

基于等温伪势格子Boltzmann方法模拟精度提高的研究

杨建华, 高明*, 陶莹, 党梦媛, 曾柏琳

上海理工大学能源与动力工程学院, 上海

收稿日期: 2023年4月3日; 录用日期: 2023年5月24日; 发布日期: 2023年5月31日

摘要

采用单组分多相格子Boltzmann方法研究单液滴在等温基板上蒸发时, 在壁面边界附近施加虚拟流体层来提高模拟精度是十分必要的。本文采用基于伪势法的流固作用模型, 结合构造虚拟流体层的不同方法, 研究了不同接触角方案对模拟过程中产生的最大虚假速度和近壁面流体密度偏差的影响, 结果表明: 基于伪势法构造流固作用力, 当液滴接触角 $\theta < 120^\circ$ 时, 采用复制流体密度法构建虚拟流体层会产生最小的虚假速度和密度偏差, 且存在密度偏差为0的最佳接触角, 是较为理想的构建虚拟流体层, 提高模拟精度的接触角方案。

关键词

格子Boltzmann方法, 虚拟流体层, 接触角, 最大虚假速度, 壁面密度偏差

Investigation on Improvement of Simulation Accuracy Based on Isothermal Pseudo-Potential Lattice Boltzmann Method

Jianhua Yang, Ming Gao*, Ying Tao, Mengyuan Dang, Bolin Zeng

School of Energy and Power Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai

Received: Apr. 3rd, 2023; accepted: May 24th, 2023; published: May 31st, 2023

Abstract

It is necessary to apply a ghost fluid layer near the wall boundary to improve the simulation accuracy.
*通讯作者。

文章引用: 杨建华, 高明, 陶莹, 党梦媛, 曾柏琳. 基于等温伪势格子 Boltzmann 方法模拟精度提高的研究[J]. 建模与仿真, 2023, 12(3): 2887-2897. DOI: 10.12677/mos.2023.123266

racy of the single-component multiphase lattice Boltzmann method for the evaporation of a single droplet on an isothermal substrate. In this paper, the fluid-solid interaction model based on pseudo-potential method is used, and the effects of different contact angle schemes on the maximum spurious velocity and the near-solid fluid density deviation are studied in combination with different methods of constructing the ghost fluid layer. The results show that: The pseudo potential method was used to construct the fluid-solid force, when the droplet contact angle $\theta < 120^\circ$, the duplicated fluid density method can produce the smallest spurious velocity and density deviation, and there is an optimal contact angle with zero density deviation. It is an ideal contact angle scheme to construct the ghost fluid layer and improve the simulation accuracy.

Keywords

Lattice Boltzmann Method, Ghost Fluid Layer, Contact Angle, Maximum Spurious Velocity, Near-Wall Density Deviation

Copyright © 2023 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

润湿现象在自然界和工业中普遍存在，如莲花效应[1]、防冻防霜[2]和沸腾传热[3]等。固体表面的润湿性由接触角来量化，接触角由固体表面的粗糙度和化学均匀性共同决定[4]。由于实验技术的局限性，数值模拟对于理解这些复杂过程中润湿性效应的潜在机制起到了非常重要的作用。

格子 Boltzmann 方法作为一种介观数值方法，具有自动跟踪界面、易于实现复杂几何形状和固体壁面润湿效应的优点。该方法已被广泛应用于研究润湿现象、多相流流动和传热传质问题，如液滴撞击固体表面[5]、三相移动接触线[6]、多孔介质两相流流动[7]和壁面润湿性对沸腾传热的影响[8]等。

伪势格子 Boltzmann 方法(以下简称“LBM”)由于其简单性、通用性和计算效率较高，是应用最广泛的多相 LB 模型[9]。在这种方法中，根据局部流体密度，每个流体节点的“effective mass”模拟了微观流体粒子之间的相互作用。这种方法的优点在于模拟流体具有非理想流体行为，在相变过程中遵循非理想状态方程，并且在相界面处具有表面张力作用，符合真实的物理场。当在伪势多相 LBM 中的固体壁面边界引入流固相互作用时，可以实现固体壁面的润湿特性[10]，固体壁面的接触角由流体粒子间作用力 $F_{cohesive}$ 和流体粒子与壁面间的粘附力 $F_{adhesive}$ 共同决定，流体粒子间作用力 $F_{cohesive}$ 可根据 Shan-Chen 伪势流体 - 流体相互作用力计算格式[9]或其改进形式[11] [12]计算，而流体粒子与壁面间的粘附力 $F_{adhesive}$ 大小取决于流体 - 固体相互作用强度，可根据不同的流固相互作用格式计算[10] [13] [14] [15]。

然而在伪势多相 LBM 中，当对固体壁面施加粘附力 $F_{adhesive}$ 时，发现近壁面的流体密度偏离了体系流体密度[14] [16] [17] [18]。这种近壁面的流体密度偏差(near-solid fluid density deviation，以下简称“NFDD”)被称为“artificial density distributions”[16]，或被称为“unphysical mass transfer layer near solid”[18]。过大的 NFDD 会对最终模拟结果产生显著的非物理影响。伪势 LBM 的另一个主要问题是在模拟过程中相界面附近产生非常大的虚假速度(maximum spurious velocity，以下简称“MSV”) [19]，其会掩盖真实的流体速度，导致算法不稳定。因此，在使用伪势 LBM 研究等温壁面润湿特性问题时，探究 NFDD 和 MSV 的生成影响对于找出最优接触角方案十分重要。

