晶格Boltzmann方法中流体力的计算

闻炳海^{1,2}, 张超英^{2*}, 方海平^{1*}

1. 中国科学院上海应用物理研究所水科学与技术研究室, 上海 201800;

2. 广西师范大学广西多源信息挖掘与安全重点实验室, 桂林 541004

*联系人, 张超英, E-mail: zhangcy@gxnu.edu.cn; 方海平, E-mail: fanghaiping@sinap.ac.cn

收稿日期: 2016-09-27; 接受日期: 2016-10-14; 网络出版日期: 2017-03-08

国家自然科学基金(编号: 11290164, 11162002, 11362003, 11462003)、中国科学院知识创新工程领域前沿项目(编号: KJZD-EW-M03)、广西自然科学基金(编号: 2014GXNSFAA118018)和广西高校科学技术研究重点项目(编号: KY2015ZD017)资助

摘要 晶格Boltzmann方法是起源于动理学理论和元胞自动机的介观数值模拟方法, 在模拟复杂流体运动, 特别是颗粒悬浮运动和多相流等领域取得了显著的成功. 在计算流体与结构之间的相互作用力时, 通过引入相对速度, 提出了伽利略不变的动量交换法. 该方法简单、精确、高效, 而且与边界的几何形状无关; 它只使用局部数据, 方便实施并行计算和三维模拟; 它具有良好的稳定性, 流体力计算结果的波动非常小, 甚至不需要进行时间平滑处理. 在数值模拟多相流的研究中, 基于热力学自由能理论计算非理想力, 提出了同时满足热力学一致性和伽利略不变性的多相流模型. 该模型物理清晰、易于实施, 可以方便地配合不同的状态方程用于模拟各种多相流系统. 化学势是驱动相分离和表达润湿性的有效途径, 在进一步的研究中, 借助化学势计算非理想力, 提出了基于化学势的多相流模型. 它在数学上等价于基于压力张量计算非理想力的模型, 但是避免了计算压力张量和张量散度, 获得了更高的计算效率. 该模型配合化学势边界条件, 可以有效地模拟润湿现象, 其接触角可以通过表面化学势进行线性调节.

关键词 晶格Boltzmann方法, 流固相互作用, 非理想力, 多相流, 润湿性

PACS: 47.11.-j, 47.55.Kf, 47.61.Jd, 68.08.Bc

1 引言

流体与结构相互作用的研究与自然现象、日常生活和工业生产密切相关. 诸如颗粒悬浮、鱼类游动、鸟类飞行、血管脉动、惯性微流控等问题的模拟研究都是以流体和结构相互作用为基础的. 要想准确地刻画边界在流体中的运动, 先决条件是精确地计算出流体与结构之间的相互作用力. 晶格Boltzmann

方法(Lattice Boltzmann Method, LBM)^[1-4]的介观属性和规则的网格划分使其擅长处理这类问题. 特别是原生的动量交换法, 由于具有简单、高效和易于并行处理的特点, 受到了人们广泛地关注和成功地应用^[5-12]. 然而, 传统的动量交换法不具有伽利略不变性, 导致其精度不高, 甚至在一些模拟(例如圆球在管道流中的侧向迁移)中会产生定性的偏差^[13,14]. 通过引入相对速度, 我们提出了伽利略不变的动量交换法^[15]. 该算法

引用格式: 闻炳海, 张超英, 方海平. 晶格Boltzmann方法中流体力的计算. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2017, 47: 070012
Wen B H, Zhang C Y, Fang H Y. Hydrodynamic force evaluation in lattice Boltzmann method (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2017, 47: 070012, doi: 10.1360/SSPMA2016-00404

简单、精确、高效, 而且与边界的几何形状无关. 它只使用局域分布函数, 方便实施并行计算和三维模拟. 计算稳定性好, 数值结果的涨落得到显著改进, 以至于无需对模拟数据进行常见的时间平均处理. 多相流现象几乎是无处不在, 它包含了相变、扩散、相界面运动等复杂的宏观动力学行为. 本质上多相流系统的这些宏观动力学行为是多相或多组分流之间微观相互作用的宏观体现^[3]. 晶格Boltzmann方法的微观本质和介观特性促使它成为研究多相和多组分流问题最成功的计算流体力学方法之一^[16-24]. 在诸多的多相流模型中, 伪势模型^[25,26]和自由能模型^[27,28]从提出至今一直广泛流行并得到了普遍地应用. 但是, 伪势模型只在有效密度函数取特定指数形式的情况下才能与热力学结果保持一致性, 这一苛刻的要求导致它在常见的应用中理论上不具有热力学一致性. Swift等人^[27,28]从自由能理论出发, 将非理想流体的热力学压力张量引入晶格Boltzmann方程, 构造了热力学一致的自由能模型. 然而, 由于其恢复的动量方程黏性应力项的第一次导数中包含了流体密度, 致使该模型不具有伽利略不变性. 基于自由能理论直接计算非理想力, 并通过力项技术将其融合至基本的晶格Boltzmann方程, 提出了理论上同时满足热力学一致性和伽利略不变性的多相流模型, 并得到了数值计算的证实^[29]. 在该模型的基础上, 我们借助化学势计算非理想力, 进一步提出了基于化学势的多相流模型^[30]. 由于避免了计算压力张量和张量散度, 计算效率和稳定性都有显著提高. 基于化学势的多相流模型可以有效地模拟润湿现象, 其中接触角可以随边界化学势线性地调节.

2 晶格Boltzmann方法

晶格Boltzmann方法起源于动理学理论和元胞自动机, 在近不可压缩条件下可以导出Navier-Stokes方程. 晶格Boltzmann方程(Lattice Boltzmann Equation, LBE)在时间、空间和速度上做了充分的离散化, 可以简洁地表示为

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + 1) - f_i(\mathbf{x}, t) = \Omega_i, \quad (1)$$

其中, $f_i(\mathbf{x}, t)$ 是 t 时刻格点 $\mathbf{x}$ 处的粒子分布函数, 相应的运动方向为 $\mathbf{e}_i (i = 0, \dots, N)$, Ω_i 是碰撞项. 宏观的质量和动量分别定义为

$$\rho = \sum f_i \quad (2)$$

和

$$\rho \mathbf{u} = \sum \mathbf{e}_i f_i. \quad (3)$$

所以, 我们可以将 f_i 视为格点上的质量分量, 而 $\mathbf{e}_i f_i$ 则是相应的动量分量. 晶格Boltzmann方程(1)在演化中采用碰撞和流动两个基本步骤, 在介观层次上揭示流体的运动现象:

碰撞:

$$\tilde{f}_i(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t) + \Omega_i, \quad (4)$$

流动:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + 1) = \tilde{f}_i(\mathbf{x}, t). \quad (5)$$

其中, f_i 和 $\tilde{f}_i$ 分别表示碰撞前和碰撞后的粒子分布函数.

根据碰撞项的不同, LBE派生出几个不同的版本, 分别称为单弛豫时间(Single-Relaxation-Time, SRT)^[31-34]、多弛豫时间(Multiple-Relaxation-Time, MRT)^[35,36]、双弛豫时间(Two-Relaxation-Time, TRT)^[37]模型和基于熵的模型(ELBE)^[38,39]等. SRT模型的碰撞项可表示为

$$\Omega_i = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{(\text{eq})}(\mathbf{x}, t)], \quad (6)$$

其中, τ 是单一的弛豫时间, 平衡分布函数 $f_i^{(\text{eq})}$ 选定为

$$f_i^{(\text{eq})} = \rho \omega_i \left[1 + 3(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2}(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2}u^2 \right], \quad (7)$$

此处, ω_i 是权重因子, $\mathbf{u}$ 是流体速度. 在MRT模型中, 针对不同的矩采用不同的弛豫时间, 其碰撞项可以表示为

$$\Omega = -\mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{S} \cdot [\mathbf{m} - \mathbf{m}^{(\text{eq})}], \quad (8)$$

其中 $\mathbf{m}$ 代表粒子分布函数的速度矩

$$\mathbf{m} = (\rho, e, \varepsilon, j_x, q_x, j_y, q_y, p_{xx}, p_{xy})^T,$$

$\mathbf{m}^{(\text{eq})}$ 为相应的平衡矩, 密度 ρ 和动量 $\mathbf{j} = (j_x, j_y) = \rho \mathbf{u}$ 是守恒量. 其他非守恒矩依赖于这些守恒矩:

$$e^{(\text{eq})} = -2\rho + \frac{3}{\rho}(j_x^2 + j_y^2),$$

$$\varepsilon^{(\text{eq})} = \rho - \frac{3}{\rho}(j_x^2 + j_y^2),$$

$$q_x^{(\text{eq})} = -j_x, q_y^{(\text{eq})} = j_y,$$

$$p_{xx}^{(\text{eq})} = \frac{1}{\rho}(j_x^2 - j_y^2), p_{xy}^{(\text{eq})} = \frac{1}{\rho}(j_x j_y).$$

$\mathbf{M}$ 是一个线性转换矩阵, 实现分布函数空间和矩空间之间的相互变换

$$\mathbf{m} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{f}, \mathbf{f} = \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{m}. \quad (9)$$

对角矩阵 $\mathbf{S}$ 中含有多个弛豫时间:

$$\mathbf{S} = \text{diag}(0, s_1, s_2, 0, s_4, 0, s_6, s_7, s_8). \quad (10)$$

关于多弛豫时间模型的更多内容可参考文献[35,40].

3 伽利略不变的流体力计算

在数值模拟方法的主导方程中, 保持伽利略不变性是一个基本原则. 最初的格子气自动机(LGA)中的非线性对流项中包含一个非物理的因子, 因此它不满足伽利略不变性^[1,41]. 虽然通过重新标度可以得到正确的Navier-Stokes方程, 但这种方法只能适用于简单系统的LGA模型, 不适用于诸如多相流等复杂的系统. 晶格Boltzmann方程在碰撞项中引入适当的平衡分布函数, 消除了这个非物理因子, 成功地获得了高阶的、甚至是完全伽利略不变的LBE模型^[42-44]. 然而, 尽管流体边界在流体运动中起着重要作用, 流固界面上相互作用力计算的伽利略不变性却很少被研究. 例如, 晶格Boltzmann方法中广泛采用的传统动量交换法就不满足伽利略不变性^[45-48], 这很可能也是该方法在计算运动边界时精度不高的主要原因.

在LBM模拟中, 可以有效地计算出穿越流固界面的动量, 流体力的作用能够用动量交换法方便地计算出来. Ladd^[5]最先将悬浮的颗粒定义成内部同为流体的球壳, 通过分别考虑内部和外部的流体来计算颗粒边界上的动量传递. 这个工作促进了LBM成为模拟存在流固相互作用流体问题流行的方法. Aidun等人^[7]应用修正的半程反弹边界条件, 直接处理不透水的粒子, 不需要内部流体, 而且流固的密度比也可以自由地调节. Mei等人^[8]在动量交换法中引入了曲线边界条件, 使得流体力的计算建立在真实的颗粒几何边界上. Aidun等人^[7]、Huang等人^[49]和Wen等人^[14]进一步考虑了由于格子类型变化导致的附加动量变化,

提高了计算的精度. 在这些进展中, 动量交换法的传统方程保持不变, 流固相互作用的伽利略不变性没有得到可靠的保证^[45-48]. 近年来, Caiazzo等人^[45]和Lorenz等人^[47]引入了修正项来改进动量交换法的伽利略不变性. Clausen等人^[46]的改进方法减少了法向应力的误差, 并研究了颗粒悬浮流的流变效应. Zhou等人^[48]结合Lees-Edwards边界条件和基于点的方法, 用于研究颗粒在流体中的悬浮运动. 虽然传统动量交换法缺少伽利略不变性所造成的数值误差已经被显著减小, 但是仍然没有能够更好地实现高精度流体力计算和从理论上保证其伽利略不变性^[47,48].

