

УДК 532.7+532.516.5+532.593

МЕТОД РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДВУХФАЗНЫХ СИСТЕМ ТИПА ЖИДКОСТЬ-ПАР

Куперштох А.Л.

Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск, Россия

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 10-08-000805), Президиума РАН (проект № 12.12), Отделения энергетики, машиностроения, механики и процессов управления РАН (проект № 14.3) и Сибирского отделения РАН (проекты № 58-2009 и № 116-2009)

АННОТАЦИЯ

Сравнительно новый метод решеточных уравнений Больцмана (LBE) представляет собой дискретную модель сплошной среды. В настоящее время метод LBE вполне может конкурировать с традиционными методами вычислительной гидродинамики, а в некоторых областях (течения в пористой среде, многофазные и многокомпонентные течения) он имеет значительные преимущества. При моделировании фазовых переходов метод LBE

представляет собой метод сквозного счета границ раздела фаз. Алгоритм LBE хорошо распараллеливается на большое количество потоковых процессоров в современных графических картах. Ускорение расчетов достигает 60-80 раз. Приведены примеры моделирования соударения капель с образованием кумулятивных струй, спиновальной декомпозиции и вскипания пересжатой жидкости при истечении из канала в свободный объем.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время широко применяется компьютерное моделирование течений среды методом решеточных уравнений Больцмана – Lattice Boltzmann Equation (LBE). Метод LBE широко используется для компьютерного моделирования течений жидкости, включая многофазные и многокомпонентные [1-5].

Решеточные методы представляют собой сравнительно новый класс методов, использующих мезоскопический подход к описанию вещества. Метод LBE представляет собой дискретную модель сплошной среды. Теоретическим основанием метода решеточных уравнений Больцмана служит тот

факт, что поведение сплошной среды на макроуровне слабо зависит от деталей ее микроскопического строения. Особенности структуры и взаимодействия частиц вещества определяют только коэффициенты переноса. При этом метод решеточных уравнений Больцмана более перспективен, чем обычные конечно-разностные методы, так как более адекватен природе вещества. В настоящее время метод LBE вполне может конкурировать с традиционными методами вычислительной гидродинамики, а в некоторых областях (течения в пористой среде, многофазные и многокомпонентные течения) он имеет значительные преимущества.

МЕТОД РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА

В отличие от классических методов расчета течений жидкости путем решения уравнений Навье – Стокса метод решеточных уравнений Больцмана рассматривает течение как движение ансамбля псевдо-частиц, имеющих некоторую функцию распределения по дискретным скоростям.

Основная идея была предложена в [6], для чего в кинетическом уравнении Больцмана использовался дискретный конечный набор скоростей частиц \mathbf{c}_k . В дополнение к этому в методе LBE скорости \mathbf{c}_k выбираются таким образом, чтобы за шаг по времени Δt частицы перелетали в соседние узлы

пространственной решетки, вектора которой удовлетворяют условию $\mathbf{e}_k = \mathbf{c}_k \Delta t$ [1,2]. Возможный набор векторов скорости для двумерной девятискоростной модели D2Q9 ($b = 8$) [7] показан на рис.1.

В методе LBE в качестве переменных используются одночастичные функции распределения $N_k(\mathbf{x}, t)$ для всего конечного набора возможных скоростей частиц \mathbf{c}_k . Решетка должна быть достаточно симметричной, чтобы обеспечить изотропность соответствующих тензоров [8].

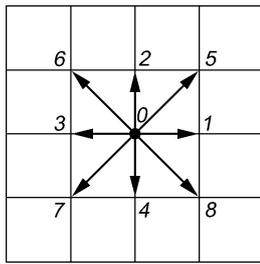


Рис.1 Возможные вектора скорости частиц в методе решеточных уравнений Больцмана для двумерной девятискоростной модели D2Q9.

В этом случае главная часть тензора потока импульса имеет гидродинамический вид

$$\Pi_{ij}^{(0)} = \sum_{k=0}^b c_{ki} c_{kj} N_k^{eq} = P \delta_{ij} + \rho u_i u_j, \quad (1)$$

где P – давление, а δ_{ij} – символ Кронекера.

