

一种精确的含可溶性表面活性剂两相流动相场方法*

陈黎明¹, 张良奇¹, 王小双^{1,2}, 肖姚¹, 曾忠¹

(1. 重庆大学 航空航天学院, 重庆 400044;

2. 沪渝人工智能研究院, 重庆 401332)

(我刊编委张良奇、曾忠来稿)

摘要: 基于相场理论, 该文提出了一种精确的考虑可溶性表面活性剂作用的两相流相场方法. 为保证相界面处动量运输的守恒性, 引入一致性的质量通量以考虑相变量扩散对质量守恒的影响, 应用有限体积方法离散守恒形式的控制方程; 选择五阶 WENO 格式处理控制方程的对流项, 改善界面处理的精度和稳定性. 此外, 还构造了多组二维差分模板以进一步改善表面张力项中的梯度离散, 并证实了对应格子 Boltzmann D2Q9 模型的模板能够显著降低伪势速度, 改善表面活性剂浓度的计算精度. 通过对静态液滴、双液滴融合、大密度比气泡上升以及剪切流中的单液滴变形与破裂等问题进行数值研究, 充分验证了所提出的两相流相场方法的精度、守恒性与鲁棒性.

关键词: 两相流; 相场方法; 可溶性表面活性剂; 连续表面力模型

中图分类号: O359 **文献标志码:** A **DOI:** 10.21656/1000-0887.450027

An Accurate Phase Field Method for 2-Phase Flow With Soluble Surfactants

CHEN Liming¹, ZHANG Liangqi¹, WANG Xiaoshuang^{1,2}, XIAO Yao¹, ZENG Zong¹

(1. College of Aerospace Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044, P.R.China;

2. Shanghai-Chongqing Institute of Artificial Intelligence, Chongqing 401332, P.R.China)

(Contributed by ZHANG Liangqi, ZENG Zong, M.AMM Editorial Board)

Abstract: An accurate phase field method for 2-phase flow with soluble surfactants was developed based on the phase field theory. The key point of this method was the utilization of consistent and conservative mass flux to ensure the conservation of momentum transport across the interface. The finite-volume method was used to discretize the governing equations in their conservative form. The 5th-order WENO scheme was chosen to effectively handle the convective terms, aimed to enhance accuracy and robustness in addressing steep variations in the interfacial region. Furthermore, various 2D difference templates were designed to optimize gradient discretization in the surface tension term. Particularly, with the template corresponding to the lattice Boltzmann D2Q9 model, a notable reduction of the spurious velocity and a significant improvement of the accuracy of surfactant concentration prediction were achieved. Various examples such as static droplets, fusion of 2 droplets, bubble rise with a large density ratio, deformation and breakage of individual droplets in shear flow demonstrate the

* 收稿日期: 2024-02-02; 修订日期: 2024-03-24

基金项目: 国家自然科学基金(12102071;12172070);重庆市博士直通车项目(CSTB2022BSXM-JCX0086)

作者简介: 陈黎明(1999—),男,硕士生(E-mail: chenliming0905@163.com);

张良奇(1985—),男,研究员,博士生导师(通讯作者. E-mail: zhangliangqi@cqu.edu.cn).

引用格式: 陈黎明, 张良奇, 王小双, 肖姚, 曾忠. 一种精确的含可溶性表面活性剂两相流动相场方法[J]. 应用数学和力学, 2024, 45(12): 1455-1472.

accuracy, conservative properties, and robustness of the proposed method.

Key words: 2-phase flow; phase field method; soluble surfactant; continuous surface force model

0 引 言

表面活性剂作为两亲性物质^[1],易吸附于界面并降低界面的表面张力,对多相流动的界面动力学行为产生巨大影响^[2].此外,表面活性剂的非线性输运会导致其在相界面处的非均匀分布,诱发沿界面切向的表面张力梯度(即 Marangoni 应力),从而对液滴或气泡的动力学行为产生进一步影响,使其成为工业应用领域控制液滴和气泡运动和变形的有效手段^[3].特别地,表面活性剂可以提高液滴生成效率和界面稳定性,是液滴微流控技术的重要添加剂。

实验研究虽然是理解表面活性剂的化学、物理性质的直接途径^[4],但却很难准确地获得关键定量信息,如流场、表面活性剂分布等.同时,通过实验研究揭示其作用机理也存在挑战.Manikantan 等^[5]指出,为了能够从流体力学的角度深入理解、解释和设计表面活性剂-流体系统,须从宏观流动尺度来研究表面活性剂的作用机理.数值模拟是实现这一目标的有效手段,国内外学者先后提出了许多方法来描述含有表面活性剂的液滴的运动和变形.解决上述问题的数值方法大致可以分为两类:界面追踪方法和界面捕捉方法.界面追踪方法基于 Lagrange 描述,使用离散的网格点描述界面,主要包括边界积分方法^[6]、front-tracking^[7]以及浸没边界法^[8]等.其中 Stone 等^[9]在 1990 年应用边界积分方法模拟了在低 Reynolds 数条件下,不可溶表面活性剂对拉伸液滴变形和破裂的影响,之后 Milliken 等^[10]将该研究扩展到了可溶性表面活性剂.在 front-tracking 方法的研究领域,Muradoglu 等^[11]研究了可溶性表面活性剂对液滴分裂的影响,并对圆管中可溶性表面活性剂作用下的气泡上升问题进行了数值模拟.Luo 等通过对三维方形管道中含有可溶^[12]/不可溶^[13]表面活性剂液滴动力学的数值模拟研究,分析了表面活性剂对液滴最终稳定状态的影响.需要指出的是,基于 front-tracking 方法的可溶性表面活性剂的输运模型需要同时考虑表面活性剂在体相区域与界面区域的输运及其耦合作用.此外,Lai 等^[14]用浸没边界方法研究了含有不可溶表面活性剂的界面运动,并确保表面活性剂的质量守恒.随后,Lai 等^[15]又将该方法应用于移动接触线的研究中.尽管界面追踪方法在载有表面活性剂的液滴运动研究中得到了广泛的应用,但是其在处理复杂界面拓扑结构变化方面存在困难和挑战。

界面捕捉方法通过辅助标量函数的演化隐式地描述界面,它能有效地处理复杂的界面拓扑结构变化.这类方法主要包括 VOF 方法(volume-of-fluid method)^[16]、level-set 方法^[17]以及相场方法(phase field method)^[18].Renardy 等^[19]利用 VOF 方法研究了剪切流动条件下含有表面活性的低黏度比液滴变形.James 等^[20]发展了非线性的表面张力状态方程,并利用 VOF 方法模拟了含不可溶表面活性剂的界面动力学行为.而 Xu 等^[21]将表面活性剂沿界面法向均匀扩展到界面附近,基于 level-set 方法建立了不可溶活性剂模型.基于相场方法,Laradji 等^[22]在 1992 年首次提出了一种新的考虑表面活性剂影响的自由能泛函,他们研究了表面活性剂对相分离动力学的影响.2010 年,Liu 等^[23]基于格子 Boltzmann 方法和相场模型,数值模拟了含有可溶性表面活性剂的液滴运动,其模型可以恢复平衡态的 Frumkin 和 Langmuir 吸附等温线.2013 年,Engblom 等^[24]对现有可溶性表面活性剂相场模型的适定性进行了细致分析,并对自由能函数进行了修正,提出了四种可行性方案,拓宽了表面活性剂相场模型的应用范围.随后,Soligo 等^[25]采用了高精度伪谱方法,对湍流通道中含有可溶性表面活性剂的液滴群体动态行为进行了深入研究.同年,Zhu 等^[26]根据热力学定律和 Onsager 变分原理,推导了考虑可溶性表面活性剂作用的移动接触线相场模型,研究了固体表面上含可溶性表面活性剂的液滴运动.近期,Zong 等^[27]与 Zhou 等^[28]也成功地应用耦合相场理论的格子 Boltzmann 方法研究了含可溶性表面活性剂的液滴动力学行为。

相场方法的理论基础坚实,其可以通过能量变分理论推导得到,能够保证良好的守恒性以及热力学一致性,还能通过改变自由能来引入各类物理效应,比如热毛细效应^[29]、表面活性剂的影响^[23]和移动接触线问题^[30]等.此外,实际计算过程中,相场方法避免了界面的几何重构和重新初始化过程,数值处理更简单.因此,本文选择相场方法来描述两相流动的相界面,并采用 Engblom 等^[24]提出的修正模型考虑可溶性表面活性剂与相界面的耦合作用,即用两个耦合的 Cahn-Hilliard 方程分别描述界面捕捉相变量和表面活性剂浓度

的动态演化.尽管相场方法具有坚实的物理基础,处理四阶非线性偏微分方程的困难是一个长期存在的问题^[31].此外,如 Yue 等^[32]所指出的:尽管 Cahn-Hilliard 方程能够保证整体计算域内的质量守恒,但实际数值计算产生的相变量数值扰动和非物理扩散会导致液滴的自发收缩,从而破坏质量守恒.因此,本文采用基于同位网格的有限体积方法来离散守恒形式的控制方程,并参照 Huang 等^[33]的研究,考虑相变量扩散对质量守恒的影响,在动量方程中引入了满足守恒性、一致性的质量通量,从而有效保证相界面处动量运输的守恒性.在数值离散处理过程中,参考了 Dong 等^[34]的工作,将四阶非线性的 Cahn-Hilliard 方程拆分为两个二阶 Helmholtz 方程;采用五阶 WENO 格式^[35]统一处理所有控制方程的对流项,以此提升数值方法的精度、守恒性和鲁棒性;应用 Rhie-Chow 插值计算控制体边界上的速度分量以避免压力振荡.最后,还借鉴了基于格子 Boltzmann 的多相流动相场方法,通过构造多维差分模板改善了表面张力中的梯度计算.

文章的组织结构如下:在第 1 节,介绍了考虑可溶性表面活性剂作用的两相流动相场模型,并提供了流动控制方程的具体表述;在第 2 节,详述了控制方程的数值离散思路,并重点阐述了用于改善表面张力计算的梯度算子差分模板;在第 3 节,对相关数值算例进行了验证分析,从伪势速度、体积守恒以及大物性参数比等方面对算法的准确性、守恒性以及鲁棒性进行了验证;最后,第 4 节,对全文的内容进行了总结与归纳.

