

基于相变过程的格子 Boltzmann 模型及应用

曾建邦, 李隆键*, 廖全, 崔文智, 陈清华, 潘良明

重庆大学动力工程学院, 重庆 400030

* 联系人, E-mail: longjian@cqu.edu.cn

2009-06-04 收稿, 2009-07-30 接受

国家自然科学基金(批准号: 50406012)、中国核动力研究设计院空泡物理和自然循环国家重点实验室基金(编号: 9140C710901090C71, 9140C7101020802)资助项目

摘要 基于 SC 模型提出了一种新的描述气液相变过程的格子 Boltzmann 模型. 通过对单组分相变过程的模拟, 验证了该模型的正确性. 通过对 vdW 流体的模拟以及与 Maxwell 构建原理的对比, 发现相对于 SC 和 Zhang 模型, 新模型能够得到与理论解相近的结果, 计算产生的最大伪速度介于 SC 和 Zhang 模型之间, 但扩大了温度的变化范围, 提高了模型的最大分离密度比, 使得新模型计算更加稳定, 适用范围更加广泛. 根据工程热力学中的对比态原理, 以工程中常用氨和水两种工质为例, 利用新模型分别模拟不同状态方程控制下的相变过程, 并与实验值进行了比较, 结果表明 P-R 状态方程更加适合描述氨和水等物质的相变过程, 特别地, P-R 状态方程模拟结果与氨的实验值更加接近, 结果具有重要工程意义.

关键词

格子 Boltzmann 方法
相变过程
Maxwell 构建
对比态原理

格子 Boltzmann 方法(LBM)是最近二十几年来发展起来的一种从介观层次模拟流体动力学的方法, 该方法具有微观粒子特性, 它可以方便地描述不同相之间的相互作用, 清晰地捕捉到两相界面. 因此, 在模拟复杂流动和传热问题上具有常规方法所没有的优势, 从而为研究多相及相变流系统提供了一种有效的途径^[1~3]. 自 1993 年 Shan 和 Chen^[4]建立第一个基于场均理论的伪势模型以来(SC 模型), 该模型在模拟气泡运动、相分离以及多孔介质中多相流动等方面已经取得巨大的成功^[5~13]. 但由于 SC 模型在处理有效密度时涉及到开根号, 因此对根号内的表达式值有严格为正数的要求, 这就大大限制了该模型的适用性. Yuan 等人^[14]通过调节 g 值的符号来保证有效密度具有真实意义. Zhang 等人^[15]在 2003 年建立的模型是改变 SC 模型中处理体积力的方式, 让体积力项直接参与格子演化方程的演化(Zhang 模型). 该模

型巧妙地避开了 SC 模型中有效密度中的根号内出现负号的问题, 但未对速度进行修正, 因而伪速度过大, 导致模型的稳定性差. 基于上述模型存在的问题, 本文改变 SC 模型中处理体积力的方式, 使其避开利用有效密度及其梯度来求体积力, 并对速度进行了修正, 而建立了一种新的描述气液相变过程的格子 Boltzmann 理论模型. 该模型在单组分相变过程的模拟中得到了验证. 为验证新模型的优越性, 利用其模拟 ven der Waals(vdW)流体, 发现模拟结果相对于 SC 模型的模拟结果更加接近 Maxwell 构建求得的理论解, 最大伪速度介于 SC 和 Zhang 模型之间, 但温度变化范围和最大分离密度比均较 SC 和 Zhang 模型大.

同时就我们所知, 多相格子 Boltzmann 模型到目前为止大多是基于理论研究, 具体结合实际物质相变过程的研究文献非常少, 为了进一步揭示新模型的工程应用性, 探索性地利用新模型模拟不同状态

英文版见: Zeng J B, Li L J, Liao Q, et al. Simulation of phase transition process using lattice Boltzmann method. Chinese Sci Bull, 2010, 55, doi: 10.1007/s11434-009-0734-x

方程控制下氨以及水的相变过程. 发现模拟氨以及水时, Peng-Robinson(P-R)状态方程更接近实验值, 且 P-R 状态方程更适合用来描述氨的相变过程. 本文所得结果具有重要的理论和工程意义, 理论上新模型发展了多相格子 Boltzmann 模型, 改进了模型的稳定性和适用性; 工程上通过对不同状态方程的评价, 得到了可以较为理想地描述实际氨和水这两种物质的状态方程——P-R 状态方程, 为进一步从介观尺度对工程实际问题中的相变过程的模拟奠定了重要的基础.

