孔隙网络模型在土壤水文学中的应用研究进展

吕 菲,刘建立

(中国科学院南京土壤研究所, 江苏 南京 210008)

摘要:非饱和土壤的水力性质是采用模型定量模拟水分和溶质在非饱和带中运动的最重要的物理参数,可以用网 络模型来预测。孔隙网络模型的主要优点在于可以对发生在土壤孔隙尺度上的物理、化学过程进行直观的表达和 模拟。目前,国内外研究者已在样品图像获取、图像分析、模型建立以及求解等方面取得了一定的进展。在对其进 行综合评述的基础上,指出了已有网络模型在建立过程中存在的不足之处,并进一步明确了今后的研究方向。

关键词:孔隙尺度;网络模型;土壤水力性质;土壤水文学
 中图分类号: \$152.7; G53.11
 文献标识码: A
 文章编号: 1001-6791(2007)06-0915-08

非饱和土壤的水力性质包括土壤水分特征曲线和水力传导率函数,是采用模型定量模拟水分和溶质在非饱 和带中运动的最重要的物理参数,它与孔隙的几何形态和拓扑性质有着直接的联系^[1]。孔隙结构特征与有效水 力性质之间的关系可以用网络模型来模拟。孔隙网络模型的主要优点在于可以对发生在土壤孔隙尺度上的物 理、化学过程进行直观的表达和模拟,并能直接根据孔隙空间的拓扑性质预测土壤水力性质。

早期的网络模型将土壤孔隙理想化成圆柱状的毛细管束,并通过简单的水分运动模拟来预测连续体尺度上的介质性质,如非饱和水力传导率函数。但是,这些模型均未考虑孔隙之间的相互连通状况,因此并不能代表 实际的土壤介质孔隙空间。Fatt 最早提出了以二维或三维网络模型来表征孔隙的结构特征^[2~4],之后这一方法 在石油工程等领域得到了进一步的发展^[5,6]。近些年来,该方法已逐渐应用到土壤物理学、水文学等领域 中^[7~9],尤其是多孔介质中的单相流与多相流研究,如相对渗透性^[8~10];两相系统中孔隙结构对相对渗透性 及毛细管压力滞后性的影响^[11];介质渗透性的预测^[12];毛细管压力、饱和度及界面面积之间的关系^[13];释水 与吸湿过程^[14,15];相的分布、界面面积及质量传递^[16]等。

建立孔隙网络模型最关键的步骤是如何识别土壤孔隙结构(孔隙形态与连通状况)并将之定量反映到网络模型中。由于实际土壤在孔隙形态学上的复杂性,为了便于网络模型的建立与求解,孔隙体和孔喉通常被简化成简单的几何形状:孔隙体多以球形或立方体表示,孔喉则以圆柱形或其他具有代表性的非环形管道表示。网络模型可以是二维或者三维的,但是二维模型在反映实际介质三维空间内孔隙的相互连通性方面具有很大的局限性,因此绝大多数已有模型都是三维的^[5]。通常的三维网络模型都是随机的^[14]或者是配位数(Coordination number)为6的立方体点阵(如果移除一些配位键则其有效配位数会更小一些)。不过,在实际孔隙介质中配位数多大于6^[17]。这种情况下应选用本身具有代表性的网络模型将实际孔隙结构直接映射到网络模型上,而不是采用规则的点阵^[12]。这样就可以在模型中保留更完整的实际孔隙形态学特征及其内在的空间相关关系。

网络模型的建立一般要经过以下几个步骤:首先,对样品进行处理以获取孔隙结构的数字图像;其次,用 图像处理软件对得到的图像进行分析和识别,得到孔隙空间的三维结构特征;再次,利用图像分析得到的特征 参数建立网络模型;最后,利用数值方法对发生在孔隙网络中的流体过程进行模拟与求解。

收稿日期: 2006-01-13; 修订日期: 2007-07-21

- 基金项目:国家自然科学基金资助项目(40401027);国家重点基础研究发展计划(973)资助项目(2005CB121103)
- 作者简介:吕 菲(1981-),男,天津人,博士研究生,主要从事土壤物理学研究。E-mail: flv @mail.issas.ac.cn
- 通讯作者:刘建立, E-mail: JLLiu @issas. ac. cn

1 孔隙结构的获取与定量表征

建立网络模型最重要的步骤就是确定并采用量化的指标来表达孔隙的结构。通常采用以下两种方法:方法 一,将特定的孔隙介质结构特征直接映射到网络模型上;方法二,用基本的形态学参数建立等价的网络模型。 这两种方法的本质不同在于,直接映射方法得到的网络模型结构与孔隙介质结构在空间上是一一对应的,而等 价的模型只是在统计学意义上的等价。

1.1 **直接映射技术**

直接映射技术要求在重建网络之前获得孔隙的结构。目前主要有以下两种手段,即连续切片图像分析技术^[18,19]和非破坏性技术。

(1) 连续切片图像分析技术 连续切片图像分析技术是研究孔隙形态学特征的一种经典方法,它通过对样品的连续切片,分析这些薄层断面以获取多孔介质的孔隙形态学特征。例如:Znszner 和 Meynot 将染色胶注入方丹白露(Fontainebleau)砂岩样品,通过腐蚀的方法得到砂岩样品的连续断面,然后利用数字图像处理技术将连续断面图像转化为二值图像。虽然该方法能够获得薄层切片的高精度二维信息,但是切片实验的操作过程是非常繁琐的,而且通过连续切片重建三维孔隙结构也是非常困难的^[20,21]。因此,众多学者在连续切片的基础上结合了统计学的方法并进行了大量的试验。Vogel 和 Roth^[1]提出了一种基于连续土壤切片的数字图像分析来获取孔隙空间几何形态与拓扑特征并重建三维孔隙结构的方法。他们将直接测定的孔隙空间的形态特征作为网络模型的输入参数,并预测了非饱和土壤的水力性质。该方法克服了以往网络模型有关参数不确定性因素的影响,比较真实地再现了土壤孔隙结构分布,从而提高了网络模型的预测能力和可靠性。Liang^[22]在对连续断面二值图像统计分析的基础上获取了三维孔隙介质结构,并用图像细化算法(thinning algorithm)得到的孔隙空间结构来预测渗透性。Hidajat 等^[23]运用统计学方法在薄层切片的基础上建立了三维网络模型来模拟释水和溶质运移过程。在其模型中,圆柱状的孔喉与表示孔隙体的节点相连,配位数为12。孔隙体本身假定没有体积。李德成^[24]等利用连续土壤切片的方法研究了一种美国耕作黑土和一种法国耕作黄壤的孔隙的小尺度特征。

这种通过对连续断面进行图像分析和统计的方法虽然可以用来构建三维网络模型,但由于实验过程中需要 获取多个连续的薄层切片,其过程非常繁琐,对切片的精度要求极高。更重要的是,实验过程可能会破坏原有 的孔隙结构,使得结果不能代表实际的介质性质。

(2) 非破坏性分析技术 如 X 射线微断层摄影技术 (CT) 由于非破坏性、非侵入性的直接图像技术可以在不破坏原有土壤孔隙结构的情况下获得表征介质几何与拓扑特征的唯一图像,因此相对于连续切片分析技术更具应用前景。目前主要的非破坏性方法有 X 射线微断层摄影技术 (CT) 和核磁共振方法 (NMR)。

CT 是在 1973 年出现的,当时只是为了满足医学的需要。其成像原理是: 以排列好的检测器来测量穿过 样品的二维扇形 X 射线的衰减(X 射线由 360 分布的发射源发射); 线形 X 射线衰减系数分布的二维图像利 用投影数据通过 Fourier 变换重建,将连续的二维图像合并起来就形成了样品的三维图像。由于 CT 技术可以在 不破坏样品的情况下对研究对象的内部结构进行测定,且成像及分析速度快,可以进行三维立体分析等特点, 因此它在各研究领域中的应用得到了迅猛发展。Pstrovic 等^[25]于 1982 年首次将医用 CT 应用到土壤科学研究中, 分别测定了土体密度和土壤水分含量。Flannery^[26]等提出了 CMT 成像技术。这种采用同步加速器 X 射线源的仪 器与医用 CT 相似,但是能够提供更为准确的具有微米级分辨率的二维或三维图像,使得研究能够在孔隙尺度 上进行。在此之后,利用高分辨率成像技术重建岩层孔隙结构、进行单相流的研究得到进一步发展。例如: Spanne 等^[27]利用 CMT 成像技术重建方丹白露砂岩样本的孔隙结构,计算孔隙的渗透性以及连通性。Coles 等^[28]在研究中利用 CMT 成像技术清晰地反映岩石孔隙中的水和油两相的分布情况,由此建立的模型也能为模 拟流体运移过程提供可靠的输入数据。

X射线微断层摄影技术(CT)是一种非破坏性、非侵入性的实验方法,代表了该领域研究未来的发展方向。

如果进一步提高仪器的精度,就可以获取更高精度的孔隙空间三维图像和更为丰富准确的研究数据。

核磁共振 (NMR) 技术 核磁共振方法 (NMR) 是基于自然界中原子核能够吸收特定频率电磁波辐射原理的一种光谱学方法。20 世纪 90 年代后, 这种方法逐渐被用于多孔介质结构的研究中。NMR 是一种非破坏性非侵入性、多维的、定量的、具有高分辨率的研究孔隙结构的试验方法。弛豫时间是 NMR 方法的重要参数。Bottomley 等^[29,30]的研究表明, 弛豫时间 (relaxation time) 受孔隙大小及其分布、土壤类型和水分含量的强烈影响。其中,自旋点阵弛豫时间 (T₁) 可用于估计固体基质的渗透性^[31], 还可用于确定流体的浸润性和渗透性^[32]。自旋间的弛豫时间 (T₂)则与表面面积和孔隙大小分布存在很强的相关性^[33]。NMR 方法通常是根据 *T*₁ 和 *T*₂ 值来确定松散多孔介质的有关性质,如孔隙度、渗透性以及孔隙大小分布等^[34~36]。此外,NMR 方法还能够测定孔隙内纵向与横向的流速分布,而且可以在保持自身位置不变的情况下测量孔隙内水分的运移与扩散状况^[37]。近些年来,NMR 方法被应用于许多单相流及二相流的研究中^[38~40]。例如: Mantle 等^[37]用 NMR 方法确定了人工填充层(氧化铝催化剂)的孔隙空间结构以及填充层内单相流的流域分布。这些研究都证明了 NMR 成像方法不仅能够直接测量孔隙的三维结构,而且还能够有效并准确地确定流域的性质。

上述几种方法都是采用直接映射表征孔隙空间结构的方法,在研究工作中得到了一定的应用,是研究孔隙 结构特征的重要方法。近些年来,另一种采用等价模型研究孔隙结构的方法也被许多学者应用于多孔介质的研 究当中。

1.2 等价重建技术

Adler^[41~43]最先提出了"重建介质"("reconstructed media")的概念,当时是为了根据连续切片的统计学信息建 立人工介质。而目前采用等价模型方法研究孔隙结构更强调的是能够进行数值模拟的人工介质,也就是所谓的 "模拟介质"("simulated media")^[44]。模拟介质的建立必须满足以下两个条件: 样本的统计学性质应能最大限 度地反映出实际介质的几何和拓扑特征。例如:孔隙度、孔隙大小分布以及连通性等。 为便于模拟计算, 建立的模型应尽可能地简单,但又要能体现出实际介质的有关特征。例如:球形填充物可用于表征砂层的结 构,而毛细管网络则更适合于表示孔隙度低的裂隙介质。实际上,模拟多孔介质主要就是采用上述方法,即颗 粒状填充物和毛细管网络。该领域的相关研究主要有:Yang等^[45]提出了一种利用球形填充物模拟多孔介质的 新算法,即根据标准对数分布曲线选取随机大小、互不重叠的球体按照随机紧密堆积与随机松散堆积原理建立 人工介质。Liang等将连续的孔隙空间划分成不同级别的孔隙^[46],由此推导出特定孔隙和孔喉大小以及孔隙配 位数、孔隙与孔喉大小的相关性和空间排列的频数分布状况。这些特征值可以作为水分运动和毛细现象的网络 模型的输入数据。bannidis等^[47]采用 3D 描述技术来重现含油层岩石样品的孔隙和通道大小分布以及平均配位 数,并将其作为网络模型的输入参数来模拟多相流体的运动过程。

由于计算机科技的发展,通过软件建立人工介质也成为了一种研究多孔介质结构的方法。关于多孔介质随 机重建的软件产品,目前有 Smart Imaging Technologies 公司开发的一套名为 S3D 的软件。S3D 通过计算机随机模 拟的方法构造三维多孔介质并可计算得到孔隙大小分布等有关结构特征。

2 数字图像分析与处理

在采用上述方法获取土壤孔隙空间的数字图像后,还应根据图像处理软件的要求将其转换为便于软件处理 的图像格式,然后对其进行统计处理,得到建立网络模型所需的特征参数。

为了进行孔隙结构分析,首先要将图像中的孔隙和固体部分识别出来,即进行数字图像分割^[48,49]。若是 利用连续切片方法得到的图像,获得的真彩色图像需先转换成灰度图像,再分割成黑白二值图像(binary image) 以供孔隙结构分析; CT方法得到的灰度图像可以直接转化成二值图像。图像格式间的转换可以利用 Photoshop、 ImageSys、ImageTools 等软件完成。由灰度图像转化成二值图像需要选取合适的阈值。阈值的选择非常重要,因 为在同一图像分辨率条件下,灰度阈值的选择是决定二元图像能否真实反映孔隙结构的关键^[50]。阈值的选择 一般有目视法和程序法两种^[51~53]。最为常用的是选取一个或几个阈值,将灰度直方图分成若干类,认为灰度 值在某一类内的像素属于同一个物体,反之则被排除在物体之外。采用阈值分割法的优点是计算简单,而且总 能用封闭且连通的边界定义不交叠的区域^[54]。为了提高图像分割结果的精度,Vogel 和 Kretzschmar^[51]采用了一 种双阈值分割算法。

在进行数字图像的分割处理之后,即可编制有关程序或利用 Arc INFO、Mapinfo、Micromorph 等商品软件对 图像进行分析,以得到建立网络模型需要的有关数据。

3 模型建立与求解

在孔隙尺度上研究多孔介质特性的模型有多种,主要分为:基于基本原理的模型(first principle based),包括分子动力学方法、计算流体动力学方法、Boltzmann 点阵法、Lattice Gas 法;基于基本作用的模型(rule based,随机增长模型),包括基于渗透理论的模型(percolation based)、DLA 模型(diffusion limited aggregation)、逆 DLA 模型。以下重点介绍两种在土壤水文学研究中比较新颖的模型,即 Boltzmann 点阵法(Lattice-Boltzmann Approach)和与形态学相结合的网络模型方法。

3.1 Boltzmann 点阵法

Boltzmann 点阵法是模拟多孔介质中多相流及多组分运移的一种非常有效的方法。最早是由 Rothmann 和 Keller^[55]提出的。其理论基础是分子运动论和统计力学。Boltzmann 点阵法从微观粒子的尺度出发,建立离散的 速度模型,在满足质量、动量和能量守恒的条件下,得出粒子分布函数,然后对粒子分布函数进行统计计算, 得到压力、流速等宏观变量。其主要思想就是以简单规则的微观粒子运动代替复杂多变的宏观现象。Boltzmann 点阵法的演进过程主要分为两个步骤: 迁移:在某个时段内粒子由一个节点以恒定的速度运动到相邻节点;

碰撞:从相邻节点运动来的粒子在某一节点上发生碰撞,根据质量、动量和能量守恒规则改变粒子的速度, 然后各粒子又以改变后的速度迁移。这两个步骤交替循环,直到流场达到平衡。

在具体计算中,需根据多孔介质的数字图像划分网格,图像中的每个像素对应一个格子,利用格子上的灰度值判定每个格子点上的物质属性。根据位图中各像素上的灰度值,可统计得到孔隙率、有效孔径等结构参数^[56]。由于在不同的网格剖分下存在不同的平衡分布函数,采用 Boltzmann 点阵法建立的模型主要有:D1Q3, D2Q9,D2Q7,D2Q13,D3Q15,D3Q18,D3Q27等(D指维数,Q指粒子运动方向的总数)。

常用的三维 Boltzmann 点阵模型是 D3Q15,即选取 15 个速度向量 e_i (分别为面中心立方体的 14 个点的方向 以及一个中心点)。粒子分布函数 $f_i(x, t)$ 代表了 t 时刻以速度向量 e_i 的粒子出现在位置 x 处的粒子密度。流 体密度以 = $\sum_i f_i$ 表示,流体速度以 $u = \sum_i f_i e_i$ / 表示,其随时间和空间变化的演进方程为

$$f_i(x + e_i, t + 1) - f_i(x, t) = - [f_i^{(eq)}(x, t) - f_i(x, t)]$$

在所研究系统的入口及出口处按照压力边界条件设定恒定的密度 1和 $2^{[57,58]}$,则可以得到渗透系数的表达式, $K = 8 L^2 u_d / (3N)$, L 为沿水流方向经过的长度, N 为沿水流方向点阵的点的个数, u_d 是量纲一的 Darcy 速度, = 1 - 2。

从当前的研究进展与动态来看,Boltzmann 点阵模型具有较为广阔的应用前景:不仅可以用于模拟小尺度 多孔介质中多相流及多组分运移现象(如吸水排水过程、水力传导率函数、滞后现象等),还可通过流速场模拟 来定量研究单个孔隙中的水分运动状况。虽然有些研究表明采用规则的Boltzmann 点阵模拟低饱和度多孔介质 中的水分运动时结果往往不甚理想,但在其他情况下该方法还是非常有效的^[59]。Boltzmann 点阵模型的建立过 程相对较为复杂,其计算所花费的时间也相当长,有时甚至是孔隙网络模型计算时间的 10⁴ ~ 10⁵ 倍。

3.2 形态学网络模型

与形态学相结合的网络模型是将传统的网络模型与实测多孔介质的孔隙形态特征相结合的一种模型。形态 学网络模型克服了以往网络模型有关参数不确定性因素的影响,可以将直接测定的孔隙空间的形态特征作为网 络模型的输入参数,并预测非饱和土壤的水力性质。

根据多孔介质二维或三维的数字图像得到的孔隙形态特征,可以建立不同结构的网络模型:如以孔隙节点、中间轴和孔喉直径为相关要素的多孔介质骨架模型,其建立方法有拓扑切片法(topological thinning)^[60]和距离转换法(distance transformation);采用不规则的几何形状,以不同直径的球体和毛细管分别表示孔隙体和孔喉分布的毛细管网络模型^[61]。相对于以上这些模型,更为常见的网络模型则采用布置在规则网格上的圆柱状毛细管来表示多孔介质的孔隙空间。这种模型虽然只是等价的形态学网络模型,但是其建立和求解要简便很多。这种规则的网络模型一般采用面中心立方体网格^[11],每个网格就是一个基本的计算单元。单元节点之间的连接线段称为配位键。每个配位键代表一个具有一定长度和半径的圆柱状孔隙,通常假定两节点间半径不变、节点本身的体积不考虑。生成网格时,首先要使网格的配位键长度和有效配位数与图像分析得到的孔隙空间的形态学特征一致。利用图像分析得到的孔隙大小分布可以得到各级别孔隙的体积以及配位键长度、有效配位数与孔隙大小分布之间的函数关系。由此建立的网络模型的连通性函数就能准确地反映实测的形态学特征。根据Young-Laplace方程得到压力水头,根据 Poiseuille 定律得到两相邻节点间的毛细管中的水流通量,进而就可以模拟网络模型中的水分运动过程^[1]。

形态学网络模型在预测小尺度多孔介质的水分特征曲线、水力传导率函数等方面为我们提供了一种比较简 单而且有效的方法。与 Boltzmann 点阵法相比,网络模型的建立过程要简单得多,运算时间也大为缩短,其模 拟精度虽不及 Boltzmann 点阵法但是也相当高。现有的形态学网络模型一般都对孔隙的几何形态和拓扑特征作 了较多的简化,这样一来虽然计算工作量大大降低,但也使得模型在模拟滞后现象、吸水排水现象等方面存在 一定的不足,这些都需要在今后的研究中进一步完善。

4 展 望

孔隙网络模型已经在国外土壤水文学及相关领域的研究中得到了较多的应用并取得了一定的进展。这种模型能直观、准确地反映发生在孔隙尺度上的物理、化学等过程,具有其他方法无可比拟的优点,因此是一种具有比较广阔应用前景的研究方法。结合目前国内外的研究进展,尝试对今后的研究方向作出以下展望;

(1) 关于孔隙空间数字图像的获取方法:由于 CT、NMR 等非破坏性方法与连续切片图像分析方法相比的 主要优点是简便、快捷,不会破坏原状样品的有关特性(如孔隙结构特征),因此随着技术方法的不断更新和新 型实验仪器的投入使用,采用非破坏性方法获取更具代表性的土壤孔隙空间结构特征将是未来的发展方向。

(2)对检测精度的要求将进一步提高。为使网络模型能更逼真地反映实际的介质特征,就必须在更小的尺度上获取并处理图像,以得到更为丰富的数据资料。目前已有的研究主要集中在 50~100 µm 的尺度范围上。 随着 CT 等检测仪器的不断发展更新,研究尺度必将进一步缩小。

(3) 图像处理是构建孔隙网络模型过程中极为重要的一步,能否从获得的图像中准确识别出孔隙及其结构 特征关系到整个模型的成败和精度。所以,有必要对现有的图像分析程序加以改进,以便获取更符合真实情况 的孔隙几何、拓扑参数。

(4)现有的形态学网络模型一般都对孔隙结构特征作了较大的简化,因此在模拟滞后作用、吸水排水过程 等时存在一定的缺陷。在今后的研究中,应考虑对模型加以改进,在保持模型结构尽可能简单的情况下能更逼 真地反映实际的孔隙几何与拓扑特征。

(5) 网络模型目前主要应用于石油科学与工程领域,在模拟多孔介质中多相流问题方面已显示出相当大的 优越性,并积累了许多成功经验。这为其今后在其它相关学科如土壤学、水文学、材料科学、化学工程等领域 中的应用和发展奠定了良好的基础。可以预见,随着不同学科领域的相互交叉、渗透,网络模型的应用领域还 会得到进一步的拓展和深入。

参考文献:

- Vogel HJ, Roth K. A new approach for determining effective soil hydraulic functions[J]. European Journal of Soil Science, 1998, 49: 547 -556.
- [2] Fatt I. The network model of porous media . Capillary characteristics [J]. Petroleum Transactions, AIME, 1956, 207: 144 159.
- [3] Fatt I. The network model of porous media . Dynamic properties of a single size tube network [J]. Petroleum Transactions, AIME, 1956, 207: 160 163.
- [4] Fatt I. The network model of porous media . Dynamic properties of networks with tube radius distribution[J]. Petroleum Transactions, AIME, 1956, 207: 164 - 181.
- [5] Chartzis I, Dullien F A L. Modeling pore structure by 2-D and 3-D networks with application to sandstone [J]. Journal of Canadian Petroleum Technology, 1977, 16: 97 - 108.
- [6] Chandler R, Koplik J, Lerman K, et al. Capillary displacement and percolation in porous media [J]. Journal of Huid Mechanics, 1982, 119: 249 - 267.
- [7] Ferrand L A, Celia M A. The effect of heterogeneity on the drainage capillary pressure-saturation [J]. Water Resources Research, 1992, 28: 859 - 870.
- [8] Rajarama H, Ferrand L A, Celia M A. Prediction of relative permeabilities for unconsolidated soil using pore scale network models[J]. Water Resources Research, 1997, 33: 43 - 52.
- [9] Blunt M, King P. Macroscopic parameters from simulations of pore scale flow[J]. Physical Review A, 1990, 42: 4780 4787.
- [10] Fischer U, M Celia. Prediction of relative and absolute permeabilities for gas and water retention curves using a pore-scale network model [J].
 Water Resources Research, 1999, 35: 1089 1100.
- [11] Jerauld G R, Salter S J. The effect of pore-structure on hysteresis in relative permeability and capillary pressure : pore level modeling [J]. Transport in Porous Media , 1990 , 5 : 103 151.
- [12] Bryant S P, King R, Mellor D W. Network model evaluation of permeability and spatial correlation in a real random sphere packing [J]. Transport in Porous Media, 1993, 11: 53 - 70.
- [13] Reeves P C, Celia M A. A functional Relationship between capillary pressure, saturation, and interfacial areas as revealed by a pore-scale network model[J]. Water Resources Research, 1996, 32: 2345 - 2358.
- [14] Lowry M I, Miller C T. Pore-scale modeling of nonwetting-phase residual in porous media [J]. Water Resources Research, 1995, 31: 455 -473.
- [15] Hilpert M, Miller C T. Pore-morphology-based simulation of drainage in totally wetting porous media [J]. Advances in Water Resources, 2001, 24: 243 - 255.
- [16] Dillard L A, Blunt M. Development of a pore network simulation model to study nonaqueous phase liquid dissolution[J]. Water Resources Research, 2000, 36: 439 - 454.
- [17] Kwiecien MJ, Macdonald IF, Dullien FAL. Three-dimensional reconstruction of porous media[J]. Chem Eng Sci, 1990, 36: 57 73.
- [18] Cousin I, Levtiz P, Bruand A. Three-dimensional analysis of loamy-clay soil using pore and chord distribution[J]. Eur J Soil Sci , 1996, 47: 439 - 452.
- [19] Vogel H J, Roth K Quantitative morphology and network representation of soil pore structure [J]. Advances in Water Resources, 2001, 24: 233 - 242.
- [20] Lin C, Cohen M H. Quantitative methods for micro-geometric modeling[J]. J Appl Phys, 1982, 53: 4152 4165.
- [21] Yao J, Frykman P, Kalaydjian F, et al. High-order moments of the phase function for real and reconstructed model porous-media-a comparison[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1993, 156: 478 - 490.
- [22] Liang Z R, Phillippi P C, Fernandes C P, et al. Prediction of permeability from the skeleton of three-dimensional pore structure [J]. SPE Reservoir Evaluation and Engineering, 1999, 2: 161 - 168.
- [23] Hidajat I, Rastogi A, Singh M, et al. Transport properties of porous media from thirr sections [J]. SPE 69623, SPE LACPEC, 2001, March 25 27.
- [24] 李德成, Velde B, 张桃林. 利用土壤的序列数字图像技术研究孔隙小尺度特征[J]. 土壤学报, 2003, 40(4): 524 528.

- [25] Petrovic A M, Siebert J E, Rieke P E. Soil bulk density analysis in three dimensions by computed tomogrphic scanning[J]. Soil Science Society of America Journal, 1982, 46: 445 449.
- [26] Flannery B P, Deckman H W, Roberg W G, et al. Three-dimensional x-ray micro-tomography[J]. Science, 1987, 237: 1469 1444.
- [27] Spanne P, Thovert J F, Jacquin C J, et al. Synchrotron computed microtomography of porous media [J]. Physical Review Letter, 1994, 73: 2001 2004.
- [28] Coles M E, Hazlett R D, Spanne P, et al. Pore level imaging of fluid transport using synchrotron X-ray micro-tomography [J]. Journal of Petroleum Science and Engineering, 1998, 19: 55 63.
- [29] Bottomley P A, Rogers H H, Forster T H. NMR imaging shows water distribution and transport in plant root systems in situ[J]. Proc Natl Acad Sci , 1986 , 83 : 87 - 89.
- [30] Rogers H H, Bottomley P A. In situ nuclear magnetic resonance imaging of roots: influence of soil type, ferromagnetic particles, and soil water[J]. J Agron. 1987, 79: 957 - 965.
- [31] Issa B, Mansfield P. Permeability estimation from TI mapping [J]. Magn Reson Imag, 1994, 12: 213 214.
- [32] Howard J J. Wettability and fluid saturations determined from NMR T1 distributions[J]. Magn Resort Imag, 1994, 12: 197 200.
- [33] Van As H, Van Dusschoten D. NMR methods for imaging of transport processes in micro-porous systems [J]. Geoderma, 1997, 80: 389 -403.
- [34] Davies S, Packer KJ. Pore-size distributions from nuclear magnetic resonance spin-lattice relaxation measurements of fluid-saturated porous solids. I. Theory and simulation[J]. Journal of Applied Physics, 1990, 67: 3163.
- [35] Davies S, Kalam M Z, Packer KJ, *et al.* Pore-size distributions from nuclear magnetic resonance spin-lattice relaxation measurements of fluid-saturated porous solids. Applications to reservoir core samples[J]. Journal of Applied Physics, 1990, 67: 3171.
- [36] Kenyon W E. Petrophysical principles of applications of NMR logging[J]. The Log Analyst, 1997, 38: 21 43.
- [37] Mantle M D, Sederman A J, Gadden L F. Single- and two-phase flow in fix-bed reactors: MRI flow visualization and lattice-Boltzmann simulations[J]. Chemical Engineering Science, 2001, 56: 523 - 529.
- [38] Kutsovsky Y E, Scriven L E, Davis H Y. NMR imaging of velocity profiles and velocity distributions in bead packs[J]. Physical Fluids, 1996, 8: 863 871.
- [39] Park J, Gbbs SJ. Mapping flow and dispersion in a packed porous column[J]. AICHE Journal, 1999, 45: 655 660.
- [40] Sederman A J, Johns M L, Alexander P, et al. Stricture-flow correlations in packed beds [J]. Chemical Engineering Science, 1997, 53: 2117 - 2250.
- [41] Adler P.M. Porous Media: Geometry and Transports[M]. Boston: Butterworth Heinemann, 1992.
- [42] Adler P M, Jacquin C G, Thovert J F. The formation factor of reconstructed porous media[J]. Water Resources Research, 1992, 28:1571 1576.
- [43] Adler PM, Jacquin C G, Quiblier J A. Flow in simulated porous media [J]. International Journal of Multiphase Flow, 1990, 16: 691 712.
- [44] Chongxun Pan. Use of Pore-scale Modeling to Understand Flow and Transport in Porous Media[D]. North Carolina: University of North Carolina, Department of Environmental Sciences & Engineering, 2003.
- [45] Yang A, Miller C T, Turcoliver L D. Simulation of correlated and uncorrelated packing of random size spheres[J]. Physical Review E, 1996, 53: 1516 - 1524.
- [46] Liang Z, Ioannidis M A, Chatzis I. Permeability and electrical conductivity of porous media from 3D stochastic replicas of the microstructure [J]. Chem Eng Sci, 2000, 55: 5247 - 5262.
- [47] Ioannidis M A, Kwiecien MJ, Chatzis I. Statistical analysis of the porous microstructure as a method for estimating reservoir permeability [J]. Journal of Petroleum Science and Engineering, 1996, 16: 251 - 261.
- [48] 刘建立,徐绍辉,刘 慧,等.预测土壤水力性质的形态学网络模型应用研究[J].土壤学报,2004,41(2):218-224.
- [49] 冯 杰, 郝振纯. CT扫描确定土壤大孔隙分布[J]. 水科学进展, 2002, 13(5): 611-617.
- [50] 李德成, Velde B, Delerue J F, et al. 用于研究土壤孔隙三维结构的连续数字图像的制备[J]. 土壤与环境, 2001, 10(2): 108 110.
- [51] Vogel HJ, Kretzschmar A. Topological characterization of pore space in soil-sample preparation and digital image-processing[J]. Geoderma, 1996, 73: 23 28.

- [52] Velde B, Moreaue E, Terribile F. Pore networks in an Italian vertisol: quantitative characterization by two dimensional image analysis [J]. Geoderma, 1996, 72: 271 - 285.
- [53] Moreaue E, Velde B, Terribile F. Comparison of 2D and 3D images of fractures in a vertisol[J]. Geoderma, 1999, 92: 55 72.
- [54] 杨 加,吴祈耀,田 捷,等.几种图像分割算法在 CT 图像分割上的实现和比较[J].北京理工大学学报,2000,20:720-724.
- [55] Rothman D H, Keller J M. Immiscible cellular-automaton fluids[J]. Journal of statistical physics, 1988, 52: 1119 1127.
- [56] 钱吉裕,李 强,宣益民,等.确定多孔介质流动参数的格子 Boltzmann 方法[J]. 工程热物理学报, 2004, 25: 655 657.
- [57] Zou Q, He X. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model[J]. Physics of Fluids, 1997, 9:1591 1 598.
- [58] Maier R S, Bernard R S, Grunau D W. Boundary conditions for the lattice Boltzmann method[J]. Phys Fluids, 1996, 8: 1788 1801.
- [59] Vogel H J, Tolke J, Schulz V P, et al. Comparison of a Lattice-Boltzmann Model, a Full-Morphology Model, and a Pore Network Model for Determining Capillary Pressure-Saturation Relationships[J]. Vadose Zone Journal, 2005, 4: 380 - 388.
- [60] Ma C M, Sonka M. A fully parallel 3D thinning algorithm and its applications [J]. Comput Vis Image Underst, 1996, 64: 420 433.
- [61] Lin CL, Miller J D. Pore structure and network analysis of filter cake [J]. Chem Eng J, 2000, 80: 221 231.

Recent advances in pore-scale network modeling in vadose zone hydrology

LU Fei , LIU Jian-li

(Institute of Soil Science, Chinese Academy of Sciences, Nanjing 210008, China)

Abstract: The effective hydraulic properties of unsaturated soil are the key parameters in the quantitative modeling of water flow and solute transport in the vadose zone, which can be predicted by the pore network model. The major advantages of the pore network model are the direct and exact representation of the pore space topology and the pore-scale modeling of transport phenomena in soil. In recent years, the considerable progresses have been made in the image acquisition and processing, the pore network generation and the numerical solution techniques of the pore-scale models. The recent advances in pore network modeling in the vadose hydrology are reviewed, and the problems and the future development of this technique are also discussed.

Key words: pore scale; network model; hydraulic properties of soil; vadose zone hydrology

^{*} The study is financially supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 40401027) and the National Basic Research Program of China (No. 2005CB121103).