

# 相变问题的格子 Boltzmann 方法.

李博韬, 航空学院, 西北工业大学

[botaoli@mail.nwpu.edu.cn](mailto:botaoli@mail.nwpu.edu.cn)

2021 年 10 月 16 日



# 第一章 引言

我们首先介绍了模拟多相流动的伪势模型，通过近些年的发展，该模型早已很大程度上克服了早期的一些如无法实现高密度比等缺陷，变得越来越成熟且流行。但是模拟多相相变的 LBM 模型还在发展的初期，很多模型都处于理论论证中，本文先后介绍了固液相变，气液相变，气液固三相相变的 LBM 模型及相关的简单算例验证。

本文是个半成品，文章的初衷是做一些液滴结冰相关的东西，但是中途遇到了一些困难因而暂时搁置。所以这篇引言也没有按照常规的研究背景-意义-成果的结构来写，而且并未撰写结论。

文章的所有内容均有代码可以参考，未完待续...



# 第二章 用于多相流动的格子 Boltzmann 伪势模型

## 2.1 数值方法

在伪势模型中，我们引入耦合了非理想状态方程的相互作用势来表示流体粒子之间的相互作用，从而使气液两相分离。采用 BGK 碰撞因子，伪势模型的密度分布函数的演化方程可以写为：

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_f} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + \Delta f_i(\mathbf{x}, t), \quad (2.1)$$

这里  $f_i(\mathbf{x}, t)$  是粒子在时间  $t$  与位置  $\mathbf{x}$  处且有速度  $\mathbf{e}_i$  的密度分布函数。 $\tau$  是松弛时间，与流体的运动粘性系数有关：

$$\tau_f = \frac{\nu}{c_s^2 \delta_t} + 0.5 \quad (2.2)$$

$f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$  为当地的平衡态分布函数定义如下：

$$f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = \omega_i \rho \left[ 1 + \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right]. \quad (2.3)$$

$\Delta f_i(\mathbf{x}, t)$  为外力项，耦合外力项的方式有多种，例如速度平移法<sup>1</sup>和离散外力法<sup>2,3</sup>等，我们这里采用精确差分法 (EDM)<sup>4</sup>如下：

$$\Delta f_i(\mathbf{x}, t) = f_i^{eq}(\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}) - f_i^{eq}(\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{u}) \quad (2.4)$$

上式中的  $\Delta \mathbf{u} = \mathbf{F} \cdot \delta_t / \rho$  表示由于外力的存在，在  $\delta_t$  时间步内流动速度的改变量。上式和公式2.3中的速度和密度由离散分布函数的动量矩求得：

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_i f_i(\mathbf{x}, t), \quad \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_i \mathbf{e}_i f_i(\mathbf{x}, t), \quad (2.5)$$

需要注意的是，在 EDM 格式中， $\mathbf{u}$  并非真实的流动速度，真实的流动速度  $\mathbf{U}$  可由碰撞前后速度的平均求得：

$$\mathbf{U} = \mathbf{u} + \frac{\mathbf{F} \delta_t}{2\rho}. \quad (2.6)$$

在最常用的 S-C 模型中，用于实现气液相分离的粒子间相互作用力由以下格式给出：

$$\mathbf{F}_{int} = -G_{int} \psi(\mathbf{x}) \nabla \psi(\mathbf{x}) \quad (2.7)$$

其中  $G_{int}$  为相互作用强度。在 Shan 和 Chen<sup>1,5</sup>提出的原始位势模型中,  $\psi(\mathbf{x}) = \psi(0)\exp[-\rho_0/\rho(\mathbf{x})]$ , 即相互作用力大小仅与当地密度有关, 我们也因此将  $\psi(\mathbf{x})$  称为等效密度。为了把任意的非理想气体状态方程耦合到伪势模型中, 我们采用 Yuan 和 Schaefer<sup>6</sup>提出的相互作用势表达如下:

$$\psi(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{2[P_{EOS}(\rho) - \rho(\mathbf{x})c_s^2]}{G_{int}}}, \quad (2.8)$$

可以看到, 只要  $G_{int}$  的取值使上式的结果为正, 最终计算所得的作用力大小  $\mathbf{F}$  与  $G_{int}$  的取值无关。 $P_{EOS}$  是由状态方程确定的压力, 在本文中, 我们使用 Peng-Robinson(P-R) 状态方程如下:

$$p_{EOS} = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - \frac{a\rho^2\varepsilon(T)}{1 + 2b\rho - b^2\rho^2} \quad (2.9)$$

其中  $\varepsilon(T) = [1 + (0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2)(1 - \sqrt{T/T_{cr}})]^2$ ,  $\omega$  为流体粒子的偏心因子, 在本文中取  $\omega = 0.344$  与水相同。 $a, b$  为常数,  $T_{cr}$  为临界状态的温度。P-R 状态方程的临界参数可由以下方式获得: 分别使公式2.9中压力  $p$  相对于密度  $\rho$  的一阶和二阶导数为 0, 我们可以得到  $a = 0.45724R^2T_{cr}^2/p_{cr}$  以及  $b = 0.0778RT_{cr}/p_{cr}$ 。在模拟中, 我们设置  $a = 2/49$ ,  $b = 2/21$ ,  $R = 1$ 。对应的临界状态参数为:  $T_{cr} = 0.072922$ ,  $P_{cr} = 0.05957$ ,  $\rho_{cr} = 2.54186$ 。S-C 模型简单且有清晰的物理背景, 但它有着热力学不一致性的缺陷, Gong 和 Cheng<sup>7</sup>对原始的相互作用力模型进行了改进, 即将公式2.7写为:

$$\mathbf{F}_{int} = -\beta G_{int}\psi(\mathbf{x})\nabla\psi(\mathbf{x}) - \frac{1 - \beta}{2}G_{int}\frac{\nabla\psi^2(\mathbf{x})}{2} \quad (2.10)$$

上式右端的第二项只包含临近格子的贡献, 而第一项临近格子与当地格子的共同贡献,  $\beta$  是调节两项相对大小的因子, 取值与所选的状态方程有关。本文中对于 P-R 状态方程, 我们取  $\beta = 1.16$ 。在数值计算中, 上式被离散为:

$$\mathbf{F}_{int} = -\beta G_{int}\psi(\mathbf{x})\sum_{i=1}^N 3\omega_i\psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i)\mathbf{e}_i - \frac{1 - \beta}{2}G_{int}\sum_{i=1}^N 3\omega_i\psi^2(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i)\mathbf{e}_i \quad (2.11)$$

在计算中我们取  $G_{int} = -1.0$ , 显然上式的离散方式表明我们只考虑最相邻的粒子之间的相互作用力。除了定义流体分子间的相互作用力, 当遇到固体边界时, 我们可以定义流体与固体间的附着力如下<sup>8</sup>:

$$\mathbf{F}_{ads} = -G_{ads}\psi(\mathbf{x})\sum_{i=1}^N 3\omega_i\psi(\mathbf{x})s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i)\mathbf{e}_i \quad (2.12)$$

这里的  $G_{ads}$  表示流体与固体相互作用强度的大小, 可以用来调节接触角的大小。 $s(\mathbf{x})$  是一个指示方程, 当  $\mathbf{x}$  对应流体节点时  $s(\mathbf{x}) = 0$ , 当  $\mathbf{x}$  对应固体边界时,  $s(\mathbf{x}) = 1$ 。考虑重力影响时, 重力  $\mathbf{F}_g$  可以计算为:

$$\mathbf{F}_g = \mathbf{g} \cdot [\rho(\mathbf{x}) - \rho_{ave}] \quad (2.13)$$

其中  $\mathbf{g}$  为重力加速度而  $\rho_{ave}$  则为整个流场的平均密度。外力  $\mathbf{F}$  可以表示为:  $\mathbf{F} = \mathbf{F}_{int} + \mathbf{F}_{ads} + \mathbf{F}_g$ 。