1 基本模型

1.1 SC 模型

单组分多相格子 Boltzmann 演化方程为^[4]

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -(f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)) / \tau, \quad (1)$$

式中 $i=0, 1, \dots, N$ 为每个格点不同的离散速度方向; $\mathbf{e}_i$ 为各个离散方向上的速度矢量; $\mathbf{x}$ 为位置矢量; Δt 为格子离散的时间步长; τ 为无量纲松弛时间; 若 $c = \Delta x / \Delta t = 1.0$, 则在 D2Q9 模型中平衡态分布函数为

$$f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = w_i \rho [1 + 3\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}^{\text{eq}} / c^2 + 4.5(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}^{\text{eq}})^2 / c^4 - 1.5(\mathbf{u}^{\text{eq}})^2 / c^2], \quad (2)$$

式中权重系数 $w_0 = 4/9$, $w_i = 1/9$, $i=1, \dots, 4$, $w_i = 1/36$, $i=5, \dots, 8$; c 为格子速度; Δx 为格子步长; 宏观密度为 $\rho = \sum_i f_i$; 宏观动量为 $\rho \mathbf{u} = \sum_i \mathbf{e}_i f_i$. 粒子间的相互作用力为^[14]

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = -c_0 \psi(\rho(\mathbf{x})) g \nabla \psi(\rho(\mathbf{x})), \quad (3)$$

式中 c_0 为常数, 与所选取的格子模型有关, 在 D2Q9 模型中 $c_0 = 6.0$; g 表征各相粒子相互间的作用强度; $\psi(\rho(\mathbf{x}))$ 为有效密度. 在该模型中是通过改变(2)式中的平衡态速度来反映粒子间相互作用力的影响, 因此平衡态速度为 $\mathbf{u}^{\text{eq}} = \mathbf{u} + \tau \mathbf{F} / \rho$, 流体的真实速度为 $\mathbf{U} = \mathbf{u} + \mathbf{F} / (2\rho)$.

如果粒子间的相互作用力满足(3)式, 通过利用 Chapman-Enskog 展开技术, 可得到流体的状态方程:

$$p = c_s^2 \rho + c_0 g [\psi(\rho(\mathbf{x}))]^2 / 2, \quad (4)$$

式中 c_s 为声速, $c_s = 1/\sqrt{3}$. 因此对于任何形式的状态方程均能找到其对应的有效密度^[14]:

$$\psi(\rho(\mathbf{x})) = \sqrt{2(p - c_s^2 \rho) / (c_0 g)}. \quad (5)$$

因此在模型求解的过程中需保证上式根号内严格为正值, 这样 $\psi(\rho(\mathbf{x}))$ 才具有真实意义.

1.2 Zhang 模型

将 LBM 模型推广到多相流中, 最关键的一步是如何将粒子间的相互作用力(体积力)引入格子模型中, Zhang 等人提出改变 SC 模型中处理体积力的形式, 直接将体积力项添加到格子演化方程式(1)的右边, 参与方程的演化. 忽略高阶项, 体积力项可以简化成^[16] $\delta F_i(\mathbf{x}, t) = w_i \mathbf{e}_i \mathbf{M}(\mathbf{x}, t) / T_0$, 式中 T_0 为常数, 与选取的模型有关, $\mathbf{M}(\mathbf{x}, t)$ 为局部动量, 而整个系统动量守恒, 因此有^[17]

$$\mathbf{M}(\mathbf{x}, t) = -\nabla U(\mathbf{x}, t) \doteq -\sum_i D \mathbf{e}_i U(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t) / (bc^2), \quad (6)$$

式中 $U(\mathbf{x}, t) = (p - c_s^2 \rho)(\mathbf{x}, t)$, $p(\mathbf{x}, t)$ 为任意形式的状态方程, D 为维数, 该模型避开了物理意义不明确的有效密度及其梯度. 但未对速度进行修正, 导致伪速度过大, 温度的取值范围小, 数值求解不稳定.

1.3 模型改进

为了克服上述模型存在的问题, 本文改变 SC 模型中利用有效密度及其梯度来求粒子间相互作用力(体积力)的形式, 并对速度进行了修正, 而提出了一种新的描述气液相变过程的单组分格子 Boltzmann 理论模型. 将(3)式改写成

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = -c_0 g \nabla \psi^2(\rho(\mathbf{x})) / 2. \quad (7)$$

结合(1), (2)和(7)式以及保证系统质量和动量守恒, 利用 Chapman-Enskog 展开技术, 忽略高阶项, 可获得 Navier-Stokes 方程^[18]:

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad \rho(\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\rho \nu \nabla \mathbf{u}), \quad (8)$$

式中压力 p 满足(4)式, 且 $\nabla p = \nabla(c_s^2 \rho) - \mathbf{F}(\mathbf{x})$; 因此体积力的形式可改写成

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = -\nabla(p - c_s^2 \rho) = -\nabla U(\mathbf{x}, t). \quad (9)$$

在 D2Q9 模型中, 对上式的离散见文献[14]. 平衡态速度和真实速度的求取方式与 SC 模型一致.

