

DOI: 10.11779/CJGE202005019

孔隙尺度下三维多孔介质扩散迂曲度的 SPH 计算

饶登宇, 白冰*

(北京交通大学土木建筑工程学院, 北京 100044)

摘要: 多孔介质的扩散迂曲度是污染物在多孔介质中扩散速率的重要量度, 研究扩散迂曲度对于研究污染物在多孔介质中的运移规律具有重要意义。迂曲度作为反映孔隙结构的复杂程度的量化指标, 其值的大小与孔隙结构关系密切; 而在常规宏观试验中难以实现对孔隙结构和试验条件的精准控制, 因此有必要发展数值仿真试验技术对扩散迂曲度与孔隙结构的关系进行机理性研究。基于光滑粒子流体动力学 (SPH) 方法对重构三维土柱进行仿真试验, 再采用曲线拟合可获取介质的扩散迂曲度值并确定有效扩散系数。分别采用颗粒流法 (PFC) 和蒙特卡洛方法随机生成三维球型颗粒堆积土柱和不同倾角的三维片状型颗粒重构土柱用于仿真试验, 并根据计算结果探讨了颗粒类型和片状颗粒片层倾角对多孔介质扩散迂曲度的影响。计算结果表明: 对片层状多孔介质, 片层与浓度梯度方向的夹角对介质的扩散迂曲度影响明显; 扩散迂曲度随着片层偏角的增大而增大; 当片层走向与浓度梯度方向一致时迂曲度甚至可能小于同孔隙率的球状颗粒堆积体的迂曲度值。

关键词: 多孔介质; 孔隙尺度; 扩散迂曲度; 光滑粒子法; 有效扩散系数

中图分类号: TU43 文献标识码: A 文章编号: 1000-4548(2020)05-0961-07

作者简介: 饶登宇(1995—), 男, 博士研究生, 主要从事环境岩土工程等方面的研究工作。E-mail: raodengyu@sina.com。

Pore-scale SPH simulations of diffusive tortuosity in 3-D porous media

RAO Deng-yu, BAI Bing

(School of Civil Engineering, Beijing Jiaotong University, Beijing 100044, China)

Abstract: The diffusive tortuosity is an important measurement of the diffusion rate of pollutants in porous media. Determining the diffusive tortuosity of porous media is of great significance for studying the migration of pollutants. Based on the Smooth particle hydrodynamics (SPH) method, the effective diffusion coefficient and the values of diffusive tortuosity can be obtained conveniently and accurately by simulating the diffusive experiment on 3-D reconstructed soil columns. The particle fluid code (PFC) and the Monte Carlo method are used to generate 3-D soil columns by stacking spherical particles and by filling random layered elements, respectively. The calculated results show that for the layered porous media, the angle between the layer and the concentration gradient direction has a significant influence on the diffusive tortuosity. The values of diffusive tortuosity generally grow with the increasing included angle. When the orientation of layers consists with the concentration gradient direction, the diffusive tortuosity is minimized and may even be less than the tortuosity value of the spherical particle packing media with the same porosity.

Key words: porous medium; pore scale; diffusive tortuosity; smoothed particle hydrodynamics; effective diffusion coefficient

0 引言

迂曲度是多孔介质的重要属性, 能够量化地反映孔隙结构的复杂程度; 确定多孔介质的扩散迂曲度对理解污染物运移规律、评估污染物的环境影响并预测其演化规律有重要意义。在岩土介质等多孔介质中, 颗粒交错的孔隙结构使得溶质的实际扩散方向偏离宏观浓度梯度方向, 从而减缓扩散作用。这使得溶质在多孔介质中表现出更小的扩散系数, 被称作有效扩散系数。扩散迂曲度 τ 一般可被定义为溶质的分子扩散系数 D_e 与多孔介质中的有效扩散系数 D_{eff} 之比^[1-4]:

$$\tau = D_e / D_{\text{eff}} \quad (1)$$

有些文献也把两扩散系数之比确定为迂曲度的平方^[2]或迂曲度平方与孔隙率之比^[5-6]。这些等量关系在本质上是相同的, 区别主要在于对迂曲度的定义不同以及对有效扩散系数求解的不同^[1]。若孔隙填充度愈高, 孔隙率愈低, 孔隙通道愈复杂, 扩散路径越曲折,

基金项目: 北京市自然科学基金项目(8182046); 国家自然科学基金项目(51678043, 51878035)

收稿日期: 2019-04-22

*通信作者 (E-mail: bbai@bjtu.edu.cn)

则对扩散作用阻碍效果更加显著, 即表现出更小的有效扩散系数和更大的扩散迂曲度。而在纯水中, 溶质扩散不存在阻碍, 扩散系数即等于分子扩散系数, 易知迂曲度满足以下基本规律^[2, 5]:

$$\left. \begin{array}{l} \tau \geq 1, \\ \lim_{n \rightarrow 1} \tau = 1. \end{array} \right\} \quad (2)$$

