之研究(1/2)

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC91-2211-E-002-042-

執行期間：91年08月01日至92年07月31日

執行單位：國立臺灣大學土木工程學系暨研究所

計畫主持人：李天浩

報告類型：精簡報告

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 92 年 6 月 11 日

行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告

反演孔頸網絡模型參數、建構導

水曲線與發展動態二相流傳輸

之研究(1/2)

A Study on Parameter Identification of Pore-Throat
Network Model, Derivation of Conductivity Curve and
on the Two-Phase Flow within the Dynamic Regime

計畫編號：NSC91-2211-E-002-042

執行期限：91年8月1日至92年7月31日

主持人：李天浩 國立台灣大學土木工程學系副教授

Email：thlee@ntu.edu.tw

中文摘要

本研究使用「孔頸網絡模型」(pore-throat network model)模擬孔隙介質中的二相流特徵曲線，得到合理的模擬結果，證實「孔頸網絡模型」可以模擬磁滯現象、估計非濕潤相殘餘量、以及表現殘留非濕潤相和接觸角的差異對於傳導係數的影響等優點。但是研究中同時也發現兩個未預期的問題存在，一是「孔頸網絡模型」有尺度效應的問題，應用「均壓法」操作可減小尺度效應的影響，但是無法完全消弭網絡中流體分佈不均勻的現象；二是在逆向反演孔頸網絡參數的研究上遇到計算量大、演算時間冗長的困難。解決以上問題的方法，必須改進孔頸模型結構型態，以「單元孔頸系集模型」(unit-pore-throat assemble model)取代原先的「頸網絡模型」。有關係集模型的研究尚在進行中，完整的研究成果將於期末報告中提出。

關鍵詞：孔隙介質、非水相性液體、二相流、擬靜態、特徵曲線、磁滯現象、非濕潤相殘餘量、孔頸網絡模型、置換機制、逆向問題。

Abstract

The pore-throat network model is applied to simulate p_c - s - k characteristic curves of two-phase flow in porous medium. The results demonstrate the model's ability to reasonably mimic the hysteresis phenomena, quantitatively estimate the non-wetting phase residuals after imbibition, and imitate the effect of residual non-wetting phase and contact angle on conductivity. However, there are two problems raised during the research. One is the size effect of the network model caused by the trend in saturation related to the distance from the boundary. The other is the amount of computation is formidable. The network model is evolved to a new direction called the "ensemble model of unit pore-throats". Preliminary study results were encouraging. For the new model is free of size effect and the computation time requirement is manageable. It will be presented and discussed in the final report.

Keywords: Porous medium, non-aqueous phase liquid (NAPL), two phase flow, quasi-static, characteristic curves, hysteresis, non-wetting phase residuals, pore-throat network, displacement mechanism, inverse problem.

一、研究目的

利用數值模式描述異質性土壤中，包括非水相液體(NAPLs)的不互溶二相或三相流體的傳輸，最困難的部分是如何準確估計毛細壓力(p)—飽和度(s)和水力傳導係數(k)等特徵曲線參數。模擬多相流傳輸的套裝軟體(例如：UTCHEM-9.0，資料來源：美國德州大學網站 <http://www.pe.utexas.edu/CPGE/UTCHEM>)及相關文獻中(例如 Lenhard and Parker, 1987; Parker et al., 1987; Parker, 1989 等)，多建議在多相流系統中使用尺度化(*scaling*)技術修正的 Brooks and Corey(Corey, 1990)或 van Genuchten(1980)的模式，來估計包括 NAPL 在內的任意二相流或三相流 p - s - k 特徵曲線。然而，由於 Brooks and Corey 或 van Genuchten 等人參數化模式背後的平行管束理論並不能解釋磁滯現象(*hysteresis phenomena*)、無法估計 NAPL 的殘餘量，也不能正確表現殘留非濕潤相對於二相流體非飽和傳導係數的影響；而尺度化技術本身亦必須符合水—NAPL 或 NAPL—空氣接觸角等於水—空氣接觸角的假設，因此 Parker(1989)等人所提出的多相流特徵曲線模式其實是有許多物理上的限制。欲確估計有 NAPL 存在的多相流系統的水分壓力(p)—飽和度(s)和水力傳導係數(k)等特徵曲線參數，必須使用接近實際土壤的物理或數學模型。

近年來以「孔頸網絡模型」(*pore-throat network model*)來模擬特徵曲線參數的做法在國際間已受相當程度的重視，但是目前在國內則尚無任何相關的研究報告發表。因此，本研究的首要工作是引入「孔頸網絡模型」的觀念，並且深入的探討模式現有應用理論的完整性。而在研究目標方面，主要有二大研究目標，擬分為兩年完成：一為發展孔頸網絡模型之非實驗性建構技術：利用逆向問題(*inverse problem*)的研究方法，由擬靜態的排退與汲取的 p - s 特性曲線決定孔頸元

件的特性，包括決定孔和頸管的尺寸頻率分佈、孔-頸間的相關性、以及孔和頸管的空間分佈等參數；二為建制一套較完整的動態傳輸模擬程序：推導計算單一矩形頸管中二相流傳導度的正確公式並建立計算偶合壓力場的方法，然後仿效 Mogenson et al.(1998)以及 Hughes and Blunt(1999, 2001)的研究，建制一套較完整的動態傳輸模擬程序。

二、研究方法

本研究第一年的目標是「發展孔頸網絡模型之非實驗性建構技術」，其內容為利用逆向問題的研究方法，由擬靜態的排退與汲取的 p-s 特性曲線估計決定孔頸元件特性，包括決定孔和頸管的尺寸頻率分佈、孔-頸間的相關性等參數；然而在進行逆向問題研究之前，我們必須要先確立解決正向問題模擬方法的可行性以及正確性。因此本期中報告的重點主要是對正向模擬結果的剖析。