Уравнения эволюции для функций распределения имеют вид

$$N_k(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = N_k(\mathbf{x}, t) + \Omega_k(N(\mathbf{x}, t)) + \Delta N_k \quad (2)$$

Здесь Ω_k – оператор столкновений, ΔN_k – изменение функций распределения за счет действия объемных сил. Гидродинамические переменные: плотность жидкости ρ и скорость \mathbf{u} в узле могут быть вычислены в соответствии с формулами

$$\rho = \sum_{k=0}^b N_k \quad \text{и} \quad \rho \mathbf{u} = \sum_{k=1}^b \mathbf{c}_k N_k \quad (3)$$

Обычно используется оператор столкновений в виде BGK (Bhatnagar – Gross – Krook [9]) приближения:

$$\Omega_k = (N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) - N_k) / \tau,$$

которое представляет собой просто релаксацию к локальному равновесию. Для моделирования течений с большими числами Рейнольдса используется оператор столкновений с несколькими временами релаксации – Multi-relaxation time (MRT).

Для изотермических вариантов LBE-моделей жидкости используется разложение равновесных функций распределения Максвелла – Больцмана в ряд по скорости \mathbf{u} до второго порядка [10]

$$N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) = \rho w_k \left(1 + \frac{\mathbf{c}_k \mathbf{u}}{\theta} + \frac{(\mathbf{c}_k \mathbf{u})^2}{2\theta^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2\theta} \right) \quad (4)$$

Здесь θ – нормированная кинетическая температура псевдо-частиц. Для ряда изотермических моделей LBE: одномерной D1Q3, двумерной D2Q9 и трехмерной D3Q19 она равна

$$\theta = (h / \Delta t)^2 / 3,$$

где h – шаг решетки.

Векторы \mathbf{c}_k и коэффициенты w_k зависят от конкретной решетки. Для двумерной девятискоростной модели D2Q9 [7] на квадратной решетке (рис.1) допустимы 3 значения модуля скорости $|\mathbf{c}_k| = 0, h / \Delta t$ и $\sqrt{2}h / \Delta t$.

Весовые коэффициенты равны $w_0 = 4/9$, $w_{1-4} = 1/9$ и $w_{5-8} = 1/36$.

Безразмерное время релаксации τ определяет кинематическую вязкость $\nu = \theta(\tau - 1/2)\Delta t$. Изменяя в определенных пределах параметр $\tau > 1/2$ можно моделировать течения псевдопластических (неньютоновских) жидкостей, для которых вязкость зависит от скорости сдвиговой деформации.

Для учета действия сил в методе LBE нами предложен метод точной разности [11-14]

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

где изменение скорости за шаг по времени

$$\Delta \mathbf{u} = \mathbf{F} \Delta t / \rho \quad (6)$$

определяется силой \mathbf{F} , действующей на вещество в узле.

В случае действия объемных сил для вычисления физической скорости следует использовать выражение, определенное на половине шага по времени [15]

$$\rho \mathbf{u}^* = \sum_{k=1}^b \mathbf{c}_k N_k + \mathbf{F} \Delta t / 2 \quad (7)$$

Обоснованием метода LBE можно считать тот факт, что во втором порядке разложения Чепмена – Энскога из уравнений LBE получаются макроскопические уравнения гидродинамики, то есть уравнения неразрывности и Навье – Стокса

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u}^*) = 0, \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \mathbf{u}^*}{\partial t} + \nabla(\Pi_{ij}^{(0)*}) = \\ = \rho \mathbf{a} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \right) \end{aligned} \quad (9)$$

Уравнение энергии может быть включено в LBE метод тремя способами:

- введением расширенного набора скоростей частиц \mathbf{c}_k [16] (например, модель D2Q13, функции распределения при этом зависят от температуры $N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}, T)$),
- введением дополнительного LBE компонента [17] (энергия рассматривается как пассивный

скаляр с нулевой массой напрямую не влияющий на импульс),

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

Компьютерное моделирование фазовых переходов методом LBE представляет собой метод сквозного счета границ раздела фаз, в том числе и вновь возникающих в объеме вещества [18-20]. В этом случае вместо разрыва плотности моделируется тонкий переходной слой жидкость-пар, в котором плотность изменяется плавно на размерах нескольких узлов решетки (аналогично методам сквозного счета ударных волн в газодинамике). При этом заметно упрощается логика компьютерных программ, так как жидкая и газообразная фазы описываются единообразно. Кроме того, отпадает необходимость в сложных граничных условиях на поверхностях раздела фаз.