3.1 传统的动量交换法

传统动量交换法(Conventional Momentum Exchange Method, CME)^[5,7,8,14,49]中的界面动量传递可用图1(a)示意. 移动边界位于流体点 $\mathbf{x}_f$ 和边界点 $\mathbf{x}_b$ 之间(在Ladd方法中是内部流体点^[5]), 在交点 S 处边界的速度为 $\mathbf{v}$. 在碰撞步中, 从边界反弹回来的分布函数 $\tilde{f}_i(\mathbf{x}_b, t)$ 可以通过内部流体演化^[5]、半程反弹边界条件^[7]或曲线边界条件^[8,14,49]计算, 其中需要考虑边界速度而加上相应的附加力项^[50-52].

当分布函数对流时, 质量分量 $\tilde{f}_i(\mathbf{x}_f, t)$ 流入边界并贡献了一个动量增量, 同时 $\tilde{f}_i(\mathbf{x}_b, t)$ 从边界流出并贡献了一个动量减量. 在之前的文献^[5,7,8,14]中, 这些动量改变直接采用离散速度 $\mathbf{e}_i$ 和 $\mathbf{e}_i$ 来计算, 即 $\mathbf{e}_i \tilde{f}_i(\mathbf{x}_f, t)$ 和 $\mathbf{e}_i \tilde{f}_i(\mathbf{x}_b, t)$. CME在一条流固连线上计算的流体力可以写为^[5,7,8,14]

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_s) = \mathbf{e}_i \tilde{f}_i(\mathbf{x}_f, t) - \mathbf{e}_i \tilde{f}_i(\mathbf{x}_b, t). \quad (11)$$

虽然一些文献提出了修正项来改进计算精度和伽利略不变性^[45-47], 但是传统方程的基本概念和形式一直没能得到本质上的改进.

3.2 伽利略不变的动量计算

很显然, 方程(11)中的动量分量 $\mathbf{e}_i \tilde{f}_i$ 以及动量的改变均以网格作为参考系, 与边界速度 $\mathbf{v}$ 无关, 即方程(11)实际上隐含了一个假设——无论边界速度是多少, 在动量传递过程中边界都是不动的. 事实上一般情形下边界是运动的, 这一假设造成了较大的计算误差, 图1(b)的数值模拟结果和下一节对于平衡系统的分析清晰地表明了这一误差.

图 1 (网络版彩图) (a) 动量交换法的通用示意图, 移动边界和流固连线相交于 S 点, x_f 和 x_b 分别代表相邻的流体和边界点, 边界在交点 S 处具有速度 v ; (b) 垂直放置在相对静止流体中的薄板一侧受到流体的静压力. 这个平衡系统被关联到多个运动参考系. 传统动量交换方程明显不具有伽利略不变性, 而当前的方法适当地考虑了边界速度, 是充分伽利略不变的, 从而获得了非常高的计算精度^[15]

Figure 1 (Color online) (a) A common schematic diagram to illustrate a moving boundary crossing a fluid-solid link at the point of intersection S , x_f and x_b denote the adjacent fluid and boundary nodes, the boundary has a velocity v at the point S ; (b) relative errors in the one-sided pressure on a vertical thin plate in the relatively stationary fluid without boundaries. This equilibrium system is connected to various velocities of the reference frame. The conventional equation obviously violates Galilean invariance. Since it properly considers the boundary velocity, the present method (GME) is Galilean invariant and thus has a very high computational accuracy^[15].

根据伽利略不变原理, 流体与固壁之间的动量传递应该与相对速度有关, 并不受参考系速度的影响. 当分布函数流过边界时, 动量计算中应当考虑的是流体相对边界的速度, 即质量分量 $\tilde{f}_i(x_f, t)$ 穿过交点 S 时相对于边界的速度为 $(e_i - v)$, 贡献给边界的动量增量为 $(e_i - v)\tilde{f}_i(x_f, t)$; 同时, $\tilde{f}_i(x_b, t)$ 穿过交点 S 时相对于边界的速度为 $(e_i - v)$, 贡献给边界的动量减量为 $(e_i - v)\tilde{f}_i(x_b, t)$. 根据动量定理, 伽利略不变的动量交换 (Galilean-Invariant Momentum Exchange, GME) 方程可以定义为^[15]

$$F(x_s) = (e_i - v)\tilde{f}_i(x_f, t) - (e_i - v)\tilde{f}_i(x_b, t). \quad (12)$$

施加在固壁边界上总的流体力 F 和扭矩 T 可以通过在所有流固连线上简单求和来计算

$$F = \sum F(x_s), \quad (13)$$

$$T = \sum (x_s - R) \times F(x_s). \quad (14)$$

其中, R 是颗粒质心的位置矢量.

流体力的计算中动量分量总是在流固连线上, 当边界静止不动时, GME 和 CME 是相同的. 应当指出, 方程 (12) 中对边界速度的考虑不同于移动边界条件^[52-56] 中的附加力项^[50-52]. 包含边界速度的附加力项代表移动边界施加在反弹分布函数上的影响, 而当前的方法根据动量定理, 通过考虑流体相对于运动边界的相对速度, 从而正确计算了边界上动量的传递. GME 用于计算流固相互作用中的流体力, 并改变移动边界的运动状态, 但是它对分布函数并没有直接的影响.

3.3 平衡态的流体力计算

通过一个简单的理论分析直观地比较 GME 和 CME. 假设图 1(a) 中的流体和边界都具有相同的速度 v , 那么这个系统等价于静止的系统, 并在物理上被关联到具有速度 $-v$ 的匀速直线运动参考系. 当该系统保持平衡状态时, 其中的分布函数则也为平衡分布函数. 采用如下的平衡分布函数形式^[1]:

$$f_i^{(eq)} = \rho \omega_i \left[1 + 3(e_i \cdot u) + \frac{9}{2}(e_i \cdot u)^2 - \frac{3}{2}u^2 \right], \quad (15)$$

其中 ω_i 是权重因子, u 是流体和边界的速度, 采用 CME, 流固连线上的流体力可以根据方程 (11) 和 (15) 计算:

$$\begin{aligned} F_i &= e_i f_i^{(eq)}(x_f, t) - e_i f_i^{(eq)}(x_b, t) \\ &= e_i \rho \omega_i \left[1 + 3(e_i \cdot v) + \frac{9}{2}(e_i \cdot v)^2 - \frac{3}{2}v^2 \right] \\ &\quad - e_i \rho \omega_i \left[1 + 3(e_i \cdot v) + \frac{9}{2}(e_i \cdot v)^2 - \frac{3}{2}v^2 \right] \\ &= 2\rho \omega_i e_i + 3\rho \omega_i [3(e_i \cdot v)^2 - v^2] e_i. \end{aligned} \quad (16)$$

由于方程 (16) 的右边存在项 $3\rho \omega_i [3(e_i \cdot v)^2 - v^2] e_i$, 因而流体力将随着参考系的速度变化, 这清晰地表明不具有伽利略不变性是 CME 内在的缺陷, 而且该项引入的误差正比于参考速度模的平方.

由于 LBE 中的离散速度 e_i 是常量, 伽利略不变性不可能在单个流固连线上得到满足, 就像单个 e_i 不能表达格子点上的流体宏观速度一样. 然而, 离散速度集是对称的, 伽利略不变的力的计算可以在局部的格子上实现. 采用 D2Q9 模型和离散速度集

$$e = \{(0, 0), (1, 0), (0, 1), (-1, 0), (0, -1), (1, 1), (-1, 1), (-1, -1), (1, -1)\},$$

不失一般性, 设边界和 e_2, e_5, e_6 相交. 在上面的平

衡系统中, 三条流固连线上局部的流体力可以用方程(12)和(15)分析得到

$$\begin{aligned}
 \mathbf{F} &= \mathbf{F}_2 + \mathbf{F}_5 + \mathbf{F}_6 \\
 &= \sum_{i=2,5,6} [(\mathbf{e}_i - \mathbf{v})f_i^{(\text{eq})}(\mathbf{x}_f, t) - (\mathbf{e}_i - \mathbf{v})f_i^{(\text{eq})}(\mathbf{x}_b, t)] \\
 &= \sum_{i=2,5,6} \{2\rho\omega_i\mathbf{e}_i + 3\rho\omega_i[3(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{v})^2 - v^2]\mathbf{e}_i \\
 &\quad - 6\rho\omega_i(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{v})\mathbf{v}\} \\
 &= \sum_{i=2,5,6} 2\rho\omega_i\mathbf{e}_i.
 \end{aligned} \quad (17)$$

通过简单的矢量计算, 方程(16)中与参考速度相关的项被离散速度集的对称性消除了. 无论参考系速度是多少, 局部的流体力都保持不变, 因此GME在平衡系统中是完全伽利略不变的. 考虑一个薄板垂直放置在相对静止的无边界流体中, 通过计算流体施加在薄板上单侧的静压力, 可以直观地展现GME和CME之间差别. 这个平衡系统被关联到水平运动的参考系, 基准数据采用从静止系统中计算得到的结果. 图1(b)比较了GME和CME计算流体力所造成的相对误差. 可以清楚地看到, 在平衡系统中CME不具有伽利略不变性, 而GME的计算误差一直为零, 即具有充分的伽利略不变性.

3.4 数值验证伽利略不变性

数值模拟颗粒的悬浮运动是检验流体力计算伽利略不变性的有效方法. 在我们的测试算例里, 圆柱和球体在重力和流体力的联合作用下运动, 流体力计算的误差会被累积和放大, 并被清楚地展现出来. 通过一系列的直接数值模拟, GME方法的计算精度、鲁棒性和伽利略不变性得到了验证. 在这些模拟中, 采用SRT模型结合二阶插值边界条件^[52]和MRT模型结合多反射边界条件^[56]取得了一致的结果, 其中SRT选择 $\tau = 0.6$, MRT选择 $\mathbf{S} = \text{diag}(0, 1.64, 1.54, 0, 1.9, 0, 1.9, 1/\tau, 1/\tau)$ ^[35,40].

我们采用关联了参考系的圆柱沉降算例来验证GME的伽利略不变性. 如图2所示, 圆柱最初被放置在充满静止流体的垂直管道中, 在偏离管道中心线的地方释放. 因为圆柱的密度比流体的密度大一些, 圆柱在重力和流体力的作用下会下沉、旋转和迁移. 最后, 圆柱会达到一个平衡状态, 沿着通道的中心线匀速下降. 圆柱的直径是0.1 cm, 通道的宽度是0.4 cm, 圆柱

图2 圆柱在垂直通道中沉降的示意图, $\mathbf{G}$ 是重力, $\mathbf{V}$ 是参考系的速度^[15]

Figure 2 A schematic diagram of a cylinder sedimentation in a vertical channel, $\mathbf{G}$ is the gravity and $\mathbf{V}$ is the velocity of the reference frame [15].

的释放位置距离左边的管壁0.076 cm, 重力加速度为 $|\mathbf{G}|=980 \text{ cm/s}^2$. 流体密度和运动学黏度分别为 1 g/cm^3 和 $0.01 \text{ cm}^2/\text{s}$. 在当前的模拟计算中, 弛豫时间选为0.6, 圆柱的直径为 $d=30$ 格子宽度, 相应的通道宽度取为 $L=120$ 格子. 通道的高度设置为 $H=800$ 格子. 圆柱放置在距离左边管壁19.76个格子的水平位置, 在垂直方向上则保持在通道的中部. 通道入口和出口的流体都一致地设置为0速度, 关联参考系的速度为 $\mathbf{V}$. 我们使用Hu等人^[57,58]采用任意拉格朗日-欧拉技术的研究作为基准数据.

