多相格子Boltzmann方法及其在相变传热中的应用

李庆*, 余悦, 唐诗

中南大学能源科学与工程学院, 长沙 410083

* 联系人, E-mail: qingli@csu.edu.cn

2019-11-25 收稿, 2020-04-13 修回, 2020-04-22 接受, 2020-04-23 网络版发表

国家自然科学基金(51822606)资助

摘要 经过30余年的发展, 格子Boltzmann方法已成为一种非常有效的数值模拟方法. 该方法是介于微观分子动力学模拟方法和基于连续介质假设的宏观数值模拟方法之间的一种介观数值模拟方法. 与传统数值模拟方法不同, 格子Boltzmann方法基于气体动理论, 具有清晰的物理背景和粒子图像, 能够非常方便地从底层刻画流体内部的相互作用, 因而对多相多组分等复杂流体系统的模拟具有很大优势. 近年来, 该方法被应用到沸腾及冷凝相变传热的研究中, 体现出了一定的优势与特色. 与VOF, Level Set等界面跟踪或界面捕捉方法相比, 格子Boltzmann方法中的气液界面可以自动产生、演化与迁移, 无须采用任何界面跟踪或界面捕捉技术. 此外, 在相变传热的研究中, 气泡或液滴可以自动成核, 无须布置种子气泡或种子液滴. 本文总结了近些年多相格子Boltzmann方法的发展, 并结合作者的研究工作, 重点评述了伪势多相格子Boltzmann模型的研究进展及其在沸腾与冷凝相变传热中的应用.

关键词 格子Boltzmann方法, 多相流, 伪势多相模型, 沸腾, 冷凝

格子Boltzmann方法是20世纪80年代末开始发展起来的一种数值模拟方法, 该方法是介于微观分子动力学模拟方法和宏观传统数值模拟方法之间的一种介观数值模拟方法^[1-3]. 从描述流体运动的方式来说, 微观分子动力学模拟着眼于每个流体分子的动力学行为, 通过刻画每个分子的具体运动并采用统计方法来描述流体的运动情况, 而宏观数值模拟方法则将流体看作连续介质(流体质点连续布满整个物理空间), 它着眼于流体质点, 并通过一组偏微分方程来直接描述流体的运动. 介观格子Boltzmann方法则着眼于流体分子的分布函数, 根据相应的控制方程来研究分布函数的时空演化, 流体的宏观运动信息通过宏观物理量与分布函数之间的关系来获得.

最早的格子Boltzmann模型并不是基于气体动理论建立的, 而是直接从格子气自动机发展而来. 1988年, McNamara和Zanetti^[4]提出把格子气自动机中的布尔运

算变成实数运算, 即采用实数来表征系综平均后的粒子分布函数, 而不再用0或1来表示格子节点上的粒子数. 这一模型被国际学术界公认为最早的格子Boltzmann模型, 它的出现开启了格子Boltzmann方法的大门. 随后, 在20世纪90年代, 格子Boltzmann方法历经了两次历史性的飞跃. 第一次历史性飞跃发生在1991年前后, 国际上3个不同的研究小组^[5-7]针对格子Boltzmann方法的碰撞矩阵提出了一种更为简单的碰撞模型, 即单松弛模型. 在单松弛格子Boltzmann模型中, BGK(Bhatnagar-Gross-Krook)碰撞算子取代了原来复杂的碰撞矩阵, 同时, 基于Maxwell分布的平衡态分布函数取代了格子气自动机中的Fermi-Dirac平衡态分布函数. 毫不夸张地说, 许多初学者对格子Boltzmann方法的热情在很大程度上源自于单松弛模型的简单及易于实施的特性.

格子Boltzmann方法的第二次历史性飞跃发生在

引用格式: 李庆, 余悦, 唐诗. 多相格子Boltzmann方法及其在相变传热中的应用. 科学通报, 2020, 65: 1677-1693

Li Q, Yu Y, Tang S. Multiphase lattice Boltzmann method and its applications in phase-change heat transfer (in Chinese). Chin Sci Bull, 2020, 65: 1677-1693, doi: [10.1360/TB-2019-0769](https://doi.org/10.1360/TB-2019-0769)

1997年前后. 在这一时期, 以He和Luo^[8~11]为代表的一些学者从不同角度严格地证明了格子Boltzmann方程可以从气体动理论的基本方程——连续Boltzmann方程导出. 这一发现建立了格子Boltzmann方法与气体动理论的联系, 有助于人们更加深刻地理解格子Boltzmann方法的物理内涵和介观背景; 另一方面, 它为构建格子Boltzmann模型提供了新的思路, 即可以直接从相关的气体动理论出发来构建相应的格子Boltzmann模型, 其后格子Boltzmann方法所发展的许多模型就是在这一思路的指引下建立的. 这两次历史性飞跃在格子Boltzmann方法的发展历史中具有十分重要的意义, 第一次飞跃使得格子Boltzmann方法从格子气自动机中完全脱离出来, 第二次飞跃则建立了格子Boltzmann方法与气体动理论的联系, 在理论上确认并巩固了格子Boltzmann方法“介观方法”的地位.

经过30余年的发展, 格子Boltzmann方法无论是在理论还是在应用方面都取得了长足的进展, 已从纯粹的理论研究迈向工程实际应用, 且涵盖了多个学科及领域. 近年来, 针对格子Boltzmann方法的基础理论与基本模型及相关应用, 国际国内已出版多部学术著作, 其中西安交通大学何雅玲等人^[12]、华中科技大学郭照立等人^[13]出版的两部中文著作对推动格子Boltzmann方法在我国的发展起到了重要的作用. 与传统数值模拟方法不同, 格子Boltzmann方法的介观背景与粒子特性使其能够非常方便地从底层刻画流体内部的相互作用, 对描述多相多组分等复杂的流体系统具有很大的优势, 这也使得多相格子Boltzmann方法的研究一直是格子Boltzmann方法领域非常重要且十分活跃的研究方向. 结合近几年的研究进展和体会, 本文将围绕多相格子Boltzmann方法及其在沸腾与冷凝相变传热中的应用, 对相关的研究工作进行整理与评述.

1 多相格子Boltzmann方法

1.1 格子Boltzmann方程

采用单松弛碰撞算子时, 格子Boltzmann方程可写成如下形式:

$$f_{\alpha}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha}\delta_t, t + \delta_t) - f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau}[f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) - f_{\alpha}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)] + \delta_t F_{\alpha}(\mathbf{x}, t), \quad (1)$$

其中 $f_{\alpha}(\mathbf{x}, t)$ 为 t 时刻空间位置 $\mathbf{x}$ 处的密度分布函数, 其对应的平衡态分布函数为 $f_{\alpha}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)$, τ 为无量纲松弛因

子, δ_t 是时间步长, $\mathbf{e}_{\alpha}$ 为离散速度, $F_{\alpha}(\mathbf{x}, t)$ 为作用力项. 上述格子Boltzmann方程可拆成“碰撞”与“迁移”两步, 碰撞步:

$$f_{\alpha}^*(\mathbf{x}, t) = f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau}[f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) - f_{\alpha}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)] + \delta_t F_{\alpha}(\mathbf{x}, t), \quad (2)$$

迁移步:

$$f_{\alpha}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha}\delta_t, t + \delta_t) = f_{\alpha}^*(\mathbf{x}, t). \quad (3)$$

从方程(2)可以看出, 格子Boltzmann方程的碰撞步是完全局部的(只涉及空间位置 $\mathbf{x}$ 处的计算), 而方程(3)则表明迁移步是完全线性的. 碰撞与迁移(collision-streaming)的“粒子”特性是格子Boltzmann方法非常重要的特性之一, 它的许多优势皆来源于这一特性.

Qian等人^[6]于1992年提出的DdQm系列离散速度模型及相应的平衡态分布函数至今仍被广泛采用, 其中D是空间维数(d), Q代表离散速度的个数(m). 以二维九速(D2Q9)离散速度模型为例, 其离散速度 $\mathbf{e}_{\alpha}$ 定义为

$$\mathbf{e}_{\alpha} = \begin{cases} (0, 0), & \alpha = 0, \\ c(\cos[(\alpha - 1)\pi/2], \sin[(\alpha - 1)\pi/2]), & \alpha = 1 \sim 4, \\ \sqrt{2}c(\cos[(2\alpha - 9)\pi/4], \sin[(2\alpha - 9)\pi/4]), & \alpha = 5 \sim 8, \end{cases} \quad (4)$$

其中 $c = \delta_x / \delta_t$ 是格子常数, δ_x 是网格步长, 相应的平衡态密度分布函数为

$$f_{\alpha}^{\text{eq}} = \rho \omega_{\alpha} \left[1 + \frac{\mathbf{e}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_{\alpha} \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{|\mathbf{u}|^2}{2c_s^2} \right], \quad (5)$$

其中 ω_{α} 为权系数, $c_s = c / \sqrt{3}$ 为格子声速. 宏观密度和速度计算如下:

$$\rho = \sum_{\alpha} f_{\alpha}, \quad \rho \mathbf{u} = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} + \frac{\delta_t}{2} \mathbf{F}, \quad (6)$$

其中 $\mathbf{F}$ 为总的作用力, 包括流体内部相互作用力、重力等. 流体的压力和黏度分别由 $p = \rho c_s^2$, $\mu = \rho c_s^2 (\tau - 0.5) \delta_t$ 给出. 对许多初学者来说, 格子Boltzmann方法最显著的优势就在于其“门槛”较低, 掌握上述知识就可以进行格子Boltzmann方法入门程序的阅读与编写.