相比较上述两模型, 新模型做了如下改进: (1) 体积力只与状态方程有关, 避免了求解有效密度及

其梯度; (2) 对速度进行了修正, 扩大了温度变化范围, 提高了模型最大分离密度比。

2 模型的验证

2.1 单组分相变现象模拟

为验证模型的正确性, 在新模型中, 选取状态方程 $p = c_s^2 \rho + c_0 g[\rho_0(1 - \exp(-\rho/\rho_0))]^2/2$, ρ_0 为任意常数, 为方便计算, 取 $\rho_0 = 1.0$; 初始时刻计算区域平均密度 $\rho = 0.693$; 压力 p 对密度 ρ 求一阶和二阶导数, 并令其等于零, 可得到临界点(拐点)的数值: $\rho_c = \rho_0 \ln 2$, $g_c = -2/(9\rho_0)$. 令温度 $T = -1/g$, 则临界温度 $T_c = -1/g_c$. 采用 256×256 网格, 松弛时间 $\tau = 1.0$, 四周采用周期性边界条件, 给初始密度一个 1.0% 的小扰动. 图 1 给出了经过 20000 步迭代后最大和最小密度随 T/T_c 的变化曲线. 当 $T/T_c < 1.0$ 时, 密度出现分离, 表明了相变的发生; 反之当 $T/T_c > 1.0$ 时, 密度不分离, 可以认为临界点处在 $T/T_c = 1.0$ 附近. 因此可得到 $T = T_c = 4.5 = -1/g_c$, 这个数值与上述计算结果甚为吻合. 图 2 给出了 $T/T_c = 0.90$, 迭代时间 $t = 200, 600, 2000, 20000$ 时的密度分布图, 图中黑色部分是密度较低(气相)区域, 白色部分是密度较高(液相)区域. 从图中可以发现, 随着时间的推移气相区域明显增大, 液相区域减小, 但最终维持 $t = 20000$ 的形状不变. 这些结果与文献结果甚为吻合^[4,19,20].

2.2 模型对比

为验证新模型的优越性, 利用上述三个模型模拟 vdW 流体的相变过程. vdW 流体状态方程为

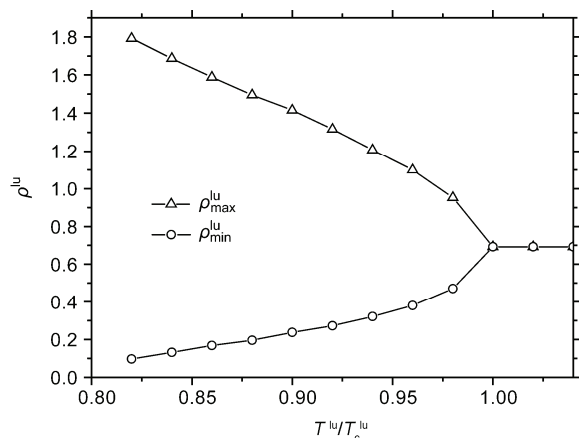


图 1 最大和最小密度随 T/T_c 值的变化曲线图

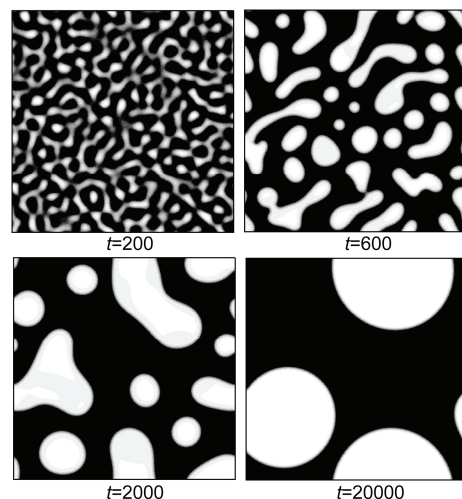


图 2 迭代 200, 600, 2000, 20000 步时的密度分布图

$$p^{\text{lu}} = \rho^{\text{lu}} R^{\text{lu}} T^{\text{lu}} / (1 - b^{\text{lu}} \rho^{\text{lu}}) - a^{\text{lu}} (\rho^{\text{lu}})^2, \quad (10)$$

式中 $R^{\text{lu}} = 1.0$, $a^{\text{lu}} = 9/49$, $b^{\text{lu}} = 2/21$ ^[21]; 上标“lu”表示格子单位; 通过对上式求一阶和二阶导数, 并令其等于零, 可获得临界参数与方程系数之间的关系为 $T_c^{\text{lu}} = 8a^{\text{lu}} / (27R^{\text{lu}}b^{\text{lu}})$, $p_c^{\text{lu}} = a^{\text{lu}} / (27(b^{\text{lu}})^2)$, $\rho_c^{\text{lu}} = 1 / (3b^{\text{lu}})$. τ 均取 1.0; 初始密度均取其临界密度; 为使方程演化, 均给初始密度一个 1.0% 的扰动.

