中南大學
Central South University

相图、相变、材料设计与制备科学中心
Science Center for Phase Diagram, Phase Transtion, Materials Design and Preparation
硬质合金微结构研究小组
"Microstructure in Cemented Carbide" Cooperation Group
中德“微结构”联合实验室
Sino-German Cooperation Group "Microstructure"

多物理场耦合的 **相场模拟软件（MInDeS）** 开发
——流体力学模块

汇报者: 黄 奇
指导老师: 杜 勇 教授

1、速度场求解

1.1 传统差分法

- **不可压缩NS方程：**

$$\nabla \cdot \boldsymbol{V} = \boldsymbol{0}$$

$$\rho \frac{D\boldsymbol{V}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \boldsymbol{V} + \rho \boldsymbol{f}$$

- **压力修正法：**

（1）初始近似压强 P^* 及 $\boldsymbol{V}^0$

（2）求解动量方程

$$\rho \frac{D}{Dt} \boldsymbol{V}^* = -\nabla P^* + \mu \nabla^2 \boldsymbol{V}^n + \rho \boldsymbol{f}$$

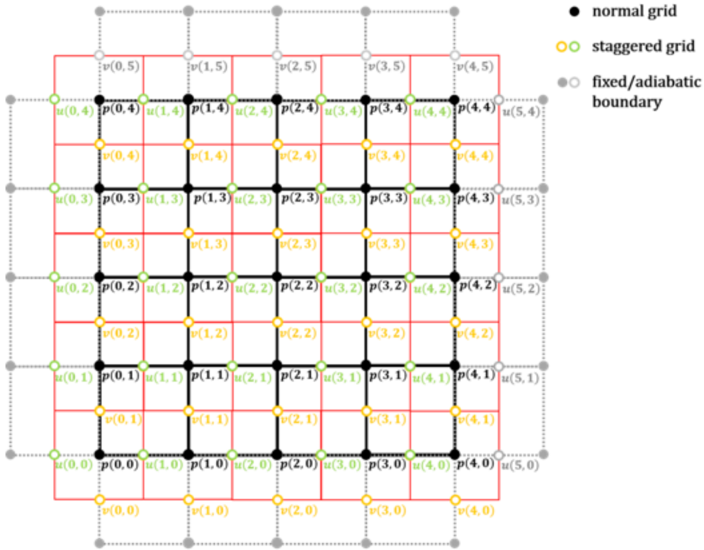
（3）通过泊松方程求解压力

$$\nabla^2 P^{n+1} = \rho \nabla \cdot \boldsymbol{V}^*$$

（4）通过新的压力修正速度场

$$\boldsymbol{V}^{n+1} = \boldsymbol{V}^* - \frac{\Delta t}{\rho} \nabla P^{n+1}$$

（5）循环迭代（2 ~ 4）求解至速度场和压强分布稳定。



1、速度场求解

1.2 LBM差分法

- **单松弛模型(LBGK) - DnQb模型：**

  二维：D2Q9　　　三维：D3Q19

  $$f_i^{eq} = \omega_i \rho \left[1 + \frac{\boldsymbol{c}_i \cdot \boldsymbol{u}}{c_s^2} + \frac{(\boldsymbol{c}_i \cdot \boldsymbol{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\boldsymbol{u}^2}{2c_s^2} \right]$$

- **LBE的程序结构：**

（1）初始化分布函数$f_i(\boldsymbol{r}, 0), (i = 0,1, \ldots, q-1)$

（2）在t时刻执行碰撞

$$f_i'(\boldsymbol{r}, t) = f_i(\boldsymbol{r}, t) + \Omega_i(\boldsymbol{r}, t), (i = 0,1, \ldots, q-1)$$

（3）执行迁移

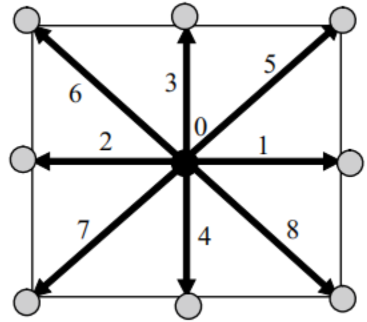
$$f_i(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{c}_i \delta_t, t + \delta_t) = f_i'(\boldsymbol{r}, t), (i = 0,1, \ldots, q-1)$$

（4）边界条件处理

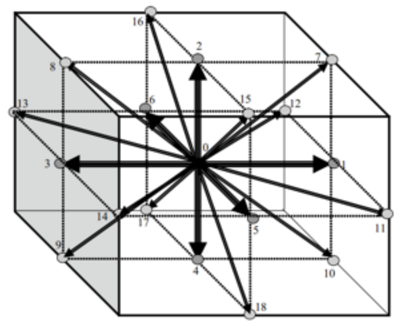
（5）计算宏观量

$$\rho(\boldsymbol{r}, t) = \sum_i f_i(\boldsymbol{r}, t),\ \rho \boldsymbol{u}(\boldsymbol{r}, t) = \sum_i \omega_i f_i(\boldsymbol{r}, t)$$

