

УДК 532.7+532.516.5+532.593

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В СРЕДЕ С ФАЗОВЫМИ ПЕРЕХОДАМИ МЕТОДОМ РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА**А. Л. Куперштох¹, Д. А. Медведев², И. И. Грибанов³**

Предложен новый способ учета теплопереноса 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. Рассмотрен ряд простейших 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 теплопереносом.

Ключевые слова: метод решеточных уравнений Больцмана, фазовые переходы, динамика многофазных сред, теплоперенос, мезоскопические методы, компьютерное моделирование.

Введение. Течения с фазовыми переходами жидкость–пар широко распространены в технике. Численное моделирование таких течений 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. В этой связи методы, использующие отслеживание границ, применять очень трудно, если вообще возможно. Более того, отношение плотностей жидкой и газообразной фаз обычно велико (может достигать нескольких десятков тысяч и более), что приводит к заметной численной диффузии на границах при использовании обычных конечно-разностных методов.

Метод решеточных уравнений Больцмана (Lattice Boltzmann Equation, LBE) [1, 2] основан на решении кинетического уравнения для ансамбля псевдочастиц. Метод LBE широко используется для моделирования течений однофазных и двухфазных сред [3–11]. Кроме того, метод хорошо распараллеливается по технологии CUDA на многопроцессорных графических ускорителях [7–15].

Для описания теплопереноса в методе LBE было предложено три принципиально различных метода: многоскоростной подход [16–18], использование конечно-разностного уравнения энергии [19] и метод второго комплекта функций распределения LBE (метод пассивного скаляра, ПС) [20, 21].

Недостатками первого подхода являются достаточно узкий диапазон моделируемых температур, а также значительное увеличение количества используемых массивов данных. При моделировании уравнения энергии обычными конечно-разностными методами в сочетании с методом LBE, использующим эйлеровы координаты, в случае движущейся среды наблюдается высокая схемная диффузия, что сильно ограничивает возможности моделирования.

Для реализации пассивного скаляра (ПС) в методе LBE используется дополнительный комплект функций распределения. При этом метод ПС имеет гораздо меньшую схемную диффузию по сравнению с конечно-разностными методами. Вместе с тем, метод LBE с теплопереносом был реализован ранее только для течений жидкости почти постоянной плотности, где в качестве ПС использовалась температура T . Однако при фазовых переходах жидкость–пар изменения плотности не малы, и необходимо рассматривать

¹ ФГБУН Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН (ИГиЛ СО РАН), просп. Лаврентьева, 15, 630090, Новосибирск; д.ф.-м.н., зав. лабораторией, e-mail: skn@hydro.nsc.ru

² ФГБУН Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН (ИГиЛ СО РАН), просп. Лаврентьева, 15, 630090, Новосибирск; к.ф.-м.н., ст. науч. сотр., e-mail: dmedv@hydro.nsc.ru

³ Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, механико-математический факультет, ул. Пирогова, 2, 630090, Новосибирск; студент, e-mail: igor1215@gmail.com

перенос не температуры, а энергии. Такой подход использовался в работах [21, 22], а также в комбинации с многоскоростным подходом в работе [23]. Во всех случаях, однако, рассматривались только однофазные течения.

1. Метод решеточных уравнений Больцмана. Метод решеточных уравнений Больцмана основан на решении кинетического уравнения для ансамбля псевдочастиц. Возможен только 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 [24]. Для одномерного случая используют модель D1Q3 с тремя векторами скорости $|\mathbf{c}_k| = 0, h/\Delta t$, а для двумерного случая — модель D2Q9 с девятью векторами скорости $|\mathbf{c}_k| = 0, h/\Delta t, \sqrt{2}h/\Delta t$. В трехмерном случае обычно используют модель D3Q19 с 19 векторами скорости $|\mathbf{c}_k| = 0, h/\Delta t, \sqrt{2}h/\Delta t$.

В качестве основных переменных используются одночастичные функции распределения N_k , имеющие смысл плотности. Уравнения эволюции для N_k имеют вид

$$N_k(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = N_k(\mathbf{x}, t) + \Omega_k(N) + \Delta N_k, \quad k = 1, \dots, b, \quad (1)$$

где Ω_k — оператор столкновений, а ΔN_k — изменение функций распределения из-за действия объемных сил (внешних и внутренних).

Оператор столкновений обычно выбирается в виде релаксации к локально равновесному состоянию с одним (модель BGK, Bhatnagar–Gross–Krook model [24]) или с несколькими временами релаксации (модель MRT, Multi-Relaxation-Time model [25]). В первом случае оператор столкновений имеет вид

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

где $\tau = t_{\text{rel}}/\Delta t$ — безразмерное время релаксации. Равновесные функции распределения $N_k^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u})$ определяются следующей формулой, которая является разложением функции распределения Максвелла–Больцмана до членов второго порядка по массовой скорости вещества [26]:

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

Здесь коэффициенты w_k зависят от конкретной решетки [24]. Для одномерной модели D1Q3 весовые коэффициенты имеют вид $w_0 = 2/3$ и $w_{1-2} = 1/6$, для двумерной модели D2Q9 — $w_0 = 4/9$, $w_{1-4} = 1/9$ и $w_{5-8} = 1/36$ и для трехмерной модели D3Q19 — $w_0 = 1/3$, $w_{1-6} = 1/18$ и $w_{7-19} = 1/36$. Кинетическая температура псевдочастиц для перечисленных LBE-моделей задается равенством $\theta = (h/\Delta t)^2/3$, а кинематическая вязкость $\nu = \theta(\tau - 1/2)\Delta t$ определяется временем релаксации.

Изменение функций распределения в узле из-за действия объемных сил вычисляется по методу точной разности (Exact Difference Method, EDM) [27–29]

$$\Delta N_k(\mathbf{x}, t) = N_k^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}) - N_k^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}), \quad (3)$$

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

Плотность вещества ρ и скорость \mathbf{u} (гидродинамические переменные) вычисляются в виде

$$\rho = \sum_{k=0}^b N_k, \quad \rho \mathbf{u} = \sum_{k=1}^b \mathbf{c}_k N_k. \quad (4)$$

В случае действия объемных сил для вычисления физической скорости \mathbf{u}^* следует использовать выражение, определенное на половине шага по времени [30]:

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

Обоснованием метода решеточных уравнений Больцмана принято считать тот факт, что при разложении уравнений эволюции по методу Чепмена–Энскога [3] во втором порядке по малому числу Кнудсена выводятся уравнения неразрывности и Навье–Стокса.

2. Фазовые переходы. Чтобы во флюиде возникли фазовые переходы, необходимо в методе LBE смоделировать притягивающую часть потенциала “межмолекулярного” взаимодействия. Поэтому в работе [5] были введены силы притяжения, действующие на вещество в узле со стороны соседних узлов. Позже

было предложено записать полную силу \mathbf{F} , действующую на вещество в узле, как градиент псевдопотенциала U , определяемого через уравнение состояния вещества [6, 19]

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

В результате в методе LBE вместо контактной границы моделируется тонкий переходной слой жидкость–пар, в котором плотность изменяется плавно на размерах нескольких узлов решетки (метод сквозного счета границ раздела фаз). При этом на границах раздела фаз жидкость–пар появляется поверхностное натяжение.