## 2.2 验证算例

### 2.2.1 Maxwell 气液共存曲线

LBM 伪势模型存在热力学不一致的问题<sup>9</sup>, 特别是在气液密度比较大的时候, 这个问题将会变得更为严重。我们常常用模拟所得的 Maxwell 气液共存曲线与理论值进行对比来验证伪势模型在气液密

度比较大时的可用性。因而为了验证本节模型在不同密度比的表现，我们模拟一个在无限大的平面中静止的二维液滴。计算域选为  $120 \times 120$  的一个方形区域，初始时我们将半径为 24 的液滴放置在计算域中央，周围全部设为气态。在演化过程中，四周全部设为周期性边界条件。松弛参数  $\tau_f = 1.0$ ，在一段时间发展稳定后，我们去液滴中心处的密度为计算所得的液态密度，计算域左上角的密度为气态密度。如图 2.1，我们给出了本节描述的模型在不同气液密度比下的表现。可以看到，模拟结果与理论值吻合

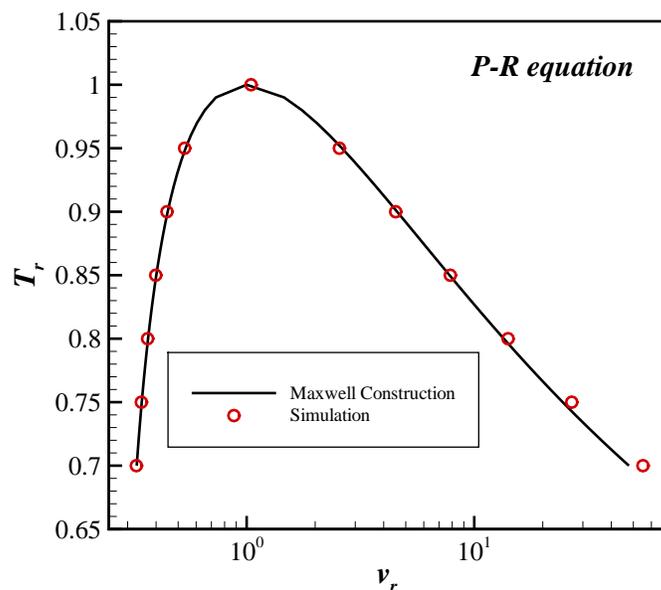


图 2.1: 气液共存曲线。

程度较好。值得注意的是，评价伪势模型的另一个标准是界面的虚拟速度大小，在本文中我们并没有进行这个验证，感兴趣的读者可以参考 ref<sup>7</sup>。

### 2.2.2 液滴接触角

液滴的有趣之处有很大一部分体现在它如何与固体壁面相互作用上，固体壁面的加入让原本的气液两相问题变为更复杂的气液固三相问题。但是由于固态壁面常常被认为是静止不变的，因而我们可以将壁面当作计算域的边界，实际的固体部分不参与计算演化，而只会影响靠近边界的流体粒子。

以平直壁面为例，当液滴与壁面接触静止时，液滴会在壁面上形成有一定大小的接触角。这个接触角的大小与壁面和液滴的化学性质以及壁面粗糙度有关<sup>10</sup>。为了模拟不同大小的接触角，我们在这里提供两类不同的方法：

第一种是虚粒子法，或者也可以叫几何构造法<sup>11</sup>。在事先知道液滴在平直壁面接触角的情况下，我们可以利用液滴在壁面接触的几何关系<sup>12</sup>，然后在固体壁面处设置一层虚拟粒子如下。

$$\psi_{i,1} = \psi_{i,3} + \tan\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right) |\psi_{i+1,2} - \psi_{i-1,2}| \quad (2.14)$$

其中  $\psi$  为相互作用势，第一个和第二个下标分别表示与固体壁面并行和垂直方向的坐标。 $\psi_{i,1}$  即为壁面上虚粒子的作用势，当给定接触角后，我们可以在每一个计算步用以上公式更新虚粒子作用势的值，

从而实现恒定静态接触角的模拟。

第二种是作用力法<sup>8</sup>。即使用公式2.12，使用该公式时，我们同样在固体壁面上布置一层虚拟粒子，但这些虚拟粒子的作用势取值与其紧邻的流体粒子相同。通过这种方式，当我们取  $G_{ads} = 0$  时，液滴在壁面上的接触角大小刚好为  $90^\circ$ ，取  $G_{ads} < 0$  时为疏水状态， $G_{ads} > 0$  时为亲水状态。但这种方式在模拟前我们无法确定接触角大小，并且在不同密度比条件下，使用相同的  $G_{ads}$  也可能得到不同的接触角大小。此外除了公式2.12，我们还可采用以下两个公式来表示模拟中的固液接触作用力：

$$\mathbf{F}_{ads} = -G_{ads}\psi(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^N 3\omega_i s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i) \mathbf{e}_i \quad (2.15)$$

$$\mathbf{F}_{ads} = -G_{ads}\rho(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^N 3\omega_i s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i) \mathbf{e}_i \quad (2.16)$$

我们分别将这几种接触力模型称为，修正的基于作用势模型 (modified- $\phi$  based)，基于作用势的模型 ( $\phi$ based) 以及基于密度的模型 ( $\rho$ based)。对这几种接触力模型的分析比较可以参考 li 等人的文章<sup>8</sup>。

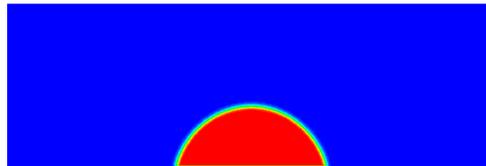
本节我们采用了第二种方式，使用2.12作为模拟中的固液接触力。为了为之后的模拟提供多种选择，我们在这里使用了修正的多松弛模型来改进伪势模型在高密度比条件下的表现，具体模型可以参考 Li 等人的文章<sup>3,9</sup>。可以验证的是，使用本节的模型当然也可以得到类似的结果。

模拟中，我们选取的计算域大小为  $n_x * n_y = 300 * 100$ ， $T = 0.80T_c$ ，对应密度比为  $\rho_l/\rho_g \approx 37$ ，松弛系数为  $\tau_g = 0.6, \tau_l = 1.5$ 。初始液滴接触角为  $90^\circ$ ，然后待液滴发展平衡后测量其接触角大小，测量方法为假设液滴气液界面为二维平面的一段圆弧，液滴接触线长度为  $a$ ，液滴高度为  $b$ ，对应圆弧半径为  $r$ ，从而我们有几何关系如下：

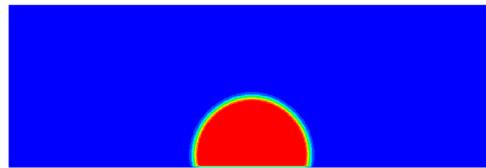
$$r = \frac{b}{2} + \frac{a^2}{8b} \quad (2.17)$$

$$\tan(\theta) = \frac{a}{2(r-b)} \quad (2.18)$$

图2.2给出了使用公式2.12时不同  $G_{ads}$  对应的模拟结果。两张子图从上到下分别对应亲水壁面和疏水壁面。



(a)  $G_{ads} = -0.15$  接触角  $\theta = 76^\circ$



(b)  $G_{ads} = 0.15$  接触角  $\theta = 101^\circ$

图 2.2: 液滴接触状态。

此外我们还给出了不同固液接触参数以及不同固液接触力模型对应的接触角大小如图。正如某些学者提到的那样，模拟所得的接触角大小随参数  $G_{ads}$  的变化是近乎线性的。