1.2 几类主要的多相格子Boltzmann模型

按照建模的理论及相分离的机制, 现有多相格子Boltzmann模型主要可以分为四类^[1~3], 根据提出时间的先后顺序, 分别是颜色梯度模型、伪势模型、自由

能模型和相场模型。格子Boltzmann方法中第一个多相模型是由Gunstensen等人^[14]于1991年提出的,他们用不同颜色的粒子分布函数来区分不同相态的流体,相与相之间的相互作用通过颜色梯度来实现,并根据颜色梯度来调整粒子的运动趋势,从而实现流体的分离或混合。在Gunstensen等人^[14]的基础上,Grunau等人^[15]建立了密度比与黏度比可调的颜色梯度模型。早期的颜色梯度模型在重新标色(recoloring)时需要求解一个极大化问题,导致计算量较大。为了克服这一缺陷,受d'Ortona等人^[16]研究工作的启发,Latva-Kokko和Rothman^[17]提出了一个公式化的分离算法来进行重新标色:

$$f_a^{R,+} = \frac{\rho_R}{\rho} f_a^* + \beta \frac{\rho_R \rho_B}{\rho^2} \cos(\varphi_a) \quad (7)$$

$$\sum_k f_a^{k,\text{eq}}(\rho_k, \mathbf{u} = 0),$$

$$f_a^{B,+} = \frac{\rho_B}{\rho} f_a^* - \beta \frac{\rho_R \rho_B}{\rho^2} \cos(\varphi_a) \quad (8)$$

$$\sum_k f_a^{k,\text{eq}}(\rho_k, \mathbf{u} = 0),$$

其中“R”和“B”分别代表红色流体和蓝色流体, φ_a 为颜色梯度与离散速度 $\mathbf{e}_a$ 之间的夹角。这一算法显著提高了颜色梯度模型的计算效率,得到了广泛的应用。

在颜色梯度模型中,表面张力通常由一个扰动算子来描述。Reis和Phillips^[18]发现早期颜色梯度模型中的扰动算子并不能恢复正确的表面张力项,继而提出了一个新的扰动算子:

$$(\Omega_a^k)^{(2)} = \frac{A_k}{2} |\nabla \rho^N| \left[\omega_a \frac{(\mathbf{e}_a \cdot \nabla \rho^N)^2}{|\nabla \rho^N|^2} - B_a \right], \quad (9)$$

其中 $\nabla \rho^N$ 为颜色梯度。随后,Liu等人^[19]将该扰动算子拓展到了三维模型。除了通过扰动算子来实施表面张力外,也有一些学者通过外力项将表面张力效应纳入到颜色梯度模型当中。值得注意的是,采用外力项纳入表面张力时将改变宏观速度的计算方式。此外,对于密度比可调的颜色梯度模型,由于状态方程是通过平衡态密度分布函数来进行调整,破坏了模型的伽利略不变性,导致其所恢复的宏观方程存在着与密度梯度相关的误差项。最近,基于Li等人^[20]的研究工作,Ba等人^[21]和Wen等人^[22]分别提出了改进的二维和三维颜色梯度模型,主要思路是针对标准格子6阶张量的各向异性进行修正,添加了相应的修正项,有效地消除了原有模型的误差项,恢复了颜色梯度模型的伽利略不变性。

伪势模型最早是由Shan和Chen^[23,24]于1993年提出的,他们利用一种伪势(pseudo-potential)来反映相与相之间的相互作用。与颜色梯度模型相比,伪势模型能够更直接地描述粒子之间的相互作用。随后,Shan和Doolen^[25]对伪势模型进行了改进,他们对平衡态密度分布函数中的速度及混合流体的速度进行了重新定义。Hou等人^[26]对颜色模型和伪势模型进行了研究,发现两种模型在相界面附近都会产生虚假速度。2006年,Shan^[27]发现伪势模型所产生的虚假速度与计算伪势相互作用力的格式有关,通过采用更高阶的各向同性格式,可以明显降低伪势模型的虚假速度。早期的伪势模型通常采用指数形式的伪势,这是因为根据伪势模型的力学稳定性条件,取指数形式的伪势时,该模型与热力学相关理论一致。近年来,一种平方根形式^[28-30]的伪势在伪势模型的研究与应用中受到了广泛的关注:

$$\psi(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{2(p_{\text{EOS}} - \rho c_s^2)}{G c^2}}, \quad (10)$$

其中 $\psi(\mathbf{x})$ 为伪势, p_{EOS} 是状态方程, G 是相互作用强度。对于平方根形式的伪势, G 主要用来确保根号里面的项非负^[30]。这一形式的伪势可以非常方便地将热力学中一些常用的状态方程纳入到伪势模型当中,如范德瓦耳斯状态方程、Peng-Robinson状态方程等,但它会带来热力学不一致性的问题,即采用平方根形式的伪势时,伪势模型所给出的气液共存密度通常与热力学中Maxwell等面积法则的结果不一致^[31]。

为了解决这一问题,Li等人^[32]提出了通过调整伪势模型的力学稳定性条件来实现热力学一致性的方法。根据这一方法,Li等人^[32]构造了新的外力格式,通过外力格式来调整伪势模型的力学稳定性条件,继而实现伪势模型的热力学一致性。在此基础上,他们构造了多松弛碰撞算子下的新伪势模型^[33],实现了伪势多相格子Boltzmann方法对大密度比、高雷诺数多相流动的模拟。目前,该方法已在伪势模型的研究与应用中得到了较为广泛的采用。伪势模型的另一缺陷在于它的表面张力依赖于气液密度比,不能自由调节。2007年,Sbragaglia等人^[34]提出了一种多范围(multi-range)伪势相互作用力,引入了两个可调参数,可以实现表面张力的调节,但调节范围有限,且表面张力在很大程度上仍然依赖于密度比。2013年,Li和Luo^[35]指出,调节伪势模型的表面张力不能影响它的力学稳定性条件,他们提出了一种新的调节方法,实现了较大范围的调节,并确

保调节表面张力时不改变伪势模型的密度比。

自由能模型是由Swift等人^[36,37]于1995年左右提出的,他们从自由能泛函出发,构造了与热力学理论一致的多相格子Boltzmann模型。其基本思路是根据自由能泛函来设计模型的平衡态密度分布函数,通过引入一个热力学压力张量来实现相分离及模拟表面张力效应,具体形式如下:

$$\mathbf{P} = \left(p_{\text{EOS}} - k\rho \nabla^2 \rho - \frac{k}{2} |\nabla \rho|^2 \right) \mathbf{I} + k \nabla \rho \nabla \rho, \quad (11)$$

其中 $\mathbf{I}$ 是二阶单位张量, k 是与表面张力有关的参数。虽然自由能模型能够与热力学理论取得一致,但是当相界面附近存在较大的密度梯度时,自由能模型不能满足伽利略不变性,会导致一些非物理的现象。为此,Swift等人^[36,37]对自由能模型的平衡态分布函数的二阶速度矩进行了修正,不过只能部分克服非伽利略不变性所带来的影响。Inamuro等人^[38]基于渐进分析方法,通过采用合适的平衡态分布函数,提出了一个能够满足伽利略不变性的自由能模型。此外,一些学者通过外力项^[39]将热力学压力张量引入到自由能模型中,从而避免了改变平衡态分布函数所引发的非伽利略不变性。需要指出的是,自由能模型本质上是一种自顶向下的模型,在具体的数值实施过程中,压力张量中的一阶导数、二阶导数需要进行相应的离散。这些离散,一方面增加了模型的复杂度;另一方面,相关的离散格式在大密度比时通常稳定性较差,限制了模型所能应用的密度比范围。近年来,一些学者提出了化学势形式^[40,41]的自由能模型,能够在一定程度上减少相关导数项的离散。事实上,尽管伪势模型是采用伪势相互作用力来描述相与相之间的相互作用,但可以证明的是,伪势相互作用力所对应的也是一个压力张量。不同的是,伪势模型并不是通过对压力张量(或压力张量的散度 $\nabla \cdot \mathbf{P}$)逐项进行离散,而是自底向上通过一个简单的伪势相互作用力来反映相对复杂的压力张量,从而实现相对分离和表面张力效应的描述。

采用上述三类多相格子Boltzmann模型时,气液相界面可以自动产生、演化与迁移,无须求解一个特定的界面捕捉方程,而第四类模型即相场模型则需要求解这样一个方程(通常是Cahn-Hilliard方程或Allen-Cahn方程)。1999年,He等人^[42]提出了一个不可压缩的多相格子Boltzmann模型,他们引入了一个指标函数(index function)来跟踪界面的位置,该指标函数所对应的控制方程是一个类Cahn-Hilliard方程,他们的模型也

因此被视为第一个相场多相格子Boltzmann模型。在He等人^[42]的基础上, Lee和Lin^[43]提出了一个三段式的求解格式用以强化He等人模型的数值稳定性,将液气密度比从10的量级提高到了1000的量级。2006年, Zheng等人^[44]指出,此前的相场格子Boltzmann模型并不能恢复正确的Cahn-Hilliard方程,为此他们设计了一个新的模型,该模型可以准确地恢复Cahn-Hilliard方程,但该模型随后被证明^[45]只适用于密度匹配的二元流体,并不适用于具有明显密度差的两相流动。2012年, Li等人^[46]发现,已有的相场模型所恢复的动量方程中存在一个附加界面力,当雷诺数较大时,该附加界面力会引入较大的数值误差。此外,值得注意的是,相场多相格子Boltzmann模型通常难以同时满足不可压缩条件($\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$)和局部质量守恒。满足局部质量守恒而不满足不可压缩条件的相场模型通常被称为准不可压缩(quasi-incompressible)模型。近年来,越来越多的相场模型采用Allen-Cahn方程^[47]作为界面捕捉方程,相关研究表明,该方程在相场格子Boltzmann模型中的表现优于Cahn-Hilliard方程^[48]。此外, Chai等人^[49]研究了局部及非局部Allen-Cahn方程的质量守恒特性。需要指出的是,相场理论并不仅限于气液两相流动,它在固液相变领域也有较广泛的应用^[50]。

以上四类多相格子Boltzmann模型有其各自的特色、优势与不足。相对来说,伪势模型是最简单且应用最广泛的多相格子Boltzmann模型,但受到热力学不一致性、表面张力不能自由调节等问题的困扰;颜色梯度模型虚假速度较小,但目前无法引入热力学中的状态方程,仅适用于不含相变的多相流动;自由能模型可以自动满足热力学一致性,但需要离散较多的空间导数项,使得模型较复杂且数值稳定性较差;相场模型近年来取得了一些进展,但其理论与机制并不依赖于格子Boltzmann方法。伪势模型与颜色梯度模型则利用了格子Boltzmann方法的介观特性,形成了较为独特的优势。本文主要聚焦于多相格子Boltzmann方法在相变传热中的应用,此类应用目前主要是基于伪势模型开展的,因此下一节我们将着重评述伪势模型的相关研究进展。