一些研究者[13] [20] [21]采用伪势多相 LBM 实现固体壁面接触角时，建议在壁面附近构造一个附加

的虚拟流体层来计算粘附力 $\mathbf{F}_{\text{adhesive}}$ ，但是大多数涉及伪势多相 LBM 壁面润湿特性的文献都没有明确指出是否在壁面附近添加了的虚拟流体层以及具体的构造方式。此外，在壁面附近添加虚拟流体层对产生 MSV 和 NFDD 的影响尚不明确，并且在各个流固相互作用方案中都没有明确提出构建虚拟流体层的最优方法，此方面的研究在文献中也没有得到足够的重视。

因此，本文采用单组分多相伪势 LBM，结合三种构造虚拟流体层的方法[22]，并与基于伪势的流固作用方案[15]结合，以等温壁面液滴蒸发作为媒介，研究了基于伪势流固作用方案中构建虚拟流体层的最优方法，最终确定了产生最小 NFDD 和 MSV 的理想接触角方案。

2. 数值方法与问题描述

2.1. 数值方法

在伪势多相格子 Boltzmann 模型中，每个节点处的流体粒子都具有“effective mass”， \mathbf{x} 处流体颗粒的“effective mass”可表示为[9]：

$$\psi(\rho(\mathbf{x})) = \sqrt{\frac{2(p - \rho(\mathbf{x})c_s^2)}{c_0 g}} \quad (1)$$

其中 $c_0 = 6$ ， $g = -1$ ， $\rho(\mathbf{x})$ 为流体密度， $c_s = 1/\sqrt{3}$ ，压力 P 可由下式 P-R 状态方程计算得出[11]：

$$P = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - \frac{a\rho^2\varepsilon(T)}{1 + 2b\rho - b^2\rho^2} \quad (2a)$$

其中 $a = 0.4572R^2T_c^2/p_c$ ， $b = 0.0778RT_c/p_c$ ，且 $\varepsilon(T)$ 可通过下式计算：

$$\varepsilon(T) = \left[1 + (0.3746 + 1.5423\omega - 0.2699\omega^2)(1 - \sqrt{T/T_c}) \right]^2 \quad (2b)$$

其中 T_c 和 P_c 表示临界温度和临界压力，本文中水的 ω 为 0.344， $\mathbf{F}_{\text{cohesive}}$ 可由下式计算得到：

$$\mathbf{F}_{\text{cohesive}}(\mathbf{x}) = -\beta\psi(\mathbf{x}) \sum_{\mathbf{x}'} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}') (\mathbf{x}' - \mathbf{x}) - \frac{1-\beta}{2} \sum_{\mathbf{x}'} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \psi^2(\mathbf{x}') (\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \quad (3)$$

方程(3)中的 $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ 为格林函数，满足 $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = G(\mathbf{x}', \mathbf{x})$ ，且 $\beta = 1.16$ 。

格子 Boltzmann 方法利用流体粒子微团的分布函数 $f_i(\mathbf{x}, t)$ 来表征计算区域内流体的运动，具有 LBGK 碰撞算子的 $f_i(\mathbf{x}, t)$ 的单弛豫控制方程表示为：

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + \Delta f_i(\mathbf{x}, t) \quad (4)$$

其中 $f_i(\mathbf{x}, t)$ 为 t 时刻位于 \mathbf{x} 位置的速度为 \mathbf{e}_i 的流体粒子微团的分布函数， Δt 是时间步长，一般取 $\Delta t = 1$ ， τ 为与流体运动黏度有关的无量纲松弛时间， $f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$ 是流体粒子微团平衡态分布函数， $\Delta f_i(\mathbf{x}, t)$ 为体积力项，由下式计算得到：

$$\Delta f_i(\mathbf{x}, t) = f_i^{eq} [\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \Delta \mathbf{u}] - f_i^{eq} [\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)] \quad (5)$$

其中 $\Delta \mathbf{u} = \mathbf{F}(\mathbf{x}) \cdot \Delta t / \rho$ ， $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ 为合力，可表示为：

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{F}_{\text{cohesive}}(\mathbf{x}) + \mathbf{F}_{\text{adhesive}}(\mathbf{x}) \quad (6)$$

其中 $\mathbf{F}_{\text{adhesive}}$ 表示的是流体与壁面之间的粘附力，其在数值上等于流固相互作用力 \mathbf{F}_s 与流体 - 虚拟流体相互作用力 $\mathbf{F}_{\text{ghost}}$ 之和，即： $\mathbf{F}_{\text{adhesive}} = \mathbf{F}_s + \mathbf{F}_{\text{ghost}}$ 。

流固相互作用力 \mathbf{F}_s 可根据以下流固相互作用模型计算[15]：

$$\mathbf{F}_s(\mathbf{x}) = -G_s \psi(\mathbf{x}) \sum_i \omega_i s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i) \mathbf{e}_i \quad (7)$$

流体 - 虚拟流体相互作用力 $\mathbf{F}_{\text{ghost}}$ 可通过以下三种方式构建[22]:

A. 无虚拟流体层:

$$\mathbf{F}_{\text{ghost}}(\mathbf{x}) = 0 \quad (8)$$

B. 复制法构建虚拟流体层:

$$\mathbf{F}_{\text{ghost}}(\mathbf{x}) = -\beta \psi(\mathbf{x}) \sum_i G(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{e}_i) \psi(\mathbf{x}_{\text{neighbor}}) \mathbf{e}_i - [(1-\beta)/2] \sum_i G(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{e}_i) \psi^2(\mathbf{x}_{\text{neighbor}}) \mathbf{e}_i \quad (9)$$

其中对于壁面, $(x_{\text{neighbor}}, y_{\text{neighbor}}) = (x_{\text{solid}}, y_{\text{solid}} + 1)$ 。

C. 常数法构建虚拟流体层:

$$\mathbf{F}_{\text{ghost}}(\mathbf{x}) = -\beta \psi(\mathbf{x}) \sum_i G(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{e}_i) \psi(\rho_{\text{int}}) \mathbf{e}_i - [(1-\beta)/2] \sum_i G(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{e}_i) \psi^2(\rho_{\text{int}}) \mathbf{e}_i \quad (10)$$

其中 $\rho_{\text{int}} = (\rho_{\text{liquid,sat}} + \rho_{\text{vapor,sat}})/2$ 。

D. 当地流体密度法构建虚拟流体层:

$$\mathbf{F}_{\text{ghost}}(\mathbf{x}) = -\beta \psi(\mathbf{x}) \sum_i G(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{e}_i) \psi(\mathbf{x}) \mathbf{e}_i - [(1-\beta)/2] \sum_i G(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{e}_i) \psi^2(\mathbf{x}) \mathbf{e}_i \quad (11)$$

Table 1. Contact angle schemes in this paper

表 1. 本文采用的接触角方案

数量	具体接触角方案
1A	基于伪势法 - 无虚拟流体层 3
1B	基于伪势法 - 复制法构造虚拟流体层 9
1C	基于伪势法 - 常流体密度法构造虚拟流体层 3
1D	基于伪势法 - 当地流体密度法构造虚拟流体层

2.2. 问题描述

图 1 给出了采用表 1 总结的接触角方案, 模拟了等温基板的液滴蒸发过程, 具体参数设置如图所示。根据 Maxwell 构造的汽液共存曲线[15], 可以得到饱和液相密度 $\rho_l = 5.91$, 饱和汽相密度 $\rho_v = 0.58$ 。饱和液相与汽相的运动粘度分别为 $\nu_l = 0.17$, $\nu_v = 1$, 液滴的初始半径 $R = 50$, 等温基板厚度 $H = 20\Delta y$, 计算区域为 $NX \times NY$, 经网格独立性验证后, 计算区域选择为 400×150 , 计算域上下边界为无滑移边界条件, 左右边界为周期性 $NX \times NY$ 边界条件, 固体壁面设置为反弹边界条件。

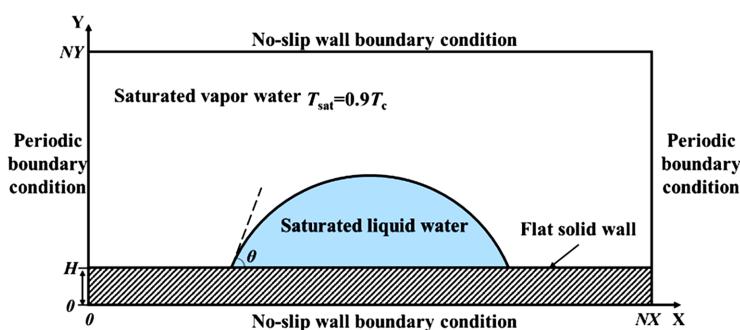


Figure 1. Diagram of droplet evaporation on isothermal substrate

图 1. 等温基板液滴蒸发示意图

3. 模型验证

为了验证所使用的 LBM 模型的正确性，采用拉普拉斯定律对模型进行了可靠性检验。本文将单个液滴置于计算域的中心，边界条件设置为周期性边界条件，模拟所选取的液滴半径为 20、25、30、35、40、45、50 格子单位，结果如图 2 所示。从图中可以看出，当表面张力一定时，液滴内外压差与 $1/R$ 呈线性关系，符合 Laplace 定律。

本文通过对液滴蒸发的 D^2 定律[23]的分析，进一步验证了模型的准确性。在模拟过程中将液滴放在计算区域中心，采用对流与周期性边界条件，液滴温度设置为饱和温度，其中 D_0 为液滴初始直径， D 为液滴蒸发后的直径，图 3 可以看出 $(D/D_0)^2$ 与蒸发时间呈线性关系，符合已知的 D^2 定律，且与 Nishiwaki [24] 的实验结果相吻合。