Для этого в [19] было предложено ввести силы притяжения

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \psi(\rho(\mathbf{x})) \sum_{k=1}^b G_k \psi(\rho(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k)) \mathbf{e}_k, \quad (10)$$

действующие на вещество в узле со стороны соседних. Здесь $G_k > 0$ – коэффициенты, которые различны для основных и диагональных направлений решетки. Коэффициенты $G_{1-4} = G_0$ соответствуют основным направлениям решетки. Значения коэффициентов для диагональных направлений G_k , обеспечивающие изотропность пространства, равны 0, $G_0/4$ и $G_0/2$ для одномерной модели D1Q3, двумерной модели D2Q9 и трехмерной модели D3Q19, соответственно.

При этом уравнение состояния (УС) имеет вид $p = \rho\theta - \alpha G_0 \psi^2$. Коэффициент α равен 1, 3/2 и 3 для изотермических моделей D1Q3, D2Q9 и D3Q19, соответственно.

Кроме того, силы между узлами обеспечивают наличие поверхностного натяжения на границе раздела фаз жидкость-пар. Величина поверхностного натяжения σ зависит от параметра G_0 [21].

В рамках изотермической модели в [20] было предложено вместо сил притяжения между узлами использовать значение полной силы \mathbf{F}_N , действующей на вещество в каждом узле. Для этого было введено понятие псевдопотенциала $U(\rho) = P(\rho) - \rho\theta$. Этот подход эквивалентен (10) при условии $\psi(\rho) = \sqrt{-(P(\rho) - \rho\theta)/(\alpha G)}$ для уравнений состояния вида $P(\rho)$ [4,22].

В [18] для описания уравнения состояния произвольного вида $P(\rho, T)$ сила, действующая на вещество в узле, и псевдопотенциал были записаны в форме

$$\mathbf{F}_N = -\nabla U, \text{ где } U = P(\rho, T) - \rho\theta \quad (11)$$

При этом использовалась обычная конечно-разностная аппроксимация градиента потенциала, которая в одномерном случае имеет вид

- решением обычного уравнения энергии в частных производных одним из методов конечных разностей [18].

$$F_i = -\frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2h} \quad (12)$$

В [23-26] нами предложено для модели (11) ввести новую функцию

$$\Phi = \sqrt{-U} \quad (13)$$

Тогда для (12) имеем эквивалентное выражение

$$F_i = \frac{(\Phi_{i+1} + \Phi_{i-1})}{2} \cdot \frac{(\Phi_{i+1} - \Phi_{i-1})}{h} \quad (14)$$

Здесь первый множитель $(\Phi_{i+1} + \Phi_{i-1})/2$ является средним арифметическим от значений в соседних узлах. Вместе с тем, выражение для силы (11) можно переписать в эквивалентном виде $\mathbf{F}_N = 2\Phi \nabla \Phi$, для которого конечно-разностная аппроксимация записывается иначе

$$F_i = \Phi_i \frac{(\Phi_{i+1} - \Phi_{i-1})}{h}, \quad (15)$$

то есть в более локальной форме, чем (14). При $\Phi(\rho) = \sqrt{\alpha G_0} \psi(\rho)$ этот метод совпадает в изотермическом случае с методом [19].

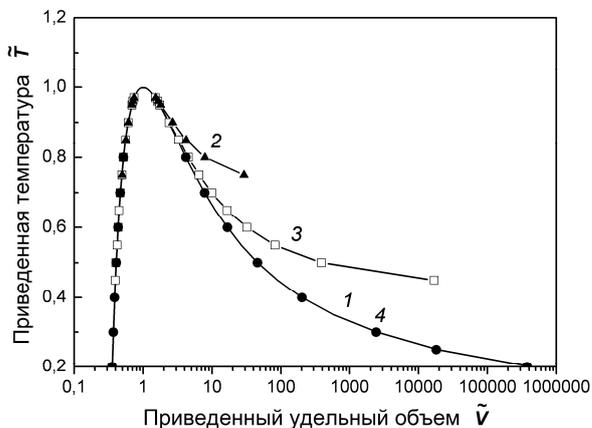


Рис.2 Кривая сосуществования фаз для плоской границы раздела в приведенных переменных. Уравнение состояния Ван-дер-Ваальса.

Теоретическая кривая сосуществования фаз пар-жидкость для уравнения состояния Ван-дер-Ваальса в приведенных переменных

$$\tilde{P} = \frac{8\tilde{T}\tilde{\rho}}{3 - \tilde{\rho}} - 3\tilde{\rho}^2 \quad (16)$$

показана на рис.2 кривой 1.