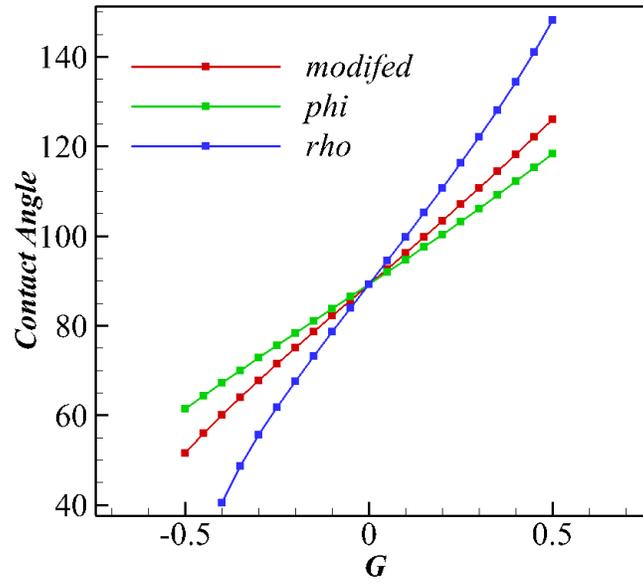


图 2.3: 液滴接触角随不同模拟参数的变化。



## 第三章 固液相变模型

### 3.1 数值方法

#### 3.1.1 温度演化的格子 Boltzmann 方程

对于单组份层流，牛顿流体的不可压流动，我们可以将其能量方程写为:<sup>13</sup>

$$\frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho c_p T \mathbf{U}) = \nabla \cdot (k \nabla T) - \frac{\partial(\rho \Delta H_{sl} f_l)}{\partial t} \quad (3.1)$$

其中  $c_p$  为定压比热， $\Delta H_{sl}$  为固液相变潜热，此处为正值。 $f_l$  为液态的体积分数，在固态区域为 0，在液态区域为 1， $f_l$  处于 0 和 1 之间时则代表此处正在发生固液相变。

如果密度  $\rho$  和定压比热  $c_p$  与时间无关，热传导率  $k$  与空间位置无关，则我们可以对上式左右同除以  $\rho c_p$ ，将其写为：

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U} T) = \alpha \nabla^2 T - \frac{\Delta H_{sl}}{c_p} \frac{\partial f_l}{\partial t} \quad (3.2)$$

其中  $\alpha$  为热扩散系数，与潜热相关的项在上式中起到了源项的作用。一旦我们确定了总焓  $H$ ，就可以确定液态体积分数如下：

$$f_l = \begin{cases} 0, & H < H_s \\ \frac{H - H_s}{H_l - H_s}, & H_s < H < H_l \\ 1, & H > H_l \end{cases} \quad (3.3)$$

$H_s$  和  $H_l$  分别为固相线温度  $T_s$  和液相线温度  $T_l$  对应的总焓。 $H$  为当地的总焓，总焓的计算公式如下：

$$H = (1 - f_l) c_s T + f_l c_p T + f_l \Delta H_{sl} \quad (3.4)$$

其中  $c_s$  为固态比热，前两项被称为显焓，第三项被称为隐焓。

在格子 Boltzmann 方法中，我们用温度分布函数  $g$  离散公式 3.2，可得  $g$  的演化方程为：

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - g_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_g} (g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) + \delta_t \omega_i \phi_{sl} \quad (3.5)$$

$\tau_g$  是温度分布函数的松弛时间，与热扩散系数  $\alpha$  有关：

$$\tau_g = \frac{\alpha}{c_s^2 \delta_t} + 0.5 \quad (3.6)$$

$g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$  是当地温度的平衡态分布函数：

$$g_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = \omega_i T \left[ 1 + \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{U}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{U})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{U}^2}{2c_s^2} \right] \quad (3.7)$$

注意上式的  $\mathbf{U}$  为真实流动速度，需用公式2.6求得。  $T$  为温度，由下式计算：

$$T = \sum_i g_i(\mathbf{x}, t) \quad (3.8)$$

源项  $\phi_{sl}$  离散为：

$$\phi_{sl} = -\frac{\Delta H_{sl}}{c_p} \frac{f_l - f_{l0}}{\delta_t}, \quad (3.9)$$

其中  $f_l$  为此时的液体体积分数，  $f_{l0}$  为上一时间步的液体体积分数。

### 3.1.2 固液界面修正

当发生固液相变时，固液界面可以被看作是液态部分的边界，且此时固态部分的密度分布函数不再更新，因而处理固液相变时，我们需要对第二章提出的 LBM 模型进行修正，并采用浸入的移动边界格式<sup>14,15</sup>来模拟移动的固液界面。此时，气、液、固三相的密度分布函数演化方程可以统一写为：

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1-B}{\tau_f} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + B\Omega_i^s + (1-B)\Delta f_i(\mathbf{x}, t) \quad (3.10)$$

浸入边界格式体现在权重系数  $B$  上，  $B$  的取值与当地液态体积分数  $f_l$  和松弛时间  $\tau_f$  有关：

$$B = \frac{(1-f_l)(\tau_f - 0.5)}{f_l + \tau_f - 0.5} \quad (3.11)$$

当地为固态时，  $B$  取 1，当地为液态时，  $B$  取 0，当此处为固液界面时，  $B$  的值介于 0， 1 之间。  $\Omega_i^s$  是额外的碰撞项，它将分布函数的非平衡部分反弹：

$$\Omega_i^s = f_{\tilde{i}}(\mathbf{x}, t) - f_i(\mathbf{x}, t) + f_i^{eq}(\rho, \mathbf{u}_s) - f_i^{eq}(\rho, \mathbf{u}) \quad (3.12)$$

其中  $\mathbf{u}_s$  是固态的速度，  $\tilde{i}$  则为  $i$  的相反方向。

## 3.2 验证算例

### 3.2.1 Stefan 问题

为了验证固液相变模型的可行性和准确性。我们首先考虑一个经典的一维 Stefan 问题，这个简单的自由界面问题存在解析解<sup>16</sup>。参考示意图3.1我们的计算域大小取为  $L_x * L_y = 500 * 100$ ，初始全场温度设为  $T_0 = 1$ ，设融化温度  $T_l = T_s = 0.5$ ，初始时全场全部为固态，设固液密度相等且  $\rho_s = \rho_l = 1$ 。设相变潜热  $L = 100$ ，固液定压比热容为  $c_s = c_{pl} = 4.0$ ，温度演化方程的松弛时间  $\tau_g = 0.8$ ，则热扩散系数为  $\alpha = c_s^2(\tau_g - 0.5)$ 。模拟中上下边界设为周期性边界条件，左右无滑移边界使用半反弹格式，左侧为恒温边界条件  $T = T_w = 0$ ，右侧也为恒温边界条件，且温度设为  $T = T_0$ 。由于左侧温度高于融化温度  $T_w > T_s$ ，在热传导作用下，左侧的固体会逐渐融化为液态，固液界面将不断右移。我们设固液界面距左侧边界的位置为  $X_i(t)$ 。在某一时刻  $t = \tau$  时，在固液界面左侧，温度大于液相线温度  $T_l$ ，材料全部融化为液态，在固液界面右侧，温度小于固相线温度  $T_s$ ，材料仍旧保持固态，  $T_s < T < T_l$  的区域为固液界面糊状区，当  $T_s = T_l$  时，糊状区域的厚度理论上为 0。

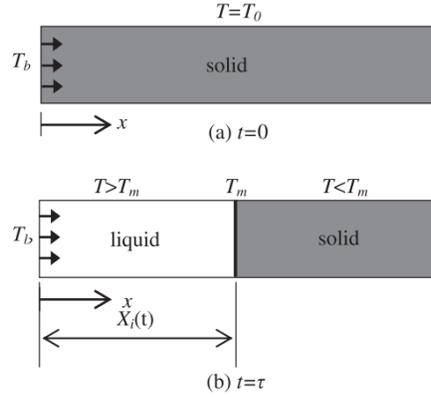


图 3.1: 一维 Stefan 问题示意图。

对于该问题而言，温度在  $x$  方向分布的理论解为：

$$T(x, t) = \begin{cases} T_w - \frac{T_w - T_l}{\text{erf}(k)} \text{erf}\left(\frac{x}{2(\alpha_l t)^{1/2}}\right), & 0 \leq x \leq X_i(t), \\ T_0 + \frac{T_s - T_0}{\text{erfc}(k/R_\alpha^{1/2})} \text{erfc}\left(\frac{x}{2(\alpha_s t)^{1/2}}\right), & x > X_i(t), \end{cases} \quad (3.13)$$