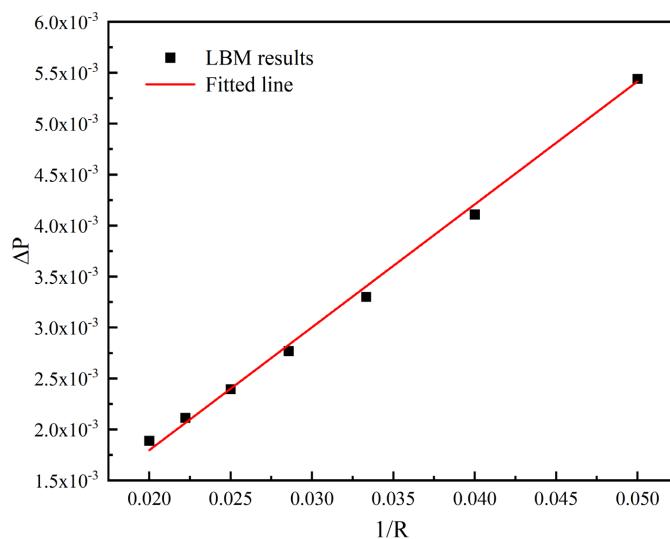


Figure 2. Verification of Laplace law
图 2. Laplace 定律验证图像

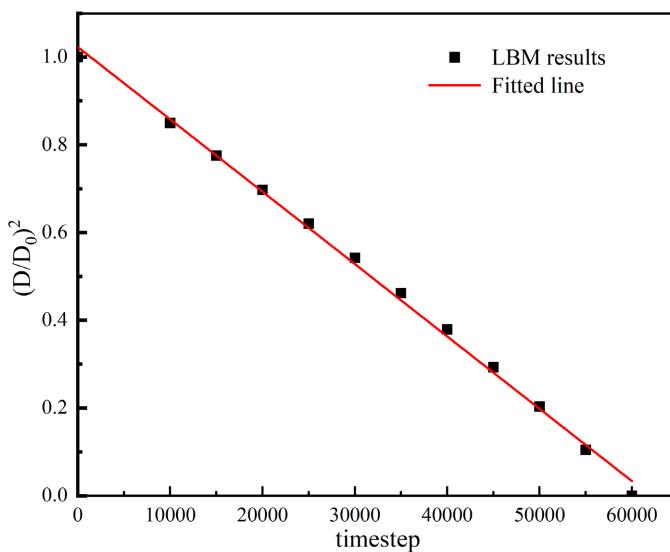


Figure 3. Verification of D^2 law
图 3. D^2 定律验证图像

4. 结果与讨论

采用基于伪势法的流固作用格式结合四种虚拟流体层的构建方法(表 1 中的方法 1A, 1B, 1C 和 1D), 对等温基板固着液滴蒸发过程中产生的 MSV 和 NFDD 等问题进行探究, 在每一个接触角模型中, 流固作用力 \mathbf{F}_s 由方程(7)给出, $\mathbf{F}_{\text{ghost}}$ 有方程(8~11)给出, 最终相对理想的接触角方案将在方案 1A, 1B, 1C 和 1D 中确定。

4.1. 最大虚假速度(MSV)的研究

图 4 表明基于伪势法 - 不施加虚拟流体层(1A)和基于伪势法 - 常流体密度法(1C), 在壁面不同接触角下两种方案产生的最大虚假速度(MSV, $|\mathbf{u}_{\text{sp}}|_{\max}$)十分相近, 且相较于其他虚拟流体层的构建方案, 保持在最小数值; 以复制流体密度法(1B)构建虚拟流体层时, 在接触角 $\theta < 120^\circ$ 时 MSV 维持在较小数值, 但是当接触角 $\theta > 120^\circ$ 时, MSV 会急剧增大, 可能最终会导致算法的不稳定; 以当地流体密度法(1D)构建虚拟流体层时, 此方案的 MSV 相较于其他方案存在着显著提高, 并且 MSV 会随着接触角的增加而变大。综上所述, 从图 4 可以得出, 在基于伪势的流固作用方案中, 无虚拟流体层(A)、复制法(B)和常数法(C)构造虚拟流体层具有最小的 MSV, 因此在接触角 $\theta < 120^\circ$, 在等温固体壁面上使用以上三种方法构造虚拟流体层是数值最稳定的模拟方法。

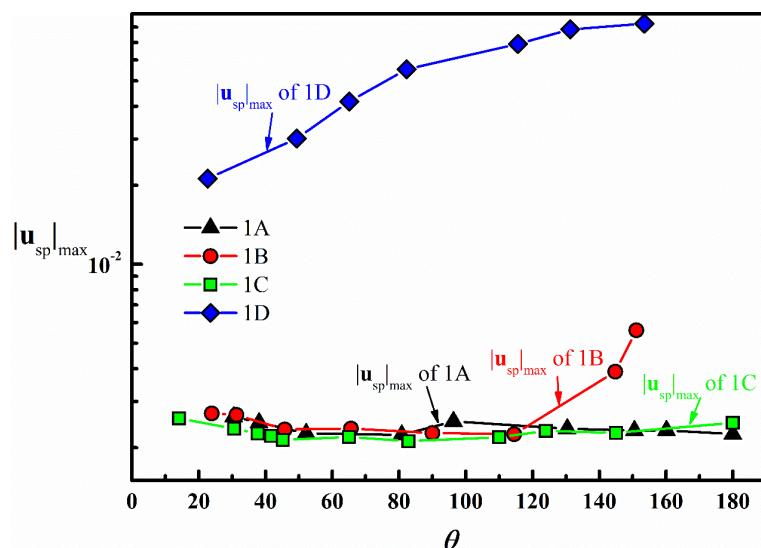


Figure 4. Comparison of MSV in different ghost fluid layer construction methods in the pseudo-potential-based interaction scheme at different contact angles θ (1A: no-ghost fluid layer method; 1B: duplicated method; 1C: constant value method; 1D: local fluid density method)