伪速度的大小是评价一个多相格子 Boltzmann 模型优劣的重要标准之一, 这主要因为: (1) 格子 Boltzmann 模型在模拟不可压流时, 只有在 $|\mathbf{u}^{\text{lu}}|_{\text{max}} / c_s$ 趋于零时才有效, 这里的 $\mathbf{u}^{\text{lu}}$ 为流体速度, 如果伪速度 $|\mathbf{u}_s^{\text{lu}}|_{\text{max}}$ 过大, 则很难从真实的流体速度中区分出伪速度, 因而难以获得有意义的结果; (2) 伪速度过大会导致计算不稳定; (3) 如果将格子模型推广到多相热模型中, 计算温度场时需要用到速度场, 若伪速度过大, 会导致速度场不准确, 因此计算的温度场就不具任何意义. 图 3 给出了 3 个模型的最大伪速度 $|\mathbf{u}_s^{\text{lu}}|_{\text{max}}$ 随 $T^{\text{lu}}/T_c^{\text{lu}}$ 变化的对比曲线, 从图中可以发现, 3 个模型中的 $|\mathbf{u}_s^{\text{lu}}|_{\text{max}}$ 随着 $T^{\text{lu}}/T_c^{\text{lu}}$ 的增大都在减小; 在同一温度值下 SC 模型的 $|\mathbf{u}_s^{\text{lu}}|_{\text{max}}$ 最小, 新模型的 $|\mathbf{u}_s^{\text{lu}}|_{\text{max}}$ 介于 SC 模型和 Zhang 模型之间; 在可取的温度范围内 SC 模型的 $|\mathbf{u}_s^{\text{lu}}|_{\text{max}}$ 均小于 0.08, 新模型在 $T^{\text{lu}}/T_c^{\text{lu}} = 0.86$ 时, $|\mathbf{u}_s^{\text{lu}}|_{\text{max}} = 0.087$, 而 Zhang 模型在 $T^{\text{lu}}/T_c^{\text{lu}} = 0.91$ 时, $|\mathbf{u}_s^{\text{lu}}|_{\text{max}} = 0.0848$. 图 4 给出了 3 个模型模拟的饱和密度曲线与 Maxwell 构建求得的理论解的对比曲线. 从图中可以发现: (1) 新模型模拟的结果介于 SC 模型和 Zhang 模型之间, SC 模型模拟的

结果与理论解偏离得最远,尤其是当 $T^{\text{lu}}/T_c^{\text{lu}}$ 变小时;
(2) 新模型的温度取值范围最大,约为 $[0.83T_c, T_c]$,
而 Zhang 模型的温度取值范围最小,约为 $[0.88T_c, T_c]$;
(3) 在可取的温度范围内,新模型的密度比最大,约为 8.195,
而 Zhang 模型最小,约为 5.872. 综合图 3 和 4 可以发现,
新模型伪速度的大小介于 SC 模型和 Zhang 模型之间,
但温度取值范围和密度比均较 SC 模型和 Zhang 模型大,
因而新模型得到了一定的改进.

3 模型的应用

3.1 单位转换

实际气体状态方程包含有与物质固有性质有关的常数,
这些常数需要根据该物质的压力、密度、温度实验数据进行
曲线拟合才能得到,如果能消除这些物性常数,使得方程具
备普遍性,这样将对物质的

热力学性质计算带来很大的方便. 真实单位的 vdW 状态
方程如下:

$$p^{\text{real}} = \rho^{\text{real}} T^{\text{real}} R^{\text{real}} / (1 - b^{\text{real}} \rho^{\text{real}}) - a^{\text{real}} (\rho^{\text{real}})^2, \quad (11)$$

上标“real”表示真实单位. 通过对比态原理,可将真实单
位下的状态方程转化成格子单位下的状态方程,转化关系
式为 $p^{\text{real}} = p^{\text{lu}} p_c^{\text{real}} / p_c^{\text{lu}}$, $\rho^{\text{real}} = \rho^{\text{lu}} \rho_c^{\text{real}} / \rho_c^{\text{lu}}$,
 $T^{\text{real}} = T^{\text{lu}} T_c^{\text{real}} / T_c^{\text{lu}}$. 将转化关系代入(11)式可得(10)
式. 在(10)式中,

$$\begin{aligned} \rho_c^{\text{lu}} &= \rho_c^{\text{real}} R^{\text{real}} T_c^{\text{real}} p_c^{\text{lu}} / (p_c^{\text{real}} R^{\text{lu}} T_c^{\text{lu}}), \\ a^{\text{lu}} &= a^{\text{real}} (\rho_c^{\text{real}} / \rho_c^{\text{lu}})^2, b^{\text{lu}} = b^{\text{real}} \rho_c^{\text{real}} / \rho_c^{\text{lu}}, \end{aligned} \quad (12)$$

