

基于格子 Boltzmann 方法的复杂管道中溶质输运特性研究*

赵勇^{1)2)#} 李林鑫^{1)2)#} 肖望^{1)2)#} 杨旭光^{3)4)†}

1) (长沙理工大学, 数学与统计学院, 湖南长沙 410114)

2) (长沙理工大学, 工程数学建模与分析湖南省重点实验室, 湖南长沙410114)

3) (湖南第一师范学院, 数学与统计学院, 湖南长沙410205)

4) (湖南第一师范学院, 大数据分析及应用湖南省普通高等学校重点实验室, 湖南长沙410205)

摘要

本文针对复杂管道中的溶质输运问题, 构建了一种通过源项重构对流项的高精度格子 Boltzmann 模型, 并将其应用于直管道、平行正弦管道和对称正弦管道中的溶质输运模拟。在固定雷诺数 $Re = 10$ 条件下, 系统研究了佩克莱数 Pe 和几何振幅 ε 对溶质云团截面平均浓度分布、质量加权平均速度及有效弥散系数的影响。Taylor-Aris 弥散算例表明, 本文模型计算得到的有效弥散系数与理论解吻合良好, 相对误差小于 0.1%。结果表明, 直管道中溶质云团保持较规则的轴向展布形态, Pe 主要通过改变有效弥散系数 D_{eff} 影响云团展宽和峰值浓度, 而对质量加权平均速度影响较弱。平行正弦管道中, 局部截面高度保持恒定, 增大 ε 仅使质量加权平均速度略有降低, 对截面平均浓度分布的影响较弱; 不同 Pe 下速度曲线基本重合, 说明 Pe 的作用主要体现在弥散展宽过程。对称正弦管道中, 局部截面高度沿流向周期变化, 收缩-扩张结构使浓度主峰滞后, 并降低质量加权平均速度, 表现出较平行正弦管道更强的几何调制作用。进一步, 基于 $10 \leq Pe \leq 120$ 、 $0.05 \leq \varepsilon \leq 0.3$ 范围内的数值结果, 建立了平行正弦管道中 D_{eff}/D 关于 Pe 和 ε 的经验关联式, 揭示了等截面中心线弯曲对 Taylor-Aris 弥散的量化调制机制。

关键词: 格子 Boltzmann, 溶质输运, 复杂管道, Taylor-Aris 弥散

1 引言

溶质在流体中的输运过程广泛存在于环境水力学、生物医学工程及能源开发等领域, 例如地下水中污染物的迁移弥散^[1]、微流控芯片内药物分子的精准输送^[2]以及化学反应器中的物质混合^[3]等。这类过程通常可由对流扩散方程^[4]与不可压 Navier-Stokes 方程^[5]联合描述。由于控制方程具有非线性和多场耦合等特点, 通常难以通过解析方法获得精确解。因此, 发展高精度数值方法以准确模拟溶质输运行为并揭示其内在物理机理, 具有重要的理论意义和应用价值。

同等贡献作者。

† 通信作者. E-mail: xuguang1988@163.com, ysfxuguang@hnfnu.edu.cn (杨旭光)

第一作者. E-mail: zhaoy@csust.edu.cn (赵勇)

* 长沙市杰出创新青年培养计划(批准号:kq2306023), 湖南省教育厅科学研究项目(批准号: 24B0310, 25A0666), 湖南省科技创新计划资助(批准号: 2024RC3228)和国家自然科学基金项目 (Nos.12302373, 12372286)资助。

目前, 针对此类问题的数值研究主要包括宏观数值方法, 如有限体积法^[6]和有限元法^[7], 以及介观数值方法, 如格子 Boltzmann 方法 (lattice Boltzmann method, LBM)^[8]。其中, LBM 凭借算法简洁、天然并行以及易于处理复杂几何边界等优势^[9], 在多孔介质渗流^[10]、多相流动^[11-13]及混溶输运等问题中展现出良好的应用前景。例如, Jin 等^[14]采用 LBM 模拟了粘性指进现象, Zhang 等^[15]基于孔隙尺度 LBM 研究了多孔介质中的可混相流体位移过程, Liu 等^[16,17]分别研究了高 Pe 数条件下的对流扩散过程和含溶解反应的驱替过程。此外, LBM 及其多分布函数形式也被拓展用于 Euler 方程等问题的数值求解^[18], 体现了该方法在不同类型控制方程中的适用性。

从碰撞模型角度看, LBM 可分为单松弛时间模型和多松弛时间模型。多松弛时间格子 Boltzmann 方法 (multiple-relaxation-time lattice Boltzmann method, MRT-LBM) 最早由 d'Humières^[19]提出, 随后 Lallemand 和 Luo^[20]对其色散、耗散、各向同性、Galilean 不变性和稳定性进行了系统分析。近年来, MRT-LBM 框架也被进一步推广到 Navier-Stokes 方程和非线性对流扩散方程等问题中^[21,22]。与单松弛时间模型相比, MRT-LBM 通过在矩空间中对不同物理模态采用不同松弛率, 能够提高模型的数值稳定性和参数调节灵活性。

尽管 LBM 在上述领域取得了较多应用, 但在对流扩散问题中, 传统速度相关平衡态模型可能会在恢复宏观方程时引入附加偏差^[23], 从而影响高精度输运模拟。为减小该类偏差, Huang 和 Wu^[24]将无散度速度场下的对流项作为源项处理, 将对流扩散方程转化为含源项的扩散方程, 并通过 Chapman-Enskog 多尺度展开证明模型能够恢复目标对流扩散方程。本文基于该源项重构对流项的建模思想, 构建适用于复杂管道溶质输运问题的高精度 MRT-LBM。同时, 为保持对流源项计算的局部性, 本文采用的局部源项计算格式可追溯至 Chai 和 Zhao 的相关工作^[25]。

为进一步检验该模型在复杂几何条件下的适用性, 本文将其应用于正弦管道中的溶质输运问题。自 Taylor^[26]和 Aris^[27]建立直圆管中轴向弥散理论以来, 相关研究已较为成熟; 然而, 对于正弦管道这类变截面几何, 溶质输运行为受流动结构与壁面几何的共同影响, 表现出更高的复杂性。Hoagland 和 Prud'homme^[28]分析了正弦管中的 Taylor-Aris 弥散, 指出管道振幅对有效弥散系数具有显著影响。近年来, Chang 和 Santiago^[29]进一步研究了任意形状轴对称通道中的 Taylor-Aris 弥散, 表明通道几何会显著影响溶质带的平均迁移位置和轴向展宽过程; Alexandre 等^[30]针对强起伏周期通道中的 Taylor 弥散建立了有效描述, 进一步说明几何起伏能够调制长时间漂移速度和有效弥散系数。此外, LBM 也被用于正弦通道内流动与传质过程的模拟, 例如 Yan 等^[31]研究了甲烷在正弦纳米通道中的弥散, Otomo 等^[32]模拟了正弦通道中残余油的位移过程。

然而, 已有研究多集中于正弦通道中的流动特性、特定传质过程或宏观弥散结果, 对不同几何调制方式下溶质云团瞬态输运机制的比较仍不充分。特别是, 对于局部截面高度周期变化的对称正弦管道和局部截面高度保持恒定的平行正弦管道, 几何调制对云团迁移速度、浓度展宽以及 Taylor-Aris 型有效弥散规律的影响是否具有本质差异, 目前仍缺乏系统讨论。

针对上述问题, 本文基于源项重构对流项的高精度 MRT-LBM, 研究直管道、对称正弦管道和平行正弦管道中的溶质输运行为。本文重点关注三个问题: 1) 所采用模型在复杂几何条件下对 Taylor-Aris 弥散的描述精度; 2) 变截面对称正弦管道与等截面平行正弦管道对溶质云团迁移和展宽的不同调制机制; 3) 平行正弦管道中有效弥散系数是否仍可表示为 Taylor-Aris 型 Pe^2 主导项与几何修正因子的组合形式。

全文结构安排如下：第 2 节介绍控制方程、无量纲化、数值模型、几何模型、边界条件与初始条件；第 3 节通过 Taylor–Aris 弥散算例验证模型精度并进行网格无关性分析；第 4 节对比三类管道中的溶质输运特性，重点讨论截面平均浓度、质量加权平均速度，第 5 节给出平行正弦管道中的有效弥散系数关联式；第 6 节总结全文。

2 数值方法与计算设置

2.1 控制方程

本文考虑不可压流体中被动溶质的对流–扩散输运问题。流场由不可压 Navier–Stokes 方程描述，溶质浓度场由对流–扩散方程控制。

流体流动满足不可压 Navier–Stokes 方程^[33]：

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (2)$$

式中， $\mathbf{u}$ 为流体速度， p 为压力， ν 为运动黏度， t 为时间。

溶质浓度 $C(\mathbf{x}, t)$ 的演化遵循对流扩散方程^[34]：

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C = \nabla \cdot (D \nabla C), \quad (3)$$

式中， C 为溶质浓度， $\mathbf{x}$ 为空间坐标， D 为分子扩散系数。

2.2 无量纲化

为揭示流动与输运的物理本质，并统一后续数值模拟的参数，对上述控制方程进行无量纲化。取管道平均高度 $L_y = 1.0$ 为特征长度，取截面平均速度 $\bar{U}$ 为特征速度，定义如下无量纲变量：

$$\mathbf{x}^* = \frac{\mathbf{x}}{L_y}, \quad t^* = \frac{t}{L_y/\bar{U}}, \quad \mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{\bar{U}}, \quad p^* = \frac{p}{\rho_0 \bar{U}^2}, \quad C^* = \frac{C}{C_0},$$

式中 $C_0 = 1.0$ ， $\rho_0 = 1.0$ 。将上述关系代入方程 (1)–(3)，得到无量纲控制方程组：

$$\nabla^* \cdot \mathbf{u}^* = 0,$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} + (\mathbf{u}^* \cdot \nabla^*) \mathbf{u}^* = -\nabla^* p^* + \frac{1}{Re} \nabla^{*2} \mathbf{u}^*,$$

$$\frac{\partial C^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* C^* = \frac{1}{Pe} \nabla^{*2} C^*,$$