根据推导条件和适用性的不同, 迂曲度大致可区分为几何迂曲度、水力迂曲度、电力迂曲度和扩散迂曲度^[4, 7]。一般认为, 对同一多孔介质, 扩散迂曲度大于几何迂曲度, 近似等于电力迂曲度, 小于水力迂曲度^[4, 7]。扩散迂曲度值作为迂曲度中的中位值, 测算扩散迂曲度可为其他迂曲度的取值提供参考。

试验中常通过分别测定非活性溶质在自由溶液和多孔介质中的扩散系数, 再由式(1)确定介质的扩散迂曲度值, 但这类试验往往需要持续数周甚至数月^[5-6]。由于多孔介质性状复杂且易变, 孔隙率、含水率、堆积特征、土壤结构、土壤材质以及温度等因素的改变即可能影响多孔介质对水和溶质的传导规律。常规宏观试验难以实现对孔隙结构和试验条件的精准控制, 也难以具体分析多孔介质结构参数对其运移特性的影响, 因此, 发展孔隙尺度数值仿真技术对推动多孔介质传质研究和迂曲度研究意义重大。受限于孔隙结构的复杂性, 对多孔介质的输运过程进行孔隙尺度建模研究在过去进展缓慢, 20世纪70年代前这甚至被认为是不可能的任务^[4]。而随着新型数值计算方法的兴起和计算机计算能力的不断提升, 数值法研究的关注点也正逐渐从求解基于表征体元(REV)尺度的微分方程, 转向模拟计算基于孔隙尺度的实体介质。近年来涌现出了一系列适用于介观尺度且易于并行计算的数值算法, 包括光滑粒子流体动力学(SPH), 格子玻尔兹曼方法(LBM)以及计算流体力学(CFD)等方法已经被用于分析孔隙尺度的相关问题^[8-9]。

SPH(光滑粒子流体动力学)是一种拉格朗日形式的无网格粒子算法, 目前已被广泛地应用于流体力学和固体力学^[10-12]。SPH方法在孔隙尺度多孔介质输运方面已有一定的研究基础^[12-18]。Zhu等^[13]提出一种模拟孔隙尺度饱和水动力扩散的SPH数值模型, 通过模拟对流过程计算了二维周期多孔介质的水力迂曲度。Tartakovsky等^[12, 14]提出孔隙尺度下的SPH多相流模型, 并用于模拟研究多孔介质的异质性和各向异性对多相流的影响以及溶质运移过程。Ryan等^[15]将该模型进一步拓展于孔隙尺度的溶质竞争吸附问题, 并将模拟结果与达西尺度下的数值解进行对比验证。Kunz等^[16]采用SPH方法模拟了二相流在孔隙结构中的排水过程, 并与模型试验进行比较。Sivaneshapillai等^[17]则

通过SPH模拟得到了孔隙尺度下非均质非饱和二维多孔介质中的排水过程。在用于孔隙尺度问题研究时, SPH方法与其他传统方法相比有一定优势。由于其无网格特性, 生成复杂孔隙空间的离散计算成本更低^[17], 且其拉格朗日框架可便捷生成复杂边界, 并易于在物质交界面处施加物理或化学作用^[15]。

本文采用SPH方法模拟了孔隙尺度下的扩散试验, 根据仿真结果可拟合得到重构三维多孔介质的扩散迂曲度值。文中分别采用离散元法(PFC)和蒙特卡洛法随机生成三维球体堆积土柱和三维片层状重构土柱用于仿真试验, 并根据计算结果探讨了片层颗粒的偏角对片状多孔介质扩散迂曲度的影响。

1 SPH 计算方法

1.1 SPH 方法基本原理

SPH方法基本思想是将问题域考虑为一系列粒子, 粒子兼具近似点和材料成分的功能。在求解控制方程时, 先需采用积分表示法近似场函数 $f(x)$ ^[10, 18]:

$$f(x) = \int_{\Omega} f(x') W(x - x', h) dx' \quad , \quad (3)$$

式中, h 为核函数的光滑长度, Ω 为积分区域, $W(x - x', h)$ 为光滑函数, 可理解为点 x 处的函数值在 x' 处的权重, 文献[10]中对核函数有详细介绍, 文中核函数选用三次 B-样条函数。

再将式(3)进一步近似为粒子叠加求和的离散化形式, 则第 i 粒子点对应的粒子近似式为^[10, 18]

$$f(x_i) = \sum_{j=1}^N f(x_j) W(r_{ij}, h) \frac{m_j}{\rho_j} \quad , \quad (4)$$

式中, N 为 i 粒子的积分区域内其他粒子总数, x_i, x_j 分别为粒子点 i 和 j 对应的坐标, 相应的 m_j, ρ_j 为粒子点的质量和密度, 定义 $r_{ij} = x_i - x_j$ 。