将 ρ_c^{lu} 代入 a^{lu} 和 b^{lu} 可得

$$\begin{aligned} a^{\text{lu}} &= a^{\text{real}} p_c^{\text{real}} (R^{\text{lu}})^2 (T_c^{\text{lu}})^2 / ((T_c^{\text{real}})^2 (R^{\text{real}})^2 p_c^{\text{lu}}), \\ b^{\text{lu}} &= b^{\text{real}} p_c^{\text{real}} R^{\text{lu}} T_c^{\text{lu}} / (T_c^{\text{real}} R^{\text{real}} p_c^{\text{lu}}). \end{aligned} \quad (13)$$

获取 a^{real} 和 b^{real} 通常有两种方式: 一种是根据任意
状态方程临界等温线在临界点的数学特征,即对密度(或
者比容)求一阶和二阶导数,并令其等于零,求解方程组
获得;二是根据物质的压力、比容和温度实验数据,用曲
线拟合的方法求得^[22]. vdW 状态方程的系数可以直接
通过第一种方式获得,而对于一些复杂的状态方程系数
(如下文的 Redlich-Kwong(R-K), Redlich-Kwong Soave(RKS)
和 P-R 状态方程),可通过第二种方式获得. 在 vdW 状态
方程中,

$$\begin{aligned} a^{\text{real}} &= 27 (R^{\text{real}} T_c^{\text{real}})^2 / (64 p_c^{\text{real}}), \\ b^{\text{real}} &= R^{\text{real}} T_c^{\text{real}} / (8 p_c^{\text{real}}), \end{aligned} \quad (14)$$

将 a^{real} 和 b^{real} 代入(13)式可得格子单位下的状态方程
系数:

$$a^{\text{lu}} = 27 (R^{\text{lu}} T_c^{\text{lu}})^2 / (64 p_c^{\text{lu}}), \quad b^{\text{lu}} = R^{\text{lu}} T_c^{\text{lu}} / (8 p_c^{\text{lu}}). \quad (15)$$

同理,可分别获得格子单位下的 R-K, RKS 和 P-R 状
态方程和对应系数,为方便书写下文将省略上标“lu”.

R-K 状态方程:

$$p = \rho RT / (1 - b\rho) - a\rho^2 / (\sqrt{T}(1 + b\rho)), \quad (16)$$

方程系数为

$$a = 0.42748 R^2 (T_c)^{2.5} / p_c, \quad b = 0.08664 R T_c / p_c. \quad (17)$$

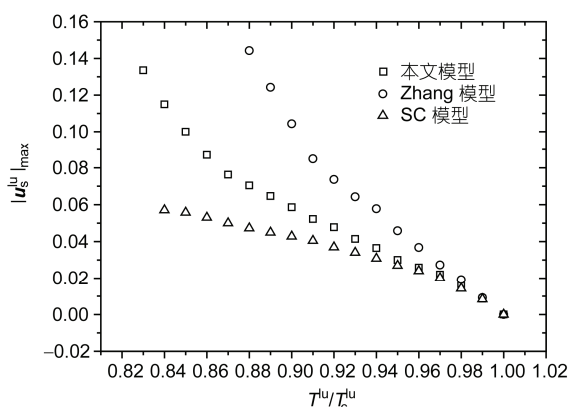


图3 不同模型最大伪速度的对比曲线

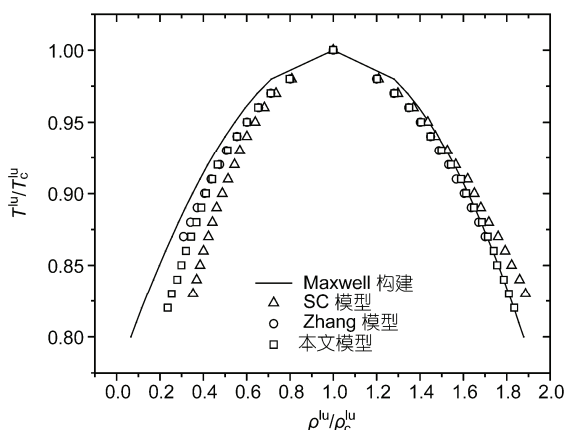


图4 不同模型模拟的饱和密度曲线与理论解的对比

RKS 状态方程:

$$p = \rho RT / (1 - b\rho) - a\alpha(T)\rho^2 / (1 + b\rho), \quad (18)$$

式中 $\alpha(T) = [1 + (0.480 + 1.574\omega - 0.176\omega^2)(1 - \sqrt{T/T_c})]^2$, ω 为偏心因子. 方程系数为

$$a = 0.42748R^2(T_c)^2 / p_c, b = 0.08664RT_c / p_c. \quad (19)$$

P-R 状态方程:

$$p = \rho RT / (1 - b\rho) - a\alpha(T)\rho^2 / (1 + 2b\rho - (b\rho)^2), \quad (20)$$

