

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУХФАЗНЫХ ТЕЧЕНИЙ ЖИДКОСТЬ–ПАР МЕТОДОМ РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА¹

А.Л. Куперштох

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

Аннотация

Разработан метод компьютерного моделирования для расчета течений жидкости с границами раздела фаз жидкость–пар, в том числе и вновь возникающими в объеме вещества. 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). В предложенном варианте метода решеточных уравнений Больцмана (Lattice Boltzmann Equation, LBE) достаточно точно описываются переходные слои жидкость–пар для уравнений состояния произвольного вида, допускающих фазовый переход. Для плоского переходного слоя, когда нет перепада давления за счет поверхностного натяжения, кривая сосуществования фаз воспроизводится с высокой точностью в достаточно широкой области температур от критической точки до $\tilde{T} \approx 0.4$. Для стационарных переходных слоев жидкость–пар удалось добиться отношения плотностей фаз порядка $10^5 - 10^6$, чего не удавалось осуществить при использовании предыдущих подходов. Смоделированы поздние стадии пузырьковой кавитации, когда осуществляется трансформация жидкости в пенную структуру, а затем в газокпельный поток. Известные модели кавитации в принципе не работают при таких величинах объемного содержания газовой фазы.

1. Введение

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 [1-5]. Метод LBE широко используется для компьютерного моделирования течений жидкости, включая многофазные и многокомпонентные, благодаря его численной устойчивости и легкой реализации сложных граничных условий.

Можно проследить историю развития основных дискретных моделей жидкостей (рис. 1). Примерно в 1960 г. был предложен метод молекулярной динамики, в котором среда описывалась как ансамбль молекул, дви-

¹ Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 03-02-16474 и № 05-08-33715)

гающихся по законам ньютоновской механики и взаимодействующих друг с другом согласно заданным потенциалам межмолекулярного взаимодействия [6]. Однако, описать этим методом поведение даже сравнительно небольшого макроскопического объема сплошной среды с характерным размером порядка миллиметра невозможно из-за чрезвычайно большого количества молекул.



Рис. 1. Развитие дискретных моделей жидкостей

В 1973 г. была предложена идея метода решеточных газов (Lattice Gas Automata – LGA) [7], который можно рассматривать как предельно упрощенный метод молекулярной динамики. В узлах двухмерной решетки «живут» частицы единичной массы, которым разрешено иметь единичную скорость, направленную вдоль одного из ребер решетки. В каждом из этих направлений может двигаться только одна из частиц, находящихся в этом узле решетки. За один шаг по времени все движущиеся частицы перелетают в соседние узлы, где сталкиваются друг с другом по некоторым заданным правилам соударений с учетом законов сохранения импульса и массы. Однако первый вариант метода LGA на двумерной квадратной решетке был слишком упрощенным и имел много недостатков, в частности, в нем получалось неправильное выражение для тензора потока импульса (неизотропность). Однако уже в следующем варианте метода [8] эта проблема была преодолена при использовании для двумерного случая треугольной

решетки. Большой вклад в развитие метода внес Вольфрам [9], который исследовал возможные минимальные наборы скоростей частиц, для которых выполняется требование изотропности.

Одним из недостатков метода решеточных газов является достаточно сильный стохастический шум, в результате чего приходится усреднять величины по локальной области пространства, по времени, а иногда и по ансамблям реализаций.

Метод решеточного уравнение Больцмана (Lattice Boltzmann equation – LBE) возник в 1988-1989 гг. [1, 2] как развитие метода решеточных газов именно с целью устранить этот случайный шум. Для этого было введено понятие заселенности, т.е. концентрации частиц в узлах, летящих с заданным направлением скорости. Вместо целых чисел для заселенностей в методе LBE используются вещественные числа.

С другой стороны, развивались подходы к численному решению кинетического уравнения Больцмана, впервые написанного в 1872 г. В 1989 г. была доказана теорема существования решения уравнения Больцмана в целом [10]. Для прямого численного решения кинетического уравнения Больцмана в фазовом пространстве (координат и скоростей) даже для двумерного случая требуется численно решать задачу в четырехмерном пространстве (x, y, v_x, v_y) . В 1964 г. Бродвелл [11, 12] для описания гидродинамических течений предложил использовать дискретный набор скоростей частиц (кинетические уравнения Больцмана с дискретными скоростями). Это приближение может быть обосновано тем, что на гидродинамическом этапе эволюции динамических систем частиц, когда время больше времени свободного пробега, в малых объемах устанавливается локальное равновесие, и даже знание одночастичной функции распределения излишне. В этом случае достаточно знать ее несколько первых моментов (Боголюбов) [13, 14] и поэтому можно ограничиться простой модельной системой с дискретным набором скоростей частиц, для которой значения моментов согласованы с гидродинамическими величинами: плотностью, импульсом, энергией. Поведение таких модельных систем подробно исследовали Вольфрам, а также Годунов и Султангазин [9, 15].

В 1997 г. метод решеточных уравнений Больцмана был выведен Хе, Люо [16] и независимо Абе [17] другим способом – непосредственно из кинетических уравнений Больцмана с дискретными скоростями.

Метод решеточных уравнений Больцмана широко применяется при компьютерном моделировании сложных течений жидкости, включая многофазные и многокомпонентные. Преимуществами метода LBE являются простота алгоритма, возможность параллельных вычислений, а также легкая реализация сложных граничных условий. Обоснованием метода LBE является тот факт, что при разложении Чепмена – Энскога этих уравнений получаются соответствующие макроскопические уравнения гидродинамики (уравнение неразрывности и уравнение Навье – Стокса) (Рис. 1).