图 4. 基于伪势流固作用方案在不同接触角 θ 下以不同虚流体层构造方法的 MSV 比较(1A: 无虚流体层; 1B: 复制法; 1C: 常数法; 1D: 当地流体密度法)

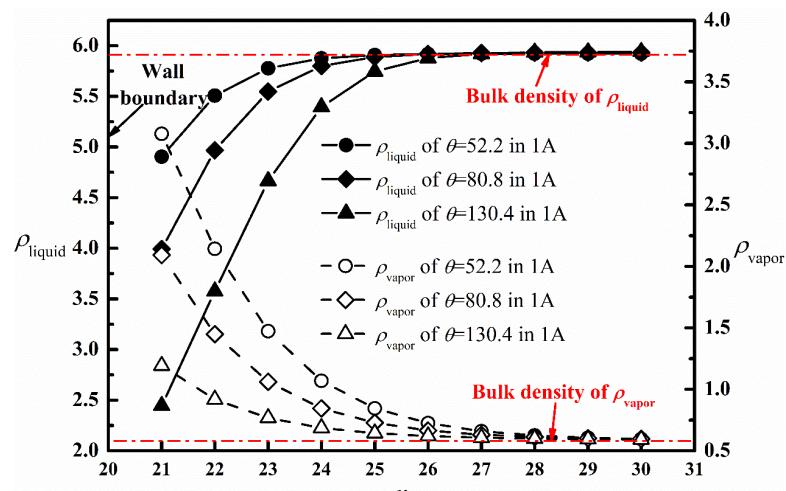
4.2. 液相/气相近壁面密度分布的研究

图 5(a), 图 5(b), 图 5(c), 图 5(d)分别给出了采用不同方案构造虚拟流体层(1A, 1B, 1C 和 1D), 在不同接触角 θ 下, 从体系流体到近壁面($y = 21\sim30$)处的液相流体密度(黑色实线)和汽相流体密度(黑色虚线)的分布情况, 其中液相或汽相的体系流体密度在图中用红色水平点划线表示。

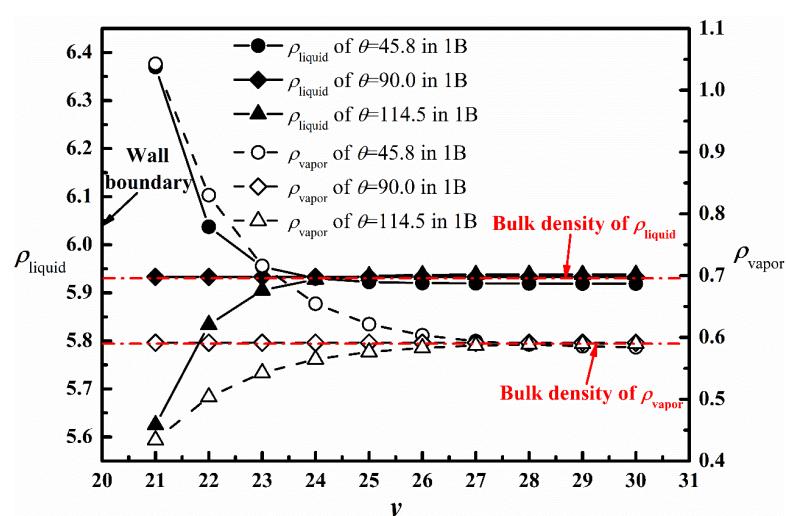
当等温壁面无虚拟流体层时(图 5(a)中的方案 1A), 固体壁面上的近壁面液相密度相较于体系液相密度偏离的流体层厚度为 $6\Delta y$ ($y = 21\sim26$), 近壁面汽相密度相较于体系汽相密度偏离的流体层厚度为 $8\Delta y$ (y

= 21~28), 并且随着接触角的增大, 近壁面液相流体密度偏离值会逐渐变大, 汽相流体密度偏离值会逐渐缩小; 同时, 当等温壁面采用常流体密度法构建虚拟流体层时(图 5(c)中的方案 1C), 其近壁面产生的流体密度相较于体系流体的偏离程度的变化规律与方案 1A 相似; 当等温壁面采用复制流体密度法构建虚拟流体层时(图 5(b)中的方案 1B), 此时近壁面液相密度相较于体系液相密度偏离的流体层厚度为 $4\Delta y$ ($y = 21\sim24$), 汽相密度相较于体系汽相密度偏离的流体层厚度为 $7\Delta y$ ($y = 21\sim27$), 可以得出结论, 存在着密度偏离度为 0 的最佳接触角 $\theta = 90^\circ$, 当接触角偏离 $\theta = 90^\circ$ 时, 近壁面液相/汽相流体的密度偏离程度会突然增大; 同时, 当等温壁面采用当地流体密度法构建虚拟流体层时(图 5(d)中的方案 1D), 近壁面近壁面液相/汽相流体的密度偏离程度变化有着与方案 1B 相似的规律, 且同样存在着密度偏离度为 0 的最佳接触角 $\theta = 65.1^\circ$ 。