式中 $\alpha(T) = [1 + (0.375 + 1.542\omega - 0.270\omega^2)(1 - \sqrt{T/T_c})]^2$, ω 为偏心因子. 方程系数为

$$a = 0.45724R^2(T_c)^2 / p_c, b = 0.0778RT_c / p_c. \quad (21)$$

3.2 氨以及水相变过程的模拟

为进一步验证该模型处理实际相变问题的可行性, 探索性地利用新模型分别模拟 R-K, RKS 和 P-R 状态方程控制下氨以及水的相变过程, 找出不同物质在何种状态方程下计算结果与实验值^[22,23]更接近. 在 RKS 和 P-R 状态方程中, 氨以及水的偏心因子分别为 $\omega_{\text{氨}}=0.25$, $\omega_{\text{水}}=0.344$ ^[22]. 通过上述单位转换, 模拟时三个状态方程的通用气体常数均取值为 $R=1.0$, 系数均取值为 $a=2/49$, $b=2/21$ ^[21].

图 5 给出了不同状态方程控制下氨的饱和密度曲线与实验值的对比曲线, 通过对比可发现, P-R 和 RKS 状态方程的温度取值范围相差不大, T/T_c 取值范围约为 $[0.7, 1.0]$, 而 R-K 状态方程的温度取值范围较小, T/T_c 取值范围约为 $[0.78, 1.0]$; 在可取的温度范围内, 在 P-R 状态方程控制下的模拟结果中液相密度分支

端与实验值最接近, 其最大相对误差约为 7.66%; 而在 RKS 和 R-K 状态方程控制下的模拟结果中, 液相密度分支端与实验值相差较大, 与实验值的最大相对误差分别约为 13.95% 和 26.31%, 相比较液相密度分支端, 在 3 个状态方程的控制下其气相密度分支端与实验值均相差不大, 但在 P-R 状态方程控制下模拟的结果与实验值最接近, 如图 5(b) 所示. 图 6 给出了不同状态方程控制下水的饱和密度曲线与实验值的对比, 通过观察可发现 P-R 状态方程温度取值范围最大, T/T_c 取值范围约为 $[0.74, 1.0]$, R-K 状态方程的温度取值范围最小, T/T_c 取值范围约为 $[0.78, 1.0]$, 而在 R-KS 状态方程中, T/T_c 取值范围约为 $[0.76, 1.0]$; 在可取的温度范围内, 在 P-R 状态方程控制下的模拟结果中液相密度分支端与实验值最接近, 其最大相对误差约为 14.70%; 而在 RKS 和 R-K 状态方程控制下的模拟结果中液相密度分支端与实验值相差较大, 与实验值的最大相对误差分别约为 17.61% 和 20.92%, 相比较液相密度分支端, 在 3 个状态方程的控制下其气相密度分支端与实验值均相差不大, 但在 P-R 状态方程控制下模拟的结果与实验值最接近, 如图 6(b) 所示. 综上所述, 相比较 R-K 和 RKS 状态方程, 选择 P-R 状态方程来描述氨以及水最佳.

不同的状态方程有其不同的适用范围, 从上述分析可知, 相对于 R-K 和 RKS 状态方程, 在 P-R 状态方程控制下, 氨以及水的饱和密度曲线与实验值都比较接近, 为此本文将探讨 P-R 状态方程更适于描述氨还是水. 从图 7 可以发现, 在模拟氨时其温度范围约为 $[0.70T_c, T_c]$, 明显比模拟水时的温度范围(约