Полная библиография насчитывает порядка несколько сотен статей! В Таблице 1 приведены только основные работы по улучшению метода LBE, в том числе касающиеся методов учета действия объемных сил и моделирования 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. Проблема заключается в том, чтобы обеспечить достаточную точность описания кривой сосуществования фаз жидкость–пар для конкретных уравнений состояния, а также сохранить устойчивость метода при отношениях плотности жидкости к плотности насыщенного пара $\rho_{\text{ж}} / \rho_{\text{п}} \sim 1000$ (то есть при достаточном удалении от критической точки). Существующие способы моделирования фазовых переходов в методе LBE обеспечивают устойчивость в лучшем случае при $\rho_{\text{ж}} / \rho_{\text{п}} \sim 100$ [21-26].

Таблица 1. Хронология развития метода ЛВЕ (основные улучшения).

1988	Впервые предложен ЛВЕ метод.	McNamara G. R., Zanetti G.	Phys. Rev. Lett.	The University of Chicago, USA
1989		Higuera F. J., Jiménez J.	Europhys. Lett.	Universidad Politecnica, Madrid, Spain
1991	ЛВЕ метод с BGK оператором столкновений. Вид равновесной функции распределения для дискретных скоростей.	Koelman J. M. V. A.	Europhys. Lett.	
1992		Qian Y. H., d'Humières D., Lallemand P.	Europhys. Lett.	Laboratoire de Physique Statistique, CNRS, Paris, France
1993	Фазовые переходы. Сила путем модификации оператора столкновений	Shan X., Chen H.	Phys. Rev. E.	Department of Physics and Astronomy, New Hampshire, USA
1994	Скорость в переходном слое на половине шага	Ginzburg I., Adler P. M.	J. Phys. II France	University of Florida, Shasseneuil, France
1995	Фазовые переходы с термодинамикой переходного слоя.	Swift M. R., Osborn W. R., Yeomans J. M.	Phys. Rev. Lett.	Theoretical Physics, Oxford, United Kingdom
1995	Дробный шаг по времени	McNamara G. R., Garcia A. L., Alder B. J.	J. Stat. Phys.	Los Alamos National Laboratory; Lawrence Livermore National Laboratory; San Jose State University, USA
1997	ЛВЕ метод получен из кинетического уравнения Больцмана	He X. Y., Luo L.-S.	Phys. Rev. E	Los Alamos National Laboratory; NASA, Langley Center, USA;
1997		Abe T.	J. Comput. Phys.	Institute of Space and Astronautical Sciences, Kanagava, Japan
1998	Учет силы через производную от равновесной функции распределения	He X. Y., Shan X. W., Doolen G. D.	Phys. Rev. E.	Los Alamos National Laboratory, USA
1998	Улучшена устойчивость метода. Изотермическая модель D1Q5 с ядром распределения	Renda A., Bella G., Succi S., Karlin I. V.	Europhys. Lett.	Universita "Tor Vergata"; Istituto Applicazioni Calcolo "M. Picone", Roma, Italy; ВЦ, Красноярск, Россия
1999	Метод конечных объемов для неструктурированных треугольных сеток	Peng G., Xi H., Duncan C., Chou S.-H.	Phys. Rev. E	Bowling Green State University, USA
2002	Учет действия силы комбинированным методом	Guo Z., Zheng C., Shi B.	Phys. Rev. E	Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, China
2003	Произвольное уравнение состояния. ЛВЕ + конечно-разностное уравнение для энергии	Zhang R., Chen H.	Phys. Rev. E	Exa Corporation, Lexington, USA
2003	Метод точной разности для учета объемных сил	Куперштох А.	Вестник НГУ	Институт гидродинамики, Новосибирск, Россия
2005	Точная кривая сосуществования фаз, аппроксимация градиента потенциала	Куперштох А.	Вестник НГУ	Институт гидродинамики, Новосибирск, Россия

2. Уравнения Больцмана с дискретными скоростями

2.1. Уравнения ББКГИ

Система из N одинаковых частиц в классической механике описывается $6N$ мерным вектором в Γ -пространстве координат \mathbf{r}_i и скоростей частиц ξ_i .

Вводятся: функция распределения $F^{(N)}(x_1, \dots, x_N, t)$, где символ x_i обозначает совокупность векторов \mathbf{r}_i и ξ_i , а также n -частичные функции распределения

$$V^{-n} F_n^{(N)}(x_1, \dots, x_n, t) = \int F^{(N)}(x_1, \dots, x_N, t) dx_{n+1} \dots dx_N. \quad (1)$$

Динамика рассматриваемой системы частиц описывается так называемой системой «зацепляющихся» уравнений Боголюбова (ББКГИ – Боголюбов, Борн, Кирквуд, Грин, Ивон) [13]

$$\frac{\partial F_n(x_1, \dots, x_n, t)}{\partial t} + L_n F_n(x_1, \dots, x_n, t) = - \frac{N-n}{V} \sum_{i=1}^n \int \mathbf{a}_{i,n+1} \frac{\partial F_{n+1}(x_1, \dots, x_{n+1}, t)}{\partial \xi_i} dx_{n+1},$$

где $L_n = \sum_i \xi_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{i,k \neq i} \mathbf{a}_{i,k} \frac{\partial}{\partial \xi_i}$ оператор Лиувилля для подсистемы из n частиц.

Этапы эволюции системы по Н. Н. Боголюбову [14]:

1. Этап первоначальной хаотизации ($t \sim \tau_0$). Здесь $\tau_0 \sim r_0 / \bar{\xi}$ – эффективная длительность столкновений, r_0 – радиус взаимодействия. Состояние системы в общем случае можно описать только полной N -частичной функцией распределения $F^{(N)}(x_1, \dots, x_N, t)$.
2. Кинетический этап ($\tau_0 \ll t < \tau$). Здесь τ – среднее время свободного пробега. Для характеристики состояния газа на этом этапе достаточно знания одночастичной функции распределения $F_1(x_1, t)$.
3. Гидродинамический этап ($t > \tau$). В малых объемах устанавливается локальное равновесие. В этом случае даже знание одночастичной функции распределения $F_1(x_1, t)$ излишне. Достаточно знать несколько ее первых моментов (интегралы по пространству скоростей). Обычно их записывают в виде:

$$\begin{aligned} \rho &= \int f(\mathbf{r}, \xi, t) d\xi_x d\xi_y d\xi_z, \\ \rho \mathbf{u} &= \int \xi f(\mathbf{r}, \xi, t) d\xi_x d\xi_y d\xi_z, \\ \varepsilon &= \frac{1}{2} \int (\xi - \mathbf{u})^2 f(\mathbf{r}, \xi, t) d\xi_x d\xi_y d\xi_z. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь функция $f(\mathbf{r}, \xi, t) \sim mF_1(x_1, t)$ и отличается только нормировкой, ρ – плотность вещества, \mathbf{u} – массовая скорость, ε – внутренняя кинетическая энергия, m – масса частиц.