其中  $R_\alpha$  为材料的固液热扩散系数之比，在本次模拟中  $R_\alpha = \alpha_s/\alpha_l = 1$ ， $X_i(t)$  为固液界面位置且：

$$X_i(t) = 2k\sqrt{\alpha_l t} \quad (3.14)$$

上面两个公式中的参数  $k$  为如下超越方程的解：

$$\frac{Ste_l}{\exp(k^2)\text{erf}(k)} - \frac{Ste_s R_\alpha^{1/2}}{\exp(k^2/R_\alpha)\text{erfc}(k/R_\alpha^{1/2})} = k\sqrt{\pi} \quad (3.15)$$

其中  $Ste_l = c_{pl}(T_w - T_l)/L = 0.02$ ， $Ste_s = c_s(T_s - T_0)/L = 0.02$ 。

以上给出的数值全部为格子单位，为了对比模拟结果，我们需要对其进行无量纲化。例如无量纲距离  $x^* = x/L_x$ ，无量纲时间  $t^* = \alpha_s t/L_x^2$  以及无量纲温度  $T^* = (T - T_0)/(T_w - T_0)$ 。图3.2给出了在  $t^* = 0.04$  时的温度分布图，可以看到模拟结果和理论解近乎完美吻合。我们将温度曲线转折处（固液界面处）局部放大后可以看到模拟结果在界面处存在很小的误差，在图3.3中我们给出了此时的固态分数  $f_s = 1 - f_l$  分布曲线。可以看到尽管在  $T_s = T_l$  的条件下理论上固液界面厚度为 0，但由于数值扩散，模拟得到的固液界面存在一定厚度的糊状区，但这个糊状区的宽度始终不超过一个网格宽度。因而模拟的准确性不会受到较大影响。并且从另一个角度来说，正是因为这个糊状区的存在，我们才能解析网格之间的界面位置。在图3.4中，我们也给出了模拟所得的固液界面位置随时间的演化以及与理论值的对比，可以看到模拟结果和理论解十分吻合，虽然在时间较长时模拟结果有比理论值偏大的趋势，但这是因为计算域长度的限制。在时间较大时右侧边界不再适用于无穷远边界条件。

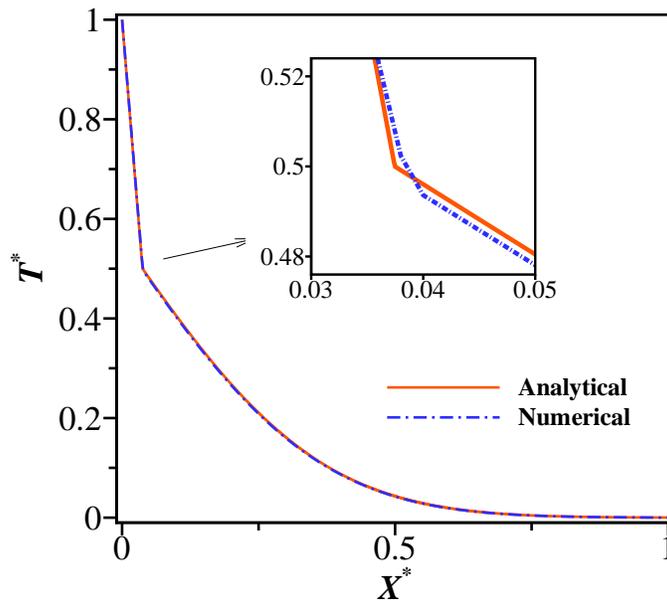


图 3.2: 在  $t^* = 0.04$  时的温度分布曲线。

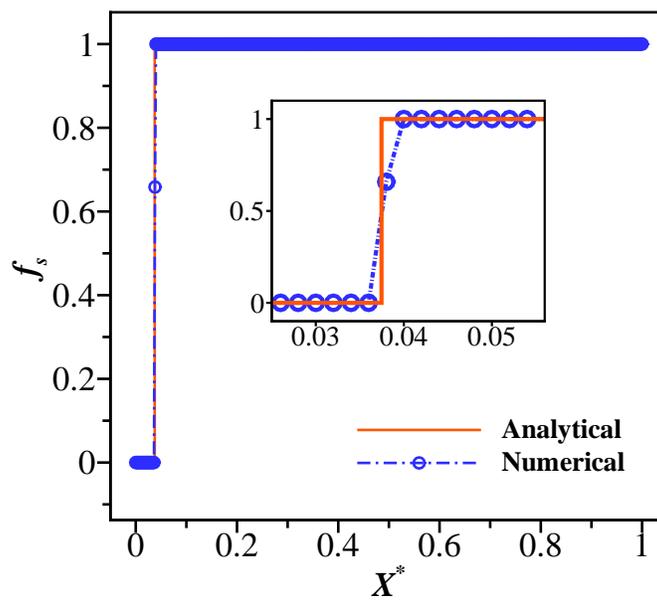


图 3.3: 在  $t^* = 0.04$  时的  $f_s$  分布曲线。

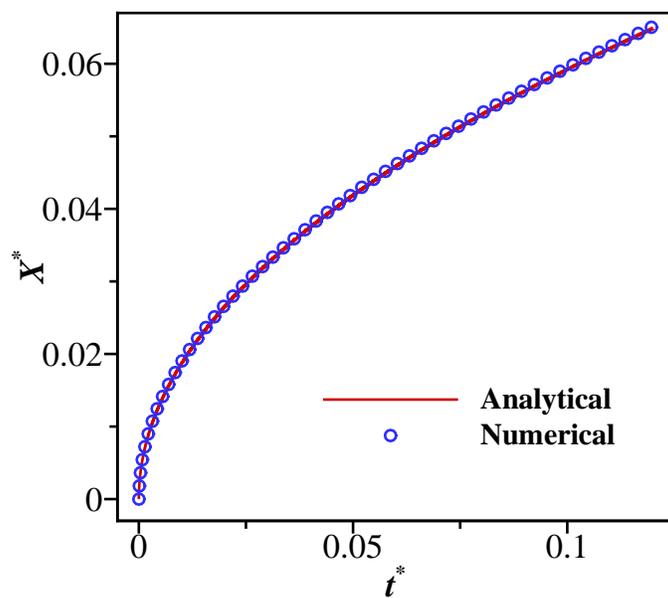


图 3.4: 界面位置随时间的演化。



## 第四章 气液相变模型

### 4.1 数值模型

气液相变模型的密度演化方程与第二章完全相同，但此时我们需要对能量方程进行额外的处理。本章的气液相变模型基于 Gong-cheng 模型<sup>7,17</sup>。如果我们忽略粘性耗散的影响，对于扩散界面模型的熵平衡方程可以写为<sup>18</sup>：

$$\rho T \frac{ds}{dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (4.1)$$

并且我们有热力学熵关系式：

$$\begin{aligned} T ds &= c_v dT + T \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_v dv = c_v dT + T \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_v d \frac{1}{\rho} \\ &= c_v dT - T \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho d\rho \end{aligned} \quad (4.2)$$

因而，我们可以将公式4.1重写为：

$$\frac{dT}{dt} = \nabla \cdot \left( \frac{k}{\rho c_v} \nabla T \right) + \frac{T}{\rho^2 c_v} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \frac{d\rho}{dt} \quad (4.3)$$

此外我们还有如下关系式：

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) T \quad (4.4)$$

以及连续方程：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U} \rho) = 0 \quad (4.5)$$

将上两式带入公式4.3中，可将其写为

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U} T) = \nabla \cdot (\alpha \nabla T) + \phi_{lv} \quad (4.6)$$

其中  $\alpha$  为热扩散系数且  $\alpha = k/(\rho c_p)$ 。  $\phi_{lv}$  为与相变有关的源项，其表达式为：

$$\phi_{lv} = T \left[ 1 - \frac{1}{\rho c_v} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \right] \nabla \cdot \mathbf{U} + \frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho c_v} - \nabla \cdot (\alpha \nabla T) \quad (4.7)$$