（6）循环迭代（2～5）求解至速度场和压强分布稳定。



D2Q9



D3Q19

2、边界条件

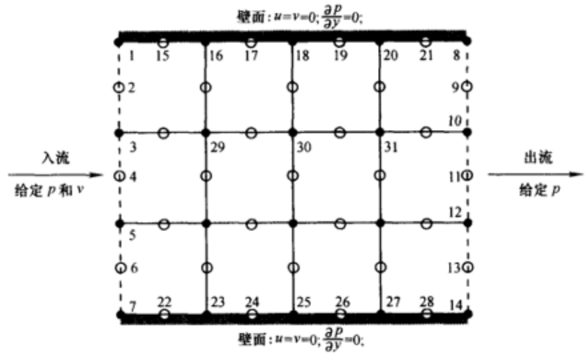
2.1 传统差分法

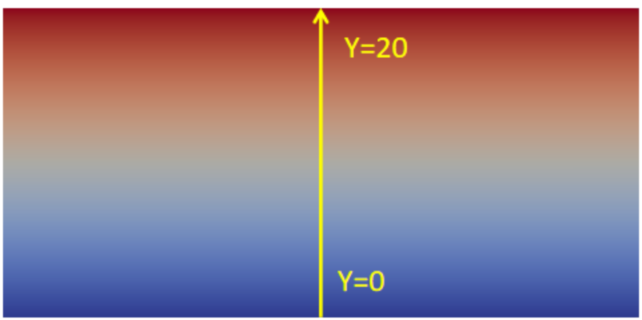
- **固定速度：**
  - 上界面

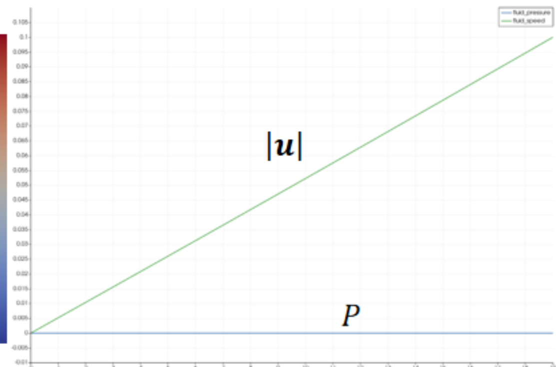
    $u_x = 0.1$
  - 下界面

    $u_x = 0, u_y = 0$
- **周期边界**
  - 左、右界面

    $u_x(i,j) \equiv u_x(i+N_x,j)$



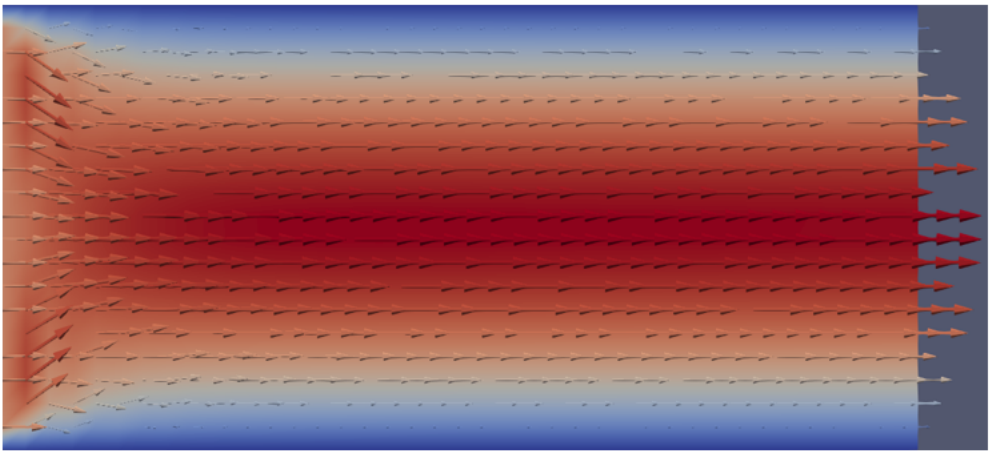




2、边界条件

2.1 传统差分法

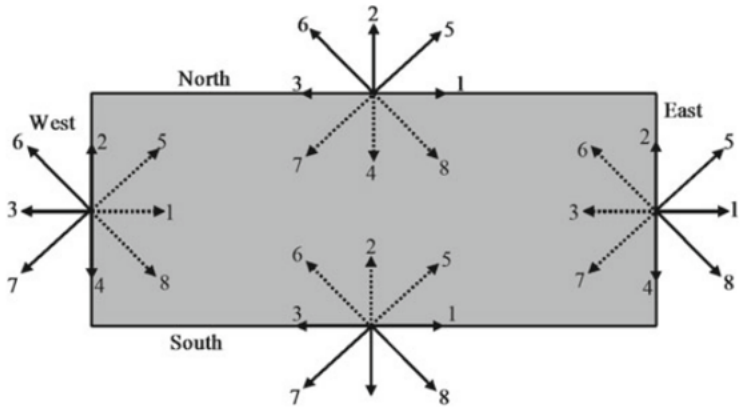
- 无滑移墙面（上下界面）
- 恒流边界（左壁, $u_x = 0.1$ ）
- 自由边界（右壁）
- **恒流入口 + 自由出口：**



