

用格子 Boltzmann 方法数值模拟三维空化现象*

张新明^{1)†} 周超英¹⁾ Islam Shams¹⁾ 刘家琦²⁾

1) 哈尔滨工业大学深圳研究生院, 深圳 518055)

2) 哈尔滨工业大学数学系, 哈尔滨 150001)

(2008 年 12 月 17 日收到, 2009 年 3 月 13 日收到修改稿)

空化是一种微观、瞬时、随机、多相的复杂现象, 其过程中所产生的极端条件以及伴随的一系列空化效应, 将对液流系统产生破坏性和建设性两方面的作用. 采用基于 Shan-Chen 模型的单组分多相流格子 Boltzmann 方法对水体中的三维空化现象进行了数值模拟, 研究了低压下水体中气核半径与空化现象的相互关系, 成功再现了低压下水体中微小气核发展成气泡的过程, 并进一步研究了水体依次流经低压区、高压区时空化产生、发展、溃灭的全过程. 数值模拟结果和理论预测结果符合良好.

关键词: 单组分多相流, 格子 Boltzmann 方法, 三维空化

PACC: 4755K, 6470F

1. 引 言

人们企图避免和缓解空化带来的危害, 但空化泡在溃灭瞬时产生高温、高压, 并伴随有一系列机械效应、热效应、化学效应和光效应. 利用该过程释放的能量和产生的特殊环境可以实现对特定物理、化学过程的强化, 达到节能、增效、减少污染的效果, 可广泛应用于众多工业领域, 如清洗、制浆、材料切割、岩石粉碎、油井解堵、材料的超细粉碎、有机污染物降解、促进化学反应等, 具有广泛的经济效益和社会效益.

空化是由于液体中的局部低压(低于相应温度下该液体的饱和蒸汽压)使液体汽化而引发的微气泡(或称气核)爆发性生长现象^[1]. 实验和计算表明, 水体能够在局部低压下产生空化现象, 是由于在水中存在着许多含有气体或蒸汽的小泡, 水中的这些小泡称为气核或空化核. 气核的存在是水体不能承受拉力的主要原因. 这些气核并不能为肉眼所看到, 只有液体流经低压区时, 气泡快速增大时才会被觉察到. 当液体中的压力降低到该液体在此温度下的饱和蒸汽压以下时, 除液体中所含气体析出而形成气泡外, 液体本身还会剧烈地汽化沸腾, 产生大量

的气泡. 由于液体汽化和溶解气体的游离是向着作为核的空泡内进行的, 结果就形成充满着空气和蒸汽的气泡. 当这些气泡随液流进入高压区时, 蒸汽高速凝结和气泡溃灭, 流体质点便向空腔中心高速冲撞, 产生强烈的冲击, 结果使瞬时的局部压力和局部温度急剧上升, 这种现象被称为空化效应(或气蚀).

水体中气泡的形成需要克服能障的影响, 新生成气泡的表面能和负压对气泡做的功构成了生成气泡所需要的能量^[2]

$$\Delta E = 4\pi r^2 \sigma + \frac{4\pi}{3} r^3 \Delta P, \quad (1)$$

其中 r 是气泡半径, σ 是表面张力, ΔP 是施加的负压. 由 $\frac{\partial(\Delta E)}{\partial r} = 0$, 我们可以得到气泡的临界半径 $r^* = -\frac{2\sigma}{\Delta P}$ 时, 能障达到最大 $\Delta E = 16\pi\sigma^3 / (3\Delta P^2)$. 图 1 中显示了在三种不同的负压下能障 ΔE 随气泡半径的变化. 本文中, 距离以模拟格子为单位, 时间以模拟时步为单位, 质量以单粒子质量为单位. 对于半径小于 r^* 的气泡, 气泡尺寸的增大意味着需要更多的能量, 而对于半径大于 r^* 的气泡, 随着气泡半径的增大, 能障随之降低, 因此气泡可以无限地增大, 从而有利于空化的产生.

* 广东省自然科学基金(批准号: 07300059)和中国博士后科学基金(批准号: 20080430930)资助的课题.

† E-mail: xinmingxueshu@hitsz.edu.cn

空化现象是液体从液相变为气相的相变过程，同时又是瞬息变化的随机过程。由于空化和空蚀是微观、瞬时、随机、多相的复杂现象，到目前为止，有关空化和空蚀的理论及不少研究成果还不能令人完全满意，许多问题还有待进一步深入研究和探索。近年来，借助流体显形和数值模拟等先进的研究方法和手段，空化和空蚀的研究正向更深入、更微观的领域发展。

