

УДК 532.7 + 536.423 + 533.75 + 532.529

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ С ГРАНИЦАМИ РАЗДЕЛА ФАЗ
ЖИДКОСТЬ-ПАР МЕТОДОМ РЕШЁТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ
БОЛЬЦМАНА¹

А. Л. Куперштох

§ 1. Введение

В отличие от классических методов расчета течений жидкости путем решения уравнений Навье–Стокса метод решеточных уравнений Больцмана (Lattice Boltzmann Equation, LBE) 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. Обоснованием этого метода можно считать тот факт, что во втором порядке разложения Чепмена–Энскога из уравнений LBE получаются уравнения гидродинамики, то есть уравнения неразрывности и Навье–Стокса.

Компьютерное моделирование фазовых переходов методом LBE представляет собой метод сквозного счета границ раздела фаз, в том числе и вновь возникающих в объеме вещества [6–8]. 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 от-

¹Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 03-02-16474).

ношениях 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 $\rho_{\text{ж}}/\rho_{\text{п}} \sim 100$ [9–14].

§ 2. Метод LBE

Основная идея метода решеточных уравнений Больцмана заключается в том, что для описания гидродинамических течений в [15, 16] 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 . Возможные вектора скорости частиц в методе решеточных уравнений Больцмана для двумерной девятискоростной модели D2Q9 [17] показаны на Рис. 1. При наличии объемных сил уравнения эволюции имеют вид

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

Здесь Ω_k — оператор столкновений, ΔN_k — изменение функций распределения 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 [18].

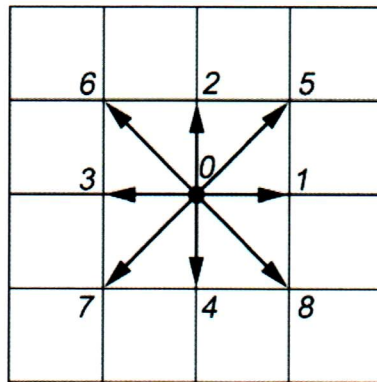


Рис. 1. Возможные вектора скорости частиц в методе решеточных уравнений Больцмана для двумерной девятискоростной модели D2Q9.

Для изотермических вариантов LBE-моделей жидкости разложение равновесных

функций распределения в ряд по скорости \mathbf{u} до второго порядка имеет вид

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

Здесь $\theta = kT/m$ — нормированная температура. Вектора \mathbf{c}_k и коэффициенты w_k зависят от конкретной решетки. Решетка должна быть достаточно симметричной, чтобы обеспечить изотропность соответствующих тензоров [19, 20]. В любом конкретном варианте метода LBE главная часть тензора потока импульса имеет гидродинамический вид

$$\Pi_{ij}^{(0)} = \sum_{k=0}^b c_{ki} c_{kj} N_k^{eq} = p \delta_{ij} + \rho u_i u_j, \quad (3)$$

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

Для двумерной девятискоростной модели D2Q9 [17] на квадратной решетке (Рис. 1) допустимы 3 значения модуля скорости $|\mathbf{c}_k| = 0, h/\Delta t$ 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 $\nu = \theta(\tau - 1/2)\Delta t$.

§ 3. Моделирование границ раздела фаз жидкость-пар в методе LBE

§ 3.1. Метод сил притяжения Шана – Чена

Для моделирования переходных слоев между фазами в [6, 7] было предложено ввести в метод LBE специальные силы, действующие между каждой парой соседних узлов. Сумма этих сил, действующих на вещество в рассматриваемом узле, равна

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \psi(\rho(\mathbf{x})) \sum_k G_k \psi(\rho(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k)) \mathbf{e}_k. \quad (4)$$

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

$$p = \rho\theta - \alpha G_0 \psi^2, \quad (5)$$

где G_0 — коэффициент в (4), 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 [6, 7] в виде

$$\psi(\rho) = \rho_0(1 - \exp(-\rho/\rho_0)), \quad (6)$$

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 (4) обеспечивают поверхностное натяжение на границе пар-жидкость. Величина поверхностного натяжения зависит от параметра G_0 [7].

§ 3.2. 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 решеточных уравнений Больцмана. Однако, в [22, 23] показано, что все они дают 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 [21–23] предложен новый способ учета действия сил — метод точной разности (МТР), для которого

$$\Delta N_k = N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}) - N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}). \quad (7)$$

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 LBE.