1 系统控制方程

1.1 相场方程与表面活性剂输运方程

在相场理论框架下,考虑由两种不混溶流体和可溶性表面活性剂组成的三元体系.为了描述该系统,引入两个相变量:用 ϕ 区分两相流体并描述相界面(记为“界面捕捉相变量”),其在单相区域是常数,而在界面区域光滑连续变化;用 ψ 表征可溶性表面活性剂的浓度,其在体相区域保持较低浓度,而在界面处达到最大值.界面捕捉相变量和表面活性剂浓度演化满足如下 Cahn-Hilliard 方程形式的相场方程:

$$\partial_t \phi + \nabla \cdot (\mathbf{u}\phi) = \nabla \cdot (M_\phi \nabla \mu_\phi), \quad (1)$$

$$\partial_t \psi + \nabla \cdot (\mathbf{u}\psi) = \nabla \cdot (\hat{M}_\psi \nabla \mu_\psi), \quad (2)$$

其中 \mathbf{u} 是速度, M_ϕ 与 \hat{M}_ψ 分别表示两个相变量的迁移率, μ_ϕ 与 μ_ψ 表示对应的化学势.化学势的表达式与自由能泛函有关

$$F_{\text{mix}} = \int_V \left[\frac{1}{4} (\phi^2 - 1)^2 + \frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla \phi|^2 + k_B T [\psi \ln \psi + (1 - \psi) \ln(1 - \psi)] - \frac{1}{4} \psi (1 - \phi^2)^2 + \frac{W}{2} \psi \phi^2 \right] dV, \quad (3)$$

其中 ε 为与界面厚度有关的参数, $k_B T$, W 是与表面活性剂分布有关的参数, k_B 为 Boltzmann 常数, T 为温度, 常数 $k_B T$ 是给定温度下表面活性剂的扩散系数, W 是使表面活性剂在体相区域保持较低浓度的参数.化学势可由上述自由能泛函对两个相变量的变分导数得到

$$\mu_\phi = \frac{\delta F_{\text{mix}}}{\delta \phi} = \phi^3 - \phi - \varepsilon^2 \nabla^2 \phi - \underbrace{\psi (\phi^3 - \phi) + W \psi \phi}_{C_{\phi\psi}}, \quad (4)$$

$$\mu_\psi = \frac{\delta F_{\text{mix}}}{\delta \psi} = k_B T \ln \left(\frac{\psi}{1 - \psi} \right) - \frac{1}{4} (1 - \phi^2)^2 + \frac{W}{2} \phi^2. \quad (5)$$

从式(4)可以看出, μ_ϕ 不仅与界面捕捉相变量有关,还受到表面活性剂的影响,将这一项称为 $C_{\phi\psi}$. Yun 等^[36]指出,该项将会在实际的数值计算中引起非物理的界面行为,实际计算中应将其忽略.相变量与化学势的边界条件为 $\mathbf{n} \cdot \nabla \mu_\phi|_r = \mathbf{n} \cdot \nabla \mu_\psi|_r = 0$, $\mathbf{n} \cdot \nabla \phi|_r = \mathbf{n} \cdot \nabla \psi|_r = 0$.根据平衡态条件,可以由化学势的表达式推导得到两个相变量的平衡态分布:

$$\phi(z) = \tanh \left(\frac{z}{\sqrt{2} \varepsilon} \right), \quad (6)$$

$$\psi = \frac{\psi_b}{\psi_b + \psi_c(\phi)(1 - \psi_b)}, \quad (7)$$

式中 ψ_b 为平衡态体相表面活性剂浓度, 辅助变量 $\psi_c(\phi)$ 是相变量 ϕ 的函数

$$\psi_c(\phi) = e^{\frac{1}{k_b T}} \left[-\frac{1}{4}(\phi^2-1)^2 + \frac{W}{2}(\phi^2-1) \right]. \quad (8)$$

可以看出, 表面活性剂的分布不仅与体相表面活性剂浓度 ψ_b 有关, 还与 $k_b T, W$ 两个参数有关.

1.2 流体动力学方程

采用不可压缩的 Navier-Stokes 方程描述流体流动:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (9)$$

$$\partial_t \rho \mathbf{u} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\eta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \mathbf{f}_s, \quad (10)$$

其中 \mathbf{u} 是速度, ρ 与 η 为流体的密度与黏度, 它们与界面捕捉相变量的分布有关

$$\rho = \frac{\rho_A + \rho_B}{2} + \frac{\rho_A - \rho_B}{2} \phi, \quad (11)$$

$$\eta = \frac{\eta_A + \eta_B}{2} + \frac{\eta_A - \eta_B}{2} \phi, \quad (12)$$

其中 $\rho_A, \rho_B, \eta_A, \eta_B$ 分别为表示流体 A 和 B 的密度与黏度. 式(10)中的 \mathbf{m} 为质量通量, 对于两相流动问题:

$$\mathbf{m} = \rho \mathbf{u} + \frac{\rho_A - \rho_B}{2} (-M_\phi \nabla \mu_\phi). \quad (13)$$

上式为 Huang 等提出的一致性质量通量^[33], 考虑界面捕捉相变量的扩散对质量守恒的影响, 这在连续层面保证了 Navier-Stokes 方程中质量和动量运输的一致性和守恒性.

1.3 连续表面力模型与表面张力的状态方程

Brackbill 等^[37]最早于 1992 年提出了连续表面力模型, 而 Liu 等^[38]将其引入到相场方法中, 这不仅简化了界面曲率的计算, 而且也引入了切向表面张力及其变化, 表面张力计算公式为

$$\mathbf{f}_s = \frac{3\sqrt{2}}{4} \varepsilon \left[\frac{\sigma}{\varepsilon^2} \mu_\phi \nabla \phi + |\nabla \phi|^2 \nabla \sigma - (\nabla \sigma \cdot \nabla \phi) \nabla \phi \right], \quad (14)$$

上式右端括号内第一项表示表面张力的法向分量, 其中 σ 为表面张力系数, 方程右端后两项则表示切向分量, 即 Marangoni 应力. 当表面张力沿界面均匀分布或表面张力系数为常数时, 切向表面张力为零. 然而, 表面活性剂会影响表面张力系数, 如方程(1)和(2)所示, 耦合界面动力学行为的表面活性剂输运过程也导致了 Marangoni 应力的产生. Chang 等^[39]通过实验观察发现, 表面张力会随着表面活性剂浓度的增加而减小, 但不会减小到原表面张力的一半. 在此研究中, 以干净界面的表面张力 σ_0 作为参考值, 通过如下状态方程反映表面张力与表面活性剂浓度之间的相关性^[28]:

$$\frac{\sigma(\psi)}{\sigma_0} = \max \{ 1 + \beta_s \ln(1 - \psi), 0.5 \}, \quad (15)$$

其中 β_s 为弹性数, 用于表征表面活性对表面张力影响的剧烈程度. 在本文的数值研究中, 只关注了较低浓度的表面活性剂输运对液滴多相流动界面动力学行为的影响, 表面张力的变化幅值小于 50%. 式(15)可写为

$$\sigma(\psi) = [1 + \beta_s \ln(1 - \psi)] \sigma_0. \quad (16)$$

2 数值离散

采用基于同位网格的有限体积方法离散求解上述控制方程, 并用五阶 WENO 格式处理对流项以抑制数值扰动和非物理扩散. 引入 Rhie-Chow 插值处理以避免压力振荡, 此外, 计算域外侧设置了虚拟网格, 从而确保在计算域内使用统一的插值格式, 同时简化了边界条件的处理.

2.1 空间离散

2.1.1 界面插值格式

以 x 方向的插值为例, 下标 i, j 表示某网格的位置, $f_{i,j}$ 表示该控制体中心的物理量, 则控制体界面上的值 $f_{i+1/2,j}$ 可以通过 Lagrange 插值表示为

$$f_{i+1/2,j}^{m,n} = \overline{(f_{i-m+1,j}, f_{i-m,j}, \dots, f_{i+n,j})}, \quad (17)$$

其中 m 与 n 分别表示 (i, j) 点左右两侧的插值点数目,以线性插值为例:

$$f_{i+1/2, j}^{1,1} = \overline{(f_{i, j}, f_{i+1, j})} = \frac{f_{i, j} + f_{i+1, j}}{2}, \quad (18)$$

沿着另一个方向的插值也可以用同样的方式来定义,除特别说明外,一般采用二阶精度的线性插值来确定控制体界面上的物理量。

2.1.2 对流项的处理

考虑如下一般形式的散度算子:

$$[\nabla \cdot (\mathbf{f}_1 \mathbf{f}_2)]_{i, j} = \frac{f_{1, i+1/2, j}^x f_{2, i+1/2, j} - f_{1, i-1/2, j}^x f_{2, i-1/2, j}}{\Delta x} + \frac{f_{1, i, j+1/2}^y f_{2, i, j+1/2} - f_{1, i, j-1/2}^y f_{2, i, j-1/2}}{\Delta y}, \quad (19)$$

式中 \mathbf{f}_1 为矢量,其 x 方向与 y 方向的分量表示为 f_1^x 和 f_1^y ,其在网格面上的值 $f_{1, i+1/2, j}^x$ 与 $f_{1, i, j+1/2}^y$ 通过三次 Lagrange 插值获得, f_2 是定义在网格中心的物理量,通过五阶 WENO 插值得到界面上的值。

2.1.3 梯度项的处理

我们主要采用两类梯度算子模板处理不同的场景.如图 1 所示,基于常规中心差分的梯度算子可以表示为

$$\nabla \phi_0 = \left\{ \frac{\partial \phi_0}{\partial x}, \frac{\partial \phi_0}{\partial y} \right\} = \left\{ \frac{\phi_1 - \phi_3}{2\Delta x}, \frac{\phi_2 - \phi_4}{2\Delta y} \right\}. \quad (20)$$

方程(14)所示表面张力项的数值处理涉及大量的梯度计算,而考虑到 Marangoni 效应,表面张力的计算会直接影响界面动力学行为与表面活性剂的输运.因此,为了提高表面张力模型的离散精度,在此借鉴了多相流动格子 Boltzmann 方法中的二维差分模板^[40],引入上下两层网格的邻近节点变量信息构建梯度算子,即 ϕ_5, ϕ_6, ϕ_7 和 ϕ_8 (见图 1).根据二元函数的 Taylor 展开,并给周围点赋予不同的权重,可以得到如下的算子模板:

$$\nabla \phi_0 = \left\{ \frac{\partial \phi_0}{\partial x}, \frac{\partial \phi_0}{\partial y} \right\} = \left\{ \frac{a(\phi_1 - \phi_3) + b(\phi_5 - \phi_6 + \phi_8 - \phi_7)}{(2a + 4b)\Delta x}, \frac{a(\phi_2 - \phi_4) + b(\phi_5 - \phi_8 + \phi_6 - \phi_7)}{(2a + 4b)\Delta x} \right\}, \quad (21)$$

其中 $a + 2b = 1$ 是保证梯度算子二阶精度的必要条件.而当 $a = 4b$ 时,该权重下梯度算子与多相格子 Boltzmann 方法 D2Q9 模型一致^[40].在后续的算例中,将通过比较静态液滴的伪势速度验证不同梯度算子的精度.需要指出的是,只在表面张力项中的梯度算子的数值离散中采用了式(20)定义的二维差分模板.除非特别说明,其他梯度项则采用式(19)定义的常规梯度算子进行处理。