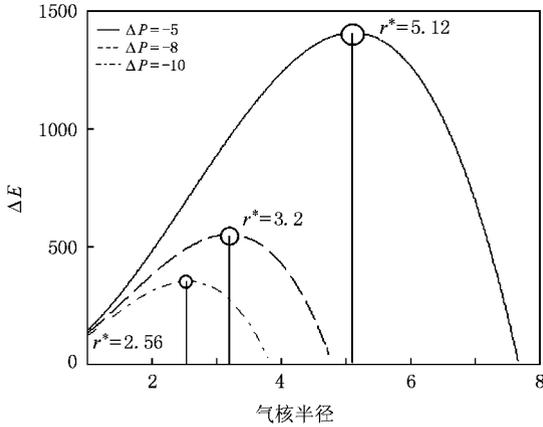


图 1 不同负压下能障与气泡半径关系

源自于元胞自动机的格子 Boltzmann 方法^[3,4] (LBM) 是一种简化的基于微观尺度层次上的数值计算方法。近年来已经引起了越来越多专家学者的关注，并成功地应用于诸多领域的科学研究^[5-7]。它是基于微观现象的一种宏观统计描述，将流体运动描述为比真实流体分子大得多的可见粒子的碰撞，这些粒子在宏观尺度下表现出流体真实的流动特征。LBM 是利用众多虚构粒子的集体行为（而不是全部的分子动力学）来描述宏观上的流体运动，因此被称为微观物理的介观描述。相比于传统的计算流体动力学 (CFD) 方法，LBM 独一无二的求解思路（由离散模型的规则来重构控制方程）带来了众多的优良特性，如良好计算稳定性、边界条件处理简单和天然的并行性等，从而使得其在多相流数值模拟中具有更大的优势。

本文采用基于 Shan-Chen 模型^[8]的单组分多相流 LBM 对水体中的三维空化现象进行了数值模拟，研究了低压下水体中气核半径 r 与空化现象的相互关系，成功再现了低压下水体中微小气核发展成气泡的过程，并进一步研究了水体依次流经低压区、高压区时空化产生、发展、溃灭的全过程。数值模拟结果和理论结果符合良好。

2. LBM

LBM 本质上是一种演化方法，是格子气自动机 (LGA)^[9] 的进一步发展，其基本原理与 LGA 相同，不同的是，在 LBM 中用粒子分布函数的演化代替 LGA 中粒子的演化，其演化方程直接采用格子 Boltzmann 方程。和传统 CFD 方法直接求解宏观变量不同，LBM 中的宏观变量是通过分布函数的矩量积分得到的。目前，存在着多种 LBM 模型，本文采用的是被广泛使用的 LBK 模型^[10,11]。

将物理空间划分为规则格子空间，速度空间离散为有限速度集合 $\{e_\alpha\}$ ，则 BGK 方法近似的 Boltzmann 方程可被离散为

$$f_\alpha(x_i + e_\alpha \Delta t, t + \Delta t) - f_\alpha(x_i, t) = - \frac{f_\alpha(x_i, t) - f_\alpha^{eq}(x_i, t)}{\tau} \quad (2)$$

其中 Δt 和 $e_\alpha \Delta t$ 为时间和空间步长， f_α 是沿 x 方向的单粒子速度分布函数， f_α^{eq} 是平衡分布函数， τ 为弛豫时间。

本文采用 D3Q19 格子模型，如图 2 所示。此模型中粒子平衡分布函数为

$$f_\alpha^{eq} = \rho \omega_\alpha \left[1 + \frac{3}{c^2} e_\alpha \cdot u + \frac{9}{2c^4} (e_\alpha \cdot u)^2 - \frac{3}{2c^2} u \cdot u \right] \quad (3)$$

其中 ω_α 平衡分布函数的权重因子， $\omega_0 = \frac{1}{3} \omega_{1 \dots 6}$

$$= \frac{1}{18} \omega_{7 \dots 18} = \frac{1}{36}$$

$$e_\alpha = \begin{cases} (0, 0, 0) & (\alpha = 0), \\ (\pm 1, 0, 0) (\pm 1, 0, 0) (0, 0, \pm 1) & (\alpha = 1 \dots 6), \\ (\pm 1, \pm 1, 0) (\pm 1, 0, \pm 1) (0, \pm 1, \pm 1) & (\alpha = 7 \dots 18). \end{cases}$$

宏观的流体密度 ρ 和速度 u 的求解公式为

$$\rho = \sum_{\alpha=0}^{18} f_\alpha, \quad \rho u = \sum_{\alpha=0}^{18} f_\alpha e_\alpha \quad (4)$$

为实现单组分多相流模拟，本文采用 Shan-Chen 模型，在 LBM 模型中引入了相邻流体粒子间的相互作用力

$$F(x, t) = - G \psi(\rho(x, t)) \times \sum_{\alpha=0}^{18} \omega_\alpha \psi(\rho(x + e_\alpha \Delta t, t)) e_\alpha \quad (5)$$