注意到除了源项不同，方程3.2和4.6完全一致，因此，我们也可以用同样的方式将其离散，引入温度分布函数  $g_i(\mathbf{x}, t)$ ，其演化方程如下：

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - g_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_g} (g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) + \delta_t \phi_{sl} \quad (4.8)$$

平衡态分布  $g_i^{eq}$  由公式3.7求得，宏观量温度  $T$  由公式3.8求得。

## 4.2 验证算例 - $D^2$ law

我们考虑一个经典的液滴蒸发问题。如果满足以下条件：液滴的蒸发过程是准静态的，液滴蒸发时粘性导致的热耗散可以忽略且不考虑浮力作用，各个热力学参数（如  $c_v, c_p, k$ ）是常数。那么液滴蒸发时其直径的平方随时间是线性变化的，这个规律也经常被称为液滴蒸发的  $D^2$  law<sup>19</sup>。

在本节中我们还将介绍其他几个气液相变模型，这些模型的基本思想都与本节介绍的模型相同，只是做了不同的简化导致最后的源项与公式4.9有所差别。我们将分别将这几种模型运用于液滴蒸发问题上，并简单分析各自特点。

第一个模型是 Gong-cheng 模型的早期版本<sup>7</sup>，最开始时，他们忽略了  $\frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho c_v} - \nabla \cdot (\alpha \nabla T)$  项，得到了一个十分简单的源项：

$$\phi_{lv} = T \left[ 1 - \frac{1}{\rho c_v} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \right] \nabla \cdot \mathbf{U} \quad (4.9)$$

显然这种简化在气液界面处是不合理的，在之后的结果中也清楚地体现了这点，我们将这个模型记为 Gong2012。

第二个模型即为本节给出的模型，记为 Gong2017。

第三个模型是 Li 等人在 2017 年提出的<sup>20</sup>，他们指出即使是采用和 Gong2017 模型相同的源项，我们在将这个源项加入 LB 方程中时仍会带来一些误差项，这些误差项同样会影响相变模型的精确性。因而即使他们的模型采用的源项仍为公式4.9，但是他们将演化方程修正为：

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - g_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_g} (g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) + \delta_t (\phi_{sl} + \frac{\delta_t}{2} \partial_t \phi_{sl}) + \delta_t C_\alpha \quad (4.10)$$

其中  $C_\alpha$  为修正项且：

$$C_\alpha = (1 - \frac{1}{2\tau_g}) \frac{\omega_\alpha \mathbf{e}_\alpha \cdot \partial_t (T\mathbf{U})}{c_s^2} \quad (4.11)$$

记该模型为 improved。

第四个模型为参考模型，选为 Li 等人于 2015 年提出的混合格子 Boltzmann 模型<sup>21</sup>。混合的说法源于该模型虽然依旧使用经典 LB 方程求解密度场和速度场，但是却改用有限差分法求解温度场。这样的做法避免了原控制方程转化为 LB 方程时产生的一些多余的误差项<sup>20</sup>。我们可以直接将方程4.6写为：

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\mathbf{U} \cdot \nabla T + \frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho c_v} + \frac{T}{\rho c_v} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \nabla \cdot \mathbf{U} \quad (4.12)$$

记上式右侧为  $K(T)$ ，我们使用经典的 4 阶 Runge-Kutta 法进行时间离散为：

$$T^{t+\delta_t} = T^t + \frac{\delta_t}{6} (h_1 + 2h_2 + 2h_3 + h_4) \quad (4.13)$$

其中  $h_1, h_2, h_3, h_4$  分别为：

$$h_1 = K(T^t) h_2 = K(T^t + \frac{\delta_t}{2} h_1), \quad h_3 = K(T^t + \frac{\delta_t}{2} h_2), \quad h_4 = K(T^t + \delta_t h_3) \quad (4.14)$$

我们记该模型为 Ref。

模拟中我们采用的计算域大小为  $Lx * Ly = 201 * 201$ ，初始状态时，一个直径为  $D_0 = 60$  的液滴被放置在计算域中央，全场温度设为  $T = 0.85T_c$ 。全场的热导率，比热容恒定，且  $k = 2/3, c_v = c_l = 5$ ，松弛参数  $\tau_f = 0.8$ 。当液滴发展 20000 时间步平衡后，我们将计算域四个边界的温度全部设为  $T = T_c$ ，

并将此时重新记为计算开始之时： $itc = 0$ 。在之后整个计算过程中，四个边界全部设为周期性边界条件，边界处温度恒定为  $T_c^{22,23}$ 。由于四周的温度较高，位于计算域中心的液滴将会不断被蒸发，图4.1给出了 Gong2017 模型在不同时间步的计算结果。

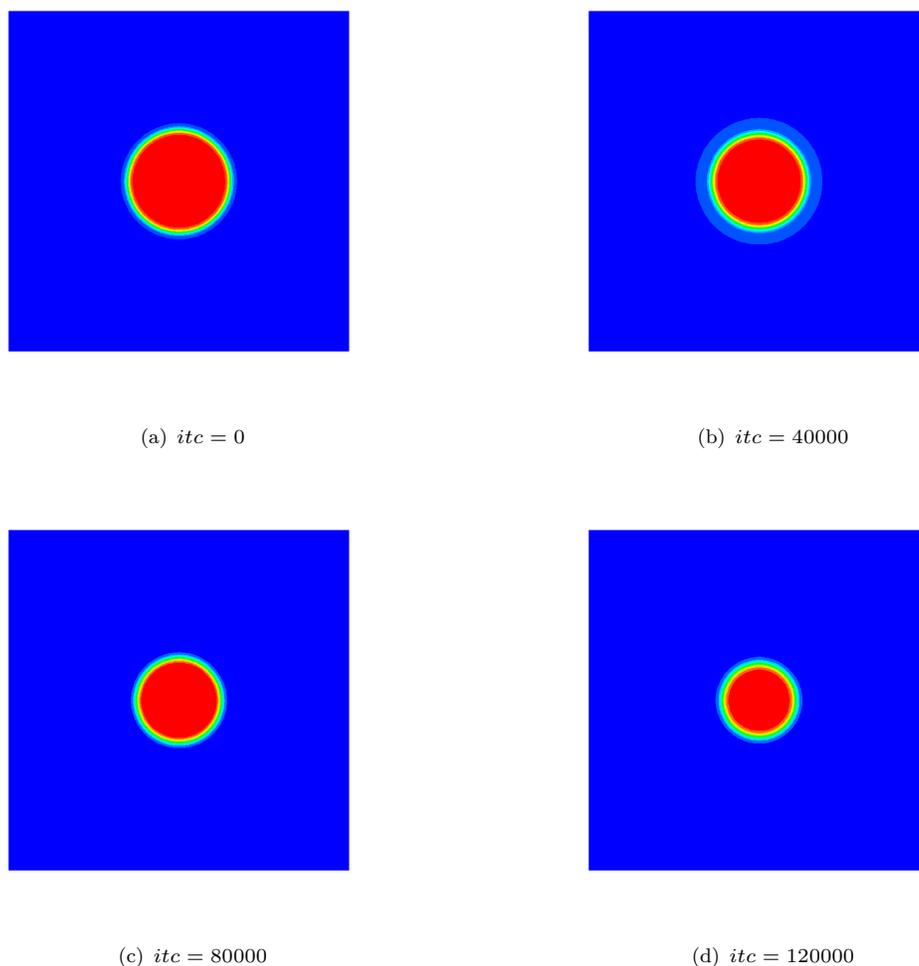


图 4.1: 液滴蒸发过程，使用模型 Gong2017。

可以看到随着时间的增长，液滴的半径逐渐减小。如果我们定义液滴的无量纲直径  $D^*$  为当前直径  $D$  与初始直径  $D_0$  的比值： $D^* = D/D_0$ 。理论表明，对于恒温蒸发的液滴， $(D^*)^2$  与时间成反比，这就是人们常说的  $D^2$  law。在图4.2中，我们给出了使用不同模型模拟所得液滴的无量纲直径的平方随时间的变化。首先，我们看到 Gong2012 模型的结果与参考值偏离很大，这是由于密度在气液界面变化很大，因而  $\frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho c_v} - \nabla \cdot (\alpha \nabla T)$  这一项在界面处不可忽略。如果我们加入该项则得到了 Gong2017 的结果，可以看到此时与参考值已经十分接近了。但由于我们将温度方程离散为 LB 方程时引入了一些误差项，因而与参考值还是有一些偏离。模型 3 加入的修正项很好的消除了这些误差项，得到的结果与参考值近乎重合。此外我们注意到在蒸发初期模拟所得的液滴直径变化很快，这是因为此时的温度常由常值变为不均匀，导致气液界面收缩，因而造成了液滴快速缩小的现象。