共做了两组模拟, 圆柱的密度分别为1.003和1.03 g/cm^3 , 最终的雷诺数相应为1.03和8.33. 雷诺数的定义采用 $Re = du_p/\nu$, 其中 u_p 是到达平衡态后圆柱的运动速度, ν 是动力学黏度. 在这个流体系统上分别关联了几个匀速参考系, 即一开始就为流体、圆柱和管道分配了相同的初始速度, 前者初始速度为 $\mathbf{V}=0, 0.001, 0.002$, 后者初始速度为 $\mathbf{V}=0, 0.01, 0.02$.

图3和4画出了圆柱运动相对于管道的时间相关的轨迹、角速度、水平和垂直速度, 并给出了采用Arbitrary Lagrangian-Eulerian Technique (ALE)^[57]的计算结果. 可以清楚地看出, 即使参考速度为0, CME的结果和ALE基准之间仍然有相当大的偏离, 而且偏离随着参考速度的增加而加大. 这说明CME不适合用于涉及边界运动的数值模拟. 与此相反, 无论参考系的速度是多少, GME的结果都和基准数据符合得非常好, 有力地支持了GME的伽利略不变性, 因此我们只画了一条线来代表多个参考系下GME的模拟结果.

3.5 流体力计算的精度

现在, 我们不关联参考系, 用密度为1.03 g/cm^3 的

图 3 (网络版彩图)圆柱相对管道时间相关的运动轨迹(a)、角速度(b)、水平速度(c)和垂直速度(d). 圆柱的密度为 1.003 g/cm^3 , 最终的雷诺数为 1.03 . 参考系的速度分别为 $V=0, 0.001, 0.002$ [15]

Figure 3 (Color online) Time-dependent trajectories (a), angular velocities (b), horizontal velocities (c) and vertical velocities (d) relative to the channel. The density of the cylinder is 1.003 g/cm^3 and the terminal Reynolds numbers is 1.03 . The dynamic simulation system is connected to three velocities of the reference frame, i.e., $V=0, 0.001$, and 0.002 [15].

图 4 (网络版彩图)圆柱相对管道时间相关的运动轨迹(a)、角速度(b)、水平速度(c)和垂直速度(d). 圆柱的密度为 1.03 g/cm^3 , 最终的雷诺数为 8.33 . 参考系的速度分别为 $V=0, 0.01, 0.02$ [15]

Figure 4 (Color online) Time-dependent trajectories (a), angular velocities (b), horizontal velocities (c) and vertical velocities (d) relative to the channel. The density of the cylinder is 1.03 g/cm^3 and the terminal Reynolds numbers is 8.33 . The dynamic simulation system is connected to two velocities of the reference frame, i.e., $V=0, 0.01$, and 0.02 [15].

圆柱在垂直管道中的沉降来验证GME方法对流体力计算精度的改进. 图5(a)和(b)比较了GME算法和CME, Aidun等人^[7]提出的方法(ALD)和格子类型相关的动量交换法(Lattice-Typ-Dependent Momentum Exchange, LME)^[14], 以及用ALE方法计算的基准数据. 采用GME方法的流体力计算结果和基准数据精确地符合, ALD和LME的计算结果包含巨大的涨落. 值得注意的是, 图中GME的结果都是原始数据, 而ALD和LME的结果已采用近邻平均法做了平滑处理, 水平力的平滑窗口为30个点, 垂直力的平滑窗口为100个点. 由于力的计算精度大幅度提高, GME方法计算流体力时局部的涨落非常小, 因此数值模拟中经常采用的时间平均法已不再需要.

我们采用多种格子尺度对密度为 1.03 g/cm^3 的圆柱沉降进行建模, 执行了一系列模拟, 仔细比较了不同动量交换法计算流体力的格子尺度效应. 管道的宽度是 0.4 cm , 圆柱的直径是 0.1 cm . 管道的格子宽度从

50逐渐增加到200个格子单位, 同时管道长度保持是宽度的10倍. 流体力计算的偏差用相对误差表示, 计算公式为

$$E = \frac{\left\{ \int [f(t) - F(t)]^2 dt \right\}^{\frac{1}{2}}}{\left\{ \int [F(t)]^2 dt \right\}^{\frac{1}{2}}}, \quad (18)$$

其中, $f(t)$ 表示LBM的计算结果, $F(t)$ 表示ALE的计算结果. 图5(c)给出了几种方法的相对误差, 可以看出, GME方法的相对误差随格子尺度的增大而快速减小, 而ALD和LME方法的相对误差一直很大, 大约高出GME方法两个数量级.

需要强调的是, GME方法计算结果中的小涨落并非来源于方程(12), 它们主要是由于计算新生流体点上分布函数时的误差造成的, 有希望被进一步减小. 使用流固连线上附近的流体点数据, 我们用了3种直观的算法计算新生流体点上的分布函数, 即二次外推

图 5 (网络版彩图) (a) 圆柱上时间相关的水平方向的力; (b) 圆柱上时间相关的垂直方向的力; 分别采用GME, LME和ALD计算, 并和ALE的基准数据相比较. 圆柱密度为 1.03 g/cm^3 . GME是原始数据, ALD和LME的数据采用近邻平均法做了平滑处理. (c) 多个格子尺度下, 水平力(F_x , 黑色)和垂直力(F_y , 蓝色)的相对误差; (d) 在GME的实施中, 采用3个不同算法计算新生流体点上的分布函数所获得的水平力, 即二次外推算法(A1), 线性外推算法(A2)和临近点平均法(A3)^[15]

Figure 5 (Color online) (a) Time-dependent horizontal forces; (b) time-dependent vertical forces evaluated by GME, LME, and ALD, compared with the ALE benchmark. The density of the cylinder is 1.03 g/cm^3 . The GME data is raw, whereas the ALD and LME data have been smoothed by the adjacent-averaging method. (c) The relative L_2 -norm error of the horizontal forces (F_x , black) and vertical forces (F_y , blue) under increasing lattice scales; (d) horizontal forces in GME simulations coupled with the different algorithms to fill the newborn fluid nodes, second-order extrapolation (A1), linear extrapolation (A2) and neighbor-node average (A3) ^[15].

算法(A1), 线性外推算法(A2)和临近点平均法(A3). 如果参与的流固连线多于一条, 则取其计算结果的平均值. 图5(d)清楚地表示, 好的算法能够显著减小流体力计算的涨落. 本章的其他模拟计算中也采用A1算法. 请参考文献[47,52,59]了解更多有关新生流体点的计算方法.

3.6 数值计算的涨落

我们进一步分析了密度为 1.03 g/cm^3 的圆柱沉降采用GME, ALD和LME方法时速度和角速度的数值波动. 如图6(a)–(c)所示, GME计算的速度和角速度非常平滑, 而且和ALE基准数据精确地符合, 然而ALD和LME的结果不但波动大而且明显的偏离基准数据.

为了考察雷诺数的影响, 我们执行了一系列模拟, 圆柱的密度从 1.02 逐渐增加到 1.22 g/cm^3 . 颗粒运动的雷诺数计算公式采用 $Re = du/\nu$, 其中 d 是管道的直径, u 是圆柱的最终下落速度, ν 是流体的运动学黏度. 在这些模拟中, 雷诺数从 6.13 增加到 34.75 . 波动的程度

采用公式(18)的相对量描述, 其中 $f(t)$ 表示LBM的计算结果, $F(t)$ 表示数据采用平滑窗口为20个点的近邻平均法处理后的结果. 从图6(d)可以看出, GME结果比ALD和LME的结果更精确而且更稳定, 涨落要小一个数量级. 采用GME算法后, 速度级的时间平均完全不需要了.

3.7 三维圆球Segré-Silberberg效应

GME能够很方便地应用于三维情形. 如图7, 模拟计算了悬浮的刚性圆球在Poiseuille流中的侧向迁移运动, 即Segré-Silberberg效应^[60–62]. 对照实验的设置, 管道的直径为 0.2 cm , 圆球的直径为 0.061 cm . 流体和圆球的密度为 1.05 g/cm^3 , 流体的动力学黏度为 1.2 泊, 流量为 $0.0711 \text{ cm}^3/\text{s}$. 在模拟计算中, 圆球的半径为 5.9 个格子单位, 管道长度为 150 个格子单位, 弛豫时间为 0.6 , 其他参数相应可得. 管道入口到出口的压力差为 1.825×10^{-5} , 采用压力边界条件^[63]进行出入口处理. 圆球的释放位置用无量纲的径向位置 r^*/R 表示, 其中 r^* 是

图6 (网络版彩图)时间相关的水平速度(a)、垂直速度(b)、角速度(c)分别采用GME, LME和ALD计算, 并和ALE的基准数据相比较. (d) 不同圆柱密度的模拟中, 水平速度(V_x , 黑色)和角速度(ω , 红色)的相对误差^[15]

Figure 6 (Color online) Time-dependent horizontal velocities (a), vertical velocities (b), and angular velocities (c) evaluated by GME, LME, and ALD, compared with the ALE benchmark. (d) The relative L_2 -norm errors of the horizontal velocity (V_x , black) and the angular velocity (ω , red) with various cylinder densities ^[15].

图7 三维的刚性圆球悬浮在Poiseuille流中迁移运动的示意图^[15]

Figure 7 A schematic diagram of a neutrally buoyant sphere migrating in a tube Poiseuille flow [15].

到管道中心线的径向距离.

图8画出了分别从径向位置 $r^*/R=0.21, 0.66$ 释放的圆球的运动轨迹. 不同于二维的圆柱模拟^[14], 圆球的平衡位置更加远离中心线. 基于LBM和GME的模拟结果与Karnis等人^[64]的实验观察一致符合, 验证了GME方法完全胜任三维颗粒悬浮运动的精确模拟.

在晶格Boltzmann方法中, 离散速度是预定义的常数, 同时可以将分布函数看作质量分量, 动量的传递可以方便地计算, 因此动量交换法是LBM中独有的算法, 可以高效地计算出边界上的流体作用力. 但是CME一直存在着计算精度低、数值涨落大和不具有伽利略不变性等问题, 难以用于精确地模拟复杂流体的运动. 本节中, 提出了伽利略不变的动量交换法, 采用相对速度计算界面上的动量传递. 理论分析和数值计算结果都表明该方法严格地具有伽利略不变性. 我们进一步发现, 伽利略不变性不但是一个模型理论上必须满足的基本原则, 它也在改进LBM数值模拟精度中起着关键的作用. 通过直接数值模拟圆柱沉降和三维的Segré-Silberberg效应证实, GME能够精确刻画悬浮颗粒在动态流场中的行为, 并且具有非常出色的稳定性. 伽利略不变的动量交换法只使用局部数据, 独立于边界的几何形状, 因此它易于实现, 运行高效, 而且能方便地应用于二维和三维情形下流体的运动模拟. GME可以和多种曲线边界条件组合^[52-56], 可以在SRT, MRT, TRT和ELBE等多种晶格Boltzmann模型上使用, 已经被成功地用于研究各种颗粒悬浮运动^[65-71]. 近期关于动量交换法的一些研究可以参考文献^[72-75]和晶格Boltzmann方法流体力计算的相关综述文献^[76].