Оказалось, что результаты моделирования сильно зависят от вида аппроксимации и становятся хуже с понижением температуры. Формула (15) обеспечива-

ет значения плотности насыщенного пара (кривая 3) более близкие к теоретическим, чем формула (12) (кривая 2).

Затем нами был предложен новый способ аппроксимации градиента потенциала в переходном слое пар-жидкость для модели (11), (13). Для этого использовалась линейная комбинация конечно-разностных аппроксимаций (12) и (15) со свободным параметром A .

Конечно-разностная формула, обеспечивающая достаточную изотропность для двухмерной модели D2Q9 и для трехмерной модели D3Q19 [24-26], записанная в векторной форме, имеет вид

$$\mathbf{F}_N(\mathbf{x}) = \frac{1}{\alpha h} \left[(1 - 2A)\Phi(\mathbf{x}) \sum_k \frac{G_k}{G_0} \Phi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k + A \sum_k \frac{G_k}{G_0} \Phi^2(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k \right] \quad (17)$$

При $A = 0$ эта формула соответствует локальной аппроксимации (15), а при $A = 0.5$ – аппроксимации со средним значением (14). Аппроксимация (17) значительно улучшает результаты при LBE моделировании. При $A = -0.152$ отклонение кривой сосуществования фаз (кривая 4 на рис.2) от теоретической меньше чем 0.2% в диапазоне температур до $\tilde{T} = 0.4$

ЧИСЛЕННАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ АЛГОРИТМА

Число Куранта–Фридрихса–Леви, определяемое конвективным членом в решеточном уравнении Больцмана (2), точно равно единице. Однако, это условие не обеспечивает численную устойчивость метода LBE для среды с уравнением состояния вида $P(\rho, T)$, которое моделируется специальными силами взаимодействия между частицами вещества в соседних узлах решетки. Было замечено, что в жидкой фазе может возникать неустойчивость, даже если газовая фаза и, соответственно, границы раздела между фазами отсутствуют [14].

В численных тестах было получено, что критерием устойчивости жидкой фазы является условие $\tilde{c} \leq \tilde{c}_{кр}$, где безразмерная скорость звука $\tilde{c} = c_s \Delta t / h$ (гидродинамическое число Куранта, возникающее для явных конечно-разностных схем уравнений газодинамики). Здесь $c_s = \sqrt{(\partial P / \partial \rho)_T}$ – скорость звука для изотермических вариантов метода LBE, определяемая УС.

Обычно уравнения состояния используются в приведенных переменных $\tilde{P} = P / P_{кр}$, $\tilde{\rho} = \rho / \rho_{кр}$ и $\tilde{T} = T / T_{кр}$. Здесь $P_{кр}$, $\rho_{кр}$ и $T_{кр}$ – значения давления, плотности и температуры в критической точке. Тогда число Куранта записывается в виде $\tilde{c} = \sqrt{k(\partial \tilde{P} / \partial \tilde{\rho})_T}$, где безразмерный параметр

[24]. При этом кривая сосуществования фаз воспроизводится при отношениях плотностей жидкость-пар до $10^6 - 10^7$.

Аппроксимация (17) обеспечивает правильные значения поверхностного натяжения на границе раздела фаз и круглую форму каплей жидкости в газе и паровых пузырей в жидкости в стационарном случае. При этом выполняется закон Лапласа для скачка давления на кривой поверхности

$$\Delta P = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right), \quad (18)$$

где R_1 и R_2 – главные радиусы кривизны поверхности.

Таким образом, алгоритм точного описания фазовых переходов в методе LBE для уравнений состояний произвольного вида должен включать в себя:

- метод точной разности (5) для учета действия объемных сил,
- специальную изотропную конечно-разностную аппроксимацию (17) для градиента псевдопотенциала на выбранной решетке,
- относительно малое отношение $\Delta t / h$, необходимое для устойчивости численных расчетов [14].

$k = P_{кр} (\Delta t / h)^2 / \rho_{кр}$ определяется характеристиками вещества и величиной шагов по времени и координате.

Алгоритм метода LBE с фазовыми переходами состоит из нескольких шагов, выполняемых последовательно (метод Яненко – расщепление по физическим процессам)

- учет действия сил (11), используя метод точной разности (5),
- перенос частиц,
- действие оператора столкновений,
- вычисление новых значений плотности и скорости, используя выражения (3).

В [14] аналитически был выполнен линейный анализ численной устойчивости этого LBE алгоритма.