这里也给我们一个提示，在处理多相问题的固液相变时，由于气液界面的密度等参数变化很大，从

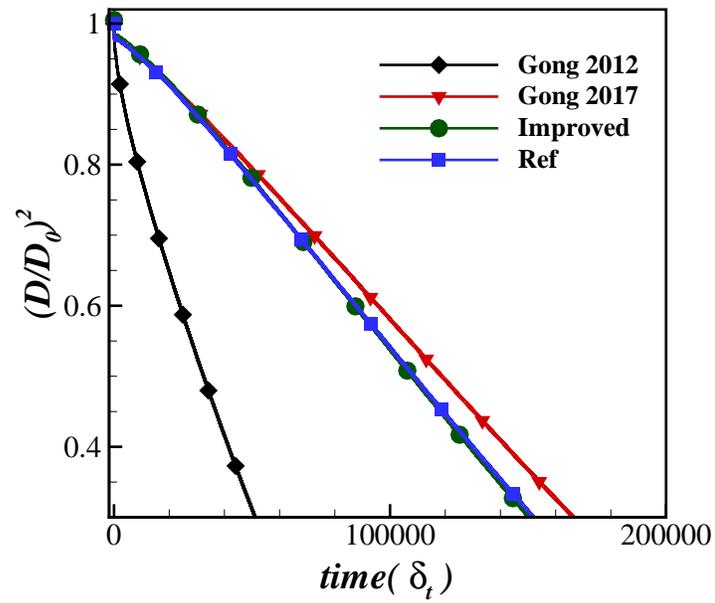


图 4.2: 液滴直径随时间的变化曲线。

公式3.1 到 3.2的简化可能会带来较大的误差。因而为了得到更精确的模拟结果，我们也需要参考本节的后几种模型对这个误差进行修正。

# 第五章 固气液三相相变

## 5.1 数值模型

将前两章的模型结合到一起,我们就得到了可描述固气液三相相变的模型。其密度分布函数  $f_i(\mathbf{x}, t)$  和温度分布函数  $g_i(\mathbf{x}, t)$  的演化方程分别为:

$$f_i(\mathbf{x}, \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1-B}{\tau_f} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + B\Omega_i^s + (1-B)\Delta f_i(\mathbf{x}, t) \quad (5.1)$$

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - g_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_g} (g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) + \delta_t \omega_i (\phi_{sl} + \phi_{lv}) \quad (5.2)$$

各项的含义和取值均可参考前三章的论述。

## 5.2 验证算例

我们现在考虑一个一维的三相相变问题<sup>24</sup>。初始时整个半无限长区域里充满了温度相同的饱和气体,在某个时刻左边界温度突然降至其冰点之下,然后气体就会在左侧凝结成液体,然后再冻结为固态,我们可以在这个区域里观察到三相界面的生成与演化。我们采用的计算域网格大小为  $l_x * l_y = 500 * 100$ , 如图5.2。在计算域的上下边界我们使用周期性边界条件,左边界设为恒温边界条件<sup>22,23</sup>, 温度为冷壁

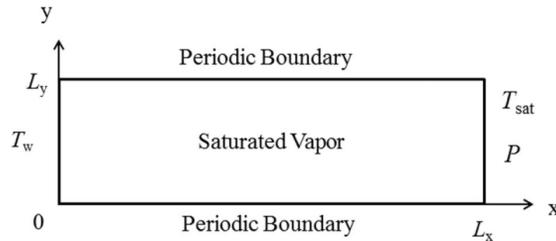


图 5.1: 计算域示意图

温度  $T_w$ , 右边界也设为恒温边界条件, 温度为初始气体的温度  $T_{sat}$ 。速度边界条件设定为左边界为无滑移边界条件, 使用半反弹格式, 右边界设置为自由出口边界, 使用恒压边界条件<sup>25</sup>。

为了描述这个问题, 我们定义一个无量纲参数傅里叶数 (Fourier number, Fo) 如下:

$$Fo = \frac{\alpha_s t}{L_0^2} \quad (5.3)$$

其中  $\alpha_s$  是固态的热扩散系数,  $t$  为时间,  $L_0$  为系统的特征长度, 在这个问题中, 我们取特征长度为计算域的宽度  $L_x$ 。同样, 我们也将模拟结果的温度无量纲化如下:

$$T^* = \frac{T}{T_{cr}}, \quad (5.4)$$

其中  $T_{cr}$  为临界温度, 其大小由状态方程定义。模拟中, 我们定义气体温度  $T_{sat}^* = 0.9$ , 冷壁温度为  $T_w^* = 0.55$ , 液态定压比热  $c_{pl} = 4.0$ , 定容比热  $c_{vl} = 4.0$ , 气态定压比热  $c_{pg} = 2.0$ , 定容比热  $c_{vg} = 2.0$ , 固态比热  $c_s = 4.0$ 。计算液态体积分数  $f_l$  的公式 3.3 中对应的  $H_s$  和  $H_l$  分别对应固相线温度为  $T_s^* = 0.64$  和液相线温度为  $T_l^* = 0.65$  的总焓,  $T_s^*$  决定了固态的密度大小,  $T_s^*$  和  $T_l^*$  决定了相变开始和结束的温度, 其相对大小影响着糊状区的宽度。设定固液相变潜热  $\Delta H_{sl} = c_p * 0.01 * T^*$ 。模拟中不考虑重力影响。