4 基于热力学的非理想力计算

多相流普遍存在于许多自然现象和工程应用之中, 其数值模拟有着重要的意义, 近年来吸引了人们越

图8 (网络版彩图)用晶格Boltzmann方法和GME模拟计算三维的Segré-Silberberg效应^[15]

Figure 8 (Color online) Three-dimensional simulations of the Segré-Silberberg effect by the lattice Boltzmann equation with GME [15].

来越多的关注. LBM是根植于介观层次的数值模拟方法, 非常适合应用于相分离的模拟研究^[77-80]. 在这些研究中, 不可避免地会发生诸如相界面的破裂和合并等严重的拓扑畸变, 传统直接求解Navier-Stokes方程的系列方法处理起来会遇到难以克服的数值困难. 到目前为止, LBM领域已经基于不同的理论背景开发出几个多相流模型, 例如颜色模型^[81]、伪势模型^[25,26]、自由能模型^[27,28]、相场模型^[82]、可压缩模型^[83-86]和基于熵的模型^[87]等. Shan等人^[25,26]采用密度相关的粒子间相互作用势来模拟分子之间的作用力, 提出了应用最为广泛的伪势模型. 但是, 理论分析表明, 只有当有效密度严格取 $\psi(\mathbf{x}) = \psi_0 \exp(-\rho/\rho_0)$ 的形式, 伪势模型的力学平衡解才具有热力学一致性. 因此, 不管有效密度是取常见的形式 $\psi(\mathbf{x}) = 1 - \exp(-\rho/\rho_0)$, 还是取近来的改进形式 $\psi(\mathbf{x}) = \sqrt{2(p - \rho c_s^2)/G}$, 伪势模型都是非热力学一致的. 这里 ρ_0 和 ψ_0 分别为参考密度和有效质量, ρ 代表密度, p 是由状态方程给出的压强, G 用来保证根号内取正值. 这个不一致性直接表现在伪势模型计算的两相共存密度偏离了Maxwell等面积构造的理论预期结果^[88,89]. Swift等人^[27,28]将非理想的热力学压力张量引入到LBM的二阶速度平衡矩, 提出了基于自由能的多相流模型. 虽然Swift模型严格满足热力学一致性, 但是它导出的Navier-Stokes方程黏性应力项的第一次导数中包含了密度, 从而破坏了伽利略不变性^[27]. Inamuro等人^[90,91]采用渐进分析技术缓解了Swift模型在伽利略不变性方面存在的问题, 并扩展到大密度比多相流的模拟. 采用Swift模型模拟二元流体时, 通常使用两个分布函数, 一个采用标准的晶格Boltzmann方程演化压力和速度场, 另一个通过Cahn-Hilliard方

程捕获相界面^[92]. Xu等人^[93,94]修正了Swift模型中压强和迁移率等矩关系的定义式和平衡态分布函数的计算公式, 提出通过负反馈等机制来提高LBM模拟过程的数值稳定性, 并将LBM与有限差分相耦合, 采用异构系统模拟复杂的多相流^[95,96], 进一步内容可参考相关综述文献^[97,98].

热力学一致性和伽利略不变性是多相流数值模型必须具备的两个基本理论属性. 前者是数值模型能够正确产生相间平衡的保障; 后者则有助于模型能够精确地描述多相流的运动. 因此, 同时具备这两个基本属性的多相流数值模型具有重要的理论意义和实际应用价值.

4.1 基于热力学多相流模型

基于LBM构造多相流模型一般包括两个部分, 即首先计算多相流体的非理想力; 然后再将非理想力融合到晶格Boltzmann方程. 在van der Waals (VDW)流体中, 含有梯度平方近似的自由能泛函可表示为^[27,99]

$$\mathcal{F} = \int \left(\psi(\rho) + \frac{\kappa}{2} |\nabla \rho|^2 \right) d\mathbf{x}, \quad (19)$$

方程右边被积函数的第一项是在温度为 T 时体相的自由能密度:

$$\psi(\rho) = \rho T \ln \left(\frac{\rho}{1 - \rho b} \right) - a \rho^2, \quad (20)$$

ρ 为密度, 第二项给出了非均匀系统中密度梯度对自由能的贡献. 自由能函数决定了压力张量的对角项:

$$p(\mathbf{x}) = p_0 - \kappa \rho \nabla^2 \rho - \frac{\kappa}{2} |\nabla \rho|^2, \quad (21)$$

其中, van der Waals流体的状态方程为

$$p_0 = \rho \psi'(\rho) - \psi(\rho). \quad (22)$$

其全压力张量则可以写为

$$P_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) = p(\mathbf{x}) \delta_{\alpha\beta} + \kappa \frac{\partial \rho}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \rho}{\partial x_\beta}. \quad (23)$$

这里, $\delta_{\alpha\beta}$ 是Kronecker符号. 相对于理想气体压强, 非理想力可以直接基于超压部分计算出来^[29]:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = -\nabla \cdot \mathbf{P}(\mathbf{x}) + \nabla \cdot \mathbf{P}_0(\mathbf{x}), \quad (24)$$

此处, $\mathbf{P}_0 = c_s^2 \rho \mathbf{I}$ 是理想气体状态方程.

假定非理想力作用于粒子的碰撞过程, 根据动量定理, 它的作用将使得平衡分布函数中粒子的动量增

加, 于是方程(7)中的速度被所谓的平衡速度替换^[100,101]:

$$\mathbf{u}^{(eq)} = \mathbf{u} + \frac{\tau \mathbf{F}}{\rho}. \quad (25)$$

相应地, 流体的宏观速度按照碰撞前后的平均动量重新定义:

$$\mathbf{v} = \mathbf{u} + \frac{\mathbf{F}}{2\rho}. \quad (26)$$

4.2 模型的热力学一致性

不失一般性, 假设气液界面是沿 y 方向发展的平面. 在此流场中, 对角形式的压力张量可以写为

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = P_{xx}(y) \mathbf{e}_x \mathbf{e}_x + P_{yy}(y) \mathbf{e}_y \mathbf{e}_y + P_{zz}(y) \mathbf{e}_z \mathbf{e}_z. \quad (27)$$

由对称性可以得到它的两个横向分量是相同的 $P_{xx}(y) = P_{zz}(y)$. 一个平衡的系统必须满足力学平衡条件^[102]:

$$\nabla \cdot \mathbf{P}(\mathbf{r}) = 0. \quad (28)$$

相应地, 法向分量会满足:

$$\frac{\partial}{\partial y} P_{yy}(y) = 0, P_{yy}(y) = P_{\text{bulk}} = \text{const}, \quad (29)$$

也就是说, 在平衡的两相共存系统中, 气液两相具有相同的压力. 将方程(21)带入方程(23), 全压力张量可以改写为

$$P_{\alpha\beta} = \left[p_0 - \kappa \rho \nabla^2 \rho - \frac{\kappa}{2} (\nabla \rho)^2 \right] \delta_{\alpha\beta} + \kappa \frac{\partial \rho}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \rho}{\partial x_\beta}. \quad (30)$$

于是, 它的法向分量($\alpha = \beta = y$)可以写成

$$P_{yy} = p_0 - \kappa \rho \frac{d^2 \rho}{dy^2} + \frac{\kappa}{2} \left(\frac{d\rho}{dy} \right)^2. \quad (31)$$

由方程(31)可以得到

$$P_{\text{bulk}} - p_0 = -\frac{\kappa}{2} \rho^2 \frac{d}{d\rho} \left[\frac{1}{\rho} \left(\frac{d\rho}{dy} \right)^2 \right]. \quad (32)$$

将方程(32)积分可得

$$\left(\frac{d\rho}{dy} \right)^2 = -\frac{2\rho}{\kappa} \int_{\rho_g}^{\rho_l} [P_{\text{bulk}} - p_0] \frac{1}{\rho^2} d\rho. \quad (33)$$

其中, ρ_g 和 ρ_l 分别是气相和液相的密度. 在气液两相的深处, 采用如下边界条件:

$$\left. \frac{d\rho}{dy} \right|_{\rho=\rho_l} = \left. \frac{d\rho}{dy} \right|_{\rho=\rho_g} = 0, \quad (34)$$

将方程(33)左边积分即得到力学平衡条件:

$$\int_{\rho_g}^{\rho_l} [P_{\text{bulk}} - p_0(\rho)] \frac{1}{\rho^2} d\rho = 0. \quad (35)$$

另一方面, 从热力学的观点出发, 当两相之间达到相平衡的时候必须满足Maxwell等面积规则:

$$\int_{v_g}^{v_l} [P_{\text{bulk}} - p_0(\rho)] dv = 0. \quad (36)$$

此处, $p_0(\rho)$ 是状态方程, v_g 和 v_l 分别是气液两相的摩尔体积. 将方程(36)改写为对 ρ 的积分, 则得到

$$\int_{\rho_g}^{\rho_l} [P_{\text{bulk}} - p_0(\rho)] \frac{1}{\rho^2} d\rho = 0. \quad (37)$$

方程(35)和(37)的比较表明: 由当前多相流模型导出的力学平衡条件与Maxwell等面积规则得到的结果完全相同. 所以, 当前的多相流模型理论上具有热力学一致性^[29].

4.3 模型的伽利略不变性

考虑了非理想力 $\mathbf{F}$ 之后, 晶格Boltzmann方程被改写为

$$\begin{aligned} & f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{x}, t) \\ &= -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{(\text{eq})}(\rho, \mathbf{u}^{(\text{eq})})]. \end{aligned} \quad (38)$$

方程中的平衡分布函数满足如下关系^[25,51,101,103]:

$$\begin{aligned} \sum_i f_i(\mathbf{x}, t) &= \sum_i f_i^{(\text{eq})}(\rho, \mathbf{u}^{(\text{eq})}) = \rho, \\ \sum_i \mathbf{e}_i f_i^{(\text{eq})}(\rho, \mathbf{u}^{(\text{eq})}) &= \rho \mathbf{u}^{(\text{eq})} = \sum_i \mathbf{e}_i f_i(\mathbf{x}, t) + \tau \delta_t \mathbf{F}, \\ \sum_i e_{ia} e_{i\beta} f_i^{(\text{eq})}(\rho, \mathbf{u}^{(\text{eq})}) &= p_0 \delta_{a\beta} + \rho u_a^{(\text{eq})} u_\beta^{(\text{eq})}. \end{aligned} \quad (39)$$

此处, $p_0 = c_s^2 \rho$ 是理想气体压力, c_s 是声速. 应用Chapman-Enskog展开分析, 可以从方程(38)和(39)恢复宏观Navier-Stokes方程. 首先将 $f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t)$ Taylor 展开到二阶, 则方程(38)可以改写为

$$\begin{aligned} & \delta_t \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla \right) f_i + \frac{\delta_t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla \right)^2 f_i \\ &+ \frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{(\text{eq})}(\rho, \mathbf{u}^{(\text{eq})})) = 0. \end{aligned} \quad (40)$$

将分布函数、时间和空间导数按照Knudsen数 ε 展开:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} &= \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2}, \\ \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} &= \varepsilon \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1}, \\ f_i &= f_i^{(\text{eq})}(\rho, \mathbf{u}^{(\text{eq})}) + \varepsilon f_i^{(1)} + \varepsilon^2 f_i^{(2)} + \dots \end{aligned} \quad (41)$$

外力 $\mathbf{F}$ 也进行相应的展开^[51,103]:

$$\mathbf{F} = \varepsilon \mathbf{F}^{(0)}, \quad F_i = \varepsilon F_i^{(0)}. \quad (42)$$