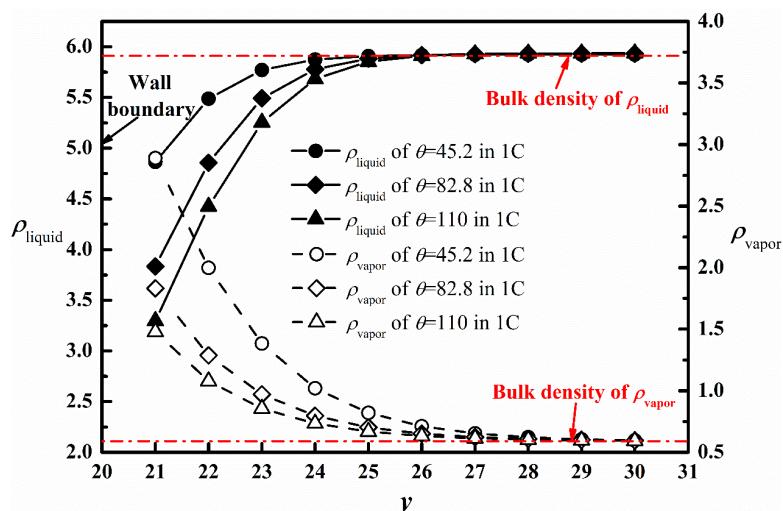
值得注意的是, 当采用方案 1B 和方案 1C 构造虚拟流体层时, 密度偏离度为 0 对所对应的接触角大小虽然不同, 但这两种方案所对应的调节接触角的流固作用系数相同: $G_s = 0$, 可以得出结论, 采用基于伪势法的流固作用格式, 以复制流体密度法(1B)或当地流体密度法(1D)构造虚拟流体层, 当流固作用系数 $G_s = 0$ 时, 可以将近壁面的密度偏离度完全消除。



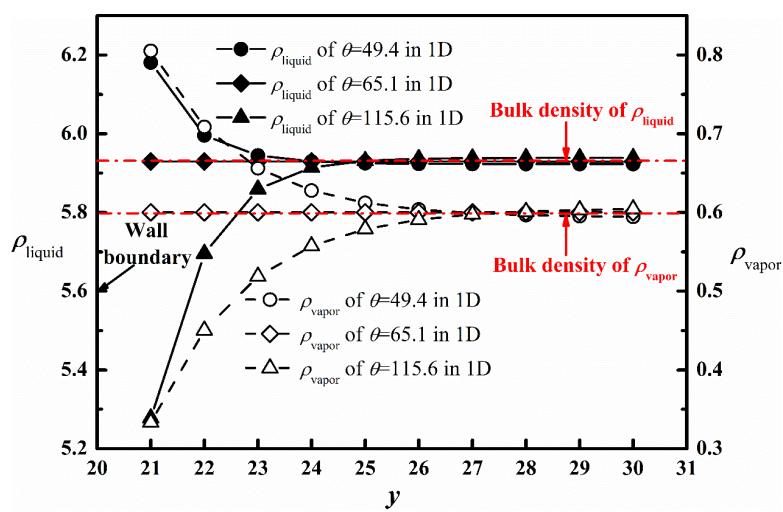
(a) 接触角方案 1A 条件下近壁面液相(汽相)密度分布



(b) 接触角方案 1B 条件下近壁面液相(汽相)密度分布



(c) 接触角方案 1C 条件下近壁面液相(汽相)密度分布



(d) 接触角方案 1D 条件下近壁面液相(汽相)密度分布

Figure 5. Effects of different ghost fluid layer construction methods on near-wall fluid density distribution using the pseudo-potential-based interaction scheme: (a) no-ghost fluid layer method (1A), (b) duplicated method (1B), (c) constant value method (1C), (d) local fluid density method (1D)

图 5. 基于伪势流固作用格式的不同虚流体层构造方法对近壁流体密度分布的影响: (a) 无虚流体层(1A), (b) 复制法(1B), (c) 常数法(1C), (d) 当地流体密度法(1D)

4.3. 近壁面密度偏差(NFDD)的研究

当采用不同的接触角方案(1A, 1B, 1C 和 1D)实现等温壁面的润湿特性时, 如图 5 所示, 近壁面的液相/汽相的流体层密度会相较于体系流体密度发生非物理性偏离, 为了定量评估这种非物理性流体密度偏差, 将近壁面液相(蒸相)的密度偏差因子定义为:

$$\varepsilon_{\text{liquid}} = |\rho(NX/2, H+1) - \rho(NX/2, H+10)| / \rho(NX/2, H+10) \quad (12)$$

$$\varepsilon_{\text{vapor}} = |\rho(0.84 \times NX, H+1) - \rho(0.84 \times NX, H+10)| / \rho(0.84 \times NX, H+10) \quad (13)$$

其中 $\rho(NX/2, H+1)$ 表示的是 $x = NX/2$ 处平壁附近流体层($y = H + 1$)的液相密度, $\rho(NX/2, H+10)$ 表示的是 $x = NX/2$ 处体系液相流体密度, 此时体系液相流体密度选取在 $y = H + 10$, 这是因为从图 5 可以看出,