1. 孔頸網絡模型的建立

以「孔頸網絡模型」模擬二相流特徵曲線的原理簡單說明如下：孔隙介質中具有大大小小不等尺寸的孔隙，大的孔隙通常為鼓起的孔狀；而小的孔隙則多半為窄小的咽喉狀，因此「孔頸網絡模型」是利用具簡單幾何形狀、定型的元件 (elements) 來模擬這些孔隙，以「孔」(pore) 元件(例如球體、立方體或錐形體)來模擬大孔徑，以「頸管」(throat) 元件(例如圓柱形、矩形管、或三角型管)來模擬小孔隙，然後以簡單的排列方式的將這些元件連結在一起，例如採用格狀結構將「孔」元件排列在節點上，而孔與孔之間則以「頸管」元件相連接，如此建構一個數值孔隙網絡模型。利用孔-頸間的擴張和收縮效果，配合二相流體在各元件中的置換機制(displacement mechanisms)，可以應用電腦計算模擬得在二相流在此網絡模型中的特徵曲線。藉由調整孔頸元件的形狀以及元件間的連接性，可使得由網絡模型所模擬得的擬靜態「水-空氣」流體對的毛細壓力-飽和度特徵曲線，包括首次排退、汲取、二次排退以及其間的掃描迴圈等，和非濕潤相殘流量能與真實土壤實驗的結果接近，則該孔頸網絡模型可以視為該孔隙介質在保水行為上的等價模型。

具代表性的孔頸網絡模型必須是可以重現的，其中孔、頸元件尺寸分佈、孔頸徑相關性、以及元件連結的形式都必須要事先決定。在不同的文獻中可以看到各家所使用的孔頸元件形式各有不同，而不同形狀的元件亦各有其實用上的優缺點(例如，Jerauld and Salter, 1990；Ioannidis and Chatzis, 1993；Reeves, 1997；Mogenson and Stenby, 1998；Vidales et al., 1998；Kawanishi et al., 1998 以及 Hughes and Blunt, 2000 等)，由於濕潤相角隅流在解釋非濕潤相的入陷現象中扮演很重要的角色，所以非圓形斷面的元件會是較恰當的選擇。關於孔頸元件間的連接方式，在文獻中可見到使用格狀網絡模型(例如，Koplic, 1982)，另外也有使用隨機分佈者(例如，Lowry and Miller, 1995)。近年來許多相關研究均建議在三維問題中可使用正規立方網絡(例如 Jerauld and Salter, 1990；Reeves, 1997；Mogenson and Stenby, 1998；Hughes and Blunt, 2000)。Jerauld and Salter(1990)探討單孔所連接頸

管數量(簡稱配管數, coordination number)及其分佈對 $k-s$ 曲線影響, 指出由配管數應在 4 至 8 之間, 平均值接近 6, 與正規立方網絡者相同; 並且正規立方網絡和隨機 Voroni 網絡(random Voroni network)的所模擬得的結果大致相同。因此, 使用正規立方網絡已可滿足需求。由是, 本研究使用以「立方體孔」+「矩形斷面頸管」所組成的正規立方孔頸網絡(如圖一)。

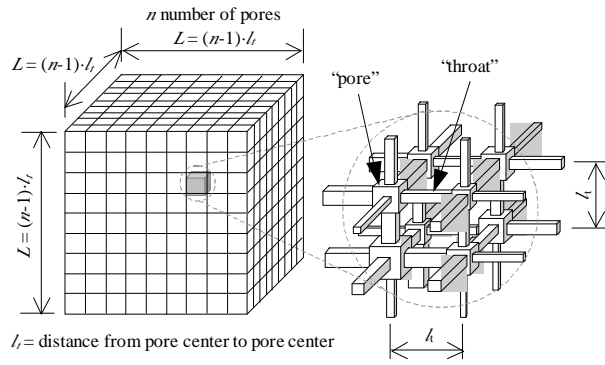
至於孔頸元件尺寸分佈的決定, 前人的研究中通常是將孔徑尺寸的分佈假設為符合某種形式的機率密度函數, 例如均勻分佈(例如, Wardlaw et al., 1987; 以及 Lenormand and Zarcone, 1988), 貝塔分佈(例如, Chatzis and Dullien, 1985; Jerauld and Salter, 1990; Reeves, 1997; 以及 Held and Celia, 2001), 或是截尾韋伯(truncated Weibull)分佈(例如, Dias et al., 1987; Ioannidis and Chatzis, 1993; Mani and Mohanty, 1997; 以及 Mogensen et al., 1999)。隨機分佈不同尺寸的孔是在正規立方網絡的節點上的, 以模擬均質性孔隙介質中孔隙的隨機性。至於頸管尺寸的分佈, 則是要視孔頸徑間的相關性而定。Jerauld and Salter(1990)指出壓密土壤應歸類為具相關性介質, 相關性介質的大孔旁是連接大的頸管, 小孔旁則是連接小的頸管; 而非壓密性則歸類於非具相關性者。具相關性與非具相關性的介質間會表現出不同的磁滯行為(Wardlaw and Li, 1988; Jerauld and Salter, 1990)。若孔隙介質為具相關性者, 必須要對孔頸的相對配置有特殊的安排, 以使網絡能反映出此特性(參考, Li and Wardlaw, 1986; Jerauld and Salter, 1990; Mogensen et al., 1999; 以及 Hughes and Blunt, 2001 等)。在正向問題的研究中, 本研究假設一組孔頸分布資料以供測試用。孔徑分布密度函數是使用和 Jerauld and Salter(1990)相同的貝塔分佈。

$$f(r_p) = \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)(r_{p,\max} - r_{p,\min})} [\xi]^{\alpha-1} [1-\xi]^{\beta-1} \quad (1)$$

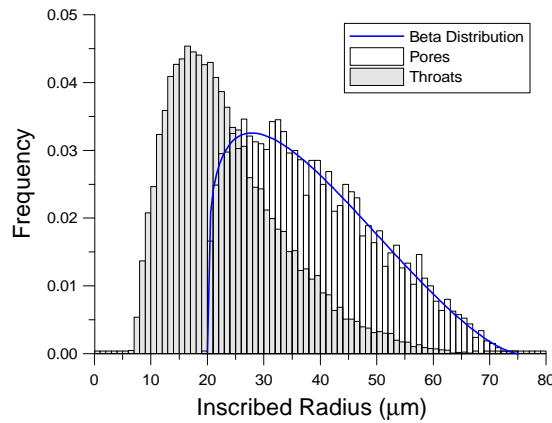
其中, $\xi = (r_p - r_{p,\min}) / (r_{p,\max} - r_{p,\min})$, r_p 為孔的內切球半徑; 參數 $\alpha = 1.25$; $\beta = 2.5$; $r_{p,\max} = 75\mu\text{m}$; 且 $r_{p,\min} = 20\mu\text{m}$ 。將具不同尺寸的孔隨機分布在網絡的節點上之後, 由以下類似於 Wardlaw and Li(1986)所提出的孔頸相關性公式決定頸管的管徑:

$$r_{i,j} = \min \left\{ \frac{C \cdot (r_{p,i} \cdot r_{p,j})}{r_{p,\max}}, r_{p,i}, r_{p,j} \right\} \quad (2)$$