Для одномерной модели D1Q3 рассмотрен рост малых гармонических возмущений плотности $\rho = \rho_0 + A_0 \exp(ikx)$ и скорости $u = u_0 + B_0 \exp(ikx)$.

Получена матрица перехода на следующий временной слой. Соответствующее характеристическое уравнение для нахождения собственных значений матрицы является квадратным. Оба корня по модулю меньше единицы для всех возмущений, если выполняется критерий устойчивости $\tilde{c}^2 - \tilde{\theta} \leq 1$. При обычном используемом значении кинетической температу-

ры LBE псевдо-частиц $\tilde{\theta} = 1/3$ критическое значение $\tilde{z}_{кр} = \sqrt{1 + \tilde{\theta}} = 1.1547$.

Численные тесты подтверждают полученный критерий и для двумерной модели. При этом было установлено, что критическое значение гидродинамиче-

УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ

Была исследована возможность использования уравнений состояния Ван-дер-Ваальса (16), Карнахана – Старлингга

$$\tilde{P} = c\tilde{T}\tilde{\rho} \frac{1 + b\tilde{\rho} + (b\tilde{\rho})^2 - (b\tilde{\rho})^3}{(1 - b\tilde{\rho})^3} - a\tilde{\rho}^2 \quad (19)$$

и Каплуна [27] для описания фазовых переходов жидкость-пар.

Последнее УС было модифицировано нами так, чтобы возможно точнее описать кривую сосуществования фаз вблизи критической точки

$$\tilde{P} = c\tilde{T}\tilde{\rho} \left(1 + \frac{d}{1/\tilde{\rho} - b} \right) - a\tilde{\rho}^2 \quad (20)$$

Параметр c является свободным, а значения a, b, d были найдены в [26], используя три условия в критической точке. Получены соотношения

$$a = \frac{1}{3-c}, b = 3-c, d = \frac{12c - 6c^2 + c^3 - 8}{c(3-c)} \quad (21)$$

При $c = 8/3$ уравнение (20) переходит в уравнение состояния Ван-дер-Ваальса. При $c = 2.78$ уравнение состояния (20) лучше описывает экспериментальные данные по кривой сосуществования фаз (рис.3), чем УС Ван-дер-Ваальса и Карнахана – Старлингга.

В работе [29] был сделан вывод, что наблюдаемые в расчетах невысокие предельные отношения $\tilde{\rho}_ж / \tilde{\rho}_п$ и отклонения кривых сосуществования от теоретических для ряда УС (особенно на газовой ветви) объясняются свойствами собственно уравнений состояния. Однако нами показано, что это связано с неточным описанием межфазных границ во всех предыдущих работах.

В [12,24,26] было показано, что при моделировании фазовых переходов в методе LBE для учета действия сил следует использовать метод точной разности (5). Действительно, на примере локальной аппроксимации (15) для полной силы (11) показано, что плотность пара на кривой сосуществования лучше всего описывается при использовании метода точной разности (рис.4). Результаты, полученные другими известными методами, гораздо хуже и, более того, зависят от времени релаксации τ .

В работе [32] был предложен метод экстраполяции изотерм для УС реальных веществ в область под бинодалью с учетом правила Максвелла. В качестве примера использовалось УС воды. Кроме того, этот

метод позволил изменять в определенных пределах поверхностное натяжение на границе раздела фаз.

метод позволил изменять в определенных пределах поверхностное натяжение на границе раздела фаз.

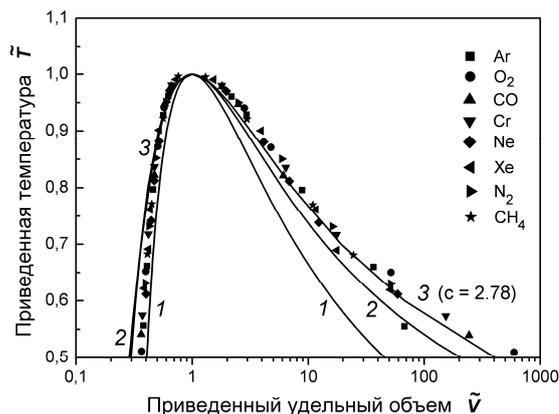


Рис.3 Сравнение расчетов кривой сосуществования фаз для разных уравнений состояния с экспериментальными данными для ряда веществ. Кривая 1 – УС Ван-дер-Ваальса, кривая 2 – УС Карнахана – Старлингга, кривая 3 – УС (20) для $c = 2.78$. Значки – экспериментальные точки для ряда веществ [28].