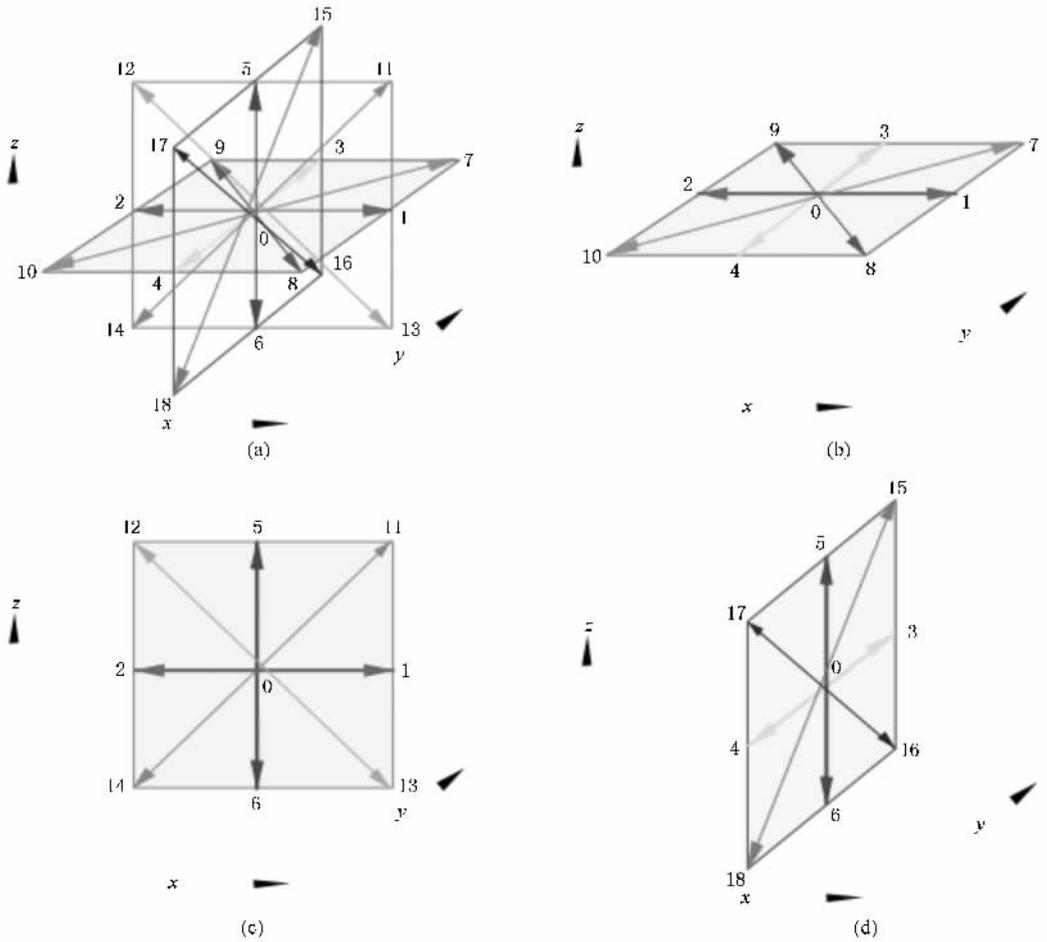


图 2 D3Q19 格子模型 (a) $x-y, y-z, x-z$ 平面 (b) $x-y$ 平面 (c) $x-z$ 平面 (d) $y-z$ 平面

这里 G 为粒子间相互作用力系数; $\psi(\rho(x, t))$ 为势函数, 本文中选用 $\psi(\rho) = \psi_0 e^{-\frac{\rho_0}{\rho}}$, 其中 ψ_0 和 ρ_0 为任意常数, 本文选用 $\psi_0 = 6, \rho_0 = 100$.



Shan-Chen 单组分多相流模型中的状态方程为

$$P = \frac{\rho}{3} + \frac{G}{6} (\psi(\rho))^2. \quad (6)$$

选择合适的函数 $\psi(\rho(x, t))$, 方程 (6) 能够拥有 van der Waals 方程一样的允许气液两相共存的特性. 相关参数选为 $\psi_0 = 6, \rho_0 = 100$ 时, 图 3 为 G 取不同值时, 方程 (6) 所表示的压力与密度关系. 压力-密度曲线是否单调的临界值为 $G^* = -20.5252$. 从图 3 可以看到: 当 $G > G^*$ 时, 压力-密度曲线单调递增 (没有相分离); 当 $G < G^*$ 时, 压力-密度曲线非单调 (可能有相分离).

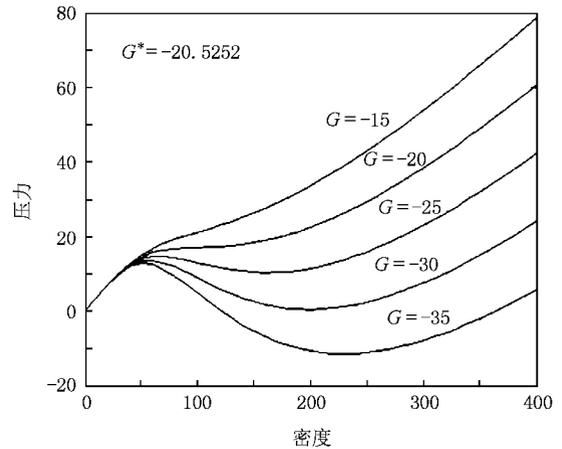


图 3 Shan-Chen 模型状态方程所表示的压力与密度关系

在数值模拟过程中, 流体粒子之间的相互作用力通过如下公式添加到计算平衡分布函数的新速度计算中:

$$u^{eq} = u + \Delta u = u + \frac{F}{\omega\rho}, \quad (7)$$

其中 $\omega = 1/\tau$.