其中, $r_{i,j}$ 表示連接孔 i 以及孔 j 的頸管的管徑(內切圓半徑); 參數 C 取為 1.2。圖 2 所示為由前述步驟所得到的孔頸分布柱狀圖, 頸管的管徑在 6 到 $70\mu\text{m}$ 之間。頸管的長度是由孔隙率決定, 假設土壤的孔隙率約為 0.4, 並且假設殘餘飽和度為 0.2, 殘餘飽和度是存在於土壤的隙縫及凹陷中, 不計入孔頸網絡的孔隙中。因此網絡所佔據的實際孔隙率為 0.2。由此, 計算得孔-孔中心的距離(圖一所標示的 l)約為 $190\mu\text{m}$ 。



圖一 正規立方孔頸網絡模型透視圖



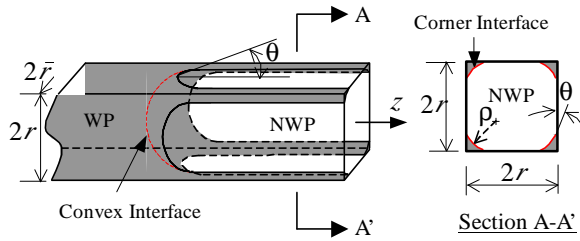
圖二 測試用孔頸徑分布柱狀圖

2. 置換機制

流體在孔頸間的置換原則為主要是由所設計的「置換機制」來控制。根據包括 Wardlaw (1982)、Lenormand et al. (1983)、Lenormand and Zarccone (1984)、Li and Wardlaw (1986)、Wardlaw and Li (1988)、Ioannidis et al. (1991)等人的研究，在排退的過程中，二相流界面在孔或頸管中均是以「活塞型運動」(piston-type motion)的機制進行置換；而在汲取的過程中，二相流界面可以三種不同的機制進行置換：「活塞型運動」、「攔斷」(snap-off)、以及「 I_n 型汲取」(I_n imbibition)，其中前二者是發生在頸管中，而後者是發生在孔中。另外，根據本研究發現，在立方體孔中，尚應考慮第四種界面置換機制，我們稱之為「脫離」現象。此四種介面置換之機制分述如下。

活塞型運動

活塞型運動是指在置換鋒面的凸透鏡型界面(convex interface，簡稱凸界面)的移動方式(見圖三)。凸界面在定型元件中的移動是可逆的，並且是類似於活塞型的，因此稱此置換機制為活塞型運動(Lenormand, 1983)。在排退的過程中，當毛細壓力到達一原先充滿濕潤相之元件的毛細壓力門檻值時，非濕潤相可入侵置換元件中的濕潤相。若元件為具矩形斷面，則其中心的濕潤相會完全被置換，但是角隅部分仍有部分濕潤相存在，如圖三之 A-A'斷面圖中所示者。假設元件中角隅濕潤相的厚度對長度的比夠小，則角隅界面大致上會平行於元件的軸向。於是活塞型運動的毛細壓力門檻值可由對凸界面取力平衡而求得。

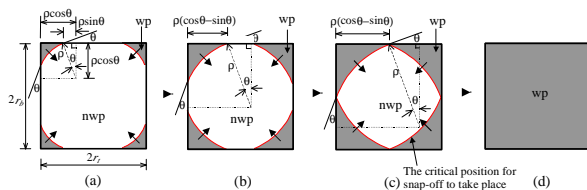


圖三 凸界面在矩形斷面毛細管中的活塞型運動(重繪自 Lenormand, 1983, fig.2)。圖中左側為透視圖，右側為 A-A'剖面圖。深色者為濕潤相。

攔斷

在汲取的過程中，濕潤相可經由兩種路徑進入網絡中，一是隨著鋒面入侵；另一是經由角隅流。考慮一矩形斷面頸管，其中心部分是被非濕潤相佔據，而角隅部分有濕潤相角隅流(為方便說明起見，以下將此類型的頸管/孔稱之為非濕潤相頸管/孔)。角隅濕潤相的厚度會隨著毛細壓力的降低而增加(圖四 a-c)，當界面到達圖四 c 所示之臨界位置時，四個角隅的界面會相接觸，其後若再降低毛細壓力，界面已無法再藉由調整曲率而承受壓力的變化，因此界面會在瞬間發生不穩定破壞，而濕潤相則隨之入侵充滿整個頸管中，原先在頸管中的非濕潤相會被排出頸管而進入兩端的孔中，此類的置換機制稱之攔斷(Lenormand, 1983)。攔斷發生的臨界條件可由幾何關係導出。

當頸管中有攔斷現象發生時，會阻斷網絡中非濕潤相的連續性，當一個孔四周的頸管均被濕潤相所佔據時，孔中的非濕潤相將無法被排出，稱為「入陷」。網絡中非濕潤相的入陷不一定是由於攔斷現象所造成，但是攔斷是造成非濕潤相入陷的條件之一。



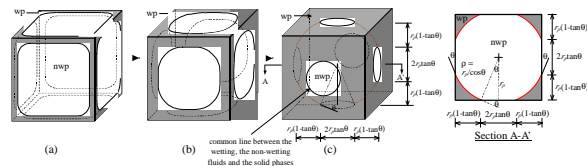
圖四 攔斷置換發生時非濕潤相頸管內之角隅濕潤相的成長過程(剖面圖)。(a)初始狀態；(b)中間狀態；(c)攔斷將發生時的臨界狀態；(d)攔斷發生後的最終狀態。圖中深色者為濕潤相。