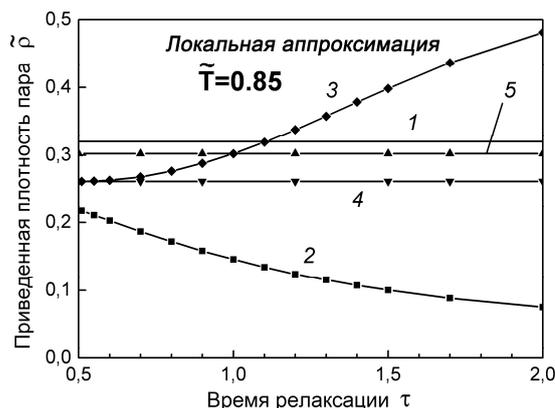


Рис.4 Плотность пара на кривой сосуществования для уравнения состояния Ван-дер-Ваальса. Кривая 1 – теория (правило Максвелла), кривая 2 – метод явной производной [30], кривая 3 – метод модификации оператора столкновений [18], кривая 4 – комбинированный метод [31], кривая 5 – наш метод точной разности (5).

РАСЧЕТЫ НА ГРАФИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОРАХ

Графические процессоры на видеокартах – Graphical Processing Unit (GPU) специально разрабатывались для быстрой обработки больших объемов графических данных. Алгоритм LBE включает в себя вычисления преимущественно в локальном узле, за исключением переноса частиц и силы взаимодействия между узлами, что позволяет его распараллелить на большое количество процессоров с использованием технологии CUDA.

Впервые GPU были использованы для моделирования методом LBE в работе [33]. Последние модификации видеокарт фирмы nVIDIA GTX-285 и

GTX-480 имеют по 240 и 480 параллельных потоковых процессоров (ядер), соответственно. Все ядра имеют доступ к относительно быстрой внутренней памяти, объем которой для GTX-480 составляет 1.5 Гигабайта. Для варианта метода LBE с фазовыми переходами ускорение нашего алгоритма для GTX-480 составляло до 60-75 раз при вычислениях с двойной точностью по сравнению с одним ядром процессора Intel Core 2 Duo с частотой 3.3 ГГц. Для двумерных расчетов использовались сетки размерами до 3600×3600.

ПРИМЕРЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДВУХФАЗНЫХ СИСТЕМ

Ниже приведены результаты моделирования ряда систем жидкость – “насыщенный” пар.

Первый пример – соударение капель, находящихся в атмосфере насыщенного пара (рис.5).

Использовалось уравнение состояния Ван-дер-Ваальса с интерполяцией изотермы $T = 0.6$ под бинадалью для уменьшения поверхностного натяжения в виде

$$\tilde{P}(\tilde{\rho}) = a_1 \tilde{\rho}^{60} + b_1 \tilde{\rho}^{1.2} + c_1 \tilde{\rho}^{1.1} + d_1 \tilde{\rho} + h_1 \quad (22)$$

При соударении четко наблюдается возникновение кумулятивных струй (рис.5,б) с отрывом отдельных капель на более поздних стадиях. Безразмерное поверхностное натяжение $\tilde{\sigma} = \sigma / (P_{кр} h)$ определялось в тестах используя закон Лапласа (18).

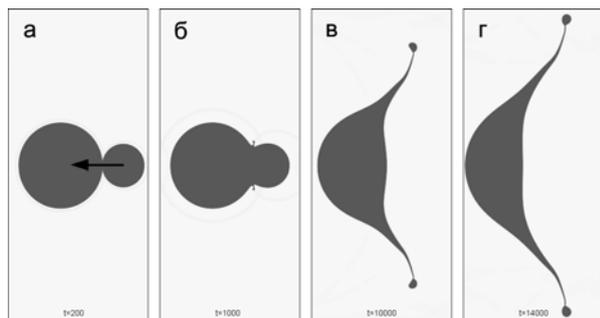


Рис.5 Столкновение капель.
Сетка 2000×4400. $R_1 = 600$, $R_2 = 300$,
 $\tilde{u} = 0.12$, $\tau = 0.67$, $A = -0.152$,
 $k = 0.02$, $\tilde{\sigma} = 2.23$. $t = 0$ (а), 1000 (б),
10000 (в), 14000 (г).

На рис.6 показана двухфазная система пар-жидкость на поздней стадии спиноподобной декомпозиции для УС H_2O при 20° С.