3. 平衡状态下的气相压力与液相压力

首先通过模拟三维相分离过程来得到平衡状态时的气相密度、液相密度,然后通过状态方程得到平衡状态时的气相压力、液相压力.采用 D3Q19 模型,模拟区域为 $50 \times 50 \times 50$,势能函数参数选择为 $\psi_0 = 6.0$, $\rho_0 = 100$,初始密度分布 $\rho = (1.5 - (0.5 - N_r)100)\rho_c$, $\rho_c = \rho = \rho_0 = 100$,其中 N_r 为 Fortran 产生的随机数,取值范围为 $[0, 1]$.流体颗粒间相互作用力系数 $G = -30$.三维相分离过程如图 4 所示.在平衡态下,我们得到了气相密度 $\rho_v = 36.8$ 和液相密度 $\rho_l = 333$,以及相应的

气相压力 $P_v = 11.4815$ 和液相压力 $P_l = 12.2732$.

4. 表面张力计算

是否产生空化现象取决于 r^* . $r^* = -2\sigma/\Delta P$.其中气液界面的表面张力 σ 通过模拟一系列不同半径的气泡在液体中的演化过程时所得到的数值模拟结果求得.首先通过数值模拟得到平衡状态下的气相密度和液相密度,然后由状态方程得到气泡内外压力差 ΔP .不同气泡半径和相应的气泡内外压力差拟合曲线如图 5 所示.最后由 Young-Laplace 定律 $\Delta P = 2\sigma/r$,我们可以知道拟合曲线的斜率即是表面张力 $\sigma = 12.8225$.

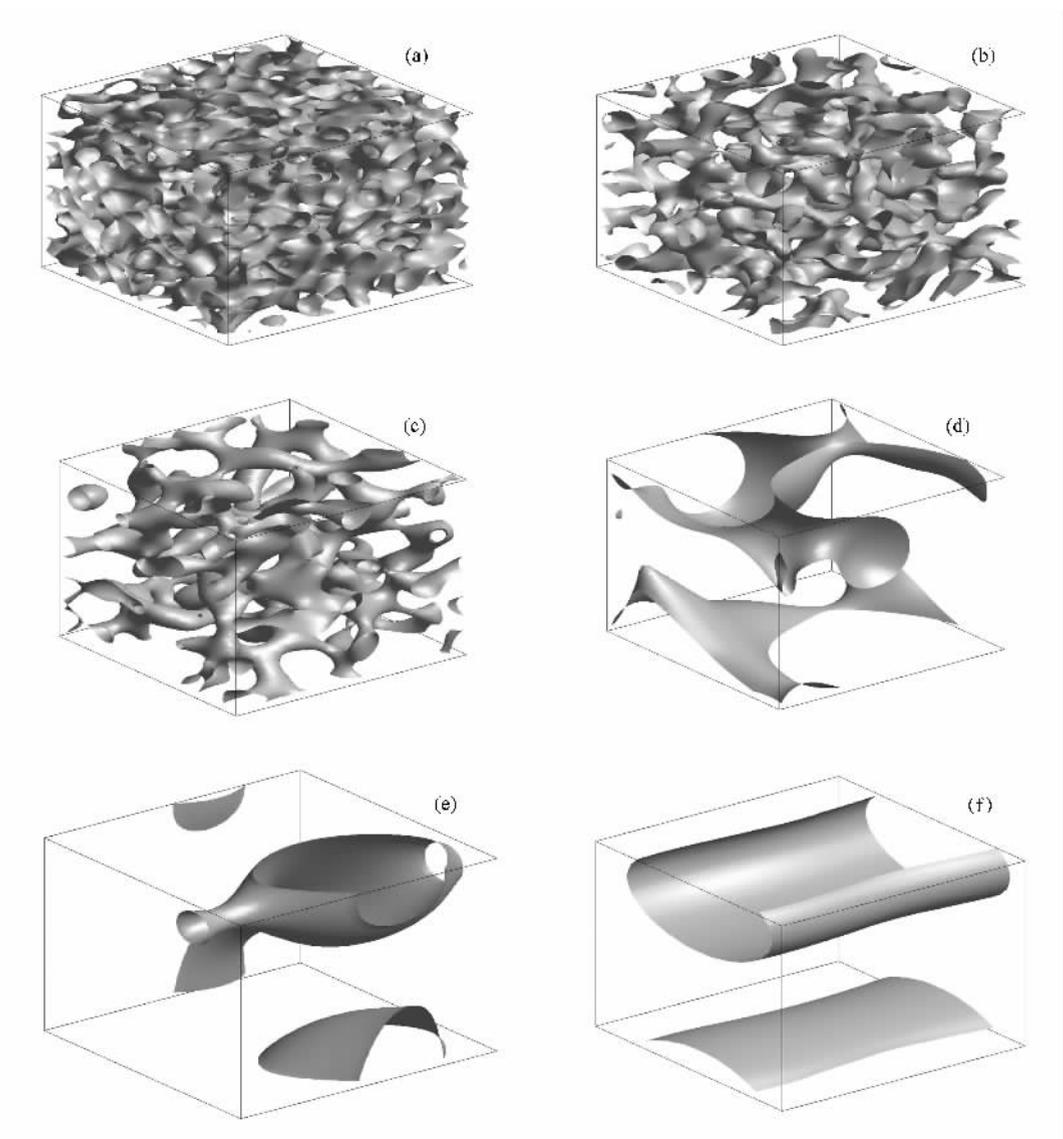


图 4 三维相分离过程 (a) $t = 10$ (b) $t = 50$ (c) $t = 100$ (d) $t = 500$ (e) $t = 1000$ (f) $t = 2000$