2、边界条件

2.2 LBM差分法 - D2Q9

- 壁面
  - 不滑移/反弹（下壁1）
    $f_2 = f_4$，$f_6 = f_8$，$f_5 = f$
  - 滑移（下壁2）
    $f_2 = f_4$，$f_6 = f_7$，$f_5 = f$
  - 移动壁面（上壁, u_x）
    $f_4 = f_2$
    $f_8 = f_6 + \frac{1}{6}\rho u_x$
    $f_7 = f_5 - \frac{1}{6}\rho u_x$

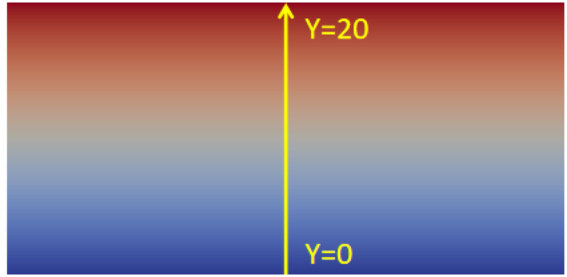


- 周期边界
  （左壁 l） $f_1^l = f_1^r$，$f_5^l = f_5^r$，$f_8^l = f_8^r$
  （右壁 r） $f_3^r = f_3^l$，$f_6^r = f_6^l$，$f_7^r = f_7^l$

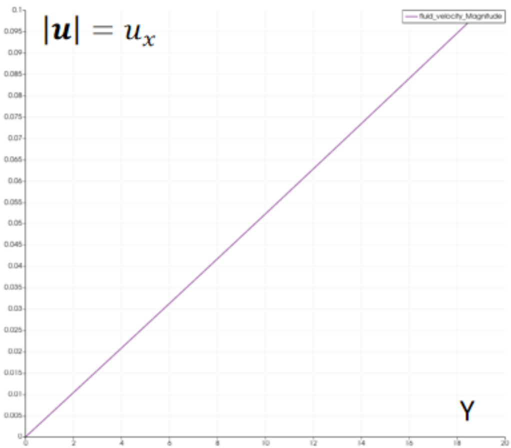
2、边界条件

2.2 LBM差分法 - D2Q9

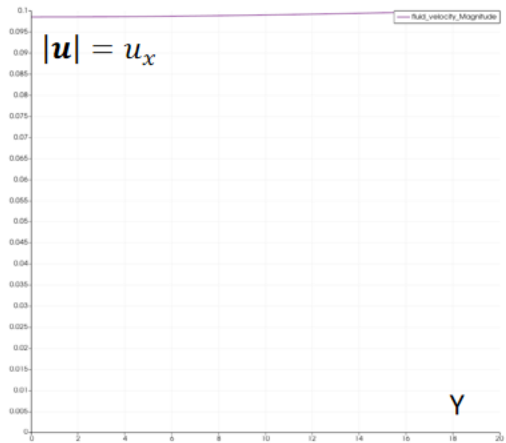
- 壁面
  - 不滑移/反弹（下壁）
  - 滑移（下壁）
  - 移动壁面（上壁, $\boldsymbol{u}_x = 0.1$）
- 周期边界



- **移动上壁+不滑移下壁：**



移动上壁+滑移下壁：

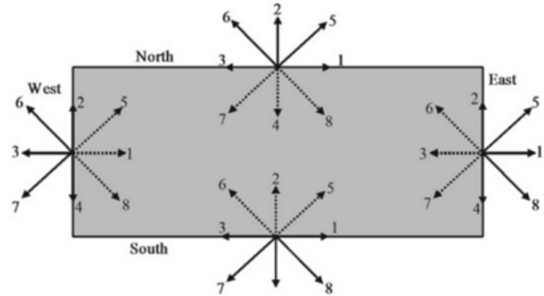


2、边界条件

2.2 LBM差分法 - D2Q9

- 无滑移墙面（上下界面）
- 自由边界（右壁）

$$f_3(N_x,j) = f_3(N_x-1,j)$$
$$f_6(N_x,j) = f_6(N_x-1,j)$$
$$f_7(N_x,j) = f_7(N_x-1,j)$$