图 5.2 给出了无量纲时间  $Fo = 0.12$  时的密度云图。图中从左到右不同颜色分别代表了固态、液态

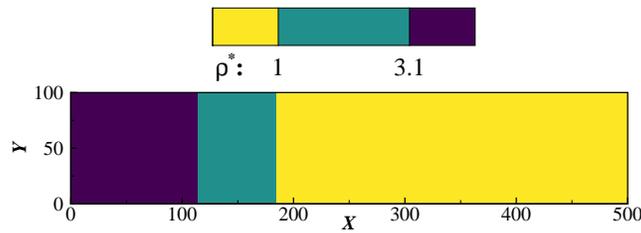


图 5.2: 在  $Fo = 0.12$  时的密度云图

和气态区域。我们可以看到, 随着一段时间的演化, 由于左侧边壁温度较低, 气体先在左侧冷凝为液态, 然后当液态温度低于结冰温度时又变为固态, 因而在计算域内从左到右不同位置分存在移动的固液和气液界面。而即使经过了较长时间的发展, 图中模拟所得的相界面仍然十分稳定。为了定量分析, 我们在图 5.3 中给出了该时刻计算域内  $x$  方向的密度  $\rho^* = \rho/\rho_0$  和固态体积分数  $f_s = 1 - f_l$  的分布。首先我们可以看到靠近左侧壁面的位置密度最高, 这个密度即对应着固态的密度, 它的值与固相线温度  $T_s^*$  和液相线温度  $T_l^*$  有关。在左侧  $f_s = 1$  的固态区域里固态密度除了在初始状态有小波动外均为定值。固液界面位于于约  $X^* = 0.29$  的位置处, 界面糊状区域的宽度约为 5 个网格大小, 如果我们设定  $T_s^* = T_l^*$  时糊状区域会更小。在固液界面右侧, 固态体积分数  $f_s$  恒为 0。但液体的密度却并非定值, 而是在不断减小, 这是因为越靠近右侧温度越高, 其对应的饱和和液态密度也越低。气液界面位于  $X^* = 0.43$  处, 在气液界面右侧密度不再变化, 一直保持为  $T = T_0$  对应的饱和和气态密度。我们在图 5.6 给出了该时刻的  $x$  方向温度分布, 图中两条蓝色的虚线分别为此时的固液界面和气液界面位置。我们可以看到, 在最左侧位置温度等于冷壁温度  $T^* = T_w^* = 0.55$ , 之后在固态区域从左到右温度线性增加, 在液态区域温度分别也近似线性增加, 不过由于固态部分的热传导系数更大, 固态部分的温度增加斜率小于液态部分。此外我们发现, 在气液界面后, 温度会升高到  $T_0$  之上, 这是因为气液相变释放的潜热能使此处的温度增加。最后, 我们给出了固液和气液界面位置随无量纲时间  $Fo$  的演化如图 5.5: 随着时间的增加, 固液界面和气液界面均从  $X^* = 0$  开始向右移动, 且移动速度不断减小。但是气液界面的移动速度大于固液界面, 因而液体层的厚度在不断增加, 这从图中两条曲线的间距在不断增大就可以看出。

最后, 如果我们发现如果改变相变潜热  $\Delta H_{sl}$  将会导致温度分布曲线的形状有较大改变。当潜热

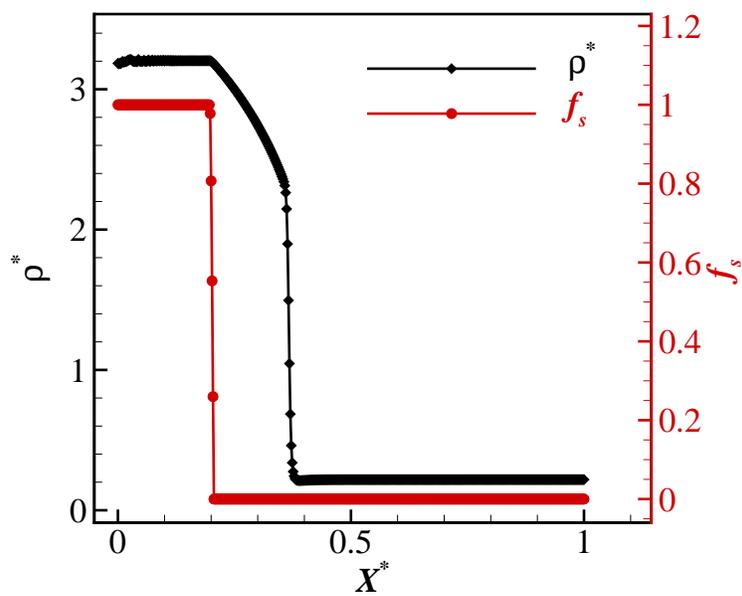


图 5.3: 在  $Fo = 0.12$  时的密度分布以及液态体积分数分布

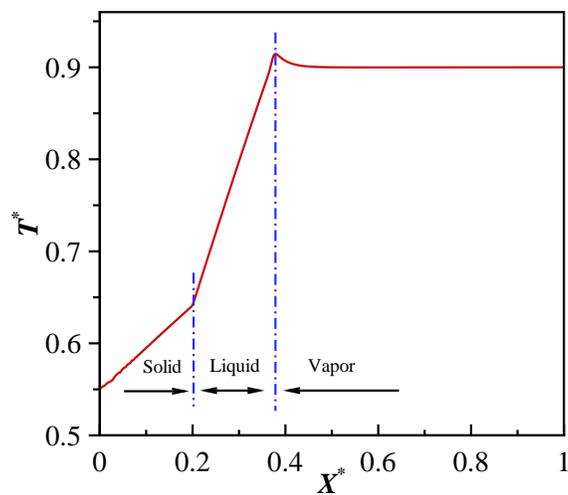


图 5.4: 在  $Fo = 0.12$  时的温度分布

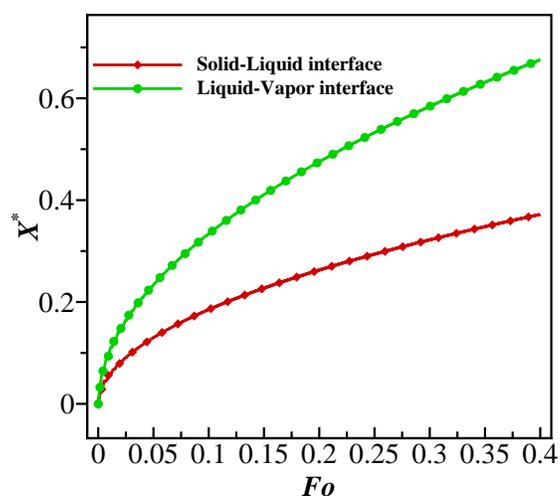


图 5.5: 在  $Fo = 0.12$  时的温度分布

很大时，固态部分和液态部分的斜率将变得一致，这也令我们怀疑之前的推论“由于固态部分的热传导系数更大，固态部分的温度增加斜率小于液态部分。”是否合理。我们在保持其他参数不变的情况下将  $\Delta H_{sl}$  分别变为  $\Delta H_{sl} = c_p * 1 * T^*$  和  $\Delta H_{sl} = c_p * 10 * T^*$ 。如果我们定义无量纲数  $St_s = \frac{c_p(T_s - T_w)}{\Delta H_{sl}}$ ，图 ref 给出了分别对应  $St_s = 9$ ， $St_s = 0.09$ ， $St_s = 0.009$  的结果。

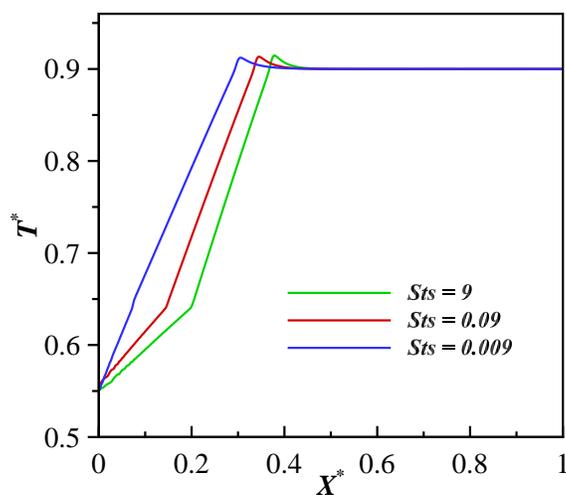


图 5.6: 不同潜热下在  $Fo = 0.12$  时的温度分布

## 第六章 液滴结冰

液滴结冰本来应该放到第三章，在这里重列一章最主要的原因还是没有得到可用的结果。

一般而言我们在处理液滴结冰问题时只考虑固液相变，因而与 Stefan 问题唯一的不同就是使用了伪势模型生成气液两相。虽然我们在第四章结尾提到，由于气液界面处的各个参数变化很大，因而直接从公式3.1到公式3.2的简化可能是不合理的，Li 等人也提到了这个问题<sup>26</sup>。

但是由于我们的主要关注点在于固液界面，气液界面对固液相变的影响可能是次要的，很多学者忽略了这个问题，直接使用公式3.2计算<sup>27-30</sup>。或者只是添加了修正项  $\frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho c_v} - \nabla \cdot (\alpha \nabla T)$  来使气液界面热通量连续<sup>31</sup>。

但无论是使用简化的模型还是混合 LBM，计算都遇到了很严重的问题：三相接触点的温度很高，如图6.1：

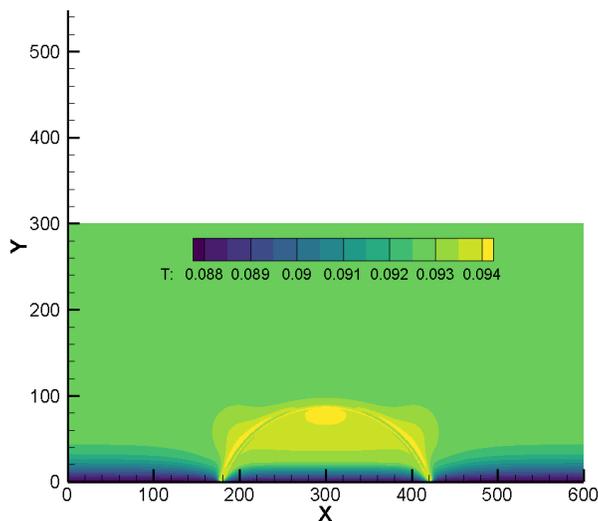


图 6.1: Temperature.