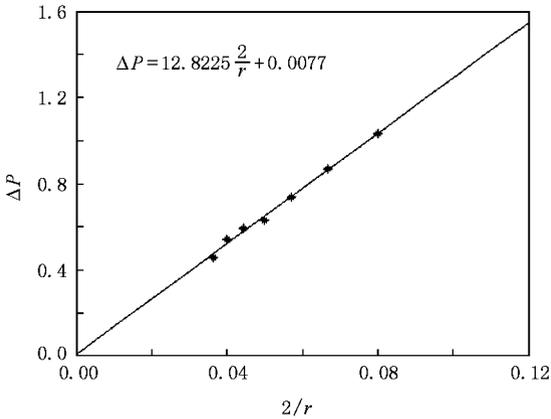


图 5 气泡内外压力差随气泡曲率的变化

5. 边界条件

采用固定压力边界条件作为数值模拟的边界条件^[12]. 此边界能够有效促进流体运动, 并创造有利于空化发生的环境. 我们将之推广到了三维情形.

假设流体沿 x 方向运动, 对于入口处的任意一个格点, 假设密度 ρ_{in} 已知, 并且 $u_y = u_z = 0$. 在经过一个迭代步骤后, 由模拟区域内部向外部方向移动的粒子分布函数 $f_2, f_3, f_4, f_5, f_6, f_9, f_{10}, f_{12}, f_{14}, f_{16}, f_{17}, f_{18}, f_{19}$ 已知, 但对于从模拟区域外部向内部方向移动的粒子分布函数 $f_1, f_7, f_8, f_{11}, f_{13}$ 未知, 我们的目的就是求出这些未知分布函数. 经过相应推导, 可以采用以下公式来计算这些未知分布函数:

$$u_x = 1 - \frac{\mathcal{X}(f_2 + f_9 + f_{10} + f_{12} + f_{14}) + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_{16} + f_{17} + f_{18} + f_{19}}{\rho_{in}},$$

$$f_1 = f_2 + \frac{1}{3}\rho_{in}u_x,$$

$$f_7 = f_{10} + \frac{1}{2}(f_4 + f_{17} + f_{18}) - \frac{1}{2}(f_3 + f_{15} + f_{16}) + \frac{1}{6}\rho_{in}u_x,$$

$$f_8 = f_9 - \frac{1}{2}(f_4 + f_{17} + f_{18}) + \frac{1}{2}(f_3 + f_{15} + f_{16}) + \frac{1}{6}\rho_{in}u_x,$$

$$f_{11} = f_{14} + \frac{1}{2}(f_6 + f_{16} + f_{18}) - \frac{1}{2}(f_5 + f_{15} + f_{17}) + \frac{1}{6}\rho_{in}u_x,$$

$$f_{13} = f_{12} - \frac{1}{2}(f_6 + f_{16} + f_{18}) + \frac{1}{2}(f_5 + f_{15} + f_{17}) + \frac{1}{6}\rho_{in}u_x.$$

出口处格点的情形与入口处类似. 未知的粒子分布函数为 $f_2, f_9, f_{10}, f_{12}, f_{14}$, 相应的求解公式为

$$u_x = -1 + \frac{\mathcal{X}(f_1 + f_7 + f_8 + f_{11} + f_{13}) + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_{16} + f_{17} + f_{18} + f_{19}}{\rho_{out}},$$

$$f_2 = f_1 - \frac{1}{3}\rho_{out}u_x,$$

$$f_9 = f_8 + \frac{1}{2}(f_4 + f_{17} + f_{18}) - \frac{1}{2}(f_3 + f_{15} + f_{16}) + \frac{1}{6}\rho_{out}u_x,$$

$$f_{10} = f_7 - \frac{1}{2}(f_4 + f_{17} + f_{18}) + \frac{1}{2}(f_3 + f_{15} + f_{16}) + \frac{1}{6}\rho_{out}u_x,$$

$$f_{12} = f_{13} + \frac{1}{2}(f_6 + f_{16} + f_{18}) - \frac{1}{2}(f_5 + f_{15} + f_{17}) + \frac{1}{6}\rho_{out}u_x,$$

$$f_{14} = f_{11} - \frac{1}{2}(f_6 + f_{16} + f_{18}) + \frac{1}{2}(f_5 + f_{15} + f_{17}) + \frac{1}{6}\rho_{out}u_x.$$

6. 数值模拟

空化现象数值模拟的成功与否和初始条件的选择有着至关重要的关系. 数值模拟初始阶段选择的气核半径决定了空化现象是否能够产生. Or 和 Tuller^[2]对于气核半径与空化现象的关系进行了理论上的探讨. 下面我们将用数值模拟的结果来验证这个理论.