2.1.4 Laplace 算子的处理

黏性项前半部分的离散会涉及 Laplace 算子的处理:

$$[\nabla \cdot (\eta \nabla u)]_{i, j} = \frac{1}{\Delta x} \left(\eta_{i+1/2, j} \frac{u_{i+1, j} - u_{i, j}}{\Delta x} - \eta_{i-1/2, j} \frac{u_{i, j} - u_{i-1, j}}{\Delta x} \right) + \frac{1}{\Delta y} \left(\eta_{i, j+1/2} \frac{u_{i, j+1} - u_{i, j}}{\Delta y} - \eta_{i, j-1/2} \frac{u_{i, j} - u_{i, j-1}}{\Delta y} \right). \quad (22)$$

2.1.5 散度梯度转置算子的离散

黏性项中还含有速度梯度的转置项 $(\nabla \mathbf{u})^T$,按照 Huang 等^[33]的定义,称之为散度梯度转置算子,其处理如下(以 x 方向的离散为例):

$$[\nabla \cdot (\eta (\nabla \mathbf{u})^T)]_{i, j}^x = \frac{1}{\Delta x} \left(\eta_{i+1/2, j} \frac{u_{i+1, j} - u_{i, j}}{\Delta x} - \eta_{i-1/2, j} \frac{u_{i, j} - u_{i-1, j}}{\Delta x} \right) +$$

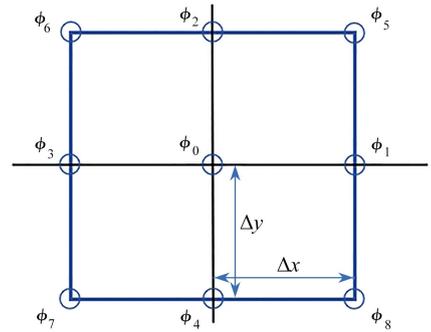


图 1 梯度算子模板点示意图

Fig. 1 The schematic diagram of the template points of the gradient operator

$$\frac{1}{\Delta y} \left(\eta_{i,j+1/2} \frac{v_{i+1/2,j+1/2} - v_{i-1/2,j+1/2}}{\Delta x} - \eta_{i,j-1/2} \frac{v_{i+1/2,j-1/2} - v_{i-1/2,j-1/2}}{\Delta x} \right), \quad (23)$$

其中

$$v_{i+1/2,j+1/2} = \frac{1}{2} (v_{i,j+1/2} + v_{i+1,j+1/2}). \quad (24)$$

2.2 时间离散

本小节将介绍控制方程的时间离散,为处理 Cahn-Hilliard 方程中的四阶非线性项,引入一个中间变量,将原方程转换为两个二阶方程依次进行求解^[34].对于表面活性剂输运方程,利用半隐式方法构造 Helmholtz 方程进行求解^[25].而对于 Navier-Stokes 方程的求解,则采用基于增量压力修正的投影方法^[41].这种方法先求解预测速度场,再进行压力修正的步骤,解决了固有的速度压力耦合问题.

首先介绍对任意变量 χ 的 J 阶精度的时间离散化方案:

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} = \frac{\gamma_0 \chi^{n+1} - \hat{\chi}}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \begin{cases} \chi^{n+1} - \chi^n, & J = 1, \\ \frac{3}{2} \chi^{n+1} - 2\chi^n + \frac{1}{2} \chi^{n-1}, & J = 2. \end{cases} \quad (25)$$

除此之外,定义 $\chi^{*,n+1}$ 为 χ^{n+1} 的显式近似:

$$\chi^{*,n+1} = \begin{cases} \chi^n, & J = 1, \\ 2\chi^n - \chi^{n-1}, & J = 2. \end{cases} \quad (26)$$

本文时间项的处理采用的是二阶离散格式.具体细节如下.

2.2.1 相场方程的求解

遵循 Dong 等^[34]的工作,对四阶非线性的相场方程进行处理,避免了对四阶偏导的计算,可以有效提升数值稳定性,通过依次求解两个二阶 Helmholtz 方程就能更新界面捕捉相变量的分布.

第一步是求解辅助变量 ψ :

$$\nabla^2 \psi - \left(\alpha + \frac{S}{\varepsilon^2} \right) \psi = Q, \quad (27)$$

其中

$$\alpha = -\frac{S}{2\varepsilon^2} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{4\gamma_0}{M_\phi \varepsilon^2 \Delta t} \frac{\varepsilon^4}{S^2}} \right), \quad (28)$$

$$S \geq \varepsilon^2 \sqrt{\frac{4\gamma_0}{M_\phi \varepsilon^2 \Delta t}}, \quad (29)$$

$$Q = \frac{1}{M_\phi \varepsilon^2} \left(-\nabla \cdot (\mathbf{u}^{*,n+1} \phi^{*,n+1}) + \frac{\hat{\phi}}{\Delta t} \right) + \nabla^2 \left[\frac{1}{\varepsilon^2} \phi^{*,n+1} ((\phi^{*,n+1})^2 - 1) - \frac{S}{\varepsilon^2} \phi^{*,n+1} \right], \quad (30)$$

辅助变量 ψ 的边界条件为^[34] $\mathbf{n} \cdot \nabla \psi |_\Gamma = 0$.

第二步是求解下一时间步的相变量 ϕ^{n+1} :

$$\nabla^2 \phi^{n+1} + \alpha \phi^{n+1} = \psi, \quad (31)$$

采用的壁面处界面捕捉相变量的边界条件为 $\mathbf{n} \cdot \nabla \phi |_\Gamma = 0$, 此外,化学势的计算参照

$$\mu_\phi^{n+1} = (\phi^{n+1})^3 - \phi^{n+1} - \varepsilon^2 \nabla^2 \phi^{n+1}. \quad (32)$$

2.2.2 表面活性剂方程的求解

表面活性方程及其化学势如下:

$$\partial_t \psi + \nabla \cdot (\mathbf{u} \psi) = \nabla \cdot (\hat{M}_\psi \nabla \mu_\psi), \quad (33)$$

$$\mu_\psi = k_B T \ln \left(\frac{\psi}{1 - \psi} \right) - \frac{1}{4} (1 - \phi^2)^2 + \frac{W}{2} \phi^2, \quad (34)$$

其中 $\hat{M}_\psi = M_\psi \psi (1 - \psi)$ 为与表面活性浓度有关的迁移率, M_ψ 为一常数,式(33)可以写为如下形式:

$$\partial_t \psi - k_B T \nabla^2 \psi = S, \quad (35)$$

其中

$$S = \nabla \cdot \left[M_\psi \psi (1 - \psi) \nabla \left(-\frac{1}{4} (\phi^2 - 1)^2 + \frac{W}{2} \phi^2 \right) \right] - \nabla \cdot (\mathbf{u}\psi) . \quad (36)$$

数值离散格式如下:

$$\frac{\gamma_0 \psi^{n+1} - \hat{\psi}}{\Delta t} - k_B T \nabla^2 \psi^{n+1} = S^{*,n+1} , \quad (37)$$

上述方程的边界条件为 $\mathbf{n} \cdot \nabla \psi|_r = 0$.

2.2.3 Navier-Stokes 方程的求解

采用增量压力修正的投影方法求解 Navier-Stokes 方程,引入中间速度 \mathbf{u}^* 将方程(10)拆成两个方程:

$$\frac{\gamma \rho^{n+1} \mathbf{u}^* - \hat{\rho} \mathbf{u}}{\Delta t} + \nabla \cdot (\mathbf{m}^{n+1} \mathbf{u}^{*,n+1}) = \nabla \cdot \{ \eta^{n+1} [\nabla \mathbf{u}^* + (\nabla \mathbf{u}^{*,n+1})^T] \} + \mathbf{f}_s^{n+1} - \nabla p^n , \quad (38)$$

$$\frac{\rho^{n+1} \mathbf{u}^{n+1} - \rho^{n+1} \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\nabla (p^{n+1} - p^n) . \quad (39)$$

通过当前步速度更新中间速度,求解方程(38),然后将不可压条件 $\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1}$ 引入方程(39),可以得到

$$\nabla \cdot \left(\frac{\Delta t}{\rho^{n+1}} \nabla (p^{n+1} - p^n) \right) = \nabla \cdot \mathbf{u}^* . \quad (40)$$

对上述关于压力的 Poisson 方程进行求解可以得到 $n+1$ 步的压力分布,再将 $n+1$ 步压力代回方程(39),进而可以得到下一步的速度分布.在此,已经分别介绍了各个方程时间上推进的算法,图 2 展示了具体的求解流程.

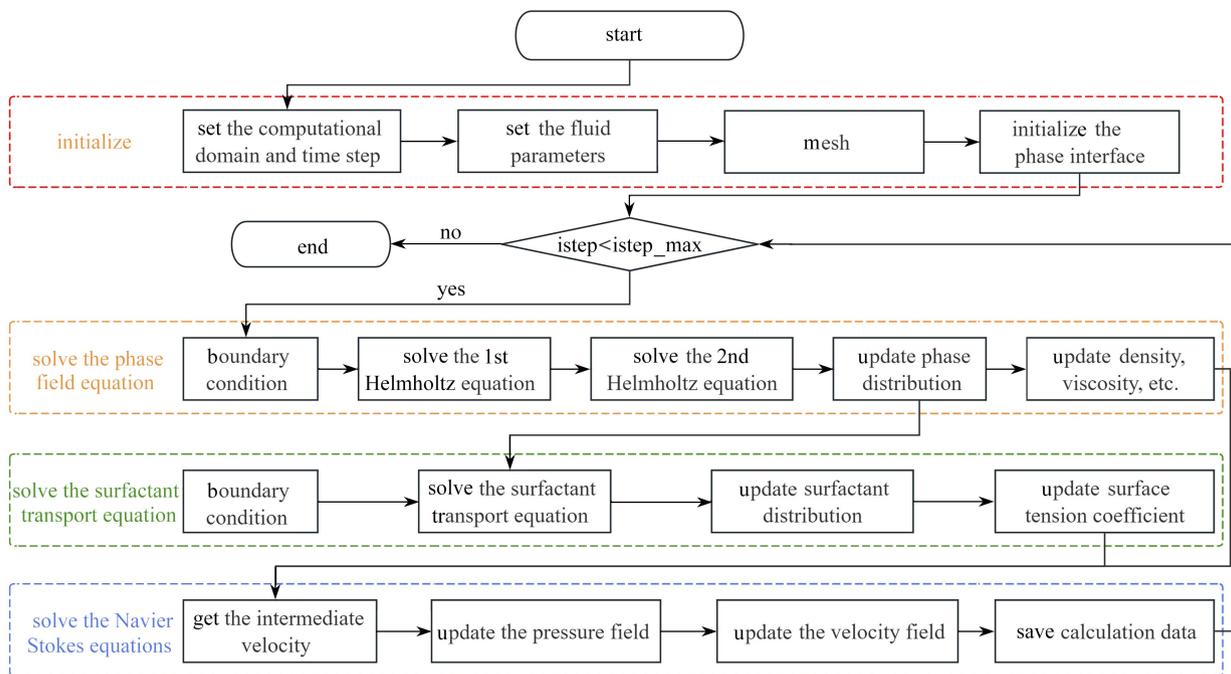


图 2 数值计算流程图

Fig. 2 The flowchart for the numerical calculation

注 为了解释图中的颜色,读者可以参考本文的电子网页版本,后同.