В работе [31] было предложено ввести функцию $\Phi = \sqrt{-U}$, при этом выражение для силы (6) можно переписать в полностью эквивалентном виде

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

где A — свободный параметр, позволяющий добиться точного описания плотностей фаз на кривой фазового равновесия. Конечно-разностная формула для уравнения (7), обеспечивающая достаточную изотропность для моделей D1Q3, D2Q9 и D3Q19 [7, 31, 32], записанная в векторной форме, имеет вид

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

где $G_k > 0$ — коэффициенты, которые различны для основных и диагональных направлений решетки. Для основных направлений решетки коэффициенты $G_k = 1$. Для диагональных направлений значения коэффициентов, обеспечивающих изотропность пространства, для двумерной модели D2Q9 задаются равенствами $G_{5-8} = 1/4$, а для 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 настоящей работе использовалось уравнение состояния Ван-дер-Ваальса

$$\tilde{p} = \frac{8\tilde{\rho}\tilde{T}}{3 - \tilde{\rho}} - 3\tilde{\rho}^2.$$

Здесь и далее будут использованы приведенные переменные $\tilde{p} = p/p_{кр}$, $\tilde{\rho} = \rho/\rho_{кр}$ и $\tilde{T} = T/T_{кр}$, где $p_{кр}$, $\rho_{кр}$ и $T_{кр}$ — значения давления, плотности и температуры в критической точке. Для уравнения состояния Ван-дер-Ваальса аппроксимация (8) при значении свободного параметра $A = -0.152$ дает отклонение кривой сосуществования фаз, полученной в расчетах по методу LBE, от теоретической меньше чем 0.2% в диапазоне температур вниз от критической $\tilde{T} = 1$ и до $\tilde{T} = 0.4$ [31]. Использование более сложных уравнений состояния, в том числе и для реальных веществ, рассмотрено в работах [32, 33].

В работе [29] показано, что устойчивость метода LBE с уравнением состояния в виде $p(\rho, T)$ определяется критерием

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T \leq \left(\frac{h}{\Delta t} \right)^2 + \theta.$$

3. Теплоперенос. Уравнение для плотности внутренней энергии E с учетом работы сил давления и теплопроводности, но без учета тепловыделения за счет вязкого трения имеет форму

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{E}\mathbf{u}) = \frac{p}{\rho} \frac{d\rho}{dt} + \nabla(\lambda\nabla T), \tag{9}$$

где $\lambda = \rho c_V \chi$ — коэффициент теплопроводности. Слагаемые в правой части уравнения (9) можно учесть с помощью конечных разностей. При этом работу сил давления удобнее записать через дивергенцию скорости с использованием уравнения неразрывности:

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

Наиболее сложным является расчет левой части уравнения (9), т.е. конвективного переноса внутренней энергии вместе с потоком вещества, скорость которого \mathbf{u}^* вычисляется по формуле (5).

В работах [16–18] это было сделано с помощью расширения набора возможных векторов скорости \mathbf{c}_k и увеличения порядка разложения равновесных функций распределения (использовались слагаемые до четвертого порядка по \mathbf{u}). Недостатками этого подхода являются достаточно узкий диапазон моделируемых температур, а также кратное увеличение количества используемых массивов данных.

В работе [19] уравнение (9) решалось с помощью метода конечных разностей с использованием плотности и скорости вещества, полученных из метода LBE. 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 затрудняет моделирование.

В третьем способе моделирования конвективного переноса энергии в методе LBE было предложено использовать метод пассивного скаляра (дополнительный комплект функций распределения LBE) [20], который имеет гораздо меньшую схемную диффузию по сравнению с конечно-разностными методами. Этот метод был реализован ранее только для течений жидкости почти постоянной плотности и, соответственно, теплоемкости, когда в качестве ПС можно использовать температуру T . Однако при фазовых переходах жидкость–пар изменения плотности не малы, и необходимо рассматривать перенос не температуры, а внутренней энергии E .

При использовании метода пассивного скаляра для плотности внутренней энергии $E = \rho c_V T$ (пассивный скаляр $E = \sum_{k=0}^b g_k$) уравнения для эволюции функций распределения $g_k(\mathbf{x}, t)$ можно записать в виде, аналогичном уравнению (1):

$$g_k(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = g_k(\mathbf{x}, t) + \frac{g_k^{\text{eq}}(E, \mathbf{u}) - g_k(\mathbf{x}, t)}{\tau_E} + \Delta g_k(\mathbf{x}, t).$$

Здесь $\Delta g_k = \Delta g_k^{(1)} + \Delta g_k^{(2)}$ — полное изменение функций распределения, а τ_E — безразмерное время релаксации функций распределения энергии. Равновесные функции распределения $g_k^{\text{eq}}(E, \mathbf{u})$ имеют вид, аналогичный уравнению (2).

Изменение энергии за счет работы сил давления и теплопроводности вычисляется в обычном конечно-разностном виде. Например, для одномерного случая имеем

$$\frac{E_i^{n+1} - E_i^n}{\Delta t} = -P_i^n \frac{(u^*)_{i+1}^n - (u^*)_{i-1}^n}{2h} + \frac{(\lambda_{i+1}^n + \lambda_i^n)T_{i+1}^n - (\lambda_{i+1}^n + 2\lambda_i^n + \lambda_{i-1}^n)T_i^n + (\lambda_i^n + \lambda_{i-1}^n)T_{i-1}^n}{2h^2}. \quad (10)$$

Соответствующие изменения функций распределения $\Delta g_k^{(1)}$ в методе LBE рассчитываются пропорционально изменению внутренней энергии в узлах решетки согласно уравнениям

$$\Delta g_k^{(1)}(\mathbf{x}, t) = g_k(\mathbf{x}, t) \frac{\Delta E_i}{E_i^n}.$$

Основная проблема заключается в том, что на границах раздела фаз есть скачок теплоемкости. Из-за 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 (давление зависит только от плотности), при этом нет обратной связи по температуре и не возникают волны давления и плотности. Для демонстрации паразитной диффузии энергии в наглядном виде в качестве такого уравнения состояния использовалось уравнение состояния типа Ван-дер-Ваальса с константой \tilde{T}_0 вместо температуры среды:

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

На рис. 1 показана паразитная диффузия энергии E_* на границах раздела фаз для покоящейся капли жидкости, находящейся в равновесии с насыщенным паром, при этом равномерное температурное распределение нарушается. Для наглядности в этом тесте выключены работа сил давления и теплопроводность.

В настоящей работе впервые удалось применить метод ПС для описания переноса энергии. Идея метода заключается в том, что вводятся специальные “псевдосилы” для скаляра энергии, удерживающие энергию от разлета на границах раздела фаз. Реализован вариант метода для случая, когда удельная теплоемкость флюида c_V постоянна, а плотность внутренней энергии при заданной температуре пропорциональна плотности флюида. Для учета действия “псевдосил” в уравнениях эволюции функций распределения $g_k(\mathbf{x}, t)$, описывающих энергию, тоже используется метод точной разности (EDM), аналогичный уравнению (3):

$$\Delta g_k^{(2)}(\mathbf{x}, t) = g_k^{\text{eq}}(E, \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}) - g_k^{\text{eq}}(E, \mathbf{u}).$$

Здесь \mathbf{u} — скорость вещества, определяемая по основному комплексу функций распределения LBE (4).

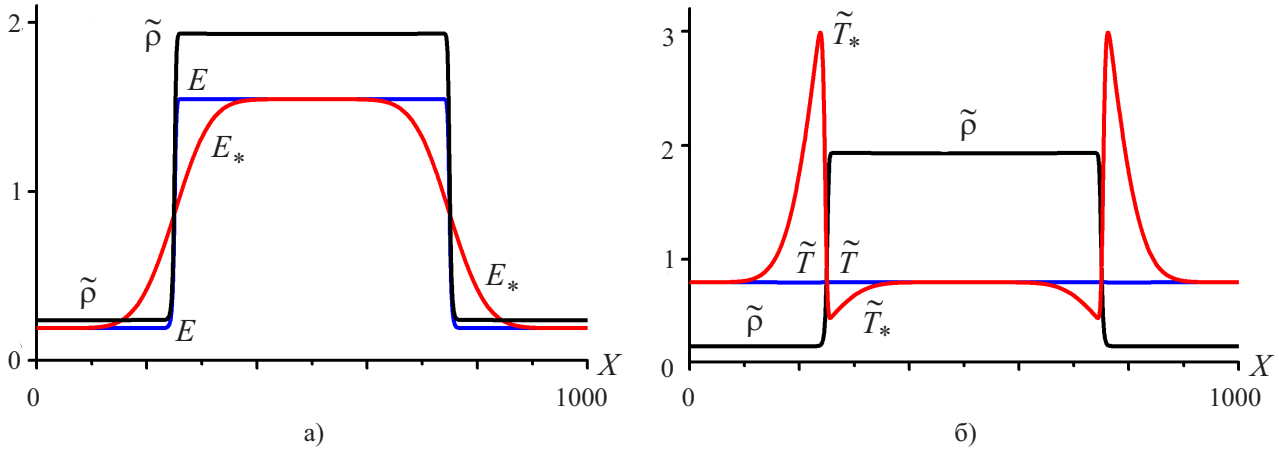


Рис. 1. Одномерная стационарная капля в насыщенном паре. Паразитная диффузия (разлет) энергии (ПС) на границах раздела фаз без использования “псевдосил” E_*

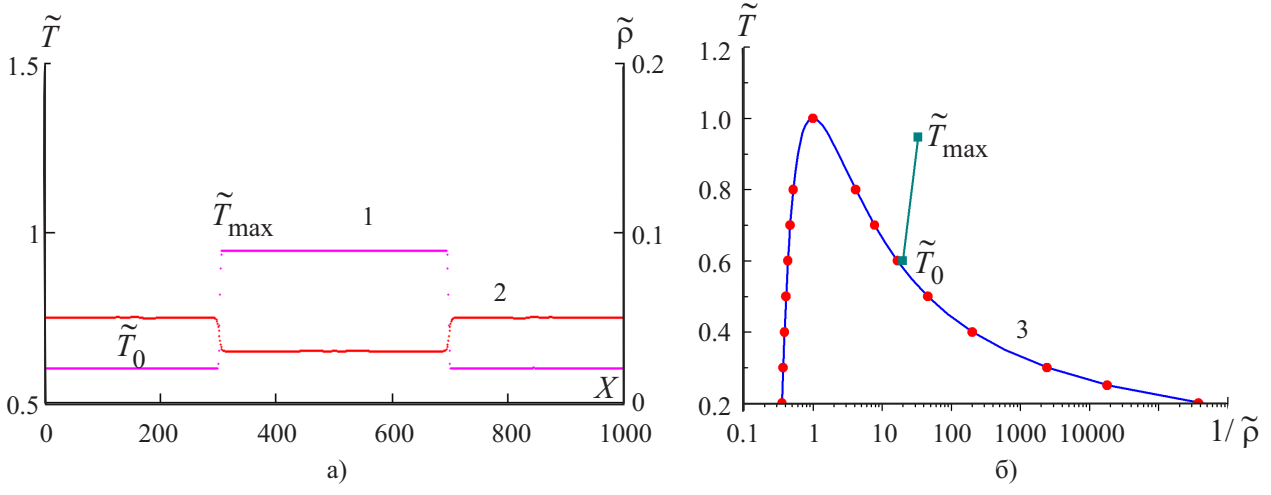


Рис. 2. Начальное состояние газа (а), кривая сосуществования фаз для уравнения состояния Ван-дер-Ваальса (б). Кривые 1 и 2 — начальные распределения температуры и плотности соответственно, кривая 3 — теоретическая кривая сосуществования фаз (правило Максвелла), точки — результаты моделирования методом LBE; $\tilde{T}_0 = 0.6$; $\tilde{\rho}_0 = 0.05$

На рис. 2 представлено начальное состояние газа для тестов по диффузии и галилеевской инвариантности. Распределения температуры и плотности в покоящемся газе (а-в) и в движущемся со скоростью $u = 0.1h/\Delta t$ (г-е) показаны на рис. 3. Видно, что выполнена галилеевская инвариантность. Коэффициент схемной диффузии энергии равен $D_E = \theta(\tau_E - 1/2)\Delta t = 0.001h^2/\Delta t$ при $\tau_E = 0.503$.

На рис. 4 показаны распределения температуры и плотности в покоящемся газе при разных коэффициентах температуропроводности χ в соответствующие моменты времени. Видно, что при этом выполняется условие подобия $l \sim \sqrt{\chi t}$.

Поскольку разностная схема (10) является явной, то устойчивость в одномерном случае сохраняется до значений $\chi\Delta t/h^2 < 0.5$. На рис. 5 показаны результаты расчетов при скорости течения $u = 0.1$ и коэффициенте температуропроводности $\chi = 0.49h^2/\Delta t$. После 1 000 000 шагов по времени температура в расчетной области полностью выравнялась (рис. 5б).

В качестве теста для работы сил давления рассматривалась задача о спинопальной декомпозиции (распад первоначально однородного флюида, состояние которого находится под спинопальной) на двухфазную систему жидкость–пар. На рис. 6 показаны результаты расчетов, когда работа сил давления не учитывалась (рис. 6а), и при учете работы сил давления (рис. 6б) в виде

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

При этом теплопроводность λ полагалась равной нулю, и оставалась только небольшая схемная диффузия

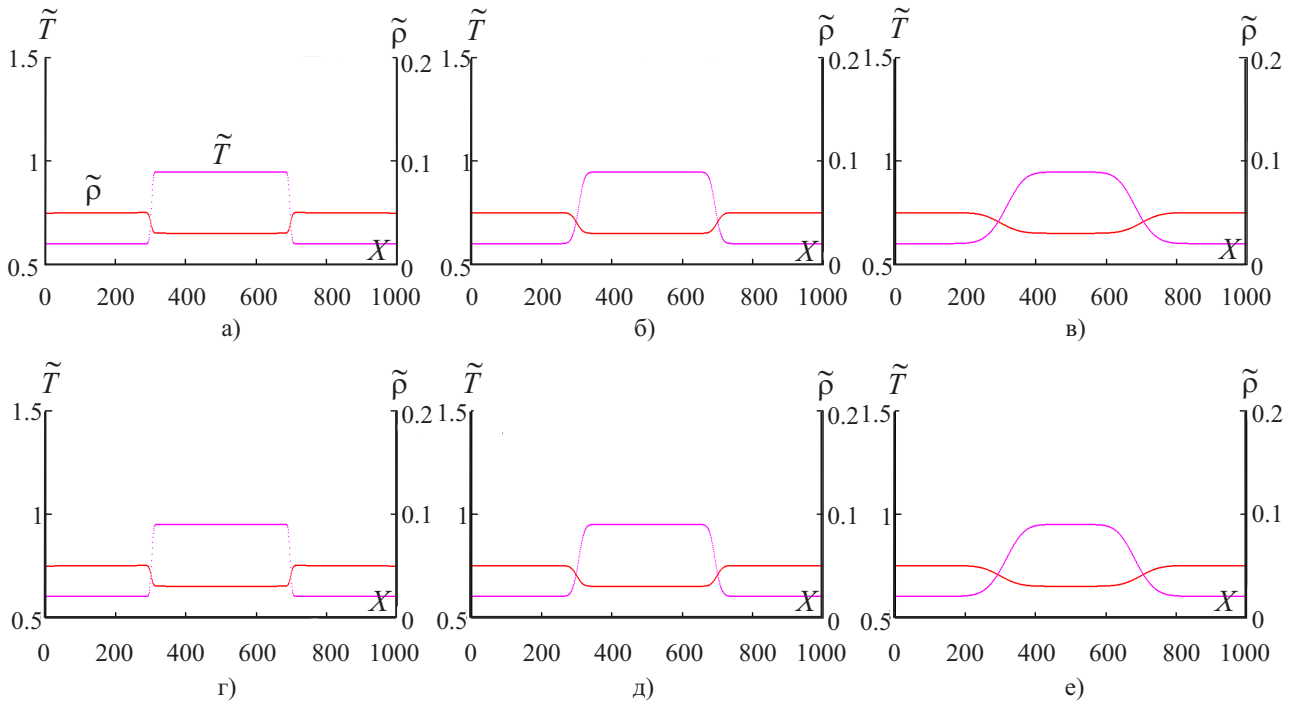


Рис. 3. Схемная диффузия энергии. Скорость течения газа $u = 0$ (а, б, в), 0.1 (г, д, е) в единицах $h/\Delta t$; $t = 10000$ (а, г), 100000 (б, д), 1000000 (в, е)

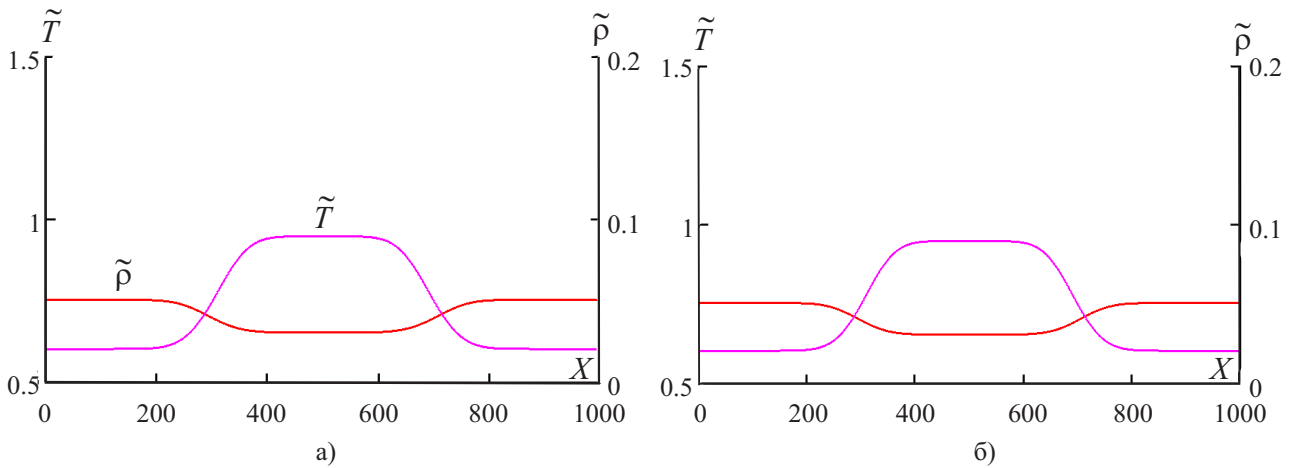


Рис. 4. Коэффициент температуропроводности $\chi = 0.01h^2/\Delta t$ (а), $\chi = 0.1h^2/\Delta t$ (б); $t = 100000$ (а), 10000 (б)

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, насколько температура пара меньше начальной:

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

Видно, что результаты моделирования дают близкое значение изменения температуры пара (рис. 6б).

4. Скрытая теплота фазового перехода. Известно, что скрытая теплота фазового перехода должна учитываться в условиях на границе раздела фаз. Соответствующее граничное условие имеет вид

$$\lambda_{\text{ж}} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=\xi-0} - \lambda_{\text{пар}} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=\xi+0} = \rho_{\text{ж}}(T)Q(T) \frac{d\xi}{dt},$$

где ξ — координата плоской границы раздела фаз жидкость–пар, $\rho_{\text{ж}}(T)$ — плотность жидкости на кривой сосуществования фаз (рис. 7б). Скрытая теплота фазового перехода $Q(T)$ уменьшается с ростом темпе-

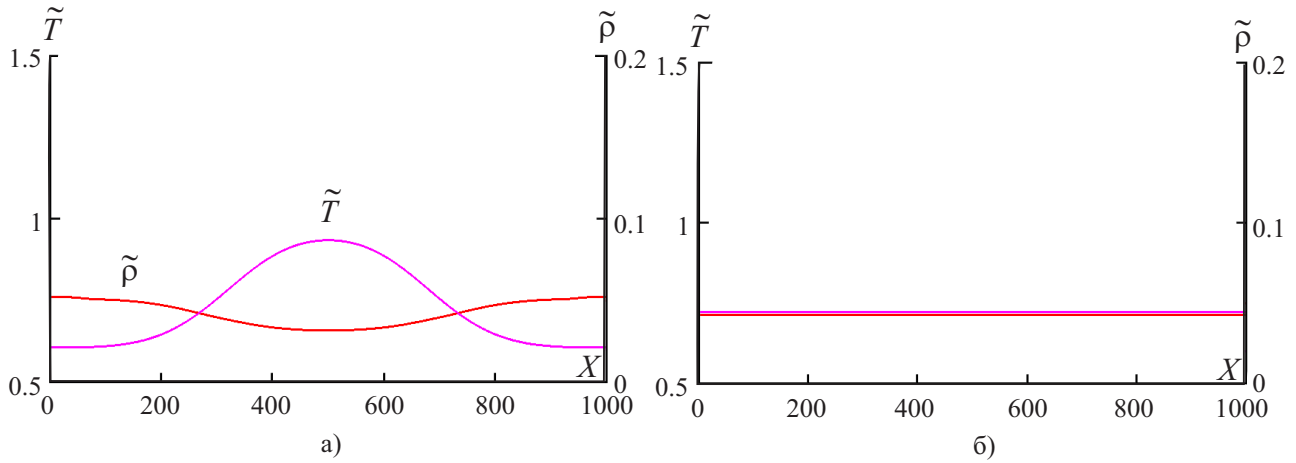


Рис. 5. Распределения температуры и плотности в течении со скоростью $u = 0.1$; температуропроводность $\chi = 0.49h^2/\Delta t$; $t = 10000$ (а), 1000000 (б)

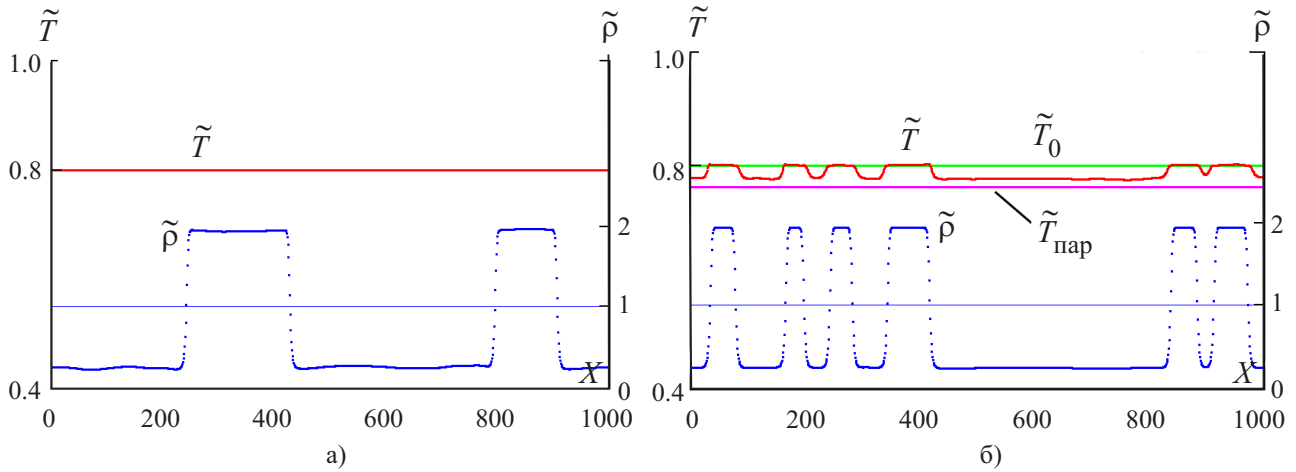


Рис. 6. Распределение температуры и плотности флюида после спиновального распада на жидкость и пар: а) работа сил давления не учитывается, б) с учетом работы сил давления. $\tilde{T}_0 = 0.8$; $\tilde{\rho}_0 = 0.7$; $t = 50000$

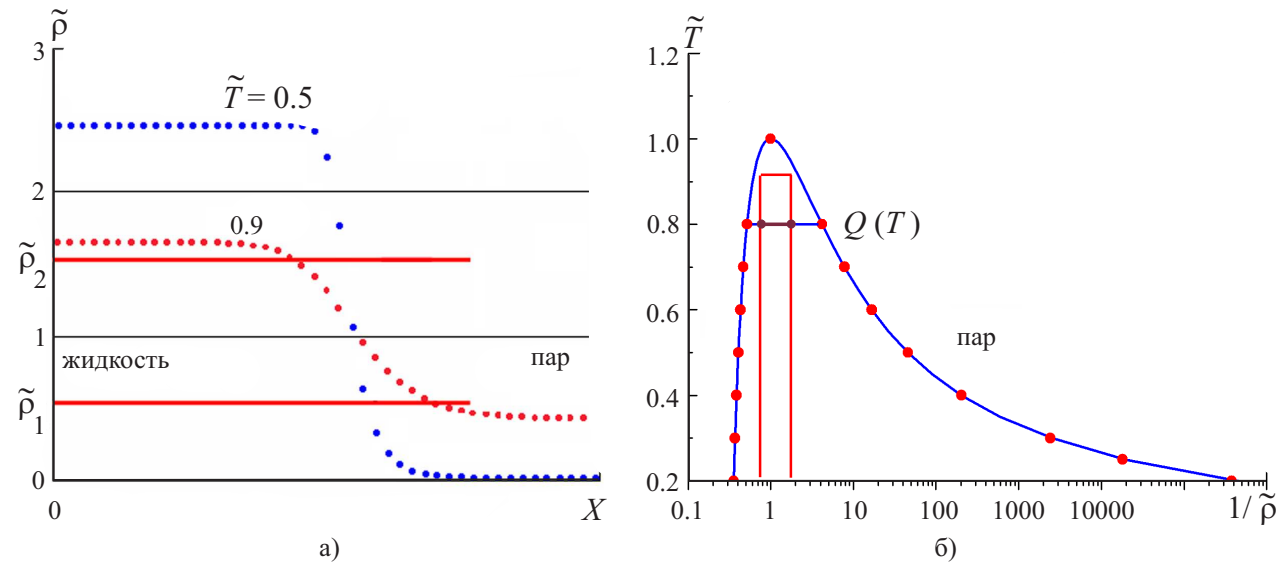


Рис. 7. Схема учета теплоты фазового перехода

ратуры и обращается в нуль при критической температуре $T = T_{кр}$. Сложность рассмотрения границ

заключается в том, что во многих задачах возникают новые границы, исчезают старые и меняется их топология. Достоинство метода LBE состоит в том, что он является методом сквозного счета границ раздела фаз жидкость–пар. При этом границы раздела фаз в методе LBE представляют собой некоторые переходные слои, в которых плотность плавно изменяется от плотности жидкости до плотности пара в соответствии с кривой сосуществования фаз. Во времени плотность порции вещества при фазовом переходе тоже изменяется постепенно. Нами предложено учитывать скрытую теплоту фазового перехода в методе LBE следующим образом. Если не ставить задачу точно описать внутреннюю структуру переходного слоя (рис. 7а), 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 в диапазоне $\rho_1 > \rho > \rho_2$ (рис. 7б) согласно уравнению

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

В качестве значений ρ_1 и ρ_2 при каждой температуре могут использоваться значения плотности пара $\rho_{\text{п}}$ и жидкости $\rho_{\text{ж}}$ соответственно.

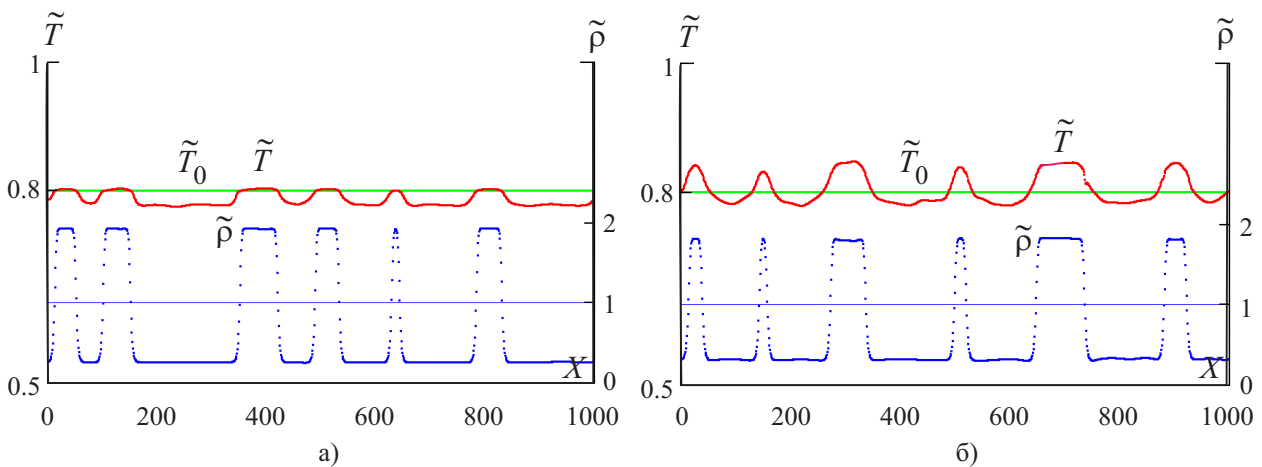


Рис. 8. Распределения температуры и плотности флюида после спинопального распада: а) без учета, б) с учетом теплоты фазового перехода; $\tilde{T}_0 = 0.8$; $\tilde{\rho}_0 = 0.7$; $t = 50000$

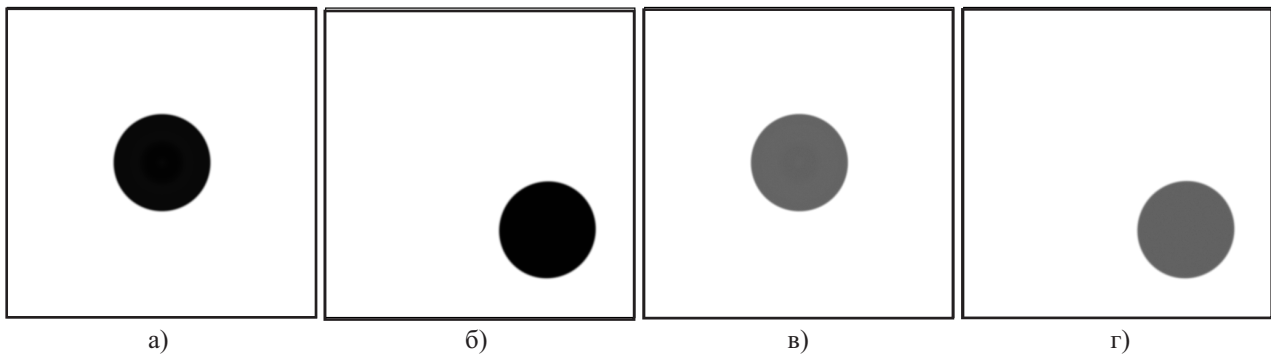


Рис. 9. Двумерная капля жидкости радиусом $R = 160$ в насыщенном паре; распределение плотности (а, б) и распределение внутренней энергии (в, г); $u_{0x} = 0.1h/\Delta t$, $u_{0y} = -0.1h/\Delta t$.
Сетка 1000×1000 ; $t = 0$ (а, в), 62000 (б, г)

На рис. 8 показаны результаты моделирования без учета (рис. 8а) и с учетом (рис. 8б) теплоты фазового перехода. Во втором случае температура жидкой фазы заметно превышает начальную, так как при конденсации пара выделяется скрытая теплота фазового перехода.

5. Двумерные тесты. Проведено моделирование двумерного течения (по модели D2Q9), состоящего из круглой капли, находящейся в равновесии с насыщенным паром. Скорость течения направлена по диагонали расчетной области (рис. 9). 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

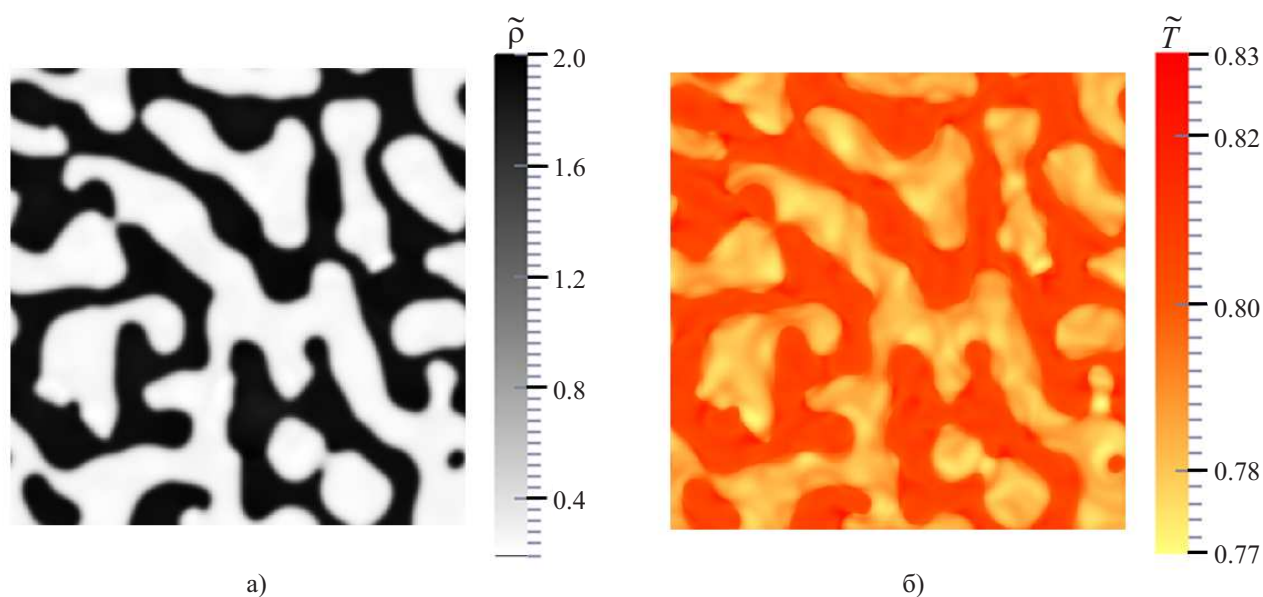


Рис. 10. Спинодальная декомпозиция. Распределение плотности (а) и распределение температуры (б); $\tilde{T}_0 = 0.8$; $\tilde{\rho}_0 = 1$; $\tilde{\rho}_j \tilde{Q} = 0.02$. Сетка 500×500 ; $t = 2630$

27 диаметрам капли. Наблюдается изотропность результатов расчетов, т.е. круглая форма капли, при этом паразитной диффузии внутренней энергии практически нет. Расчеты распараллеливались на четырех ядрах процессора.

На рис. 10 показаны результаты двумерного моделирования спинодальной декомпозиции флюида ($\tilde{\rho}_0 = 1$) с начальной температурой $\tilde{T}_0 = 0.8$ с учетом работы сил давления и скрытой теплоты фазового перехода. Видно, что температура пара опускается до $\tilde{T}_0 \approx 0.77$, что меньше начальной из-за расширения, а температура жидкости достигает $\tilde{T}_0 \approx 0.83$, что больше начальной, из-за выделения теплоты фазового перехода. При дальнейшей эволюции системы температура выравнивается за счет теплопроводности.

6. Заключение. Впервые удалось применить метод дополнительного компонента LBE для уравнения переноса энергии для случая течений с фазовыми переходами. В алгоритме учитывается теплопроводность, работа сил давления и скрытая теплота фазового перехода. 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 и устойчивость метода.

Метод LBE с учетом тепломассопереноса применим для моделирования широкого круга течений с фазовыми переходами и хорошо распараллеливается по технологии CUDA на многопроцессорных графических ускорителях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *McNamara G.R., Zanetti G.* Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata // *Phys. Rev. Lett.* 1988. **61**, N 20. 2332–2335.
2. *Higuera F.J., Jiménez J.* Boltzmann approach to lattice gas simulations // *Europhys. Lett.* 1989. **9**, N 7. 663–668.
3. *Chen S., Doolen G.D.* Lattice Boltzmann method for fluid flow // *Annu. Rev. Fluid Mech.* 1998. **30**. 329–364.
4. *Aidun C.K., Clausen J.R.* Lattice-Boltzmann method for complex flows // *Annu. Rev. Fluid Mech.* 2010. **42**. 439–472.
5. *Shan X., Chen H.* Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components // *Phys. Rev. E.* 1993. **47**, N 3. 1815–1819.
6. *Qian Y.-H., Chen S.* Finite size effect in lattice-BGK models // *Int. J. Mod. Phys. C.* 1997. **8**, N 4. 763–771.
7. *Куперштох А.Л.* Трехмерное моделирование двухфазных систем типа жидкость–пар методом решеточных уравнений Больцмана на GPU // *Вычислительные методы и программирование.* 2012. **13**. 130–138.
8. *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.
9. *Бижулов Д.А., Сенин Д.С., Демин Д.С., Дмитриев А.В., Грачев Н.Е.* Реализация метода решеточных уравнений Больцмана для расчетов на GPU-кластере // *Вычислительные методы и программирование.* 2012. **13**. 13–19.

10. Бижулов Д.А., Сенин Д.С. Реализация метода решеточных уравнений Больцмана без хранимых функций распределения для GPU // Вычислительные методы и программирование. 2013. **14**. 370–374.
11. 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. **67**, N 2. 340–349.
12. Li W., Wei X., Kaufman A. Implementing lattice Boltzmann computation on graphics hardware // Visual Computer. 2003. **19**, N 7/8. 444–456.
13. Tölke J., Krafczyk M. TeraFLOP computing on a desktop PC with GPUs for 3D CFD // Int. J. Comput. Fluid Dyn. 2008. **22**, N 7. 443–456.
14. Obrecht C., Kuznik F., Tourancheau B., Roux J.-J. A new approach to the lattice Boltzmann method for graphics processing units // Computers and Mathematics with Applications. 2011. **61**, N 12. 3628–3638.
15. Walsh S.D.C., Saar M.O. Developing extensible lattice-Boltzmann simulators for general-purpose graphics-processing units // Commun. Comput. Phys. 2013. **13**, N 3. 867–879.
16. Alexander F.J., Chen S., Sterling J.D. Lattice Boltzmann thermohydrodynamics // Phys. Rev. E. 1993. **47**, N 4. R2249–R2252.
17. Qian Y.-H. Simulating thermohydrodynamics with lattice BGK models // Journal of Scientific Computing. 1993. **8**, N 3. 231–242.
18. Chen Y., Ohashi H., Akiyama M. Thermal lattice Bhatnagar–Gross–Krook model without nonlinear deviations in macrodynamical equations // Phys. Rev. E. 1994. **50**, N 4. 2776–2783.
19. Zhang R., Chen H. Lattice Boltzmann method for simulations of liquid–vapor thermal flows // Phys. Rev. E. 2003. **67**, N 6. 066711-1–066711-6.
20. Shan X. Simulation of Rayleigh–Bénard convection using a lattice Boltzmann method // Phys. Rev. E. 1997. **55**, N 3. 2780–2788.
21. He X., Chen S., Doolen G.D. A novel thermal model for the lattice Boltzmann method in incompressible limit // J. Comput. Phys. 1998. **146**, N 2. 282–300.
22. Guo Z., Zheng C., Shi B., Zhao T.S. Thermal lattice Boltzmann equation for low Mach number flows: decoupling model // Phys. Rev. E. 2007. **75**, N 3. 036704-1–036704-15.
23. Li Q., He Y.L., Wang Y., Tao W.Q. Coupled double-distribution-function lattice Boltzmann method for the compressible Navier–Stokes equations // Phys. Rev. E. 2007. **76**, N 5. 056705-1–056705-19.
24. Qian Y.-H., d’Humières D., Lallemand P. Lattice BGK models for Navier–Stokes equation // Europhys. Lett. 1992. **17**, N 6. 479–484.
25. Lallemand P., Luo L.-S. Theory of the lattice Boltzmann method: dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance and stability // Phys. Rev. E. 2000. **61**, N 6. 6546–6562.
26. Koelman J.M.V.A. A simple lattice Boltzmann scheme for Navier–Stokes fluid flow // Europhys. Lett. 1991. **15**, N 6. 603–607.
27. Kupershtokh A.L. New method of incorporating a body force term into the lattice Boltzmann equation // Proc. 5th International EHD Workshop. Poitiers: University of Poitiers, 2004. 241–246.
28. Куперштох А.Л. Учет действия объемных сил в решеточных уравнениях Больцмана // Вестник НГУ: Серия “Математика, механика и информатика”. 2004. **4**, № 2. 75–96.
29. Kupershtokh A.L. Criterion of numerical instability of liquid state in LBE simulations // Computers and Mathematics with Applications. 2010. **59**, N 7. 2236–2245.
30. Ginzburg I., Adler P.M. Boundary flow condition analysis for the three-dimensional lattice Boltzmann model // J. Phys. II France. 1994. **4**, N 2. 191–214.
31. Куперштох А.Л. Моделирование течений с границами раздела фаз жидкость–пар методом решеточных уравнений Больцмана // Вестник НГУ: Серия “Математика, механика и информатика”. 2005. **5**, № 3. 29–42.
32. Kupershtokh A.L., Medvedev D.A., Karpov D.I. On equations of state in a lattice Boltzmann method // Computers and Mathematics with Applications. 2009. **58**, N 5. 965–974.
33. 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. **61**, N 12. 3537–3548.

Поступила в редакцию
15.04.2014

Modeling of Thermal Flows in a Medium with Phase Transitions Using the Lattice Boltzmann Method

A. L. Kupershtokh¹, D. A. Medvedev², and I. I. Gribanov³

¹ Lavrentyev Institute of Hydrodynamics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences; Lavrentyev prospekt 15, Novosibirsk, 630090, Russia; Professor, Head of Laboratory, e-mail: skn@hydro.nsc.ru

² *Laurentyev Institute of Hydrodynamics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences; Laurentyev prospekt 15, Novosibirsk, 630090, Russia; Associate Professor, e-mail: dmedv@hydro.nsc.ru*

³ *National Research Novosibirsk State University, Faculty of Mechanics and Mathematics; ulitsa Pirogova 2, Novosibirsk, 630090, Russia; Graduate Student, e-mail: igor1215@gmail.com*

Received April 15, 2014

Abstract: A new method is proposed for the computation of heat and mass transfer for the modeling of flow of a medium with liquid–vapor phase transitions using the lattice Boltzmann equations (LBE). When the phase boundaries are present, it is necessary to consider the equation of energy transfer. A second set of LBE distribution functions is introduced in the form of a passive scalar that describes the transfer of internal energy. In order to eliminate the spurious diffusion of energy at the interface with a high density ratio, special pseudo-forces are introduced to prevent the passive scalar from expansion. The thermal conductivity and the pressure work are taken into account in the energy equation. The latent heat of evaporation and condensation is accounted in the energy equation for the inner region of a thin liquid–vapor transition layer. This allows one to avoid tracking the interfaces. Several simple tests were carried out to demonstrate all the aspects of the processes considered. It is shown that the Galilean invariance and the scaling of thermal conduction processes hold. The proposed method has a low scheme diffusion for the internal energy and can be applied for modeling a wide range of flows of two-phase media with the mass and heat transfer.