将方程(41)带入(40), 可得下列关系:

$$O(\varepsilon): \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) f_i^{(\text{eq})}(\rho, \mathbf{u}^{(\text{eq})}) + \frac{1}{\tau \delta_t} f_i^{(1)} = 0, \quad (43)$$

$$\begin{aligned} O(\varepsilon^2): & \frac{\partial}{\partial t_2} f_i^{(\text{eq})}(\rho, \mathbf{u}^{(\text{eq})}) \\ &+ \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 \right) f_i^{(1)} + \frac{1}{\tau \delta_t} f_i^{(2)} = 0. \end{aligned} \quad (44)$$

分别应用方程(43)和(44)的0阶和1阶矩, 经过一些直接的计算, 可恢复下列质量和动量方程:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (\rho u_\alpha^{(\text{eq})}) = \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \delta_t \frac{\partial F_\alpha}{\partial x_\alpha}, \quad (45)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_\alpha^{(\text{eq})}) + \frac{\partial}{\partial x_\beta} (\rho u_\alpha^{(\text{eq})} u_\beta^{(\text{eq})}) \\ &= -\frac{\partial p_0}{\partial x_\alpha} + F_\alpha + \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \delta_t \varepsilon \frac{\partial F_\alpha}{\partial t_1} \\ &+ \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \delta_t \frac{\partial}{\partial x_\beta} (u_\beta^{(\text{eq})} F_\alpha + u_\alpha^{(\text{eq})} F_\beta) \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left[\rho c_s^2 \left(\frac{\partial u_\beta^{(\text{eq})}}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha^{(\text{eq})}}{\partial x_\beta} \right) \right]. \end{aligned} \quad (46)$$

应用方程(25)和(26), 并忽略高阶的附加项, 最终可得连续性方程和动量方程^[51,103]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (47)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) \\ &= -\nabla p_0 + \mathbf{F} + \nabla \cdot [\rho \mathbf{v} (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T)], \end{aligned} \quad (48)$$

方程(48)右边的前两项之和等于方程(24)所表述的

全压力张量散度 $-\nabla \cdot \mathbf{P}$, 这反映当前的介观模型保持了正确的宏观压力张量. 如果没有非理想力 $\mathbf{F}$, 方程(47)和(48)是标准的理想流体Navier-Stokes方程. 众所周知, 它们满足伽利略不变性. 而另一方面, 计算非理想力 $\mathbf{F}$ 的方程(24)和理想气体压力张量都与宏观速度无关, 所以 $\mathbf{F}$ 一定是伽利略不变的. 因此, 当前的多相流模型理论上满足伽利略不变性^[29].

4.4 数值模拟和验证

我们通过模拟一级相变现象来考察和验证当前的多相流模型. 计算域是一个 200×200 的正方形流场, 周围采用周期性边界条件. 为了将模拟与实际物理属性相联系, 采用了折合变量 $T_r = T/T_c$ 和 $\rho_r = \rho/\rho_c$, 其中 T_c 和 ρ_c 分别是临界温度和临界密度.

为了验证数值模型的热力学一致性, 我们采用Maxwell等面积构造解出的两相共存密度作为基准. 气液两相的界面是水平的, 流场的中部初始化为液体, 其余部分设置为气体. 首先计算了最常用的van der Waals状态方程:

$$p_0 = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - a\rho^2, \quad (49)$$

其中, R 是普适气体常数, a 是吸引参数, b 是体积参数. 他们分别取值为 $R = 1$, $a = 9/49$ 和 $b = 2/21$. 相应的临界温度和临界密度分别为 $T_c = 4/7$ 和 $\rho_c = 7/2$. 从图9(a)可以清楚地看到当前模型的共存密度分布与基准值符合得很好. 图9(b)进一步显示了两相过渡区的密度分布, 数值结果与它的理论预期(双曲正切曲线)相符合^[99]. 这些结果从数值方面证实了当前的模型是热力学一致的. 但是, 修正的伪势模型^[88]表现出与基准值明显的偏离, 特别是在气相一侧. 在过渡区靠近液相的肩部也可以看到明显的隆起.

虚流动通常出现在曲线形的气液界面附近, 会严重干扰多相流的数值模拟结果^[100,104]. 通过模拟无重力环境下气相包围的液滴来考察本数值模型的虚速度. 当系统处于力学平衡状态时, 最大的宏观速度代表了虚流动的强度. 如图10所示, 当前模型的虚流动明显低于改进的伪势模型. 因为虚流动处于很低的水平, 当前的模型可以在模拟液滴运动、马兰哥尼流、瑞利流等多相流时, 更精确地捕获流体的行为.

一个多相流数值模型应当是可扩展的, 能够尽可

图9 (网络版彩图) (a) VDW状态方程的两相共存曲线; (b) 气液界面过渡区的密度分布^[29]

Figure 9 (Color online) (a) Two-phase coexistence curve of van der Waals' EOS; (b) the density profiles in the transition region of liquid-gas interface ^[29].

能多地模拟真实的物理系统. 通过替换方程(22), 当前模型可以方便地耦合多种状态方程. 这里, 采用著名的Peng-Robinson (PR)状态方程^[105]来建模常见的水气系统:

$$p_0 = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - \frac{a\alpha(T)\rho^2}{1 + 2b\rho - b^2\rho^2}, \quad (50)$$

其中, 参数设置为 $R=1$, $a=2/49$ 和 $b=2/21$. $\alpha(T)$ 是温度函数, 其定义为

$$\alpha(T) = [1 + (0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2) \times (1 - \sqrt{T/T_c})]^2.$$

为了模拟水和水蒸气, 偏心因子取为 $\omega = 0.344$. 结果, 临界温度和临界密度分别为 $T_c = 0.072919$ 和 $\rho_c = 2.657304$. 图11(a)画出了PR状态方程计算的两

图 10 (网络版彩图)比较伪势模型和当前模型的虚速度^[29]
Figure 10 (Color online) Comparison of the spurious current between the Shan-Chen and the present model [29].

相共存密度, 与来自Maxwell等面积构造的基准值符合得非常好. 因此, 只要选择合适的状态方程, 当前的

模型就能够准确地模拟真实的物理系统.

伽利略不变性不仅是惯性参照系下物理定律必须具有的特性, 在改进晶格Boltzmann数值模拟精度方面也起到重要的作用^[15,90]. 在多个参考系中模拟了圆形液滴, 用液滴尺寸和表面圆的程度来验证当前模型的伽利略不变性. 考虑到LBM的对称性, 只需要考察方向在 $\pi/4$ 范围内的参考系速度. 我们选择了具有代表性的 0° , 10° , 22.5° , 30° 和 45° 共5个速度方向, 对应的液滴半径分别是30, 32, 34, 36和38个格子单位. 参考速度的大小为每时步0.01格子单位. 模拟的温度为 $T_r = 0.8$. 如图11(b)所示, 从1万步演化到1千万时步, 液滴的形状几乎没有变化. 液滴的尺寸仅仅比初始尺寸轻微减小了0.2%. 而伪势模型和Swift模型在关联参考速度之后液滴大小和形状都有明显变化^[89,90]. 所模拟的液滴尺寸在各个方向上的波动幅度^[15]相似, 在所有模拟中

图 11 (网络版彩图) (a) Peng-Robinson状态方程的两相共存密度; (b) 在多个运动方向上验证模型的伽利略不变性; (c) 验证Laplace定律, 实线的斜率等于表面张力; (d) 用 κ 值调整表面张力或减小虚流动^[29]
Figure 11 (Color online) (a) Two-phase coexistence curve of Peng-Robinson (water) EOS; (b) test of galilean invariance in multi-directions; (c) confirmation of the laplace law, the solid line has a slope equal to the surface tension; (d) adjustment of surface tension or reduction of spurious current by the κ values [29].

都小于0.01%. 对于速度方向 0° , 10° , 22.5° , 30° 和 45° , x 和 y 方向上半径的最大差值分别只有0.019, 0.017, 0.016, 0.015和 6×10^{-12} 格子长度. 这从数值上验证了当前的模型是充分伽利略不变的, 而且在对角线方向上对称度最好.

表面张力是气液两相界面的基本物理属性. 在图11(c)中, 采用验证Laplace定律的实例考察了当前模型计算的表面张力. Laplace定律反映了液滴内外压力差 ΔP 、液滴半径 R 和表面张力 σ 之间的关系: $\Delta P = \sigma / R$. 在4个不同温度下进行了模拟计算, 分别为 $T_r = 0.75, 0.8, 0.85, 0.9$. 结果显示, 压力差随着半径倒数的增加而线性地增加. 图中各条线都有一个稳定的斜率, 代表了该温度下的表面张力大小. 当前多相流模型还有一个额外的与表面张力相关的可调参数 κ . 图11(d)画出了温度 T_r 为0.85和0.9时, 参数 κ 的改变对表面张力和虚流动的影响. 随着 κ 值均匀的从0.005增加到0.05, 表面张力逐渐的增大, 而虚流动显著地减小了. 因此, 当前的模型可以灵活地调整表面张力以匹配真实的物理系统, 或者减小数值模拟中虚流动的影响.

晶格Boltzmann方程被广泛地用于求解各种类型的流体力学问题. 由于出色的有效性和高效率, 它在数值模拟多相流领域更是深受欢迎. 我们直接从多相流的自由能出发计算非理想效应, 提出了一个可靠的数值多相流模型, 其热力学一致性和伽利略不变性得到了理论证明和充分地数值验证^[29]. 这个模型可以配合不同的状态方程, 模拟各种各样的多相流系统, 其中的可调参数 κ 能够用于减小虚流动或调整表面张力以满足实际研究的需求. 当前的多相流模型具有坚实的物理基础, 能够方便地推广应用于三维模拟或者在多弛豫、双弛豫等其他晶格Boltzmann模型上实施.

5 基于化学势的非理想力计算

化学势 (Chemical Potential, CP) 是定压下的偏摩尔吉布斯自由能. Onsager和Stefan-Maxwell不可逆热力学公式认为化学势的梯度是绝热质量传输的驱动力^[106,107]. 分子从高化学势向低化学势转移的过程伴随着自由能的释放, 当自由能达到最小时, 多相流系统实现化学平衡或相平衡. 所以, 化学势是驱动相分离并达到相平衡和表达表面润湿性的有效途径.

5.1 基于化学势的多相流模型

第4节的多相流模型直接从经典的热力学理论导出, 具有热力学一致性和伽利略不变性. 然而, 非理想力计算中压力张量及其散度的计算既耗时又占用大量空间. 进一步地分析也发现, 压力张量很难方便地用于表示固体表面的润湿性. 所以, 引入化学势来计算非理想力和模拟润湿现象^[30]. 对于van der Waals流体, 化学势可以从自由能密度函数导出^[92,99,108]:

$$\mu = \frac{\partial \Phi}{\partial \rho} - \nabla \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial (\nabla \rho)}, \quad (51)$$

其中

$$\Phi(\rho) = \psi(\rho) + \frac{\kappa}{2}(\nabla \rho)^2. \quad (52)$$

所以, 化学势的计算可以基于密度和自由能密度

$$\mu = \psi'(\rho) - \kappa \nabla^2 \rho. \quad (53)$$

将方程(21)代入(23)得

$$P_{\alpha\beta} = \left[p_0 - \kappa \rho \nabla^2 \rho - \frac{\kappa}{2}(\nabla \rho)^2 \right] \delta_{\alpha\beta} + \kappa \frac{\partial \rho}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \rho}{\partial x_\beta}. \quad (54)$$

再将方程(22)带入方程(54), 压力张量散度的 α 分量可以表示为

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_\beta} P_{\alpha\beta} = & \frac{\partial}{\partial x_\alpha} [\rho(\psi'(\rho) - \kappa \nabla^2 \rho) - \psi(\rho)] \\ & - \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[\frac{\kappa}{2}(\nabla \rho)^2 \right] + \kappa \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \rho}{\partial x_\beta} \right), \end{aligned} \quad (55)$$

将方程(53)带入方程(55), 经过一些基本运算, 容易得到压力张量散度与化学势梯度之间一个非常简洁的关系^[30]:

$$\nabla \cdot P = \rho \nabla \mu. \quad (56)$$

继续将方程(56)带入方程(24), 即得到基于化学势的非理想力计算公式^[30]:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = -\rho \nabla \mu + \nabla \cdot \mathbf{P}_0(\mathbf{x}). \quad (57)$$

非理想力基于压力张量表示的方程(24)与基于化学势表示的方程(57)在数学上完全等价, 然而其表示形式、数值计算效率与精度则有所不同^[108]. 我们既可以采用4.1节中描述的平衡速度修正方式将非理想力耦合到晶格Boltzmann方程, 也可以采用其他的力项形式^[50,51]. 不过, 不同力项形式的计算结果存在着比较

明显的差别.