流体的密度偏差只发生在近壁面附近的流体层内(流体层厚度 $< 10\Delta y$)，选择近壁面汽相密度值 $\rho(0.84 \times NX, H+1)$ 和体系汽相流体密度值 $\rho(0.84 \times NX, H+10)$ 的原因也与液相流体密度值的选择原因类似。

图 6 表明采用方案 1A 和 1C，近壁面液相密度偏差 $\varepsilon_{\text{liquid}}$ 随着接触角的增加而明显增大，汽相密度偏差 $\varepsilon_{\text{vapor}}$ 随接触角的增大而减小，所以在任意接触角下，采用基于伪势的流固作用格式时，不推荐使用无虚拟流体层(A)和常流体密度法(C)来构建虚拟流体层；与之相反，采用复制流体密度法(B)和常流体密度法(D)构建流体层， $\varepsilon_{\text{liquid}}$ 和 $\varepsilon_{\text{vapor}}$ 相较于方案 1A 和 1C 要小得多。通过比较图 5 与图 6 得出的结果，可以得出结论：采用基于伪势法的流固作用格式，在接触角 $\theta < 120^\circ$ 时，以复制流体密度法(B)构造虚拟流体层是最合理的方案，且存在最佳接触角 $\theta = 90^\circ$ 。

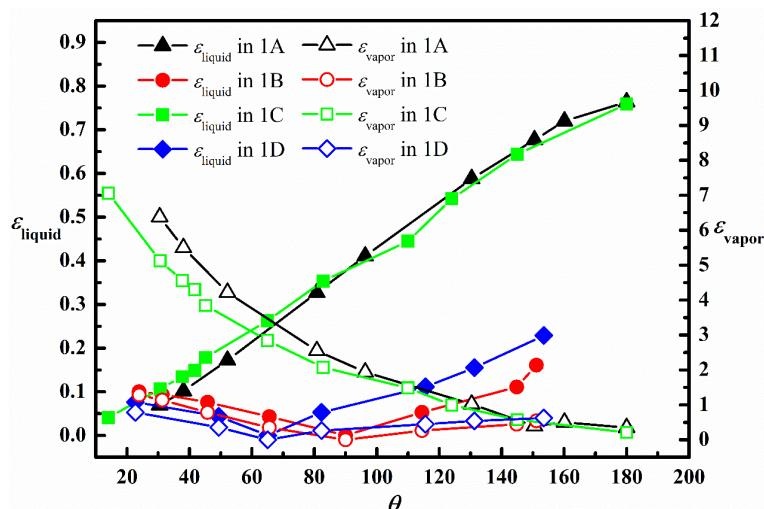


Figure 6. Comparison of near-wall liquid density deviation $\varepsilon_{\text{liquid}}$ and near-solid vapor density deviation $\varepsilon_{\text{vapor}}$ in different ghost fluid layer construction method by using the pseudo-potential-based interaction scheme at different contact angles θ (1A: no-ghost fluid layer method; 1B: duplicated method; 1C: constant value method; 1D: local fluid density method)

图 6. 基于伪势法不同构造虚拟流体层方式的 $\varepsilon_{\text{liquid}}$ 和 $\varepsilon_{\text{vapor}}$ 随接触角 θ 的变化情况(1A: 无虚流体层; 1B: 复制法; 1C: 常数法; 1D: 当地流体密度法)

5. 结论

本文采用单组分多相格子 Boltzmann 方法，主要研究了以不同方式施加虚拟流体层对等温基板液滴蒸发模拟精度的影响，主要结论如下：

- 1) 基于伪势法构造流固作力，以复制流体密度法(B)施加虚拟流体层，在接触角 $\theta < 120^\circ$ 时产生的 MSV 保持在较小数值，但不适合模拟较疏水的润湿表面($\theta > 120^\circ$)，会使 MSV 急剧增大，而以常流体密度法和当地流体密度法施加虚拟流体层，产生的 MSV 始终维持在较小的数值。
- 2) 采用基于伪势法的流固作用格式，在接触角 $\theta < 120^\circ$ 时，以复制流体密度法(B)构造虚拟流体层产生的 NFDD 最小，且存在壁面密度偏差为 0 的最佳接触角，是较为理想的构建虚拟流体层，提高模拟精度的接触角方案。

参考文献

- [1] Marmur, A. (2004) The Lotus Effect: Superhydrophobicity and Metastability. *Langmuir*, **20**, 3517-3519.
<https://doi.org/10.1021/la036369u>