Keywords: lattice Boltzmann method, phase transitions, dynamics of multiphase fluids, heat and mass transfer, mesoscopic methods, computer simulations.

References

1. G. R. McNamara and G. Zanetti, “Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice-Gas Automata,” *Phys. Rev. Lett.* **61** (20), 2332–2335 (1988).
2. F. J. Higuera and J. Jiménez, “Boltzmann Approach to Lattice Gas Simulations,” *Europhys. Lett.* **9** (7), 663–668 (1989).
3. S. Chen and G. D. Doolen, “Lattice Boltzmann Method for Fluid Flow,” *Annu. Rev. Fluid Mech.* **30**, 329–364 (1998).
4. C. K. Aidun and J. R. Clausen, “Lattice-Boltzmann Method for Complex Flows,” *Annu. Rev. Fluid Mech.* **42**, 439–472 (2010).
5. X. Shan and H. Chen, “Lattice Boltzmann Model for Simulating Flows with Multiple Phases and Components,” *Phys. Rev. E* **47** (3), 1815–1819 (1993).
6. Y.-H. Qian and S. Chen, “Finite Size Effect in Lattice-BGK Models,” *Int. J. Mod. Phys. C* **8** (4), 763–771 (1997).
7. A. L. Kupershtokh, “Three-Dimensional Simulations of Two-Phase Liquid–Vapor Systems on GPU Using the Lattice Boltzmann Method,” *Vychisl. Metody Programm.* **13**, 130–138 (2012).
8. A. L. Kupershtokh, “Three-Dimensional LBE Simulations on Hybrid GPU-Clusters of the Decay of a Binary Mixture of Liquid Dielectrics with a Solute Gas to a System of Gas–Vapor Channels,” *Vychisl. Metody Programm.* **13**, 384–390 (2012).
9. D. A. Bikulov, D. S. Senin, D. S. Demin, et al., “Implementation of the Lattice Boltzmann Method on GPU Clusters,” *Vychisl. Metody Programm.* **13**, 13–19 (2012).
10. D. A. Bikulov and D. S. Senin, “Implementation of the Lattice Boltzmann Method without Stored Distribution Functions on GPU,” *Vychisl. Metody Programm.* **13**, 370–374 (2013).
11. A. L. Kupershtokh, “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,” *Comput. Math. Appl.* **67** (2), 340–349 (2014).
12. W. Li, X. Wei, and A. Kaufman, “Implementing Lattice Boltzmann Computation on Graphics Hardware,” *Vis. Comput.* **19** (7/8), 444–456 (2003).
13. J. Tölke and M. Krafczyk, “TeraFLOP Computing on a Desktop PC with GPUs for 3D CFD,” *Int. J. Comput. Fluid Dyn.* **22** (7), 443–456 (2008).
14. C. Obrecht, F. Kuznik, B. Tourancheau, and J.-J. Roux, “A New Approach to the Lattice Boltzmann Method for Graphics Processing Units,” *Comput. Math. Appl.* **61** (12), 3628–3638 (2011).
15. S. D. C. Walsh and M. O. Saar, “Developing Extensible Lattice-Boltzmann Simulators for General-Purpose Graphics-Processing Units,” *Commun. Comput. Phys.* **13** (3), 867–879 (2013).

16. F. J. Alexander, S. Chen, and J. D. Sterling, "Lattice Boltzmann Thermohydrodynamics," *Phys. Rev. E* **47** (4), R2249–R2252 (1993).
17. Y.-H. Qian, "Simulating Thermohydrodynamics with Lattice BGK Models," *J. Sci. Comput.* **8** (3), 231–242 (1993).
18. Y. Chen, H. Ohashi, and M. Akiyama, "Thermal Lattice Bhatnagar–Gross–Krook Model without Nonlinear Deviations in Macrodynamical Equations," *Phys. Rev. E* **50** (4), 2776–2783 (1994).
19. R. Zhang and H. Chen, "Lattice Boltzmann Method for Simulations of Liquid–Vapor Thermal Flows," *Phys. Rev. E* **67** (6), 066711-1–066711-6 (2003).
20. X. Shan, "Simulation of Rayleigh–Bénard Convection Using a Lattice Boltzmann Method," *Phys. Rev. E* **55** (3), 2780–2788 (1997).
21. X. He, S. Chen, and G. D. Doolen, "A Novel Thermal Model for the Lattice Boltzmann Method in Incompressible Limit," *J. Comput. Phys.* **146** (2), 282–300 (1998).
22. Z. Guo, C. Zheng, B. Shi, and T. S. Zhao, "Thermal Lattice Boltzmann Equation for Low Mach Number Flows: Decoupling Model," *Phys. Rev. E* **75** (3), 036704-1–036704-15 (2007).
23. Q. Li, Y. L. He, Y. Wang, and W. Q. Tao, "Coupled Double-Distribution-Function Lattice Boltzmann Method for the Compressible Navier–Stokes Equations," *Phys. Rev. E* **76** (5), 056705-1–056705-19 (2007).
24. Y.-H. Qian, D. d’Humières, and P. Lallemand, "Lattice BGK Models for Navier–Stokes Equation," *Europhys. Lett.* **17** (6), 479–484 (1992).
25. P. Lallemand and L.-S. Luo, "Theory of the Lattice Boltzmann Method: Dispersion, Dissipation, Isotropy, Galilean Invariance and Stability," *Phys. Rev. E* **61** (6), 6546–6562 (2000).
26. J. M. V. A. Koelman, "A Simple Lattice Boltzmann Scheme for Navier–Stokes Fluid Flow," *Europhys. Lett.* **15** (6), 603–607 (1991).
27. A. L. Kupershtokh, "New Method of Incorporating a Body Force Term into the Lattice Boltzmann Equation," in *Proc. 5th Int. EHD Workshop, Poitiers, France, August 30–31, 2004* (Univ. of Poitiers, Poitiers, 2004), pp. 241–246.
28. A. L. Kupershtokh, "Incorporating a Body Force Term into the Lattice Boltzmann Equation," *Vestn. Novosib. Gos. Univ., Ser.: Mat., Mekh., Inform.* **4** (2), 75–96 (2004).
29. A. L. Kupershtokh, "Criterion of Numerical Instability of Liquid State in LBE Simulations," *Comput. Math. Appl.* **59** (7), 2236–2245 (2010).
30. I. Ginzburg and P. M. Adler, "Boundary Flow Condition Analysis for the Three-Dimensional Lattice Boltzmann Model," *J. Phys. II France* **4** (2), 191–214 (1994).
31. A. L. Kupershtokh, "Simulation of Flows with Liquid–Vapor Interfaces by the Lattice Boltzmann Method," *Vestn. Novosib. Gos. Univ., Ser.: Mat., Mekh., Inform.* **5** (3), 29–42 (2005).
32. A. L. Kupershtokh, D. A. Medvedev, and D. I. Karpov, "On Equations of State in a Lattice Boltzmann Method," *Comput. Math. Appl.* **58** (5), 965–974 (2009).
33. A. L. Kupershtokh, "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," *Comput. Math. Appl.* **61** (12), 3537–3548 (2011).