数值模拟区域 $50 \times 50 \times 50$, 进出口采用三维固定压力边界条件促使流体运动. 整个模拟区域施加

小于平衡态液相压力的压力来模拟流体流经低压区. 对于不同的负压力, 我们分别在模拟区域内加入不同半径的气核以研究气核半径与空化现象的关系. 对于 $\Delta P = -5$, $r^* = -\frac{2\sigma}{\Delta P} = 5.129$, 我们分别加入了半径为 $r = 4 < r^*$ 和 $r = 7 > r^*$ 的气核. 图 6 显示了横截面 $z = 25$ 上的密度分布. 对于 $\Delta P = -10$, 空化临界半径 $r^* = -\frac{2\sigma}{\Delta P} = 2.5645$, 我们分别加入了半径 $r = 2 < r^*$ 和 $r = 4 > r^*$ 的气核. 图 7 显示了横截面 $z = 25$ 上的密度分布图. 从图

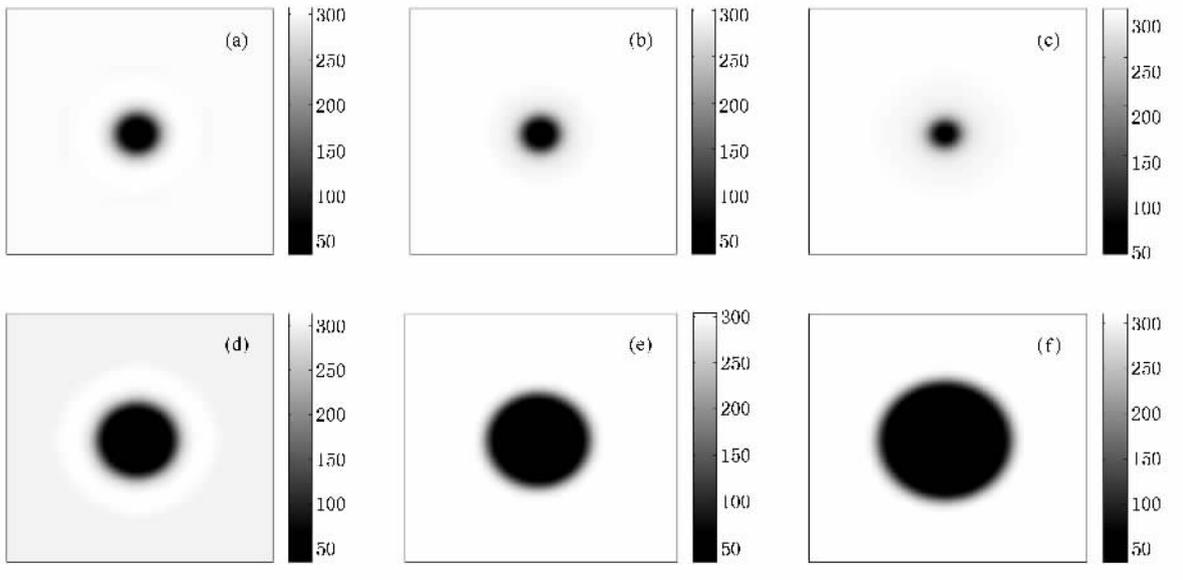


图 6 初始气核半径对空化现象的影响 $\Delta P = -5$, 横截面 $z = 25$. 右侧灰度条表示密度 ρ 的值 (a) $r = 4, t = 10$ (b) $r = 4, t = 20$ (c) $r = 4, t = 30$ (d) $r = 7, t = 10$ (e) $r = 7, t = 100$ (f) $r = 7, t = 500$

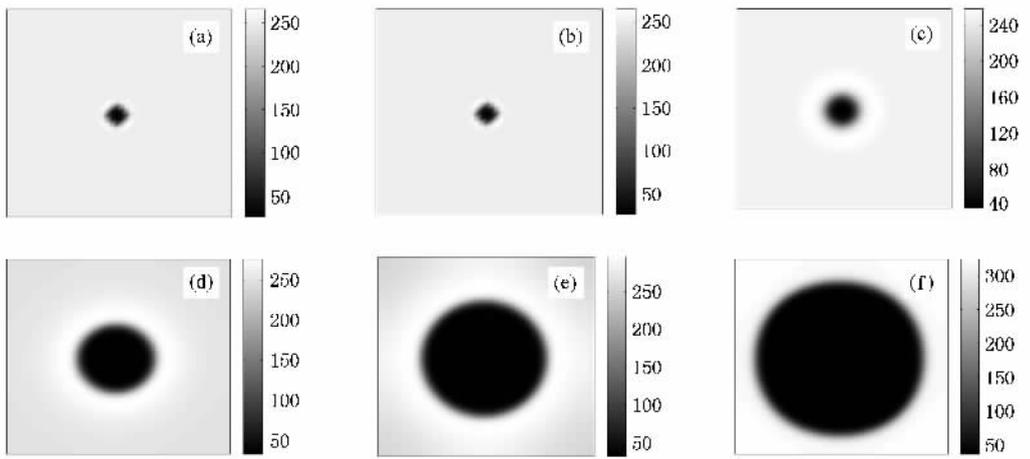


图 7 初始气核半径对空化现象的影响 $\Delta P = -10$, 横截面 $z = 25$. 右侧灰度条表示密度 ρ 的值. (a) $r = 2, t = 1$, (b) $r = 2, t = 2$ (c) $r = 4, t = 10$ (d) $r = 4, t = 60$ (e) $r = 4, t = 100$ (f) $r = 4, t = 500$

6 和图 7 中可以明显看到,当气核半径小于 r^* 时,气核尺寸逐渐减小,直至消失;而当气核半径大于 r^* 时,产生空化现象.较大负压下流体中较小尺寸的气核就能够不断增长,从而形成空化现象.图 8 和图 9 显示了数值模拟过程中,对于不同负压压力,加入不同半径气核时整个模拟区域内气相格点数随演化时间的变化曲线.从图 8 和图 9 可以看到,当气核半

径小于 r^* 时,整个模拟区域内气相格点数迅速降到零(没有气相格点,气核消失);而当气核半径大于 r^* 时,整个模拟区域内气相格点数剧烈增长,经过振荡发展趋向一个固定值(空化现象产生).