1.2 SPH 扩散方程

若不考虑对流和吸附, 溶质的稳态迁移扩散用 Fick 第二定律描述, 控制方程为^[19]

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_e \nabla^2 C \quad . \quad (5)$$

Cleary 等^[20]提出针对扩散方程的优化 SPH 公式, 并用于求解传热问题, 该改进可确保在不连续材料中热流传递的连续性。Bai 等^[21]进一步研究验证了该方程在各类边界条件下求解热扩散问题时的准确性, 并提出一种针对规则粒子排布形式的边界优化方法。

参考文献[20, 21]中对热扩散方程的离散形式, 可得到扩散方程的 SPH 近似表达式:

$$\frac{dC_i}{dt} = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} \frac{4D_e^i D_e^j}{D_e^i + D_e^j} C_{ij} \left(\frac{1}{|r_{ij}|} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r_{ij}} \right) \quad , \quad (6)$$

式中, $C_{ij} = C_i - C_j$ 。由式(9)可知, 若设定固体粒子的溶质扩散系数 D_e 为 0, 则固体粒子项在流体粒子的近似表达式计算中无累加值, 因而固体粒子在溶质扩散计算中可直接省去。

对于扩散问题, 时间步长需满足以下规则^[20-21]:

$$\Delta t \leq \min \left(\frac{\beta h^2}{D_e} \right), \quad (7)$$

式中, β 为计算参数, 相关研究表明当 $\beta < 0.15$ 时计算是稳定的。时间积分采用具有二阶精度的改进 Euler 预测-校正方法计算^[21]。在每个计算步开始前, 计算浓度预测值:

$$\tilde{C}(t + \Delta t) = C(t) + \Delta t \frac{dC}{dt} \Big|_t. \quad (8)$$

在计算步结束后计算校正值:

$$C(t + \Delta t) = C(t) + \frac{\Delta t}{2} \left[\frac{dC}{dt} \Big|_t + \frac{d\tilde{C}}{dt} \Big|_{t+\Delta t} \right]. \quad (9)$$

1.3 解析解

对单向扩散问题, 假定介质中溶液的初始质量浓度为 C_0 , 介质两端为浓度始终等于 0 的第一类边界条件, 则该问题可归结为以下一维定解问题:

$$\left. \begin{array}{l} C_t - DC_{xx} = 0, \\ C|_{x=0} = 0, C|_{x=L} = 0, \\ C|_{t=0} = C_0, x \in (0, L). \end{array} \right\} \quad (10)$$

采用分离变量法求解, 可解出解析解为

$$C(x, t) = 2C_0 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1 - \cos k\pi}{k\pi} \cdot \sin\left(\frac{k\pi x}{L}\right) \cdot \exp\left(-\frac{k^2\pi^2 D}{L^2} t\right), \quad (11)$$

式中, L 为介质厚度, D 为介质中的扩散系数, 若将多孔介质平均化为连续介质, 采用扩散方程描述其孔隙水中的扩散现象时, 则 D 即为有效扩散系数。

若求和级数的累加次数 k 取 20, 再将式(11)中的变量无量纲化: 时间因数 $T_v = D_e t / L^2$, 定义位置因数 $X = x / L$ 。并结合式(1)可得

$$\frac{C(x, t)}{C_0} = 2 \sum_{k=1}^{20} \frac{1 - \cos k\pi}{k\pi} \cdot \sin(k\pi X) \cdot \exp\left(-k^2\pi^2 \frac{T_v}{\tau}\right). \quad (12)$$

由式(12)可知, 对于等效的一维土柱试验, 溶质迁移演化程度仅与时间因数 T_v 相关。由于常规溶质在实际环境中扩散系数 D_e 的数量级一般在 $10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, 因此若要将溶质迁移推进到一定的时间因数需要消耗大量时间, 这也是造成有效扩散系数试验时间周期长的主要原因。在仿真试验中, 可通过选取合适的时间步长来避免这一问题。

1.4 仿真实验实施过程

首先对计算模型做如下规定: ①流场饱和; ②多孔介质骨架不发生变形; ③孔隙水不流动; ④溶质的

质量和密度忽略不计。

以图 1 所示的介质为例: 扩散场为二维正方形多孔介质, 厚度 $L = 0.012 \text{ m}$, 介质中填充为等尺寸且整齐排布的圆形颗粒; 流体粒子按间距 $\Delta x = 0.0001 \text{ m}$ 等距布置, 左右两侧设置边界粒子用于施加浓度边界条件。图 1 中固体粒子已被省略, 扩散域内流体粒子总计 9344 个, 孔隙率 $n = 0.65$ 。设定溶液中含有某溶质, 初始浓度为 C_0 , 两侧边界粒子浓度始终为 0; 设定溶质的分子扩散系数 $D_e = 1 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ 。