Тогда для класса методов, названных методом явной производной (МЯП) [24–26], включая метод неопределенных коэффициентов [27], имеем

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

Для метода модификации оператора столкновений (МОС) [6, 7] имеем

$$\Delta R_k = -\frac{\rho w_k}{2\theta} \left(\frac{(\mathbf{c}_k \Delta \mathbf{u})^2}{\theta} - (\Delta \mathbf{u})^2 \right) (1 - \tau). \quad (9)$$

В недавно опубликованном комбинированном методе (КМ) [28] метод неопределенных коэффициентов использовался в сочетании с методом модификации оператора столкновений в виде

$$N_k(\mathbf{x} + \mathbf{c}_k \Delta t, t + \Delta t) = N_k(\mathbf{x}, t) + (N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}_+) - N_k(\mathbf{x}, t))/\tau + \Delta N_k^+, \quad (10)$$

где $\Delta \mathbf{u}_+ = \Delta \mathbf{u}/2$, а выражение для ΔN_k^+ , приведенное в [28], можно переписать в виде

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

В итоге, отклонение этого метода от МТР равно

$$\Delta R_k = -\frac{\rho w_k}{8\theta\tau} \left(\frac{(\mathbf{c}_k \Delta \mathbf{u})^2}{\theta} - (\Delta \mathbf{u})^2 \right). \quad (12)$$

Для перечисленных методов были рассчитаны стационарные переходные слои для одномерной модели. На Рис. 2 показаны кривые сосуществования фаз для уравнения состояния (5) при $\rho_0 = 1$. Теоретические значения плотности пара и жидкости (Рис. 2, 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 $G_0 \approx 1$.

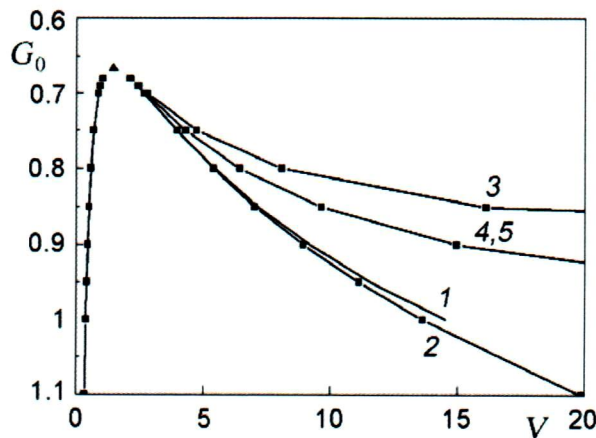


Рис. 2. Кривые сосуществования фаз для УС (5), (6). 1 — по правилу Максвелла, 2 — МТР, 3 — МЯП, 4 — МОС, 5 — КМ. \blacktriangle — критическая точка. $\rho_0 = 1$, $\tau = 0.51$.

Были рассчитаны одномерные стационарные переходные слои при различных значениях времени релаксации τ (Рис. 3). 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 (9) и (12).

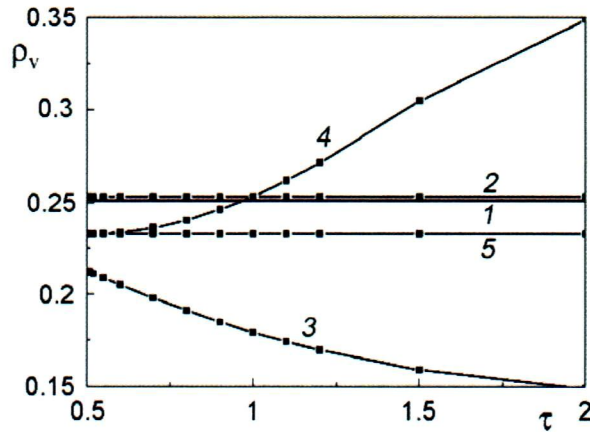


Рис. 3. Плотность пара на кривой сосуществования фаз для УС (5), (6) при $G_0 = 0.75$ в зависимости от времени релаксации τ . 1 — по правилу Максвелла, 2 — МТР, 3 — МЯП, 4 — МОС, 5 — КМ. $\rho_0 = 1$.