脫離

「脫離」是一種類似於「攔斷」的置換機制，但是它是發生在立方體孔中的。首先假想有近乎一封閉的立方體孔(亦即，假設頸管是不存在的)，允許濕潤相由角隅中滲入，並且角隅濕潤相厚度可隨著毛細壓力的降低而增加(圖五 a-c)。當毛細壓力降低到一個臨界值時，封閉孔中的二相流界面會聚合成球形，如圖五 c 所示，界面與固體孔壁的共線(common line)將接近於一半徑為 $r_p \tan \theta$ 的圓，其中 r_p 為孔的內切球的半徑，下標“p”代表孔(pore)。在此臨界狀態下，界面已達到最小曲率，其後若繼續降低毛細壓力，因為系統無法再藉由調整界面曲率以及共線

圓的大小來承擔增加的濕潤相飽和度，因此界面必須脫離孔壁，而濕潤相將迅速入侵佔據整個孔體。在此，我們將此現象稱之為「脫離」(breakaway)置換。脫離置換發生的臨界壓力可由對 A-A' 剖面取力平衡可導得。

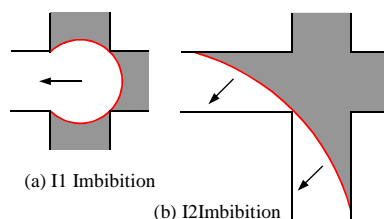
其次考慮有頸管存在的狀況。共線圓必須大於頸管的內切圓，否則脫離現象不可能發生，因此在孔頸網絡中脫離現象成立的條件是必須滿足 $r_{z,max} < r_p \tan \theta$ ，其中， $r_{z,max}$ 為連接到孔的非濕潤相頸管中最大頸管的管徑。由上述條件可知，當接觸角 θ 為 0° 時，孔中的脫離置換不可能發生。



圖五 脫離置換發生時非濕潤相孔內之角隅濕潤相的成長過程(透視圖)。(a)初始狀態；(b)中間狀態；(c)脫離將發生時的臨界狀態。圖中深色者為濕潤相。

I_n 型汲取

在置換鋒面處，二相流凸界面是以活塞型運動的方式在頸管中非濕潤相移動，但是當凸界面欲通過非濕潤相孔時，其移動的方式會受到該孔所連接的非濕潤相頸管的數目所影響(Lenormand et al., 1983；Lenormand and Zacone, 1984；Wardlaw et al., 1987；以及 Ioannidis et al., 1991 等)。Lenormand et al.(1983)將凸界面在孔中的置換機制稱之為 *I_n* 型汲取，其中，*n* 為非濕潤相頸管的數目。非濕潤相頸管數愈多(即 *n* 值愈大)，則汲取所需的毛細壓力門檻值愈低，這是因為發生不穩定的臨界面會有較小曲率的緣故。Lenormand 等人以矩形斷面毛細管所組成的二維網絡模型為例，說明 *I₁* 及 *I₂* 型汲取臨界面的位置，分別如圖六(a)及(b)所示，並推導汲取發生門檻壓力值。在孔頸網絡模型中，由於各孔中 *I_n* 型汲取的臨界面的位置會隨著孔頸的幾何絕對與相對的變化關係而有所不同，很難逐一的推導得到正確的 *I_n* 型汲取門檻壓力，因此多數文獻是將 Lenormand 等人的推導公式直接延伸套用孔頸網絡模型中。根據本研究的理論推導認為，*I₃* 型以上的汲取是不可能發生的。

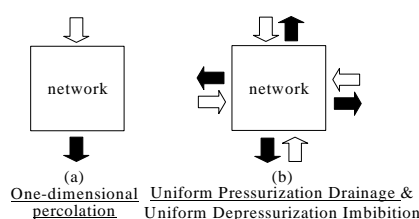


圖六 Lenormand 等的二維毛細管模型之(a) *I₁* 型汲取；與(b) *I₂* 型汲取界面移動程序示意圖。圖中深色者濕潤相(改繪自 Lenormand and Zacone, 1984, fig.6)

3. 模擬二相流步驟

前人模擬毛細壓力-飽和度的做法是使用「單向滲透法」(one-dimensional

percolation)，令網絡的一面連接到置換流體源(source)，置換流體只能由該面入侵網絡中，而被置換流體則是只能由越過網絡的另一面排出(見圖七 a 之示意圖)，網絡的另外四面則是給予週期性邊界條件(periodic boundary condition)。然而，此種模擬的做法會有尺度效應(size effect)的問題，網絡的厚度愈大，突破壓力(breakthrough pressure，定義為由網絡的一面到跨越網絡的另一面恰有非濕潤相連通路徑形成時的壓力)會愈大；同時汲取結束後非濕潤相殘餘量也會愈高。尺度效應問題是無法克服的，這是由於網絡模型本身的限制。減少尺度效應的做法，可以改採「均勻加壓排退」(uniform pressurization drainage)以及「均勻減壓汲取」(uniform depressurization imbibition)的模擬方式(圖七 b)，模型四周給予自由的(free)邊界條件，非濕潤相與濕潤相均可由各邊界進出網絡。此種做法會使尺度效應較不明顯。



圖七 (a)「單向滲透法」與(b)「均勻加壓排退」和「均勻減壓汲取」比較。圖中白色箭頭表示置換流體進入網絡的路徑；黑色箭頭表示被置換流體離開網絡的路徑。

模擬毛細壓力-飽和度曲線

以「孔頸網絡模型」模擬擬靜態系統毛細壓力-飽和度的做法，首先假設系統中的壓力以及流體分佈狀態為已知(例如進行排退時是假設系統的壓力為零並且孔隙中完全充滿濕潤相流體)，然後以逐漸加圍壓的方式進行排退；以逐漸減圍壓的方式進行汲取。排退時，非濕潤相是分鋒面置換的方式由網絡的四周入侵網絡，而濕潤相則經由角隅流離開網絡路徑。汲取時，濕潤相的入侵方式可以同時為鋒面置換或是角隅流增厚，非濕潤相則要有連通到邊界的路徑才能被排出，否則就會留在網絡中成為殘留量。在每一個置換步驟中，給予網絡一個特定的毛細壓力，然再根據二相流在定型元件中的置換原則，分析二相流界面在系統中新的平衡位置以及二相流在各元件中重新配置的情形，待所有的條件都確定後，求得整個網絡的平均飽和度，然後得到毛細壓力-飽和度的關係。