其中，雷诺数 Re 和佩克莱数 Pe 分别定义为

$$Re = \frac{\bar{U} L_y}{\nu}, \quad Pe = \frac{\bar{U} L_y}{D},$$

其中 Re 表征惯性力与黏性力之比， Pe 表征对流输运与分子扩散之比，运动黏度取 $\nu = 0.001$ 。

后续数值模拟中，雷诺数固定为 $Re = 10$ ，体积力和运动黏度保持不变，因此不同 Pe 工况下的背景流场基本一致。本文通过改变分子扩散系数 D 调节 Pe ，从而考察不同 Pe 条件下溶质输运行为的变化。

2.3 流体流动的 MRT-LBM

本文采用二维九速 (D2Q9) 模型的 MRT-LBM^[35,36] 求解流场方程组(1)–(2)。其中分布函数 f_i 的演化方程为:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -(\mathbf{M}^{-1} \mathbf{S} [\mathbf{m}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{m}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)])_i + \delta_t \left(\mathbf{M}^{-1} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{2} \mathbf{S} \right) \hat{\mathbf{F}} \right)_i, \quad i = 0, 1, \dots, 8, \quad (4)$$

式中, $\mathbf{c}_i$ 为离散速度, 定义为 $\mathbf{c}_0 = (0, 0)$, $\mathbf{c}_1 = -\mathbf{c}_3 = (1, 0)$, $\mathbf{c}_2 = -\mathbf{c}_4 = (0, 1)$, $\mathbf{c}_5 = -\mathbf{c}_7 = (1, 1)$, $\mathbf{c}_6 = -\mathbf{c}_8 = (-1, 1)$; $\mathbf{c} = \delta_x / \delta_t$ 为格子速度, 其中 δ_x 为网格步长, δ_t 为时间步长; 在后续的格子 Boltzmann 模拟中, 所有计算均在格子单位 ($\delta_x = 1$, $\delta_t = 1$, $c = 1$) 下进行; $\mathbf{M}$ 为变换矩阵^[20], 其具体形式为

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

$\hat{\mathbf{F}}$ 为体积力^[37], 其具体形式为:

$$\hat{\mathbf{F}} = (0, 6\mathbf{u} \cdot \mathbf{F}, -6\mathbf{u} \cdot \mathbf{F}, F_x, -F_x, F_y, -F_y, 2(u_x F_x - u_y F_y), u_x F_y + u_y F_x)^T. \quad (6)$$

分布函数与矩空间变量满足

$$\mathbf{m} = \mathbf{M} \mathbf{f}, \quad (7)$$

D2Q9 的矩向量取为

$$\mathbf{m} = (\rho, e, \varepsilon, j_x, q_x, j_y, q_y, p_{xx}, p_{xy})^T, \quad (8)$$

式中, ρ 为密度, ρ_0 通常取 1, $j_x = \rho_0 u_x$, $j_y = \rho_0 u_y$ 为动量分量, 其余为非守恒矩。

对于不可压流动, 取 $\rho = \rho_0 + \delta\rho$, 平衡矩为

$$\mathbf{m}^{(eq)} = (\rho, -2\rho + 3\rho_0 |\mathbf{u}|^2, \rho - 3\rho_0 |\mathbf{u}|^2, \rho_0 u_x, -\rho_0 u_x, \rho_0 u_y, -\rho_0 u_y, \rho_0 (u_x^2 - u_y^2), \rho_0 u_x u_y)^T, \quad (9)$$

松弛矩阵取

$$\mathbf{S} = \text{diag}(s_0, s_e, s_\varepsilon, s_j, s_q, s_j, s_q, s_p, s_p), \quad (10)$$

并采用

$$s_e = s_\varepsilon = s_p = \frac{1}{\tau_f}, \quad s_q = \frac{8(2 - s_p)}{8 - s_p}. \quad (11)$$

运动黏度由剪切模态松弛率给出

$$\nu = c_s^2 \left(\frac{1}{s_p} - \frac{1}{2} \right) \delta_t = \frac{1}{3} \left(\tau_f - \frac{1}{2} \right) \delta_t. \quad (12)$$

宏观量的定义为

$$\rho_0 \mathbf{u} = \sum_i c_i f_i + \frac{\delta_t}{2} \mathbf{F}. \quad (13)$$

2.4 溶质运输的 MRT-LBM

本文基于将对流扩散方程转化为含源项扩散方程的思想，构建了相应的 MRT-LBM。在无散度速度场条件下，方程(3)可改写为纯扩散方程的形式：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla C) + q_c, \quad \text{其中} \quad q_c = -\mathbf{u} \cdot \nabla C.$$

由此，对流项由源项 q_c 表示，从而避免传统速度相关平衡态模型在恢复对流扩散方程时可能引入的附加偏差。

基于此，浓度分布函数 $g_i(\mathbf{x}, t)$ 的 MRT 演化方程定义为：

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta_t, t + \delta_t) - g_i(\mathbf{x}, t) = -(\mathbf{M}^{-1} \mathbf{S} [\mathbf{m}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{m}^{(eq)}(\mathbf{x}, t)])_i + \delta_t \left(\mathbf{M}^{-1} \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{S}}{2} \right) \mathbf{q}_m(\mathbf{x}, t) \right)_i, \quad i = 0, 1, \dots, 8, \quad (14)$$

其中 $\mathbf{g} = (g_0, \dots, g_8)^T$ ， $\mathbf{m} = \mathbf{M} \mathbf{g}$ 为矩向量， $\mathbf{S} = \text{diag}(s_0, s_e, s_\epsilon, s_j, s_q, s_j, s_q, s_v, s_v)$ 为松弛矩阵。平衡态矩 $\mathbf{m}^{(eq)}$ 仅与宏观浓度 C 相关，其形式为 $\mathbf{m}^{(eq)} = C(1, \alpha_1, \alpha_2, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^T$ 。 $\mathbf{q}_m$ 为矩空间中的离散源项向量，其作用是将宏观源项 q_c 引入演化方程，可构造为 $\mathbf{q}_m = q_c(1, \beta_1, \beta_2, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^T$ ，其中 β_1 和 β_2 为自由参数，通过 Chapman-Enskog 分析与模型其他参数关联。

宏观浓度通过下式计算：

$$C = \sum_{i=0}^8 g_i + \frac{\delta_t}{2} q_c. \quad (15)$$

为确保计算局部性并保持二阶精度，根据 Chapman-Enskog 分析结果，源项 q_c 可由分布函数构造为如下局部格式：

$$q_c = \frac{6}{4 + \alpha_1} \frac{s_j}{\delta_t} \mathbf{u} \cdot \sum_{i=0}^8 c_i g_i. \quad (16)$$

对应的分子扩散系数与模型参数的关系为：

$$D = \frac{4 + \alpha_1}{6} \left(\frac{1}{s_j} - \frac{1}{2} \right) \delta_t, \quad (17)$$

式中， α_1 为可调的自由参数， s_j 为松弛参数。

2.5 几何模型

本文考虑三种二维管道：直管道、平行正弦管道和对称正弦管道（见图 1）。三者平均高度一致，取值为 1；计算域长度取 $L_x = 30$ 。对正弦类管道取波长 $\lambda = 7.5$ 。



图 1 三类管道几何构型对比

Fig. 1. Comparison of three channel geometries

直管道：上下壁面为平行直线：

$$y_{\text{top}} = \frac{L_y}{2} + r_0, \quad (18)$$

$$y_{\text{bot}} = \frac{L_y}{2} - r_0, \quad (19)$$

其中 r_0 为管道半高，本文取 $r_0 = 0.5$ ，以保证三种管道的平均高度均为 1。

对称正弦管道：上下壁面相对于中心线 $y = L_y/2$ 反向起伏：

$$y_{\text{top}}(x) = \frac{L_y}{2} + \varepsilon \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) + r_0, \quad (20)$$

$$y_{\text{bot}}(x) = \frac{L_y}{2} - \varepsilon \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) - r_0, \quad (21)$$

通道高度 $h(x) = y_{\text{top}}(x) - y_{\text{bot}}(x) = 2r_0 + 2\varepsilon \sin(2\pi x/\lambda)$ 随 x 周期变化。

平行正弦管道：上下壁面间距恒为 L_y ，中心线沿流向周期偏移：

$$y_{\text{top}}(x) = \frac{L_y}{2} + \varepsilon \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) + r_0, \quad (22)$$

$$y_{\text{bot}}(x) = \frac{L_y}{2} + \varepsilon \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) - r_0, \quad (23)$$

对应中心线

$$y_c(x) = \frac{L_y}{2} + \varepsilon \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right). \quad (24)$$

2.6 边界条件与初始条件

本文首先给出物理问题的边界条件。对于三类管道，固体壁面处流体速度满足无滑移条件，浓度场满足无通量条件；流向两端采用周期性边界条件，即速度场和浓度场在入口与出口处周期连接。流体由体积力驱动。

在 LBM 计算中，壁面无滑移速度边界条件采用标准反弹格式实现，浓度场的壁面无通量边界条件同样采用标准反弹格式实现，流向两端采用周期性边界处理^[38]。反弹类边界格式是 LBM 中常用的壁面边界处理方法，其改进形式可进一步提高不可压 LBM 模型的边界处理精度^[39]。对于直管道和对称正弦管道，体力取为

$$\mathbf{F} = (G, 0),$$

其中 $G = 1.2 \times 10^{-4}$ 。对于平行正弦管道，为保证驱动力方向与管道中心线切向一致，将体力分解为

$$F_x = G \frac{1}{\sqrt{1 + (dy_c/dx)^2}}, \quad F_y = G \frac{dy_c/dx}{\sqrt{1 + (dy_c/dx)^2}}, \quad (25)$$

其中 $y_c(x)$ 表示平行正弦管道的中心线。

参考 Zhang 等^[15]的方法，浓度场初值设为

$$C(x, y, 0) = \begin{cases} 1, & 0 < x \leq 1.68, \\ 0, & \text{其他}, \end{cases} \quad (26)$$

用于描述初始时刻局域分布的溶质云团。

3 数值模拟与分析

3.1 精度测试

为验证本文数值模型的计算精度，本文选取平板泊肃叶流中的 Taylor–Aris 弥散作为基准算例。Taylor 和 Aris 的经典理论表明，当溶质在充分发展的剪切流中输运足够长时间后，其截面平均浓度沿流向的展宽过程可以由有效弥散系数 D_{eff} 表征^[26,27]。对于平板泊肃叶流， D_{eff} 与分子扩散系数 D 满足如下关系^[15,40]：

$$\frac{D_{\text{eff}}}{D} = 1 + \frac{Pe^2}{210}, \quad (27)$$

数值计算中， D_{eff} 由溶质云团轴向方差随时间的增长率确定。轴向方差定义为

$$\sigma_x^2(t) = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2, \quad (28)$$

其中

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\int_{\Omega} x^2 C d\Omega}{\int_{\Omega} C d\Omega}, \quad \langle x \rangle = \frac{\int_{\Omega} x C d\Omega}{\int_{\Omega} C d\Omega}. \quad (29)$$

有效弥散系数可表示为

$$D_{\text{eff}} = \frac{1}{2} \frac{d\sigma_x^2(t)}{dt}. \quad (30)$$

表 1 给出了不同 Pe 条件下本文模型与文献模型^[15]中的对流扩散 LBM 计算结果的对比。可以看出，本文模型计算得到的 $D_{\text{eff,N}}/D$ 与理论值 $D_{\text{eff,th}}/D$ 吻合良好，相对误差均小于 0.1%。

表 1 不同模型计算有效弥散系数的对比

Table 1. Comparison of effective dispersion coefficients calculated by different models.