3 数值验证

3.1 两相流动算例验证

3.1.1 静态液滴

静态液滴问题可以量化离散层面上的压力梯度和表面张力之间的平衡.对于一个静置液滴,速度为零,

对流作用和黏性作用消失,此时只有表面张力与压力梯度平衡液滴才能够保持静止状态.然而,数值离散误差会破坏这种平衡,从而在界面附近驱动流体运动,产生非物理的伪势速度^[42].

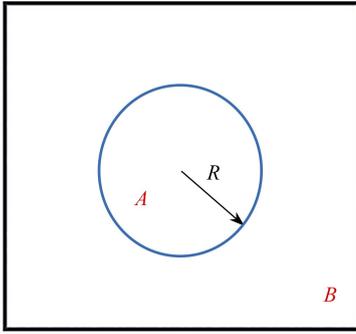


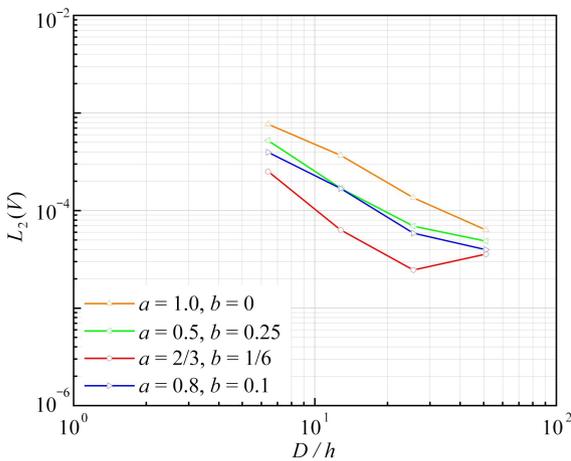
图3 静态液滴示意图

Fig. 3 The schematic diagram of the static droplet

考虑一个四周为无滑移固壁的方形求解域 ($\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$). 一个半径 R 为 0.2 的圆形液滴被放置在求解域的中心, 整个求解域内的初始速度为零. 考虑网格大小 h 为 $1/16, 1/32, 1/64, 1/128$ 的四种情况, 时间步长为 0.001, 流体参数为 $\rho_A = \rho_B = 1\ 000, \eta_A = \eta_B = 0.1, \sigma = 1$, 与相场方程有关的一些参数参照 $\varepsilon = \varepsilon_0 (h/h_0)^{2/3}, M = M_0 (h/h_0)^{3/2}$. 其中 $\varepsilon_0 = h_0 = 1/32, M_0 = 10^{-3}$, 在 $t = 10$ 时分别通过速度的二范数 L_2 与无穷范数 L_∞ 来评估伪势速度. 压力梯度离散由方程 (20) 所示的常规中心差分模板来完成, 在此分别采用四种不同权重的差分算子来离散表面张力并对比其伪势速度

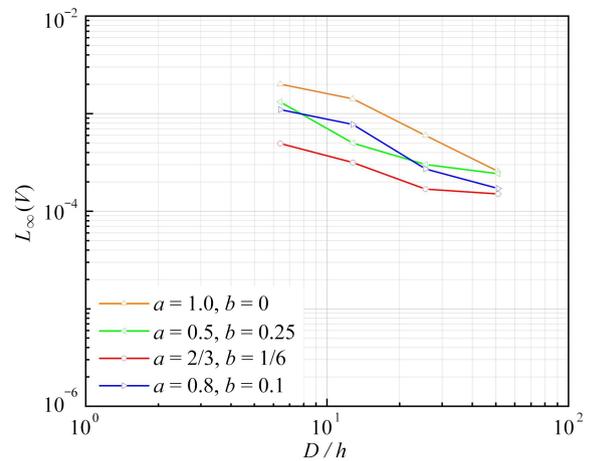
数值, 即按照方程 (21) 所示的定义取不同的 a 值. 显然 $a = 1, b = 0$ 对应由方程 (20) 定义的常规中心差分模板, 而当 $a = 4b$, 即 $a = 2/3, b = 1/6$ 时, 对应多相格子 Boltzmann 方法中计算表面张力所常用的差分模板.

图 4 显示了伪势速度随网格分辨率的收敛情况. 可以观察到, 无论使用哪种梯度算子模板, 随着网格分辨率的提高, 伪势速度误差范数均会收敛到一个较小的值. 值得注意的是, 当 $a = 2/3, b = 1/6$ 时, 即采用格子 Boltzmann 方法常用的差分模板处理表面张力, 伪势速度二范数和无穷范数都小于其他差分算子模板所得结果, 这表明该模板在实现压力梯度与表面张力的数值平衡方面具有优势. 同时, 在表 1 中对比了不同网格分辨率情况下常用差分算子模板与模板 $a = 2/3, b = 1/6$ 计算所得伪势速度, normal 代表常规梯度算子, present 代表格子 Boltzmann 方法一致的二维梯度模板, 结果进一步验证了后者在减少伪势速度误差方面的优势. 如无其他特殊说明, 后续问题研究均采用 $a = 2/3, b = 1/6$ 的梯度模板处理表面张力.



(a) 伪势速度的二范数误差

(a) The 2-norm errors of the pseudopotential velocity



(b) 伪势速度的无穷范数误差

(b) The infinite-norm errors of the pseudopotential velocity

图4 静置液滴结果

Fig. 4 The results of static droplet

除了通过对比伪势速度分析压力与表面张力的平衡之外, 还对不同半径、不同表面张力系数的静置液滴计算了内外压差, 并将计算结果与 Laplace 定律的理论预测进行了对比:

$$\Delta p = \frac{\sigma}{R}. \quad (41)$$

表 1 不同网格分辨率下伪势速度的范数误差

Table 1 Errors of the pseudopotential velocity at different grid resolutions

grid resolution	L_2		L_∞	
	present	normal	present	normal
32×32	6.314×10^{-5}	3.157×10^{-4}	3.680×10^{-4}	1.418×10^{-3}
64×64	2.459×10^{-5}	1.585×10^{-4}	1.354×10^{-4}	5.982×10^{-4}
128×128	3.585×10^{-5}	1.506×10^{-4}	3.732×10^{-5}	2.565×10^{-4}

选用与上述算例相同的求解域与边界条件,测试了 $R = 0.1, 0.15, 0.2, 0.25, 0.3$ 与表面张力系数为 $0.001, 0.002, 0.005$ 情况下液滴的压力分布,流体物性参数为 $\rho_A = 10, \rho_B = 1, \eta_A = \eta_B = 0.01, C_n = \varepsilon/L = 0.01$, 迁移率为 $M_\phi = 10^{-3}$, 采用的网格量为 200×200 .

图 5 展示了三种不同表面张力系数情况下,液滴半径范围从 0.1 到 0.3 时液滴界面内外压差随液滴曲率的变化情况.可以看出,不同表面张力系数条件下的数值解均与解析解吻合良好.图 6 给出了计算结束时求解域中心线 ($y = L/2$) 上半径为 0.25 的液滴 ($\sigma = 0.001$) 相变量 ϕ 的分布,同时还给出了中心线上相变量的理论分布:

$$\phi(x, y) = \tanh\left(\frac{R - \sqrt{(x - L/2)^2 + (y - L/2)^2}}{\sqrt{2}\varepsilon}\right). \quad (42)$$

如图 6 所示,数值计算所得的相变量轮廓线与理论预测完全吻合.

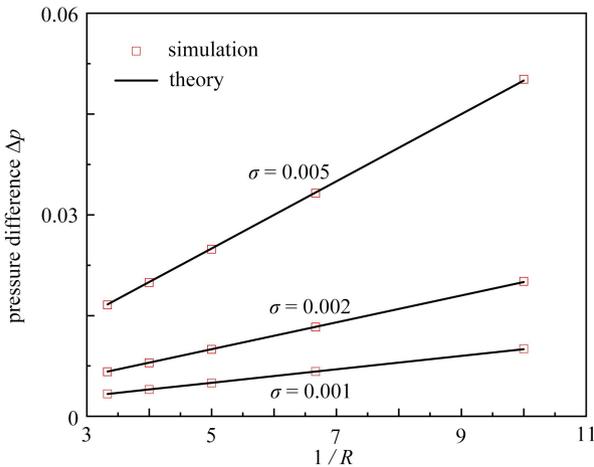


图 5 不同半径不同表面张力系数下液滴内外压差的数值解与理论解的对比

Fig. 5 Comparison of numerical and theoretical solutions of pressure differences between inside and outside droplets with different radii and different surface tension coefficients

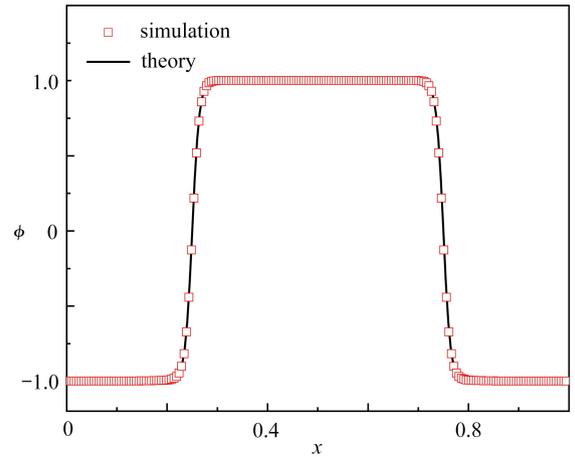


图 6 $R = 0.25$ 时相界面分布的数值解与理论解的对比

Fig. 6 Comparison of numerical and theoretical solutions for the phase interface distribution at $R = 0.25$

3.1.2 液滴融合

本小节将应用液滴融合算例验证本文发展的数值方法在实际计算中的守恒性.如图 7 所示,两液滴 A 放置在环境流体 B 中,当液滴间隙小于两倍的界面宽度时,两个液滴会在表面张力的作用下发生融合.算例设置如图 7 所示,计算域 $\Omega = L \times L = [0, 1] \times [0, 1]$, 四周均为无滑移固壁.液滴半径为 $R = 0.15$, 两个液滴的初始位置分别为 $(0.325, 0.5)$ 与 $(0.675, 0.5)$.其余参数设置为 $\rho_A = 10, \rho_B = 1, \eta_A = 0.1, \eta_B = 0.1, M_\phi = 10^{-3}, \varepsilon = 0.02, \sigma = 0.2$, 时间步长为 $dt = 2 \times 10^{-4}$, 总的计算时间为 10.