最后,我们成功模拟了负压压力为 $\Delta P = -10$,当 $r > r^*$ 时($r = 7 > r^*$)流体依次流经低压区、高压区,流体内的气泡产生、发展、溃灭的全过程.图 10

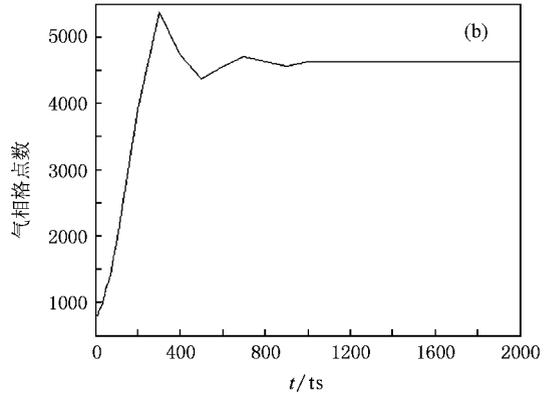
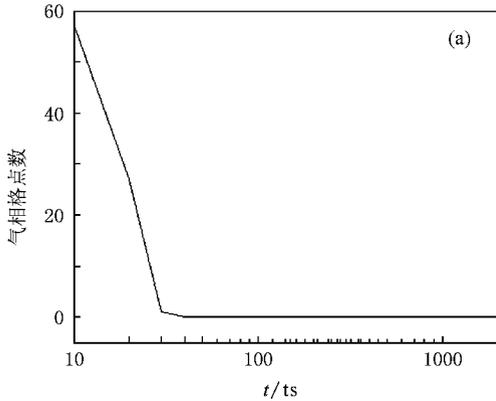


图 8 模拟区域气相格点数随模拟时间的变化 $\Delta P = -5$. (a) $r = 4$ (b) $r = 7$

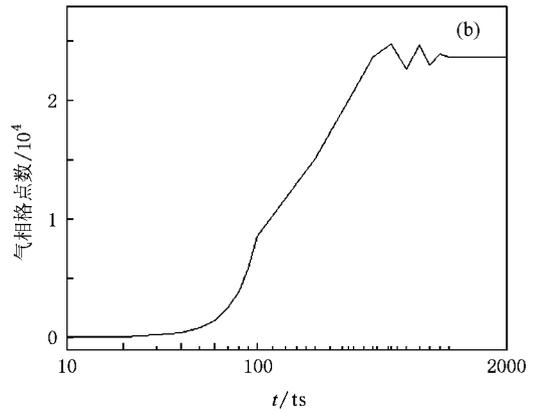
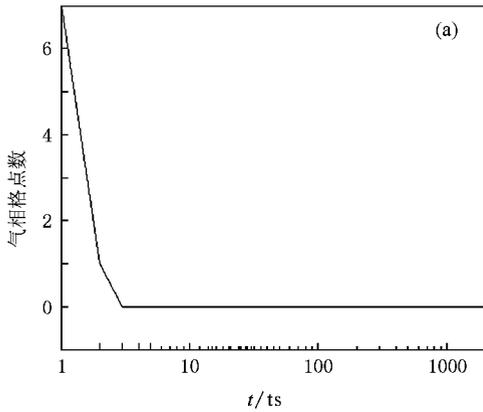


图 9 模拟区域气相格点数随模拟时间的变化 $\Delta P = -10$. (a) $r = 2$ (b) $r = 4$

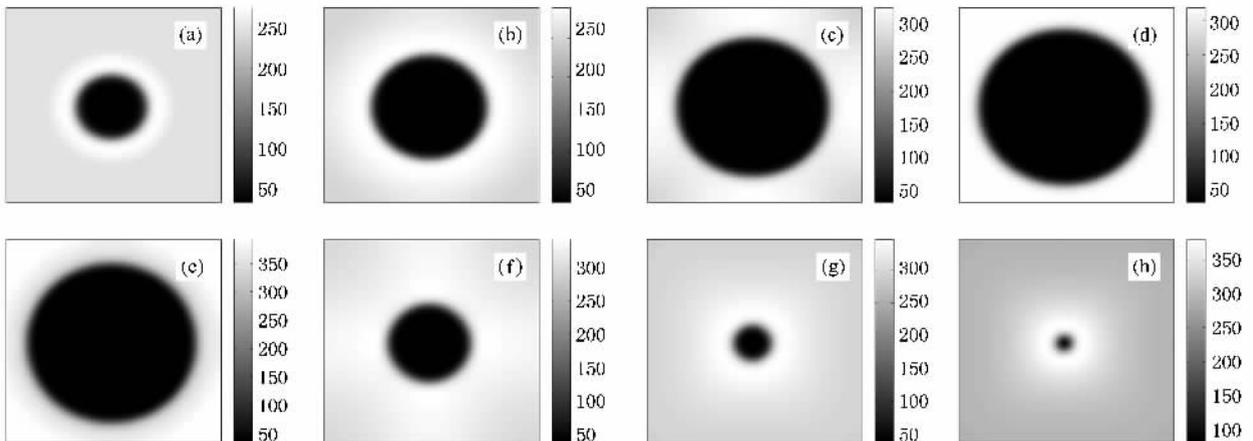


图 10 空化产生、发展、溃灭过程 (a) $t = 10$ (b) $t = 50$ (c) $t = 80$ (d) $t = 2200$ (e) $t = 2210$ (f) $t = 2280$ (g) $t = 2301$ (h) $t = 2307$

显示了空化现象产生、发展、溃灭的全过程.图 11 显示了整个模拟区域内气相格点数随演化时间变化曲线.