模擬滲透率-飽和度曲線

當二相流在各元件中的位置均已決定後，在網絡的上下兩端給予微小的壓力梯度，此壓力必須夠小而不至於使界面移動，流體不會重新分配。然後分別計算整個網絡的非濕潤相以及濕潤相的流量，再將計算得的流量與在相同梯度下單相流的流量比較，得到相對滲透率值。單一非濕潤相孔/頸管中的非濕潤相傳導度式採用 Bryant and Blunt(1991)所建議的公式計算，其角隅流的傳導度則是根據 Zhou et al.(1996)所推導得的公式計算。計算整體網絡流量的方法則是假設孔中的壓力坡降夠小而可以忽略，亦即，孔中的壓力為定值，則根據質量守衡定律，各

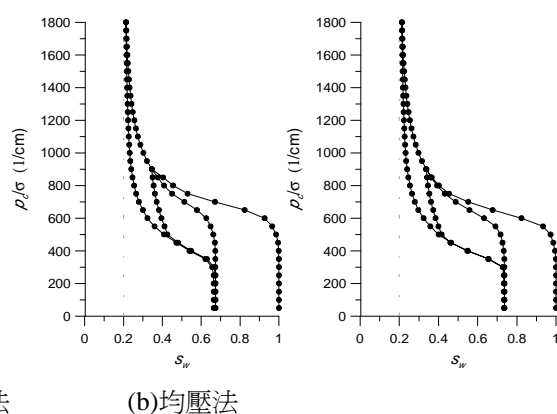
孔中的淨流通量應為零。因此各孔中的壓力可以由解質量守衡聯立方程式而求得。由得各孔的壓力後，再將壓力代回傳導度公式中求得各層中(即上下兩層孔間)的總流量，再將所有層的總流量平均後(理論上，根據流量守衡定律各層的總傳導度應該是相同的)，即可得到網絡的流量。

三、結果與討論

本研究將結果分為三部分來討論，一是討論「均勻加壓排退」與「均勻減壓汲取」的操作過程(為方便說明起見，以下將「均勻加壓排退」+「均勻減壓汲取」的模擬法稱之為「均壓法」)在減小尺度效應的影響上是否優於「單向滲透法」；二是比較不同接觸角二相流體在相同的孔頸網絡中所模擬得的 p_c-s 與 $k-s$ 曲線的模擬結果，並探導其合理性；三是逆向問題研究所遇到的問題。

1. 「均壓法」與「單向滲透法」模擬較果比較

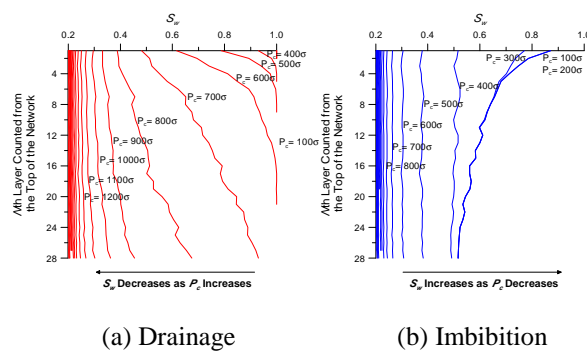
以接觸角為 0° 的流體對以及具 $30 \times 30 \times 30$ 個孔的網絡架構中進行測試。測試的方法是令網絡中先充滿濕潤相流體，然後由零毛細壓力開始增加毛細壓力進行排退，當壓力增加到 900σ 後，再開始減壓的汲取過程；減壓回復至 0 壓力後，再加壓至 1800σ ，最後再將壓力回復至 0 。因此整個壓力變化的過程為 $0 \rightarrow 900\sigma \rightarrow 0 \rightarrow 1800\sigma \rightarrow 0$ 。模擬結果如圖八所示，其中(a)為以「單向滲透法」操作所得到的毛細壓力-飽和度(此處及以下所稱飽和度若無特別說明者即是指濕潤相流體的飽和度)曲線；(b)為以「均壓法」所得到的結果，除了前者有較大的非濕潤相殘餘量外，兩者似無太大的差異。然而，若將網絡切成數層，逐層分析層與層間濕潤相飽和度的變化時，會發現各層的流體飽和度分布狀況差異其實很大。



圖八 接觸角為 0° 之流體對在具 $30 \times 30 \times 30$ 個孔的網絡架構中以，(a) 「單向滲透法」以及(b) 「均壓法」所模擬得的毛細壓力-飽和度曲線。

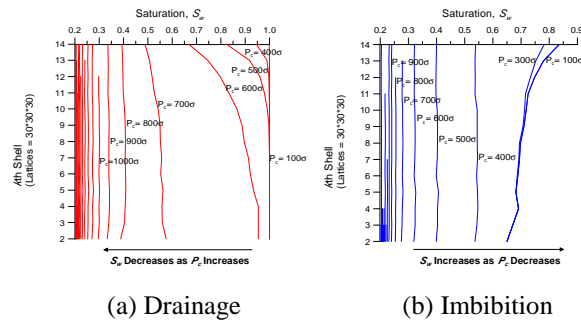
在「單向滲透法」模型中，將網絡由上至下，自兩層的孔中心到孔中心距離的中點切開，不考慮最上一層與最下一層的孔，共將網絡切成 28 層(layers)，每一層的厚度均為 $190\mu\text{m}$ ，所包含的孔隙體積包括該層中所有的孔和水平連接的頸管，以及孔上下頸管體積之半的貢獻。圖九(a)和(b)分別為由十組重複的模擬結果取平均所得到的主排退(直接對被濕潤相飽和的網絡加壓至 1800σ)以及主汲取

過程中，各層飽和度變化的關係。圖中顯示，除非在很高的毛細壓力下，在排退的過程中，各層飽和度會隨著深度的增加而遞減，表示在網絡的上方有較多的非濕潤相流體，而網絡的下方有較多的濕潤相流體。即使壓力增至 900σ ，網絡的平均飽和度已降至 45% 左右，網絡頂底的層飽和度仍將近有 12% 的差異，因此在排退過程中，流體在網絡中不是均勻分布的。而汲取的過程中，假設濕潤相可以透過角隅流自由到達網絡中任何元件中，由局部的置換機制條件決定一元件中是否發生汲取。根據這樣的原理，配合「單向滲透法」計算，在汲取初期，流體的分布大致上為均勻分布。但當壓力降至 300σ 之後，流體不均勻分布的現象就變得很明顯，網絡頂層和底層的飽和度的差異可高達 25%。因此「單向滲透法」中會有嚴重的尺度效應問題。