- 恒压边界

（左壁 $l, p^{in} = 2.0$） $f_1^l = f_3^l$

$$f_5^l = 0.5\left(p^{in} - f_0^l\right) - f_2^l - f_3^l - f_6^l$$
$$f_8^l = 0.5\left(p^{in} - f_0^l\right) - f_3^l - f_4^l - f_7^l$$

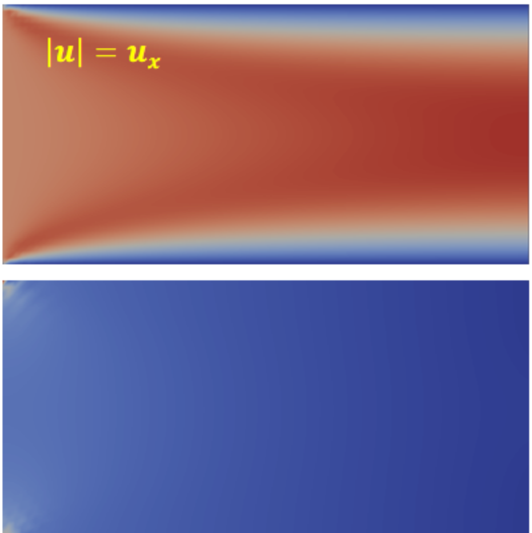
- 恒流边界（左壁, $\boldsymbol{u_x} = \mathbf{0.1}$）

$$f_1 = f_3 + \frac{2}{3}\rho u_x$$
$$f_5 = f_7 + \frac{1}{6}\rho u_x$$
$$f_8 = f_6 + \frac{1}{6}\rho u_x$$

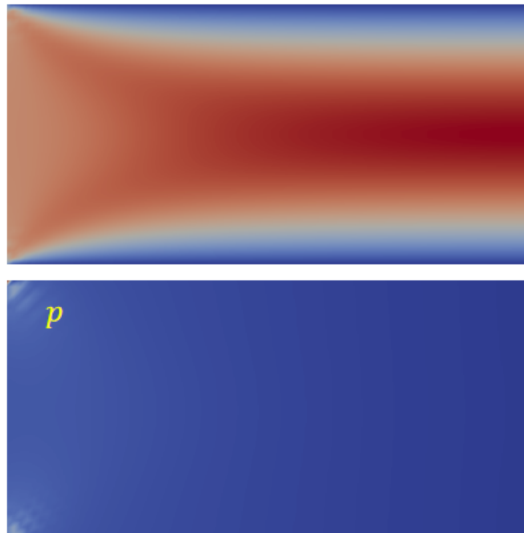
2、边界条件

2.2 LBM差分法 - D2Q9

- 无滑移墙面（上下界面）
- 自由边界（右壁）
- 恒压边界（左壁，$p = 2.0$）
- 恒流边界（左壁，$u_x = 0.1$ ）
- 恒流入口 + 自由出口：



入口加压+自由出口：



2、边界条件

2.2 LBM差分法 - D2Q9

- 固体绕流
- (Z Guo, Physics of fluids, 2002)
- 迁移得未知分布函数

$$f_{\bar{i}}(\boldsymbol{r_f}, t+\delta_t) = f_{\bar{i}}(\boldsymbol{r_b}, t)$$

- 固相内得未知函数分解为平衡项及非平衡项

$$f_{\bar{i}}(\boldsymbol{r_b}, t) = f_{\bar{i}}^{eq}(\boldsymbol{r_b}, t) + f_{\bar{i}}^{neq}(\boldsymbol{r_b}, t)$$

$$q = |\boldsymbol{r_f} - \boldsymbol{r_w}| / |\boldsymbol{r_f} - \boldsymbol{r_b}|$$

- 平衡项

$$f_{\bar{i}}^{eq}(\boldsymbol{r_b}, t) = F_{\bar{i}}^{eq}(\rho_b, \boldsymbol{u_b}, t)$$

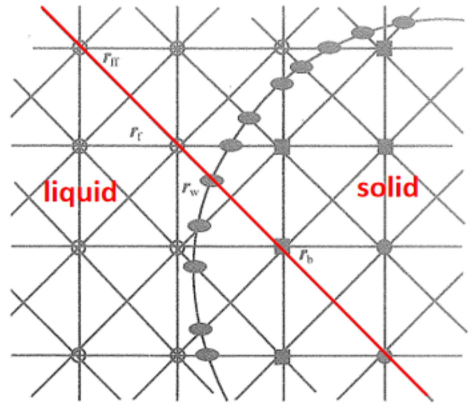
$$\rho_b = \rho_f,\ \boldsymbol{u_b} = \begin{cases} \boldsymbol{u_{s1}} & q \geq 0.75 \\ q\boldsymbol{u_{s1}} + (1-q)\boldsymbol{u_{s2}} & q < 0.75 \end{cases}$$