图 8 展示了较低网格分辨率条件下 (64×64) 的液滴融合过程,两液滴先是在表面张力作用下互相靠近,然后发生接触融合.如图 8(d) 所示,在 $t = 2$ 时融合液滴在 y 方向有一定的拉长,而 $t = 5$ 时液滴已经趋于稳定(图 8(e)).在此基础上又继续计算了一定时间,在 $t = 10$ 时对融合液滴的相界面数值解(实线)与理论解(虚线)进行了对比,可以看出即便在低网格分辨率情况下,融合后液滴界面分布与理论值吻合程度良好

(图 8(f)).图 9(a)给出了计算过程中液滴体积随时间的变化,采用 $a = 2/3, b = 1/6$ 的差分算子模板处理表面张力得到的液滴体积为理论解的 95.89%,而方程 (19) 所示的常规梯度算子模板得到的计算结果为理论解的 95.20%,表明采用与多相流动格子 Boltzmann 方法一致的差分算子模板离散表面张力还可以改善数值计算的守恒性.

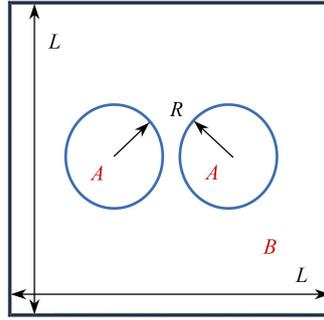


图 7 两个液滴融合的示意图

Fig. 7 Schematic diagram of the fusion of 2 droplets

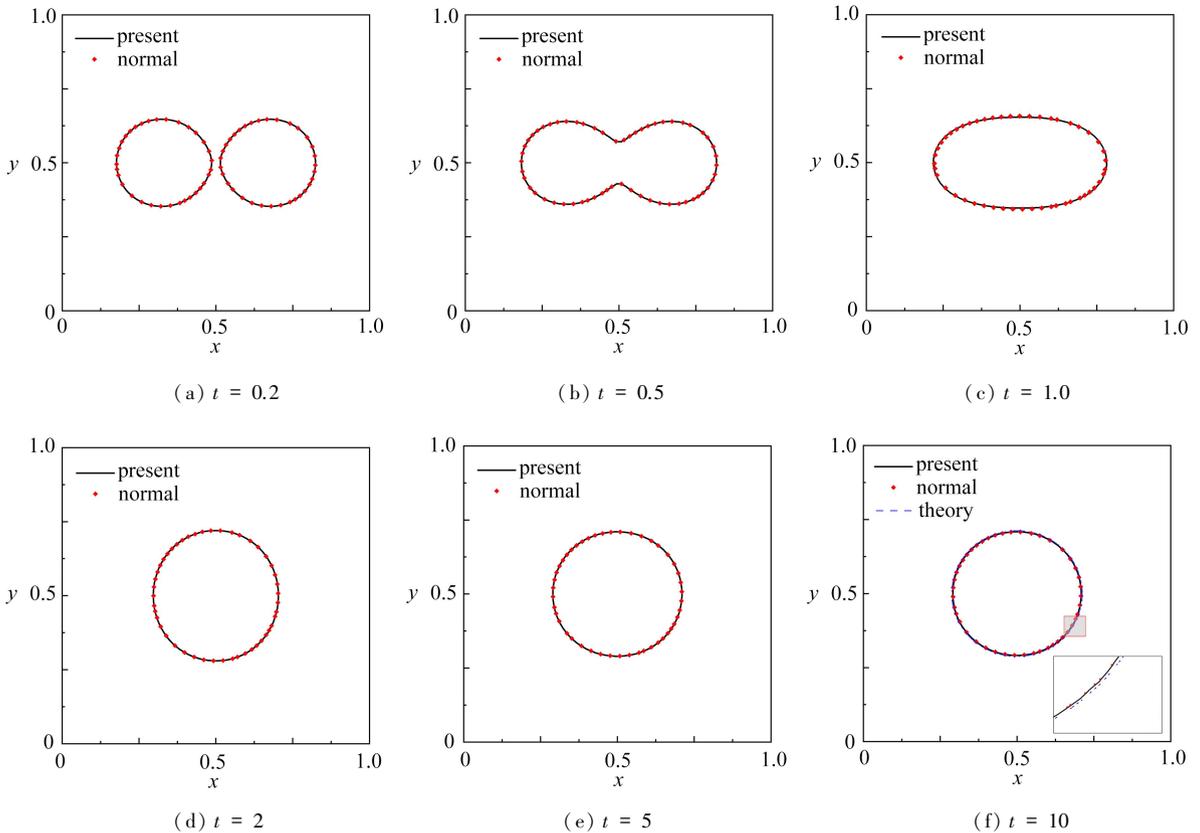


图 8 不同时刻的界面形态

Fig. 8 The interface morphologies at different moments

接下来,采用网格分辨率 200×200 对上述问题进行研究.界面厚度参数改为 $\varepsilon = 0.01$,两个液滴中心分别为 $(0.335, 0.5)$ 与 $(0.665, 0.5)$,时间步长为 $dt = 5 \times 10^{-5}$,其余设置均不变.图 9(b)同样给出了采用两种差分算子模板计算得到的液滴体积随时间的变化情况,在当前网格分辨率条件下,液滴最终体积为理论预测的 99.65%.通过对融合液滴半径的定量误差计算,相对误差为 -0.325% ,小于 Chen 等^[43]的结果 (1.39%).

3.1.3 大密度比气泡上升

应用大密度比与大黏度比情况下的气泡上升问题进一步验证算法的鲁棒性.算例设计如图 10 所示,求解域 $\Omega = L_1 \times L_2 = [0, 1] \times [0, 2]$,一个初始半径 $R = 0.25$ 的液滴位于 $(0.5, 0.5)$,计算域左右边界为滑移固

壁,上下为无滑移固壁.相关的参数为 $\rho_A = 1, \rho_B = 1\ 000, \eta_A = 0.1, \eta_B = 10, M_\phi = 5 \times 10^{-2}, g = 0.98, \sigma = 1.96$, 网格分辨率为 128×256 , 时间步长为 $dt = 10^{-4}$.

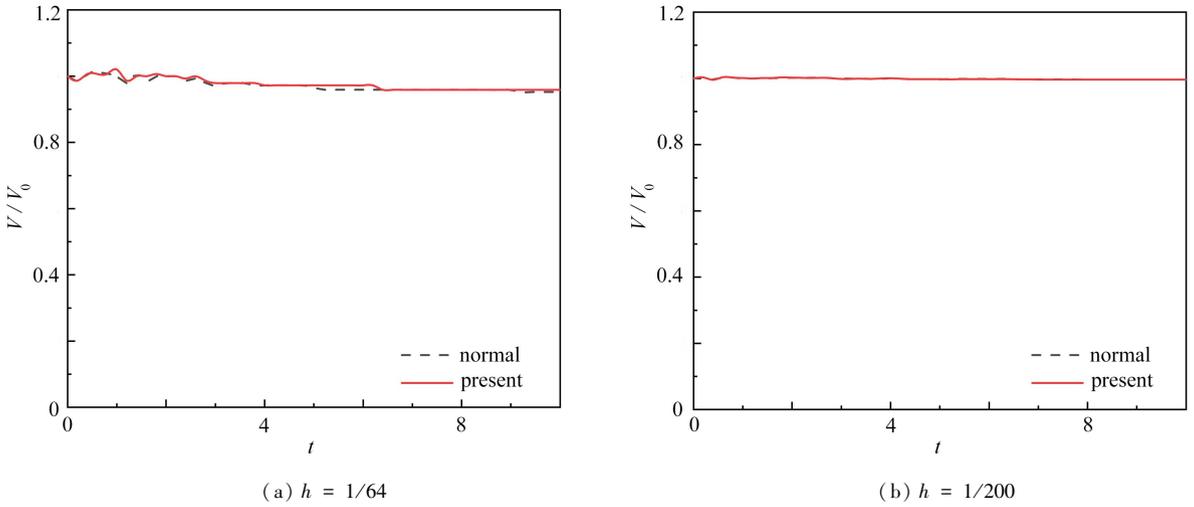


图 9 不同网格分辨率情况下液滴体积随时间的变化

Fig. 9 The variations of droplet volumes with time for different grid resolutions

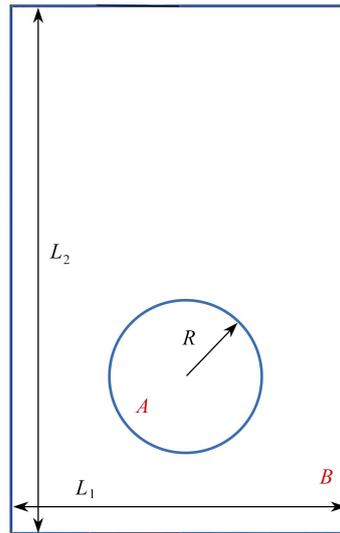


图 10 气泡上升示意图

Fig. 10 The schematic diagram of bubble rise

为了定量对比数值计算结果,定义气泡的质量中心位置 y_c 与平均上升速度 v_c :

$$y_c = \frac{\int_{\Omega} y \frac{1 + \phi}{2} d\Omega}{\int_{\Omega} \frac{1 + \phi}{2} d\Omega}, v_c = \frac{\int_{\Omega} v \frac{1 + \phi}{2} d\Omega}{\int_{\Omega} \frac{1 + \phi}{2} d\Omega}, \tag{43}$$

其中 y 为竖直坐标值, v 为速度 \mathbf{u} 在竖直方向上的分量.

由于流体 A 的密度小于环境流体 B 的密度,因此气泡在浮力的作用下将会上升,图 11 给出了几个时刻的界面快照,图 12 给出了气泡位置和上升速度的定量结果,可以看出计算结果与文献结果^[44-45]吻合良好.

3.2 考虑表面活性作用的两相流动算例

3.2.1 表面活性剂平衡态分布

在 $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ 的求解域的中心放置一个直径为 0.5 的液滴,界面厚度参数为 0.01.不考虑重力的影响,求解域四周为无滑移固壁,初始速度场处处为零,液滴和周围流体的密度与黏度为 $\rho_A = 100, \rho_B = 1, \eta_A$

$= 1, \eta_B = 0.1$, 表面张力系数为 $\sigma_0 = 0.01$, 与表面活性剂分布有关的参数为 $k_B T = 0.675, W = 1, \beta_s = 0.5$, 迁移率常数为 $M_\phi = M_\psi = 10^{-3}$, 计算时间为 10, 在不同体相表面活性剂浓度为 $\psi_b = 0.01, 0.05$ 下进行数值模拟, 网格分辨率为 200×200 . 分别采用方程 (19) 定义的常规梯度模板和二维梯度模板离散表面张力项, 对比分析两者在考虑毛细作用的界面行为描述中的精度.