2 伪势多相格子Boltzmann模型的研究进展

2.1 伪势模型简介

1993年, Shan和Chen^[23,24]提出一种基于伪势的相

互作用力来描述流体内部的相互作用, 具体形式如下:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = -G \psi(\mathbf{x}) \sum_{\alpha} w_{\alpha} \psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha} \delta_t) \mathbf{e}_{\alpha}, \quad (12)$$

其中 $\psi(\mathbf{x})$ 是空间位置 $\mathbf{x}$ 处的伪势, $\psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha} \delta_t)$ 是 $\mathbf{e}_{\alpha}$ 方向相邻格点的伪势, G 是相互作用强度, w_{α} 是权系数. 对D2Q9离散速度模型, $w_{1-4} = 1/3$, $w_{5-8} = 1/12$ ^[27]. 在早期的伪势模型中, 伪势相互作用力是通过改变平衡态分布函数中速度的定义嵌入到格子Boltzmann方程中:

$$\begin{aligned} f_{\alpha}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha} \delta_t, t + \delta_t) - f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \\ = -\frac{1}{\tau} [f_{\alpha} - f_{\alpha}^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}^{\text{eq}})], \end{aligned} \quad (13)$$

其中速度 $\mathbf{u}^{\text{eq}} = (\sum_{\alpha} f_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} + \tau \delta_t \mathbf{F}) / \rho$. 同时, 真实的流体速度定义如下^[25]:

$$\rho \mathbf{v} = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} + \frac{\delta_t}{2} \mathbf{F}. \quad (14)$$

这一作用力格式通常被称为Shan-Chen或Shan-Doolen格式, 该格式已被证明会在宏观动量方程中引入误差项, 且误差项与松弛因子 τ 有关, 导致早期的伪势模型所给出的气液共存密度依赖于运动黏性系数.

2009年, 俄国学者Kupershtokh等人^[51]针对伪势模型提出了一个新的作用力格式, 并命名为“精确差分(exact difference method, EDM)”格式, 该格式采用如下形式的格子Boltzmann方程:

$$\begin{aligned} f_{\alpha}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha} \delta_t, t + \delta_t) - f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \\ = -\frac{1}{\tau} [f_{\alpha} - f_{\alpha}^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u})] + f_{\alpha}^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}) \\ - f_{\alpha}^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}), \end{aligned} \quad (15)$$

其中 $\mathbf{u} = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} / \rho$, $\Delta \mathbf{u} = \mathbf{F} \delta_t / \rho$. 真实流体速度的定义与Shan-Chen格式的定义一致. 通过Chapman-Enskog多尺度展开分析, 可以发现该格式在Navier-Stokes层次所恢复的动量方程形式如下^[52]:

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \Pi \\ + \mathbf{F} - \delta_t^2 \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{F} \mathbf{F}}{4\rho} \right), \end{aligned} \quad (16)$$

其中 Π 为黏性应力张量. 与Shan-Chen格式不同, 该格式的误差项(方程(16)右边最后一项)与松弛因子 τ 无关.

实际上, 对于指数形式的伪势, 即 $\psi(\mathbf{x}) = \psi_0 \exp[-\rho_0 / \rho(\mathbf{x})]$, 许多研究均已表明, 无论是Shan-Chen格式还是EDM格式^[52], 都会导致气液共存密度偏离Maxwell等面积法则所给出的结果. 这是因为指数形式

的伪势所对应的力学稳定性条件是在没有任何误差项的情况下成立, 因此采用指数形式的伪势时应当使用Guo等人^[53]或Wagner^[54]提出的作用力格式.

2.2 伪势模型的力学稳定性条件与热力学一致性

伪势模型的力学稳定性条件可写成如下形式(具体的推导过程可参考文献^[33]的附录):

$$\int_{\rho_g}^{\rho_l} \left(p_b - \rho c_s^2 - \frac{Gc^2}{2} \psi^2 \right) \frac{\psi'}{\psi} d\rho = 0, \quad (17)$$

其中 ρ_l 和 ρ_g 分别为液相密度和气相密度, ψ' 是伪势对密度的一阶导数, 即 $\psi' = d\psi / d\rho$. 当 ψ 取指数形式时, 即 $\psi(\mathbf{x}) = \psi_0 \exp[-\rho_0 / \rho(\mathbf{x})]$, 可得 $\psi' = \rho_0 \psi / \rho^2$. 相应地, 方程(17)可转换为

$$\int_{\rho_g}^{\rho_l} \left(p_b - \rho c_s^2 - \frac{Gc^2}{2} \psi^2 \right) \frac{1}{\rho^2} d\rho = 0. \quad (18)$$

可以证明方程(18)与热力学中的Maxwell等面积法则是一致的, 但此时伪势模型的状态方程固定为

$$\begin{aligned} p_{\text{EOS}} &= \rho c_s^2 + \frac{Gc^2}{2} \psi^2 \\ &= \rho c_s^2 + \frac{Gc^2}{2} \psi_0^2 \exp[-2\rho_0 / \rho(\mathbf{x})], \end{aligned} \quad (19)$$

无法引入热力学中的实际气体状态方程, 如范德瓦耳斯状态方程、Carnahan-Starling状态方程、Peng-Robinson状态方程等. 为了解决这一问题, 一些学者^[28-30]提出了平方根形式的伪势, 即方程(10), 且相关研究表明, 采用平方根形式的伪势可以提高伪势模型所能适用的最大密度比, 但也带来了热力学不一致性的问题, 即 $\psi' / \psi \sim 1 / \rho^2$ 的关系不再成立, 导致伪势模型的气液共存密度与Maxwell等面积法则的结果不一致.

2012年, Li等人^[32]提出在采用平方根形式的伪势时, 可以通过调整伪势模型的力学稳定性条件来实现它的热力学一致性, 即将方程(17)调整为

$$\int_{\rho_g}^{\rho_l} \left(p_b - \rho c_s^2 - \frac{Gc^2}{2} \psi^2 \right) \frac{\psi'}{\psi^{1+\varepsilon}} d\rho = 0, \quad (20)$$

其中 ε 为大于零的常数. 以Carnahan-Starling状态方程为例, Li等人^[32]对比了方程(20)的解析解和Maxwell等面积法则的结果, 发现在区间 $\varepsilon \in [1, 2]$ 存在一个 ε 的值($\varepsilon \approx 1.7$), 使得方程(20)所给出的气液共存密度与Max-

well等面积法则的结果基本一致. 基于此, 他们提出了一个新的作用力格式来调整伪势模型的力学稳定性条件^[32].

$$F_\alpha(\mathbf{x}, t) = \omega_\alpha \delta_t \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left[\frac{\mathbf{F} \cdot \mathbf{e}_\alpha}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{v}_{\text{new}} \mathbf{F} + \mathbf{F} \mathbf{v}_{\text{new}}) : (\mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha - c_s^2 \mathbf{I})}{2c_s^4} \right] \quad (21)$$

其中 $\mathbf{v}_{\text{new}} = \mathbf{v} + \sigma \mathbf{F} / [(\tau - 0.5) \delta_t \psi^2]$, 常数 σ 用来调节力学稳定性条件即方程(20)中的常数 ε , 且 $\varepsilon = -16G\sigma$.

在此基础上, Li等人^[33]构造了多松弛碰撞算子下的新伪势模型, 该模型采用如下形式的矩空间作用力项:

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ 6\mathbf{F} \cdot \mathbf{v} + \frac{12\sigma|\mathbf{F}|^2}{\psi^2 \delta_t (\tau_e - 0.5)} \\ -6\mathbf{F} \cdot \mathbf{v} - \frac{12\sigma|\mathbf{F}|^2}{\psi^2 \delta_t (\tau_s - 0.5)} \\ F_x \\ -F_x \\ F_y \\ -F_y \\ 2(v_x F_x - v_y F_y) \\ (v_x F_y + v_y F_x) \end{pmatrix}, \quad (22)$$

其中 $|\mathbf{F}|^2 = (F_x^2 + F_y^2)$, 流体速度 $\mathbf{v}$ 由方程(14)定义. 图1为该模型在不同松弛因子下的气液共存密度与Maxwell等面积法则给出结果的对比. 基于多松弛伪势模型, Li等人^[33]实现了伪势多相格子Boltzmann方法对大密度

比、高雷诺数多相流动的数值模拟. 随后, Zhang等人^[55]、Xu等人^[56]分别基于D3Q19、D3Q15离散速度模型将Li等人^[33]的模型拓展至三维.