На рис.7 показано истечение пересжатой жидкости из канала в открытый объем. При этом за счет быстрой разгрузки в волне разрежения состояние ве-

щества попадает в область метастабильности. Происходит “вскипание” жидкости за счет гетерогенной нуклеации, которая моделировалась стохастическим возникновением маленьких зародышей газовой фазы. Частота возникновения зародышей зависит от глубины захода в область метастабильности. На стенках канала выполнялось условие прилипания.

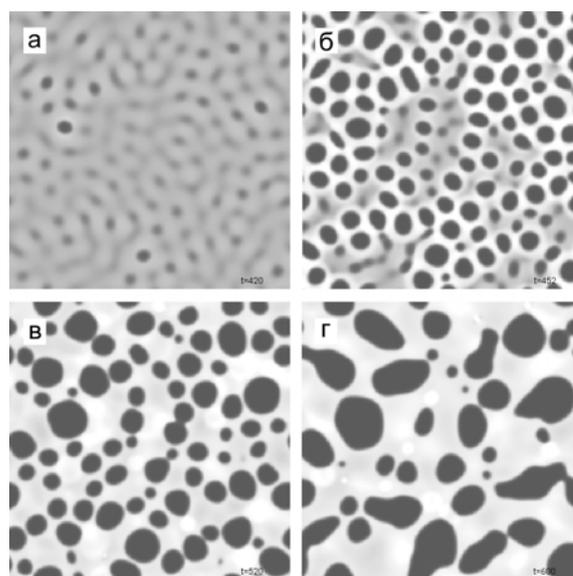


Рис.6 Спиноподобная декомпозиция. Паровые пузырьки показаны темным цветом. Начальная плотность вещества $\tilde{\rho}_0 = 1.9 < \tilde{\rho}_{ж}$. $\tau = 0.8$, $k = 0.005$, $A = -0.15$. $t = 420$ (а), 450 (б), 520 (в), 600 (г).



Рис.7 Вскипание пересжатой жидкости при истечении из канала в открытый объем.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, реализован алгоритм точного описания фазовых переходов в методе LBE для уравнений состояний вида $P(\rho, T)$. Метод LBE хорошо распараллеливается по технологии CUDA