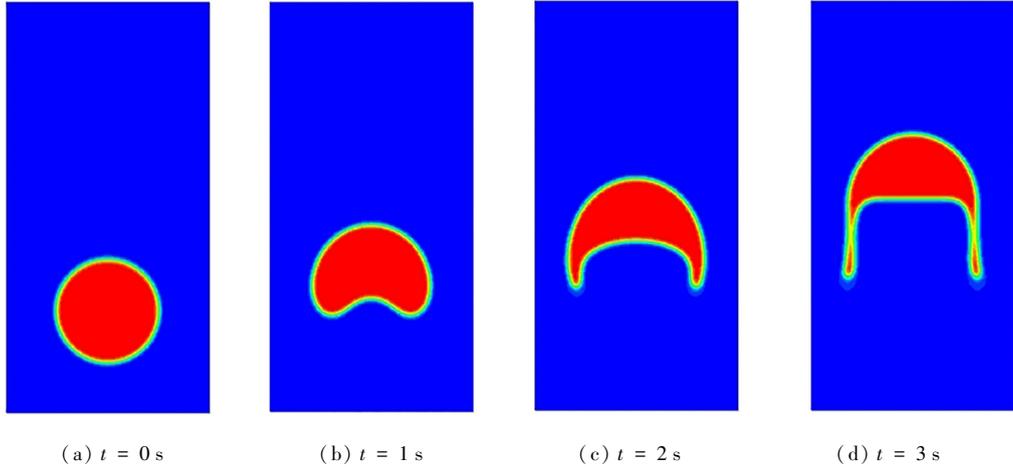


图 11 气泡上升过程中某些时刻的界面形态

Fig. 11 The interface morphologies at some moments during the rise of the bubble

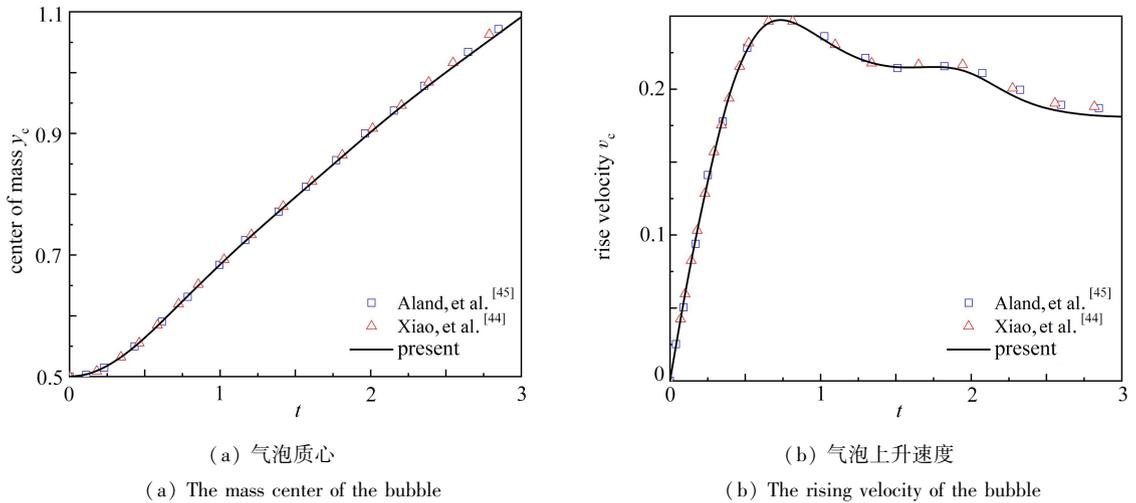


图 12 大密度比气泡的上升速度以及质量中心

Fig. 12 The rising velocity and the centre of mass of the bubble with a large density ratio

图 13 展示了采用两种梯度算子模板计算得到的表面活性在求解域中轴线上的分布, 显然二维梯度模板的结果更为精确. 表 2 还定量对比了水平中心线上表面活性剂浓度的误差范数, 可以看出与多相流动格子 Boltzmann 方法一致的二维梯度模板 (present) 的误差小于常规梯度算子 (normal) 的误差.

表 2 水平中心线上表面活性剂分布误差

Table 2 Errors of surfactant distributions on the horizontal centreline

ψ_b	L_2		L_∞	
	present	normal	present	normal
0.01	1.163×10^{-4}	1.238×10^{-4}	6.067×10^{-4}	6.631×10^{-4}
0.05	5.065×10^{-4}	5.433×10^{-4}	2.721×10^{-3}	3.001×10^{-3}

3.2.2 单液滴剪切变形

为测试当前方法捕捉表面活性剂作用下界面变形的精度, 对液滴在剪切流动下的变形进行数值模拟. 如图 14 所示, 顶部和底部板以恒定的速度 U_0 向相反的方向移动. 两个平行板之间的距离为 $2H = 2$. 一个半径 R

= 0.4 的圆形液滴被放置在计算域的中心.在惯性力、黏性力和表面张力的共同作用下,液滴的形状会发生变化.

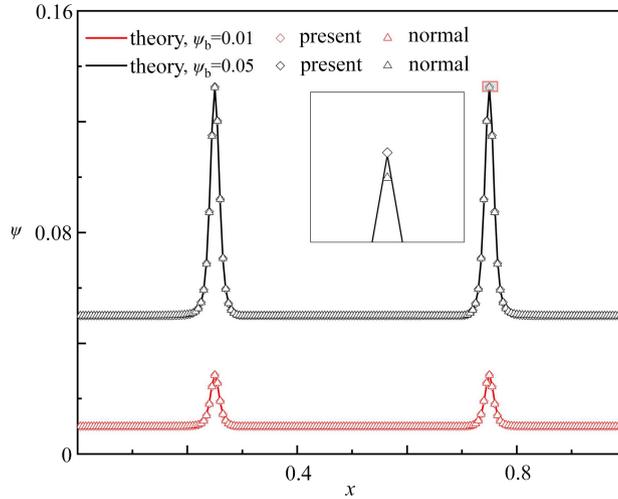


图 13 水平中心线上表面活性剂分布

Fig. 13 The surfactant distributions on the horizontal centre line

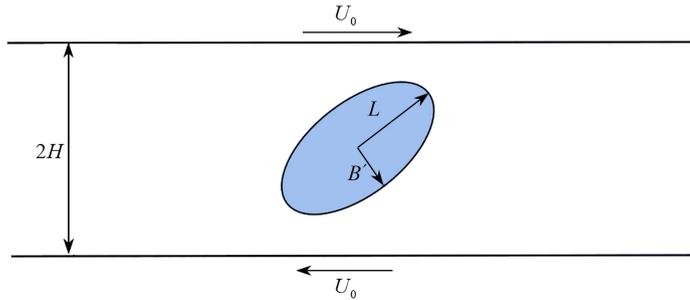


图 14 剪切流动中的单液滴

Fig. 14 The schematic diagram of a droplet in shear flow

默认这两种流体具有相同的密度和黏度.顶壁和底壁为无滑移边界条件,左右为周期边界条件,初始速度场为 Couette 流速分布.液滴的变形取决于 Reynolds 数 Re 和毛细数 Ca :

$$Re = \frac{\rho U_0 H}{\eta}, \quad Ca = \frac{U_0 \eta R}{H \sigma}. \tag{44}$$

第一个测试使用 400×200 网格,考虑 $Re = 0.1$ 的情况,界面厚度参数 $\varepsilon = 0.02$.使用参数 $D = (L - B') / (L + B')$ 表示液滴的变形程度,其中 L 和 B' 分别为界面距离液滴中心 (x_0, y_0) 的最大和最短距离.时间步长为 10^{-4} ,无量纲时间为 $t^* = (H/U_0)t$, $M_\phi = 0.005$,在此分别考虑 Ca 数为 $0.0625, 0.125, 0.1875$ 与 0.25 的情况.图 15 给出了液滴变形参数随时间的变化情况,可以看出,在无量纲时间 $t^* = 2$ 时,液滴已经处于平衡状态.

Taylor^[46] 在 1934 年就对当前问题进行了相关的研究,并提出了关于变形参数的理论公式:

$$D = \frac{35}{32} Ca, \tag{45}$$

其中 D 为变形系数,Shapira 等^[47] 考虑上下壁对液滴变形的约束,提出了修正公式:

$$D = \frac{35}{32} Ca \left[1 + C_{SH} \frac{3.5}{2} \left(\frac{R}{2H} \right)^3 \right], \tag{46}$$

其中 $C_{SH} = 5.6996$.图 16 展示了当前数值计算结果与方程(44)的理论预测以及其他文献参考结果^[48-50] 的比较,可以看出数值结果与理论吻合良好,与 Soligo 等^[50] 的基于高精度方法的结果一致.

引入表面活性剂的影响,参照 Soligo 等^[50] 的工作,与表面活性剂输运有关的参数为 $M_\psi = 0.01$, $k_B T = 0.675$, $W = 4.2735$, $\beta_s = 0.5$, 界面流动参数同上.考虑表面活性剂作用的液滴界面变形参数理论预测公式为^[50]

$$D = \frac{35}{32} Ca_e \left[1 + C_{SH} \frac{3.5}{2} \left(\frac{R}{2H} \right)^3 \right], \quad (47)$$

其中 Ca_e 为等效毛细管数, 其值为 $(\sigma_0/\sigma_{av})Ca$, σ_{av} 为表面活性剂影响下的平均表面张力, 同样地, 在 Ca 为 0.062 5, 0.125 0, 0.187 5 与 0.250 0 的情况计算体相表面活性剂浓度 $\psi_b = 0.01, 0.02$ 的液滴变形。