Pe	文献模型 ^[15]			本文模型		
	$D_{\text{eff,N}}/D$	$D_{\text{eff,th}}/D$	误差 (%)	$D_{\text{eff,N}}/D$	$D_{\text{eff,th}}/D$	误差 (%)
10	1.4729	1.4771	0.28	1.4758	1.4771	0.088
50	12.8646	12.9063	0.32	12.8963	12.9063	0.077
120	69.3750	69.5750	0.29	69.5395	69.5750	0.051

3.2 网格无关性

为进一步验证数值结果的可靠性, 本文以对称正弦管道为例进行网格无关性检验。选取几何振幅 $\varepsilon = 0.15$, 并取 $Pe = 50$, 分别采用 $N_y = 24, 48, 60, 72$ 四组网格进行计算, 对应的流向网格数分别为 $N_x = 720, 1440, 1800, 2160$ 。在无量纲时间 $t^* = 8.33$ 时, 对比不同网格下的截面平均浓度分布 $\bar{C}(x, t)$, 结果如图 2 所示。

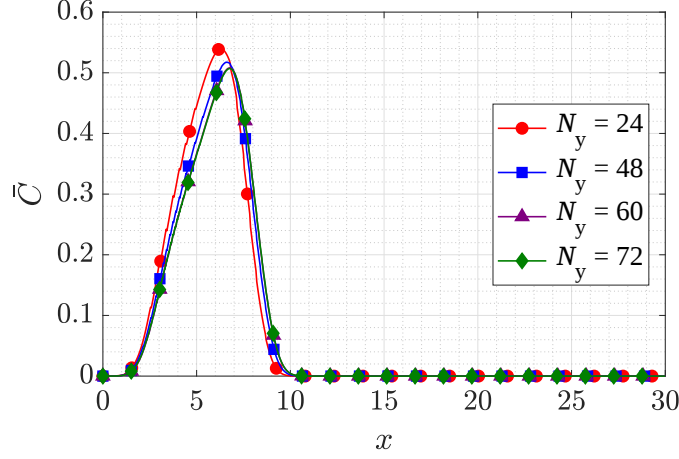


图 2 对称正弦管道网格无关性测试

Fig. 2. Grid independence test for symmetric sinusoidal channel

由图 2 可以看出, 当 $N_y = 24$ 和 48 时, 所得截面平均浓度曲线仍存在较明显差异; 而当网格加密至 $N_y = 60$ 后, 计算结果与 $N_y = 72$ 已基本重合, 说明此时网格离散误差已显著减小, 进一步加密网格对结果影响较小。综合计算精度与计算代价, 后续数值模拟统一采用 $N_y = 60$ (对应 $N_x = 1800$) 作为计算网格。

4 数值结果与分析

为定量刻画溶质云团的输运特征, 本文引入以下物理量。截面平均浓度 $\bar{C}(x, t)$ 用于表征溶质沿流向的轴向分布, 其定义为

$$\bar{C}(x, t) = \frac{1}{h(x)} \int_{y_{\text{bot}}(x)}^{y_{\text{top}}(x)} C(x, y, t) dy, \quad h(x) = y_{\text{top}}(x) - y_{\text{bot}}(x), \quad (31)$$

其中, $h(x)$ 为局部截面高度。

质量加权平均速度 $\bar{V}_x(t)$ 用于表征溶质云团整体沿 x 方向的输运速度, 其定义为

$$\bar{V}_x(t) = \frac{\int_{\Omega} u_x(\mathbf{x}, t) C(\mathbf{x}, t) d\Omega}{\int_{\Omega} C(\mathbf{x}, t) d\Omega}, \quad (32)$$

其中, Ω 为流体区域, $u_x(\mathbf{x}, t)$ 为流体速度在 x 方向的分量。

以下分析均在固定雷诺数 $Re = 10$ 条件下进行, 佩克莱数 Pe 的变化范围为 10–120。

4.1 直管道

直管道作为无几何起伏的基准构型，用于考察泊肃叶流场中 Pe 对溶质云团轴向输运行为的影响。由于直管道中不存在由壁面起伏引起的局部收缩、扩张或流向偏折，溶质云团的轴向展宽主要来源于分子扩散与泊肃叶速度剪切的共同作用，即 Taylor-Aris 有效弥散。

4.1.1 截面平均浓度

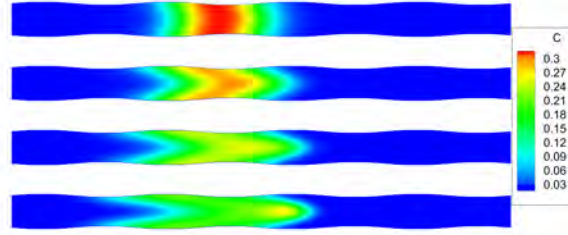


图 3 不同 Pe 下直管道的浓度云图（从上到下 $Pe = 10, 50, 80, 120$, $t = 80000$ ）

Fig. 3. Concentration contours in a straight channel at different Pe (from top to bottom: $Pe = 10, 50, 80, 120$; $t = 80000$).

图 3 给出了 $t = 80000$ 时不同 Pe 下直管道的浓度云图。可以看出，溶质云团在直管道中保持较规则的轴向展布形态，未出现由几何起伏引起的局部滞留或明显偏转。这说明在无几何扰动的直管道中，溶质云团的轴向输运主要受泊肃叶速度剪切与分子扩散共同诱导的 Taylor-Aris 弥散控制。

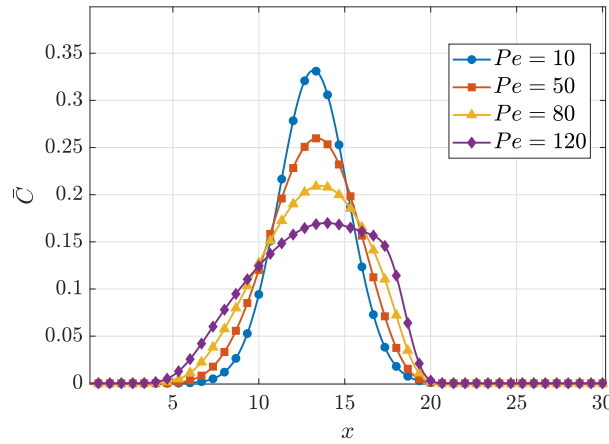


图 4 不同 Pe 下直管道的截面平均浓度分布（ $t = 80000$ ）

Fig. 4. Cross-sectionally averaged concentration profiles in a straight channel at different Pe ($t = 80000$).

图 4 进一步给出了对应的截面平均浓度分布。由图可见， $Pe = 10$ 时浓度曲线最为集中，峰值浓度最高；当 Pe 增大至 50, 80, 120 时，浓度峰值逐渐降低，曲线沿流向展宽，该现象可由式 (27) 解释。

由于本文在固定 $\bar{U}$ 和 L_y 条件下通过改变分子扩散系数 D 调节 Pe ，由 $D = \bar{U}L_y/Pe$ 可得

$$D_{\text{eff}} = \bar{U}L_y \left(\frac{1}{Pe} + \frac{Pe}{210} \right). \quad (33)$$

由式 (33) 可知, D_{eff} 在 $Pe = \sqrt{210} \approx 14.5$ 附近取得最小值。在本文选取的四个工况中, $Pe = 10$ 接近该区间, 因此云团展宽较弱、峰值浓度较高; 而 $Pe = 50, 80, 120$ 均位于较大 Pe 区间, 随着 Pe 增大, 剪切诱导弥散贡献增强, 导致云团轴向展宽加剧、峰值浓度降低。

因此, 直管道中 Pe 对浓度分布的影响主要通过有效弥散系数 D_{eff} 体现, 即 Pe 改变 D_{eff} , 进而影响溶质云团的轴向展宽和峰值浓度。

4.1.2 质量加权平均速度

图 5 给出了由式 (32) 计算得到的质量加权平均速度 $\bar{V}_x(t)$ 随时间的演化规律。可以看出, 不同 Pe 下的 $\bar{V}_x(t)$ 曲线几乎重合, 均在初始阶段迅速增大, 并随后逐渐趋于稳定, 稳定后约为 9.8×10^{-3} 。这是因为本文在固定 Re 、固定体积力和固定运动黏度条件下, 通过改变分子扩散系数 D 调节 $Pe = \bar{U}L_y/D$, 不同 Pe 工况对应的背景泊肃叶流场基本一致。因此, Pe 的变化主要通过有效弥散系数 D_{eff} 影响云团展宽和峰值浓度, 而不会明显改变溶质云团的质量加权平均速度。

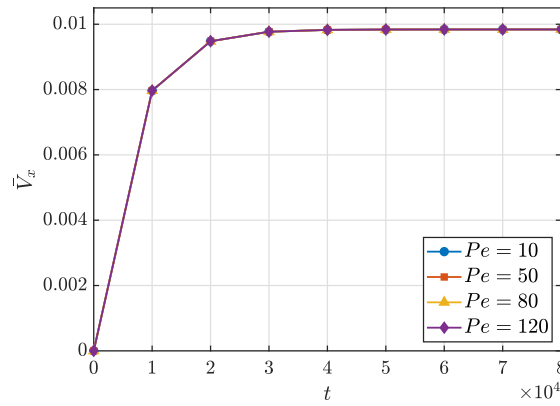


图 5 不同 Pe 下直管道的溶质云团质量加权平均速度演化

Fig. 5. Evolution of the mass-weighted average velocity of the solute cloud in a straight channel at different Pe .