- [2] Cao, L., Jones, A.K., Sikka, V.K., Wu, J. and Gao, D. (2009) Anti-icing Superhydrophobic Coatings. *Langmuir*, **25**, 12444-12448. <https://doi.org/10.1021/la902882b>
- [3] Phan, H.T., Caney, N., Marty, P., Colasson, S. and Gavillet, J. (2009) Surface Wettability Control by Nanocoating: The Effects on Pool Boiling Heat Transfer and Nucleation Mechanism. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **52**, 5459-5471. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2009.06.032>
- [4] Lafuma, A. and Quéré, D. (2003) Superhydrophobic States. *Nature Materials*, **2**, 457-460. <https://doi.org/10.1038/nmat924>
- [5] Shen, S., Bi, F. and Guo, Y. (2012) Simulation of Droplets Impact on Curved Surfaces with lattice Boltzmann Method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **55**, 6938-6943. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.07.007>
- [6] Yu, Y., Li, Q., Zhou, C.Q., Zhou, P. and Yan, H.J. (2017) Investigation of Droplet Evaporation on Heterogeneous Surfaces Using a Three-Dimensional Thermal Multiphase Lattice Boltzmann Model. *Applied Thermal Engineering*, **127**, 1346-1354. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2017.08.158>
- [7] Hao, L. and Cheng, P. (2010) Pore-Scale Simulations on Relative Permeabilities of Porous Media by Lattice Boltzmann Method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **53**, 1908-1913. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2009.12.066>
- [8] Gong, S. and Cheng, P. (2015) Lattice Boltzmann Simulations for Surface Wettability Effects in Saturated Pool Boiling Heat Transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **85**, 635-646. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2015.02.008>
- [9] Shan, X. and Chen, H. (1993) Lattice Boltzmann Model for Simulating Flows with Multiple Phases and Components. *Physical Review E*, **47**, 1815-1819. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.47.1815>
- [10] Martys, N.S. and Chen, H. (1996) Simulation of Multicomponent Fluids in Complex Three-Dimensional Geometries by the Lattice Boltzmann Method. *Physical Review E*, **53**, 743-750. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.53.743>
- [11] Gong, S. and Cheng, P. (2012) Numerical Investigation of Droplet Motion and Coalescence by an Improved Lattice Boltzmann Model for Phase Transitions and Multiphase Flows. *Computers & Fluids*, **53**, 93-104. <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2011.09.013>
- [12] He, X. and Doolen, G.D. (2002) Thermodynamic Foundations of Kinetic Theory and Lattice Boltzmann Models for Multiphase Flows. *Journal of Statistical Physics*, **107**, 309-328. <https://doi.org/10.1023/A:1014527108336>
- [13] Li, Q., Luo, K.H., Kang, Q.J. and Chen, Q. (2014) Contact Angles in the Pseudopotential Lattice Boltzmann Modeling of Wetting. *Physical Review E*, **90**, Article ID: 053301. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.90.053301>
- [14] Li, Q., Yu, Y. and Luo, K.H. (2019) Implementation of Contact Angles in Pseudopotential Lattice Boltzmann Simulations with Curved Boundaries. *Physical Review E*, **100**, Article ID: 053313. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.100.053313>
- [15] Sukop, M.C. and Thorne D.T. (2006) Lattice Boltzmann Modeling: An Introduction for Geoscientists and Engineers. Springer, Berlin. <https://doi.org/10.1007/978-3-540-27982-2>
- [16] Attar, E. and Körner, C. (2009) Lattice Boltzmann Method for Dynamic Wetting Problems. *Journal of Colloid and Interface Science*, **335**, 84-93. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2009.02.055>
- [17] Raiskinmäki, P., Shakib-Manesh, A., Jäsberg, A., Koponen, A., Merikoski, J. and Timonen, J. (2002) Lattice-Boltzmann Simulation of Capillary Rise Dynamics. *Journal of Statistical Physics*, **107**, 143-158. <https://doi.org/10.1023/A:1014506503793>
- [18] Akai, T., Bijeljic, B. and Blunt, M.J. (2018) Wetting Boundary Condition for the Color-Gradient Lattice Boltzmann Method: Validation with Analytical and Experimental Data. *Advances in Water Resources*, **116**, 56-66. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2018.03.014>
- [19] Shan, X. (2006) Analysis and Reduction of the Spurious Current in a Class of Multiphase Lattice Boltzmann Models. *Physical Review E*, **73**, Article ID: 047701. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.73.047701>
- [20] Gong, S. and Cheng, P. (2017) Direct Numerical Simulations of Pool Boiling Curves Including Heater's Thermal Responses and the Effect of Vapor Phase's Thermal Conductivity. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, **87**, 61-71. <https://doi.org/10.1016/j.icheatmasstransfer.2017.06.023>
- [21] Yang, J., Fei, L., Zhang, X., Ma, X., Luo, K.H. and Shuai, S. (2021) Improved Pseudopotential Lattice Boltzmann Model for Liquid Water Transport Inside Gas Diffusion Layers. *International Journal of Hydrogen Energy*, **46**, 15938-15950. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.02.067>
- [22] Wang, D. (2022) Effects of Fluid-Solid Wall Heat Transfer on the Achievable Simulated Solid Wall Contact Angles in Pseudopotential Lattice Boltzmann Method with Different Ghost Fluid Layers Constructed at a Solid Wall. *Heat*

- Transfer Research*, **53**, 21-33. <https://doi.org/10.1615/HeatTransRes.2021040253>
- [23] Law, C.K. (1982) Recent Advances in Droplet Vaporization and Combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, **8**, 171-201. [https://doi.org/10.1016/0360-1285\(82\)90011-9](https://doi.org/10.1016/0360-1285(82)90011-9)
- [24] Nishiwaki, N. (1955) Kinetics of Liquid Combustion Processes: Evaporation and Ignition Lag of Fuel Droplets. *Symposium (International) on Combustion*, **5**, 148-158. [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(55\)80022-7](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(55)80022-7)