圖九 接觸角為 0° 之相流體對在 $30 \times 30 \times 30$ 個孔的網絡架構中以「單向滲透法」所模擬得之，
(a)主排退以及(b)主汲取的層飽和度(layer- saturation)變化曲線。

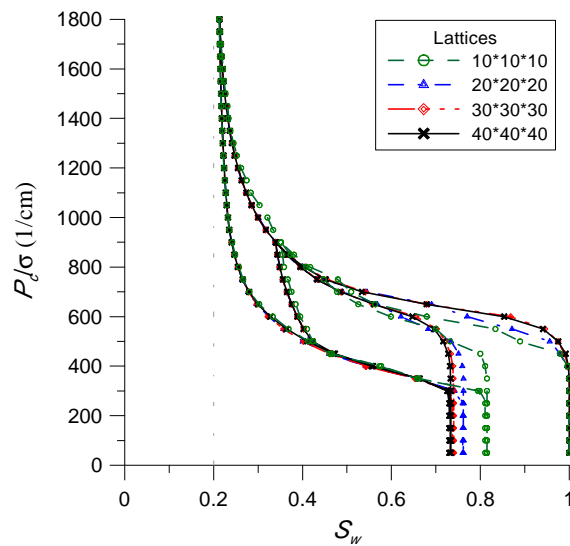
在「均壓法」模型中，不以由上向下切層(layer by layer)的方式分析網絡中的流體分布變化，而是以由外向內剝層(shell by shell)方式分析之。不考慮最外層與最內層的孔，可將網絡剝為 14 層，每層中包含 $(k+2)^3 - k^3$ 個孔，其中 k 為自網絡中心算起向外的層數。主排退以及主汲取層飽和度變化曲線分別如圖十(c)和(d)所示，圖中顯示雖然在排退初期，當毛細壓力較低時，網絡中仍然有流體分布不均勻的現象(本研究發現這部分是無法避免的，即使在真實土壤退水實驗中的排退初期、毛細壓力較低時，也會有流體分布不均勻的現象)，但是當壓力增至 700σ 以後，不均勻的現象就變得不明顯。所以，和「單向滲透法」比較，「均壓法」的排退不均勻問題程度較不嚴重。在汲取的後期，當壓力降至 300σ 以後，網絡模型中也同樣出現層飽和度隨著與網絡中心距離增加而逐漸增大現象，但是網絡內外飽和度的差值卻小很多。綜觀以上的結果，和「單向滲透法」比較，「均壓法」是一個相對較好的操作方式。所以後續所有的分析均使用「均壓法」獲得特徵曲線的關係。



圖十 接觸角為 0° 之流體對在 $30*30*30$ 個孔的網絡架構中，以「均壓法」所模擬得之，
(a)主排退以及(b)主汲取的層飽和度(shell-saturation)變化曲線。

關於孔頸網絡模型的尺寸到底應取為多大才能避免尺寸效應，達到穩定的模擬效果，各家研究結果各有不同。Diaz et al.(1987)以及 Li et al.(1986)已討論過網絡尺寸的影響。他們分別指出當孔數為 $15*15*15$ 和 $20*20*20$ 時可以得到滿意的模擬結果。Reeves(1997)則是認為要使用 $27*27*65$ 孔的網絡，以上研究的網絡模型是建構在各不同形狀的孔頸元件上，但同樣的都是以「單向滲透法」的操作模式來進行 p_c-s 曲線的模擬。

本研究測試接觸角為 0° 的流體對在孔數分別為 $10*10*10$ 、 $20*20*20$ 、 $30*30*30$ 、以及 $40*40*40$ 的網絡架構中的表現，結果如圖十一所示，網絡中的孔數愈多，突破壓力會愈大；同時非濕潤相殘餘量也會愈高。但是突破壓力以及非濕潤相殘留量的增加速度會隨著孔數的增加而趨緩，在 $30*30*30$ 個孔以及 $40*40*40$ 個孔的網絡中所模擬得的毛細壓力-飽和度曲線已相當的接近。所以大致上來說， $30*30*30$ 的網絡已可滿足模擬上的需求，但這仍需更多的模擬資料來證實。

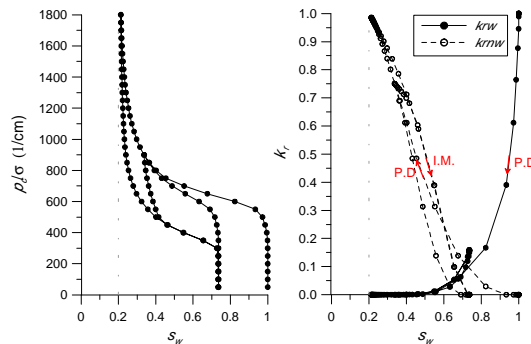


圖十一 接觸角為 0° 的流體對在 $10*10*10$ 、 $20*20*20$ 、 $30*30*30$ 、以及 $40*40*40$ 個孔的網絡架構中所模擬得的毛細壓力-飽和度曲線。

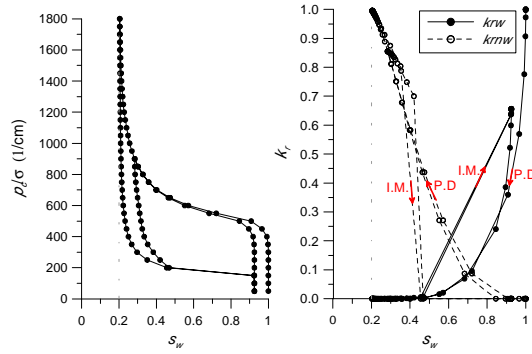
2. 相對滲透率-飽和度曲線的模擬

模擬相對滲透率-飽和度曲線的工作是在 $24*24*24(=13824)$ 個孔的網絡架構中完成，之所以捨棄 $30*30*30(=27000)$ 孔不用而改用 $24*24*24$ 孔，是受限於個人電腦記憶體的限制的不得已做法。在求相對滲透率的過程中，必須解聯立方程式以求得各孔中的壓力分布。若網絡的孔數為 $30*30*30$ ，則須要建立 $27000*27000(=7.29*10^8)$ 大小的矩陣，若變數為實數(2bytes)，共需要 1.424GB 以上的記憶體(RAM)才能暫存此矩陣。而 $13824*13824$ 個孔的網絡矩陣僅需 373MB 記憶體。後者在 P4 處理器中，模擬一組包括主排退、主汲取、以及一次掃描迴圈在內的完整 p_c-s-k 曲線資料，需要 6 小時以上的演算時間。若只模擬一組包括主排退、主汲取、以及一次掃描迴圈在內的 p_c-s 曲線，需要 1 小時以上的計算時間，其中大部分是在汲取上。上述計算時間主要是消耗在反矩陣的演算上。因為汲取的置換機制較複雜，所以在汲取的過程中必須將壓力遞減的間距取得非常的小，才能得到穩定且可重現(reproducible)的結果。

實驗室中在量測退水的毛細壓力-水分-傳導特徵曲線時，必須給予土樣一個很小壓力梯度，避免土樣中流體飽和度差異太大的非均質。使用數值模式模擬時，可以固定二相流界面在網絡中的位置，所以可以採用一個較大的壓力梯度；若給予的壓力梯度太小，反而可能因為計算精度的問題造成計算上較大的相對誤差。在本數值試驗過程中，採用之壓力梯度取為 100σ 。圖十二與圖十三為接觸角為 0° 的流體對以及接觸角為 30° 者，由網絡模型中所模擬得的特徵曲線。模擬的初始條件為網絡中充滿濕潤相，毛細壓力變化的過程為 $0 \rightarrow 900\sigma \rightarrow 0 \rightarrow 1800\sigma \rightarrow 0$ 。



圖十二 接觸角為 0° 的流體對在 $24*24*24$ 個孔的網絡架構中所模擬得的毛細壓力-飽和度與相對滲透率-飽和度曲線。



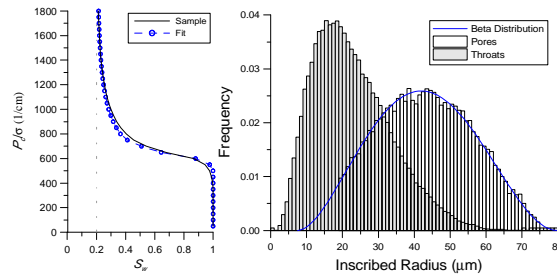
圖十三 接觸角為 30° 的流體對在 $24 \times 24 \times 24$ 個孔的網絡架構中所模擬得的毛細壓力-飽和度與相對滲透率-飽和度曲線。

比較圖十二與圖十三中，兩者的非濕潤相殘餘飽和度相，發現當接觸角為 0° 時，非濕潤相會有 28% 殘餘在網絡中；接觸角為 30° 時，非濕潤相的殘餘飽和度降至約 5%，兩者有很明顯的差異。這顯示出兩個事實：一、接觸角是影響非濕潤相殘留的重要因素之一；接觸角愈小，非濕潤相的殘留量愈大。這樣的結果是與 Wardlaw (1982) 由實驗所觀察到的現象是吻合的。

由相對滲透率-飽和度曲線可觀察到濕潤相流體在排退和汲取之間沒有很明顯的磁滯效應；而非濕潤相流體的曲線則有明顯的磁滯效應，這樣的結果符合 Jerauld 和 Salter (1990) 的實驗觀察。接觸角為 0° 在汲取結束後滲透率沒有辦法回復到排退前的飽和滲透率，傳導係數僅剩下 20%，這是因為入陷的非濕潤相阻礙了濕潤相的通路的緣故。當非濕潤相的入陷量愈多，相對滲透率的縮減比例愈大。相對而言，接觸角為 30° 的流體對中，濕潤相流體在汲取結束後仍有 65% 左右的相對滲透率。

3. 逆向問題研究所遭遇的問題

在逆向問題的研究上，所遇到的最大的困難是運算時間。因為了解運算時所耗費的時間主要是在汲取的模擬上，所以本研究曾嘗試以「模擬退火法」(simulated annealing algorithms) 只模擬排退的 p_c - s 曲線來反演孔頸徑分佈的參數。假設圖十四(b)的孔頸分佈曲線為反演的目標，但是擬合的結果顯示，許多不同組合的孔頸分佈函數都能展現出近似的排退 p_c - s 曲線。例如圖十四(a)所示者即為其中一例，而其孔頸分佈形式[圖十四(b)]卻與目標組者(圖二)相去甚遠，兩組分佈除排退的 p_c - s 曲線外，所表現出的其他曲線如汲取以及中間掃描者迴路者皆不相同。因此可知只使用排退 p_c - s 曲線反演參數是不夠的，必須還要有其他曲線的配合。



(a)pc-s 曲線 (b)孔頸徑分佈柱狀圖

圖十四 以退火法模擬排退毛細壓力-飽和度曲線反演孔頸網絡模型模擬參數。(a)擬合所得之毛細壓力-飽和度曲線；(b)擬合所得之孔頸徑分佈柱狀圖。

圖十四所得到的結果共花費約 19 小時的運算時間，若是要加上汲取的模擬，則估計要花上數月的時間才能完成一組逆向問題的測試，並且尚不能保證測試結果是可以接受的。運算時間的問題若無法克服，則本研究計劃反演孔頸網絡模型參數的目標將難以達成。

四、結論與建議

本研究在使用「孔頸網絡模型」模擬二相流體的 p_c-s-k 曲線，在正向模擬孔隙介質的特徵曲線上，可以得到合理的模擬結果，但是其中仍有一些不盡理想之處。第一，尺度效應的問題是必然存在的，應用「均壓法」雖然可減小尺度效應的影響，但是無法完全消弭網絡中流體分佈不均勻的現象。第二，研究過程中發現，以前述目前的「孔頸網絡模型」建立程序所建立的網絡架構僅適用於模擬砂質土壤的 p_c-s 曲線，其中排退時的濕潤相飽和度可能會在很小的毛細壓力變化範圍內，由完全飽和排退到一個很小的量。這是因為在網絡中，孔佔據大部分的孔隙體積，但是非濕潤相連通路徑成卻是受到頸管大小主控，頸管一但發生排退，所連接的孔中的濕潤相也會隨之排出，造成飽和度的快速下降。第三，目前所使用的網絡架構不適用於模擬黏土的 p_c-s 曲線。欲修正模型的適用條件，必須必須鬆綁網絡的孔隙率等於土壤的孔隙率的限制條件，使得頸管可以有較大的分佈範圍，才能適用於模擬黏土的 p_c-s 曲線。但其可行性尚必須要更進一步的研究。