2.3 伪势模型表面张力的调节

对于平直气液界面, 可以导出如下形式的伪势模型表面张力^[3]:

$$\gamma = -\frac{Gc^4}{6} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{d\psi}{dn} \right) d\psi \\ = -\frac{Gc^4}{6} \int_{\rho_g}^{\rho_l} \psi'^2 \left(\frac{d\rho}{dn} \right) d\rho, \quad (23)$$

其中 n 为气液界面法线方向. 从形式上看, 伪势模型表面张力的大小可以通过相互作用强度 G 来进行调节, 但采用指数形式的伪势时, 相互作用强度 G 影响气液密度比, 于是改变表面张力的大小会同时改变密度比. 相应地, 采用平方根形式的伪势时, ψ'^2 正比于 $1/G$, 因而改变 G 的大小对方程(23)没有影响. 为了解决这一问题, 意大利学者Sbragaglia等人^[34]提出了一种多范围(multi-range)伪势相互作用力, 形式如下:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = -\psi(\mathbf{x}) \sum_\alpha w_\alpha \left[G_1 \psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta_t) \right. \\ \left. + G_2 \psi(\mathbf{x} + 2\mathbf{e}_\alpha \delta_t) \right] \mathbf{e}_\alpha, \quad (24)$$

其中 G_1 和 G_2 为可调参数. 当 $G_1 = G$ 、 $G_2 = 0$ 时, 方程(24)退化为方程(12). Sbragaglia等人^[34]认为方程(24)对应如下形式的压力张量:

$$\mathbf{P} = \left[\rho c_s^2 + \frac{A_1}{2} c^2 \psi^2 + A_2 \left(\frac{c^4}{12} |\nabla \psi|^2 + \frac{c^4}{6} \psi \nabla^2 \psi \right) \right] \mathbf{I} - \frac{A_2 c^4}{6} \nabla \psi \nabla \psi, \quad (25)$$

图1 (网络版彩色)伪势格子Boltzmann模型不同作用力格式的热力学一致性对比. (a) $\tau_r=0.6$; (b) $\tau_r=0.8$ ^[33]

Figure 1 (Color online) Comparison of thermodynamic consistency between different forcing schemes of the pseudopotential lattice Boltzmann model. (a) $\tau_r=0.6$; (b) $\tau_r=0.8$ ^[33]

其中 $A_1=G_1+2G_2$, $A_2=G_1+8G_2$. Huang等人^[31]对多范围伪势相互作用力进行了研究, 他们发现, 虽然可以通过调节 A_2/A_1 的大小对表面张力进行调节, 但依然会改变相应的气液密度比(表1).

2013年, Li和Luo^[35]指出, 多范围伪势相互作用力虽然引入了两个可调参数, 但其对表面张力的调节会改变伪势模型的力学稳定性条件, 不能使表面张力独立于气液密度比. 为此, 他们提出了一种新的调节方法, 即在矩空间的碰撞步添加一个源项:

$$\mathbf{m}^* = \mathbf{m} - A(\mathbf{m} - \mathbf{m}^{\text{eq}}) + \delta_t \left(\mathbf{I} - \frac{A}{2} \right) \mathbf{S} + \delta_t \mathbf{C}, \quad (26)$$

其中 $\mathbf{m}$ 为分布函数相应的矩, $\mathbf{m}^{\text{eq}}$ 为平衡态矩函数, $\mathbf{m}^*$ 为碰撞后的矩, A 与松弛因子有关, $\mathbf{I}$ 是单位二阶张量, $\mathbf{S}$ 是作用力项, $\mathbf{C}$ 是源项, 其具体形式如下:

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1.5\tau_e^{-1}(Q_{xx} + Q_{yy}) \\ -1.5\tau_s^{-1}(Q_{xx} + Q_{yy}) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\tau_v^{-1}(Q_{xx} - Q_{yy}) \\ -\tau_v^{-1}Q_{xy} \end{pmatrix}, \quad (27)$$

其中 Q_{xx} , Q_{yy} , Q_{xy} 通过下式计算:

$$\mathbf{Q} = \kappa \frac{G}{2} \psi(\mathbf{x}) \sum_{\alpha=1}^8 w_{\alpha} [\psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha} \delta_t) - \psi(\mathbf{x})] \mathbf{e}_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha}, \quad (28)$$

其中参数 κ 用来调节表面张力的大小. 基于方程(27), Li和Luo^[35]实现了对伪势模型表面张力较大范围的调节, 并确保调节表面张力时气液密度比基本不变. 目前, 该方法已被Xu等人^[56]和Ammar等人^[57]分别基于D3Q15和D3Q19离散速度模型拓展至三维.

2.4 伪势模型的接触角格式

对于气液两相流的模拟, 当存在气液界面与固体表面的接触时, 需要引入接触角格式或算法来实施相应的湿润性边界. 伪势格子Boltzmann方法中最早的接触角格式是由Martys和Chen^[58]于1996年提出的, 他们提出用一种流固作用力来实施接触角:

$$\mathbf{F}_{\text{ads}} = -G_w \rho(\mathbf{x}) \sum_{\alpha} w_{\alpha} s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha} \delta_t) \mathbf{e}_{\alpha}, \quad (29)$$

表1 多范围伪势相互作用力对表面张力的调节^[31]

Table 1 Adjustment of surface tension using the multi-range pseudo-potential interaction force^[31]

T/T_c	$\sqrt{A_2/A_1}$	$\vartheta (\times 10^{-3})$	ρ_l/ρ_g
0.85	1.0	2.683	0.2768/0.02250
0.85	1.458	4.199	0.2785/0.02587
0.85	1.904	5.461	0.2795/0.02775
0.775	1.0	5.661	0.3175/0.003745
0.775	1.458	7.939	0.3191/0.008159
0.775	1.904	10.57	0.3201/0.010520

其中, $s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha} \delta_t)$ 是一个开关函数, 对固体区域取1, 对流体区域取0; 系数 G_w 用来调节接触角的大小. 方程(29)中求和符号前的变量为密度 $\rho(\mathbf{x})$, 也有一些学者^[59,60]用伪势取代密度, 继而得到如下形式的流固作用力格式:

$$\mathbf{F}_{\text{ads}} = -G_w \psi(\mathbf{x}) \sum_{\alpha} w_{\alpha} s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha} \delta_t) \mathbf{e}_{\alpha}. \quad (30)$$

流固作用力格式的主要缺陷在于其引起的虚假速度较大.

伪势模型中另一种比较常用的接触角格式是Benzi等人^[61]于2006年提出的虚拟密度格式. 该格式针对固体区域设置一个虚拟密度 ρ_w (其值为常数), 可以在流体边界节点处直接应用伪势相互作用力, 即方程(12). 虚拟密度格式的实施非常简单, 且虚假速度较小, 在处理复杂结构表面、运动固体表面的接触角时具有明显优势, 但该格式会在固体表面附近形成一层比较厚的非物理的密度层(图2), 影响数值模拟的准确性.

此外, Ding和Spelt^[63]针对相场模型所提出的几何接触角格式也被应用到伪势模型. 对于平直表面, 几何接触角格式在固体表面下布置一层虚拟层, 并采用下式来计算虚拟层的密度:

$$\rho_{i,0} = \rho_{i,2} + \tan\left(\frac{\pi}{2} - \theta_a\right) |\rho_{i+1,1} - \rho_{i-1,1}|, \quad (31)$$

其中下标 i 表征 x 方向的坐标, 下标0表征固体表面下的虚拟层. 该格式的优势在于可以通过 θ_a 预先给定接触角的大小, 且精度较高(数值模拟得到的接触角与给定的接触角通常偏差不大). 2015年, Liu和Ding^[64]将几何接触角格式拓展到了二维曲线表面, 但相应的数值实施比平直表面的格式即方程(31)要复杂得多.

总的来说, 流固作用力格式与虚拟密度格式的实施比较简单, 但前者会引入较大的虚假速度, 而后者则

图2 (网络版彩色)曲线边界上虚拟密度格式所给出的接触角. $\theta \approx 31^\circ$ (a), 65° (b), 121° (c)^[62]

Figure 2 (Color online) Contact angles obtained by the virtual-density scheme on a curved solid surface. $\theta \approx 31^\circ$ (a), 65° (b), 121° (c)^[62]

会在固体表面附近形成一层非物理的密度层;几何接触角格式虽然虚假速度较小,也不会形成非物理的密度层,但对于曲线表面等复杂表面来说实施非常复杂,实用性较差.最近, Li等人^[62]提出了一种新的虚拟密度格式,该格式需要计算出固体点附近的平均流体密度,即

$$\rho_{\text{ave}}(\mathbf{x}) = \frac{\sum_{\alpha} w_{\alpha} \rho(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha} \delta_t) s_w(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha} \delta_t)}{\sum_{\alpha} w_{\alpha} s_w(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha} \delta_t)}, \quad (32)$$

其中, $\mathbf{x}$ 为固体区域的虚拟点,它至少有一个相邻点在流体区域; $s_w(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha} \delta_t)$ 为开关函数,对流体区域取1,固体区域取0.取 $\rho_w(\mathbf{x}) = \rho_{\text{ave}}(\mathbf{x})$ 时,相应的接触角约为 90° ,因此 Li等人^[62]采用如下分段形式的接触角格式来增大或减小伪势模型的接触角:

$$\rho_w(\mathbf{x}) = \begin{cases} \varphi \rho_{\text{ave}}(\mathbf{x}), & \varphi \geq 1, \\ \text{for decreasing } \theta, \\ \rho_{\text{ave}}(\mathbf{x}) - \Delta\rho, & \Delta\rho \geq 0, \\ \text{for increasing } \theta, \end{cases} \quad (33)$$

其中 φ 和 $\Delta\rho$ 为常数,分段选取的依据详见文献^[62].当 $\varphi=1$ 或 $\Delta\rho=0$ 时, 方程(33)退化为 $\rho_w(\mathbf{x}) = \rho_{\text{ave}}(\mathbf{x})$. 同时,该格式设置了一个限制器,即 $\rho_g \leq \rho_w(\mathbf{x}) \leq \rho_l$. 当方程(33)的计算结果大于 ρ_l , 直接取 $\rho_w(\mathbf{x}) = \rho_l$; 类似地,当方程(33)的计算结果小于 ρ_g , 直接取 $\rho_w(\mathbf{x}) = \rho_g$. 与流固作用力格式相比,该格式的虚假速度要小得多,同时,它克服了原有虚拟密度格式的缺陷,且数值实施仍然非常简单,通用性较好.图3为该格式与原有虚拟密度格式对泊肃叶流动的模拟结果的对比.