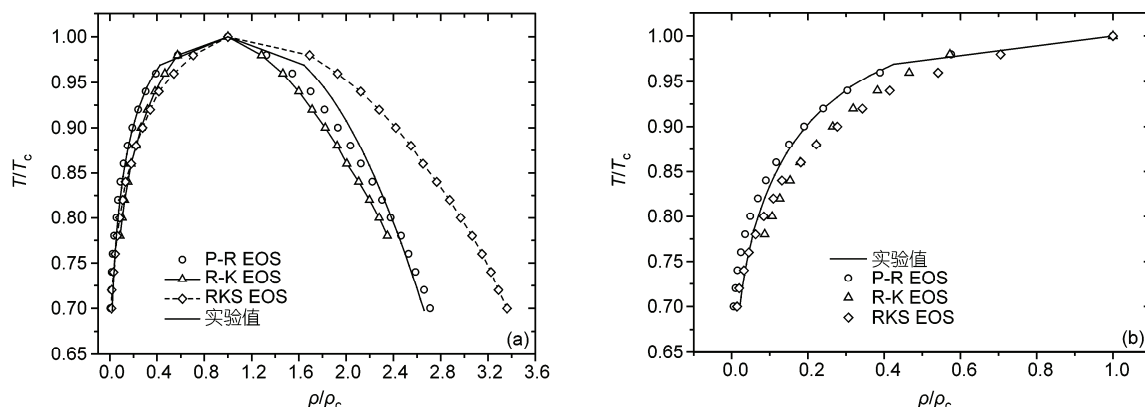


图 5 不同状态方程控制下氨的饱和密度曲线与实验值的比较

(a) 气相和液相密度分支端; (b) 气相密度分支端

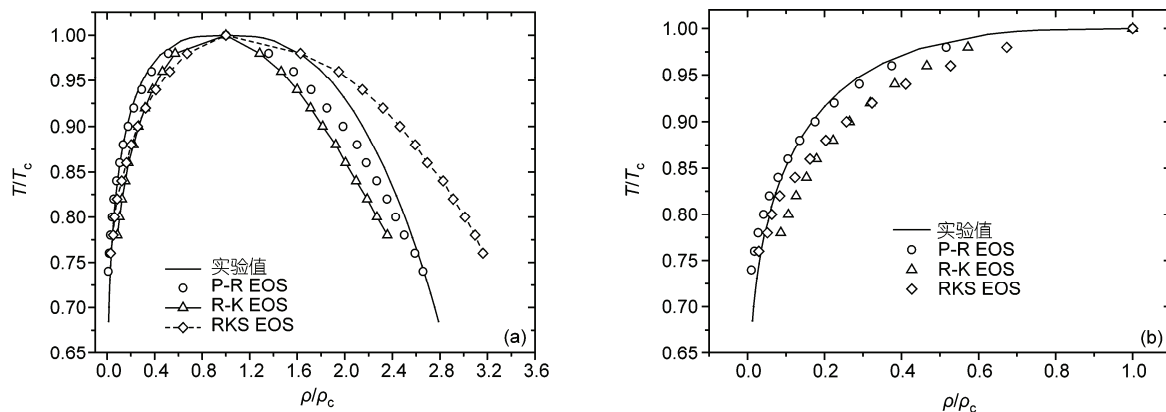


图6 不同状态方程控制下水的饱和密度曲线与实验值的比较

(a) 气相和液相密度分支端; (b) 气相密度分支端

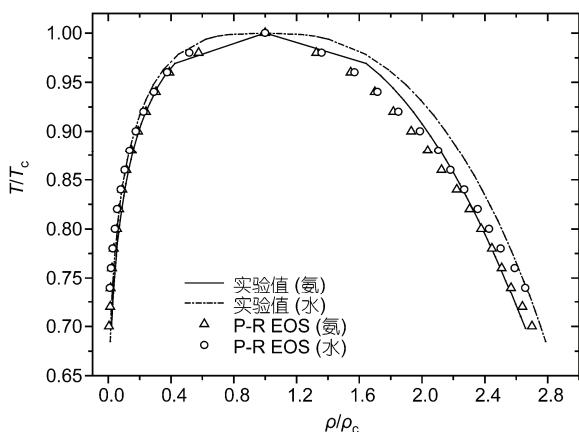


图7 P-R 状态方程控制下氨以及水的饱和密度曲线与实验值的比较

为 $[0.74T_c, T_c]$ 大; 模拟氨以及水时, 气相密度分支端均与其对应实验值基本一致(如图5和6所示); 模拟氨时, 液相密度分支端与实验值更为接近, 在其可取的温度范围内, 其最大相对误差约为7.66%, 而在模拟水时, 液相密度分支端与其对应的实验值的最大相对误差约为14.70%, 显然比模拟氨时的最大相对误差大很多. 综上所述, 在利用新模型模拟氨以及水时, P-R 状态方程更适用于描述氨的相变过程.

4 结论与讨论

本文基于 SC 相变模型, 改变 SC 模型中求体积力的方式, 巧妙回避了模型中有效密度需要开根号的这一限制, 并对速度进行了修正, 使得新模型在保证 SC 模型所有优点的同时, 扩大了温度调节范围, 增大了最大分离密度比, 与 Zhang 模型相比减小了伪速度, 使得新模型的稳定性和适用性都优于 SC 和 Zhang 模型. 另外, 本文巧妙地运用对比态原理, 并成功运用到本文提出的新模型中, 从介观尺度模拟了实际的氨以及水的相变过程. 评价了不同状态方程的优劣性, 发现对于实际的氨和水这两种工质, P-R 状态方程的模拟结果更加接近于其实验值, 特别地, P-R 状态方程模拟结果与氨的实验值更加接近.