很显然,在上述推导过程中,不需要明确指定具体的状态方程;只要状态方程遵循方程(22),并且相应的化学势由方程(51)定义,上述非理想力的计算就是成立的.因此,基于化学势的多相流模型也可以配合不同的状态方程使用,例如van der Waals, Redlich-Kwong, Peng-Robinson, Carnahan-Starling等状态方程.由于方程(56)与基于压力张量的方程(24)具有数学上的等价性,所以基于化学势的多相流模型在理论上也满足热力学一致性和伽利略不变性.同时,由于避免了计算压力张量及其散度,基于化学势的模型在计算效率和存储空间的使用上都更高效,特别是在模拟三维多相流系统时这一特性尤为突出.

5.2 状态方程对应的化学势

对于一个给定的状态方程 p_0 ,方程(22)是一个典型的一阶线性常微分方程,容易得到自由能密度的通解为

$$\psi = \rho \left(\int \frac{p_0}{\rho^2} d\rho + C \right), \quad (58)$$

其中, C 是一个常数,它不会出现在非理想力的计算中.将其带入方程(53)即可求出状态方程对应的化学势.我们选择了几个广泛使用的状态方程,明确计算出自由能密度和化学势^[30].

最著名的状态方程当属van der Waals方程,即4.4节的方程(49).解方程(53)和(58)容易得到范氏方程相应的自由能密度和化学势为

$$\psi = \rho RT \ln \left(\frac{\rho}{1 - b\rho} \right) - a\rho^2 \quad (59)$$

和

$$\mu = RT \left[\ln \left(\frac{\rho}{1 - b\rho} \right) + \frac{1}{1 - b\rho} \right] - 2a\rho - \kappa \nabla^2 \rho. \quad (60)$$

Redlich-Kwong (RK)状态方程改进了van der Waals方程的吸引项,得到了更精确的结果:

$$p_0 = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - \frac{a\alpha(T)\rho^2}{(1 + b\rho)}, \quad (61)$$

其中温度函数 $\alpha(T) = 1 / \sqrt{T}$. Soave的改进方程(RKS)包含了一个更为复杂的温度函数,

$$\alpha(T) = [1 + (0.480 + 1.574\omega - 0.176\omega^2) \times (1 - \sqrt{T_r})]^2,$$

其中 ω 是针对不同物质的偏心因子.这两个状态方程的自由能密度和化学势是相同的

$$\psi^{\text{RK}} = RT\rho \ln \frac{\rho}{1 - b\rho} - \frac{a\alpha(T)}{b} \rho \ln(1 + b\rho) \quad (62)$$

和

$$\mu^{\text{RK}} = RT \ln \frac{\rho}{1 - b\rho} + \frac{RT}{1 - b\rho} - \frac{a\alpha(T)}{b} \ln(1 + b\rho) - \frac{a\alpha(T)\rho}{1 + b\rho} - \kappa \nabla^2 \rho. \quad (63)$$

Peng-Robinson (PR)状态方程通常在表达液体密度上表现得更优越,

$$p_0 = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - \frac{a\alpha(T)\rho^2}{1 + 2b\rho - b^2\rho^2}, \quad (64)$$

其中温度函数表示为

$$\alpha(T) = [1 + (0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2) \times (1 - \sqrt{T/T_c})]^2.$$

它的自由能密度和化学势分别为

$$\psi^{\text{PR}} = RT\rho \ln \frac{\rho}{1 - b\rho} - \frac{a\alpha\rho}{2\sqrt{2}b} \ln \frac{\sqrt{2} - 1 + b\rho}{\sqrt{2} + 1 - b\rho} \quad (65)$$

和

$$\mu^{\text{PR}} = RT \ln \frac{\rho}{1 - b\rho} - \frac{a\alpha(T)}{2\sqrt{2}b} \ln \frac{\sqrt{2} - 1 + b\rho}{\sqrt{2} + 1 - b\rho} + \frac{RT}{1 - b\rho} - \frac{a\alpha(T)\rho}{1 + 2b\rho - b^2\rho^2} - \kappa \nabla^2 \rho. \quad (66)$$

Carnahan-Starling (CS)状态方程为排斥项提供了更好的近似:

$$p_0 = \rho RT \frac{1 + b\rho/4 + (b\rho/4)^2 - (b\rho/4)^3}{(1 - b\rho/4)^3} - a\rho^2. \quad (67)$$

求解所得相应的自由能密度和化学势为

$$\psi^{\text{CS}} = RT\rho \left[\frac{3 - b\rho/2}{(1 - b\rho/4)^2} + \ln \rho \right] - a\rho^2 \quad (68)$$

和

$$\mu^{\text{CS}} = RT \left[\frac{3 - b\rho/4}{(1 - b\rho/4)^3} + \ln \rho + 1 \right] - 2a\rho - \kappa \nabla^2 \rho. \quad (69)$$

在以下的模拟中, 对于PR和RKS状态方程, 吸引参数和体积修正参数分别取 $a = 2/49$, $b = 2/21$; 对于CS状态方程则取 $a = 1$, $b = 4$. 普适气体常数统一取为 $R = 1$. 水的偏心因子取 $\omega = 0.344$, 而甲烷的偏心因子取 $\omega = 0.011$. 同时, 也采用了折合变量来表示温度.

5.3 化学势润湿边界条件

化学势具有清晰的物理意义, 在表达固体表面润湿性方面要比伪势模型的密度或等效密度更有效^[25,102,109,110]. Swift模型也曾经引入了一个额外的化学势来研究受限系统表面的润湿现象^[28]. 当前的模型建立在化学势基础上, 若直接采用化学势驱动相分离, 则实施化学势边界条件更为简便和自然. 只要给固体边界赋予一个确定的化学势, 流体和固体之间的润湿相互作用可以很容易地计算出来. 假设流体与固体之间的边界是水平的, 且位于 $(y=1)$ 的一排格子点上. 这排边界格点被当作流体点处理, 其上的分布函数仍然参与碰撞和流动. 来自固体方向的分布函数采用半程反弹边界条件计算. 为了在这些边界流体点上计算非理想力, 必须要估算 $(y=0)$ 的固体点上的密度, 以便用于方程(21)中计算密度的梯度. 我们采用了邻近流体点密度加权平均的策略^[30]:

$$\rho(x, 0) = \frac{2}{3}\rho(x, 1) + \frac{1}{6}\rho(x-1, 1) + \frac{1}{6}\rho(x+1, 1). \quad (70)$$

固体边界的润湿性通过赋予 $(y=0)$ 固体点的化学势来表达, 这些化学势将在方程(57)中计算边界流体点化学势梯度时起作用. 应用这个化学势边界条件, 被模拟的液滴将会直接落在固体表面, 液固之间不再有过渡区. 这一特性在精确测量接触角时至关重要.

5.4 线性可调的接触角

接触角是反映流体浸润固体表面的特征量. 基于化学势的多相流模型能够有效地模拟润湿现象. 计算域采用长度 $Dx = 500$ 和宽度 $Dy = 200$ 的长方形. 流场的密度分布被初始化为^[89,111]

$$\rho(x, y) = \frac{\rho_g + \rho_l}{2} + \frac{\rho_g - \rho_l}{2} \tanh\left[\frac{2(r - r_0)}{W}\right], \quad (71)$$

其中, ρ_g 和 ρ_l 是由Maxwell等面积构造计算出来的气液两相共存密度, $W = 5$ 是初始的气液界面宽度, $r_0 = 50$ 是液滴的初始半径, 且有 $r = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}$, 其中 $x_0 = Dx/2$, $y_0 = r_0 + 1$. 温度取 $T_r = 0.8$, 弛豫时间为1.3, 方程(53)的参数 κ 取值为0.01. 每个算例执行10万步演化以达到平衡态. 流场的左右边界采用周期性边界条件, 上下边界采用反弹边界条件. 因为液滴不会触及, 所以上边界的化学势值可以任选, 其典型取值为周围相邻流体点的化学势. 当忽略重力时, 水平固体平面上的液滴会形成一个完美的球冠. 如果用 L 和 H 代表这个球冠的底边宽度和高度, 则液滴的半径可以表示为 $R = (4H^2 + L^2)/8H$, 接触角可以用公式 $\tan\theta = L/2(R - H)$ 计算得到. 这一计算接触角的方法被称为球冠法. 为了模拟不同表面的润湿性, 采用RKS状态方程模拟了一个固体表面上的液滴. 图12清楚地显示, 当前模型可以有效地模拟从亲水到超疏水固体表面的润湿现象.

我们采用3个状态方程(RKS, CS和PR)进一步研究了化学势和接触角之间的关系, 其中用PR方程分别模拟了水滴和甲烷液滴. 如图13所示, 随着固体表面化学势的增加, 模拟得到的接触角平滑的上升. 值得注意的是, 接触角几乎是随着化学势的变化而线性地增大. 其他数值模型的接触角随控制变量的变化一般是较复杂的曲线^[102,112], 所以基于化学势多相流模型的线性可调接触角可以非常方便地调整所模拟固体表面的

图 12 (网络版彩图)液滴在具有不同化学势的固体表面上形成的接触角, 采用RKS状态方程计算. (a) $\theta=30^\circ$ at $CP=-0.23$; (b) $\theta=60^\circ$ at $CP=-0.13$; (c) $\theta=105^\circ$ at $CP=0$; (d) $\theta=135^\circ$ at $CP=0.09$; (e) $\theta=160^\circ$ at $CP=0.15$; (f) $\theta=180^\circ$ at $CP=0.18$ ^[30]

Figure 12 (Color online) Contact angles obtained on solid surfaces with different chemical potentials by using RKS EOS. (a) $\theta=30^\circ$ at $CP=-0.23$; (b) $\theta=60^\circ$ at $CP=-0.13$; (c) $\theta=105^\circ$ at $CP=0$; (d) $\theta=135^\circ$ at $CP=0.09$; (e) $\theta=160^\circ$ at $CP=0.15$; (f) $\theta=180^\circ$ at $CP=0.18$ [30].

图 13 (网络版彩图)接触角随着固体表面化学势的增加而线性增长, 温度为0.8^[30]

Figure 13 (Color online) Contact angle linearly increasing with the chemical potential of the solid surface at the reduced temperature 0.8 [30].

润湿性.

6 结论

本文介绍了近几年课题组在流体与结构相互作用和多相流领域关于流体力和非理想力计算的研究

成果^[15,29,30]. 所提出的伽利略不变的动量交换法、基于热力学和化学势的多相流模型在理论上有其特色, 在模拟计算上有明显优势. 我们期待这些方法能够进一步推动晶格Boltzmann方法在研究复杂流体领域的广泛应用.