§ 3.3. 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 ЛВЕ была введена специальная сила \mathbf{F}_N , действующая на вещество в каждом узле [8]. 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)

$$\mathbf{F}_N = -\nabla U. \quad (13)$$

В [8] было предложено выразить этот потенциал через уравнение состояния следующим образом:

$$U = p(\rho, T) - \rho\theta. \quad (14)$$

В рамках изотермической модели [6, 7] в [5, 29] было получено выражение для функции $\psi(\rho)$ в виде

$$\psi(\rho) = \sqrt{-(p(\rho) - \rho\theta)/(\alpha G_0)} \quad (15)$$

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

§ 3.4. Аппроксимация градиента потенциала

По аналогии с (15) нами предложено ввести аналогичную функцию

$$\Phi = \sqrt{-U} \quad (16)$$

и для модели [8] с уравнением состояния произвольного вида (13), (14). Тогда для одномерного случая (D1Q3) конечно-разностная аппроксимация уравнения (13) может быть записана в виде

$$F_i = -\frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2h} = \frac{(\Phi_{i+1} + \Phi_{i-1})(\Phi_{i+1} - \Phi_{i-1})}{2h}. \quad (17)$$

Вместе с тем, рассматривая силу \mathbf{F}_N (13), действующую на вещество в узле, можно получить новое выражение

$$\mathbf{F}_N = 2\Phi(\rho, T)\nabla\Phi(\rho, T). \quad (18)$$

Конечно-разностную аппроксимацию этого вектора можно написать в виде

$$\mathbf{F}_N = \frac{1}{\alpha h} \Phi(\mathbf{x}) \sum_k \frac{G_k}{G_0} \Phi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k. \quad (19)$$

Эта аппроксимация силы точно совпадает с формулой, используемой в изотермическом методе [6, 7], 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 (19) получаем конечно-разностную аппроксимацию

$$F_i = \Phi_i \frac{(\Phi_{i+1} - \Phi_{i-1})}{h}. \quad (20)$$

Формулы (17) и (20) отличаются только тем, что в (20) 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 $\tilde{p} = p/p_{cr}$, $\tilde{\rho} = \rho/\rho_{cr}$, $\tilde{T} = T/T_{cr}$

$$\tilde{p} = \frac{8\tilde{T}\tilde{\rho}}{3 - \tilde{\rho}} - 3\tilde{\rho}^2, \quad (21)$$

для которого была рассчитана теоретическая кривая сосуществования фаз пар-жидкость в соответствии с правилом Максвелла (Рис. 4, 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 (17) или (20) и становятся гораздо хуже для обеих аппроксимаций в области относительно низких температур. Вместе с тем, при использовании формулы (20) значения плотности насыщенного пара (Рис. 4, кривая 2) существенно ближе к теоретическим, чем результаты, полученные при использовании формулы (17) (кривая 3). Таким образом, для точного описания кривой сосуществования фаз очень важен вид аппроксимации сил (13).

Чтобы заметно улучшить результаты, нами предложен новый, более общий способ конечно разностной аппроксимации уравнений (13), (16), то есть градиента потенциала в переходном слое пар-жидкость для модели [8]. В одномерном случае предложено использовать линейную комбинацию формул (17) и (20) с некоторым коэффициентом A в виде

$$F_i = [A\Phi_{i+1} + (1 - 2A)\Phi_i + A\Phi_{i-1}] \frac{(\Phi_{i+1} - \Phi_{i-1})}{h}. \quad (22)$$

В частных случаях $A = 0$ и $A = 0.5$ это выражение переходит, соответственно, в формулы (20) и (17). При $A = -0.152$ отклонение кривой сосуществования фаз (Рис. 4, кривая 4) от теоретической меньше чем 0.4 % (Рис. 5) в диапазоне температур от критической точки до $\tilde{T} = 0.4$. Аппроксимация (22) для уравнений (13), (16) позволяет использовать в моделях ЛВЕ уравнения состояния любого вида $p(\rho, T)$, допускающие фазовый переход (при этом потенциал U определяется формулой (14)).

Для учета действия сил в методе ЛВЕ для всех вариантов аппроксимации использовался метод точной разности [21-23].

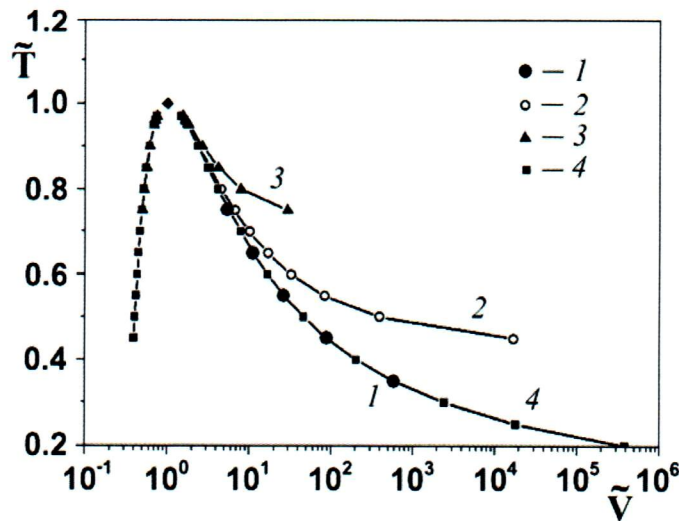


Рис. 4. Кривая сосуществования фаз в приведенных переменных.