3 伪势多相格子Boltzmann模型在相变传热中的应用

相变传热以其高热流密度和小温差等特点和优势,成为传统工业与航空航天、电子信息、生物医学以及新能源等领域中优选的热质传递过程.与单相对流传热相比,相变对流传热更加复杂.以沸腾传热为例,虽然该现象在生活及工业生产中非常常见,但由于沸腾

图3 (网络版彩色)原有虚拟密度(a)和新虚拟密度(b)格式对泊肃叶流动的模拟结果的对比^[62]

Figure 3 (Color online) Comparison of the velocity profiles of Poiseuille flow obtained by the original (a) and improved (b) virtual-density schemes^[62]

过程包含大量相互影响的物理现象,如气泡的成核、生长与脱离,气泡的聚并与破碎,气液界面的生成与演化,界面上的蒸发与凝结等,该过程具有非常复杂的多相相互作用、非平衡、多尺度等特性。尽管众多学者对沸腾传热过程进行了深入细致的研究,但由于实验研究所得到的结论在很大程度上只在有限的参数范围内有效,而传统数值模拟方法对沸腾的模拟往往基于大量假设并人为设置种子气泡,因此许多机理仍未得到很好的解释。

近年来,多相格子Boltzmann方法特别是伪势模型被许多学者应用到相变传热研究中。与传统数值模拟方法如VOF、Level Set等界面跟踪或界面捕捉方法相比,伪势多相格子Boltzmann模型通过描述相与相之间的相互作用使得相界面可以自动产生、演化和迁移,无须采用界面跟踪或界面捕捉技术。此外,在沸腾或冷凝的模拟中,伪势模型可以自动成核,无须人为布置种子气泡或种子液滴,这些特性使得伪势模型对相变传热的研究具有一定的优势与特色。本文接下来对伪势多相格子Boltzmann模型在沸腾及冷凝传热中的应用分别进行介绍和评述。

3.1 沸腾传热中的应用

在池沸腾中,沸腾分为三个阶段:核沸腾、过渡沸腾与膜态沸腾。其中,核沸腾是沸腾传热中最有效的传热方式,膜态沸腾时由于传热表面被气膜完全覆盖,传热会急剧恶化。在沸腾传热研究领域,Zhang和Chen^[65]率先实现了格子Boltzmann方法对核沸腾过程的模拟,他们选取了一个矩形的计算区域,将上下边界设置为无滑移固体壁面,左右边界设置为周期边界,对Rayleigh-Benard热对流所引起的核沸腾进行了数值模拟研究。初始时刻,流场施加1%的随机密度扰动,同时,为了增强气泡的形成,在靠近底部加热面的第一层网格施加了一个小的温度扰动。小气泡在高温底部生成,并逐渐结合为大气泡上升,如图4所示。在Zhang和Chen^[65]的模拟中,从高温底部形成了两股气泡流,小气泡从底部脱离,由于其运动速度比大气泡快,因此会不断发生气泡的碰撞与合并现象。

通过采用三维伪势模型对核沸腾过程进行数值模拟研究,Biferale等人^[66]于2012年证明了具有热力学压力张量的伪势格子Boltzmann模型能够得到与克劳修斯-克拉珀龙方程一致的潜热定义。他们的模拟结果表明,核沸腾过程中会出现Non-Oberbeck-Boussinesq效

图4 核沸腾过程的格子Boltzmann模拟。(a) $t=39.5$; (b) $t=41.5$; (c) $t=43.5$; (d) $t=45.5$ ^[65]

Figure 4 Snapshots of lattice Boltzmann simulations of a nucleate boiling process. (a) $t=39.5$; (b) $t=41.5$; (c) $t=43.5$; (d) $t=45.5$ ^[65]

应,相较于未发生沸腾现象时,核沸腾的传热效率与传热波动更强。此外,在沸腾过程中不断产生的上浮气泡会影响速度场与温度场的小尺度特性。

Gong和Cheng^[67]采用伪势模型对恒壁温与恒热流边界条件下的沸腾成核问题进行二维数值模拟研究,他们分析了重力、壁面接触角与过热度对气泡脱离直径及气泡脱离频率的影响。研究结果表明,重力与壁面过热度对气泡的脱离直径与脱离频率影响较大,而壁面接触角只对气泡的脱离频率有一定的影响,对气泡的脱离直径则影响很小。通过对移动接触线的研究与分析,他们还发现,沸腾时气-液-固三相接触线呈现出周期性的变化规律。随后,Gong和Cheng^[68]对复合湿润性平直表面上的池沸腾过程进行了数值模拟研究,结果表明,在光滑的亲水表面上布置疏水点,能够有效地促进气泡成核,进而强化沸腾换热。

2015年, Li等人^[69]基于伪势模型成功实现了对池沸腾的三个沸腾阶段及沸腾曲线的模拟. 在他们的模拟结果中, 气泡的成核、生长、脱离与结合均得到了完整的呈现, 如图5所示. 通过分析相关的数值模拟结果, 他们发现伪势多相模型能够很好地捕捉到沸腾传热的一些基本特征, 如过渡沸腾阶段瞬态热流密度的剧烈波动、最大沸腾传热系数所对应的壁面过热度较临界热流密度所对应的过热度低等特征. 此外, Li等人^[69]还研究了传热表面湿润性对沸腾传热的影响. 结果表明, 临界热流密度随着接触角的增大而减小, 并且增大接触角可以降低起沸时所需的壁面过热度.

竖直表面, 尤其是竖直面内的沸腾过程也是沸腾传热研究的重点方向之一. 2015年, Sun等人^[70]采用多相格子Boltzmann方法成功模拟了竖直表面上的核沸腾与过渡沸腾, 通过对气泡在高温竖直表面上的生长与脱离过程的模拟, 研究了竖直表面上沸腾传热的机理. 2017年, Sun等人^[71]采用伪势模型对竖直面内的流动沸腾进行了数值模拟研究. 他们通过在竖直面壁上布置一定数量的高热流密度点来实现沸腾, 底部边界采用速度入口, 顶部边界采用出流边界条件; 通过设置不同的参数, 对不同的流型进行了模拟, 分析了热流密度、雷诺数、流道宽度、成核点宽度等因素对流动沸腾的影响, 特别是对偏离核沸腾状态形成的影响. 研究结果表明, 通过增加雷诺数、增加管宽等措施, 可以避免偏离核沸腾状态的出现. 随后, Sun等人^[72]研究了传热表面亲疏水性对流动沸腾的影响, 通过将动态接触角与静态接触角的模拟结果进行对比, 发现动态接触角中的接触角迟滞现象对沸腾传热有较大的影响.

基于伪势模型, Markus和Hazi^[73]率先对空腔成核的问题进行了数值模拟研究, 但他们并未考虑固体区域与流体区域共轭传热的问题. 2017年, Mu等人^[74]将共轭传热纳入到伪势模型当中, 对粗糙表面上空腔成核的过程进行了数值模拟研究. 通过研究不同形状的空腔, 他们发现, 矩形空腔中的气泡在矩形空腔底部的角点产生, 这一点与其他形状空腔气泡在空腔底部中心成核不同. 此外, 他们发现, 在传热表面上布置空腔虽然能够促进气泡成核, 但是由于气体长时间占据空腔内部, 最终会导致加热面的热流密度较低. Zhou等人^[75]也对空腔中的核沸腾过程进行了相关的研究.

Li等人^[76]采用伪势模型对结构化亲疏水复合湿润性表面上的沸腾传热过程进行了研究, 他们发现, 在亲水表面布置顶部疏水的柱台能够有效地促进气泡成核,

图5 (网络版彩色)三个沸腾阶段的格子Boltzmann模拟. (a) 核沸腾; (b) 过渡沸腾; (c) 膜态沸腾^[69]

Figure 5 (Color online) Snapshots of lattice Boltzmann simulations of three boiling stages. (a) Nucleate boiling; (b) transition boiling; (c) film boiling^[69]

降低了起沸所需的壁面过热度. 此外, 柱台顶部疏水区域生成的气泡与柱台底角处成核的气泡会相互影响, 加快底角处气泡的脱离速率, 从而提高沸腾换热效率.

随后, Yu等人^[77]采用三维伪势模型对结构化亲疏水复合湿润性表面上的沸腾传热进行了进一步的研究. 在三维模拟中, 随着柱台宽度的增大, 沸腾传热效率会呈现先升高后降低的趋势, 存在一个最佳宽度(图6), 而且随着传热表面过热度的变化, 最佳宽度也会随之改变.

Ma等人^[78]采用伪势模型对四种不同湿润性布置方式的微柱表面上的沸腾传热过程进行了模拟, 研究了柱台结构与表面湿润性对气泡动力学的影响. 结果表明, 不同润湿性布置的微柱表面气泡成核的位置是由润湿性效应与壁面温度效应的竞争结果决定的, 在四种湿润性布置方式中, 疏水柱顶结合亲水基底的布置方式的传热性能最好. 此外, Ma和Cheng^[79]对三维点阵微柱结构烧干点的特征进行了研究, 发现该结构产生的吸芯效应能够有效地提高沸腾传热的临界热流密度. 最近, Zhang等人^[80]研究了封闭狭窄空间中的液气相变, 发现在充液比为40%左右时传热性能最优.

3.2 冷凝传热中的应用

蒸汽凝结是气液相变, 它是液气相变(蒸发和沸腾)的反过程. 与沸腾过程类似, 冷凝过程亦具有非常复杂的多相相互作用、非平衡、多尺度等特性. 格子Boltzmann方法在冷凝领域的研究起步较晚, 但发展迅速.

图6 (网络版彩色)结构化复合湿润表面上沸腾过程的三维格子Boltzmann模拟。(a) $W=401.u.$ (b) $W=701.u.$ ^[77]

Figure 6 (Color online) Snapshots of 3D lattice Boltzmann simulations of boiling heat transfer on structured surfaces with mixed wettability. (a) $W=401.u.$ (b) $W=701.u.$ ^[77]

2013年, Liu和Cheng^[81]基于伪势模型研究了竖直疏水表面上的液滴冷凝行为, 冷源点上的液滴成核、生长等动力学行为得到了完整的呈现. 此外, 他们研究了冷凝点上的液滴速度、温度和瞬时热流密度, 结果表明, 随着表面接触角的增大, 液滴冷凝周期减小. 随后, Liu和Cheng^[82]研究了竖直表面上的层流膜态冷凝现象. 他们考虑了内部作用力和剪切力, 得到了稳态下的液膜厚度、速度和传热参数, 其结果与经典的解析解吻合较好, 但在高Jakob数和低Prandtl时仍存在偏差. Li和Cheng^[83]研究了带有亲水点的疏水表面从珠状冷凝到膜态冷凝的转变过程, 发现珠状冷凝时三相接触线附近具有最大的热流密度, 而膜状冷凝时更靠近壁面的液层具有更大的热流密度. 此外, 增加过冷度会促使珠状冷凝向膜状冷凝转变, 而增加亲水点间距则会抑制液滴合并.