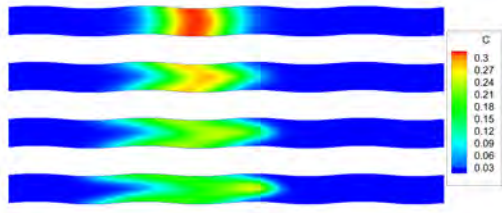
综上, 直管道中不存在几何起伏, Pe 对浓度分布的影响主要体现为有效弥散系数 D_{eff} 的变化, 而对质量加权平均速度的影响较弱。因此, 直管道结果可作为后续复杂管道输运分析的基准。

4.2 平行正弦管道

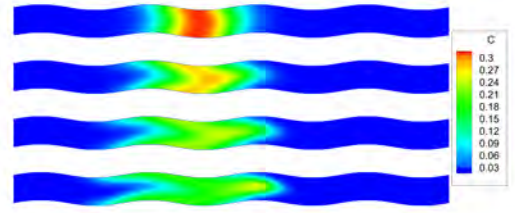
平行正弦管道的上下壁面沿流向同步偏移, 局部截面高度 $h(x)$ 保持恒定, 仅中心线发生周期性弯曲。因此, 与对称正弦管道中的收缩-扩张结构不同, 平行正弦管道主要用于考察等截面中心线弯曲对溶质输运的影响。

4.2.1 截面平均浓度

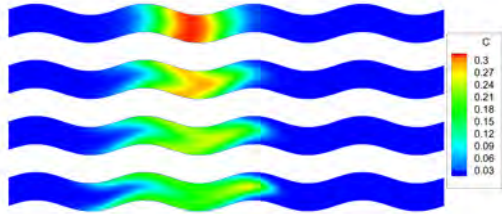
图 6 给出了 $t = 80000$ 时不同 ε 与 Pe 组合下平行正弦管道的浓度云图。可以看出, 溶质云团整体随管道中心线弯曲发生空间偏转, 但其轴向分布形态仍较为规则, 未出现明显的局部滞留或高浓度区突变。随着 ε 增大, 管道弯曲程度增强, 云团的横向摆动更加明显; 但在相同 Pe 下, 不同 ε 对应的浓度高值区沿轴向的位置变化较小, 说明等截面中心线弯曲对浓度轴向分布的影响相对较弱。



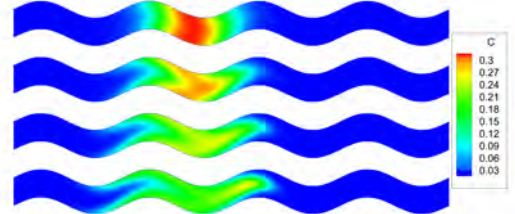
(a) ($\varepsilon = 0.05$, $Pe = 10, 50, 80, 120$, 从上到下)



(b) ($\varepsilon = 0.1$, $Pe = 10, 50, 80, 120$, 从上到下)



(c) ($\varepsilon = 0.2$, $Pe = 10, 50, 80, 120$, 从上到下)



(d) ($\varepsilon = 0.3$, $Pe = 10, 50, 80, 120$, 从上到下)

图 6 不同 ε 与 Pe 组合下平行正弦管道的浓度云图 ($t = 80000$)

Fig. 6. Concentration contours in a parallel sinusoidal channel at $t = 80000$ for different ε and Pe .

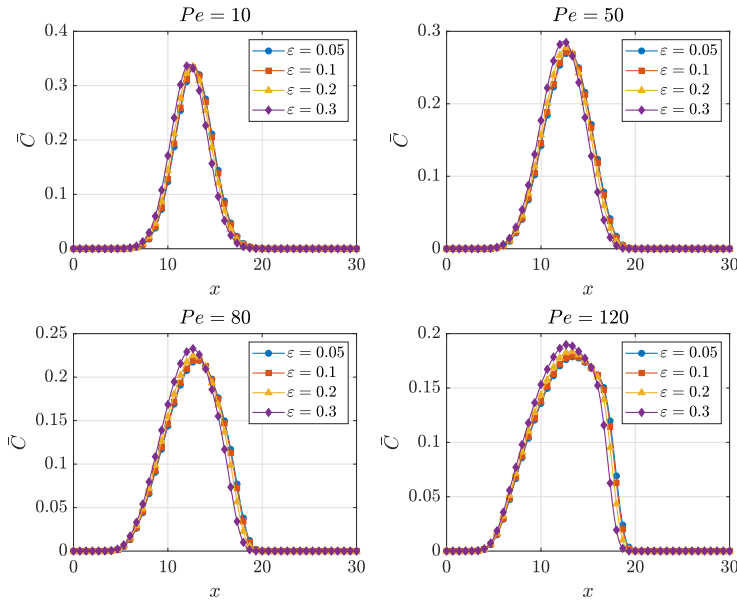


图 7 不同 ε 下平行正弦管道的截面平均浓度分布 ($t = 80000$)

Fig. 7. Cross-sectionally averaged concentration profiles in a parallel sinusoidal channel at different ε ($t = 80000$).

图 7 给出了固定 Pe 时不同 ε 下的截面平均浓度分布。可以看出，在 $Pe = 10, 50, 80, 120$ 四个工况下，不同 ε 对应的曲线基本重合，仅在峰值位置和峰值高度上存在轻微差异。这进一步说明，在局部截面高度保持恒定的平行正弦管道中，增大振幅主要改变云团所经历的弯曲路径，而不会明显改变截面平均浓度的轴向分布形态。图 8 给出了固定 ε 时不同 Pe 下的截面平均浓度分布。与振幅

作用较弱的结果不同， Pe 对浓度曲线的影响更加明显： $Pe = 10$ 时浓度峰值较高、分布较集中；当 Pe 增大至 50, 80, 120 时，浓度峰值逐渐降低，曲线沿轴向展宽。该规律与直管道中的 Taylor–Aris 弥散特征一致，说明在平行正弦管道中， Pe 主要通过改变有效弥散系数 D_{eff} 影响云团的轴向展宽和峰值浓度，而 ε 对截面平均浓度分布的直接影响相对较弱。

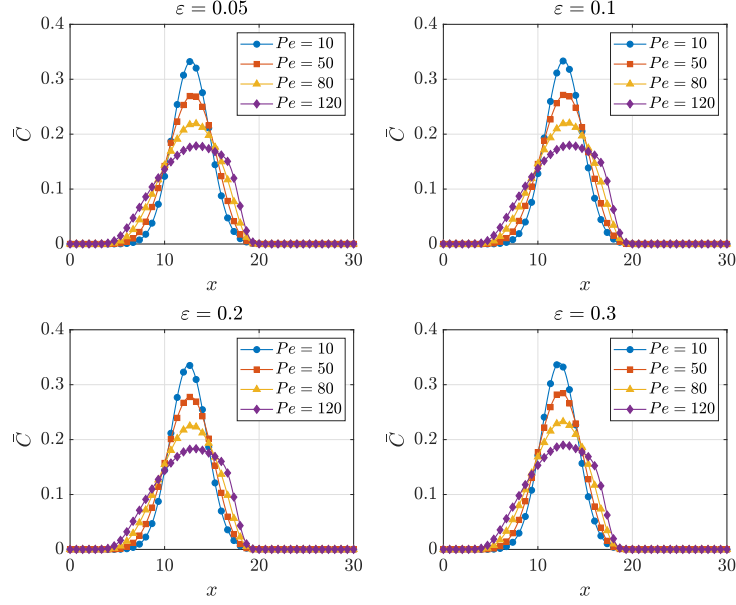


图 8 不同 Pe 下平行正弦管道的截面平均浓度分布 ($t = 80000$)

Fig. 8. Cross-sectionally averaged concentration profiles in a parallel sinusoidal channel at different Pe ($t = 80000$).

4.2.2 质量加权平均速度

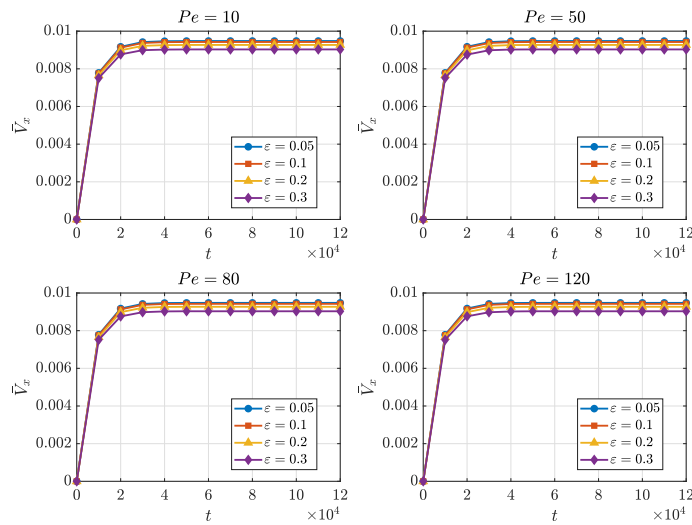


图 9 不同 ε 下平行正弦管道的溶质云团质量加权平均速度演化

Fig. 9. Evolution of the mass-weighted average velocity of the solute cloud in a parallel sinusoidal channel at different ε .