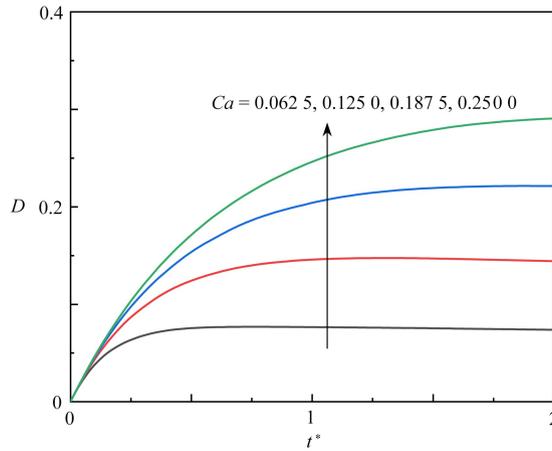


图 15 变形系数随时间的变化

Fig. 15 The deformation coefficient vs. the time

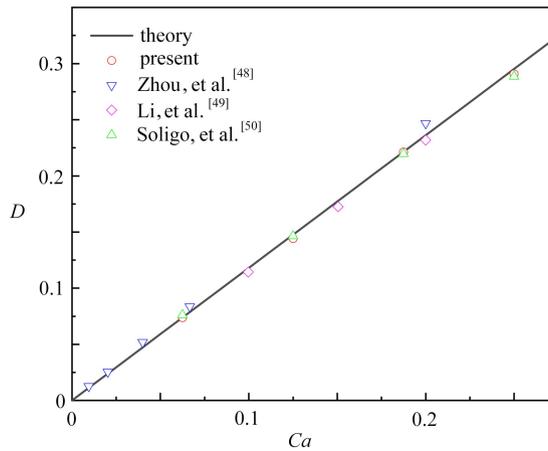


图 16 剪切流中干净液滴变形系数

Fig. 16 The deformation coefficient of the clean droplet in shear flow

图 17 给出了数值计算得到的液滴平衡态变形参数, 结果表明本文发展的方法与 Soligo 等^[50] 的高精度方法所得结果一致, 都可以精确预测表面活性剂作用下的液滴界面变形。

对于考虑表面活性剂影响的单液滴剪切, 解析关系很好地预测了模拟的结果. 在最高 Ca 数 (0.25), 解析解略大于数值结果; 这一方面归结于解析关系的局限性, 而另一方面便是表面活性剂的作用不仅会导致平均表面张力的降低, 表面活性剂在液滴尖端聚集还会导致非均匀表面张力, 这也会影响液滴的界面形态, 这些都是数值计算与理论预测产生一定差距的原因. 图 18 给出了毛细管数为 0.25 时含有 (不含有) 表面活性剂液滴的平衡态界面形态, 可以看出表面活性剂对液滴界面变形的影响, 随着表面活性剂浓度的增加, 液滴变形程度也有所增加。

3.2.3 剪切流动中液滴的破裂

进一步增大 Reynolds 数 ($Re = 10$) 和毛细数 ($Ca = 0.35$), 采用本文提出的方法研究表面活性剂对液滴剧烈变形的影响. 两流体具有相同的密度与黏度, 忽略重力的影响, 一半径 $R = 0.4$ 的液滴放置在求解域 $\Omega = [0, 8] \times [0, 2]$ 的中心. 考虑两种初始体相表面活性剂浓度 $\psi_b = 0.01, 0.02$ 的影响, 与表面活性剂有关的参数设定为 $M_\psi = 0.01$, $k_B T = 0.675$, $W = 4.273 5$, $\beta_s = 1.0$. 求解域上下壁面为无滑移边界条件, 左右为周期性边界

条件.采取的网格量为 512×128 ,界面厚度参数为 $\varepsilon = 0.02$,时间步长为 $dt = 10^{-4}$,总的计算时间为 40.

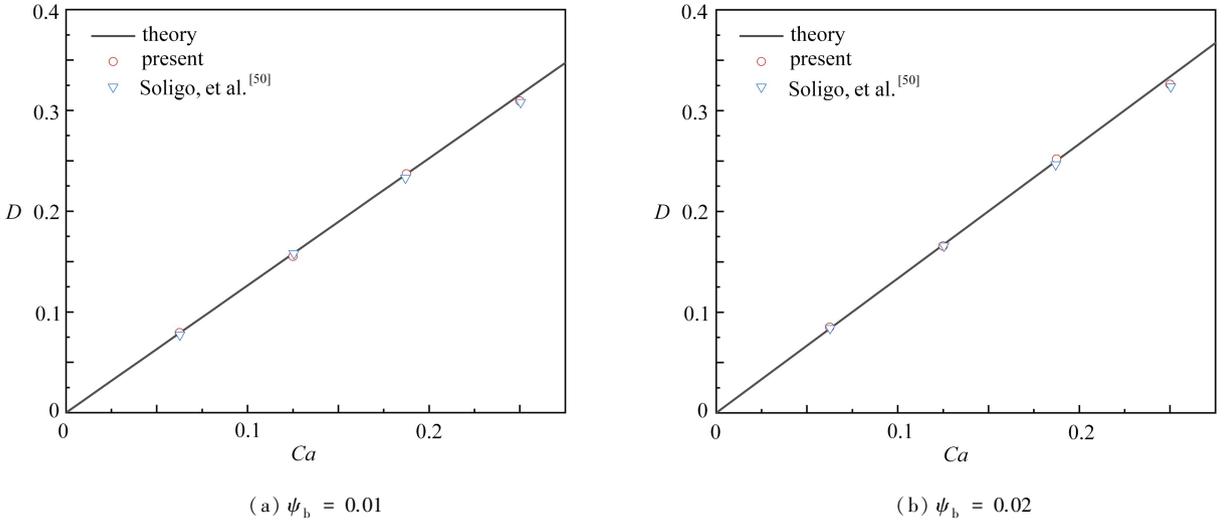


图 17 不同表面活性剂浓度对液滴变形系数的影响

Fig. 17 Effects of different surfactant concentrations on the deformation coefficients of the droplet

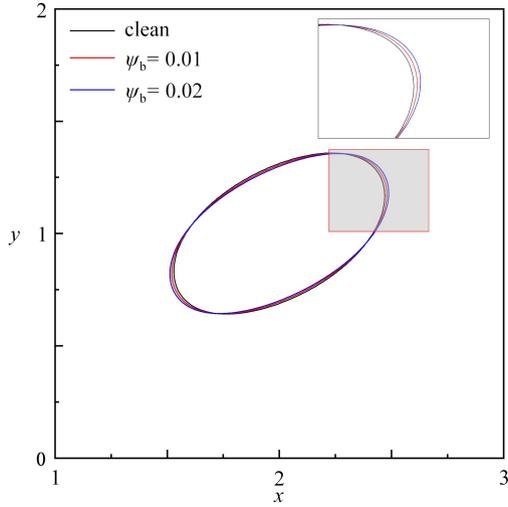


图 18 不同表面活性剂浓度对液滴变形的影响 ($Ca = 0.25$)

Fig. 18 Effects of different surfactant concentrations on droplet deformations ($Ca = 0.25$)

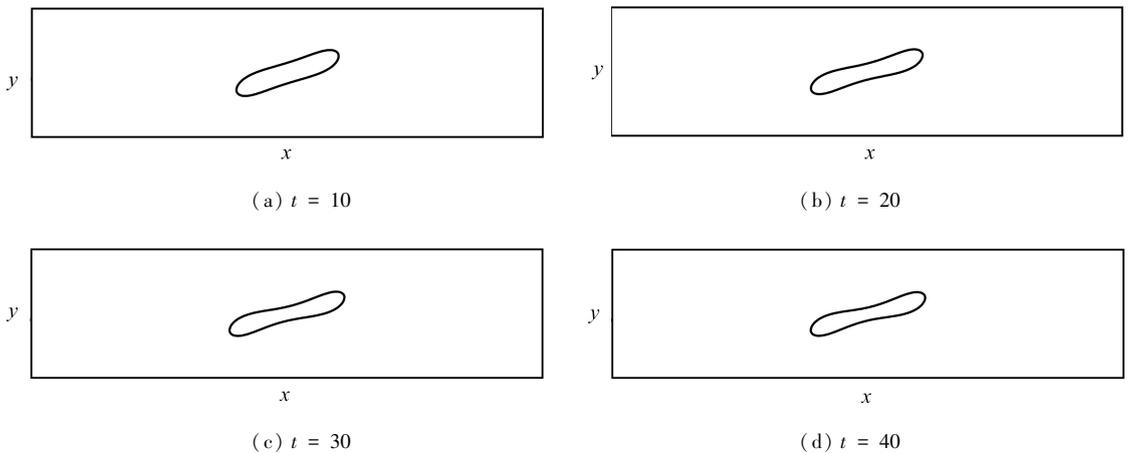


图 19 不同时刻的干净液滴界面形状 ($Re = 10, Ca = 0.35$)

Fig. 19 Interface shapes of the clean droplet at different moments ($Re = 10, Ca = 0.35$)

图 19 给出了干净液滴在上述参数条件下的变形,可以看出液滴没有被拉断,但是对比图 20 中的红色液滴界面形状和图 19 发现,表面活性剂的加入对液滴变形起到了显著推动作用,尤其是在 $t = 40$ 时刻,表面活性剂导致液滴分裂为两个液滴,对比图 20 中的红色和蓝色液滴界面形状可以发现,进一步增加表面活性剂浓度,会使得液滴拉长和分裂变形更为剧烈,如图 20(d) 所示,液滴甚至分裂成为三个液滴,这与 Zong 等^[27] 所观察到的结果一致。

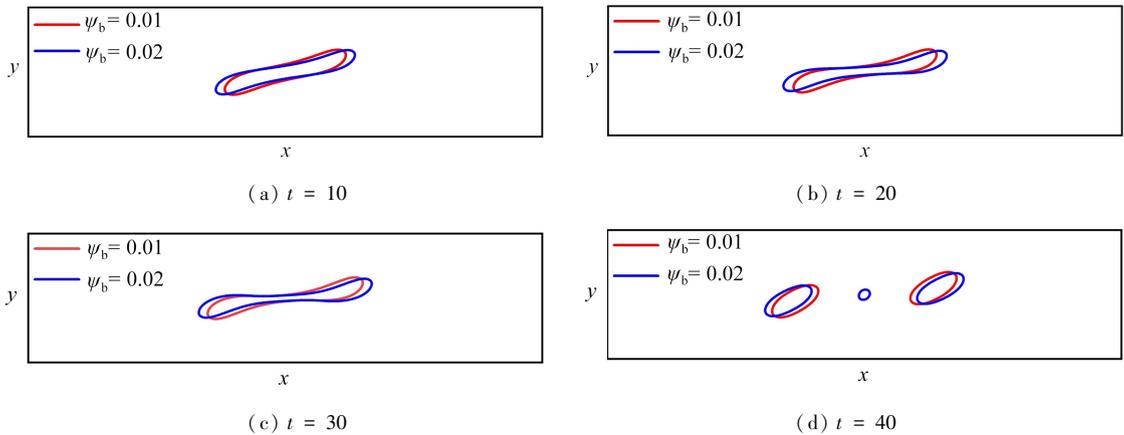


图 20 不同表面活性剂浓度对液滴破裂的影响

Fig. 20 Effects of surfactant concentrations on the droplet breakage

4 结 论

本文发展了一种精确的用于描述含有表面活性剂两相流动的相场方法,引入一致性的质量通量以考虑界面扩散对质量运输的影响,保证界面区域动量运输的一致性和守恒性,用有限体积方法离散守恒形式的控制方程;将 Cahn-Hilliard 方程拆解为两个二阶 Helmholtz 方程以处理四阶非线性扩散项带来的求解困难;采用五阶 WENO 格式处理控制方程的对流项,提高物性参数剧烈变化的界面区域的计算精度和鲁棒性.此外,表面张力是描述界面动力学行为以及表面活性剂作用的关键,涉及大量梯度运算,本文还构造了二维差分算子以改善表面张力的计算。

