

Всероссийская конференция XXXI «Сибирский теплофизический семинар», 17-19 ноября 2014, Новосибирск, Россия Доклад №3-08

532.7+532.516.5+532.593

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ С ФАЗОВЫМИ ПЕРЕХОДАМИ МЕТОДОМ РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА С УЧЕТОМ ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ

Куперштох А.Л.^{1,2}, Медведев Д.А.^{1,2}, Грибанов И.И.¹

¹ Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, 630090, Россия, Новосибирск, пр. Лаврентьева, 15

² Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, 630090, Россия, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

АННОТАЦИЯ

Предложен новый способ учета переноса тепла для моделирования течений в среде с фазовыми переходами жидкость-пар методом решеточных уравнений Больцмана (Lattice Boltzmann Equation, LBE). При наличии границ раздела фаз необходимо рассматривать уравнение переноса энергии. Для этого вводится второй комплект функций распределения LBE в форме пассивного скаляра, описывающего перенос внутренней энергии. Для устранения паразитной диффузии энергии на границах раздела фаз с большим скачком плотности введены специальные "псевдосилы", удерживающие пассивный скаляр от разлета. В уравнении энергии учитываются теплопроводность и работа сил давления. Для того, чтобы метод LBE остался методом сквозного счета границ раздела фаз, выделение и поглощение скрытой теплоты фазового перехода учитывается в уравнении энергии во внутренней области тонкого переходного слоя от жидкости к пару. Проведен ряд простых тестов, демонстрирующих все аспекты рассматриваемых процессов. Показано выполнение галилеевской инвариантности и подобия процессов теплопроводности. Метод имеет малую схемную диффузию внутренней энергии и может быть применен для моделирования широкого класса течений двухфазных сред с тепломассопереносом.

введение

Численное моделирование течений с фазовыми переходами жидкость-пар представляет заметные трудности из-за того, что в процессе расчетов в объеме вещества могут возникать новые межфазные границы, а существующие границы могут исчезать или изменять свою топологию. Поэтому методы, использующие выделение границ, применять очень трудно, если вообще возможно. Кроме того, отношение плотностей жидкой и газообразной фаз обычно велико (может достигать нескольких десятков и сотен тысяч), что приводит к заметной численной диффузии и/или дисперсии на границах при использовании обычных конечно-разностных методов.

Метод решеточных уравнений Больцмана (LBE) основан на решении кинетического уравнения для ансамбля псевдочастиц. Метод LBE широко используется для моделирования течений однофазных и двухфазных сред [1-7].

Для описания теплопереноса в методе LBE было предложено три принципиально различных метода. В работах [8-11] это было сделано с помощью расширения набора возможных векторов скорости \mathbf{c}_k . Недостатками

многоскоростного подхода являются достаточно узкий диапазон моделируемых температур, а также значительное увеличение количества используемых массивов данных и усложнение задания граничных условий.

В работе [12] уравнение энергии решалось с помощью метода конечных разностей с использованием плотности и скорости вещества, полученных из метода LBE (гибридный метод). Однако при моделировании теплопереноса в эйлеровых координатах этим методом в случае движущейся среды наблюдается высокая схемная диффузия и дисперсия внутренней энергии на границах раздела фаз, что сильно ограничивает возможности моделирования.

В третьем способе моделирования конвективного переноса энергии для описания пассивного скаляра (ПС) в методе LBE используется второй комплект функций распределения LBE [13-16]. При этом схемная диффузия гораздо меньше, чем в конечно-разностных методах. Однако ранее этот метод был реализован только для течений жидкости почти постоянной плотности и, соответственно, теплоемкости, когда в качестве ПС можно использовать температуру. Для течений с фазовыми переходами плотность вещества сильно меняется, и необходимо рассматривать перенос не температуры, а энергии. Второй комплект функций распределения для энергии использовался в работах [14-16], но только для однофазных течений.

1. МЕТОД РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА

Метод решеточных уравнений Больцмана основан на решении кинетического уравнения для ансамбля псевдочастиц. Используется небольшой набор скоростей псевдочастиц \mathbf{c}_k – такой, что векторы $\mathbf{e}_k = \mathbf{c}_k \Delta t$ соответствуют расстояниям до соседних узлов пространственной решетки, где Δt – шаг по времени. Для одномерной модели D1Q3 с тремя векторами скорости $|\mathbf{c}_k| = 0$, $h/\Delta t$. Для двумерной модели D2Q9 с девятью векторами скорости и для трехмерной модели D3Q19 с 19 векторами скорости $|\mathbf{c}_k| = 0$, $h/\Delta t$, $\sqrt{2}h/\Delta t$.

В качестве основных переменных в методе LBE используются одночастичные функции распределения N_k , имеющие смысл плотности, уравнения эволюции для которых имеют вид

 $N_k(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = N_k(\mathbf{x}, t) + \Omega_k(N) + \Delta N_k$, (1) где k = 1,...,b. Здесь Ω_k – оператор столкновений, а ΔN_k – изменение функций распределения из-за действия объемных сил (внешних и внутренних).

Оператор столкновений часто выбирается в виде релаксации к локально равновесному состоянию

$$\Omega_k = \frac{N_k^{eq}(\boldsymbol{\rho}, \mathbf{u}) - N_k(\mathbf{x}, t)}{\tau},$$

где $\tau = t_{\rm rel} / \Delta t$ – безразмерное время релаксации.

В качестве формулы для равновесных функций распределения $N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u})$ используется известное разложение равновесных функций распределения Максвелла – Больцмана в ряд по скорости **u** до второго порядка

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

Здесь коэффициенты w_k зависят от конкретной решетки. Кинетическая температура псевдочастиц для перечисленных выше LBE моделей равна $\theta = (h/\Delta t)^2/3$, а кинематическая вязкость $v = \theta(\tau - 1/2)\Delta t$ определяется временем релаксации τ .

Плотность вещества ρ и скорость **u** (гидродинамические переменные) вычисляются как

$$\rho = \sum_{k=0}^{b} N_k , \qquad \rho \mathbf{u} = \sum_{k=1}^{b} \mathbf{c}_k N_k . \tag{3}$$

Изменение функций распределения в узле из-за действия объемных сил вычисляется по методу точной разности (Exact Difference Method, EDM) [16-17]

$$\Delta N_k(\mathbf{x},t) = N_k^{eq}(\rho,\mathbf{u}+\Delta\mathbf{u}) - N_k^{eq}(\rho,\mathbf{u}), \qquad (4)$$

где $\Delta \mathbf{u} = \mathbf{F} \Delta t / \rho$ – изменение скорости вещества за шаг по времени, а **F** – полная сила, действующая на вещество в узле.

В случае действия объемных сил для вычисления физической скорости **u*** следует использовать выражение

$$\rho \mathbf{u}^* = \sum_{k=1}^b \mathbf{c}_k N_k + \mathbf{F} \Delta t / 2 \,. \tag{5}$$

Обоснованием метода решеточных уравнений Больцмана принято считать тот факт, что при разложении уравнений эволюции (1) по методу Чепмена – Энскога [1] во втором порядке по малому числу Кнудсена получаются макроскопические уравнения гидродинамики, то есть известные уравнения неразрывности и Навье – Стокса.

2. МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

Чтобы во флюиде возникли фазовые переходы, необходимо в методе LBE смоделировать притягивающую ветвь потенциала «межмолекулярного» взаимодействия. Для этого в работе [3] были введены силы притяжения, действующие на вещество в узле со стороны соседних узлов. Позже было предложено записать полную силу **F**, действующую на вещество в узле, как градиент псевдопотенциала U, определяемого через уравнение состояния вещества [4,12]

$$\mathbf{F} = -\nabla U = -\nabla (p(\rho, T) - \rho\theta) .$$
(6)

В результате в методе LBE вместо контактной границы моделируется тонкий переходной слой жидкостьпар, в котором плотность изменяется плавно на размерах нескольких узлов решетки (метод сквозного счета границ раздела фаз). При этом на границах раздела появляется поверхностное натяжение, которое уменьшается при повышении температуры и обращается в ноль в критической точке.

В работе [19] было предложено ввести функцию $\Phi = \sqrt{-U}$. Тогда выражение для силы (6) можно переписать в эквивалентном виде

$$\mathbf{F} = 2A\nabla(\Phi^2) + (1 - 2A)2\Phi\nabla\Phi, \tag{7}$$

где *А* – свободный параметр, позволяющий добиться точного описания плотностей фаз на кривой фазового равновесия [19]. Конечно-разностная формула для уравнения (7), обеспечивающая достаточную изотропность, имеет вид [5,19,20]

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\alpha h} \left[A \sum_{k=1}^{b} G_{k} \Phi^{2}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{k}) \mathbf{e}_{k} + (1 - 2A) \Phi(\mathbf{x}) \sum_{k=1}^{b} G_{k} \Phi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{k}) \mathbf{e}_{k} \right].$$
(8)

Здесь $G_k > 0$ – коэффициенты, различные для основных и диагональных направлений решетки. Для основных направлений решетки коэффициенты $G_k = 1$. Для диагональных направлений значения коэффициентов, обеспечивающих изотропность пространства, в двумерной модели D2Q9 задаются равенствами $G_{5-8} = 1/4$, а в трехмерной модели имеем $G_{7-18} = 1/2$. При этом коэффициент α равен 1, 3/2 и 3 для изотермических моделей D1Q3, D2Q9 и D3Q19, соответственно.

В данной работе использовалось уравнение состояния Ван-дер-Ваальса

$$\widetilde{p} = \frac{8\widetilde{\rho}\widetilde{T}}{3-\widetilde{\rho}} - 3\widetilde{\rho}^2 \,. \tag{9}$$

Здесь и далее будут использованы приведенные переменные $\tilde{p} = p / p_{\rm kp}$, $\tilde{\rho} = \rho / \rho_{\rm kp}$ и $\tilde{T} = T / T_{\rm kp}$, где $p_{\rm kp}$, $\rho_{\rm kp}$ и $T_{\rm kp}$ – значения давления, плотности и температуры в критической точке. Использование более сложных уравнений состояния, в том числе и для реальных веществ, рассмотрено в [20,21].

Зависимость удельной теплоемкости *с*_V от объема задается известной формулой

$$\left(\frac{\partial c_V}{\partial V}\right)_T = T \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T}\right)_V.$$

Из нее следует, что для аналитических уравнений состояния Ван-дер-Ваальса, Карнахана – Старлинга, модифицированного в [20] УС Каплуна – Мешалкина и других УС, линейно зависящих от температуры, удельная теплоемкость c_V не зависит от плотности, то есть при переходе границы жидкость-пар не меняется.

3. ТЕПЛОПЕРЕНОС

Уравнение для плотности внутренней энергии $E = \rho c_V T$ с учетом работы сил давления и теплопроводности имеет вид

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \operatorname{div}(E\mathbf{u}) = \frac{p}{\rho} \frac{d\rho}{dt} + \nabla(\lambda \nabla T), \qquad (10)$$

где $\lambda = \rho c_V \chi$ – коэффициент теплопроводности. Тепловыделением из-за вязкого трения обычно можно пренебречь.

Наиболее сложным является расчет левой части уравнения (10), т.е. конвективного переноса внутренней энергии вместе с потоком вещества, скорость которого \mathbf{u}^* вычисляется по формуле (5).

В данной работе для моделирования конвективного переноса энергии предложено использовать дополнительный комплект функций распределения LBE (метод пассивного скаляра, ПС). Этот метод имеет гораздо меньшую схемную диффузию по сравнению с конечноразностными методами. Однако ранее он был реализован только для течений жидкости почти постоянной плотности и, соответственно, теплоемкости, когда в качестве ПС можно использовать температуру T.

Для течений с фазовыми переходами плотность вещества сильно меняется, и необходимо использовать уравнение (10) для плотности внутренней энергии. При этом $E = \sum_{k=0}^{b} g_k$, а уравнения для эволюции функций распределения $g_k(\mathbf{x},t)$ можно записать в виде, аналогичном уравнению (1)

$$g_{k}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_{k}\Delta t, t + \Delta t) = g_{k}(\mathbf{x}, t) + \frac{g_{k}^{eq}(E, \mathbf{u}) - g_{k}(\mathbf{x}, t)}{\tau_{E}} + \Delta g_{k}(\mathbf{x}, t).$$

Здесь Δg_k – изменение функций распределения за шаг по времени, а τ_E – безразмерное время релаксации для функций распределения энергии. Равновесные функции распределения $g_k^{eq}(E, \mathbf{u})$ имеют вид, аналогичный уравнению (2).

Основная проблема заключается в том, что на границах раздела фаз есть скачок объемной теплоемкости. Изза этого даже при равномерном распределении давления и температуры начинается паразитная диффузия (разлет) энергии из плотной фазы в менее плотную. Этот эффект хорошо наблюдается для стационарной капли в случае баротропного уравнения состояния $p = p(\rho)$ (давление зависит только от плотности). При этом нет обратной связи по температуре, и не возникают волны давления и плотности. В качестве такого уравнения состояния использовалось уравнение типа Ван-дер-Ваальса с константой \widetilde{T}_0 вместо температуры среды

$$\widetilde{p}(\widetilde{\rho}) = \frac{8\widetilde{T}_0\widetilde{\rho}}{3-\widetilde{\rho}} - 3\widetilde{\rho}^2.$$

На рис. 1 показан разлет энергии E_* на границах раздела фаз для одномерной покоящейся капли жидкости, находящейся в равновесии с насыщенным паром. При этом начальное равномерное распределение температуры $\tilde{T} = \text{const}$ нарушается (рис. 26). Для наглядности в этом тесте работа сил давления и теплопроводность выключены.

В данной работе впервые удалось разработать метод ПС для описания переноса энергии в условиях фазовых переходов. Для этого вводятся специальные "псевдосилы" для скаляра энергии, удерживающие энергию от разлета на границах фаз. Реализован вариант метода для случая, когда удельная теплоемкость флюида c_V постоянна, и плотность внутренней энергии при заданной температуре пропорциональна плотности флюида [22]. Для учета действия "псевдосил" в уравнениях эволюции функций распределения $g_k(\mathbf{x},t)$, описывающих энергию, тоже используется метод точной разности (EDM), аналогичный уравнению (4)

$$\Delta g_k^{(1)}(\mathbf{x},t) = g_k^{eq}(E,\mathbf{u}+\Delta \mathbf{u}) - g_k^{eq}(E,\mathbf{u}) , \qquad (11)$$

где **u** – скорость вещества, определяемая по основным функциям распределения LBE N_k (3).



Рис. 1. Паразитная диффузия (разлет) энергии на границах раздела фаз для одномерной стационарной капли в насыщенном паре.

Слагаемые в правой части уравнения (10) можно учесть с помощью явной конечно-разностной схемы. Работу сил давления удобнее переписать в виде

$$\frac{p}{\rho}\frac{d\rho}{dt} = -p\operatorname{div}(\mathbf{u}^*) \,.$$

Например, в одномерном случае для изменения энергии за счет работы сил давления ΔE_p и за счет теплопроводности ΔE_T имеем

$$\frac{E_i^{n+1} - E_i^n}{\Delta t} = -p_i^n \frac{(u^*)_{i+1}^n - (u^*)_{i-1}^n}{2h} + \frac{(\lambda_{i+1}^n + \lambda_i^n)T_{i+1}^n - (\lambda_{i+1}^n + 2\lambda_i^n + \lambda_{i-1}^n)T_i^n + (\lambda_i^n + \lambda_{i-1}^n)T_{i-1}^n}{2h^2}.$$
(12)

При этом соответствующие изменения функций распределения $\Delta g_k^{(2)}$ в методе LBE вычисляются пропорционально изменению внутренней энергии в узлах решетки за шаг по времени

$$\Delta g_k^{(2)}(\mathbf{x},t) = g_k(\mathbf{x},t) \Delta E_i / E_i^n, \qquad (13)$$

где $\Delta E_i = \Delta E_p + \Delta E_T$. Таким образом, полное изменение функций распределения вычисляется как $\Delta g_k = \Delta g_k^{(1)} + \Delta g_k^{(2)}$.

Начальное состояние газа для тестов по диффузии и галилеевской инвариантности выбрано в виде прямоугольника (шириной 400 h) с параметрами $\tilde{T}_{max} = 0.947$, $\tilde{\rho}_1 = 0.03$ на фоне $\tilde{T}_0 = 0.6$, $\tilde{\rho}_0 = 0.05$ так, что давление p = const. Распределения температуры и плотности в покоящемся газе (рис. 2а,б) и в движущемся со скоростью $u = 0.1h/\Delta t$ (рис. 2в,г) полностью совпадают, то есть выполнена галилеевская инвариантность. При $\tau_E = 0.503$ коэффициент схемной диффузии энергии равен $D_E = \theta(\tau_E - 1/2)\Delta t = 0.001h^2/\Delta t$.

Показано, что в покоящемся газе для распределений температуры и плотности при разных коэффициентах

температуропроводности χ в соответствующие моменты времени выполняется условие подобия $l \sim \sqrt{\chi t}$. Поскольку разностная схема (11) является явной, то устойчивость в одномерном случае сохраняется для значений $\chi \Delta t / h^2 < 0.5$.



Рис. 2. Схемная диффузия энергии. Скорость течения газа и = 0 (a, б); 0.1 (в, г) в единицах h/∆t. t = 10000 (a, в), 1000000 (б, г).



Рис. 3. Распределение температуры \widetilde{T} и плотности флюида $\widetilde{
ho}$ после спинодального распада на жидкость и пар с учетом

работы сил давления. $\widetilde{T}_0 = 0.8$, $\widetilde{\rho}_0 = 0.7$. t = 50000.

В качестве теста для работы сил давления рассматривалась задача о спинодальной декомпозиции (распад первоначально однородного флюида, состояние которого находится под спинодалью) на двухфазную систему жидкость-пар.

На рис. З показаны результаты расчетов. При этом теплопроводность λ полагалась равной нулю, и оставалась только небольшая схемная диффузия энергии.

Поскольку теплоемкость жидкой фазы значительно больше, чем у пара, а относительное изменение объема меньше, то температура жидкости повышается из-за работы сил давления незначительно. Температура же газовой фазы заметно уменьшается. Можно привести оценку температуры пара

$$T_{\text{nap}} = T_0 - \frac{p}{c_V} \left(\frac{1}{\rho_{\text{nap}}} - \frac{1}{\rho_0} \right).$$

Видно, что результаты моделирования дают близкие значения температуры пара (рис. 3).

Без учета работы сил давления скорость распространения малых возмущений (скорость звука) соответствует изотермическому случаю. Например, для уравнения Ван-дер-Ваальса она равна

$$\widetilde{c}_T^2 = \left(\frac{\partial \widetilde{\rho}}{\partial \widetilde{\rho}}\right)_T = \frac{24\widetilde{T}_0}{(3-\widetilde{\rho})^2} - 6\widetilde{\rho}.$$

При учете работы сил давления скорость звука соответствует адиабатическому значению. Для уравнения Вандер-Ваальса

$$\widetilde{c}_{S}^{2} = \left(\frac{\partial \widetilde{\rho}}{\partial \widetilde{\rho}}\right)_{S} = \gamma \frac{24\widetilde{T}_{0}}{\left(3 - \widetilde{\rho}\right)^{2}} - 6\widetilde{\rho}.$$

Показатель адиабаты $\gamma = c_P / c_V$ можно изменять, меняя значение c_V . Скорость звука при этом изменяется, что наблюдается в тестовых расчетах.

3. СКРЫТАЯ ТЕПЛОТА ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

Скрытая теплота фазового перехода должна учитываться в условиях на движущейся границе раздела фаз

$$\left. \lambda_{\mathfrak{m}} \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=\xi=0} - \left. \lambda_{\mathrm{map}} \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=\xi=0} = \rho_{\mathfrak{m}}(T)Q(T)\frac{d\xi}{dt} \,.$$

Здесь ξ – координата плоской границы раздела фаз жидкость-пар, $\rho_{\pi}(T)$ – плотность жидкости на кривой сосуществования фаз (рис. 4). Теплота фазового перехода Q(T) уменьшается с ростом температуры и обращается в ноль при $T = T_{\text{кр}}$.



Рис. 4. Схема учета теплоты фазового перехода. Теоретическая кривая сосуществования фаз для УС Ван-дер-Ваальса – кривая 1. Расчеты методом LBE – точки 2.

Сложность заключается в том, что во многих задачах границы возникают, исчезают, изменяется их топология. Достоинство метода LBE заключается в том, что он является методом сквозного счета границ раздела фаз жидкость-пар. При этом границы раздела фаз представляют собой некоторые переходные слои, в которых плотность плавно изменяется от плотности жидкости до плотности пара в соответствии с кривой сосуществования фаз (рис. 4). Плотность порции вещества при фазовом переходе изменяется во времени тоже постепенно, пробегая ряд промежуточных значений.

Если не пытаться точно описать внутреннюю структуру переходного слоя, а учесть скрытую теплоту фазового перехода только интегрально по ширине переходного слоя, то можно считать, что скрытая теплота тоже постепенно выделяется или поглощается внутри переходного слоя на некотором участке изменения плотности $\rho_1 > \rho > \rho_2$ (рис. 4) согласно уравнению

$$\frac{dE}{dt} = \frac{\rho_{\ast}(T)Q(T)}{\rho_2 - \rho_1} \frac{d\rho}{dt} = -\frac{\rho_{\ast}(T)Q(T)}{\rho_2 - \rho_1} \rho \operatorname{div}(\mathbf{u}^*).$$

В качестве значений ρ_1 и ρ_2 при каждой температуре могут использоваться значения плотности пара $\rho_{\text{пар}}$ и жидкости $\rho_{\#}$, соответственно. При этом изменение внутренней энергии в узле решетки за шаг по времени из-за теплоты фазового перехода ΔE_Q тоже включается в формулу (13) так, что $\Delta E_i = \Delta E_p + \Delta E_T + \Delta E_Q$.



Рис. 5. Распределения температуры и плотности флюида после спинодального распада с учетом теплоты фазового пере- $\stackrel{\sim}{\sim}$

xoda. $\widetilde{T}_0 = 0.8$, $\widetilde{\rho}_0 = 0.7$. t = 50000.

На рис. 5 показаны результаты моделирования с учетом теплоты фазового перехода. При этом температура жидкой фазы заметно превышает начальную, так как при конденсации пара выделяется скрытая теплота фазового перехода.

4. РАСЧЕТЫ ПО ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ

Проведено моделирование двумерного течения, включающего круглую каплю, находящуюся в равновесии с насыщенным паром. Скорость течения направлена по диагонали расчетной области (рис. 6). Использовались периодические граничные условия по x и по y. За время t = 62000 капля вместе с течением совершила более шести оборотов по диагонали, что соответствует 27 диаметрам капли. Наблюдается изотропность результатов расчетов, т.е. круглая форма капли. Паразитная диффузия внутренней энергии практически отсутствует. Выполнена галилеевская инвариантность. Неравномерность температуры в расчетах $\Delta \tilde{T} \approx 0.001$.



Рис. 6. Капля жидкости радиусом R = 160h в насыщенном паре. Распределение плотности (а, б) и распределение внутренней энергии (в, г). $u_{0x} = u_{0y} = 0.1h/\Delta t$. t = 0 (а, в), 62000 (б, г). Сетка 1000×1000.

На рис. 7 показаны результаты двумерного моделирования спинодальной декомпозиции флюида с началь-

ной температурой $\widetilde{T}_0 = 0.8$ с учетом работы сил давления и теплоты фазового перехода. Температура пара опускается до $\widetilde{T} \approx 0.77$, что меньше начальной из-за расширения, а температура жидкости достигает $\widetilde{T} \approx 0.83$, что выше начальной из-за выделения теплоты фазового перехода.

При дальнейшей эволюции системы происходит коалесценция капель в одну или несколько, как за счет их слияния, так и за счет испарения маленьких капель. Температура с течением времени выравнивается за счет теплопроводности. На рис. 8 показаны последние две капли. Температура меньшей капли ниже за счет эффекта испарения, а большая капля нагревается из-за конденсации. Разница температур может доходить до $\Delta \widetilde{T} \approx 0.01$. Когда процесс закачивается (остается одна капля), неравномерность температуры уменьшается до $\Delta \widetilde{T} < 0.001$.



Рис. 7. Спинодальная декомпозиция. Распределение плотности (a) и распределение температуры (б). t = 2630. $\widetilde{T}_0 = 0.8$. $\widetilde{\rho}_0 = 1$. Сетка 500×500.



поздней стадии спинодальной декомпозиции. $\widetilde{T}_0 = 0.8$. $\widetilde{\rho}_0 = 0.8$. t = 1750000. Сетка 500×500.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Впервые удалось разработать метод дополнительного компонента LBE для уравнения переноса энергии в случае течений с фазовыми переходами. В алгоритме учитываются теплопроводность, работа сил давления и скрытая теплота фазового перехода, источники тепла. Реализованный алгоритм является методом сквозного счета границ раздела фаз жидкость-пар, т.е. не требует выделения границ раздела фаз и постановки на них граничных условий. Выполнены простые тесты, показывающие галилеевскую инвариантность, малую схемную диффузию энергии, изотропность и устойчивость метода. Метод LBE хорошо распараллеливается по технологии CUDA на многопроцессорных графических ускорителях. Таким образом, разработанный метод LBE с учетом тепломассопереноса применим для моделирования широкого круга течений с фазовыми переходами.

Список литературы:

- Chen S., Doolen G.D. Lattice Boltzmann method for fluid flow // Annu. Rev. Fluid Mech., 1998, Vol. 30, pp. 329–364.
- Aidun C.K., Clausen J.R. Lattice-Boltzmann method for complex flows // Annu. Rev. Fluid Mech., 2010, Vol. 42, pp. 439–472.
- Shan X., Chen H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components // Phys. Rev. E, 1993, Vol. 47, No. 3, pp. 1815–1819.
- Qian Y.H., Chen S. (1997). "Finite size effect in lattice-BGK models", International Journal of Modern Physics C, Vol. 8, No. 4, pp. 763–771.
- Куперштох А.Л. Трехмерное моделирование двухфазных систем типа жидкость-пар методом решеточных уравнений Больцмана на GPU // Вычислительные методы и программирование. – 2012. – Т. 13. – С. 130–138.
- Куперштох А.Л. Трехмерное моделирование методом LBE на гибридных GPU-кластерах распада бинарной смеси жидкого диэлектрика с растворенным газом на систему парогазовых каналов // Вычислительные методы и программирование. 2012. 13. 384–390.
- Kupershtokh A.L. Three-dimensional LBE simulations of a decay of liquid dielectrics with a solute gas into the system of gas-vapor channels under the action of strong electric fields // Computers and Mathematics with Applications, 2014, Vol. 67, No. 2, pp. 340–349.
- Alexander F.J., Chen S., Sterling J.D. Lattice Boltzmann thermohydrodynamics // Phys. Rev. E, 1993, Vol. 47, No. 4, pp. R2249–R2252.
- Qian Y.H. Simulating thermohydrodynamics with lattice BGK models // Journal of Scientific Computing, 1993, Vol. 8, No. 3, pp. 231–242.
- Chen Y., Ohashi H., Akiyama M. Thermal lattice Bhatnagar-Gross-Krook model without nonlinear deviations in macrodynamical equations // Phys. Rev. E, 1994, Vol. 50, No. 4, pp. 2776–2783.
- Karlin I.V., Sichau S, Chikatamarla S.S. Consistent two-population lattice Boltzmann model for thermal flows // Phys. Rev. E, 2013, Vol. 88, No. 6, pp. 063310.
- Zhang R., Chen H. Lattice Boltzmann method for simulations of liquidvapor thermal flows // Phys. Rev. E, 2003, Vol. 67, No. 6, pp. 066711.

- Shan X. Simulation of Rayleigh–Bénard convection using a lattice Boltzmann method // Phys. Rev. E, 1997, Vol. 55, No. 3, pp. 2780– 2788.
- He X., Chen S., Doolen G.D. A novel thermal model for the lattice Boltzmann method in incompressible limit // Journal of Computational Physics, 1998, Vol. 146, No. 2, pp. 282–300.
- Guo Z., Zheng C., Shi B., Zhao T.S. Thermal lattice Boltzmann equation for low Mach number flows: Decoupling model // Phys. Rev. E, 2007, Vol. 75, No. 3, pp. 036704.
- Li Q., He Y.L., Wang Y., Tao W.Q. Coupled double-distributionfunction lattice Boltzmann method for the compressible Navier – Stokes equations // Phys. Rev. E, 2007, Vol. 76, No. 5, pp. 056705.
- 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.
- Kupershtokh A.L. Criterion of numerical instability of liquid state in LBE simulations // Computers and Mathematics with Applications, 2010, Vol. 59, No. 7, pp. 2236–2245.
- 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.
- Kupershtokh A.L., Medvedev D.A., Karpov D.I. On equations of state in a lattice Boltzmann method // Computers and Mathematics with Applications, 2009, Vol. 58, No. 5, pp. 965–974.
- 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, 2011, Vol. 61, No. 12, pp. 3537–3548.
- Куперштох А.Л., Медведев Д.А., Грибанов И.И. Моделирование тепломассопереноса в среде с фазовыми переходами методом решеточных уравнений Больцмана // Вычислительные методы и программирование. 2014. Т. 15. С. 317–328.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Минобрнауки России и грантов РФФИ № 13-01-00526a и № 13-08-00763а.