致谢 感谢上海超级计算中心、中国科学院计算机网络信息中心、国家超级计算深圳中心(云计算中心)的支持.

参考文献

- 1 Chen S, Doolen G D. Lattice Boltzmann method for fluid flows. *Annu Rev Fluid Mech*, 1998, 30: 329–364
- 2 Aidun C K, Clausen J R. Lattice-Boltzmann method for complex flows. *Annu Rev Fluid Mech*, 2010, 42: 439–472
- 3 Guo Z L, Zheng C G. Theory and Applications of Lattice Boltzmann Method (in Chinese). Beijing: Science Press, 2009 [郭照立, 郑楚光. 格子Boltzmann方法的原理及应用. 北京: 科学出版社, 2009]
- 4 He Y L, Wang Y, Li Q. Lattice Boltzmann Method: Theory and Applications (in Chinese). Beijing: Science Press, 2009 [何雅玲, 王勇, 李庆. 格子Boltzmann方法的理论及应用. 北京: 科学出版社, 2009]
- 5 Ladd A J C. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 1. Theoretical foundation. *J Fluid*

- [Mech](#), 1994, 271: 285–309
- 6 Ladd A J C. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized boltzmann equation. 2. Numerical results. *J Fluid Mech*, 1994, 271: 311–339
- 7 Aidun C K, Lu Y, Ding E J. Direct analysis of particulate suspensions with inertia using the discrete Boltzmann equation. *J Fluid Mech*, 1998, 373: 287–311
- 8 Mei R, Yu D, Shyy W, et al. Force evaluation in the lattice Boltzmann method involving curved geometry. *Phys Rev E*, 2002, 65: 041203
- 9 Fang H, Wang Z, Lin Z, et al. Lattice Boltzmann method for simulating the viscous flow in large distensible blood vessels. *Phys Rev E*, 2002, 65: 051925
- 10 Wan R Z, Fang H P, Lin Z F, et al. Lattice Boltzmann simulation of a single charged particle in a newtonian fluid. *Phys Rev E*, 2003, 68: 011401
- 11 Li H, Fang H, Lin Z, et al. Lattice Boltzmann simulation on particle suspensions in a two-dimensional symmetric stenotic artery. *Phys Rev E*, 2004, 69: 031919
- 12 Zhang C Y, Shi J, Tan H L, et al. Sedimentation of a single charged elliptic cylinder in a newtonian fluid by lattice Boltzmann method. *Chin Phys Lett*, 2004, 21: 1108–1110
- 13 Li H, Lu X, Fang H, et al. Force evaluations in lattice Boltzmann simulations with moving boundaries in two dimensions. *Phys Rev E*, 2004, 70: 026701
- 14 Wen B, Li H, Zhang C, et al. Lattice-type-dependent momentum-exchange method for moving boundaries. *Phys Rev E*, 2012, 85: 016704
- 15 Wen B, Zhang C, Tu Y, et al. Galilean invariant fluid-solid interfacial dynamics in lattice Boltzmann simulations. *J Comp Phys*, 2014, 266: 161–170, arXiv: [1303.0625](#)
- 16 Li Q, Zhou P, Yan H J. Pinning-depinning mechanism of the contact line during evaporation on chemically patterned surfaces: A lattice Boltzmann study. *Langmuir*, 2016, 32: 9389–9396
- 17 Li Q, Kang Q J, Francois M M, et al. Lattice Boltzmann modeling of self-propelled leidenfrost droplets on ratchet surfaces. *Soft Matter*, 2015, 12: 302–312
- 18 Huang J J, Huang H, Wang X. Numerical study of drop motion on a surface with stepwise wettability gradient and contact angle hysteresis. *Phys Fluids*, 2014, 26: 062101, arXiv: [1307.6715](#)
- 19 Huang H, Huang J J, Lu X Y. A mass-conserving axisymmetric multiphase lattice Boltzmann method and its application in simulation of bubble rising. *J Comp Phys*, 2014, 269: 386–402
- 20 Benzi R, Chibbaro S, Succi S. Mesoscopic lattice Boltzmann modeling of flowing soft systems. *Phys Rev Lett*, 2009, 102: 026002, arXiv: [0807.4471](#)
- 21 Biferale L, Perlekar P, Sbragaglia M, et al. Convection in multiphase fluid flows using lattice Boltzmann methods. *Phys Rev Lett*, 2012, 108: 104502, arXiv: [1111.0905](#)
- 22 Shan X, Yuan X F, Chen H. Kinetic theory representation of hydrodynamics: A way beyond the Navier-Stokes equation. *J Fluid Mech*, 2006, 550: 413–441
- 23 Li H B, Yi H H, Shan X W, et al. Shape changes and motion of a vesicle in a fluid using a lattice Boltzmann model. *Europhys Lett*, 2008, 81: 54002
- 24 Dellar P J. Planar channel flow in Braginskii magnetohydrodynamics. *J Fluid Mech*, 2011, 667: 520–543
- 25 Shan X, Chen H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Phys Rev E*, 1993, 47: 1815–1819
- 26 Li Q, Luo K H, Kang Q J, et al. Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation. *Phys Rev E*, 1994, 49: 2941–2948
- 27 Swift M R, Orlandini E, Osborn W R, et al. Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems. *Phys Rev E*, 1996, 54: 5041–5052
- 28 Swift M R, Osborn W R, Yeomans J M. Lattice Boltzmann simulation of nonideal fluids. *Phys Rev Lett*, 1995, 75: 830–833
- 29 Wen B, Qin Z, Zhang C, et al. Thermodynamic-consistent lattice Boltzmann model for nonideal fluids. *Europhys Lett*, 2015, 112: 44002
- 30 Wen B, Zhou X, He B, et al. Chemical-potential-based lattice Boltzmann method for nonideal fluids. arXiv: [1611.00907](#)
- 31 Chen S, Chen H, Martinez D, et al. Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics. *Phys Rev Lett*, 1991, 67: 3776–3779
- 32 Chen H, Chen S, Matthaeus W H. Recovery of the Navier-Stokes equations using a lattice-gas Boltzmann method. *Phys Rev A*, 1992, 45: R5339–R5342
- 33 Qian Y H, D’Humières D, Lallemand P. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation. *Europhys Lett*, 1992, 17: 479–484
- 34 Benzi R, Succi S, Vergassola M. The lattice Boltzmann equation: Theory and applications. *Phys Rep*, 1992, 222: 145–197
- 35 Lallemand P, Luo L S. Theory of the lattice Boltzmann method: Dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability. *Phys Rev E*,

- 2000, 61: 6546–6562
- 36 D’Humières D, Ginzburg I, Krafczyk M, et al. Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions. *Philos Trans R Soc A-Math Phys Eng Sci*, 2002, 360: 437–451
- 37 Ginzburg I, Verhaeghe F, D’Humières D. Two-relaxation-time lattice Boltzmann scheme: About parametrization, velocity, pressure and mixed boundary conditions. *Commun Comput Phys*, 2008, 3: 427–478
- 38 Karlin I V, Ferrante A, Öttinger H C. Perfect entropy functions of the lattice Boltzmann method. *Europhys Lett*, 1999, 47: 182–188
- 39 Succi S, Karlin I V, Chen H. Colloquium: Role of the H theorem in lattice Boltzmann hydrodynamic simulations. *Rev Mod Phys*, 2002, 74: 1203–1220
- 40 Luo L S, Liao W, Chen X, et al. Numerics of the lattice Boltzmann method: Effects of collision models on the lattice Boltzmann simulations. *Phys Rev E*, 2011, 83: 056710
- 41 Frisch U, Hasslacher B, Pomeau Y. Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation. *Phys Rev Lett*, 1986, 56: 1505–1508
- 42 Qian Y H, Zhou Y. Complete Galilean-invariant lattice BGK models for the Navier-Stokes equation. *Europhys Lett*, 1998, 42: 359–364
- 43 Chikatamarla S S, Karlin I V. Entropy and Galilean invariance of lattice Boltzmann theories. *Phys Rev Lett*, 2006, 97: 190601
- 44 Nie X B, Shan X, Chen H. Galilean invariance of lattice Boltzmann models. *Europhys Lett*, 2008, 81: 34005, arXiv: 0801.2924
- 45 Caiazzo A, Junk M. Boundary forces in lattice Boltzmann: Analysis of momentum exchange algorithm. *Comp Math Appl*, 2008, 55: 1415–1423
- 46 Clausen J R, Aidun C K. Galilean invariance in the lattice-Boltzmann method and its effect on the calculation of rheological properties in suspensions. *Int J Multiphase Flow*, 2009, 35: 307–311
- 47 Lorenz E, Caiazzo A, Hoekstra A G. Corrected momentum exchange method for lattice Boltzmann simulations of suspension flow. *Phys Rev E*, 2009, 79: 036705
- 48 Zhou G, Wang L, Wang X, et al. Galilean-invariant algorithm coupling immersed moving boundary conditions and Lees-Edwards boundary conditions. *Phys Rev E*, 2011, 84: 066701
- 49 Huang H, Yang X, Krafczyk M, et al. Rotation of spheroidal particles in Couette flows. *J Fluid Mech*, 2012, 692: 369–394
- 50 Luo L S. Unified theory of lattice Boltzmann models for nonideal gases. *Phys Rev Lett*, 1998, 81: 1618–1621
- 51 Guo Z, Zheng C, Shi B. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method. *Phys Rev E*, 2002, 65: 046308
- 52 Lallemand P, Luo L S. Lattice Boltzmann method for moving boundaries. *J Comp Phys*, 2003, 184: 406–421
- 53 Mei R, Luo L S, Shyy W. An accurate curved boundary treatment in the lattice Boltzmann method. *J Comp Phys*, 1999, 155: 307–330
- 54 Bouzidi M, Firdaouss M, Lallemand P. Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries. *Phys Fluids*, 2001, 13: 3452–3459
- 55 Guo Z, Zheng C, Shi B. An extrapolation method for boundary conditions in lattice Boltzmann method. *Phys Fluids*, 2002, 14: 2007–2010
- 56 Ginzburg I, D’Humières D. Multireflection boundary conditions for lattice Boltzmann models. *Phys Rev E*, 2003, 68: 066614
- 57 Hu H H, Patankar N A, Zhu M Y. Direct numerical simulations of fluid-solid systems using the arbitrary Lagrangian-Eulerian technique. *J Comp Phys*, 2001, 169: 427–462
- 58 Feng J, Hu H H, Joseph D D. Direct simulation of initial value problems for the motion of solid bodies in a Newtonian fluid Part 1. Sedimentation. *J Fluid Mech*, 1994, 261: 95–134
- 59 Caiazzo A. Analysis of lattice Boltzmann nodes initialisation in moving boundary problems. *Prog Comput Fluid Dyn*, 2008, 8: 3–10
- 60 Segré G, Silberberg A. Radial particle displacements in poiseuille flow of suspensions. *Nature*, 1961, 189: 209–210
- 61 Segré G, Silberberg A. Behaviour of macroscopic rigid spheres in poiseuille flow. 1. Determination of local concentration by statistical analysis of particle passages through crossed light beams. *J Fluid Mech*, 1962, 14: 115–135
- 62 Segré G, Silberberg A. Behaviour of macroscopic rigid spheres in poiseuille flow. 2. Experimental results and interpretation. *J Fluid Mech*, 1962, 14: 136–157
- 63 Zou Q, He X. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. *Phys Fluids*, 1997, 9: 1591–1598
- 64 Karnis A, Goldsmith H L, Mason S G. Flow of suspensions through tubes. V. Inertial effects. *Can J Chem Eng*, 1966, 44: 181–193
- 65 Wang L P, Peng C, Guo Z, et al. Flow modulation by finite-size neutrally buoyant particles in a turbulent channel flow. *J Fluids Eng*, 2016, 138: 041306
- 66 Wang L P, Peng C, Guo Z, et al. Lattice Boltzmann simulation of particle-laden turbulent channel flow. *Comp Fluids*, 2016, 124: 226–236
- 67 Peng C, Teng Y, Hwang B, et al. Implementation issues and benchmarking of lattice Boltzmann method for moving rigid particle simulations in a viscous flow. *Comp Math Appl*, 2016, 72: 349–374
- 68 Wen B H, Chen Y Y, Zhang R L, et al. Lateral migration and nonuniform rotation of biconcave particle suspended in poiseuille flow. *Chin Phys Lett*, 2013, 30: 064701
- 69 Wen B, Chen H, Qin Z, et al. Lateral migration and nonuniform rotation of suspended ellipse in poiseuille flow. *Comput Math Appl*, 2016, in