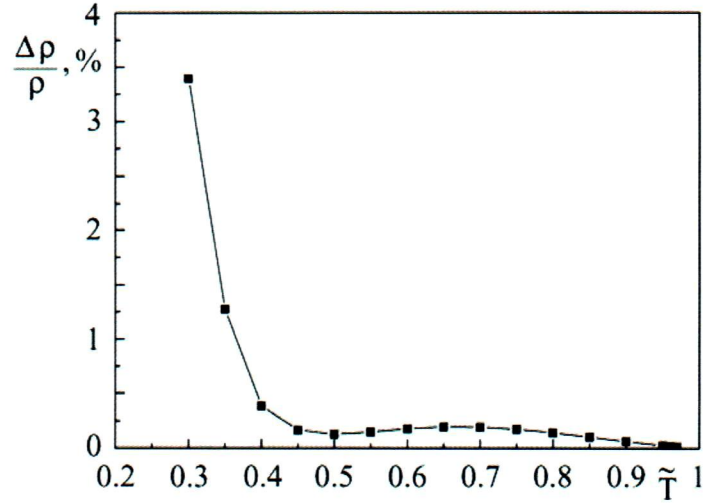


Рис. 5. Относительное отклонение результатов моделирования для плотности пара при использовании аппроксимации (22) от теоретической кривой сосуществования фаз.

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

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\alpha h} \left[(1 - 2A)\Phi(\mathbf{x}) \sum_k \frac{G_k}{G_0} \Phi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k + A \sum_k \frac{G_k}{G_0} \Phi^2(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k \right]. \quad (23)$$

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 [19]) на квадратную решетку в двумерном пространстве (Рис. 6). В модели D4Q25 из узла выходит 24 ребра решетки. Проекции соответствующих векторов решетки \mathbf{e}_k имеют вид $(1,1,0,0)$, $(1,0,1,0)$, \dots , $(0,0,1,1)$. Все они имеют одинаковую длину $\sqrt{2}$ и, соответственно, все компоненты силы (4) для локально однородного вещества ($\rho = \text{const}$) равны по модулю и пропорциональны $\sqrt{2}G_0$. Проекция всех этих сил, которые действуют на рассматриваемый узел со стороны соседних узлов четырехмерной решетки в модели D4Q25, на квадратную решетку в двумерном пространстве дают отношение коэффициентов $G_1 = G_0/4$. По аналогии для трехмерной модели D3Q19 получаем $G_1 = G_0/2$.

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

$$\begin{aligned} (F_{i,j})_x = & \frac{2}{3h} \{ (A\Phi_{i+1,j} + (1 - 2A)\Phi_{i,j} + A\Phi_{i-1,j})(\Phi_{i+1,j} - \Phi_{i-1,j}) + \\ & + \frac{1}{4} [(A\Phi_{i+1,j+1} + (1 - 2A)\Phi_{i,j} + A\Phi_{i-1,j-1})(\Phi_{i+1,j+1} - \Phi_{i-1,j-1}) + \\ & + (A\Phi_{i+1,j-1} + (1 - 2A)\Phi_{i,j} + A\Phi_{i-1,j+1})(\Phi_{i+1,j-1} - \Phi_{i-1,j+1})] \}. \quad (24) \end{aligned}$$

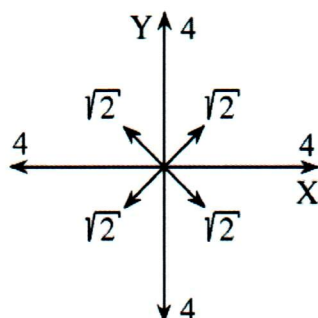


Рис. 6. Проекция всех сил, действующих на рассматриваемый узел со стороны соседних узлов четырехмерной решетки в модели D4Q25, на квадратную решетку в двухмерном пространстве.