$$\boldsymbol{u_{s1}} = [\boldsymbol{u_w} + (q-1)\boldsymbol{u_f}]/q$$

$$\boldsymbol{u_{s2}} = [2\boldsymbol{u_w} + (q-1)\boldsymbol{u_{ff}}]/(1+q)$$

- 非平衡项

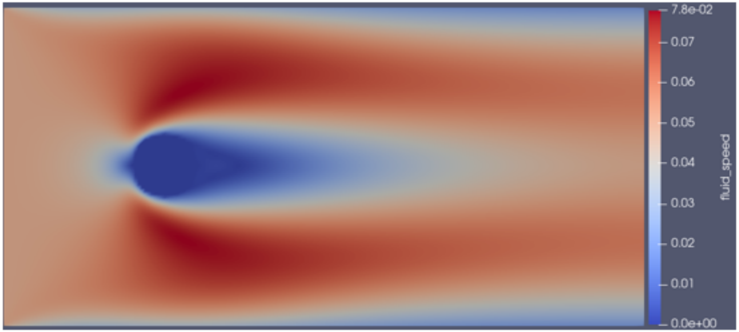
$$f_{\bar{i}}^{neq}(\boldsymbol{r_b}, t) = \begin{cases} f_{\bar{i}}(\boldsymbol{r_f}, t) - f_{\bar{i}}^{eq}(\boldsymbol{r_f}, t) & q \geq 0.75 \\ q[f_{\bar{i}}(\boldsymbol{r_f}, t) - f_{\bar{i}}^{eq}(\boldsymbol{r_f}, t)] + (1-q)[f_{\bar{i}}(\boldsymbol{r_{ff}}, t) - f_{\bar{i}}^{eq}(\boldsymbol{r_{ff}}, t)] & q < 0.75 \end{cases}$$



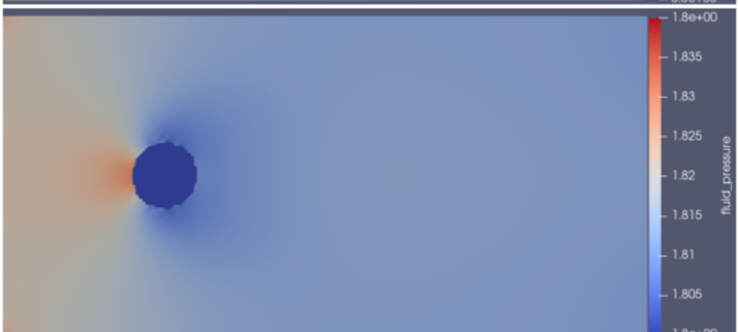
2、边界条件

2.2 LBM差分法 - D2Q9

- 固体绕流 (Z Guo, Physics of fluids, 2002)
- 漫反射上下壁，粗糙度 = 0.1; 恒流左壁, $u_x = 0.05$; 自由右壁;
- 速度：



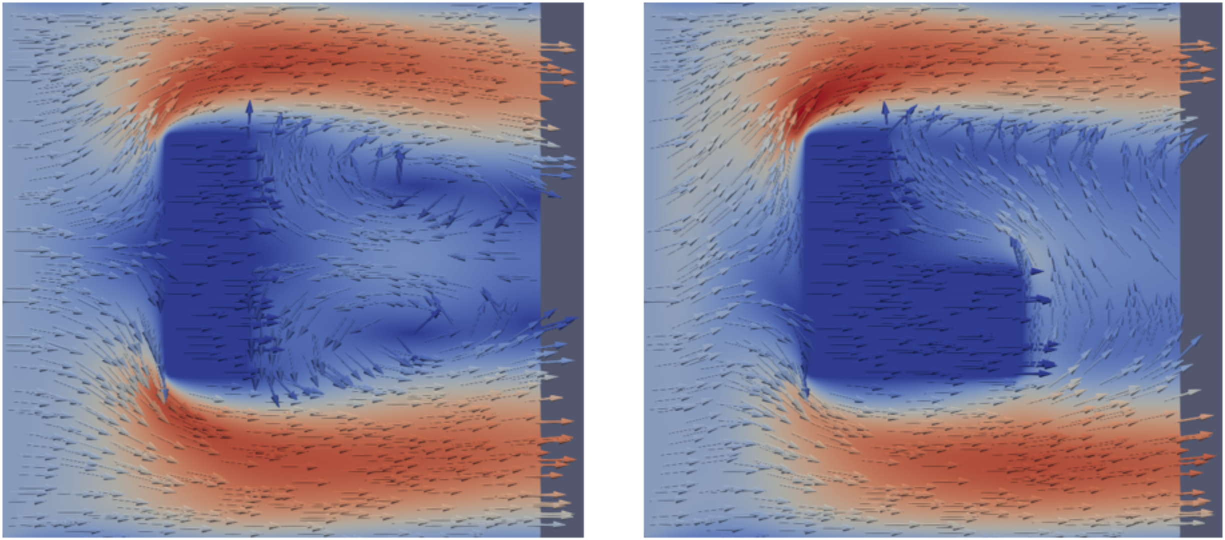
- 压力：



2、边界条件

2.2 LBM差分法 - D2Q9

- 固体绕流 (Z Guo, Physics of fluids, 2002)
- 漫反射上下壁，粗糙度 = 0.1; 恒流左壁, $\boldsymbol{u}_x = 0.01$; 自由右壁;
- 速度矢量:

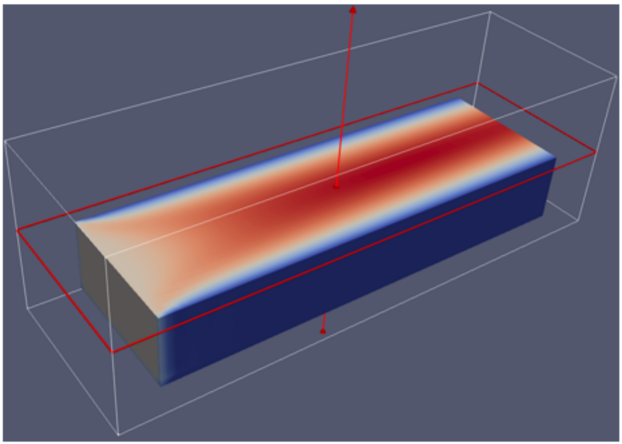


2、边界条件

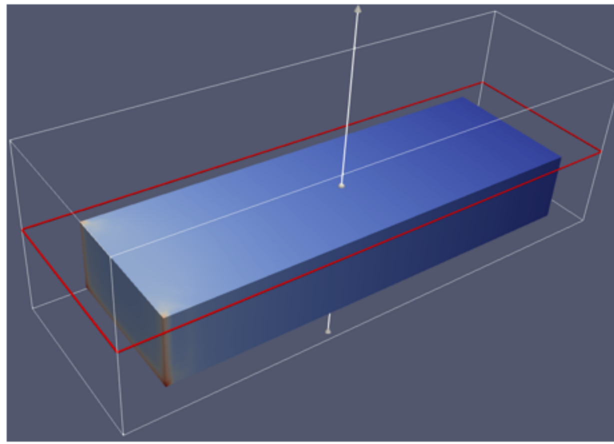
2.3 LBM差分法 - D3Q19

- 边界条件 (M. Hecht, Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2010)
- 漫反射上下左右壁，粗糙度 = 0.1;
- 恒流前壁, $u_x = 0.1$; 自由后壁;

- 速度：



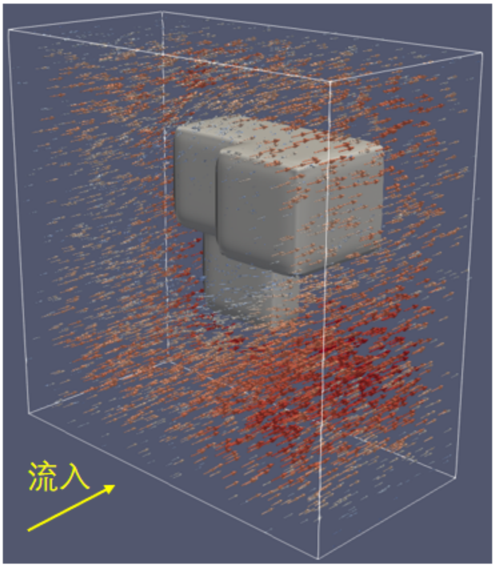
压强：



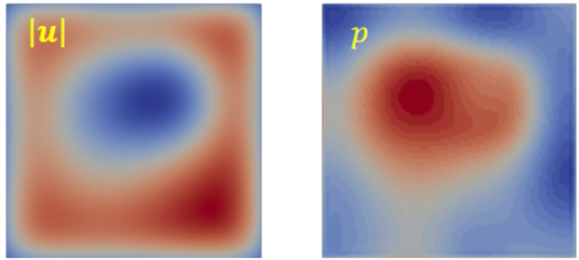
2、边界条件

2.3 LBM差分法 - D3Q19

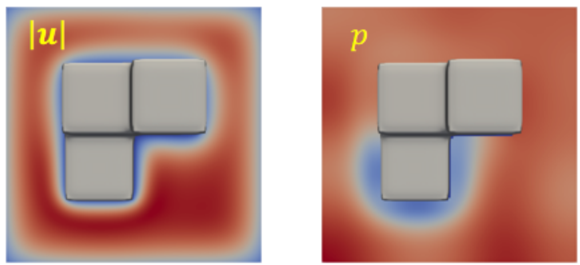
- 固体绕流 (Z. Guo, Physics of fluids, 2002)
- 漫反射上下左右壁，粗糙度 = 0.1; 恒压前壁, $p = 1.8$; 自由后壁
- 速度矢量分布：