蒸汽冷凝时, 若存在不凝性气体, 会对凝结过程的传热传质造成影响. Li等人^[84]采用多相多组分伪势模型研究了不凝性气体对冷凝的影响. 他们发现, 在水平表面上, 不凝性气体会在三相接触线附近聚集, 降低热

流密度, 增加成核等待时间, 影响冷凝传热过程, 而在竖直表面上, 不凝性气体会减小液滴的脱离半径, 增加成核和脱离时间段. 此外, 随着重力和接触角减小, 液滴尺寸变大, 且生成周期变长. 随后, Zheng等人^[85]也开展了不凝性气体对液滴冷凝影响的研究, 发现不凝性气体影响传热的关键时期为液滴初始形成的时期, 对充分发展的大液滴则影响有限. 此外, 接触线的动态行为在不凝性气体的聚集效应中起着非常重要的作用, 较小的接触角能够促使不凝性气体离开三相线附近. 然而, 部分实验表明, 不凝性气体的存在能够适当提高带有亲水区域的疏水表面的传热效率, 为此, Shen等人^[86]研究了该过程的具体机理. 他们发现, 在一定的不凝性气体含量下, 存在临界的亲水区域比例. 当亲水区域比例小于临界值时, 液滴成核和早期成长的表面热阻较大, 当亲水区域比例大于临界值时, 珠状冷凝向膜状冷凝的转变过程会提前. 因此, 适当的亲水区域比例能够实现促进冷凝成核率和推迟膜状冷凝时间的平衡, 为存在不凝性气体时提高冷凝表面的传热效率提供了新的思路.

此外, Wu等人^[87]采用伪势模型研究了有限空间内冷凝和沸腾共存的现象, 发现冷凝和沸腾的相互作用主要表现为冷凝液滴掉落并与成长中的气泡接触, 造成气泡的破裂和液面的扰动, 继而影响气泡的运动和脱离, 如图7所示. 此外, 他们发现, 亲水表面具有更短的沸腾热响应时间、更低的稳态温度和更高的沸腾传热系数. 当减小有限空间的尺寸时, 换热能力会受到抑制, 这种效应在采用亲水表面时表现更为明显. 随后, Zhang等人^[88]采用伪势模型研究了微型平板热虹吸管中的相变传热过程. 他们发现, 在冷凝和蒸发的共同作用下, 当上下壁面的间距较小时, 冷凝液滴聚集并与下壁面连接形成液桥现象. 此外, 他们还研究了Bond数和Jakob数对相变传热的影响. 当Bond数较小时, 过渡沸腾和膜态沸腾会提前发生, 此时应尽量选取偏小的Jakob数来增强换热能力.

近年来, 冷凝液滴的弹跳行为引起了广泛的关注. 2009年, Boreyko和Chen^[89]完成了超疏水表面的液滴弹跳实验, 液滴自发弹跳的动能来自于表面能的释放, 弹跳的液滴可以提供新的固液接触区域, 形成连续的成核和脱离周期. Peng等人^[90]基于多相格子Boltzmann方法模拟了液滴合并的动态演化过程, 发现液滴合并可分为三个阶段: (1) 两液滴形成液桥; (2) 液滴收缩变形; (3) 液滴弹跳, 并基于能量守恒计算了该过程释放的表面能和液滴跳跃高度, 发现大约25.2%的初始动能最终会转化成垂直弹跳的动能. Liu等人^[91]研究了两个相同液滴合并的弹跳行为, 认为液滴弹跳是基质对聚集液滴之间液桥冲击的反作用形成的. 在弹跳过程中, 释放的表面能一部分转化为平移动能, 大部分能量则在上升过程中储存在震荡模式中, 直至消散.

Liu等人^[92]采用伪势模型研究了超疏水表面上二维液滴的自发弹跳行为, 不同液滴尺寸的弹跳速度和高度与实验结果吻合较好. 他们发现, 当液滴直径过小

时, 由于黏性耗散过大液滴无法弹跳, 随着液滴直径增大先达到最大弹跳速度, 而后弹跳速度降低. 为了解决二维液滴下层液体无法落入槽内的问题, Liu和Cheng^[93]随后采用三维伪势模型对液滴弹跳进行了进一步的研究, 分析了微柱台间距尺寸对液滴弹跳的影响. 他们发现, 在很小的间距时, 固液接触面积较大, 表面张力过大导致黏附力增加, 液滴弹跳速度较小, 而很大的间距时, 底部液滴落入槽内, 黏性扩散增强, 动能降低, 液滴弹跳速度减小. 因此, 液滴弹跳速度随着柱台间距的增大会先增加而后减小, 液滴弹跳存在着一个最佳的柱台间距.

Shi和Tang^[94]研究了液滴的垂直弹跳和水平移动行为. 在光滑表面上, 液滴能够从超疏水区向疏水区水平移动; 在粗糙表面上, 液滴能够从高密度锥台区向低密度方向水平移动, 而且液滴在直排结构表面上倾向于水平移动, 在交叉结构表面上则更易形成垂直弹跳. 考虑湿润性和粗糙度的影响时, 无湿润性梯度的大接触角微锥台表面具有最高弹跳高度, 反之, 有湿润性梯度的表面弹跳高度最低, 这是因为流固接触区域的表面黏附力会影响液滴的弹跳行为. Zhang和Yuan^[95]研究了随机粗糙表面上的液滴弹跳行为, 分析了壁面峰度、倾斜度、接触角和液滴初始直径的影响, 发现液滴在Cassie状态容易起跳, Wenzel状态则由于液体渗入微沟槽, 黏性耗散增加使得表面能降低, 导致液滴无法起跳.

Zhang等人^[96]采用多相多组分伪势模型研究了超疏水阵列表面上的液滴成核与生长过程, 通过调整微柱结构的尺寸, 观察到了三种成核模式: 在顶部成核时, 表现为Cassie特征; 在底部成核时, 表现为Wenzel特征; 在两侧成核时, 压力会驱使液滴向上移动, 表现为Cassie特征, 如图8所示. 此外, 他们研究了微柱几何尺寸的具体影响. Zhang等人^[97]采用伪势模型研究了长

图7 (网络版彩色)有限空间内冷凝和沸腾共存时的相互作用. (a) $t^* = 2916.4$; (b) $t^* = 2917.5$; (c) $t^* = 2920.6$; (d) $t^* = 2921.7$ ^[87]

Figure 7 (Color online) The interaction between boiling and condensation in a confined micro-space. (a) $t^* = 2916.4$; (b) $t^* = 2917.5$; (c) $t^* = 2920.6$; (d) $t^* = 2921.7$ ^[87]

图8 (网络版彩色)不同结构上的液滴成核、成长和合并^[96]

Figure 8 (Color online) Evolution of droplet nucleation, growth and coalescence varying with different structures^[96]

方形和锥形微结构表面上的液滴冷凝行为,发现Wenzel状态是亚稳定的,而Cassie状态则是稳定的,且状态转变的能量壁垒取决于液滴和固体底面的黏附作用.他们发现疏水表面和微结构能够共同降低能量壁垒,实现自发转变.因此,锥台表面和小间距的长方形柱台表面更易形成Cassie状态.随后, Li等人^[98]改变微结构的疏水性,成核位置从底部向顶部上升,实现了Wenzel状态向Cassie状态的转变.最近, Ashrafi-Habibabadi和Moosavi^[99]研究了结构化表面上的液滴冷凝过程.他们发现,在疏水表面上,柱台间距较小时冷凝液滴为Cassie状态,而柱台间距较大时冷凝液滴为Wenzel状态;在超疏水表面上,小尺寸柱台结构无法成核,若增大结构尺寸则能够成核.

4 总结与展望

历经30余年的发展,格子Boltzmann方法的理论体系已逐渐完善,并在多相多组分流动、多孔介质流动、非牛顿流体、粒子悬浮流、湍流、化学反应流、磁流体、燃料电池等许多领域得到了广泛应用.近年来,该方法被应用到了沸腾及冷凝相变传热研究中,体现出一定的特色与优势.首先,格子Boltzmann方法可以比较方便地从底层刻画流体内部的相互作用,使得相界面可以自动产生、演化与迁移,无须采用任何

界面跟踪或界面捕捉技术,这是VOF、Level Set等界面跟踪或界面捕捉方法所无法比拟的.其次,在格子Boltzmann方法中,气泡或液滴可以自动成核,无须人为布置种子气泡或种子液滴,因此更能起到揭示沸腾及冷凝传热机理的作用.

本文总结了近年来多相格子Boltzmann方法的发展,着重评述了伪势多相格子Boltzmann模型的研究进展及其在沸腾与冷凝相变传热中的应用.毋庸置疑,沸腾及冷凝的研究目前仍然非常依赖于实验,数值模拟的主要作用在于辅助实验研究,以揭示相关的机理与机制,或反馈相关信息用以指导实验设计.一方面,这是由于实际的沸腾及冷凝过程非常复杂,且许多机理尚不明了,已有模型在参数上难以完全匹配相应的实验工况,因而目前的沸腾及冷凝数值模拟研究主要还是以定性为主,离定量研究尚有一定的距离;另一方面,沸腾及冷凝过程是典型的多尺度、非平衡过程,虽然分子动力学模拟原理上能够适用于全尺度,但受限于计算资源,其计算尺寸往往限于纳米尺度,而格子Boltzmann方法通常情况下是不能适用于纳米尺度的.深入揭示沸腾及冷凝传热的机理及相关的尺度效应,需要发展相变传热的多尺度/跨尺度数值模拟方法,构建介观-微观多尺度耦合模型/算法是一个可供讨论的方案.