Аналогичное выражение использовалось для проекции силы \mathbf{F}_N на ось y . Заметим, что коэффициент A имеет то же самое значение, что и в одномерном случае, которое для уравнения Ван-дер-Ваальса равно $A = -0.152$. Для плоского переходного слоя, перпендикулярного оси x , формула (24) переходит в формулу (22), то есть результаты, приведенные на Рис. 4 и 5, справедливы и в двумерном случае (при отсутствии кривизны поверхности).

§ 4. Результаты численного моделирования

На Рис. 7 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.

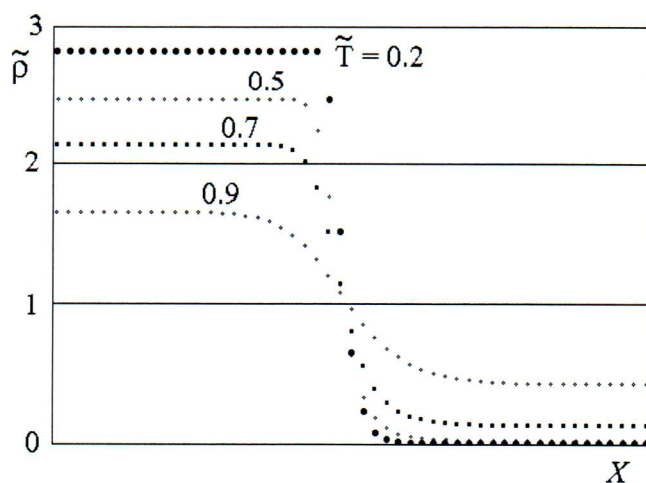


Рис. 7. Переходной слой жидкость-пар. $\tilde{T} = 0.2; 0.5; 0.7; 0.9$.

Предложенная нами аппроксимация (23) обеспечивает правильные значения плотности на кривой сосуществования фаз и поверхностного натяжения на границе раздела

фаз, а также круглую форму каплей жидкости в газе (Рис. 8) и паровых пузырей в жидкости в стационарном случае, то есть достаточно изотропна. Отношение плотностей фаз для случая, приведенного на Рис. 8, составляет величину $\rho_{\text{ж}}/\rho_{\text{п}} \approx 1330$.

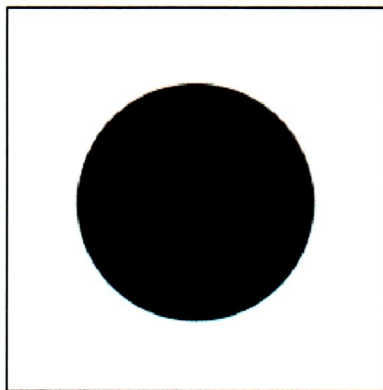


Рис. 8. Капля жидкости в насыщенном паре после установления равновесия при $\tilde{T} = 0.35$. $\tilde{\rho}_{\text{ж}} = 2.66$, $\tilde{\rho}_{\text{п}} = 0.002$ (результаты моделирования). Сетка 200×200 .

На Рис. 9 в качестве примера показаны результаты моделирования пузырьковой кавитации в жидкости в волне разрежения, как существенно стохастического процесса. В слое жидкости $-x_0 < x < x_0$ были случайным образом распределены пузырьки (Рис. 9,б). Слева и справа от слоя, соответственно, при $x < -x_0$ и при $x > x_0$ находился насыщенный пар, причем границы расчетной области были достаточно далеко. По y использовались периодические граничные условия. При $t = 0$ в этом слое двухфазной среды было задано начальное распределение скорости: $u_y = 0$, $u_x = u_0 x/x_0$ (Рис. 9,а). Рассчитывалась дальнейшая эволюция течения двухфазной среды в отсутствии внешних объемных сил в изотермическом случае при $\tilde{T} = 0.8$. В последующем течение жидкости с пузырьками трансформируется в пенную структуру (Рис. 9,в), а на более поздних стадиях — в газокапельный поток (Рис. 9,г). Известные модели кавитации в принципе не могут описать детальную внутреннюю структуру течения при таких величинах объемного содержания газовой фазы.