从本文的工作可以看出, 本文提出的相变格子 Boltzmann 模型, 发展了多相格子 Boltzmann 理论, 在多相格子 Boltzmann 模型这个前沿领域迈进了一步, 同时对氨和水的模拟结果, 具有重要的工程价值, 将相变格子 Boltzmann 模型成功运用到了实际物质的模拟中, 为从介观尺度揭示实际工程相变现象的机理奠定了理论基础. 因此, LBM 可望延伸至多相及相变流等其他重要领域, 并发挥更大的作用.

致谢 感谢南京理工大学动力工程学院赵凯博士富有建设性的讨论.

参考文献

- 郭照立, 郑楚光, 李青, 等. 流体力学的格子 Boltzmann 方法. 武汉: 湖北科学技术出版社, 2002
- Zeng J B, Li L J, Liao Q, et al. Simulation of boiling process with lattice Boltzmann method. J Xi'an Jiao Tong Univ, 2009, 43: 28—32

- 3 黄伟峰, 李勇, 刘秋生. 格子 Boltzmann 方法在电流体动力学中的应用: 均匀电场中液滴的变形和失稳. 科学通报, 2007, 52: 1232—1236
- 4 Shan X W, Chen H D. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. Phys Rev E, 1993, 47: 1815—1820
- 5 Sankaranarayanan K, Shan X W, Kevrekidis I G, et al. Analysis of drag and virtual mass forces in bubbly suspensions using an implicit formulation of the lattice Boltzmann method. J Fluid Mech, 2002, 452: 61—96
- 6 Mayer G, Hazi G, Imre A R, et al. Lattice Boltzmann simulation of vapour-liquid equilibrium on 3D finite lattice. Int J Mod Phys A, 2004, 15: 459—469
- 7 Zhao K, Li Q, Xuan Y M. Investigation on the three-dimensional multiphase conjugate conduction problem inside porous media with the lattice Boltzmann method. Sci China Ser E, 2009, 52: 2973—2980
- 8 Liu Z F, W X H. The Permeability in two-dimensional percolation porous media. Prog Nat Sci, 2004, 14: 101—106
- 9 何雅玲, 王勇, 李庆. 格子 Boltzmann 方法的理论及应用. 北京: 科学出版社, 2009
- 10 李志辉, 张涵信. 基于 Boltzmann 模型方程各流域三维复杂绕流问题统一算法研究. 中国科学 G 辑: 物理学力学天文学, 2009, 39: 414—427
- 11 Wang Y W, Wang Y, An Y R, et al. Aerodynamic simulation of high-speed trains based on the lattice Boltzmann method (LBM). Sci China Ser E, 2008, 51: 624—631
- 12 赖惠林, 马昌凤. 非线性偏微分方程的高阶格子 BGK 模型. 中国科学 G 辑: 物理学力学天文学, 2009, 39: 913—922
- 13 Guan H, Wu C J. Large-eddy simulations of turbulent flows with lattice Boltzmann dynamics and dynamical system sub-grid models. Sci China Ser E, 2009, 52: 670—679
- 14 Yuan P, Schaefer L. Equations of state in a lattice Boltzmann model. Phys Fluids, 2006, 18: 1—11
- 15 Zhang R Y, Chen H D. Lattice Boltzmann method for simulations of liquid-vapor thermal flows. Phys Rev E, 2003, 67: 1—6
- 16 Martys N S, Shan X W, Chen H D. Evaluation of the external force term in the discrete Boltzmann equation. Phys Rev E, 1998, 58: 6855—6857
- 17 Qian Y H, Chen S Y. Finite size effect in lattice-BGK models. Int J Mod Phys C, 1997, 8: 763—771
- 18 郭照立, 郑楚光. 格子 Boltzmann 方法的原理及应用. 北京: 科学出版社, 2009
- 19 Qin R S. Mesoscopic interparticle potentials in the lattice Boltzmann equation for multiphase fluids. Phys Rev E, 2006, 73: 1—5
- 20 Zhao K, Li Q, Xuan Y M. Simulation of phase transition with lattice Boltzmann method. J Comput Phys, 2008, 25: 151—156
- 21 Swift M R, Orlandini E, Osborn W R, et al. Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems. Phys Rev E, 1996, 54: 5041—5052
- 22 沈维道, 蒋智敏, 童钧耕. 工程热力学. 北京: 高等教育出版社, 2001
- 23 杨世铭, 陶文铨. 传热学. 北京: 高等教育出版社, 1998