在逆向問題的研究上，目前遇到的最大困難是運算時間的需求。由於這是技術上無法克服的，因此，必須由改進孔頸模型結構型態上著手，方能解決運算時間的問題。在此方面本研究已經得到初步的研究成果，修正後的孔頸架構稱之為「單元孔頸系集模型」(Unit-pore-throat Ensemble Model)，模型中孔頸單元以「系集」的方式組合，取代「網絡」的架構。初步研究成果證實，系集模型不僅可以大幅縮短反演孔頸徑分布函數參數所需的時間，並且可以避免「尺度效應」的問題。由於研究尚在進行中，完整成果將於期末報告提出。

五、參考資料

1. Bryant, S. and M. J. Blunt, "Prediction of Relative Permeability in Simple Porous Media", *Physical Review A*, vol. 46, no. 4, pp.2004-2011, 1992.

2. Corey, A. T., *Mechanics of Immiscible Fluids in Porous Media*, Water Resources Publications, 2nd print, Littleton, Colorado, 1990.
3. Chastzis, I. and F.A.L. Dullien, "The Modelling of Mercury Porosimetry and the Relative Permeability of Mercury in Sandstones using Percolation Theory", *International Chemical Engineering*, vol. 25, no. 1, pp.47-66, 1985
4. Dias, C.E., I. Chastzis and F.A.L. Dullien, "Simulation of Capillary Pressure Curve Using Bond Correlated Site Percolation on a Simple Cubic Net work", *Transport in Porous Media*, vol. 2, pp.215-240, 1987.
5. Hughes, R. G. and M. J. Blunt, "Pore Scale Modeling of Rate Effects in Imbibition", *Transport in Porous Media*, vol. 40, pp.295-322, 2000.
6. Hughes, R. G. and M. J. Blunt, "Network Modeling of Multiphase Flow in Fractures", *Advances in Water Resources*, vol. 24, pp.409-421, 2001.
7. Held, R.J. and M.A. Celia, "Modeling Support of Functional Relationships between Capillary Pressure, Saturation, Interfacial Area and Common Lines", *Advances in Water Resource*, 24, pp325-343, 2001.
8. Ioannidis, M. A., I. Chatzis, and A.C. Payatakes, "A Mercury Porosimeter for Investigating Capillary Phenomena and Microdisplacement Mechanisms in Capillary Networks", *Journal of Colloid and Interface Science*, vol.143, no.1, (1991).
9. Ioannidis, M. A. and I. Chatzis, "Network Modelling of Pore Structure and Transport Properties of Porous Media", *Chemical Engineering Science*, vol. 48, no. 5, pp. 951-972, 1993.
10. Jerauld, G.R. and S.J. Salter, "The Effect of Pore-Structure on Hysteresis in Relative Permeability and Capillary Pressure: Pore-Level Modeling", *Transport in Porous Media*, vol. 5, pp.103-151, 1990.
11. Koplik, J, "Creeping Flow in Two-Dimensional Networks", *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 119, pp.210-247, 1982.
12. Kawanishi, T., Y. Hayashi, Yoshishige, p. v. Roberts, and M. J. Blunt, "Fluid-Fluid Interfacial Area during Two and Three Phase Fluid Displacement in Porous Media: A Network Model Study", *International Association of Hydrological Sciences*, n 250, pp.89-95, 1998.
13. Lowry, M.I. and C.T. Millern "Pore-Scale Modeling of Nonwetting-Phase Residual in Porous Media", *Water Resources Research*, vol. 31, no.3, pp455-473, 1995.
14. Lenhard, R. J. and J. C. Parker, "Measurement and Prediction of Saturation-Pressure Relationships in Three-Phase Porous Media Systems", *Journal of Contaminant Hydrology*, vol. 1,pp. 407-424, 1987.
15. Lenormand, R., C. Zarcone and A. Sarr, "Mechanism of the Displacement of One

- Fluid by Another in A Network of Capillary Ducts”, *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 135, pp.337-353, 1983.
16. Lenormand, R. and C. Zarcone, “Role of Roughness and Edges during Imbibition in Square Capillaries”, *SPE of AIME*, Annual Meeting, Houston, Texas, pp.1-17, 1984.
 17. Lenormand, R., E. Touboul and C. Zarcone, “Numerical Models and Experiments on Immiscible Displacements in Porous Media”, *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 189, pp.165-187, 1988.
 18. Li, Y. and N. C. Wardlaw, “The Influence of Wettability and Critical Pore-Throat Size Ratio on Snap-Off”, *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 109, no. 2, pp.461-472, 1986.
 19. Mogenson, K. and E.H. Stenby, “A Dynamic Two-Phase Pore-Scale Model of Imbibition”, *Transport in Porous Media*, vol. 32, pp.299-327, 1998.
 20. Parker, J. C., R. J. Lenhard and T. Kuppasamy, “A Parametric Model for Constitutive Properties Governing Multiphase Flow in Porous Media”, *Water Resources Research*, vol. 23, no. 4, pp. 618-624, 1987.
 21. Parker, J. C., “Multiphase Flow and Transport in Porous Media”, *Reviews of Geophysics*, vol. 27, no. 3, pp. 311-328, 1989.
 22. Reeves, P. C., *The Development of Pore-Scale Network Models for The Simulation of Capillary Pressure-Saturation-Interfacial Area-Relative Permeability Relationships in Multi-Fluid Porous Media*, Ph.D. Thesis, Princeton Univ., N.J., 1997.
 23. van Penuche, M. Th. “A Closed form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils”, *Soil Science Society of America Journal*, vol. 44, pp.892-898, 1980.
 24. Wardlaw, N. C., “The effects of geometry, wettability, viscosity and interfacial tension on trapping in single pore-throat pairs”, *Journal of Canadian Petroleum Technology*, pp.21-27, 1982.
 25. Wardlaw, N. C., “Pore-Throat Size Correlation from Capillary Pressure Curve”, *Transport in Porous Media*, vol. 2, pp.597-614, 1987.
 26. Wardlaw, N. C. and Y. Li, “Fluid Topology, Pore Size and Aspect Ratio during Imbibition”, *Transport in Porous Media*, vol. 3, pp.17-34, 1988.