- press, doi: 10.1016/j.camwa.2016.09.011
- 70 Li X, Jiang F, Hu C. Analysis of the accuracy and pressure oscillation of the lattice Boltzmann method for fluid-solid interactions. *Comp Fluids*, 2016, 129: 33–52
- 71 Dorschner B, Chikatamarla S S, Karlin I V. Entropic lattice Boltzmann method for moving and deforming geometries in three dimensions. 2016, arXiv: 1608.04658
- 72 Chen Y, Cai Q, Xia Z, et al. Momentum-exchange method in lattice Boltzmann simulations of particle-fluid interactions. *Phys Rev E*, 2013, 88: 013303
- 73 Yin X, Le G, Zhang J. Mass and momentum transfer across solid-fluid boundaries in the lattice-Boltzmann method. *Phys Rev E*, 2012, 86: 026701
- 74 Hu Y, Li D, Shu S, et al. Modified momentum exchange method for fluid-particle interactions in the lattice Boltzmann method. *Phys Rev E*, 2015, 91: 033301
- 75 Giovacchini J P, Ortiz O E. Flow force and torque on submerged bodies in lattice-Boltzmann methods via momentum exchange. *Phys Rev E*, 2015, 92: 063302, arXiv: 1407.4524
- 76 Wen B, Zhang C, Fang H. Hydrodynamic force evaluation by momentum exchange method in lattice Boltzmann simulations. *Entropy*, 2015, 17: 27
- 77 Li Q, Luo K H, Kang Q J, et al. Lattice Boltzmann methods for multiphase flow and phase-change heat transfer. *Prog Energy Combust Sci*, 2016, 52: 62–105
- 78 Chen L, Kang Q, Mu Y, et al. A critical review of the pseudopotential multiphase lattice Boltzmann model: Methods and applications. *Int J Heat Mass Transfer*, 2014, 76: 210–236
- 79 Xu A G, Zhang G C, Gan Y B, et al. Lattice Boltzmann modeling and simulation of compressible flows. *Front Phys*, 2012, 7: 582–600, arXiv: 1209.3542
- 80 Huang H, Sukop M C, Lu X Y. *Multiphase Lattice Boltzmann Methods: Theory and Application*. New York: John Wiley & Sons, 2015
- 81 Gunstensen A K, Rothman D H, Zaleski S, et al. Lattice Boltzmann model of immiscible fluids. *Phys Rev A*, 1991, 43: 4320–4327
- 82 He X, Shan X, Doolen G D. Discrete Boltzmann equation model for nonideal gases. *Phys Rev E*, 1998, 57: 13–16
- 83 Gan Y, Xu A, Zhang G, et al. Discrete Boltzmann modeling of multiphase flows: Hydrodynamic and thermodynamic non-equilibrium effects. *Soft Matter*, 2015, 11: 5336–5345, arXiv: 1503.08450
- 84 Gan Y, Xu A, Zhang G, et al. Two-dimensional lattice Boltzmann model for compressible flows with high mach number. *Phys A Stat Mech Its Appl*, 2008, 387: 1721–1732
- 85 Gan Y, Xu A, Zhang G, et al. Lattice Boltzmann study of thermal phase separation: Effects of heat conduction, viscosity and Prandtl number. *Europhys Lett*, 2012, 97: 44002
- 86 Chen F, Xu A, Zhang G, et al. Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann approach to compressible flows with flexible specific-heat ratio and prandtl number. *Europhys Lett*, 2010, 90: 1632–1652
- 87 Mazloomi M A, Chikatamarla S S, Karlin I V. Entropic lattice Boltzmann method for multiphase flows. *Phys Rev Lett*, 2015, 114: 174502
- 88 Yuan P, Schaefer L. Equations of state in a lattice Boltzmann model. *Phys Fluids*, 2006, 18: 042101
- 89 Li Q, Luo K H, Li X J. Forcing scheme in pseudopotential lattice Boltzmann model for multiphase flows. *Phys Rev E*, 2012, 86: 016709, arXiv: 1204.4098
- 90 Inamuro T, Konishi N, Ogino F. A Galilean invariant model of the lattice Boltzmann method for multiphase fluid flows using free-energy approach. *Comp Phys Commun*, 2000, 129: 32–45
- 91 Inamuro T, Ogata T, Tajima S, et al. A lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences. *J Comp Phys*, 2004, 198: 628–644
- 92 Zheng H W, Shu C, Chew Y T. A lattice Boltzmann model for multiphase flows with large density ratio. *J Comp Phys*, 2006, 218: 353–371
- 93 Xu A, Gonnella G, Lamura A. Phase-separating binary fluids under oscillatory shear. *Phys Rev E*, 2003, 67: 056105
- 94 Xu A, Gonnella G, Lamura A, et al. Scaling and hydrodynamic effects in lamellar ordering. *Europhys Lett*, 2005, 71: 651–657
- 95 Xu A, Gonnella G, Lamura A. Morphologies and flow patterns in quenching of lamellar systems with shear. *Phys Rev E*, 2006, 74: 011505
- 96 Xu A, Gonnella G, Lamura A. Simulations of complex fluids by mixed lattice Boltzmann-finite difference methods. *Phys A-Stat Mech Its Appl*, 2006, 362: 42–47
- 97 Xu A G, Zhang G C, Li Y J, et al. Modeling and simulation of nonequilibrium and multiphase complex systems—Lattice Boltzmann kinetic theory and application (in Chinese). *Prog Phys*, 2014, 34: 136–167 [许爱国, 张广财, 李英骏, 等. 非平衡与多相复杂系统模拟研究——Lattice Boltzmann动理学理论与应用. *物理学进展*, 2014, 34: 136–167]
- 98 Xu A G, Zhang G C, Gan Y B. Progress in studies on discrete Boltzmann modeling of phase separation process (in Chinese). *Mech Eng*, 2016,

- 38: 361–374 [许爱国, 张广财, 甘延标. 相分离过程的离散Boltzmann方法研究进展. 力学与实践, 2016, 38: 361–374]
- 99 Rowlinson J S, Widom B. Molecular Theory of Capillarity. Oxford: Clarendon Press, 1982
- 100 Shan X. Analysis and reduction of the spurious current in a class of multiphase lattice Boltzmann models. [Phys Rev E](#), 2006, 73: 047701
- 101 Shan X, Doolen G. Multicomponent lattice-Boltzmann model with interparticle interaction. [J Stat Phys](#), 1995, 81: 379–393
- 102 Benzi R, Biferale L, Sbragaglia M, et al. Mesoscopic modeling of a two-phase flow in the presence of boundaries: The contact angle. [Phys Rev E](#), 2006, 74: 021509
- 103 Buick J M, Greated C A. Gravity in a lattice Boltzmann model. [Phys Rev E](#), 2000, 61: 5307–5320
- 104 Guo Z, Shi B, Zheng C. Chequerboard effects on spurious currents in the lattice Boltzmann equation for two-phase flows. [Phil Trans R Soc Lond A](#), 2011, 369: 2283–2291
- 105 Peng D Y, Robinson D B. A new two-constant equation of state. [Ind Eng Chem Fund](#), 1976, 15: 59–64
- 106 De Groot S R, Mazur P. Nonequilibrium Thermodynamics. New York: Wiley, 1962
- 107 Cracknell R F, Nicholson D, Quirke N. Direct molecular dynamics simulation of flow down a chemical potential gradient in a slit-shaped micro-pore. [Phys Rev Lett](#), 1995, 74: 2463–2466
- 108 Jamet D, Torres D, Brackbill J U. On the theory and computation of surface tension: The elimination of parasitic currents through energy conservation in the second-gradient method. [J Comp Phys](#), 2002, 182: 262–276
- 109 Martys N S, Chen H. Simulation of multicomponent fluids in complex three-dimensional geometries by the lattice Boltzmann method. [Phys Rev E](#), 1996, 53: 743–750
- 110 Li Q, Luo K H, Kang Q J, et al. Contact angles in the pseudopotential lattice Boltzmann modeling of wetting. [Phys Rev E](#), 2014, 90: 053301, arXiv: [1410.2569](#)
- 111 Huang H, Krafczyk M, Lu X. Forcing term in single-phase and Shan-Chen-type multiphase lattice Boltzmann models. [Phys Rev E](#), 2011, 84: 046710
- 112 Huang H, Thorne Jr D T, Schaap M G, et al. Proposed approximation for contact angles in Shan-and-Chen-type multicomponent multiphase lattice Boltzmann models. [Phys Rev E](#), 2007, 76: 066701

Hydrodynamic force evaluation in lattice Boltzmann method

WEN BingHai^{1,2}, ZHANG ChaoYing^{2*} & FANG HaiPing^{1*}

¹ *Division of Interfacial Water and Key Laboratory of Interfacial Physics and Technology,
Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China;*

² *Guangxi Key Lab of Multi-Source Information Mining & Security, Guangxi Normal University, Guilin 541004, China*

The lattice Boltzmann method is a mesoscopic numerical method originating from kinetic theory and the cellular automaton concept. It has been successfully used to simulate complex flows, especially particle suspensions and multiphase flows. In this paper, we review our recent work on fluid-structure interactions and nonideal force evaluations. We introduced the relative velocity into the treatment of fluid-structure interfacial dynamics and proposed a Galilean invariant momentum exchange method. The method is simple, accurate and efficient. It is independent of boundary geometries and only uses the local data, thus it is convenient to implement parallelization and 3D simulations. The numerical simulations are so vastly improved that the force fluctuations are very small and a time average procedure becomes unnecessary. To simulate phase separation and two-phase flow, we directly evaluated the nonideal force based on the free energy and proposed a multiphase flow model. Thermodynamic consistency and Galilean invariance of the model are theoretically satisfied and numerically verified. This model can be easily implemented and cooperated with various equations of state to simulate all kinds of the multiphase systems. Chemical potential is an effective way to drive phase transition or express surface wettability. In the further study, we proposed another multiphase flow model based on chemical potential. It is mathematically equivalent to the previous one, but is more computationally efficient owing to avoiding the calculations of pressure tensor and tensor divergence. Together with the chemical potential boundary condition, the model can effectively simulate wetting phenomena. The numerical results show that the contact angle can be linearly tuned by the surface chemical potential.

lattice Boltzmann method, fluid-structure interaction, nonideal force, multiphase flow, wettability

PACS: 47.11.-j, 47.55.Kf, 47.61.Jd, 68.08.Bc

doi: [10.1360/SSPMA2016-00404](https://doi.org/10.1360/SSPMA2016-00404)