При некоторых приближениях из уравнений ББКГИ может быть выведено кинетическое уравнение Больцмана для одночастичной функции распределения $f(\mathbf{r}, \xi, t)$ [13, 14]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \nabla f + \mathbf{a} \nabla_{\xi} f = \Omega. \quad (3)$$

Здесь Ω – интеграл столкновений (источники и стоки), вектор \mathbf{a} – ускорение под действием сил.

Детальное обоснование для применения уравнения Больцмана в гидро- и газодинамике можно найти в [27].

Равновесной функцией распределения по скоростям частиц является распределение Максвелла – Больцмана

$$f^{eq}(\mathbf{u}) = \frac{\rho}{(2\pi\theta)^{D/2}} \exp\left(-\frac{(\xi - \mathbf{u})^2}{2\theta}\right). \quad (4)$$

Здесь $\theta = kT/m$ – нормированная температура, а D – размерность пространства. Отметим, что это распределение по скоростям частиц справедливо не только для разреженных газов, но и для жидкостей [27,28]. Очевидно, что для равновесной функции распределения интеграл столкновений $\Omega(f^{eq}) = 0$, что означает детальное равновесие.

2.2. Уравнения Больцмана с дискретными скоростями

На гидродинамическом этапе для описания гидродинамических течений было предложено ограничиться простыми модельными системами, имеющими только дискретный конечный набор векторов скорости частиц \mathbf{c}_k , причем для этих систем значения моментов функции распределения должны быть согласованы с гидродинамическими величинами (плотностью, импульсом и энергией) [11, 12]. Это приближение может быть обосновано тем, что на гидродинамическом этапе эволюции динамических систем частиц, когда время больше времени свободного пробега, в малых объемах устанавливается локальное равновесие, и не обязательно точное описание одночастичной функции распределения.

Кинетическое уравнение Больцмана с дискретными скоростями (без учета действия внешних сил) имеет вид

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + \mathbf{c}_k \nabla f_k = \Omega_k. \quad (5)$$

В этом случае распределение по скоростям приближенно представляется в виде суммы δ -функций. Например, для простейшего одномерного

случая имеем три вектора скорости c_{-1} , 0 и c_{+1} (Рис. 2) и общая функция распределения имеет вид

$$f^*(\xi) = f_{-1} + f_0 + f_{+1},$$

где $f_k(\xi) = N_k \delta(\mathbf{c}_k)$. В расчетах обычно используются только коэффициенты N_k , которые называют заселенностями (имеют размерность плотности).

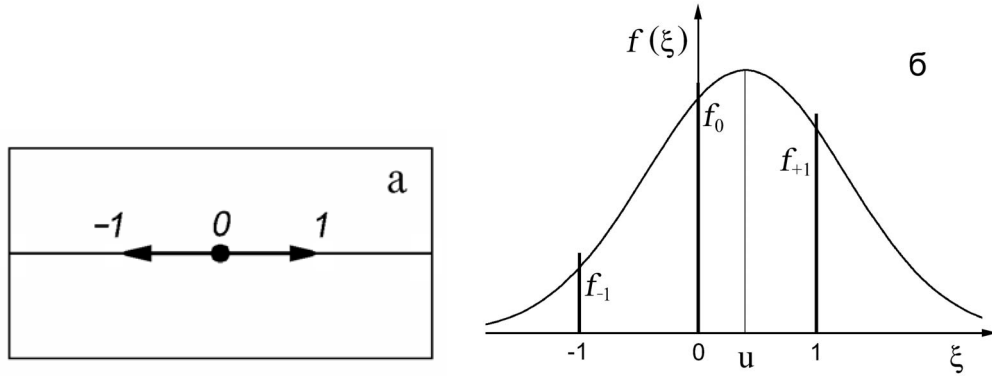


Рис. 2. Возможные вектора скоростей для простейшей одномерной изотермической модели (а), соответствующая функция распределения по скоростям (б).

Гидродинамические величины (плотность жидкости $\rho(\mathbf{r}, t)$, скорость $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ и внутренняя энергия $\varepsilon(\mathbf{r}, t)$) могут быть рассчитаны как моменты функций распределения (заселенностей) $\rho = \sum_{k=0}^M N_k$, $\rho \mathbf{u} = \sum_{k=0}^M \mathbf{c}_k N_k$ и $\varepsilon = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^M (\mathbf{c}_k - \mathbf{u})^2 N_k$. Здесь M – количество возможных ненулевых векторов скорости.