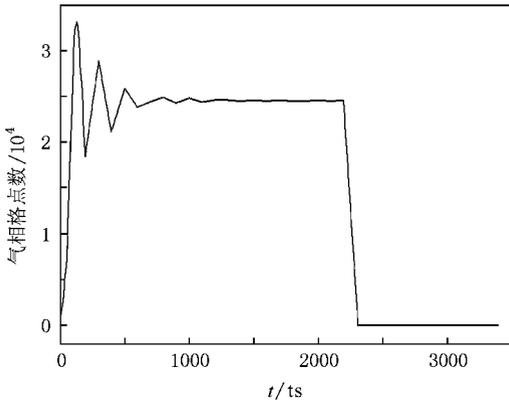


图 11 模拟区域气相格点数随模拟时间的变化 $\Delta P = -10$, $r = 7$

7. 结 论

基于 Shan-Chen 模型,本文将单组分多相流 LBM 应用于流体中三维空化现象的数值模拟,研究了低压下流体中气核半径与空化现象的相互关系.数值模拟结果和理论预测结果符合良好.当气核半径小于临界半径时,气核尺寸逐渐减小,直至消失;而当气核半径大于临界半径时,气核尺寸逐渐增大,产生空化现象.较大负压下,流体中较小尺寸的气核就能够不断增长,从而形成空化现象.基于 LBM 本身具有的优良特性,我们成功再现了低压下水体中微小气核发展成气泡的过程,并进一步研究了水体依次流经低压区、高压区时空化产生、发展、溃灭的全过程.数值模拟结果显示,LBM 是一种处理多相流的有效方法.

- [1] Ni H G 1993 *Bubble Nuclei-Cavitation-Cavitation Erosion*(Chengdu : Chengdu University of Technology Press)p7 (in Chinese)[倪汉根 1993 气核空化空蚀 (成都 : 成都科技大学出版社) 第 7 页]
- [2] Or D , Tuller M 2002 *Water Resource Res.* **38** 19
- [3] McNamara G R , Zanetti G 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 2332
- [4] Higuera F J , Jimenez J 1889 *Europhys. Lett.* **9** 663
- [5] Feng S D , Zhang Q , Ren R C 2001 *Acta Phys. Sin* **50** 1207 (in Chinese)[冯士德、张 琼、任荣彩 2001 物理学报 **50** 1207]
- [6] Zhang C Y , Li H B , Tan H L , Liu M R , Kong L J. 2005 *Acta Phys. Sin* **54** 1982 (in Chinese)[张超英、李华兵、谭惠丽、刘慕

- 仁、孔令江 2005 物理学报 **54** 1982]
- [7] Lu Y H , Zhan J M 2006 *Acta Phys. Sin* **55** 4774 (in Chinese)[卢玉华、詹杰民 2006 物理学报 **55** 4774]
- [8] Shan X , Chen H 1993 *Phys. Rev. E* **47** 1815
- [9] Frish U , Hasslacher B , Pomeau Y 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 1505
- [10] Chen S , Chen H , Martinez D , Matthaus W 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 3776
- [11] Qian Y H , D'Humières D , Lallemand P 1992 *Europhys. Lett.* **17** 479
- [12] Zou Q , He X 1997 *Phys. Fluids* **9** 1591

Three-dimensional cavitation simulation using lattice Boltzmann method^{*}

Zhang Xin-Ming^{1)†} Zhou Chao-Ying¹⁾ Islam Shams¹⁾ Liu Jia-Qi²⁾

1) *Shenzhen Graduate School, Harbin Institute of Technology, Shenzhen 518055, China*

2) *Department of Mathematics, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China*

(Received 17 December 2008 ; revised manuscript received 13 March 2009)

Abstract

The cavitation is a complex phenomenon which is microcosmic, transient, stochastic and multiphased. The extreme condition and related cavitation effects which the collapsed cavities generate will affect the liquid-vapor system greatly. In this article, we accurately simulate heterogeneous cavitation in liquid system with single component multiphase lattice Boltzmann model and successfully reproduce the complete cavitation process of a bubble: inception, growth and collapse. The relationship between the radius of bubble seed and cavitation for a specified tension has been investigated by lattice Boltzmann method simulations. The simulations show excellent agreement with energy considerations based on interface formation and bubble expansion.

Keywords : single component multiphase fluid, lattice Boltzmann method, three-dimensional cavitation

PACC : 4755K, 6470F

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of Guangdong Province, China (Grant No.07300059) and the Science Foundation for Postdoctor of China (Grant No.20080430930).

[†] E-mail: xinmingxueshu@hitsz.edu.cn