§ 5. Заключение

Таким образом, 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 LBE достаточно точно моделируются переходные слои жидкость-пар для уравнений состояний произвольного вида $p(\rho, T)$,

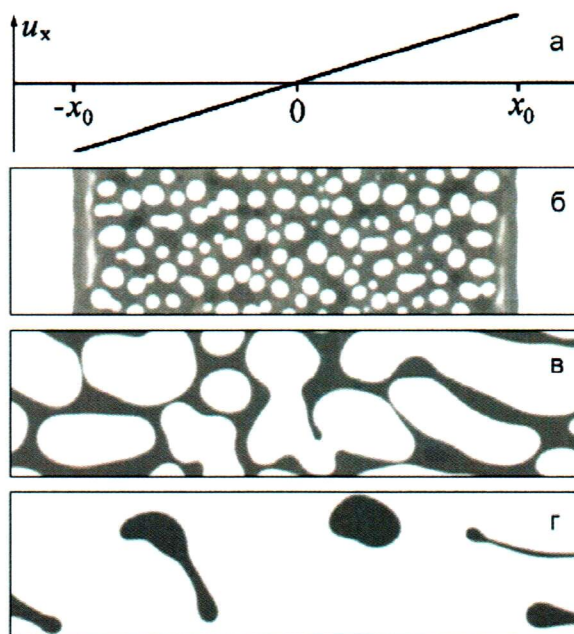


Рис. 9. Поздние стадии пузырьковой кавитации, возникающей в слое жидкости в условиях расходящегося потока (в волне разрежения).

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 $\tilde{T} \approx 0.4$ (отклонения меньше 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.

Фактически, прецизионное описание кривой сосуществования фаз в методе решетчатых уравнений Больцмана стало возможным при выполнении одновременно двух условий: корректного учета действия сил в методе LBE (предложенный ранее метод точной разности [21–23]) и специальной аппроксимации градиента потенциала (23) при использовании метода среднего поля.

Смоделированы поздние стадии пузырьковой кавитации, когда осуществляется трансформация жидкости в пенную структуру, а затем в газокапельный поток. Известные модели кавитации в принципе не могут описать детальную внутреннюю структуру течения при таких величинах объемного содержания газовой фазы.

Литература

- [1] *G. R. McNamara, G. Zanetti*, Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata, *Phys. Rev. Lett.*, **61**, No. 20 (1988), 2332–2335.

- [2] *F. J. Higuera, J. Jiménez*, Boltzmann approach to lattice gas simulations, *Europhys. Lett.*, **9**, No. 7 (1989), 663–668.
- [3] *S. Chen, G. D. Doolen*, Lattice Boltzmann method for fluid flow, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **30** (1998), 329–364.
- [4] *X. He, S. Chen, G. D. Doolen*, A novel thermal model for the lattice Boltzmann method in incompressible limit, *J. Comp. Phys.*, **146**, No. 1 (1998), 282–300.
- [5] *R. R. Nourgaliev, T. N. Dinh, T. G. Theofanous, D. Joseph*, The lattice Boltzmann equation method: theoretical interpretation, numerics and implications, *Int. J. of Multiphase Flow*, **29**, No. 1 (2003), 117–169.
- [6] *X. Shan, H. Chen*, Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components, *Phys. Rev. E*, **47**, No. 3 (1993), 1815–1819.
- [7] *X. Shan, H. Chen*, Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation, *Phys. Rev. E*, **49**, No. 4 (1994), 2941–2948.
- [8] *R. Zhang, H. Chen*, Lattice Boltzmann method for simulations of liquid-vapor thermal flows, *Phys. Rev. E*, **67**, No. 6 (2003), 066711-1–066711-6.
- [9] *Y. Chen, S. Teng, T. Shukuwa, H. Ohashi*, Lattice-Boltzmann simulation of two-phase flows, *Int. J. Modern Physics C*, **9**, No. 8 (1998), 1383–1391.
- [10] *B. J. Palmer, D. R. Rector*, Lattice-Boltzmann algorithm for simulating thermal two-phase flow, *Phys. Rev. E*, **61**, No. 5 (2000), 5295–5306.
- [11] *R. R. Nourgaliev, T. N. Dinh, B. R. Sehgal*, On lattice Boltzmann modeling of phase transition in an isothermal non-ideal fluid, *Nuclear Engineering and Design*, **211**, No. 2/3 (2002), 153–171.
- [12] *A. N. Kalarakis, V. N. Burganos, A. C. Payatakes*, Galilean-invariant lattice-Boltzmann simulation of liquid-vapor interface dynamics, *Phys. Rev. E*, **65**, No. 5 (2002), 056702-1–056702-13.
- [13] *G. Hazi, A. R. Imre, G. Mayer, I. Farkas*, Lattice Boltzmann methods for two-phase flow modeling, *Ann. Nuclear Energy*, **29**, (2002), 1421–1453.
- [14] *J. Zhang, B. Li, D. Y. Kwok*, