

基于准不可压相场理论的精确平衡 两相格子 Boltzmann 方法*

李春熠 郭照立†

(华中科技大学, 煤燃烧国家重点实验室, 武汉 430074)

(2024 年 10 月 29 日收到; 2025 年 1 月 15 日收到修改稿)

相比于基于不可压相场的两相格子 Boltzmann 方程 (LBE) 模型, 基于准不可压相场理论的 LBE 模型能够严格保证局部质量守恒. 然而, 以往准不可压相场 LBE 模型不具有精准平衡性质, 两相界面附近存在虚假速度且界面分布不满足热力学平衡. 针对这一问题, 本文通过重新设计求解相场方程的平衡态分布函数和源项, 实现了离散尺度的精准平衡, 建立了准不可压相场理论的精准两相 LBE 模型. 对平界面问题和稳态液滴问题的数值模拟表明, 该模型能消除虚假速度, 具有良好的平衡性能. 对分层泊肃叶流的数值模拟证明了该模型模拟动态问题及大黏度比问题的准确性. 此外还比较了不同表面张力和不同黏度混合规则对模型的影响, 结果表明, 使用 $F_s = \mu \nabla \phi$ 计算表面张力无法消除虚假速度; 模拟动态问题时, 使用阶跃混合规则计算混合黏度可以得到更准确的结果. 最后, 对相分离问题的数值模拟表明, 该模型可以严格保证局部质量守恒.

关键词: 两相流, 格子 Boltzmann 方法, 准不可压相场模型**PACS:** 47.11.Qr, 47.61.Jd**DOI:** 10.7498/aps.74.20241513**CSTR:** 32037.14.aps.74.20241513

1 引言

基于介观动力学理论的格子 Boltzmann 方程 (LBE) 方法是多相流模拟的一类有效研究手段, 如今已发展出多种有效的 LBE 模型^[1-4]. 然而, 常规多相 LBE 模型还存在一些根本问题, 如界面捕获不准确和虚假速度问题等. 理论上, 当系统达到平衡状态时, 化学势应为常数, 流体失去驱动力从而速度为零. 然而, 在现有许多多相 LBE 模型中, 界面附近的虚假速度无法完全消除^[5-13]. 一般情况下, 虚假速度远小于问题的特征速度, 对模拟的影响较小, 但在某些情况下, 虚假速度会导致数值不稳定和非物理现象, 例如, 伪势模型^[7,8]的两相密度分布会明显偏离麦克斯韦共存曲线, 相场模型^[9]中也

观察到了类似的非物理现象.

为了确定虚假速度来源并减轻其影响, 人们已经做出了多种尝试. 例如, Cristea 和 Sofonea^[10]认为有限差分型 LBE 模型产生虚假速度的原因在于计算演化方程中空间导数的一阶迎风格式, 他们引入了一个修正力项用于解决这个问题. Wagner^[11]将虚假速度归因于作用力的离散化, 并指出使用势形式的表面张力可以消除虚假速度. 然而, 该方法存在数值不稳定问题, 需要加入与数值黏度和速度有关的校正项来改善. Shan^[12]指出伪势模型中的虚假速度来源于作用力项中梯度算子离散格式的各向同性不足. 基于这个观点, Sbragaglia 等^[13]开发了高阶各向同性离散格式, 降低了伪势模型的虚假速度.

以往研究表明, LBE 的虚假速度来源于离散

* 华中科技大学交叉研究支持计划 (批准号: 2023JCYJ002) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zlguo@hust.edu.cn

误差产生的虚假力. Guo 等^[14]对自由能 LBE 模型进行了严格的数学分析, 得出了总力不平衡方程. 结果表明, 理想气体压力梯度和表面张力在离散尺度上的不平衡导致了虚假速度. 随后 Guo^[15]进一步得出了不平衡净力的结构, 提出了能完全消除虚假速度的精准平衡 (well-balanced, WB) LBE 模型. Zhang 等^[16]在此基础上提出了改进模型, 提高了数值稳定性. 受 WB-LBE 模型的启发, Zheng 等^[17]提出了相场模型中平衡力的处理方式, 通过重构与 Navier-Stokes 方程对应的 LBE, 建立了相场 WB-LBE 模型. 最近, Ju 等^[18]通过分析发现, 相场 LBE 模型的虚假速度来自求解相场 Cahn-Hilliard (CH) 方程的 LBE, 并重新设计了相应的 LBE, 建立了另一种相场 WB-LBE 模型.

目前已有的相场 WB-LBE 模型已被证明能够很好地消除虚假速度. 然而, 上述相场 WB-LBE 模型都是基于不可压相场模型开发的, 当两种流体具有不同密度时, 无法保证局部质量守恒^[19]. Yang 和 Guo^[3]基于准不可压相场模型^[20]提出了能满足局部质量守恒的 LBE 模型, 但仍会产生较大的虚假速度. 因此, 本文的目的在于构建一个基于准不可压相场理论的 WB-LBE 模型.

本文安排如下. 第 2 节将简要介绍准不可压相场 LBE 模型; 第 3 节将分析虚假速度的来源, 提出精确平衡的 LBE 模型, 并通过 Chapman-Enskog (CE) 展开验证了所提出模型的平衡性质; 第 4 节将给出基础算例来验证我们的模型; 第 5 节为总结部分.

2 基于准不可压相场理论的 LBE 模型

2.1 准不可压相场理论

相场理论用自由能函数来描述两相系统的热力学行为, 它可以由标记不同相流体的序参数 ϕ 表示:

$$F(\phi) = \int_{\Omega} \left[\psi(\phi) + \frac{\kappa}{2} |\nabla \phi|^2 \right] d\Omega, \quad (1)$$

其中 $\psi(\phi)$ 是体相自由能密度, κ 是表面张力系数, Ω 是控制体积. 对于两相系统, 体相自由能密度可以采用双势阱的形式^[21]:

$$\psi(\phi) = \beta(\phi - \phi_1)^2(\phi - \phi_2)^2, \quad (2)$$

其中 ϕ_1 和 ϕ_2 分别为第 1 相和第 2 相的序参数, 一

般有 $\phi_1 = 1$ 和 $\phi_2 = 0$. β 是与 κ 相关的常数, 它们满足以下关系:

$$\sigma = \frac{|\phi_1 - \phi_2|^3}{6} \sqrt{2\kappa\beta}, \quad (3)$$

$$W = \frac{1}{|\phi_1 - \phi_2|} \sqrt{\frac{8\kappa}{\beta}}, \quad (4)$$

其中 σ 为表面张力, W 表示界面厚度. 根据自由能函数可以得到化学势 μ , 即:

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{\delta F(\phi)}{\delta \phi} = \frac{\partial \psi}{\partial \phi} - \kappa \nabla^2 \phi \\ &= 4\beta(\phi - \phi_1)(\phi - \phi_2) \left(\phi - \frac{\phi_1 + \phi_2}{2} \right) - \kappa \nabla^2 \phi. \end{aligned} \quad (5)$$

序参数的演化满足 Cahn-Hilliard (CH) 方程:

$$\partial_t \phi + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla \mu), \quad (6)$$

其中 $\mathbf{u}$ 是流体速度, λ 是迁移系数.

在不可压相场理论中, 描述流体的控制方程还包括不可压 Navier-Stokes (NS) 方程:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (7)$$

$$\partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u})$$

$$= -\nabla p + \nabla \cdot \left\{ \rho \nu \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right] \right\} + \mathbf{F}, \quad (8)$$

其中 p 是动力学压力; $\mathbf{F} = \mathbf{F}_s + \mathbf{G}$ 是总力, 包括表面张力 $\mathbf{F}_s$ 和外部体积力 $\mathbf{G}$. Zhang 等^[4]指出, 表面张力采用势能形式时, 可以得到更小的虚假速度. 因此, 如无特别说明, 我们在模拟中均使用 $\mathbf{F}_s = -\phi \nabla \mu$ 形式的表面张力, 并利用各向同性中心差分格式 (41) 离散梯度算子. ρ 和 ν 分别是混合流体的密度和运动黏度, 采用线性混合规则可以表示为

$$\rho = \frac{\phi - \phi_2}{\phi_1 - \phi_2} \rho_1 + \frac{\phi_1 - \phi}{\phi_1 - \phi_2} \rho_2, \quad (9a)$$

$$\rho \nu = \frac{\phi - \phi_2}{\phi_1 - \phi_2} \rho_1 \nu_1 + \frac{\phi_1 - \phi}{\phi_1 - \phi_2} \rho_2 \nu_2, \quad (9b)$$

其中 ρ_1 和 ρ_2 分别表示第 1 相和第 2 相流体的密度, ν_1 和 ν_2 分别表示第 1 相和第 2 相流体的运动黏度. 由于 ϕ 的实际物理意义为第 1 相的体积分, 根据密度的定义, 混合密度一般采用线性混合规则, 而黏度则可采用不同的混合方法, 如倒数规则、指数规则和阶跃规则等, 将在后文进行比较. 上述模型已在多相流领域得到广泛应用. 然而, 将 (7) 式和 (9a) 代入 (6) 式中会得到:

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \frac{\rho_1 - \rho_2}{\phi_1 - \phi_2} \nabla \cdot (\lambda \nabla \mu). \quad (10)$$

显然, 当 $\rho_1 \neq \rho_2$ 时, 不可压相场模型无法保证局部质量守恒.

准不可压相场模型^[20]不再假设速度散度为 0, 而是取

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = -\gamma \nabla \cdot (\lambda \nabla \mu), \quad (11)$$

其中 γ 是和两相密度相关的系数, 可表示为

$$\gamma = \frac{\rho_1 - \rho_2}{\phi_1 \rho_2 - \phi_2 \rho_1}. \quad (12)$$

将 (9) 式、(11) 式和 (12) 式代入 (6) 式中, 可以得到:

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (13)$$

这表明准不可压相场模型严格满足局部质量守恒.

2.2 准不可压相场 LBE 模型

Yang 和 Guo^[3] 基于准不可压相场理论给出了相应的 LBE 模型, 使用两套分布函数分别描述流动和相场, 求解 NS 方程和 CH 方程的 LBE 分别为

$$\begin{aligned} & f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{x}, t) \\ &= -\frac{1}{\tau_f} \left[f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) \right] \\ &+ \delta_t \left[1 - \frac{1}{2\tau_f} \right] F_i(\mathbf{x}, t), \quad (14) \\ & g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - g_i(\mathbf{x}, t) \\ &= -\frac{1}{\tau_g} \left[g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) \right] \\ &+ \delta_t \left[1 - \frac{1}{2\tau_g} \right] G_i(\mathbf{x}, t), \quad (15) \end{aligned}$$

式中 $f_i(\mathbf{x}, t)$ 和 $g_i(\mathbf{x}, t)$ 表示在 t 时刻位于 $\mathbf{x}$ 处的 i 方向的分布函数, 分别为压力分布函数和序参数分布函数; τ_f 和 τ_g 分别是黏度和迁移系数相关的无量纲松弛时间; f_i^{eq} 和 g_i^{eq} 为平衡态分布函数, 定义为

$$f_i^{\text{eq}} = \omega_i [p + c_s^2 \rho s_i(\mathbf{u})], \quad (16)$$

$$g_i^{\text{eq}} = \omega_i \phi s_i(\mathbf{u}) + \begin{cases} \phi + (\omega_i - 1) \alpha \mu, & i = 0 \\ \omega_i \alpha \mu, & i \neq 0 \end{cases}, \quad (17)$$

其中

$$s_i(\mathbf{u}) = \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{\mathbf{u} \mathbf{u} : (\mathbf{e}_i \mathbf{e}_i - c_s^2 \mathbf{I})}{2c_s^4}. \quad (18)$$

这里 α 为可调参数, 一般取为 1; $c_s = c/\sqrt{3}$ 是格子声速;

ω_i 为权系数; $\mathbf{e}_i$ 是第 i 个离散速度. 以 D2Q9 模型为例, 权系数为 $\omega_0 = 4/9$, $\omega_{1-4} = 1/9$ 和 $\omega_{5-8} = 1/36$, 离散速度为 $\mathbf{e}_0 = (0, 0)$, $\mathbf{e}_{1-4} = c \{\cos[(i-1)\pi/2], \sin[(i-1)\pi/2]\}$ 以及 $\mathbf{e}_{5-8} = \sqrt{2}c \{\cos[(2i-1)\pi/4], \sin[(2i-1)\pi/4]\}$, 其中 $c = \delta_x/\delta_t$, δ_x 和 δ_t 分别为空间和时间步长. F_i 和 G_i 是源项, 定义为

$$\begin{aligned} F_i &= (\mathbf{e}_i - \mathbf{u}) \cdot [\omega_i \mathbf{F} [1 + s_i(\mathbf{u})] + \omega_i s_i(\mathbf{u}) c_s^2 \nabla \rho] \\ &- \omega_i c_s^2 \rho \gamma \nabla \cdot (\lambda \nabla \mu), \quad (19) \end{aligned}$$

$$G_i = -\frac{\omega_i \phi}{c_s^2 \rho} (\mathbf{e}_i - \mathbf{u}) \cdot (\nabla p - \mathbf{F}) [1 + s_i(\mathbf{u})]. \quad (20)$$

宏观量包括压力 p 、速度 $\mathbf{u}$ 和序参数 ϕ , 可通过下式统计得到:

$$p = \sum_i f_i + \frac{\delta t}{2} c_s^2 (\mathbf{u} \cdot \nabla \rho - \gamma \rho \nabla \cdot (\lambda \nabla \mu)), \quad (21)$$

$$\mathbf{u} = \frac{1}{c_s^2 \rho} \left[\sum_i \mathbf{e}_i f_i + \frac{\delta t}{2} c_s^2 \mathbf{F} \right], \quad (22)$$

$$\phi = \sum_i g_i. \quad (23)$$

通过 Chapman-Enskog (CE) 展开, 模型可恢复宏观方程, 同时得到运动黏度和迁移系数的计算式:

$$\nu = c_s^2 (\tau_f - 0.5) \delta_t, \quad (24)$$

$$\lambda = c_s^2 \alpha (\tau_g - 0.5) \delta_t. \quad (25)$$

为方便, 我们称上述 LBE 模型为 YG-LBE 模型.

3 基于准不可压相场理论的精确平衡 LBE 模型

3.1 虚假速度来源

与大多数两相 LBE 模型类似, YG-LBE 模型也存在虚假速度. Ju 等^[18] 分析发现, 其根源在于求解 CH 方程的 LBE 中平衡态和源项在离散尺度上不平衡. 该模型通过 CE 展开所恢复的宏观方程为^[18]

$$\partial_t \phi + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) = \lambda \nabla \cdot (\nabla \mu + \Gamma_1 - \Gamma_2), \quad (26)$$

其中

$$\Gamma_1 = \partial_{t1} (\phi \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u} \mathbf{u}) = \frac{\phi}{\rho} (\mathbf{F} - \nabla p), \quad (27)$$

$$\Gamma_2 = \sum_i \mathbf{e}_i G_i^{(0)} = \frac{\phi}{\rho} (\mathbf{F} - \nabla p). \quad (28)$$

显然 Γ_1 和 Γ_2 的表达式相同, 通常可以认为它们相互抵消. 然而 Γ_1 产生于 LBE 的碰撞迁移过程, 源

于平衡态分布函数; 而 Γ_2 是源项中的添加项, 目的是为了消除 Γ_1 . 但二者实质上来源不同, 在数值网格上其离散模板不同, 因此会产生非零的化学势梯度, 从而导致虚假速度的出现.

3.2 精确平衡 LBE 模型

上述分析表明, 产生 Γ_1 和 Γ_2 的根源在于平衡态分布函数 (17) 引入了 $s_i(\mathbf{u})$ 来恢复 CH 方程中的对流项 $\nabla \cdot (\phi \mathbf{u})$. $s_i(\mathbf{u})$ 导致了 Γ_1 的出现, 因此需要引入人工项 Γ_2 来抵消它. 解决办法是^[18] 移除平衡态分布函数中的 $s_i(\mathbf{u})$, 通过重新设计源项来恢复准确的对流项. 这样 Γ_1 不再出现, 也就不再需要人工项 Γ_2 . 基于上述思路, 我们重新设计了求解 CH 方程的 LBE, 发展了一个基于准不可压相场理论的精确平衡模型.

求解 CH 方程的新 LBE 为^[22]

$$\begin{aligned} & g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - g_i(\mathbf{x}, t) \\ &= -\frac{1}{\tau_g} [g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)] + \delta_t G_i(\mathbf{x}, t) \\ &+ \frac{\delta_t^2}{2} \partial_t G_i(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (29)$$

其中平衡态分布函数不再包含 $s_i(\mathbf{u})$, 定义为

$$g_i^{\text{eq}} = \begin{cases} \phi + (\omega_i - 1) \alpha \mu, & i = 0, \\ \omega_i \alpha \mu, & i \neq 0. \end{cases} \quad (30)$$

为了准确恢复 CH 方程, 新的源项定义为

$$G_i = \omega_i [\nabla \cdot (\phi \mathbf{u})] \left[-1 + \frac{\mathbf{I} : (\mathbf{e}_i \mathbf{e}_i - c_s^2 \mathbf{I})}{2c_s^2} \right]. \quad (31)$$

序参数的计算式为

$$\phi = \sum_i g_i. \quad (32)$$

为分析 LBE (29) 式对应的宏观方程, 对其进行 CE 分析. 首先引入如下的多尺度展开:

$$g_i = g_i^{(0)} + \varepsilon g_i^{(1)} + \varepsilon^2 g_i^{(2)} + \dots, \quad (33)$$

$$\partial_t = \varepsilon \partial_{t0} + \varepsilon^2 \partial_{t1}, \quad \nabla = \varepsilon \nabla_0, \quad G_i = \varepsilon G_i^{(0)}. \quad (34)$$

对 (29) 式应用 Taylor 展开, 可以得到:

$$D_i g_i + \frac{\delta_t}{2} D_i^2 g_i = -\frac{1}{\delta_t \tau_g} (g_i - g_i^{\text{eq}}) + G_i + \frac{\delta_t}{2} G_i, \quad (35)$$

其中 $D_i = \partial_t + \mathbf{e}_i \cdot \nabla$. 将 (33) 式和 (34) 式代入 (35) 式中, 可以得到不同尺度上的方程:

$$O(\varepsilon^0) : g_i^{(0)} = g_i^{\text{eq}}, \quad (36a)$$

$$O(\varepsilon^1) : D_{i0} g_i^{(0)} = -\frac{1}{\delta_t \tau_g} g_i^{(1)} + G_i^{(0)}, \quad (36b)$$

$$\begin{aligned} O(\varepsilon^2) : & \partial_{t1} g_i^{(0)} + D_{i0} g_i^{(1)} + \frac{\delta_t}{2} D_{i0}^2 g_i^{(0)} \\ &= -\frac{1}{\delta_t \tau_g} g_i^{(2)} + \frac{\delta_t}{2} \partial_{t0} G_i^{(0)}. \end{aligned} \quad (36c)$$

根据 (36b) 式, 可将 (36c) 式写为

$$\partial_{t1} g_i^{(0)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau_g}\right) D_{i0} g_i^{(1)} + \frac{\delta_t}{2} \mathbf{e}_i \cdot \nabla_0 G_i^{(0)} = -\frac{1}{\delta_t \tau_g} g_i^{(2)}. \quad (37)$$

根据平衡态分布函数 g_i^{eq} 和源项 G_i 的定义, 可以得到如下的速度矩:

$$\sum_i g_i^{(0)} = \phi, \quad \sum_i \mathbf{e}_i g_i^{(0)} = 0, \quad \sum_i \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i g_i^{(0)} = c_s^2 \alpha \mu \mathbf{I}, \quad (38a)$$

$$\sum_i g_i^{(1)} = \sum_i g_i^{(2)} = 0, \quad \sum_i \mathbf{e}_i g_i^{(1)} = -\delta_t \tau_g c_s^2 \alpha \nabla \mu, \quad (38b)$$

$$\sum_i G_i^{(0)} = -\nabla_0 \cdot (\phi \mathbf{u}), \quad \sum_i \mathbf{e}_i G_i^{(0)} = 0, \quad (38c)$$

对 (36b) 式和 (37) 式求零阶矩, 并利用 (38) 式, 可以得到:

$$\partial_{t0} \phi + \nabla_0 \cdot (\phi \mathbf{u}) = 0, \quad (39a)$$

$$\partial_{t1} \phi = \nabla_0 \cdot [c_s^2 \alpha \delta_t (\tau_g - 0.5) \nabla_0 \mu]. \quad (39b)$$

联立 (39a) 式和 (39b) 式, 得到如下的 CH 方程:

$$\partial_t \phi + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla \mu). \quad (40)$$

从上述推导中可以看到, 当前模型在恢复宏观方程的过程中避免了不平衡项的产生, 可以实现离散尺度上的精确平衡.

为了计算方便并保证二阶空间精度, 本文均采用各向同性中心差分格式来离散梯度算子和 Laplace 算子:

$$\nabla \phi = \frac{1}{c_s^2 \delta_t} \sum \omega_i \mathbf{e}_i \phi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t), \quad (41a)$$

$$\nabla^2 \phi = \frac{2}{c_s^2 \delta_t} \sum \omega_i [\phi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t) - \phi(\mathbf{x})], \quad (41b)$$

其中 ϕ 可以是任意物理量.

为方便, 本文称该模型为 well-balanced (WB)-LBE 模型.

4 数值验证

本节将模拟几个典型算例, 验证 WB-LBE 的性能, 并与 YG-LBE 模型进行比较.

4.1 平界面问题

首先模拟了一个 x - y 坐标系下的平界面问题. 计算区域是一个 $L_x \times L_y = 30 \times 128$ 的矩形区域, L_x 和 L_y 分别为区域宽度和高度. 计算网格为 $N_x \times N_y = 30 \times 128$. 初始时第 1 相分布在中心区域, 其余空间充满第 2 相. 初始的序参数根据下式设置:

$$\phi_0 = \phi_2 + 0.5(\phi_1 - \phi_2) \left[\tanh\left(2\frac{y-y_1}{W}\right) + \tanh\left(2\frac{y-y_2}{W}\right) \right], \quad (42)$$

其中 $y_1 = N_y/4$ 和 $y_2 = 3N_y/4$ 分别是第 1 相所在区域的下边界和上边界; W 是界面厚度, 在本文中均设置为 $W = 4$. 模拟中, 四个边界均设置为周期边界. 第 1 相流体的密度和运动黏度分别为 $\rho_1 = 10$ 和 $\nu_1 = 0.1$, 而第 2 相流体的密度和运动黏度分别为 $\rho_2 = 1.0$ 和 $\nu_2 = 0.1$; 表面张力 $\sigma = 0.005$, 迁移系数 $\lambda = 0.1$.

为了便于比较, 我们用系统的总动能 E 来表征

虚假速度的大小, 总动能定义为

$$E = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho |\mathbf{u}|^2 d\mathbf{x}, \quad (43)$$

其中 Ω 表示计算域. 图 1 给出了本文模型 (WB-LBE) 与 YG-LBE 模型的结果. 图 1(a) 给出了总动能 E 随时间步 t 的演化过程. 由图 1(a) 可以看出, 在大约 $t = 10^6$ 前, 二者的总动能变化趋势相同, 都是先随时间减小到约 10^{-15} 量级, 再升高到约 10^{-5} 量级, 然后开始随时间逐步减小. 然而在 $t = 10^6 - 10^{6.5}$ 之间某个时刻之后, YG-LBE 的总动能再次迅速升高, 直到数值发散. 而 WB-LBE 总动能不断减小, 最终稳定在约 10^{-25} 量级. 图 1(b) 给出了稳态时 WB-LBE 的速度分布. 由图 1(b) 可以发现, 虚假速度在 10^{-15} 量级, 达到了机器精度. YG-LBE 即使是在前期总动能降到最低的时刻 (图 1(c)) 其最大虚假速度仍然在 10^{-9} 量级. 图 1(d) 给出了总动能达到最低时两个模型所得的化学势分布. 可以看到, YG-LBE 模型的化学势有 10^{-8} 量级的变化, 而本文模型的化学势基本保持常数, 其变化量级在 10^{-15} .

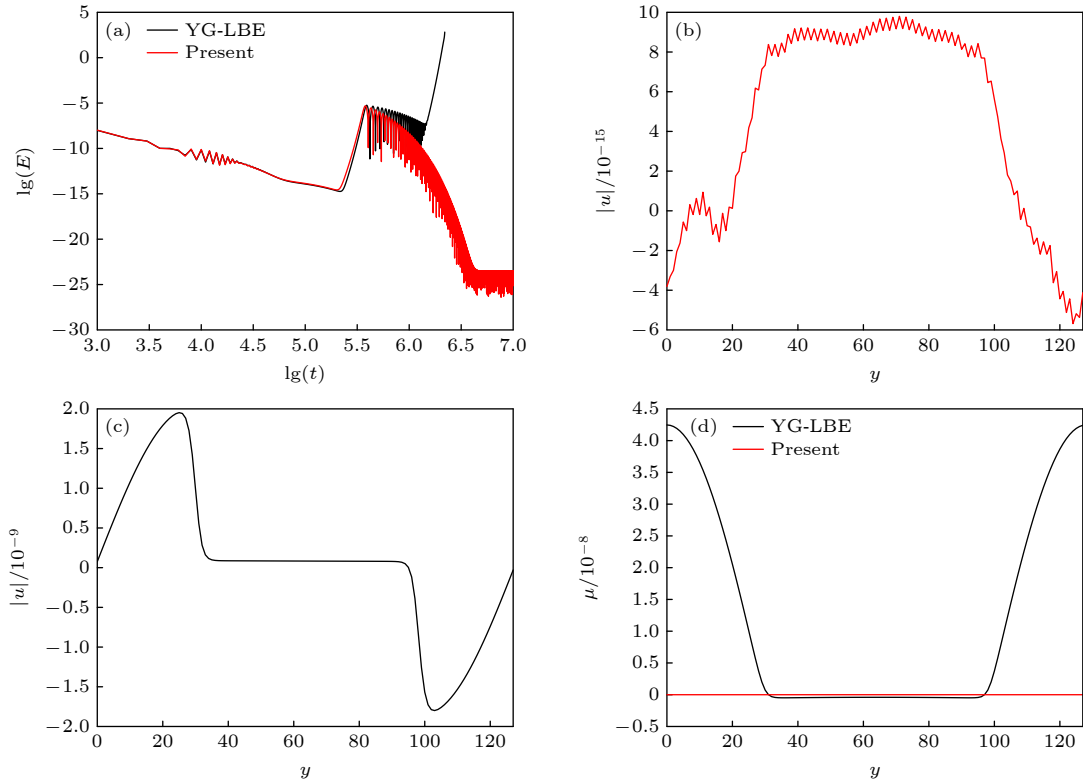


图 1 本文 WB-LBE 模型与 YG-LBE 模型模拟平界面问题的结果 (a) 总动能随时间的演化过程; (b) 稳态时 WB-LBE 计算的流动速度分布; (c) 稳态时 YG-LBE 模型计算的流动速度分布; (d) 化学势分布

Fig. 1. Numerical results of the WB-LBE and YG-LBE models for the planar interface: (a) Time evolution of the total kinetic energy; (b) distribution of velocity obtained by the WB-LBE model at steady state; (c) distribution of velocity obtained by the YG-LBE model at steady state; (d) distributions of chemical potential.

4.2 稳态液滴问题

我们进一步模拟了一个二维稳态液滴问题. 液滴半径为 R , 计算域为 $N_x \times N_y = 128 \times 128$. 用第 1 相表示液滴, 半径 $R = N_x/4$, 初始时置于计算域中心, 其他位置充满第 2 相流体. 序参数初始化为

$$\phi = \frac{\phi_1 + \phi_2}{2} + \frac{\phi_1 - \phi_2}{2} \times \tanh \left[2 \frac{R - \sqrt{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2}}{W} \right], \quad (44)$$

其中 $(x_c, y_c) = (N_x/2, N_y/2)$ 是初始时液滴圆心所在位置坐标. 模拟中, 对四个边界均采用周期边界, 其他参数和前述平界面问题一致.

我们比较了本文 WB-LBE 模型和 YG-LBE 模型的结果, 如图 2 所示. 图 2(a) 给出的总动能时间演化过程与平界面问题的有所不同, 不再有先减小后快速增大的阶段, 而是一个近乎单调下降的过程. 与平界面问题类似的是, 在 $t = 10^6 - 10^{6.5}$ 之间某个时刻之后, YG-LBE 模型的结果中 E 随时间快速增大, 直到稳定在 10^2 量级, 此时虚假速度极大.

本文的 WB-LBE 模型计算的总动能 E 则不断随时间减小, 最终稳定在约 10^{-25} 量级. 从图 2(b) 给出的速度分布可以看出, 此时虚假速度在 10^{-15} 量级, 达到了机器精度. 而在 E 达到最低时, 图 2(c) 所展示的 YG-LBE 模型的虚假速度仍然在 10^{-8} 量级. 从图 2(d) 给出的化学势分布还能发现, 在 E 达到最低时, YG-LBE 模型的化学势有 10^{-7} 量级的变化, 而 WB-LBE 模型的化学势基本保持恒定. 上述比较均说明了当前模型可以达到精确平衡状态.

下面我们比较两种形式的表面张力对模型性能的影响. 这两种表面张力的表达式如下 [4]:

$$\mathbf{F}_s = -\phi \nabla \mu, \quad (45a)$$

$$\mathbf{F}_s = \mu \nabla \phi. \quad (45b)$$

结果如图 3 所示, 其中 case1 和 case2 分别使用了 (45a) 式和 (45b) 式计算表面张力. 图 3(a) 给出了两种情况下总动能的时间演化过程. 由图 3(a) 可以看到, case1 中总动能下降到了 10^{-25} 量级, 而 case2 中总动能在中途突然升高, 最终稳定在较高水平. 这说明使用 (45b) 式形式的表面张力无法消除虚假速度. (45a) 式和 (45b) 式这两种势能形式

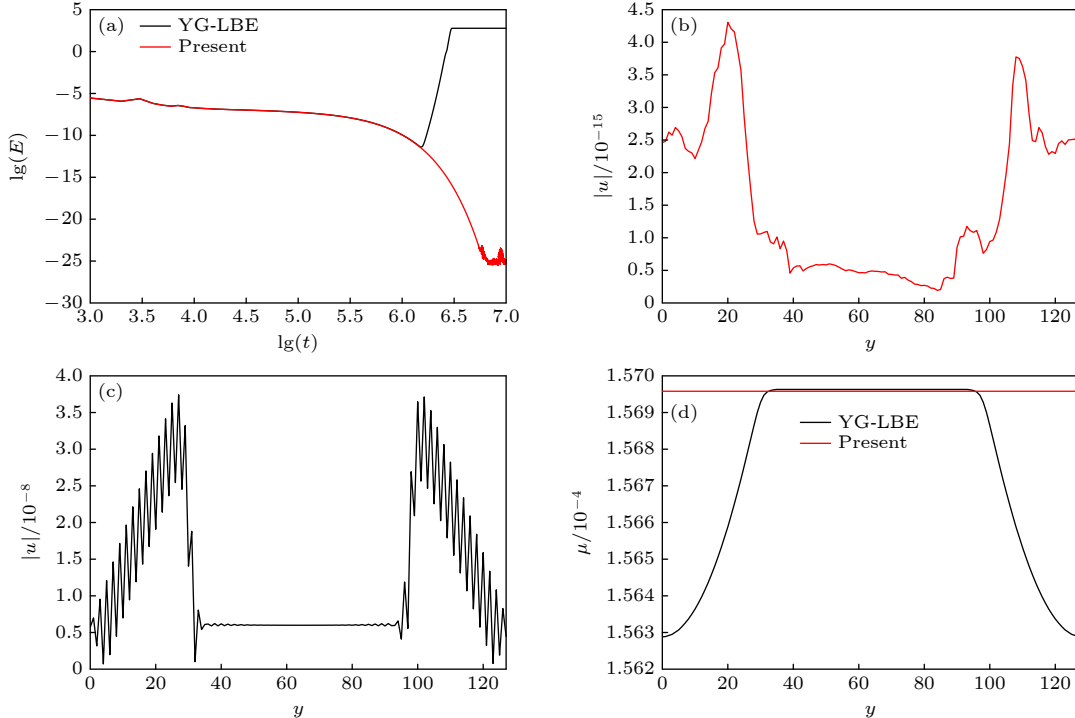


图 2 本文 WB-LBE 模型与 YG-LBE 模型模拟稳态液滴问题的结果 (a) 总动能随时间的演化过程; (b) 稳态时 WB-LBE 计算的流动速度分布; (c) 稳态时 YG-LBE 计算的流动速度分布; (d) 化学势分布

Fig. 2. Results of the WB-LBE and YG-LBE models for the steady-state droplet problem: (a) Time evolution of the total kinetic energy; (b) velocity distribution obtained by the WB-LBE model; (c) velocity distribution obtained by the YG-LBE model; (d) distributions of chemical potential.

的表面张力通常被认为是等价的,然而在平衡状态下, (45b) 式无法保证化学势为常数,从而无法实现精确平衡. 图 3(b) 给出了两种情况下的化学势分布,可见 case1 中化学势为常数,而 case2 中化学势有明显变化.

上述模拟均使用了线性黏度混合规则. 前面提到,黏度的混合规则还包括倒数规则、指数规则和阶跃规则,分别是

$$\frac{1}{\rho\nu} = \frac{\phi}{\rho_1\nu_1} + \frac{1-\phi}{\rho_2\nu_2}, \quad (46a)$$

$$\ln(\rho\nu) = \phi \ln(\rho_1\nu_1) + (1-\phi) \ln(\rho_2\nu_2), \quad (46b)$$

$$\rho\nu = \begin{cases} \rho_1\nu_1, & \phi \geq 0.5, \\ \rho_2\nu_2, & \phi < 0.5. \end{cases} \quad (46c)$$

为了比较它们对模型性能的影响,我们增大了黏度比,令 $\nu_1 = 0.1$, $\nu_2 = 0.01$, 其他参数保持不变. 图 4 比较了不同混合规则的结果,其中 case1—case4 分别使用了 (9b) 式、(46a) 式、(46b) 式和 (46c) 式来计算混合黏度. 从图 4(a) 可以看到,四种情况下的序参数分布完全一致,说明不同黏度混合规则对于本问题的界面捕捉性能没有明显影响. 图 4(b) 给出了化学势的分布,可以看到,四种情况的化学势

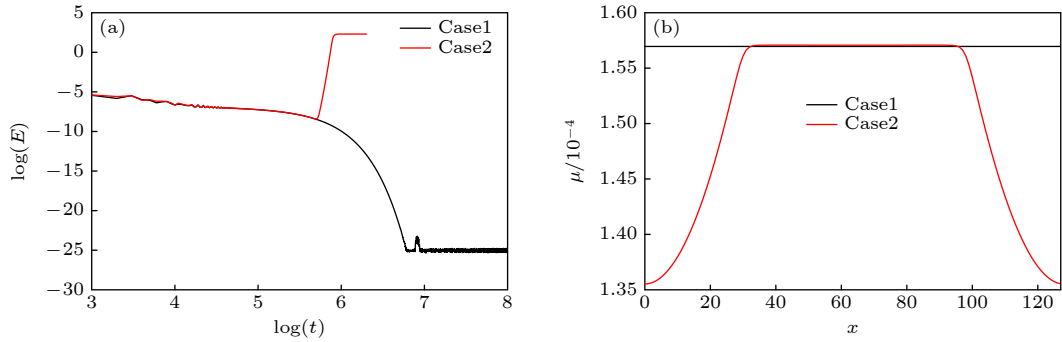


图 3 使用不同表面张力形式时稳态液滴问题的计算结果 (a) 总动能随时间的演化过程; (b) 化学势分布

Fig. 3. Numerical results of the steady-state droplet problem using different forms of surface tension: (a) Time evolution of the total kinetic energy; (b) distributions of chemical potential.

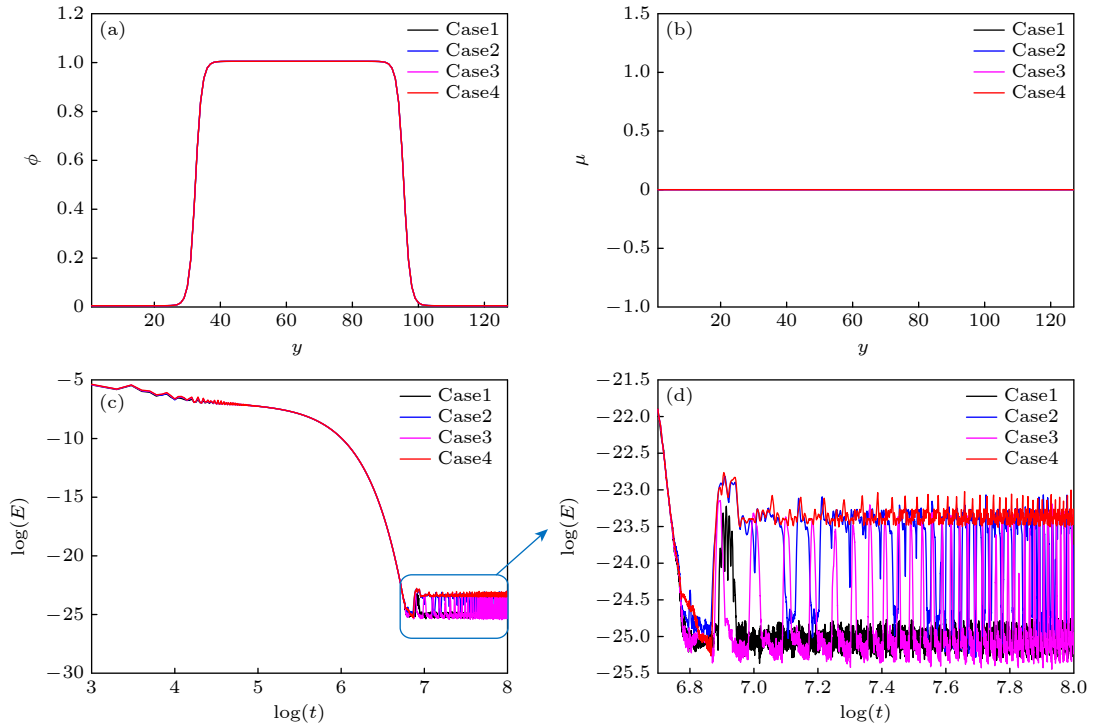


图 4 使用不同黏度混合规则时稳态液滴的计算结果 (a) 序参数分布; (b) 化学势分布; (c), (d) 总动能随时间的演化过程

Fig. 4. Numerical results of the steady-state droplet problem using different viscosity mixing rules: (a) Distributions of order parameter; (b) distributions of chemical potential; (c), (d) time evolution of total kinetic energy.

也均为常数,且等于一个相同的值.图4(c), (d)给出了总动能的时间演化及其局部放大图,可以看到,在虚假速度方面,不同黏度混合规则展现出了一定的差别,case1和case4的总动能最终分别稳定在了 10^{-25} 和 10^{-23} 量级,case2和case3的总动能最终在 10^{-25} 和 10^{-23} 量级之间波动.

4.3 分层泊肃叶流

本节计算了分层泊肃叶流问题.计算域设置为

$$u = \begin{cases} \frac{G_x h^2}{2\rho_2\nu_2} \left[-\left(\frac{y}{h}\right)^2 - \frac{y}{h} \frac{\rho_1\nu_1 - \rho_2\nu_2}{\rho_1\nu_1 + \rho_2\nu_2} + \frac{2\rho_2\nu_2}{\rho_1\nu_1 + \rho_2\nu_2} \right], & -h \leq y \leq 0, \\ \frac{G_x h^2}{2\rho_1\nu_1} \left[-\left(\frac{y}{h}\right)^2 - \frac{y}{h} \frac{\rho_1\nu_1 - \rho_2\nu_2}{\rho_1\nu_1 + \rho_2\nu_2} + \frac{2\rho_1\nu_1}{\rho_1\nu_1 + \rho_2\nu_2} \right], & 0 < y \leq h, \end{cases} \quad (47)$$

其中根据我们所取的网格数, $h = 124.5$.

在4.2节中我们比较了不同黏度混合规则对静态液滴问题的影响,下面将通过模拟该动态问题,进一步比较它们之间的区别.图5给出了 x 方向速度沿 y 方向的分布及其局部放大图,其中case1—case4分别使用了(9b)式、(46a)式、(46b)式和(46c)式来计算混合黏度,整体上看,case2和case4的结果与解析解吻合良好,在界面附近,case4的结果与解析解更加一致.因此,模拟动态问题时,使用(46c)式的阶跃混合规则计算混合黏度能得到更准确的结果.

为了进一步验证当前模型的准确性,还模拟了不同动力黏度比 $M = \frac{\mu_1}{\mu_2} = \frac{\rho_1\nu_1}{\rho_2\nu_2}$ 的情况.我们使用(46c)式来计算混合黏度,设置两相密度为

$N_x \times N_y = 64 \times 250$,上下边界为无滑移固体边界,使用修正反弹格式实现无滑移边界,左右边界为周期边界.计算域的上半部分充满第1相,下半部分充满第2相.流动由沿 x 方向的恒定外力 $G_x = 10^{-7}$ 驱动.模拟时,设置两相密度为 $\rho_1 = \rho_2 = 1.0$,运动黏度分别为 $\nu_1 = 1.0$ 和 $\nu_2 = 0.1$,表面张力 $\sigma = 0.005$,迁移系数 $\lambda = 0.1$,界面厚度 $W = 4.0$.该问题的 x 方向速度沿 y 方向的分布存在解析解:

$\rho_1 = \rho_2 = 1.0$,固定 $\nu_1 = 1.0$,通过调整 ν_2 的大小来改变动力黏度比.图6给出了和 $M = 10, 100, 1000$ 时的速度分布,模拟结果都和解析解吻合良好.这证明了当前模型模拟动态问题及大黏度比问题的准确性.

4.4 两相分离问题

本节将模拟一个两相分离问题,并与基于不可压相场的LBE模型[18]进行对比.计算区域为 $N_x \times N_y = 100 \times 100$ 的正方形区域,初始时序参数包含一个小扰动,即:

$$\phi = \frac{1}{2} \left[1 + 0.1 \sin\left(\frac{4\pi x}{N_x}\right) \cos\left(\frac{4\pi y}{N_y}\right) \right]. \quad (48)$$

模拟时,设置黏度比 $\nu_1/\nu_2 = 1$,表面张力 $\sigma = 0.001$,松弛时间 $\tau_f = \tau_g = 1.0$,界面厚度 $W = 4$.

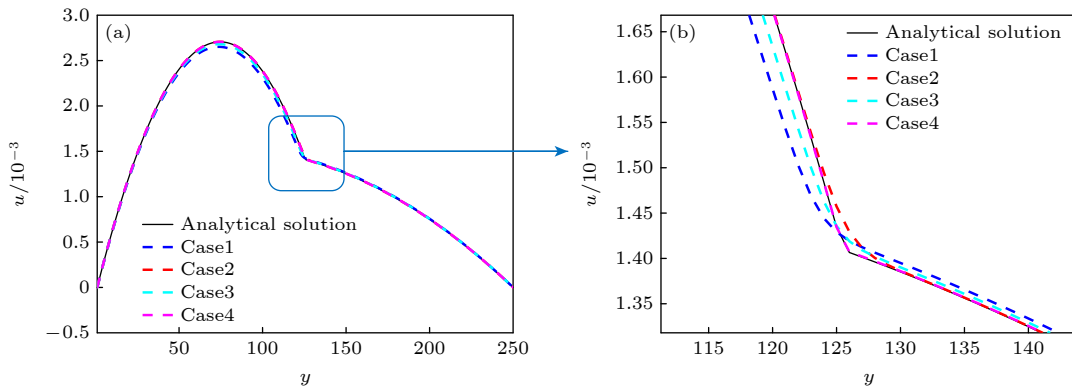


图5 使用不同黏度混合规则时分层泊肃叶流的速度分布

Fig. 5. Distributions of flow velocity of the layered Poiseuille flow with different viscosity mixing rules.

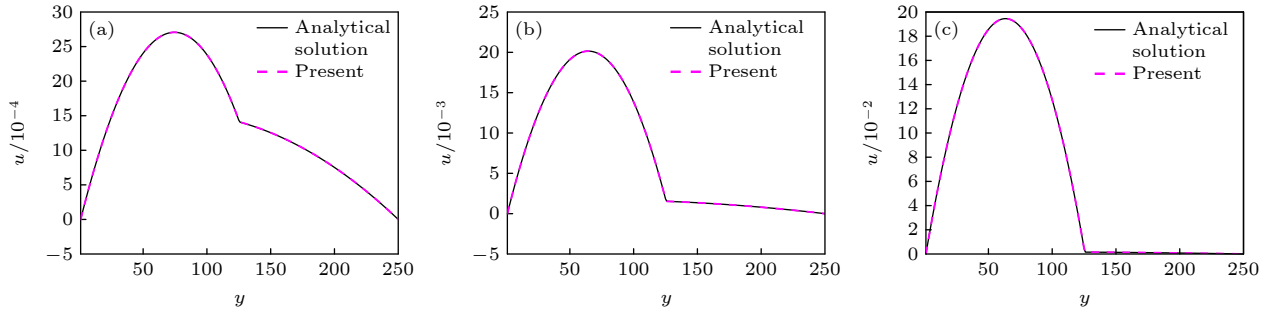

 图 6 不同动力黏度比时分层泊肃叶流速度分布 (a) $M = 10$; (b) $M = 100$; (c) $M = 1000$.

Fig. 6. Distributions of flow velocity of the layered Poiseuille flow with different dynamic viscosity ratios: (a) $M = 10$; (b) $M = 100$; (c) $M = 1000$.

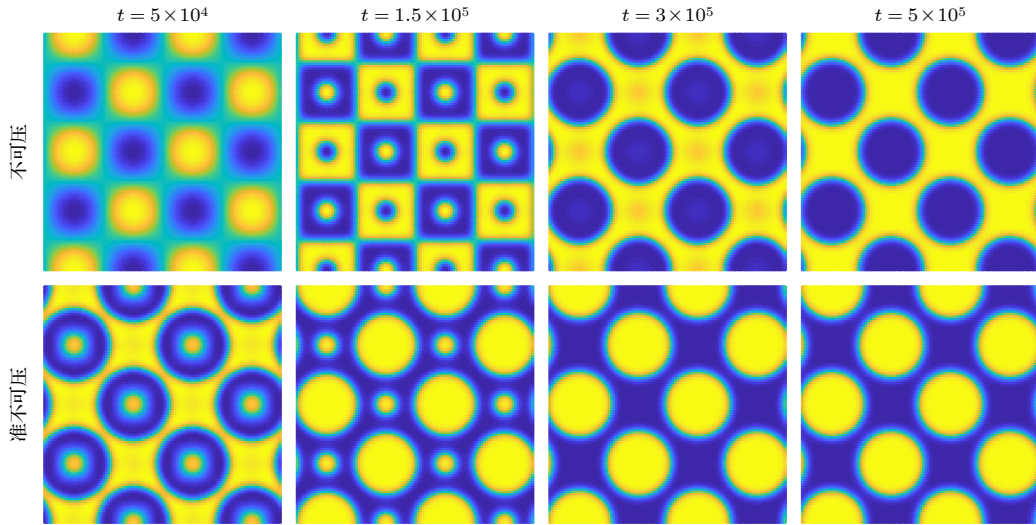


图 7 不可压模型和准不可压模型计算的两相分布 (黄色, 流体 1; 蓝色, 流体 2)

Fig. 7. Phase distributions predicted by the incompressible model and the quasi-incompressible model. Yellow, Fluid 1; Blue, Fluid 2.

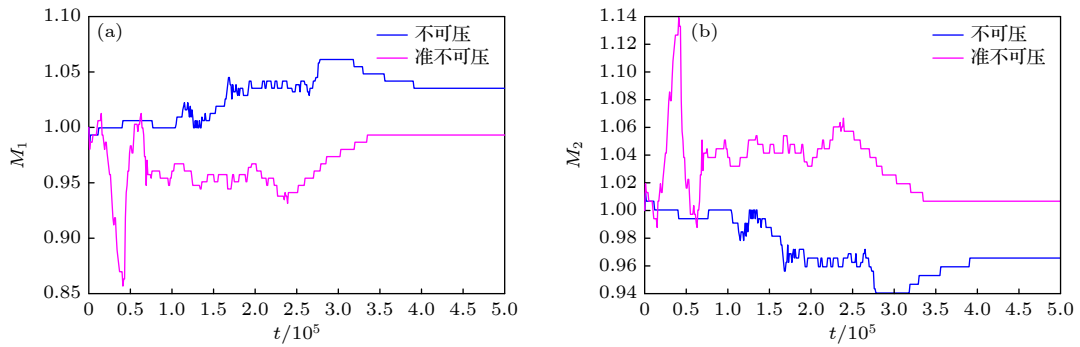


图 8 单相质量随时间的变化

Fig. 8. Variation of single-phase mass over time.

基于不可压相场的 LBE 模型^[18]中, 对应的连续方程为 (7) 式, 与准不可压连续方程 (11) 相比, 二者主要差异是右端项 $\gamma \nabla \cdot (\lambda \nabla \mu)$, 该项与参数 γ 有关, 并且只在界面区起作用. 因此当 $\gamma = 0$ 时或在体相区, 两模型相同. 当 γ 较大或界面占总体区域的比例较大时, 该项所起的作用越大, 模型差异也

会明显. 本算例中我们取 $\gamma = 4$, 密度比为 $\rho_1/\rho_2 = 5$. 同时, 由于初时时刻包含的两相界面较多, 因此两个模型的预测结果可能有较大差异.

图 7 给出了两个模型在不同时刻得到的相分布, 可以看到, 两个模型在相分离问题上展现出了较大的差异. 一方面, 准不可压模型结果的演化速

度更快, 其预测的相分离要早于不可压模型; 另一方面, 两模型得到了相反的相分离结果, 在准不可压模型的结果中, 黄色表示的相为离散相, 蓝色为连续相, 而不可压模型的结果正好相反.

我们还统计了这个过程中两相的质量变化, 用下式计算各时刻单相总质量:

$$m_1(t) = \int_{\Omega, \phi(t) \geq 0.5} \rho_1 dV, \quad (49a)$$

$$m_2(t) = \int_{\Omega, \phi(t) < 0.5} \rho_2 dV, \quad (49b)$$

令 $M_1 = m_1(t)/m_1(0)$, $M_2 = m_2(t)/m_2(0)$, 图 8 给出了 M_1-t 和 M_2-t 曲线. 可以看到, 稳定后, 不可压模型^[18] 所得各相的质量均相对初始时有较大偏差, 相对误差为 3.53%, 而准不可压模型的结果中质量偏差较小, 相对误差仅为 0.67%.

5 结 论

基于准不可压相场理论, 本文提出了一种能够在离散尺度上达到精确平衡的两相 LBE 模型. 模拟了平界面问题和稳态液滴问题, 并与无精确平衡性质的准不可压相场 YG-LBE 模型^[3] 进行了比较. 结果表明, 本文模型将虚假速度消除到了机器精度, 且得到了几乎恒定的化学势, 证明了当前模型的平衡性能. 模拟稳态液滴问题时, 还比较了不同表面张力形式和不同黏度混合规则的影响. 结果表明, (45b) 式表示的表面张力形式不能保证化学势为常数, 无法实现精确平衡; 不同黏度混合规则在模拟静态问题时对模型没有明显影响. 进一步模拟了分层泊肃叶流, 比较了不同黏度混合规则的影响, 结果表明, 使用阶跃混合规则计算混合黏度可以得到更准确的结果. 还模拟了不同黏度比条件下

的分层泊肃叶流, 结果均与解析解吻合良好, 证明了当前模型模拟动态问题及大黏度比问题的准确性. 此外, 还模拟了一个两相分离问题, 展示了准不可压模型和不可压模型的差异, 证明了本文模型能够保证局部质量守恒. 总之, 本文提出的精确平衡两相 LBE 模型解决了原始模型的虚假速度问题, 同时能够保证局部质量守恒.

参考文献

- [1] Guo Z L, Shu C 2013 *Lattice Boltzmann Method and its Application in Engineering* (Vol. 3) (Singapore: World Scientific Publishing)
- [2] Huang H B, Sukop M, Lu X Y 2015 *Multiphase Lattice Boltzmann Methods: Theory and Application* (Hoboken, NJ: Wiley-Blackwell)
- [3] Yang K, Guo Z L 2016 *Phys. Rev. E* **93** 043303
- [4] Zhang C H, Guo Z L, Liang H 2021 *Int. J. Numer. Methods Fluids* **93** 2225
- [5] Connington K, Lee T 2012 *J. Mech. Sci. Technol.* **26** 3857
- [6] Gong J M, Oshima N, Tabe Y 2019 *Comput. Math. Appl.* **78** 1166
- [7] Huang H B, Krafczyk M, Lu X Y 2011 *Phys. Rev. E* **84** 046710
- [8] Zhai Q L, Zheng L, Zheng S 2017 *Phys. Rev. E* **95** 023313
- [9] Siebert D, Philippi P, Mattila K 2014 *Phys. Rev. E* **90** 053310
- [10] Cristea A, Sofonea V 2003 *Int. J. Mod. Phys. C* **14** 1251
- [11] Wagner A J 2003 *Int. J. Mod. Phys. B* **17** 193
- [12] Shan X 2006 *Phys. Rev. E* **73** 047701
- [13] Sbragaglia M, Benzi R, Biferale L, Succi S, Sugiyama K, Toschi F 2007 *Phys. Rev. E* **75** 026702
- [14] Guo Z L, Zheng C G, Shi B C 2011 *Phys. Rev. E* **83** 036707
- [15] Guo Z L 2021 *Phys. Fluids* **33** 031709
- [16] Zhang C H, Guo Z L, Wang L P 2022 *Phys. Fluids* **34** 012110
- [17] Zheng L, Zheng S, Zhai Q L 2021 *Phys. Fluids* **33** 092102
- [18] Ju L, Liu P Y, Yan B C, Bao J, Sun S Y, Guo Z L 2023 [arXiv: 2311.10827v1 \[physics.flu-dyn\]](https://arxiv.org/abs/2311.10827v1)
- [19] Lowengrub J, Truskinovsky L 1998 *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **454** 2617
- [20] Shen J, Yang X F, Wang Q 2013 *Commun. Comput. Phys.* **13** 1045
- [21] Jacqmin D 1999 *Commun. Comput. Phys.* **155** 96
- [22] Deng B, Shi B C, Wang G C 2005 *Chin. Phys. Lett.* **22** 267

A well-balanced lattice Boltzmann method based on quasi-incompressible phase-field theory^{*}

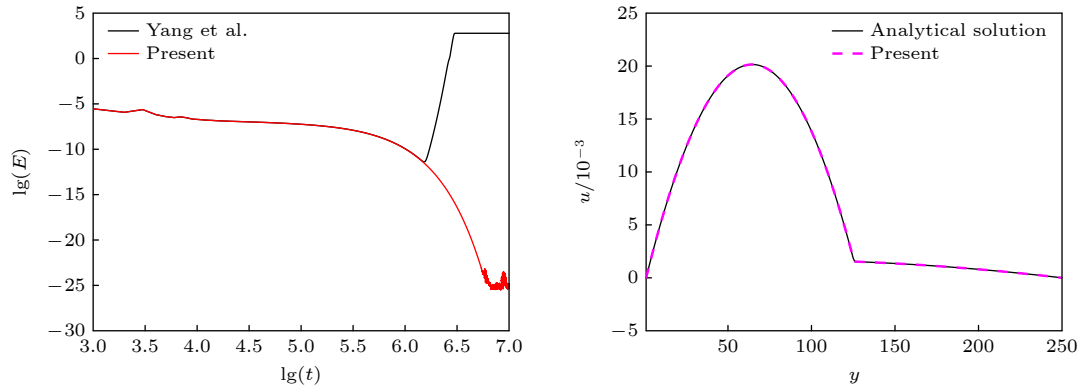
LI Chunyi GUO Zhaoli[†]

(State Key Laboratory of Coal Combustion, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

(Received 29 October 2024; revised manuscript received 15 January 2025)

Abstract

Compared with the lattice Boltzmann equation (LBE) model based on incompressible phase field theory, the LBE based on quasi-incompressible phase field theory has the advantage of local mass conservation. However, previous quasi-incompressible phase-field-based LBE model does not satisfy the well-balanced property, resulting in spurious velocities in the vicinity of interface and density profiles inconsistent with those from thermodynamics. To address this problem, a novel LBE model is developed based on the quasi-incompressible phase-field theory. First, numerical artifacts in the original LBE for the Cahn-Hilliard are analyzed. Based on this analysis, the equilibrium distribution function and source term are reformulated to eliminate the numerical artifacts, enabling the new LBE to realize the well-balanced characteristics at a discrete level. The performance of the proposed LBE model is tested by simulating a number of typical two-phase systems. The numerical results of the planar interface and static droplet problems demonstrate that the present model can eliminate spurious velocities and achieve well-balanced state. Numerical results of the layered Poiseuille flow demonstrate the accuracy of the present model in simulating dynamic two-phase flow problems. The well-balanced properties of the LBE model with two different formulations of surface tension ($\mathbf{F}_s = -\phi\nabla\mu$ and $\mathbf{F}_s = \mu\nabla\phi$) are also investigated. It is found that the formulation of $\mathbf{F}_s = \mu\nabla\phi$ cannot eliminate the spurious velocities, while the formulation of $\mathbf{F}_s = \mu\nabla\phi$ can achieve the well-balanced state. The influences of viscosity formulations of the fluid mixture are also compared. Particularly, four mixing rules are considered. It is shown that the use of step mixing rule gives more accurate results for the layered Poiseuille flow. Finally, we compare the performance of the present quasi-incompressible LBE model with that of the original fully incompressible LBE model by simulating the phase separation problem, and the results show that the present model can ensure the local mass conservation, while the fully incompressible LBE can yield quite different predictions.



Keywords: two-phase flow, lattice Boltzmann method, quasi-incompressible phase field model

PACS: 47.11.Qr, 47.61.Jd

DOI: 10.7498/aps.74.20241513

CSTR: 32037.14.aps.74.20241513

^{*} Project supported by the Interdisciplinary Research Program of HUST, China (Grant No. 2023JCYJ002).

[†] Corresponding author. E-mail: zlguo@hust.edu.cn

基于准不可压相场理论的精确平衡两相格子Boltzmann方法

李春熠 郭照立

A well-balanced lattice Boltzmann method based on quasi-incompressible phase-field theory

LI Chunyi GUO Zhaoli

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 064702 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20241513

CSTR: 32037.14.aps.74.20241513

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241513>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

直通道内两相流动的格子玻尔兹曼方法模拟

Lattice Boltzmann method simulation of two-phase flow in horizontal channel

物理学报. 2023, 72(8): 084701 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222421>

三相流体的轴对称格子 Boltzmann 模型及其在 Rayleigh-Plateau 不稳定性的应用

Axisymmetric lattice Boltzmann model for three-phase fluids and its application to the Rayleigh-Plateau instability

物理学报. 2023, 72(4): 044701 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221967>

基于格子Boltzmann方法的二维气泡群熟化过程模拟

Lattice Boltzmann method based simulation of two dimensional bubble group ripening process

物理学报. 2022, 71(11): 110504 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20212183>

基于相场方法的多孔合金马氏体相变模拟

Phase-field method based simulation of martensitic transformation in porous alloys

物理学报. 2023, 72(14): 148102 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230212>

剪切增稠幂律流体中单气泡上升动力学行为的格子Boltzmann方法研究

Lattice Boltzmann method for studying dynamics of single rising bubble in shear-thickening power-law fluids

物理学报. 2024, 73(13): 134701 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240394>

基于格子Boltzmann方法的幂律流体二维顶盖驱动流转捩研究

Transitions of power-law fluids in two-dimensional lid-driven cavity flow using lattice Boltzmann method

物理学报. 2021, 70(18): 184703 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210451>