ЛИТЕРАТУРА

1. McNamara G.R., Zanetti G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata // *Phys. Rev. Lett.* 1988. V. 61, N 20. P. 2332–2335.
2. Higuera F.J., Jiménez J. Boltzmann approach to lattice gas simulations. // *Europhys. Lett.* 1989. V. 9, N 7. P. 663–668.
3. Chen S., Doolen G.D. Lattice Boltzmann method for fluid flow // *Annu. Rev. Fluid Mech.* – 1998. V. 30. P. 329–364.
4. Nourgaliev R.R., Dinh T.N., Theofanous T.G., Joseph D. The lattice Boltzmann equation method: theoretical interpretation, numerics and implications // *Int. J. of Multiphase Flow.* 2003. V. 29, N 1. P. 117–169.
5. Aidun C.K., Clausen J.R. Lattice-Boltzmann Method for Complex Flows // *Annu. Rev. Fluid Mech.* 2010. V. 42. P. 439–472.
6. Broadwell J.E. Study of rarefied shear flow by the discrete velocity method // *J. Fluid Mech.*, 1964. V. 19. P. 401–414.
7. Qian Y. H., Orzag S. A., Lattice BGK models for the Navier – Stokes equation: Nonlinear deviation in compressible regimes // *Europhys. Lett.*, 1993, V. 21. P. 255–259.
8. Wolfram S. Cellular automaton fluids 1: Basic theory // *J. Stat. Phys.*, 1986. V. 45, N 3/4. P. 471–526.
9. Bhatnagar P. L., Gross E. P., Krook M. K. A model for collision process in gases. I. Small amplitude process in charged and neutral one-component system // *Phys. Rev.* 1954. V. 94, N 3. P. 511–525.
10. Koelman J. M. V. A. A simple lattice Boltzmann scheme for Navier–Stokes fluid flow // *Europhys. Lett.* 1991. V. 15, N 6. P. 603–607.
11. Kupershtokh A. L. Calculations of the action of electric forces in the lattice Boltzmann equation method using the difference of equilibrium distribution functions // Доклады VII Межд. научн. конф. "Современные проблемы электрофизики и электрогидродинамики жидкостей", Санкт-Петербург, 2003, с. 152–155.
12. Kupershtokh A. L. New method of incorporating a body force term into the lattice Boltzmann equation // *Proc. of the 5th International EHD Workshop, Poitiers, France, 2004*, pp. 241–246.
13. Куперштох А. Л. Учет действия объемных сил в решеточных уравнениях Больцмана // Вестник НГУ: Серия "Математика, механика и информатика". 2004. Т. 4, № 2. С. 75–96.
14. Kupershtokh A. L. Criterion of numerical instability of liquid state in LBE simulations // *Computers and Mathematics with Applications*, 2010. V. 59, N 7. P. 2236–2245.
15. Ginzburg I., Adler P.M. Boundary flow condition analysis for the three-dimensional lattice Boltzmann model // *J. Phys. II France.* 1994. V. 4. N 2. P. 191–214.
16. Alexander F. J., Chen S., and Sterling J. D. Lattice Boltzmann thermohydrodynamics // *Phys. Rev. E.* 1993. V. 47, N 4. P. R2249–R2252.
17. Shan X. Simulation of Rayleigh–Bénard convection using a lattice Boltzmann method // *Physical Review E.* 1997. V. 55, N 3. P. 2780–2788.
18. Zhang R., Chen H. Lattice Boltzmann method for simulations of liquid-vapor thermal flows // *Phys. Rev. E.* 2003. V. 67, N 6. P. 066711.
19. Shan X., Chen H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components // *Phys. Rev. E.* 1993. V. 47, N 3. P. 1815–1819.
20. Qian Y. H., Chen S., Finite size effect in lattice-BGK models // *International Journal of Modern Physics C.* 1997. V. 8, N 4. P. 763–771.
21. Shan X., Chen H. Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation // *Phys. Rev. E.* 1994. V. 49, N 4. P. 2941–2948.
22. He X., Doolen G. D., Thermodynamic foundation of kinetic theory and lattice Boltzmann models for multiphase flows // *J. Stat. Phys.* 2002. V. 107, N 1/2. P. 309–328.
23. Kupershtokh A. L., Stamatelatos C., Agoris D. P. Stochastic model of partial discharge activity in liquid and solid dielectrics // *Proc. 15th IEEE Int. Conf. on Dielectric Liquids, Coimbra, Portugal, 2005*, pp. 135–138.
24. Куперштох А. Л. Моделирование течений с границами раздела фаз жидкость-пар методом решеточных уравнений Больцмана // Вестник НГУ: Серия "Математика, механика и информатика". 2005. Т. 5, № 3. С. 29–42.
25. Kupershtokh A. L., Karpov D. I., Medvedev D. A., Stamatelatos C. P., Charalambakos V. P., Pyrgioti E. C., Agoris D. P., Stochastic models of partial discharge activity in solid and liquid dielectrics //

на многопроцессорных графических ускорителях, что дает новые возможности для численного моделирования двухфазных систем.

- IET Science, Measurement and Technology. 2007. V. 1, N 6. P. 303–311.
26. Kupershtokh A. L., Medvedev D. A., Karpov D. I. On equations of state in a lattice Boltzmann method // *Computers and Mathematics with Applications*, 2009. V. 58, N 5. P. 965–974.
27. Каплун А. Б., Мешалкин А. Б. О термодинамическом обосновании формы единого уравнения состояния жидкости и газа // *ТВТ*. 2003. Т. 41, № 3. С. 373–380.
28. Скрипов В.П., Файзуллин М.З. Фазовые переходы кристалл – жидкость – пар и термодинамическое подобие. М.: Физматлит, 2003. – 160 с.
29. Yuan P., Schaefer L. Equations of state in a lattice Boltzmann model // *Phys. Fluids*. 2006. V. 18, N 4. P. 042101.
30. He X., Shan X., Doolen G. D. Discrete Boltzmann equation model for nonideal gases // *Phys. Rev. E*. 1998. V. 57, N 1. P. R13–R16.
31. Guo Z., Zheng C., Shi B. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method // *Phys. Rev. E*. 2002. V. 65, N 4. P. 046308.
32. Kupershtokh A. L. A lattice Boltzmann equation method for real fluids with the equation of state known in tabular form only in regions of liquid and vapor phases // *Computers and Mathematics with Applications*. 2010 (in press, doi: 10.1016/j.camwa.2010.06.032).
33. Li W., Wei X., Kaufman A. Implementing lattice Boltzmann computation on graphics hardware // *Visual Computer*. 2003. V. 19. P. 444–456.