本文采用静态液滴、液滴融合、气泡上升以及剪切流中的液滴变形与破裂等算例,对发展的方法进行了验证,数值结果表明:多相流动格子 Boltzmann 方法常用的差分模板可以有效改善压力梯度与表面张力的平衡、降低界面伪势速度,提高表面活性剂浓度的计算精度;本文提出的考虑表面活性剂作用的两相流动相场方法在保证质量守恒、预测表面活性剂浓度以及考虑表面活性剂影响的界面行为描述等方面与已有研究具有良好的 consistency。

参考文献 (References):

- [1] BELHAJ A F, ELRAIES K A, MAHMOOD S M, et al. The effect of surfactant concentration, salinity, temperature, and pH on surfactant adsorption for chemical enhanced oil recovery: a review[J]. *Journal of Petroleum Exploration and Production Technology*, 2020, **10**(1): 125-137.
- [2] ROSEN M J, KUNJAPPU J T. *Surfactants and Interfacial Phenomena*[M]. John Wiley & Sons, 2012.
- [3] STONE H A, STROOCK A D, AJDARI A. Engineering flows in small devices: microfluidics toward a lab-on-a-chip[J]. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 2004, **36**: 381-411.
- [4] 孙涛, 庞明军, 费洋. 气泡间距对受污染球形气泡界面性质和尾流的影响[J]. *应用数学和力学*, 2020, **41**(10): 1157-1170. (SUN Tao, PANG Mingjun, FEI Yang. Effects of bubble spacings on interface properties and wake flow for 2 contaminated spherical bubbles[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2020, **41**(10): 1157-1170. (in Chinese))
- [5] MANIKANTAN H, SQUIRES T M. Surfactant dynamics: hidden variables controlling fluid flows[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2020, **892**: P1.

- [6] STONE H A. Dynamics of drop deformation and breakup in viscous fluids[J]. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 1994, **26**: 65-102.
- [7] TRYGGVASON G, BUNNER B, ESMAEELI A, et al. A front-tracking method for the computations of multiphase flow[J]. *Journal of Computational Physics*, 2001, **169**(2): 708-759.
- [8] MITTAL R, IACCARINO G. Immersed boundary methods[J]. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 2005, **37**: 239-261.
- [9] STONE H A, LEAL L G. The effects of surfactants on drop deformation and breakup[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1990, **220**: 161-186.
- [10] MILLIKEN W J, LEAL L G. The influence of surfactant on the deformation and breakup of a viscous drop: the effect of surfactant solubility[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 1994, **166**(2): 275-285.
- [11] MURADOGLU M, TRYGGVASON G. A front-tracking method for computation of interfacial flows with soluble surfactants[J]. *Journal of Computational Physics*, 2008, **227**(4): 2238-2262.
- [12] LUO Z Y, SHANG X L, BAI B F. Effect of soluble surfactant on the motion of a confined droplet in a square microchannel[J]. *Physics of Fluids*, 2019, **31**(11): 117104.
- [13] LUO Z Y, SHANG X L, BAI B F. Marangoni effect on the motion of a droplet covered with insoluble surfactant in a square microchannel[J]. *Physics of Fluids*, 2018, **30**(7): 077101.
- [14] LAI M C, TSENG Y H, HUANG H. An immersed boundary method for interfacial flows with insoluble surfactant[J]. *Journal of Computational Physics*, 2008, **227**(15): 7279-7293.
- [15] LAI M C, TSENG Y H, HUANG H. Numerical simulation of moving contact lines with surfactant by immersed boundary method[J]. *Communications in Computational Physics*, 2010, **8**(4): 735-757.
- [16] HIRT C W, NICHOLS B D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries[J]. *Journal of Computational Physics*, 1981, **39**(1): 201-225.
- [17] OSHER S, FEDKIW R P. Level set methods: an overview and some recent results[J]. *Journal of Computational Physics*, 2001, **169**(2): 463-502.
- [18] JACQMIN D. Calculation of two-phase Navier-Stokes flows using phase-field modeling[J]. *Journal of Computational Physics*, 1999, **155**(1): 96-127.
- [19] RENARDY Y Y, RENARDY M, CRISTINI V. A new volume-of-fluid formulation for surfactants and simulations of drop deformation under shear at a low viscosity ratio[J]. *European Journal of Mechanics B: Fluids*, 2002, **21**(1): 49-59.
- [20] JAMES A J, LOWENGRUB J. A surfactant-conserving volume-of-fluid method for interfacial flows with insoluble surfactant[J]. *Journal of Computational Physics*, 2004, **201**(2): 685-722.
- [21] XU J J, LI Z, LOWENGRUB J, et al. A level-set method for interfacial flows with surfactant[J]. *Journal of Computational Physics*, 2006, **212**(2): 590-616.
- [22] LARADJI M, GUO H, GRANT M, et al. The effect of surfactants on the dynamics of phase separation[J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 1992, **4**(32): 6715-6728.
- [23] LIU H H, ZHANG Y H. Phase-field modeling droplet dynamics with soluble surfactants[J]. *Journal of Computational Physics*, 2010, **229**(24): 9166-9187.
- [24] ENGBLOM S, DO-QUANG M, AMBERG G, et al. On diffuse interface modeling and simulation of surfactants in two-phase fluid flow[J]. *Communications in Computational Physics*, 2013, **14**(4): 879-915.
- [25] SOLIGO G, ROCCON A, SOLDATI A. Coalescence of surfactant-laden drops by phase field method[J]. *Journal of Computational Physics*, 2019, **376**: 1292-1311.
- [26] ZHU G P, KOU J S, YAO B W, et al. Thermodynamically consistent modelling of two-phase flows with moving contact line and soluble surfactants[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2019, **879**: 327-359.
- [27] ZONG Y J, ZHANG C H, LIANG H, et al. Modeling surfactant-laden droplet dynamics by lattice Boltzmann method[J]. *Physics of Fluids*, 2020, **32**(12): 122105.
- [28] ZHOU W N, XING Y F, LIU X L, et al. Modeling of droplet dynamics with soluble surfactant by multi-relaxation-time phase-field lattice Boltzmann method[J]. *Physics of Fluids*, 2023, **35**(1): 012109.
- [29] GUO Z, LIN P. A thermodynamically consistent phase-field model for two-phase flows with thermocapillary

- effects[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2015, **766**: 226-271.
- [30] 李家宇, 曾忠, 乔龙. 相场方法模拟液滴的动态润湿行为[J]. 应用数学和力学, 2019, **40**(9): 957-967. (LI Jiayu, ZENG Zhong, QIAO Long. Numerical simulation of droplets' dynamic wetting process with the phase field method[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2019, **40**(9): 957-967. (in Chinese))
- [31] TANG T, QIAO Z H. Efficient numerical methods for phase-field equations[J]. *Scientia Sinica Mathematica*, 2020, **50**(6): 775.
- [32] YUE P T, ZHOU C F, FENG J J. Spontaneous shrinkage of drops and mass conservation in phase-field simulations[J]. *Journal of Computational Physics*, 2007, **223**(1): 1-9.
- [33] HUANG Z Y, LIN G, ARDEKANI A M. Consistent, essentially conservative and balanced-force phase-field method to model incompressible two-phase flows[J]. *Journal of Computational Physics*, 2020, **406**: 109192.
- [34] DONG S, SHEN J. A time-stepping scheme involving constant coefficient matrices for phase-field simulations of two-phase incompressible flows with large density ratios[J]. *Journal of Computational Physics*, 2012, **231**(17): 5788-5804.
- [35] JIANG G S, SHU C W. Efficient implementation of weighted ENO schemes[J]. *Journal of Computational Physics*, 1996, **126**(1): 202-228.
- [36] YUN A, LI Y B, KIM J. A new phase-field model for a water-oil-surfactant system[J]. *Applied Mathematics and Computation*, 2014, **229**: 422-432.
- [37] BRACKBILL J U, KOTHE D B, ZEMACH C. A continuum method for modeling surface tension[J]. *Journal of Computational Physics*, 1992, **100**(2): 335-354.
- [38] LIU H H, WU L, BA Y, et al. A lattice Boltzmann method for axisymmetric thermocapillary flows[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2017, **104**: 337-350.
- [39] CHANG C H, FRANSES E I. Adsorption dynamics of surfactants at the air/water interface: a critical review of mathematical models, data, and mechanisms[J]. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 1995, **100**: 1-45.
- [40] YUE L Q, CHAI Z H, WANG H L, et al. Improved phase-field-based lattice Boltzmann method for thermocapillary flow[J]. *Physical Review E*, 2022, **105**(1/2): 015314.
- [41] GUERMOND J L, MINEV P, SHEN J. An overview of projection methods for incompressible flows[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2006, **195**(44/47): 6011-6045.
- [42] POPINET S. Numerical models of surface tension[J]. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 2018, **50**: 49-75.
- [43] CHEN Z, SHU C, TAN D, et al. Simplified multiphase lattice Boltzmann method for simulating multiphase flows with large density ratios and complex interfaces[J]. *Physical Review E*, 2018, **98**(6): 063314.
- [44] XIAO Y, ZENG Z, ZHANG L Q, et al. A spectral element-based phase field method for incompressible two-phase flows[J]. *Physics of Fluids*, 2022, **34**(2): 022114.
- [45] ALAND S, VOIGT A. Benchmark computations of diffuse interface models for two-dimensional bubble dynamics[J]. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2012, **69**(3): 747-761.
- [46] TAYLOR G I. The formation of emulsions in definable fields of flow[J]. *Proceedings of the Royal Society of London (Series A): Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 1934, **146**(858): 501-523.
- [47] SHAPIRA M, HABER S. Low Reynolds number motion of a droplet in shear flow including wall effects[J]. *International Journal of Multiphase Flow*, 1990, **16**(2): 305-321.
- [48] ZHOU H, POZRIKIDIS C. The flow of suspensions in channels: single files of drops[J]. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 1993, **5**(2): 311-324.
- [49] LI J, RENARDY Y Y, RENARDY M. Numerical simulation of breakup of a viscous drop in simple shear flow through a volume-of-fluid method[J]. *Physics of Fluids*, 2000, **12**(2): 269-282.
- [50] SOLIGO G, ROCCON A, SOLDATI A. Deformation of clean and surfactant-laden droplets in shear flow[J]. *Meccanica*, 2020, **55**(2): 371-386.