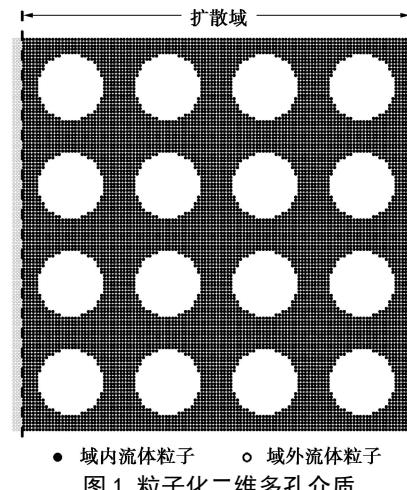


Fig. 1 Discretization of 2-D porous media

采用 SPH 计算该问题, 首先需对粒子赋初值, 再计算相邻粒子对, 最后根据扩散方程逐步计算并更新每个粒子的浓度。计算中, 光滑长度 h 选取为 1 倍粒子间距, 时间步长 $\Delta t = 1 \text{ s}$, 图 2 给出了 $T_v = 0.1$ (14400 计算步) 时介质中的浓度分布情况。根据计算结果, 采用等坐标位置取平均值的方法计算介质中不同深度处的平均浓度, 得到图 3 所示的浓度分布。采用式(12)对浓度分布曲线进行拟合, 可得到扩散迂曲度值, 再由式(1)即可计算得到有效扩散系数。

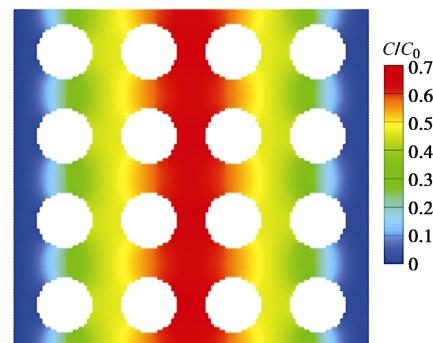


图 2 二维多孔介质浓度分布图

Fig. 2 Concentration distribution of 2-D porous media

为验证 SPH 计算扩散问题的准确性, 并对比说明多孔介质对溶质扩散的阻滞效果, 计算中增设了孔隙率 $n = 1$ 的对照组 (即扩散域完全填充为流体粒子, 粒子个数 14400 个), 此时算例可以完全等效为一维分

子扩散问题。计算结果见图 3, $n = 1$ 的数值解与解析解保持一致, 说明 SPH 算法在求解扩散方程是准确的。图 3 中对照给出了 T_v 为 0.005, 0.05, 0.1 时, $n = 1$ 和 $n = 0.65$ 两种算例的溶质浓度分布曲线。对比可知, 在时间因数相同时, 由于多孔介质中存在颗粒交错的孔隙结构, 使得溶质的扩散方向偏离宏观浓度梯度方向, 明显减缓了溶质的扩散速度。

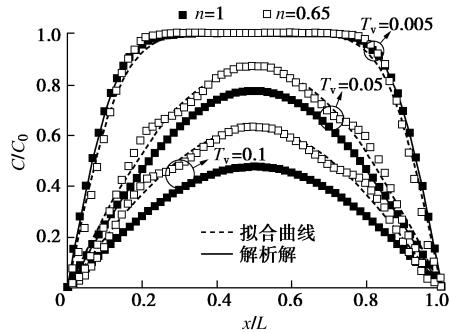


图 3 浓度分布曲线

Fig. 3 Distribution curves of concentration

针对如图 1 所示的等粒径对齐圆形颗粒介质, Rebecca 等^[22]采用交错网格有限差分方法求解泊松方程得到扩散迂曲度, 并给出了孔隙率 - 迂曲度趋势线。图 4 中将本方法所得孔隙率 - 迂曲度关系与 Rebecca 等^[22]的结果进行对比。两者符合较好, 进一步检验了本方法计算所得扩散迂曲度值的准确性。

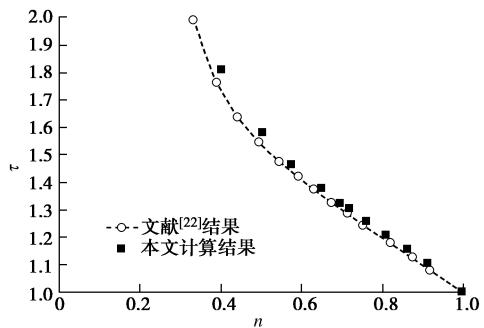


图 4 等粒径对齐圆形颗粒介质的孔隙率 - 迂曲度趋势线

Fig. 4 Tortuosity-porosity trends for in-line array of granules with uniform size

2 三维介质的仿真试验

2.1 三维多孔介质的生成

(1) 球状堆积多孔介质

借助 PFC^{3D} 软件可方便快捷地生成堆积多孔介质: 只需先生成一系列粒径随机的球体, 再让其自由落体至长方形柱体内。自然堆积完成后, 在堆积体上方施加向下运动的平板, 以达到压实的效果并控制堆积体的孔隙率。生成效果见图 5 (a), 图中球体颗粒共 400 个, 颗粒直径在 1.0~2.5 mm 随机取值, 所截取的土柱高度 $L = 0.0175\text{m}$, 长宽均为 0.012 m。计算