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 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
- 4 McNamara G R, Zanetti G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. *Phys Rev Lett*, 1988, 61: 2332–2335
- 5 Koelman J M V A. A simple lattice Boltzmann scheme for Navier-Stokes fluid flow. *Europhys Lett*, 1991, 15: 603–607
- 6 Qian Y H, D’Humières D, Lallemand P. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation. *Europhys Lett*, 1992, 17: 479–484
- 7 Chen S, Chen H, Martinez D, et al. Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics. *Phys Rev Lett*, 1991, 67: 3776–3779
- 8 He X, Luo L S. A priori derivation of the lattice Boltzmann equation. *Phys Rev E*, 1997, 55: R6333–R6336
- 9 He X, Luo L S. Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *Phys Rev E*, 1997, 56: 6811–6817
- 10 Abe T. Derivation of the lattice Boltzmann method by means of the discrete ordinate method for the Boltzmann equation. *J Comput Phys*, 1997, 131: 241–246
- 11 Shan X, He X. Discretization of the velocity space in the solution of the Boltzmann equation. *Phys Rev Lett*, 1998, 80: 65–68
- 12 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]
- 13 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]
- 14 Gunstensen A K, Rothman D H, Zaleski S, et al. Lattice Boltzmann model of immiscible fluids. *Phys Rev A*, 1991, 43: 4320–4327
- 15 Grunau D, Chen S, Eggert K. A lattice Boltzmann model for multiphase fluid flows. *Phys Fluids A-Fluid Dyn*, 1993, 5: 2557–2562
- 16 d’Ortona U, Salin D, Cieplak M, et al. Two-color nonlinear Boltzmann cellular automata: Surface tension and wetting. *Phys Rev E*, 1995, 51: 3718–3728
- 17 Latva-Kokko M, Rothman D H. Diffusion properties of gradient-based lattice Boltzmann models of immiscible fluids. *Phys Rev E*, 2005, 71: 056702
- 18 Reis T, Phillips T N. Lattice Boltzmann model for simulating immiscible two-phase flows. *J Phys A-Math Theor*, 2007, 40: 4033–4053
- 19 Liu H, Valocchi A J, Kang Q. Three-dimensional lattice Boltzmann model for immiscible two-phase flow simulations. *Phys Rev E*, 2012, 85: 046309
- 20 Li Q, Luo K H, He Y L, et al. Coupling lattice Boltzmann model for simulation of thermal flows on standard lattices. *Phys Rev E*, 2012, 85: 016710
- 21 Ba Y, Liu H, Li Q, et al. Multiple-relaxation-time color-gradient lattice Boltzmann model for simulating two-phase flows with high density ratio. *Phys Rev E*, 2016, 94: 023310
- 22 Wen Z X, Li Q, Yu Y, et al. Improved three-dimensional color-gradient lattice Boltzmann model for immiscible two-phase flows. *Phys Rev E*, 2019, 100: 023301
- 23 Shan X, Chen H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Phys Rev E*, 1993, 47: 1815–1819
- 24 Shan X, Chen H. Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation. *Phys Rev E*, 1994, 49: 2941–2948
- 25 Shan X, Doolen G. Multicomponent lattice-Boltzmann model with interparticle interaction. *J Stat Phys*, 1995, 81: 379–393
- 26 Hou S, Shan X, Zou Q, et al. Evaluation of two lattice Boltzmann models for multiphase flows. *J Comput Phys*, 1997, 138: 695–713
- 27 Shan X. Analysis and reduction of the spurious current in a class of multiphase lattice Boltzmann models. *Phys Rev E*, 2006, 73: 047701
- 28 He X, Doolen G D. Thermodynamic foundations of kinetic theory and lattice Boltzmann models for multiphase flows. *J Statistical Phys*, 2002, 107: 309–328
- 29 Qin R S. Mesoscopic interparticle potentials in the lattice Boltzmann equation for multiphase fluids. *Phys Rev E*, 2006, 73: 066703
- 30 Yuan P, Schaefer L. Equations of state in a lattice Boltzmann model. *Phys Fluids*, 2006, 18: 042101
- 31 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
- 32 Li Q, Luo K H, Li X J. Forcing scheme in pseudopotential lattice Boltzmann model for multiphase flows. *Phys Rev E*, 2012, 86: 016709
- 33 Li Q, Luo K H, Li X J. Lattice Boltzmann modeling of multiphase flows at large density ratio with an improved pseudopotential model. *Phys Rev E*, 2013, 87: 053301
- 34 Sbragaglia M, Benzi R, Biferale L, et al. Generalized lattice Boltzmann method with multirange pseudopotential. *Phys Rev E*, 2007, 75: 026702
- 35 Li Q, Luo K H. Achieving tunable surface tension in the pseudopotential lattice Boltzmann modeling of multiphase flows. *Phys Rev E*, 2013, 88: 053307
- 36 Swift M R, Osborn W R, Yeomans J M. Lattice Boltzmann simulation of nonideal fluids. *Phys Rev Lett*, 1995, 75: 830–833
- 37 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
- 38 Inamuro T, Konishi N, Ogino F. A galilean invariant model of the lattice Boltzmann method for multiphase fluid flows using free-energy approach.

- Comput Phys Commun*, 2000, 129: 32–45
- 39 Mazloomi M A, Chikatamarla S S, Karlin I V. Entropic lattice Boltzmann method for multiphase flows. *Phys Rev Lett*, 2015, 114: 174502
 - 40 Lee T, Fischer P F. Eliminating parasitic currents in the lattice Boltzmann equation method for nonideal gases. *Phys Rev E*, 2006, 74: 046709
 - 41 Wen B, Zhou X, He B, et al. Chemical-potential-based lattice Boltzmann method for nonideal fluids. *Phys Rev E*, 2017, 95: 063305
 - 42 He X, Chen S, Zhang R. A lattice Boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of Rayleigh–Taylor instability. *J Comput Phys*, 1999, 152: 642–663
 - 43 Lee T, Lin C L. A stable discretization of the lattice Boltzmann equation for simulation of incompressible two-phase flows at high density ratio. *J Comput Phys*, 2005, 206: 16–47
 - 44 Zheng H W, Shu C, Chew Y T. A lattice Boltzmann model for multiphase flows with large density ratio. *J Comput Phys*, 2006, 218: 353–371
 - 45 Fakhari A, Rahimian M H. Phase-field modeling by the method of lattice Boltzmann equations. *Phys Rev E*, 2010, 81: 036707
 - 46 Li Q, Luo K H, Gao Y J, et al. Additional interfacial force in lattice Boltzmann models for incompressible multiphase flows. *Phys Rev E*, 2012, 85: 026704
 - 47 Ren F, Song B, Sukop M C, et al. Improved lattice Boltzmann modeling of binary flow based on the conservative Allen-Cahn equation. *Phys Rev E*, 2016, 94: 023311
 - 48 Wang H L, Chai Z H, Shi B C, et al. Comparative study of the lattice Boltzmann models for Allen-Cahn and Cahn-Hilliard equations. *Phys Rev E*, 2016, 94: 033304
 - 49 Chai Z, Sun D, Wang H, et al. A comparative study of local and nonlocal Allen-Cahn equations with mass conservation. *Int J Heat Mass Transf*, 2018, 122: 631–642
 - 50 Sun D, Xing H, Dong X, et al. An anisotropic lattice Boltzmann—Phase field scheme for numerical simulations of dendritic growth with melt convection. *Int J Heat Mass Transf*, 2019, 133: 1240–1250
 - 51 Kupershtokh A L, Medvedev D A, Karpov D I. On equations of state in a lattice Boltzmann method. *Comput Math Appl*, 2009, 58: 965–974
 - 52 Li Q, Zhou P, Yan H J. Revised Chapman-Enskog analysis for a class of forcing schemes in the lattice Boltzmann method. *Phys Rev E*, 2016, 94: 043313
 - 53 Guo Z, Zheng C, Shi B. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method. *Phys Rev E*, 2002, 65: 046308
 - 54 Wagner A J. Thermodynamic consistency of liquid-gas lattice Boltzmann simulations. *Phys Rev E*, 2006, 74: 056703
 - 55 Zhang D, Papadakis K, Gu S. Three-dimensional multi-relaxation time lattice-Boltzmann model for the drop impact on a dry surface at large density ratio. *Int J Multiphase Flow*, 2014, 64: 11–18
 - 56 Xu A, Zhao T S, An L, et al. A three-dimensional pseudo-potential-based lattice Boltzmann model for multiphase flows with large density ratio and variable surface tension. *Int J Heat Fluid Flow*, 2015, 56: 261–271
 - 57 Ammar S, Pernaudeau G, Trépanier J Y. A multiphase three-dimensional multi-relaxation time (MRT) lattice Boltzmann model with surface tension adjustment. *J Comput Phys*, 2017, 343: 73–91
 - 58 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
 - 59 Raiskinmäki P, Koponen A, Merikoski J, et al. Spreading dynamics of three-dimensional droplets by the lattice-Boltzmann method. *Comput Mater Sci*, 2000, 18: 7–12
 - 60 Raiskinmäki P, Shakib-Manesh A, Jäsberg A, et al. Lattice-boltzmann simulation of capillary rise dynamics. *J Stat Phys*, 2002, 107: 143–158
 - 61 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
 - 62 Li Q, Yu Y, Luo K H. Implementation of contact angles in pseudopotential lattice Boltzmann simulations with curved boundaries. *Phys Rev E*, 2019, 100: 053313
 - 63 Ding H, Spelt P D M. Wetting condition in diffuse interface simulations of contact line motion. *Phys Rev E*, 2007, 75: 046708
 - 64 Liu H R, Ding H. A diffuse-interface immersed-boundary method for two-dimensional simulation of flows with moving contact lines on curved substrates. *J Comput Phys*, 2015, 294: 484–502
 - 65 Zhang R, Chen H. Lattice Boltzmann method for simulations of liquid-vapor thermal flows. *Phys Rev E*, 2003, 67: 066711
 - 66 Biferale L, Perlekar P, Sbragaglia M, et al. Convection in multiphase fluid flows using lattice Boltzmann methods. *Phys Rev Lett*, 2012, 108: 104502
 - 67 Gong S, Cheng P. Lattice Boltzmann simulation of periodic bubble nucleation, growth and departure from a heated surface in pool boiling. *Int J Heat Mass Transf*, 2013, 64: 122–132
 - 68 Gong S, Cheng P. Numerical simulation of pool boiling heat transfer on smooth surfaces with mixed wettability by lattice Boltzmann method. *Int J Heat Mass Transf*, 2015, 80: 206–216
 - 69 Li Q, Kang Q J, Francois M M, et al. Lattice Boltzmann modeling of boiling heat transfer: The boiling curve and the effects of wettability. *Int J Heat Mass Transf*, 2015, 85: 787–796
 - 70 Sun T, Li W, Dong B. Numerical simulation of vapor bubble growth on a vertical superheated wall using lattice Boltzmann method. *Int J Numer Methods Heat Fluid Flow*, 2015, 25: 1214–1230
 - 71 Sun T, Gui N, Yang X, et al. Numerical study of patterns and influencing factors on flow boiling in vertical tubes by thermal LBM simulation. *Int*