这也进而影响了液滴的结冰过程，使其三相接触点一直无法结冰，结冰线始终保持上凸，如图6.2。

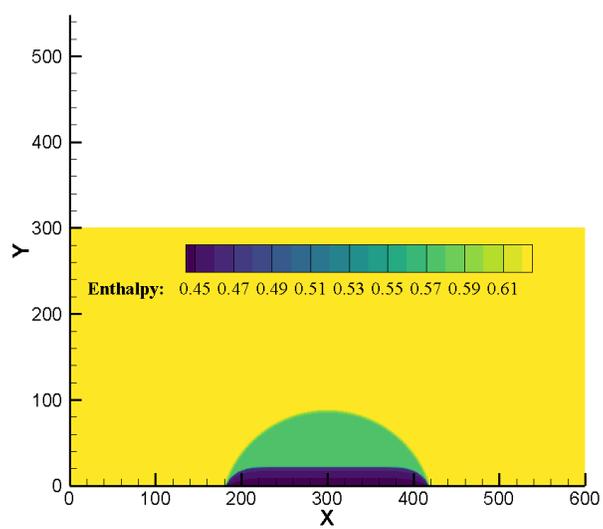


图 6.2: enthalpy.

## 参考文献

- [1] Xiaowen Shan and Hudong Chen. Lattice boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Physical review E*, 47(3):1815, 1993.
- [2] Zhaoli Guo, Chuguang Zheng, and Baochang Shi. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice boltzmann method. *Physical review E*, 65(4):046308, 2002.
- [3] Q Li, Kai Hong Luo, XJ Li, et al. Forcing scheme in pseudopotential lattice boltzmann model for multiphase flows. *Physical Review E*, 86(1):016709, 2012.
- [4] AL Kupershtokh, DA Medvedev, and DI Karpov. On equations of state in a lattice boltzmann method. *Computers & Mathematics with Applications*, 58(5):965–974, 2009.
- [5] Xiaowen Shan and Hudong Chen. Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice boltzmann equation. *Physical Review E*, 49(4):2941, 1994.
- [6] Peng Yuan and Laura Schaefer. Equations of state in a lattice boltzmann model. *Physics of Fluids*, 18(4):042101, 2006.
- [7] Shuai Gong and Ping Cheng. Numerical investigation of droplet motion and coalescence by an improved lattice boltzmann model for phase transitions and multiphase flows. *Computers & Fluids*, 53:93–104, 2012.
- [8] Qing Li, KH Luo, QJ Kang, and Q Chen. Contact angles in the pseudopotential lattice boltzmann modeling of wetting. *Physical Review E*, 90(5):053301, 2014.
- [9] Q Li, KH Luo, and XJ Li. Lattice boltzmann modeling of multiphase flows at large density ratio with an improved pseudopotential model. *Physical Review E*, 87(5):053301, 2013.
- [10] David Quéré. Wetting and roughness. *Annu. Rev. Mater. Res.*, 38:71–99, 2008.
- [11] Lei Wang, Hai-bo Huang, and Xi-Yun Lu. Scheme for contact angle and its hysteresis in a multiphase lattice boltzmann method. *Physical Review E*, 87(1):013301, 2013.
- [12] Hang Ding and Peter DM Spelt. Wetting condition in diffuse interface simulations of contact line motion. *Physical Review E*, 75(4):046708, 2007.

- [13] Suman Chakraborty and Dipankar Chatterjee. An enthalpy-based hybrid lattice-boltzmann method for modelling solid-liquid phase transition in the presence of convective transport. *Journal of Fluid Mechanics*, 592:155, 2007.
- [14] DR Noble and JR Torczynski. A lattice-boltzmann method for partially saturated computational cells. *International Journal of Modern Physics C*, 9(08):1189–1201, 1998.
- [15] Rongzong Huang, Huiying Wu, and Ping Cheng. A new lattice boltzmann model for solid–liquid phase change. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 59:295–301, 2013.
- [16] Sushil Chandra Gupta. *The classical Stefan problem: basic concepts, modelling and analysis with quasi-analytical solutions and methods*, volume 45. Elsevier, 2017.
- [17] Chaoyang Zhang and Ping Cheng. Mesoscale simulations of boiling curves and boiling hysteresis under constant wall temperature and constant heat flux conditions. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 110:319–329, 2017.
- [18] Daniel M Anderson, Geoffrey B McFadden, and Adam A Wheeler. Diffuse-interface methods in fluid mechanics. *Annual review of fluid mechanics*, 30(1):139–165, 1998.
- [19] CK Law. Recent advances in droplet vaporization and combustion. *Progress in energy and combustion science*, 8(3):171–201, 1982.
- [20] Qing Li, P Zhou, and HJ Yan. Improved thermal lattice boltzmann model for simulation of liquid-vapor phase change. *Physical Review E*, 96(6):063303, 2017.
- [21] Qing Li, QJ Kang, Marianne M Francois, YL He, and KH Luo. Lattice boltzmann modeling of boiling heat transfer: The boiling curve and the effects of wettability. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 85:787–796, 2015.
- [22] Takaji Inamuro, Masato Yoshino, Hiroshi Inoue, Riki Mizuno, and Fumimaru Ogino. A lattice boltzmann method for a binary miscible fluid mixture and its application to a heat-transfer problem. *Journal of Computational Physics*, 179(1):201–215, 2002.
- [23] Like Li, Renwei Mei, and James F Klausner. Boundary conditions for thermal lattice boltzmann equation method. *Journal of Computational Physics*, 237:366–395, 2013.
- [24] Xiaoping Li, Jianan Zhao, and Ping Cheng. A lattice boltzmann model for condensation and freezing of dry saturated vapor about a cryogenic spot on an inclined hydrophobic surface. *International journal of heat and mass transfer*, 114:628–639, 2017.
- [25] Qisu Zou and Xiaoyi He. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice boltzmann bgk model. *Physics of fluids*, 9(6):1591–1598, 1997.
- [26] Qing Li, Kai Hong Luo, QJ Kang, YL He, Q Chen, and Q Liu. Lattice boltzmann methods for multiphase flow and phase-change heat transfer. *Progress in Energy and Combustion Science*, 52:62–105, 2016.

- [27] Wei Xiong and Ping Cheng. Numerical investigation of air entrapment in a molten droplet impacting and solidifying on a cold smooth substrate by 3d lattice boltzmann method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 124:1262–1274, 2018.
- [28] Wei Xiong and Ping Cheng. Mesoscale simulation of a molten droplet impacting and solidifying on a cold rough substrate. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 98:248–257, 2018.
- [29] Zhiyuan Ma, W Xiong, and P Cheng. 3d lattice boltzmann simulations for water droplet’s impact and transition from central-pointy icing pattern to central-concave icing pattern on supercooled surfaces. part i: Smooth surfaces. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 171:121097, 2021.
- [30] Jianan Zhao, Xiaoping Li, and Ping Cheng. Lattice boltzmann simulation of a droplet impact and freezing on cold surfaces. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 87:175–182, 2017.
- [31] Chaoyang Zhang, Hui Zhang, Wenzhen Fang, Yugang Zhao, and Chun Yang. Axisymmetric lattice boltzmann model for simulating the freezing process of a sessile water droplet with volume change. *Physical Review E*, 101(2):023314, 2020.