中将土柱离散化, 在柱体空间内规则设置 SPH 粒子, 粒子间距 $\Delta x = 0.0002\text{ m}$; 图 5(b)中流体粒子共 142973 颗 (不含上下界面外的 3 层边界粒子), 孔隙率 $n = 0.45$ 。仿真试验步骤和其他参数的选取与 1.4 节相同, 图 5(c)为 $T_v = 0.2$ (12250 计算步) 时计算结果。

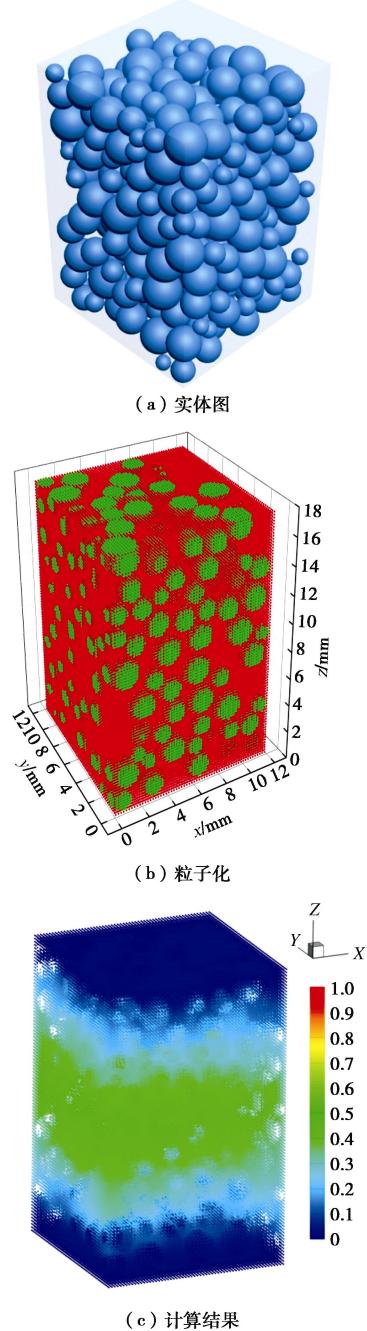


图 5 三维球状堆积多孔介质示意图

Fig. 5 Schematic diagrams of 3-D sphere packing porous media

(2) 片层状分布的重构多孔介质

片层状重构多孔介质生成方法借鉴于岩体结构面网格的计算机生成方式, 即根据实测统计分析建立多孔介质中片层分布的概率密度函数, 并通过蒙特卡洛法按该密度函数采样, 从而得到与实际相接近的人工随机介质。对于复杂问题甚至可根据需要生成四面体、

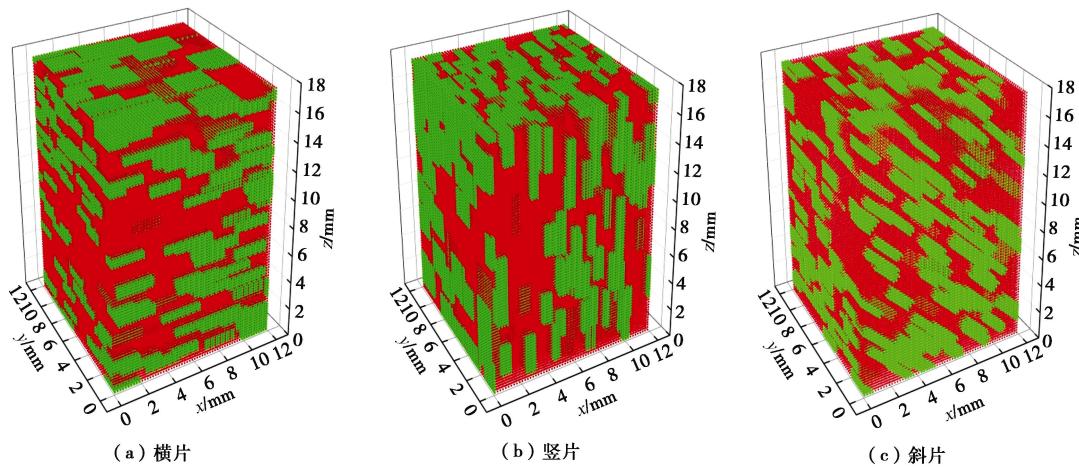
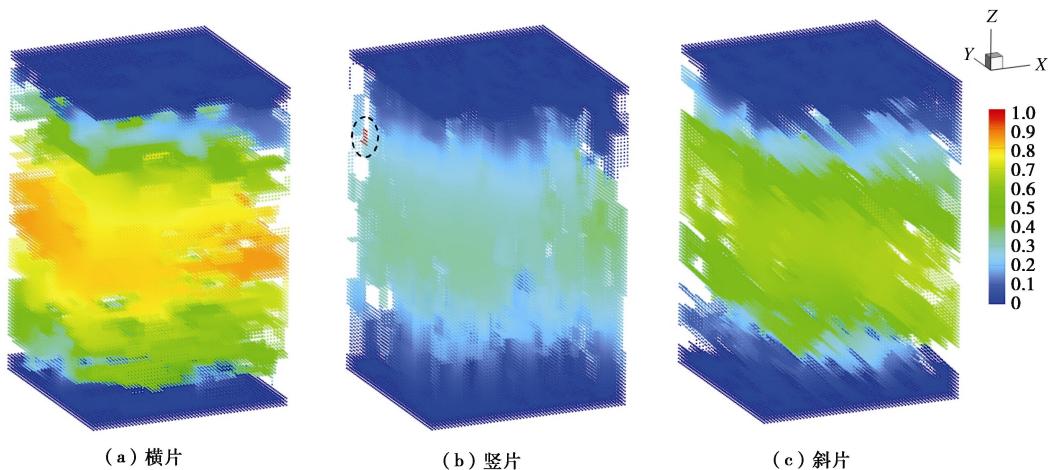