- [Commun Heat Mass Transf](#), 2017, 86: 32–41
- 72 Sun T, Gui N, Yang X, et al. Pseudo-potential MRT-thermal LB simulation of flow boiling in vertical tubes. [Heat Mass Transf](#), 2018, 54: 3035–3045
- 73 Márkus A, Házzi G. Simulation of evaporation by an extension of the pseudopotential lattice Boltzmann method: A quantitative analysis. [Phys Rev E](#), 2011, 83: 046705
- 74 Mu Y T, Chen L, He Y L, et al. Nucleate boiling performance evaluation of cavities at mesoscale level. [Int J Heat Mass Transf](#), 2017, 106: 708–719
- 75 Zhou P, Liu Z, Liu W, et al. LBM simulates the effect of sole nucleate site geometry on pool boiling. [Appl Therm Eng](#), 2019, 160: 114027
- 76 Li Q, Yu Y, Zhou P, et al. Enhancement of boiling heat transfer using hydrophilic-hydrophobic mixed surfaces: A lattice Boltzmann study. [Appl Therm Eng](#), 2018, 132: 490–499
- 77 Yu Y, Wen Z X, Li Q, et al. Boiling heat transfer on hydrophilic-hydrophobic mixed surfaces: A 3D lattice Boltzmann study. [Appl Therm Eng](#), 2018, 142: 846–854
- 78 Ma X, Cheng P, Quan X. Simulations of saturated boiling heat transfer on bio-inspired two-phase heat sinks by a phase-change lattice Boltzmann method. [Int J Heat Mass Transf](#), 2018, 127: 1013–1024
- 79 Ma X, Cheng P. Dry spot dynamics and wet area fractions in pool boiling on micro-pillar and micro-cavity hydrophilic heaters: A 3D lattice Boltzmann phase-change study. [Int J Heat Mass Transf](#), 2019, 141: 407–418
- 80 Zhang C, Wu S, Yao F, et al. Numerical study on vapor–liquid phase change in an enclosed narrow space. [Numer Heat Transf Part A-Appl](#), 2020, 77: 199–214
- 81 Liu X, Cheng P. Lattice Boltzmann simulation for dropwise condensation of vapor along vertical hydrophobic flat plates. [Int J Heat Mass Transf](#), 2013, 64: 1041–1052
- 82 Liu X, Cheng P. Lattice Boltzmann simulation of steady laminar film condensation on a vertical hydrophilic subcooled flat plate. [Int J Heat Mass Transf](#), 2013, 62: 507–514
- 83 Li X, Cheng P. Lattice Boltzmann simulations for transition from dropwise to filmwise condensation on hydrophobic surfaces with hydrophilic spots. [Int J Heat Mass Transf](#), 2017, 110: 710–722
- 84 Li M, Huber C, Mu Y, et al. Lattice Boltzmann simulation of condensation in the presence of noncondensable gas. [Int J Heat Mass Transf](#), 2017, 109: 1004–1013
- 85 Zheng S, Eimann F, Philipp C, et al. Single droplet condensation in presence of non-condensable gas by a multi-component multi-phase thermal lattice Boltzmann model. [Int J Heat Mass Transf](#), 2019, 139: 254–268
- 86 Shen L Y, Tang G H, Li Q, et al. Hybrid wettability-induced heat transfer enhancement for condensation with noncondensable gas. [Langmuir](#), 2019, 35: 9430–9440
- 87 Wu S, Yu C, Yu F, et al. Lattice Boltzmann simulation of co-existing boiling and condensation phase changes in a confined micro-space. [Int J Heat Mass Transf](#), 2018, 126: 773–782
- 88 Zhang C, Wu S, Yao F. Evaporation regimes in an enclosed narrow space. [Int J Heat Mass Transf](#), 2019, 138: 1042–1053
- 89 Boreyko J B, Chen C H. Self-propelled dropwise condensate on superhydrophobic surfaces. [Phys Rev Lett](#), 2009, 103: 184501
- 90 Peng B, Wang S, Lan Z, et al. Analysis of droplet jumping phenomenon with lattice Boltzmann simulation of droplet coalescence. [Appl Phys Lett](#), 2013, 102: 151601
- 91 Liu F, Ghigliotti G, Feng J J, et al. Numerical simulations of self-propelled jumping upon drop coalescence on non-wetting surfaces. [J Fluid Mech](#), 2014, 752: 39–65
- 92 Liu X, Cheng P, Quan X. Lattice Boltzmann simulations for self-propelled jumping of droplets after coalescence on a superhydrophobic surface. [Int J Heat Mass Transf](#), 2014, 73: 195–200
- 93 Liu X, Cheng P. 3D multiphase lattice Boltzmann simulations for morphological effects on self-propelled jumping of droplets on textured superhydrophobic surfaces. [Int Commun Heat Mass Transf](#), 2015, 64: 7–13
- 94 Shi Y, Tang G H. Investigation of coalesced droplet vertical jumping and horizontal moving on textured surface using the lattice Boltzmann method. [Comput Math Appl](#), 2018, 75: 1213–1225
- 95 Zhang L Z, Yuan W Z. A lattice Boltzmann simulation of coalescence-induced droplet jumping on superhydrophobic surfaces with randomly distributed structures. [Appl Surf Sci](#), 2018, 436: 172–182
- 96 Zhang Q, Sun D, Zhang Y, et al. Lattice Boltzmann modeling of droplet condensation on superhydrophobic nanoarrays. [Langmuir](#), 2014, 30: 12559–12569
- 97 Zhang B, Chen X M, Dobnikar J, et al. Spontaneous Wenzel to Cassie dewetting transition on structured surfaces. [Phys Rev Fluids](#), 2016, 1: 073904
- 98 Li M, Huber C, Tao W, et al. Study on nucleation position and wetting state for dropwise condensation on rough structures with different wettability using multiphase lattice Boltzmann method. [Int J Heat Mass Transf](#), 2019, 131: 96–100
- 99 Ashrafi-Habibabadi A, Moosavi A. Droplet condensation and jumping on structured superhydrophobic surfaces. [Int J Heat Mass Transf](#), 2019, 134: 680–693

Summary for “多相格子Boltzmann方法及其在相变传热中的应用”

Multiphase lattice Boltzmann method and its applications in phase-change heat transfer

Qing Li^{*}, Yue Yu & Shi Tang

School of Energy Science and Engineering, Central South University, Changsha 410083, China

^{*} Corresponding author, E-mail: qingli@csu.edu.cn

In the past three decades, the lattice Boltzmann (LB) method has been developed into an efficient numerical method for simulating fluid flow and heat transfer. It is a mesoscopic numerical approach, sitting in the middle between the molecular dynamic method and conventional numerical methods based on the continuum assumption. Unlike conventional numerical methods, the LB method is built on the mesoscopic kinetic equation. It tracks the evolution of a particle distribution function and then accumulates the particle distribution function to obtain the macroscopic properties. Owing to its kinetic nature, the LB method has exhibited many advantages over conventional numerical methods. For example, in the LB equation the convective operator is linear, whereas the convective terms of the Navier-Stokes equations are nonlinear. Moreover, in the LB simulations the complex boundary conditions can be formulated with the elementary mechanical rules such as the bounce-back rule according to the interaction of the “LB particles” with the solid walls. Furthermore, the LB method is ideal for parallel computing because of its explicit scheme and local interactions. Particularly, the intermolecular interactions of fluids can be easily incorporated into the LB method. As a result, the interface between different phases can arise, deform, and migrate naturally in the LB modeling without using any techniques to track or capture the interface, which is often required in the VOF or Level Set method.

The existing multiphase LB models can be generally classified into four categories, i.e., the color-gradient model, the pseudopotential model, the free-energy model, and the phase-field model. In the color-gradient LB model, two distribution functions are introduced to represent two different fluids and a color-gradient-based perturbation operator is employed to generate surface tension. Moreover, a recoloring step is used in the color-gradient model so as to separate different phases. The pseudopotential LB model is the simplest and the most popular multiphase LB model. In this model, the fluid interactions are mimicked by an interparticle potential, through which the separation of different phases or components can be achieved naturally. Accordingly, the interface between different phases can arise, deform and migrate naturally. The free-energy LB model was developed based on thermodynamics considerations, which modifies the second-order moment of the particle equilibrium distribution function so as to include a non-ideal thermodynamic pressure tensor. The phase-field LB model is based on the phase-field theory, in which the interface dynamics is described by an order parameter that obeys the Cahn-Hilliard equation or a Cahn-Hilliard-like equation. In this paper we briefly review some recent advances in these multiphase LB models. Particularly, recent progress in the pseudopotential LB model is highlighted. It is shown that the thermodynamic consistency of the pseudopotential model can be achieved by adjusting the mechanical stability condition via an improved forcing scheme. Furthermore, an alternative approach is presented to tune the surface tension of the pseudopotential model and an improved contact angle scheme is introduced, which retains the advantages of the original virtual-density scheme but does not suffer from an unphysical thick mass-transfer layer near the solid boundary. Moreover, the applications of the pseudopotential LB model to boiling and condensation heat transfer are outlined.

lattice Boltzmann method, mutliphase flow, pseudopotential model, boiling, condensation

doi: [10.1360/TB-2019-0769](https://doi.org/10.1360/TB-2019-0769)