流入面： $0.00173 \le |u| \le 0.061, \quad p \approx 1.8$



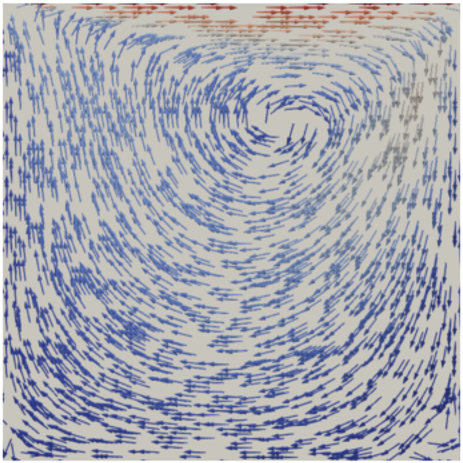
流出面： $0 \le |u| \le 0.065, \quad p \approx 1.8$

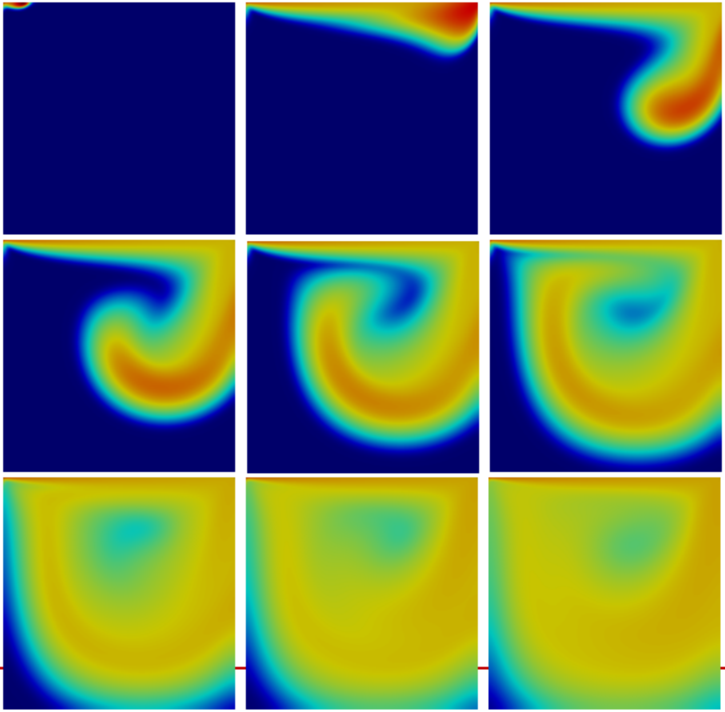


3、LBM对流扩散

3.1 LBM强制对流

- 方腔流： 上下左右壁，粗糙度 = 1.0; 上壁速度,$|u| = 0.1$
- 速度矢量分布： 温度场演化：





3、LBM对流扩散

3.2 LBM自然对流

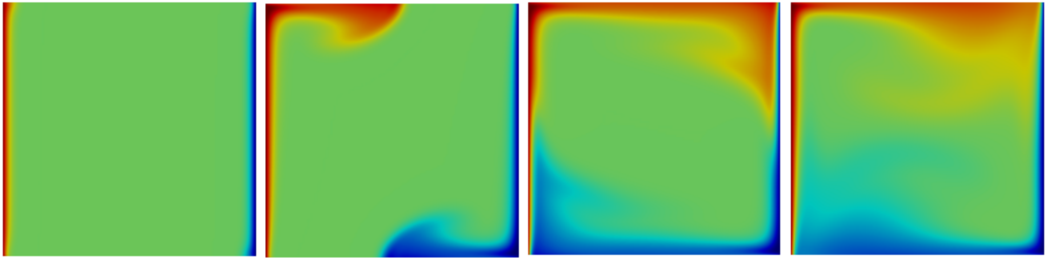
- **耦合外力：**

$$f_i(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{c}_i\delta_t, t+\delta_t) - f_i(\boldsymbol{r}, t) = \Omega_i(\boldsymbol{r}, t) + \delta_t F_i$$