图 6 层状重构多孔介质示意图

Fig. 6 Schematic diagrams of layered reconstituted porous media

图 7 层状重构多孔介质计算结果 ($T_v = 0.2$)Fig. 7 Calculated results of layered reconstituted porous media ($T_v = 0.2$)

八面体颗粒或“人”字、“X”型颗粒等。这里简单地采用均匀分布生成随机变量, 片层颗粒为片状长方体(定义长高比和宽高比均大于2的长方体为片状)。

为分析片层状多孔介质中层面倾角对扩散迂曲度的影响, 分别按照竖片(0°)、横片(90°)和斜片(45°)3种方式生成片状多孔介质(图6)。土柱整体仍为长方体, 尺寸为 $0.012\text{ m} \times 0.012\text{ m} \times 0.0175\text{ m}$, 均匀随机填充720个左右片层颗粒, 颗粒长宽高分别在 $2.0\sim 3.0$, $1.6\sim 2.4$, $0.4\sim 0.8\text{ mm}$ 中随机取值, 孔隙率均控制在0.45。图6给出了3种层状多孔介质粒化图, 图7给出了 $T_v=0.2$ 时的计算结果。

2.2 三维多孔介质的扩散迂曲度

由图7知, 若片状介质中颗粒层面沿垂直于浓度梯度的方向(横向, 90°)分布, 则其对溶质扩散的阻滞作用最为明显, 斜向次之, 竖向最差。计算中, 随着计算步增加, 4种介质的扩散迂曲度均能趋于稳定值(图8, 大致从 $T_v=0.2$ 开始稳定); $T_v < 0.6$ 时, 拟合优度 R^2 基本保持在0.95以上(图9)。

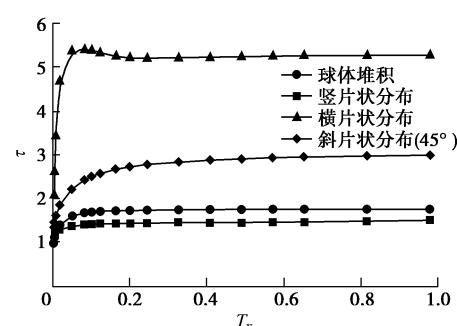


图 8 扩散迂曲度与时间因数

Fig. 8 Diffusive tortuosity versus time factor

图9中, 竖片状分布在计算后期拟合优度出现了明显下降, 是由于该多孔介质中存在少量闭合孔隙结构(见图7(b)中虚线圈出的区域)。随着扩散进行, 整体溶质浓度不断降低而闭合孔隙结构中部分粒子点仍然保持着高浓度, 使得溶质分布曲线出现突变点, 影响了整体拟合效果, 建议在计算溶质分布曲线时剔除闭合孔隙粒子点。综合考虑, 扩散迂曲度按 $|\Delta\tau / \Delta T_v| < 1$, $R^2 > 0.95$ 的时刻取值较为合理。类似地, 在保证孔

隙率相同的前提下分别生成斜片状 15° ， 30° ， 60° ， 75° 介质，并计算扩散迂曲度值。图 10 给出了片状介质的扩散迂曲度随片层偏角的变化趋势。

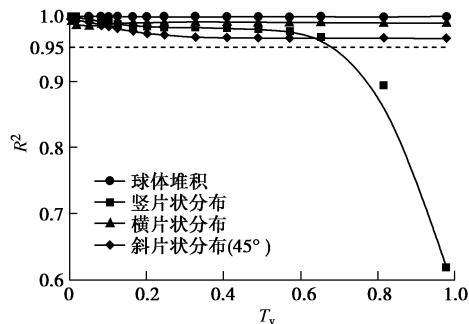


图 9 拟合优度与时间因数

Fig. 9 R-squared versus time factor

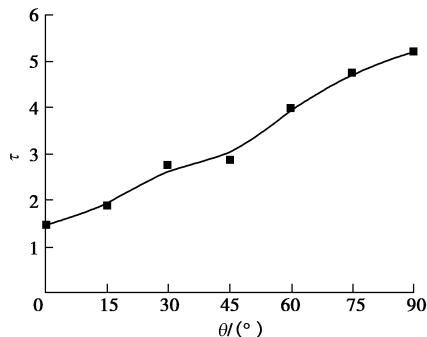


图 10 扩散迂曲度与片层偏角

Fig. 10 Diffusive tortuosity versus layer angle

由计算结果可知，在孔隙率相同时，片层偏角对溶质的扩散迂曲度有显著影响，横片状多孔介质扩散迂曲度最大，斜片状次之，竖片状最小；扩散迂曲度将随着颗粒片层偏角的增大而增大。横片状介质的扩散迂曲度可以达到竖片状介质的 3 倍以上，而竖片状多孔介质的迂曲度值甚至小于球状堆积介质的迂曲度值。本文计算得到球状堆积介质的扩散迂曲度值为 1.76，与 Davarzani 等^[23]通过室内试验测得的玻璃球颗粒柱扩散迂曲度值的分布范围基本相符。

2.3 多孔介质的扩散迂曲度与孔隙率

多孔介质迂曲度与其孔隙率关系密切，二者变化有明显的规律性。大量理论及试验研究表明^[2,6]，不论是何种迂曲度，其值均随孔隙率的增大而减小，1.4 节图 4 中计算结果也说明了这一点。

通过改变片层颗粒算子个数，可得到不同孔隙率的三维土柱。图 11 中给出了 45 组仿真试验的计算结果，迂曲度均按照 $T_v=0.2$ 时刻的浓度分布曲线拟合取值。文献[2]中系统总结了扩散迂曲度与孔隙率的理论及经验公式。考虑到算例中土颗粒尺寸较大，故采用指类型公式 $\tau = (an^{1-b})^c$ 对迂曲度与孔隙率的散点图进行曲线拟合（ a, c 一般取 1）。拟合曲线形态与计算结果吻合较好，进一步检验了计算结果的合理性。

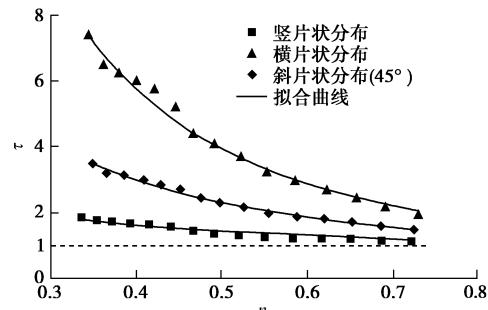


图 11 扩散迂曲度与孔隙率

Fig. 11 Diffusive tortuosity versus porosity

3 结 论

(1) 本文基于 Fortran 编程采用光滑粒子流体动力学方法 (SPH) 求解扩散方程，实现孔隙尺度下三维土柱中溶质扩散的仿真试验，从而可通过拟合得到介质的扩散迂曲度并确定有效扩散系数。SPH 方法求解扩散方程的准确性得到了解析解验证。二维等粒径圆形颗粒介质的计算结果与文献中结果符合较好。

(2) 文中采用颗粒流软件便捷生成三维球体颗粒随机堆积的多孔介质，并提出一种采用蒙特卡洛随机生成三维片层状重构多孔介质的方法，采用该方法可按照特定的概率密度函数生成所需的片层模型。

(3) 根据土柱仿真试验的计算结果可知：对于片层状多孔介质，当颗粒层面法向方向与浓度梯度方向一致时，扩散迂曲度最大；随着片层与浓度梯度方向夹角减小，扩散迂曲度逐渐减小；当片层与浓度梯度方向一致时迂曲度最小，甚至小于同孔隙率的球状颗粒堆积体的扩散迂曲度值。

(4) 本文进一步拓展了多孔介质迂曲度的数值研究手段，尤其是在孔隙尺度。采用仿真试验的方式可实现对孔隙结构和试验条件的精准控制，并可从细观尺度下研究多孔介质结构参数对溶质运移特性的影响。在今后的研究中，可继续采用 SPH 方法进行多孔介质输运相关的机理性研究。

参 考 文 献：

- [1] SHACKELFORD C D. Laboratory diffusion testing for waste disposal—A review[J]. Journal of Contaminant Hydrology, 1991, 7(3): 177–217.
- [2] SHEN L, CHEN Z. Critical review of the impact of tortuosity on diffusion[J]. Chemical Engineering Science, 2007, 62(14): 3748–3755.
- [3] LI Z, DONG M. Experimental study of diffusive tortuosity of liquid-saturated consolidated porous media[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2010, 49(13): 6231–6237.
- [4] GHANBARIAN B, HUNT A G, EWING R P, et al. Tortuosity

- in porous media: a critical review[J]. *Soil Science Society of America Journal*, 2013, **77**(5): 1461 – 1477.
- [5] BOUDREAU B P. The diffusive tortuosity of fine-grained unlithified sediments[J]. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 1996, **60**(16): 3139 – 3142.
- [6] SUN Z, TANG X, CHENG G. Numerical simulation for tortuosity of porous media[J]. *Microporous & Mesoporous Materials*, 2013, **173**: 37 – 42.
- [7] SAOMOTO H, KATAGIRI J. Direct comparison of hydraulic tortuosity and electric tortuosity based on finite element analysis[J]. *Theoretical and Applied Mechanics Letters*, 2015, **5**(5): 177 – 180.
- [8] YANG X, MEHMANI Y, PERKINS W A, et al. Intercomparison of 3D pore-scale flow and solute transport simulation methods[J]. *Advances in Water Resources*, 2016, **95**: 176 – 189.
- [9] 徐宗恒, 徐则民, 王志良. 格子 Boltzmann 方法在斜坡非饱和带土体大孔隙流研究中的应用[J]. *岩土工程学报*, 2017, **39**(1): 178 – 184. (XU Zong-heng, XU Ze-min, WANG Zhi-liang. Application of lattice Boltzmann method in macropore flows in unsaturated zone soil of slopes[J]. *Chinese Journal of Geotechnical Engineering*, 2017, **39**(1): 178 – 184. (in Chinese))
- [10] LIU M B, LIU G R. Smoothed particle hydrodynamics (sph): an overview and recent developments[J]. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 2010, **17**(1): 25 – 76.
- [11] MONAGHAN J J. Smoothed particle hydrodynamics and its diverse applications[J]. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 2012, **44**: 323 – 346.
- [12] TARTAKOVSKY A M, TRASK N, PAN K, et al. Smoothed particle hydrodynamics and its applications for multiphase flow and reactive transport in porous media[J]. *Computational Geosciences*, 2016, **20**(4): 807 – 834.
- [13] ZHU Y, FOX P J. Simulation of pore-scale dispersion in periodic porous media using smoothed particle hydrodynamics[J]. *Journal of Computational Physics*, 2002, **182**: 622 – 645.
- [14] TARTAKOVSKY A M, MEAKIN P. Pore scale modeling of immiscible and miscible fluid flows using smoothed particle hydrodynamics[J]. *Advances in Water Resources*, 2006, **29**(10): 1464 – 1478.
- [15] RYAN E M, TARTAKOVSKY A M, AMON C. Pore-scale modeling of competitive adsorption in porous media[J]. *Journal of Contaminant Hydrology*, 2011, **120/121**: 56 – 78.
- [16] KUNZ P, ZARIKOS I M, KARADIMITRIOU N K, et al. Study of multi-phase flow in porous media: comparison of SPH simulations with micro-model experiments[J]. *Transport in Porous Media*, 2016, **114**: 581 – 600.
- [17] SIVANESAPILLAI R, STEEB H. Fluid interfaces during viscous-dominated primary drainage in 2D micromodels using pore-scale SPH simulations[J]. *Geofluids*, 2018: 1 – 13.
- [18] 饶登宇, 白冰. 溶质运移中多孔介质弥散度影响因素的 SPH 模拟研究[J]. *水利学报*, 2019, **50**(7): 824 – 834. (RAO Deng-yu, BAI Bing. Study on the factors affecting dispersity of porous media by SPH simulation in solute transport[J]. *Journal of Hydraulic Engineering*, 2019, **50**(7): 824 – 834. (in Chinese))
- [19] BAI Bing, RAO Deng-yu, CHANG Tao, et al. A nonlinear attachment-detachment model with adsorption hysteresis for suspension-colloidal transport in porous media[J]. *Journal of Hydrology*, 2019, **578**: 124080.
- [20] BAI Bing, RAO Deng-yu, XU Tao, et al. SPH-FDM boundary for the analysis of thermal process in homogeneous media with a discontinuous interface[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2018, **117**: 517 – 526.
- [21] CLEARY P W, MONAGHAN J J. Conduction modeling using smoothed particle hydrodynamics[J]. *Journal of Computational Physics*, 1999, **148**: 227 – 264.
- [22] REBECCA A, SHUYU S. Computing and comparing effective properties for flow and transport in computer-generated porous media[J]. *Geofluids*, 2017: 1 – 24.
- [23] DAVARZANI H, MARCOUX M, COSTESEQU P, et al. Experimental measurement of the effective diffusion and thermodiffusion coefficients for binary gas mixture in porous media[J]. *Chemical Engineering Science*, 2010, **65**(18): 5092 – 5104.