图 9 给出了固定 Pe 时不同 ε 下质量加权平均速度 $\bar{V}_x(t)$ 的演化规律。可以看出，各工况下 $\bar{V}_x(t)$ 均在初始阶段迅速增大，并随后逐渐趋于稳定。随着 ε 增大，稳定后的 $\bar{V}_x$ 略有降低。这是因为平行正弦管道中体力沿中心线切向施加，局部流动方向随中心线弯曲而发生偏转，使溶质云团的整体轴向迁移速度略有减小。

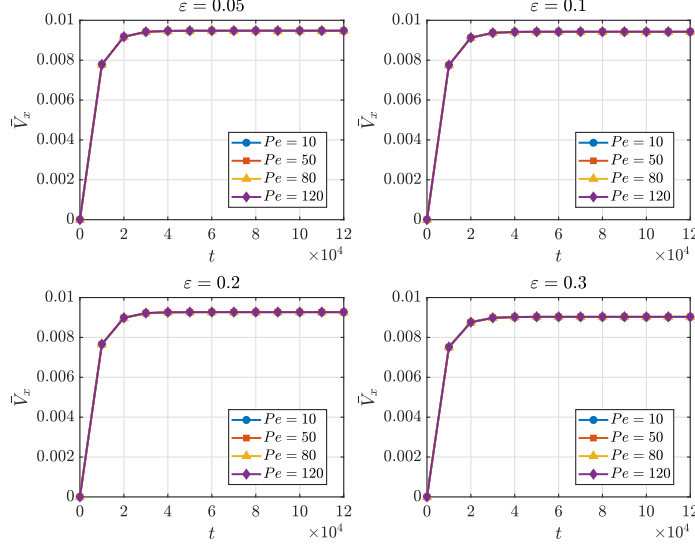


图 10 不同 Pe 下平行正弦管道的溶质云团质量加权平均速度演化

Fig. 10. Evolution of the mass-weighted average velocity of the solute cloud in a parallel sinusoidal channel at different Pe .

图 10 给出了固定 ε 时不同 Pe 下的 $\bar{V}_x(t)$ 演化。可以看出，在每一个固定振幅下， $Pe = 10, 50, 80, 120$ 对应的速度曲线几乎重合，并在后期收敛到相近的稳定水平。因此， Pe 的变化主要影响溶质云团的弥散展宽过程。

综上，平行正弦管道中局部截面高度保持恒定，振幅 ε 对截面平均浓度分布的影响较弱，仅使质量加权平均速度随中心线弯曲程度增加而略有降低；相比之下， Pe 主要通过有效弥散系数 D_{eff} 影响云团的轴向展宽和峰值浓度，而同样对质量加权平均速度几乎无影响。

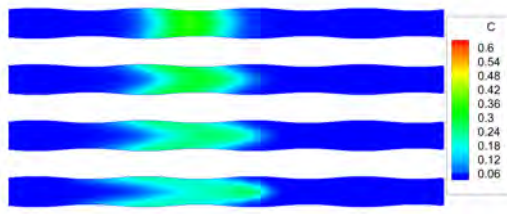
4.3 对称正弦管道

对称正弦管道的上下壁面相对于中心线反向起伏，使局部截面高度 $h(x)$ 沿流向周期性变化，从而形成交替出现的收缩区与扩张区。与直管道和平行正弦管道相比，该构型不仅改变了壁面形状，还引入了沿程截面面积的周期调制。因此，对称正弦管道可用于考察变截面结构对溶质云团迁移、聚集和展宽行为的影响。

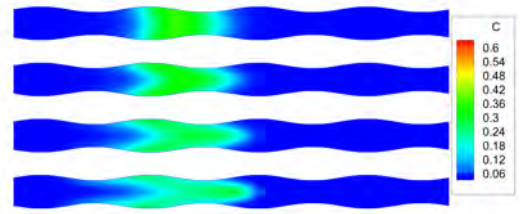
4.3.1 截面平均浓度

图 11 给出了 $t = 80000$ 时不同 ε 与 Pe 组合下对称正弦管道的浓度云图。可以看出，溶质云团不再保持直管道中的规则轴向分布，而是受到周期性收缩-扩张结构的调制。随着 ε 增大，局部截面高度变化增强，浓度高值区整体滞后，并更容易集中在收缩区、扩张区或其过渡区域附近。特别是当 $\varepsilon = 0.2$ 和 $\varepsilon = 0.3$ 时，主峰滞后现象更加明显，说明变截面结构会抑制溶质云团的整体轴向迁

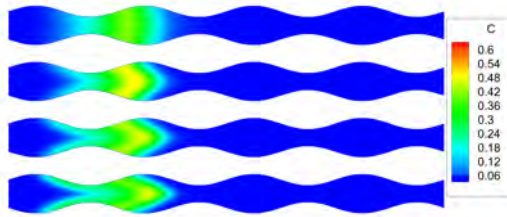
移。



(a) ($\varepsilon = 0.05$, $Pe = 10, 50, 80, 120$, 从上到下)



(b) ($\varepsilon = 0.1$, $Pe = 10, 50, 80, 120$, 从上到下)



(c) ($\varepsilon = 0.2$, $Pe = 10, 50, 80, 120$, 从上到下)



(d) ($\varepsilon = 0.3$, $Pe = 10, 50, 80, 120$, 从上到下)

图 11 不同 ε 与 Pe 组合下对称正弦管道的浓度云图 ($t = 80000$)

Fig. 11. Concentration contours in a symmetric sinusoidal channel at $t = 80000$ for different ε and Pe .

图 12 给出了固定 Pe 时不同 ε 下的截面平均浓度分布。可以看出，在各个 Pe 条件下，随着 ε 从 0.05 增大至 0.3，浓度主峰均出现滞后。小振幅条件下， $\varepsilon = 0.05$ 和 $\varepsilon = 0.1$ 对应的曲线位置较为接近；而当 ε 增大至 0.2 和 0.3 时，主峰位置明显后移，峰值浓度也发生较大变化。这表明振幅增大会增强局部收缩-扩张结构对溶质云团位置和浓度分布的影响。

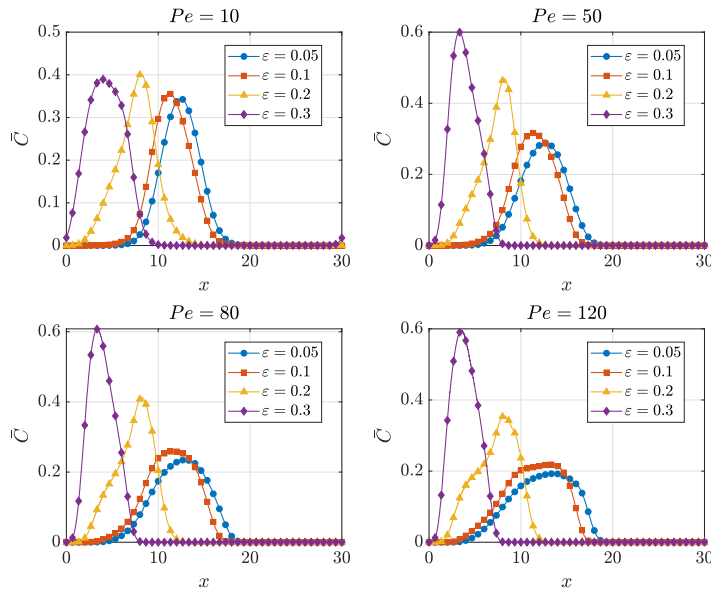


图 12 不同 ε 下对称正弦管道的截面平均浓度分布 ($t = 80000$)

Fig. 12. Cross-sectionally averaged concentration profiles in a symmetric sinusoidal channel for different ε at $t = 80000$.

图 13 给出了固定 ε 时不同 Pe 下的截面平均浓度分布。可以看出，在较小振幅 $\varepsilon = 0.05$ 和 $\varepsilon = 0.1$ 下，浓度分布仍表现出与直管道相近的弥散特征，即 $Pe = 10$ 时云团较为集中，而 $Pe = 50, 80, 120$ 时曲线沿轴向展宽、峰值降低。当振幅增大至 $\varepsilon = 0.2$ 和 $\varepsilon = 0.3$ 时，局部收缩-扩张结构对浓度分布的影响增强，不同 Pe 下曲线差异更加复杂，表明 Pe 的作用会与变截面几何效应相互耦合。

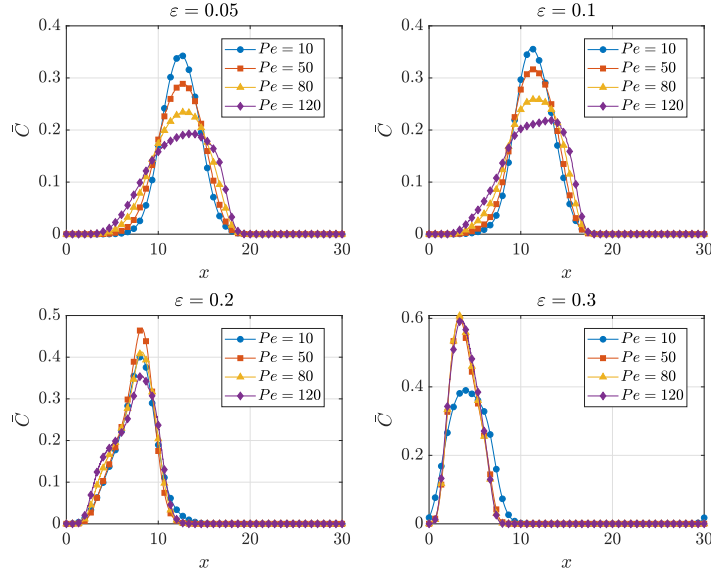


图 13 不同 Pe 下对称正弦管道的截面平均浓度分布 ($t = 80000$)

Fig. 13. Cross-sectionally averaged concentration profiles in a symmetric sinusoidal channel for different Pe at $t = 80000$.

4.3.2 质量加权平均速度

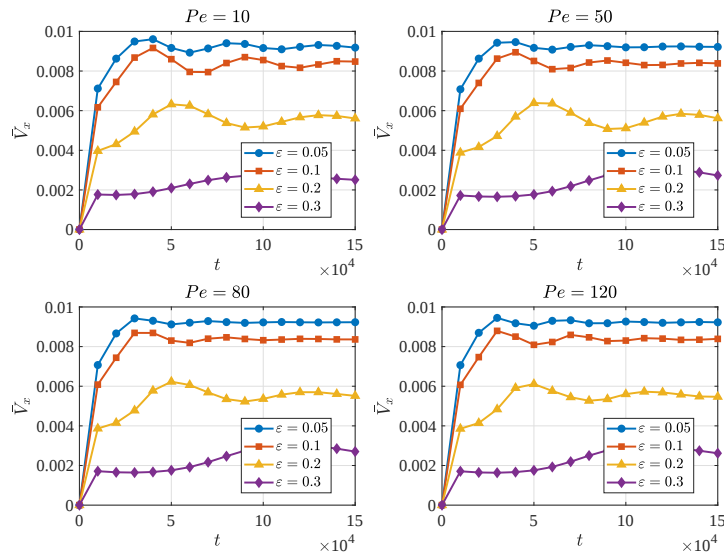


图 14 不同 ε 下对称正弦管道的溶质云团质量加权平均速度演化

Fig. 14. Evolution of the mass-weighted average velocity of the solute cloud in a symmetric sinusoidal channel at different ε .

图 14 给出了固定 Pe 时不同 ε 下质量加权平均速度 $\bar{V}_x(t)$ 的演化规律。可以看出，各工况下 $\bar{V}_x(t)$ 均在初始阶段迅速增大，随后进入受几何结构持续调制的演化阶段。随着 ε 增大， $\bar{V}_x(t)$ 的整体水平降低，并在后期保持一定波动。这表明振幅是影响对称正弦管道中溶质云团整体轴向迁移速度的主要几何参数。

图 15 给出了固定 ε 时不同 Pe 下的 $\bar{V}_x(t)$ 演化。可以看出，在给定振幅下，不同 Pe 对应的速度曲线整体较为接近，说明相较于几何振幅， Pe 对质量加权平均速度的影响较弱。对于 $\varepsilon = 0.05$ 和 $\varepsilon = 0.1$ ，不同 Pe 下的曲线几乎重合；当 $\varepsilon = 0.2$ 和 $\varepsilon = 0.3$ 时，曲线之间出现一定差异，但仍小于不同振幅之间的差异。因此，在对称正弦管道中， Pe 主要通过改变云团展宽范围间接影响其质量加权平均速度，而不是决定整体速度水平的主导因素。

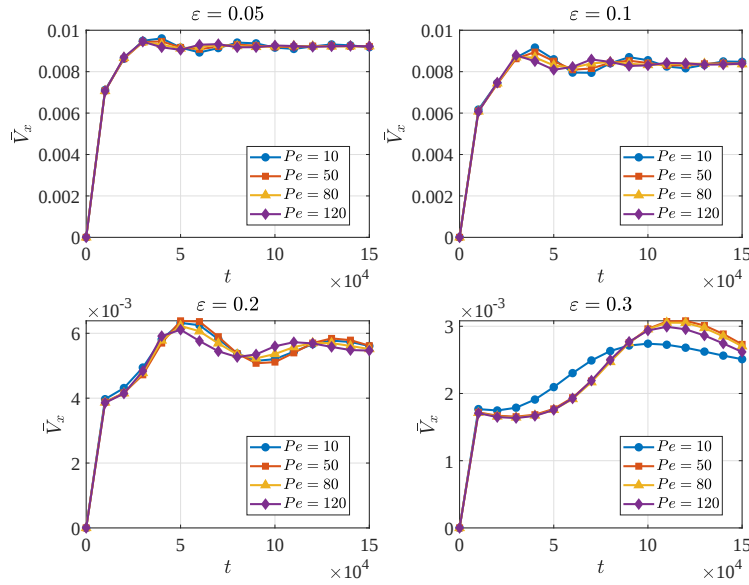


图 15 不同 Pe 下对称正弦管道的溶质云团质量加权平均速度演化

Fig. 15. Evolution of the mass-weighted average velocity of the solute cloud in a symmetric sinusoidal channel at different Pe .

综上，对称正弦管道中局部截面高度沿流向周期性变化，收缩-扩张结构会使浓度主峰滞后，并明显降低质量加权平均速度。与平行正弦管道相比，对称正弦管道中的变截面结构引入了更强的几何调制作用，使 Pe 对浓度分布的影响与局部截面变化发生耦合。因此，本文将对称正弦管道作为变截面几何对照，而不进一步建立其峰值浓度或瞬时速度的经验拟合关系。

5 有效弥散系数及经验关联式

有效弥散系数 D_{eff} 是表征溶质云团轴向展宽强度的重要物理量。为进一步定量分析不同管道中的弥散行为，本文根据式 (30) 由轴向方差 σ_x^2 的增长率计算 D_{eff} 。

图 16 给出了三种管道中溶质云团轴向方差 σ_x^2 随时间的演化规律。

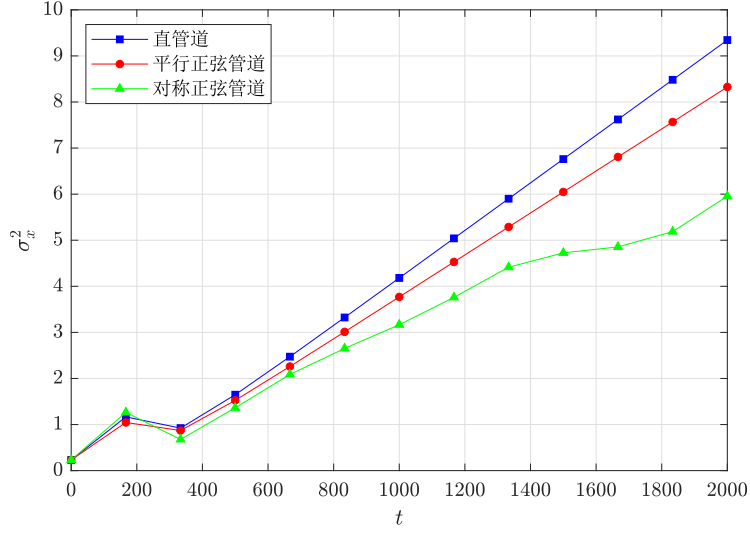


图 16 不同管道中溶质云团轴向方差随时间的演化

Fig. 16. Temporal evolution of the axial variance of the solute cloud in different channel geometries.

由图 16 可以看出, 经过初始过渡阶段后, 直管道和平行正弦管道中的 σ_x^2 随时间近似线性增长, 说明溶质云团进入相对稳定的轴向弥散阶段, 可通过方差增长率提取有效弥散系数。相比之下, 对称正弦管道中的 σ_x^2 在相同时间范围内仍表现出明显的非线性增长, 说明局部收缩-扩张结构仍持续影响云团展宽过程。因此, 后续重点分析平行正弦管道中 D_{eff}/D 与 Pe 、 ε 的关系, 并建立相应的经验关联式。

由于直管道中的有效弥散系数已有经典 Taylor-Aris 理论描述, 而对称正弦管道中局部截面高度沿流向周期变化, 溶质输运受到收缩-扩张结构和局部速度非均匀性的共同影响, 难以用单一几何修正因子描述。相比之下, 平行正弦管道的局部截面高度保持恒定, 几何效应主要来自中心线弯曲和流路延长, 因此更适合在 Taylor-Aris 弥散关系基础上建立经验修正模型。基于此, 本文重点拟合平行正弦管道中 D_{eff}/D 与 Pe 、 ε 的关系。

考虑到 Taylor-Aris 弥散关系中常数项 1 对应分子扩散贡献, 而 $Pe^2/210$ 项表征剪切诱导弥散贡献, 本文仅对 Pe^2 主导项引入与振幅有关的几何修正因子 $f(\varepsilon)$, 即

$$\frac{D_{\text{eff}}}{D} = 1 + \frac{Pe^2}{210} f(\varepsilon), \quad (34)$$

其中

$$f(\varepsilon) = \frac{1 + 174771.14\varepsilon + 3119300.13\varepsilon^2}{1 + 192723.07\varepsilon + 3508807.67\varepsilon^2 + 5949193.88\varepsilon^4}. \quad (35)$$

图 17 给出了数值结果与拟合曲面的对比。黑色散点为由方差增长率计算得到的数值结果, 彩色曲面为式 (34) 的拟合结果。

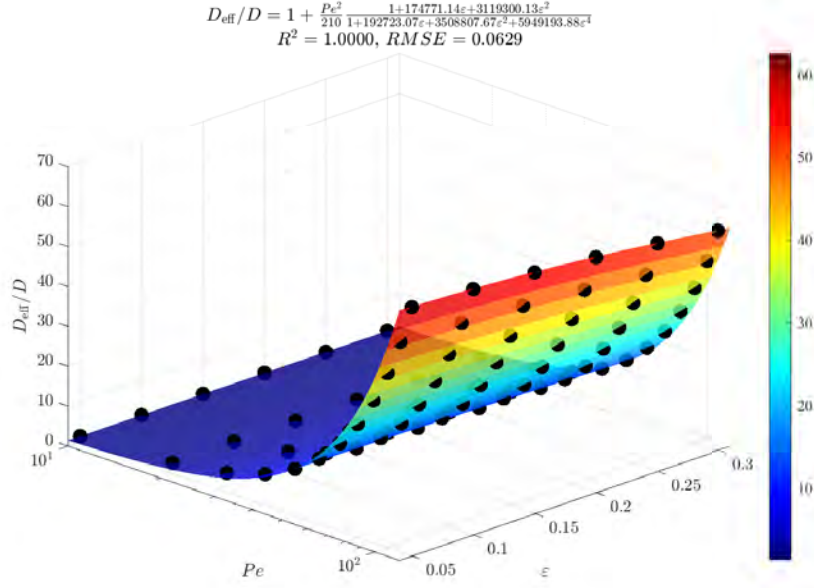


图 17 平行正弦管道中 D_{eff}/D 随 Pe 和 ϵ 的变化及拟合结果

Fig. 17. Variation of D_{eff}/D with Pe and ϵ in a parallel sinusoidal channel and the corresponding fitting result.

可以看出，拟合曲面与数值数据吻合较好，拟合决定系数在保留四位小数时为 $R^2 = 1.0000$ ，均方根误差为 $RMSE = 0.0629$ 。该结果表明，在本文参数范围内，平行正弦管道中的有效弥散系数仍可表示为 Taylor-Aris 型 Pe^2 主导项与振幅修正因子的组合形式。也就是说，等截面中心线弯曲主要通过 $f(\epsilon)$ 对剪切诱导弥散贡献进行修正。

需要指出的是，式 (34) 为基于本文数值结果得到的经验关联式，其适用范围为

$$10 \leq Pe \leq 120, \quad 0.05 \leq \epsilon \leq 0.3.$$

6 结论

本文基于源项重构对流项的思想，构建了适用于复杂管道溶质输运问题的高精度 MRT-LBM，并在固定雷诺数 $Re = 10$ 条件下，研究了佩克莱数 Pe 和几何振幅 ϵ 对直管道、平行正弦管道和对称正弦管道中溶质输运行为的影响。Taylor-Aris 弥散算例表明，本文模型计算得到的有效弥散系数与理论解吻合良好，相对误差小于 0.1%，验证了模型的准确性。主要结论如下：

1. 直管道中，溶质云团保持较规则的轴向展布形态。由于不存在几何起伏， Pe 对质量加权平均速度的影响较弱，而主要通过改变有效弥散系数 D_{eff} 影响云团的轴向展宽和峰值浓度。在本文选取的参数范围内，浓度分布的变化应由 D_{eff} 统一表征，而不能仅由分子扩散系数 D 解释。
2. 平行正弦管道中，局部截面高度保持恒定，仅中心线发生周期性弯曲。数值结果表明，振幅 ϵ 对截面平均浓度分布的影响较弱，不同 ϵ 下浓度曲线差异较小； Pe 则主要通过有效弥散系数影响云团的轴向展宽和峰值浓度。同时，质量加权平均速度对 Pe 不敏感，仅随 ϵ 增大而小幅降低。

3. 对称正弦管道中，局部截面高度沿流向周期性变化，收缩-扩张结构对溶质云团输运产生更强影响。随着 ε 增大，浓度主峰出现滞后，质量加权平均速度显著降低并在后期保持一定波动。与平行正弦管道相比，变截面结构会引入更强的局部速度非均匀性和几何调制作用。
4. 基于轴向方差增长率，本文进一步提取了平行正弦管道中的有效弥散系数，并在 $10 \leq Pe \leq 120$ 、 $0.05 \leq \varepsilon \leq 0.3$ 范围内建立了 D_{eff}/D 的经验关联式。结果表明，平行正弦管道中的有效弥散系数仍可表示为 Taylor-Aris 型 Pe^2 主导项与振幅修正因子的组合形式，说明等截面中心线弯曲主要通过几何修正因子对剪切诱导弥散贡献进行定量修正。

总体而言，对称正弦管道中的变截面结构主要通过收缩-扩张效应改变云团迁移速度和局部浓度分布，而平行正弦管道中的等截面中心线弯曲主要对 Taylor-Aris 型有效弥散进行修正。两类正弦管道体现了不同几何调制方式对溶质输运行为的影响差异。

附录 A Chapman-Enskog 多尺度展开

本文采用的 Chapman-Enskog 多尺度展开基于源项重构对流项的思想^[24]，并结合本文所采用的 MRT-LBM 和符号体系整理如下。

对式 (14) 作 Taylor 展开，并写入矩空间，可得

$$(I\partial_t + \mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{m} + \frac{\delta_t}{2} (I\partial_t + \mathbf{E} \cdot \nabla)^2 \mathbf{m} = -\frac{\mathbf{S}}{\delta_t} (\mathbf{m} - \mathbf{m}^{(eq)}) + \left(I - \frac{\mathbf{S}}{2}\right) \mathbf{q}_m + O(\delta_t^2), \quad (36)$$

其中， $\mathbf{E} = (\mathbf{E}_x, \mathbf{E}_y)^T$ 为矩空间中的速度算子，

$$\mathbf{E}_\alpha = \mathbf{M} \text{diag}(c_{0\alpha}, c_{1\alpha}, \dots, c_{8\alpha}) \mathbf{M}^{-1}, \quad \alpha = x, y. \quad (37)$$

因此，

$$\mathbf{E} \cdot \nabla = \mathbf{E}_x \partial_x + \mathbf{E}_y \partial_y.$$

引入 Chapman-Enskog 多尺度展开

$$\partial_t = \varepsilon \partial_{t_1} + \varepsilon^2 \partial_{t_2}, \quad \nabla = \varepsilon \nabla_1, \quad (38)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{m}^{(0)} + \varepsilon \mathbf{m}^{(1)} + \varepsilon^2 \mathbf{m}^{(2)} + \dots, \quad q_c = \varepsilon q_c^{(1)}, \quad \mathbf{q}_m = \varepsilon \mathbf{q}_m^{(1)}. \quad (39)$$

将上述展开代入式 (36)，并按 ε 的阶次整理，得到

$$\varepsilon^0: \quad \mathbf{m}^{(0)} = \mathbf{m}^{(eq)}, \quad (40)$$

$$\varepsilon^1: \quad (I\partial_{t_1} + \mathbf{E} \cdot \nabla_1) \mathbf{m}^{(0)} - \mathbf{q}_m^{(1)} = -\frac{\mathbf{S}}{\delta_t} \left(\mathbf{m}^{(1)} + \frac{\delta_t}{2} \mathbf{q}_m^{(1)} \right), \quad (41)$$

$$\varepsilon^2: \quad \partial_{t_2} \mathbf{m}^{(0)} + (I\partial_{t_1} + \mathbf{E} \cdot \nabla_1) \left(I - \frac{\mathbf{S}}{2} \right) \left(\mathbf{m}^{(1)} + \frac{\delta_t}{2} \mathbf{q}_m^{(1)} \right) = -\frac{\mathbf{S}}{\delta_t} \mathbf{m}^{(2)}. \quad (42)$$

由宏观浓度定义

$$C = m_0 + \frac{\delta_t}{2} q_c, \quad (43)$$

可得

$$m_0^{(1)} + \frac{\delta_t}{2} q_c^{(1)} = 0, \quad m_0^{(n)} = 0, \quad n \geq 2. \quad (44)$$

取式 (41) 和式 (42) 的守恒矩分量，并结合式 (44)，得到

$$\varepsilon^1: \partial_t C = q_c^{(1)}, \quad (45)$$

$$\varepsilon^2: \partial_t C + \nabla_1 \cdot \left(1 - \frac{s_j}{2}\right) \begin{pmatrix} m_3^{(1)} \\ m_5^{(1)} \end{pmatrix} = 0. \quad (46)$$

由式 (41) 中与一阶矩 m_3 和 m_5 对应的分量可得

$$-\frac{s_j}{\delta_t} \begin{pmatrix} m_3^{(1)} \\ m_5^{(1)} \end{pmatrix} = \frac{4 + \alpha_1}{6} \nabla_1 C. \quad (47)$$

将式 (47) 代入式 (46)，得到

$$\partial_t C = \nabla_1 \cdot \left[\frac{4 + \alpha_1}{6} \left(\frac{1}{s_j} - \frac{1}{2} \right) \delta_t \nabla_1 C \right]. \quad (48)$$

综合式 (45) 和式 (48)，并恢复到原始尺度，有

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\frac{4 + \alpha_1}{6} \left(\frac{1}{s_j} - \frac{1}{2} \right) \delta_t \nabla C \right] + q_c. \quad (49)$$

又由于本文取

$$q_c = -\mathbf{u} \cdot \nabla C, \quad (50)$$

式 (49) 可写为

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C = \nabla \cdot (D \nabla C), \quad (51)$$

其中

$$D = \frac{4 + \alpha_1}{6} \left(\frac{1}{s_j} - \frac{1}{2} \right) \delta_t. \quad (52)$$

因此，本文所采用的 MRT-LBM 能够在宏观极限下恢复目标对流扩散方程。

进一步地，为保证对流源项 q_c 的计算保持局部性，由 $q_c = -\mathbf{u} \cdot \nabla C$ 和式 (47) 可知，

$$q_c = \frac{6}{4 + \alpha_1} \frac{s_j}{\delta_t} \mathbf{u} \cdot \varepsilon \begin{pmatrix} m_3^{(1)} \\ m_5^{(1)} \end{pmatrix}. \quad (53)$$

利用矩展开

$$m_{3,5} = m_{3,5}^{(0)} + \varepsilon m_{3,5}^{(1)} + \varepsilon^2 m_{3,5}^{(2)} + \dots, \quad (54)$$

并注意到

$$m_3^{(0)} = m_5^{(0)} = 0, \quad (55)$$

可将源项写为

$$q_c = \frac{6}{4 + \alpha_1} \frac{s_j}{\delta_t} \mathbf{u} \cdot \left[\begin{pmatrix} m_3 \\ m_5 \end{pmatrix} - \varepsilon^2 \begin{pmatrix} m_3^{(2)} \\ m_5^{(2)} \end{pmatrix} \right] + O(\varepsilon^3). \quad (56)$$

为了使式 (56) 中的源项计算在 $O(\varepsilon^2)$ 精度下仍保持局部性，可通过适当选取自由参数 β_1 消去二阶修正项。根据二阶矩方程并经整理可得，当自由参数 β_1 满足

$$\beta_1 = \alpha_1 + (4 + \alpha_1) \frac{s_j^{-1} - 1/2}{s_e^{-1} - 1/2}, \quad (57)$$

时, 有

$$m_3^{(2)} = m_5^{(2)} = 0. \quad (58)$$

关于 $m_3^{(2)}$ 和 $m_5^{(2)}$ 的具体化简过程可参见文献^[24]。因此, 式 (56) 可化为局部计算格式

$$q_c = \frac{6}{4 + \alpha_1} \frac{s_j}{\delta_t} \mathbf{u} \cdot \sum_{i=0}^8 c_i g_i + O(\epsilon^3). \quad (59)$$

忽略 $O(\epsilon^3)$ 高阶项后, 式 (59) 即为正文中采用的对流源项局部计算格式。

参考文献

- [1] Gao W Y, Li X, Wu C, Chen W W, Li W C, Xue S G 2026 *J. Environ. Sci.* DOI: 10.1016/j.jes.2026.03.039
- [2] Guo B, Zhao Y, Zhang X 2026 *Bioengineering* **13** 363
- [3] Mao Z S, Yang C 2017 *Chin. J. Chem. Eng.* **25** 381
- [4] Nyaupane U R, Uprety K N, Sapkota B P 2024 *Sci. World* **17** 142
- [5] Zhao Y, Ge Y X, Chen X M, Chen Z Y, Wang L 2025 *Chin. J. Theor. Appl. Mech.* **57** 1597 (in Chinese) [赵勇, 葛懿萱, 陈鑫梦, 陈震宇, 汪垒 2025 力学学报 **57** 1597]
- [6] Gao X, Li T L, Qiao Y W, Zhang Y, Wang Z Y 2024 *J. Groundw. Sci. Eng.* **12** 132
- [7] Girault V, Raviart P A 1986 *Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations: Theory and Algorithms* (Berlin: Springer-Verlag)
- [8] Chen S, Doolen G D 1998 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **30** 329
- [9] Delgado-Gutiérrez A, Marzocca P, Cárdenas D, Probst O 2020 *Int. J. Numer. Methods Fluids* **92** 1778
- [10] Wang H L, Chai Z H, Guo Z L 2009 *Chin. J. Comput. Phys.* **26** 389 (in Chinese) [王华龙, 柴振华, 郭照立 2009 计算物理 **26** 389]
- [11] Zhan C J, Chai Z H 2026 *Chin. J. Comput. Phys.* DOI: 10.19596/j.cnki.1001-246x.2025-9211 (in Chinese) [湛承杰, 柴振华 2026 计算物理 DOI: 10.19596/j.cnki.1001-246x.2025-9211]
- [12] Yang X G, Wang L 2023 *Chin. J. Theor. Appl. Mech.* **55** 1649 (in Chinese) [杨旭光, 汪垒 2023 力学学报 **55** 1649]
- [13] Yang X G, Wang X, Yuan X L 2026 *Acta Phys. Sin.* **75** 011001 (in Chinese) [杨旭光, 王欣, 袁晓垒 2026 物理学报 **75** 011001]
- [14] Jin X, Liu G J, Guo Z L 2015 *Chin. J. Comput. Phys.* **32** 423 (in Chinese) [金鑫, 刘高洁, 郭照立 2015 计算物理 **32** 423]

- [15] Zhang T, Shi B C, Huang C S, Liang H 2015 *J. Stat. Phys.* **161** 1453
- [16] Liu G J, Guo Z L, Shi B C 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 014702 (in Chinese) [刘高洁, 郭照立, 施保昌 2016 物理学报 **65** 014702]
- [17] Liu G J, Shao Z Y, Lou Q 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 054702 (in Chinese) [刘高洁, 邵子宇, 娄钦 2022 物理学报 **71** 054702]
- [18] Zhao Y, Zhan C J, Zhang H, Qian X 2026 *Appl. Math. Lett.* **179** 109942
- [19] d’Humières D 1992 *Rarefied Gas Dynamics: Theory and Simulations* ed Shizgal B D, Weaver D P (Washington DC: AIAA) **159** 450
- [20] Lallemand P, Luo L S 2000 *Phys. Rev. E* **61** 6546
- [21] Chai Z H, Shi B C 2020 *Phys. Rev. E* **102** 023306
- [22] Chai Z H, Yuan X L, Shi B C 2023 *Phys. Rev. E* **108** 015304
- [23] Guo Z L, Zheng C G, Shi B C 2002 *Phys. Rev. E* **65** 046308
- [24] Huang R, Wu H 2015 *Phys. Rev. E* **91** 033302
- [25] Chai Z H, Zhao T S 2013 *Phys. Rev. E* **87** 063309
- [26] Taylor G I 1953 *Proc. R. Soc. Lond. A* **219** 186
- [27] Aris R 1956 *Proc. R. Soc. Lond. A* **235** 67
- [28] Hoagland D A, Prud’homme R K 1985 *AIChE J.* **31** 236
- [29] Chang R, Santiago J G 2023 *J. Fluid Mech.* **976** A30
- [30] Alexandre A, Guérin T, Dean D S 2025 *Phys. Rev. E* **111** 064124
- [31] Yan X, Chang Y L, Xu Y F, Zhao J C, Liu D H 2025 *Energy Sci. Eng.* **13** 4973
- [32] Otomo H, Fan H L, Hazlett R, Li Y, Staroselsky I, Zhang R Y, Chen H D 2015 *C. R. Mec.* **343** 559
- [33] Sommer K D, Mieg L, Sharma S, Skoda R, Mönnigmann M 2026 *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **452** 118699
- [34] Vana R, Karunakar P 2026 *Int. J. Numer. Methods Heat Fluid Flow* **36** 91
- [35] Zhao Y, Liu X Y, Chen Z Y, Wang L 2025 *Phys. Rev. E* **111** 055304
- [36] Zhao Y, Xiao Q, Chen X M, Yang X G 2025 *Chin. J. Theor. Appl. Mech.* **57** 2709 (in Chinese) [赵勇, 肖奇, 陈鑫梦, 杨旭光 2025 力学学报 **57** 2709]
- [37] Guo Z L, Zheng C G 2008 *Int. J. Comput. Fluid Dyn.* **22** 465

- [38] Krüger T, Kusumaatmaja H, Kuzmin A, Shardt O, Silva G, Viggien E M 2016 *The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice* (Cham: Springer)
- [39] Yang B, Liao S, Xiao W, Zhao Y 2026 *Acta Mech. Sin.* **42** 325626
- [40] Yoshida H, Nagaoka M 2010 *J. Comput. Phys.* **229** 7774

录用稿件，非最终出版稿

Transport Characteristics of Solute in Complex Channels

Based on Lattice Boltzmann Method*

ZHAO Yong^{1)2)#} LI Linxin^{1)2)#} XIAO Wang^{1)2)#} YANG
Xuguang^{3)4)†}

1) (*School of Mathematics and Statistics, Changsha University of Science and Technology, Changsha, Hunan 410114, China*)

2) (*Hunan Provincial Key Laboratory of Mathematical Modeling and Analysis in Engineering, Changsha University of Science and Technology, Changsha, Hunan 410114, China*)

3) (*School of Mathematics and Statistics, Hunan First Normal University, Changsha, Hunan 410205, China*)

4) (*Hunan Provincial Key Laboratory of Big Data Analysis and Application, Hunan First Normal University, Changsha, Hunan 410205, China*)

Abstract

Solute transport in complex channels is widely involved in environmental flows, microfluidic systems, porous media transport, and biochemical mixing processes. Compared with straight channels, curved or periodically varying channels can significantly modify the migration, spreading, and effective dispersion of solute clouds through the coupling between flow structures and wall geometries. To quantitatively investigate these effects, a high-accuracy multiple-relaxation-time lattice Boltzmann method (MRT-LBM) is developed based on the source-term reconstruction of the convection term. In this model, the convection term in the convection–diffusion equation is reformulated as a source term, so that the solute transport equation can be solved in the form of a diffusion equation with a reconstructed source. This treatment avoids the additional deviation that may be introduced by the conventional velocity-dependent equilibrium distribution and is suitable for high-accuracy simulations of solute transport in complex geometries. Three typical two-dimensional channels are considered, namely a straight channel, a parallel sinusoidal channel with a constant local height, and a symmetric sinusoidal channel with a periodically varying local height. The Reynolds number is fixed

* Project supported by the Changsha Outstanding Innovative Youth Training Program (Grant No. kq2306023), the Scientific Research Project of Hunan Provincial Department of Education (Grant Nos. 24B0310 and 25A0666), the Hunan Science and Technology Innovation Program (Grant No. 2024RC3228), and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12302373, 12372286).

These authors contributed equally.

† Corresponding author. E-mail: xuguang1988@163.com, ysfxuguang@hnfnu.edu.cn (Xuguang Yang)

The First Author. E-mail: zhaoy@csust.edu.cn (Yong Zhao)

at $Re = 10$, and the Peclet number Pe is adjusted by changing the molecular diffusion coefficient D , while the background flow field remains nearly unchanged under different Pe conditions. The effects of Pe and the geometric amplitude ε on the cross-sectionally averaged concentration distribution, the mass-weighted average velocity, and the effective dispersion coefficient are systematically analyzed. The accuracy of the present model is first verified by the classical Taylor–Aris dispersion problem in a plane Poiseuille flow. The effective dispersion coefficients calculated by the present model agree well with the theoretical solution, with relative errors less than 0.1%, demonstrating the high accuracy of the present model in capturing the long-time axial dispersion behavior of solute clouds. The numerical results show that the transport mechanisms are strongly dependent on the channel geometry. In the straight channel, the solute cloud maintains a regular axial distribution without obvious geometric distortion. The variation of Pe mainly changes the effective dispersion coefficient D_{eff} , thereby affecting the axial spreading range and the peak concentration of the solute cloud, whereas its influence on the mass-weighted average velocity is weak. In the parallel sinusoidal channel, the upper and lower walls shift synchronously along the streamwise direction, and the local channel height remains constant. As a result, increasing ε mainly enhances the lateral deflection of the solute cloud along the curved centerline, but has only a weak effect on the axial concentration distribution. The mass-weighted average velocity decreases slightly with increasing ε , while the velocity curves obtained at different Pe nearly overlap, indicating that Pe mainly affects the dispersion process rather than the overall migration speed. In contrast, the symmetric sinusoidal channel exhibits a much stronger geometric modulation effect. Since the local channel height varies periodically along the streamwise direction, alternating contraction and expansion regions are formed. With increasing ε , the concentration peak shows an obvious axial lag, and the mass-weighted average velocity decreases significantly. This indicates that the periodic contraction–expansion structure can suppress the overall axial migration of the solute cloud and enhance the coupling between geometric modulation and dispersion. At relatively small amplitudes, the concentration distribution still exhibits characteristics similar to Taylor–Aris dispersion. However, when ε becomes large, the influence of the varying cross-section becomes dominant, and the concentration profiles under different Pe show more complicated differences. Furthermore, based on numerical results in the ranges of $10 \leq Pe \leq 120$ and $0.05 \leq \varepsilon \leq 0.3$, an empirical correlation for D_{eff}/D in the parallel sinusoidal channel is established. The correlation retains the Taylor–Aris-type Pe^2 -dominated structure and introduces a geometric correction factor related to ε , thereby providing a quantitative description of the effective dispersion coefficient in a channel with a constant cross-section and a periodically curved centerline. These results demonstrate that the present high-accuracy MRT-LBM can effectively describe solute transport in complex channels and provide a useful numerical framework for analyzing geometry-regulated dispersion processes.

Keywords: lattice Boltzmann method, solute transport, complex channel, Taylor–Aris dispersion