2.3. Изотропность набора векторов скорости

Чтобы в разложении Чепмена – Энско́га в результате получились правильные макроскопические уравнения гидродинамики необходимо, чтобы набор векторов скорости был достаточно симметричным (симметрия решетки). Для изотермического случая достаточно выполнения условий

$$\begin{aligned} \sum_k c_{ki} c_{kj} N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) &= \rho \theta \delta_{ij} + \rho u_i u_j, \\ \sum_k c_{ki} c_{kj} c_{kl} N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) &= \rho \theta \Delta_{ijlm}^{(4)} u_m, \end{aligned} \quad (6)$$

где

$$\Delta_{ijlm}^{(4)} = \delta_{ij} \delta_{lm} + \delta_{il} \delta_{jm} + \delta_{im} \delta_{jl}.$$

Для свойств симметрии решетки определяющими характеристиками являются тензоры ранга n , компоненты которых имеют вид [9]

$$E_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)} = \sum_k c_{k i_1} c_{k i_2} \dots c_{k i_n} . \quad (7)$$

Для **изотермических вариантов LBE** достаточно изотропности тензоров до четвертого ранга включительно. Если у решетки все ненулевые вектора скорости одинаковы по модулю (M штук), то в пространстве размерности D «изотропность» выполняется если

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{(2n+1)} &= 0, \\ \mathbf{E}^{(2n)} &= \frac{M}{D(D+2) \dots (D+2n-2)} \Delta^{(2n)}, \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} \Delta_{ij}^{(2)} &= \delta_{ij}, \\ \Delta_{ijlm}^{(4)} &= \delta_{ij} \delta_{lm} + \delta_{il} \delta_{jm} + \delta_{im} \delta_{jl}. \end{aligned}$$

Для тензоров последующих рангов справедливо рекурсивное соотношение

$$\Delta_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(2n)} = \sum_{j=2}^{2n} \delta_{i_1 i_j} \Delta_{i_2 \dots i_{j-1} i_{j+1} \dots i_{2n}}^{(2n-2)} .$$

В общем случае для решетки с разными модулями скорости надо рассмотреть тензоры ранга n с учетом весов w_k

$$E_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)} = \sum_k w_k c_{k i_1} c_{k i_2} \dots c_{k i_n} . \quad (9)$$

Для **термических вариантов LBE** необходимо, чтобы были изотропными тензора до шестого ранга включительно.

3. Метод LBE

Основная идея метода решеточных уравнений Больцмана заключается в том, что для описания гидродинамических течений было предложено использовать дискретный конечный набор скоростей частиц в кинетическом уравнении Больцмана, которые за шаг по времени перелетают в соседние узлы пространственной решетки [1, 2].

В методе LBE в качестве переменных используются одночастичные функции распределения N_k для всего конечного набора возможных скоростей частиц \mathbf{c}_k . При наличии объемных сил уравнения эволюции имеют вид

$$N_k(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = N_k(\mathbf{x}, t) + \Omega_k(N(\mathbf{x}, t)) + \Delta N_k . \quad (10)$$

Здесь Ω_k – оператор столкновений, ΔN_k – изменение функций распреде-

ления за счет действия объемных сил, Δt – шаг по времени (вектор решетки $\mathbf{e}_k = \mathbf{c}_k \Delta t$). Плотность жидкости ρ и скорость \mathbf{u} в узле могут быть вычислены в соответствие с формулами $\rho = \sum_{k=0}^b N_k$ и $\rho \mathbf{u} = \sum_{k=0}^b \mathbf{c}_k N_k$. Обычно используется оператор столкновений в виде BGK (Bhatnagar–Gross–Krook) приближения: $\Omega_k = (N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) - N_k) / \tau$, которое представляет собой просто релаксацию к локальному равновесию [29].

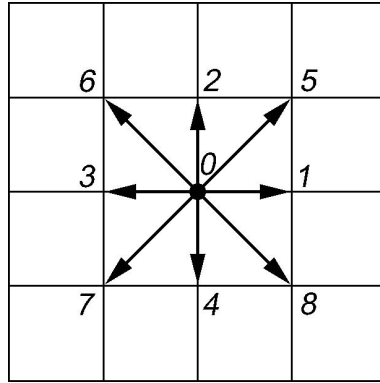


Рис. 3. Возможные вектора скорости частиц в методе решеточных уравнений Больцмана для двумерной девятискоростной модели D2Q9.

Для изотермических вариантов LBE-моделей жидкости разложение равновесных функций распределения (4) в ряд по скорости \mathbf{u} до второго порядка имеет вид

$$N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) = \rho w_k \left(1 + \frac{\mathbf{c}_k \mathbf{u}}{\theta} + \frac{(\mathbf{c}_k \mathbf{u})^2}{2\theta^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2\theta} \right). \quad (11)$$

Вектора \mathbf{c}_k и коэффициенты w_k зависят от конкретной решетки. Решетка должна быть достаточно симметричной, чтобы обеспечить изотропность соответствующих тензоров [9, 30]. В любом конкретном варианте метода LBE главная часть тензора потока импульса имеет гидродинамический вид

$$\Pi_{ij}^{(0)} = \sum_{k=0}^b c_{ki} c_{kj} N_k^{eq} = p \delta_{ij} + \rho u_i u_j, \quad (12)$$

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

Для двумерной изотермической девятискоростной модели D2Q9 [31] на квадратной решетке (Рис. 3) допустимы 3 значения модуля скорости частиц $|\mathbf{c}_k| = 0, h/\Delta t$ и $\sqrt{2}h/\Delta t$, где h – шаг сетки. Весовые коэффициенты равны $w_0 = 4/9$, $w_{1-4} = 1/9$ и $w_{5-8} = 1/36$. Использовалась также одномерная модель D1Q3 с тремя значениями скорости $\mathbf{c}_k = -h/\Delta t, 0$ и $+h/\Delta t$ ($w_0 = 2/3$, $w_{1,2} = 1/6$). Для ряда моделей LBE (D1Q3, D2Q9, D3Q19) соответствующее значение нормированной температуры $\theta = (h/\Delta t)^2 / 3$. Безразмерное время релаксации τ определяет кинематическую вязкость

$$v = \theta(\tau - 1/2)\Delta t.$$

4. Моделирование границ раздела фаз жидкость–пар в методе LBE

4.1. Метод сил притяжения Шана – Чена

Для моделирования переходных слоев между фазами в [18, 19] было предложено ввести в метод LBE специальные силы, действующие между каждой парой соседних узлов. Сумма этих сил, действующих на вещество в рассматриваемом узле, равна

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \psi(\rho(\mathbf{x})) \sum_k G_k \psi(\rho(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k)) \mathbf{e}_k, \quad (13)$$

Здесь G_k – коэффициенты, различные для основных и диагональных направлений сетки. При $G_k > 0$ эти силы являются силами притяжения. Эти силы обеспечивают поверхностное натяжение в тонком переходном слое между фазами, где плотность вещества изменяется сильно. Для такой модели уравнение состояния (УС) имеет вид

$$p = \rho\theta - \alpha G_0 \psi^2, \quad (14)$$

где G_0 – коэффициент в (13), соответствующий основным направлениям решетки. Коэффициенты G_1 для диагональных направлений, обеспечивающие изотропность, равны: для двумерной модели D2Q9 $G_1 = G_0/4$, а для трехмерной модели D3Q19 $G_1 = G_0/2$. Соответствующие значения коэффициентов равны: $\alpha = 1$ для модели D1Q3, $\alpha = 3/2$ для модели D2Q9 и $\alpha = 3$ для модели D3Q19.

При определенных зависимостях функции ψ от плотности уравнение состояния для такой изотермической модели допускает фазовые переходы. В частности, для функции, предложенной в [18, 19] в виде

$$\psi(\rho) = \rho_0(1 - \exp(-\rho/\rho_0)), \quad (15)$$

наблюдается фазовый переход жидкость–пар. При этом критическая точка соответствует значениям $G_{0*} = 2\theta/(\alpha\rho_0)$ и $\rho_* = \rho_0 \ln 2$. Например, при $\rho_0 = 1$ имеем $\rho_* = 0.693$, при этом $G_{0*} = 2/3$ для одномерной модели D1Q3 и $G_{0*} = 4/9$ для двумерной модели D2Q9. Для значений $G_0 > G_{0*}$ возможно сосуществование плотной (жидкость) и разреженной (пар) фаз. В этом случае силы (13) обеспечивают поверхностное натяжение на границе пар-жидкость. Величина поверхностного натяжения зависит от параметра G_0 [19].

4.2. Учет действия сил в методе LBE при расчете переходных слоев

Для правильного моделирования фазовых переходов методом LBE необходимо как можно точнее учесть силы, действующие на вещество в узлах. Существует несколько способов учета действия сил в методе решетчатых уравнений Больцмана. Однако, в [32, 33] показано, что все они да-

ют хорошие результаты только, если величины сил малы, так как в этих методах только линейные члены разложения по приращению скорости за шаг по времени $\Delta \mathbf{u} = \mathbf{F}\Delta t / \rho$ являются правильными. В переходном же слое жидкость-пар величины этих сил достаточно велики. В [32-34] предложен новый способ учета действия сил – метод точной разности (МТР), для которого

$$\Delta N_k = N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}) - N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}). \quad (16)$$

В этом случае правильными являются оба – и линейный, и квадратичный члены разложения по степеням $\Delta \mathbf{u}$. Для локально равновесных течений члены разложения по $\Delta \mathbf{u}$ более высоких степеней должны вообще отсутствовать.

Можно ввести величину отклонения других методов учета действия сил от метода точной разности ΔR_k для изотермического варианта ЛВЕ.

Тогда для класса методов, названных методом явной производной (МЯП) [35-37], включая метод неопределенных коэффициентов [38], имеем

$$\Delta R_k = -\frac{\rho w_k}{2\theta} \left(\frac{(\mathbf{c}_k \Delta \mathbf{u})^2}{\theta} - (\Delta \mathbf{u})^2 \right). \quad (17)$$

Для метода модификации оператора столкновений (МОС) {Shan,Shan2} [18, 19] имеем

$$\Delta R_k = -\frac{\rho w_k}{2\theta} \left(\frac{(\mathbf{c}_k \Delta \mathbf{u})^2}{\theta} - (\Delta \mathbf{u})^2 \right) (1 - \tau). \quad (18)$$

В недавно опубликованном комбинированном методе (КМ) [39] метод неопределенных коэффициентов использовался в сочетании с методом модификации оператора столкновений в виде

$$N_k(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = N_k(\mathbf{x}, t) + (N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}_+) - N_k(\mathbf{x}, t)) / \tau + \Delta N_k^+, \quad (19)$$

где $\Delta \mathbf{u}_+ = \Delta \mathbf{u} / 2$, а выражение для ΔN_k^+ , приведенное в [39], можно переписать в виде

$$\Delta N_k^+ = \rho w_k \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left(\frac{\mathbf{c}_k - \mathbf{u}}{\theta} + \frac{(\mathbf{c}_k \mathbf{u})}{2\theta^2} \mathbf{c}_k \right) \Delta \mathbf{u}. \quad (20)$$

В итоге, отклонение этого метода от МТР равно

$$\Delta R_k = -\frac{\rho w_k}{8\theta\tau} \left(\frac{(\mathbf{c}_k \Delta \mathbf{u})^2}{\theta} - (\Delta \mathbf{u})^2 \right). \quad (21)$$

Для перечисленных методов были рассчитаны стационарные переходные слои для одномерной модели. На Рис. 4 показаны кривые сосуществования фаз для уравнения состояния (14), (15) при $\rho_0 = 1$. Теоретические значения плотности пара и жидкости (Рис. 4, кривая 1) были рассчитаны с

использованием правила Максвелла. Результаты моделирования для плотности жидкости хорошо согласуются с теоретическими значениями. Вместе с тем, полученные значения плотности пара на кривой сосуществования фаз все сильнее начинают отличаться от теоретических при увеличении параметра G_0 , то есть, при удалении от “критической точки” $G_{0*} = 2/3$. Действительно, отклонения результатов, полученных методом модификации оператора столкновений (кривая 4), методами явной производной (кривая 3) и комбинированным методом (кривая 5), от теоретических значений достаточно велики уже при $G_0 > 0.75$. Только результаты, полученные с использованием МТР (кривая 2), хорошо совпадают с теоретическими до значений параметра $G_0 \approx 1$.

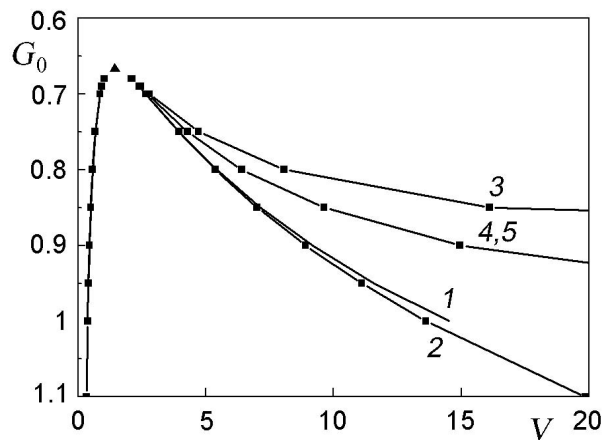


Рис. 4. Кривые сосуществования фаз для УС (14), (15). 1 – по правилу Максвелла, 2 – МТР, 3 – МЯП, 4 – МОС, 5 – КМ. ▲ – критическая точка. $\rho_0 = 1$, $\tau = 0.51$.

Были рассчитаны одномерные стационарные переходные слои при различных значениях времени релаксации τ (Рис. 5). Очевидно, что для заданного уравнения состояния плотность пара не может зависеть от параметра релаксации τ , как это наблюдается при моделировании методами явной производной, и методом модификации оператора столкновений. Только результаты, полученные с использованием МТР, хорошо совпадают с теоретическими и, кроме того, естественно, не зависят от времени релаксации. Заметим, что метод модификации оператора столкновений (кривая 4) совпадает с МТР (кривая 2) при $\tau = 1$, а комбинированный метод (кривая 5) совпадает с методом модификации оператора столкновений (кривая 4) при $\tau = 0.5$. Действительно, эти результаты следуют также из формул (18) и (21).

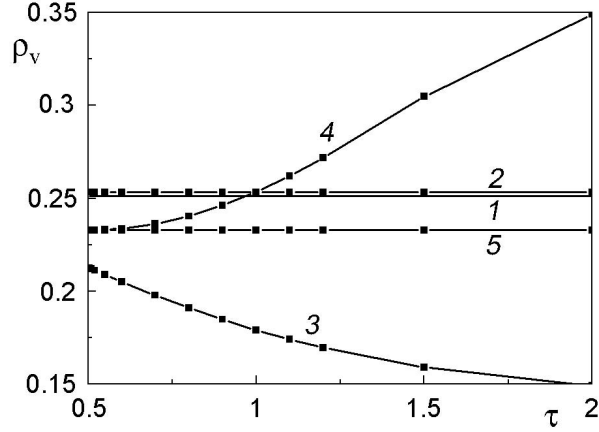


Рис. 5. Плотность пара на кривой сосуществования фаз для УС (14), (15) при $G_0 = 0.75$ в зависимости от времени релаксации τ . 1 – по правилу Максвелла, 2 – МТР, 3 – МЯП, 4 – МОС, 5 – КМ. $\rho_0 = 1$.

4.3. Метод среднего поля Жанга – Чена для других УС с фазовыми переходами

Для возможности моделирования фазовых переходов в случае уравнений состояния вида $p(\rho, T)$ в метод LBE была введена специальная сила \mathbf{F}_N , действующая на вещество в каждом узле [20]. Фактически, эту силу можно рассматривать как результирующую всех сил, действующих со стороны соседних узлов (метод среднего поля). Эта сила должна быть градиентом определенного потенциала U , чтобы обеспечить сохранение полного импульса (если внешние силы отсутствуют)

$$\mathbf{F}_N = -\nabla U. \quad (22)$$

В [20] было предложено выразить этот потенциал через уравнение состояния следующим образом:

$$U = p(\rho, T) - \rho\theta. \quad (23)$$

В рамках изотермической модели [18, 19] в [5, 40] было получено выражение для функции $\psi(\rho)$ в виде

$$\psi(\rho) = \sqrt{-(p(\rho) - \rho\theta)/(\alpha G_0)} \quad (24)$$

для уравнений состояния вида $p(\rho)$.

4.4. Аппроксимация градиента потенциала

По аналогии с (24) нами предложено ввести аналогичную функцию

$$\Phi = \sqrt{-U} \quad (25)$$

и для модели [20] с уравнением состояния произвольного вида (22), (23). Тогда для одномерного случая (D1Q3) конечно-разностная аппроксимация уравнения (22) может быть записана в виде

$$F_i = -\frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2h} = \frac{(\Phi_{i+1} + \Phi_{i-1})(\Phi_{i+1} - \Phi_{i-1})}{2h}. \quad (26)$$

Вместе с тем, рассматривая силу \mathbf{F}_N (22), действующую на вещество в узле, можно получить новое выражение

$$\mathbf{F}_N = 2\Phi(\rho, T)\nabla\Phi(\rho, T). \quad (27)$$

Конечно-разностную аппроксимацию этого вектора можно написать в виде

$$\mathbf{F}_N = \frac{1}{\alpha h} \Phi(\mathbf{x}) \sum_k \frac{G_k}{G_0} \Phi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k. \quad (28)$$

Эта аппроксимация силы точно совпадает с формулой, используемой в изотермическом методе [18, 19], если определить функцию $\Phi(\rho) = \sqrt{\alpha G_0} \psi(\rho)$ при значении $h = 1$, которое обычно подразумевается в LBE методе.

В одномерном случае ($\alpha = 1$) из (28) получаем конечно-разностную аппроксимацию

$$F_i = \Phi_i \frac{(\Phi_{i+1} - \Phi_{i-1}))}{h}. \quad (29)$$

Формулы (26) и (29) отличаются только тем, что в (29) для рассматриваемого узла i вместо среднего значения функции $\bar{\Phi} = (\Phi_{i-1} + \Phi_{i+1})/2$ используется локальное значение Φ_i .

Сравнение результатов моделирования было проведено на примере уравнения состояния Ван-дер-Ваальса в приведенных переменных $\tilde{p} = p/p_{cr}$, $\tilde{\rho} = \rho/\rho_{cr}$, $\tilde{T} = T/T_{cr}$

$$\tilde{p} = \frac{8\tilde{T}\tilde{\rho}}{3 - \tilde{\rho}} - 3\tilde{\rho}^2, \quad (30)$$

для которого была рассчитана теоретическая кривая сосуществования фаз пар-жидкость в соответствии с правилом Максвелла (Рис. 6, кривая 1). Здесь p_{cr} , ρ_{cr} и T_{cr} – критические величины для фазового перехода пар-жидкость.

Результаты моделирования хорошо совпадают с теоретическими значениями плотности жидкости на кривой сосуществования фаз. Однако, оказалось, что результаты моделирования для плотности насыщенного пара сильно зависят от вида аппроксимации (26) или (29) и становятся гораздо хуже для обеих аппроксимаций в области относительно низких температур. Вместе с тем, при использовании формулы (29) значения плотности насыщенного пара (Рис. 6, кривая 2) существенно ближе к теоретическим, чем результаты, полученные при использовании формулы (26) (кривая 3). Таким образом, для точного описания кривой сосуществования фаз очень важен вид аппроксимации сил (22).

Чтобы заметно улучшить результаты, нами предложен новый, более общий способ конечно разностной аппроксимации уравнений (22), (25), то есть градиента потенциала в переходном слое пар-жидкость для модели

[20]. В одномерном случае предложено использовать линейную комбинацию формул (26) и (29) с некоторым коэффициентом A в виде

$$F_i = [A\Phi_{i+1} + (1-2A)\Phi_i + A\Phi_{i-1}] \frac{(\Phi_{i+1} - \Phi_{i-1})}{h}. \quad (31)$$

В частных случаях $A=0$ и $A=0.5$ это выражение переходит, соответственно, в формулы (29) и (26). При $A=-0.152$ отклонение кривой сосуществования фаз (Рис. 6, кривая 4) от теоретической меньше чем 0.4 % (Рис. 7) в диапазоне температур от критической точки до $\tilde{T} = 0.4$. Аппроксимация (31) для уравнений (22), (25) позволяет использовать в моделях ЛВЕ уравнения состояния любого вида $p(\rho, T)$, допускающие фазовый переход (при этом потенциал U определяется формулой (23)).

Для учета действия сил в методе ЛВЕ для всех вариантов аппроксимации использовался метод точной разности [32-34].

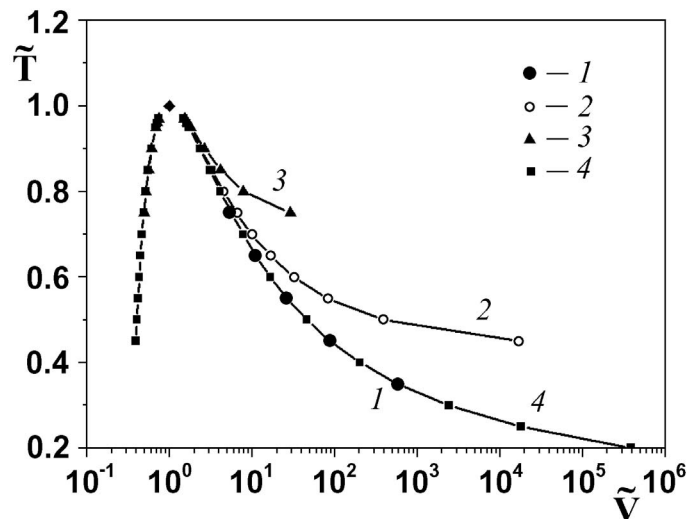


Рис. 6. Кривая сосуществования фаз в приведенных переменных.

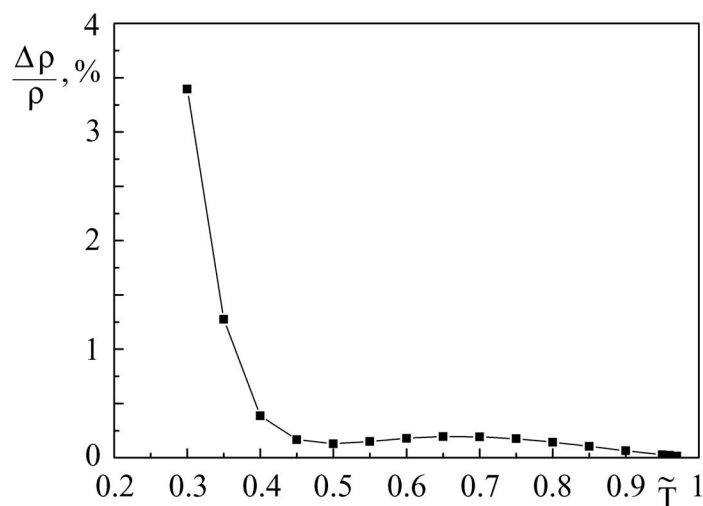


Рис. 7. Относительное отклонение результатов моделирования для плотности пара при использовании аппроксимации (31) от теоретической кривой сосуществования фаз.

Для двухмерной модели LBE (D2Q9) и для трехмерной модели D3Q19 предлагается использовать конечно-разностную аппроксимацию силы (13) в векторной форме

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\alpha h} \left[(1 - 2A)\Phi(\mathbf{x}) \sum_k \frac{G_k}{G_0} \Phi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k + A \sum_k \frac{G_k}{G_0} \Phi^2(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k \right]. \quad (32)$$

Правильные соотношения между коэффициентами G_1 и G_0 для модели D2Q9 можно получить, рассматривая проекции всех сил, действующих на рассматриваемый узел со стороны соседних узлов четырехмерной решетки в модели LBE D4Q25 (которая, очевидно, достаточно изотропна [9]) на квадратную решетку в двухмерном пространстве (Рис. 8). В модели D4Q25 из узла выходит 24 ребра решетки. Проекции соответствующих векторов решетки \mathbf{e}_k имеют вид $(1,1,0,0)$, $(1,0,1,0)$, ..., $(0,0,1,1)$. Все они имеют одинаковую длину $\sqrt{2}$ и, соответственно, все компоненты силы (13) для локально однородного вещества ($\rho = \text{const}$) равны по модулю и пропорциональны $\sqrt{2}G_0$. Проекции всех этих сил, которые действуют на рассматриваемый узел со стороны соседних узлов четырехмерной решетки в модели D4Q25, на квадратную решетку в двухмерном пространстве дают отношение коэффициентов $G_1 = G_0/4$. По аналогии для трехмерной модели D3Q19 получаем $G_1 = G_0/2$.

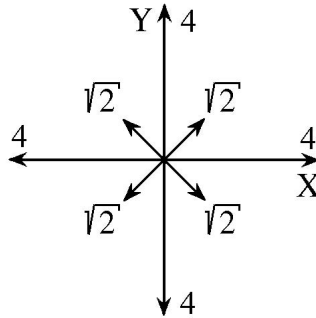


Рис. 8. Проекция всех сил, действующих на рассматриваемый узел со стороны соседних узлов четырехмерной решетки в модели D4Q25, на квадратную решетку в двухмерном пространстве.

Например, для двумерной модели LBE (D2Q9) конечно-разностная аппроксимация для проекции силы \mathbf{F}_N на ось x имеет вид

$$\begin{aligned} (F_{i,j})_x = & \frac{2}{3h} \left\{ (A\Phi_{i+1,j} + (1-2A)\Phi_{i,j} + A\Phi_{i-1,j})(\Phi_{i+1,j} - \Phi_{i-1,j}) + \right. \\ & + \frac{1}{4} \left[(A\Phi_{i+1,j+1} + (1-2A)\Phi_{i,j} + A\Phi_{i-1,j-1})(\Phi_{i+1,j+1} - \Phi_{i-1,j-1}) + \right. \\ & \left. \left. + (A\Phi_{i+1,j-1} + (1-2A)\Phi_{i,j} + A\Phi_{i-1,j+1})(\Phi_{i+1,j-1} - \Phi_{i-1,j+1}) \right] \right\}. \quad (33) \end{aligned}$$

Аналогичное выражение использовалось для проекции силы \mathbf{F}_N на ось y . Заметим, что коэффициент A имеет то же самое значение, что и в одно-

мерном случае, которое для уравнения Ван-дер-Ваальса равно $A = -0.152$. Для плоского переходного слоя, перпендикулярного оси x , формула (33) переходит в формулу (31), то есть результаты, приведенные на Рис. 6 и 7, справедливы и в двумерном случае (при отсутствии кривизны поверхности).

5. Результаты численного моделирования

На Рис. 9 показана зависимость приведенной плотности вещества в плоском переходном слое жидкость-пар. Как и должно быть, толщина переходного слоя увеличивается при приближении к критической точке, а поверхностное натяжение стремится к нулю.

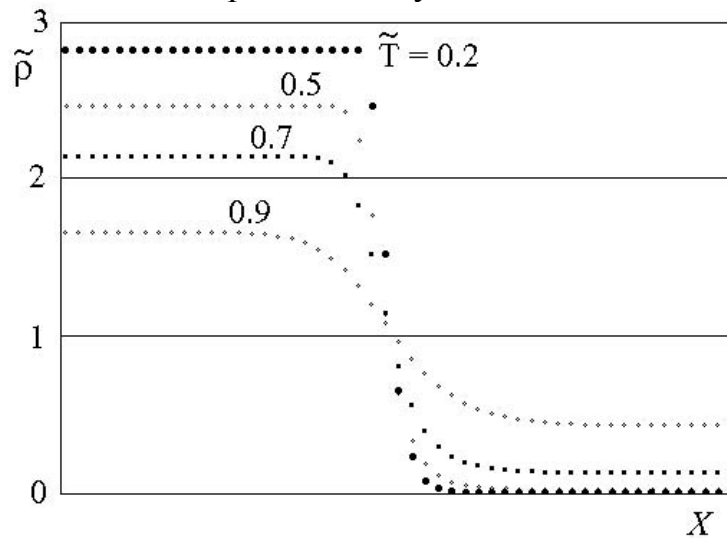


Рис. 9. Переходной слой жидкость-пар. $\tilde{T} = 0.2; 0.5; 0.7; 0.9$.

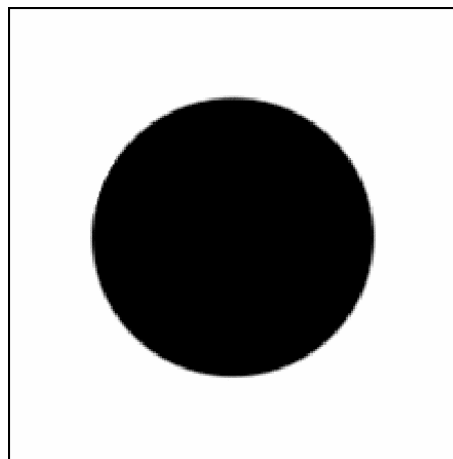


Рис. 10. Капля жидкости в насыщенном паре после установления равновесия при $\tilde{T} = 0.35$. $\tilde{\rho}_{\text{ж}} = 2.66$, $\tilde{\rho}_{\text{п}} = 0.002$ (результаты моделирования).
Сетка 200×200 .

Предложенная нами аппроксимация (32) обеспечивает правильные значения плотности на кривой сосуществования фаз и поверхностного натя-