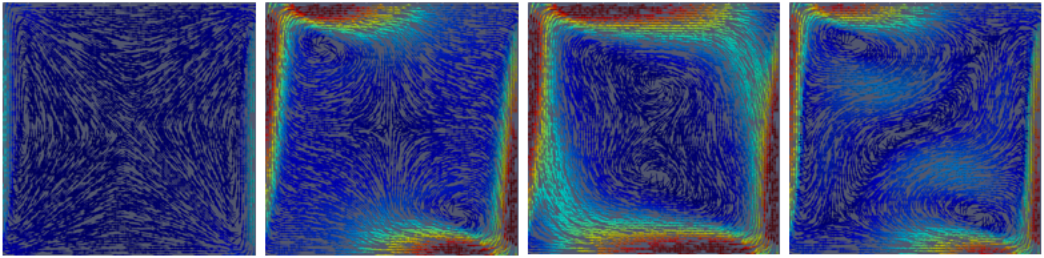
- **修正LGA模型、GZS模型：**

$$F_i = \omega_i \frac{\boldsymbol{c}_i \cdot \boldsymbol{F}}{c_s^2} \quad \text{or} \quad F_i = \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right)\omega_i \left[\frac{\boldsymbol{c}_i - \boldsymbol{u}}{c_s^2} + \frac{\boldsymbol{c}_i \cdot \boldsymbol{u}}{c_s^4}\boldsymbol{c}_i\right] \cdot \boldsymbol{F} \qquad \boldsymbol{F} = \kappa\left(T^{ref} - T\right)\rho\boldsymbol{g}$$

- **温度：**



- **速度场：**



4、LBM多相流

4.1 LBM两相流（未调试完成）

耦合外力：

$$F_i=\left(1-\frac{1}{2\tau}\right)\omega_i\left[\frac{\boldsymbol{c}_i\cdot\boldsymbol{F}}{c_s^2}+\frac{\boldsymbol{u}\nabla\rho\ :\boldsymbol{c}_i\boldsymbol{c}_i}{c_s^2}\right]\ ,\quad \boldsymbol{F}=\boldsymbol{F}_s+\boldsymbol{G}\ ,\quad \boldsymbol{F}_s=\frac{\delta f}{\delta\phi}\nabla\phi\ ,\ \boldsymbol{G}=\rho\boldsymbol{g}$$

气泡相：

$$\frac{\delta\phi}{\delta t}+\nabla\cdot(\phi\boldsymbol{u})=\nabla\cdot M\nabla\frac{\delta f}{\delta\phi}$$

密度、黏度：

$$\rho=\phi(\rho_l-\rho_g)+\rho_g\ ,\ v=\phi(v_l-v_g)+v_g$$

平衡分布函数：

$$g_i^{eq}=\begin{cases}\frac{p}{c_s^2}(\omega_i-1)+\rho s_i(\boldsymbol{u}), & i=0\\ \frac{p}{c_s^2}\omega_i+\rho s_i(\boldsymbol{u}), & i\neq 0\end{cases}\ ,\ s_i(\boldsymbol{u})=\omega_i\left[\frac{\boldsymbol{c}_i\cdot\boldsymbol{u}}{c_s^2}+\frac{(\boldsymbol{c}_i\cdot\boldsymbol{u})^2}{2c_s^4}-\frac{\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{u}}{2c_s^2}\right]$$

动量求解：

$$\rho\boldsymbol{u}=\sum_i\boldsymbol{c}_i g_i+\frac{1}{2}\Delta t\boldsymbol{F}$$

压强求解：

$$p=\frac{c_s^2}{(1-\omega_0)}\left[\sum_{i\neq 0}g_i+\frac{1}{2}\Delta t\boldsymbol{u}\cdot\nabla\rho+\rho s_0(\boldsymbol{u})\right]$$

4、LBM多相流

4.1 LBM两相流（未调试完成）

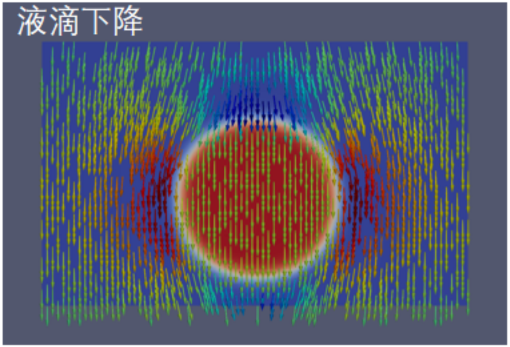
问题：

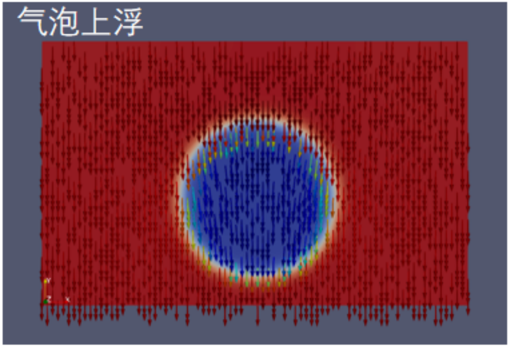
1、气泡无法上浮，速度场分布与文献不符

2、气泡演化过慢

3、液滴内速度场分布非常规

待后续再测。





5、LBM高效求解

5.1 LBM CUDA 并行（暂未实现）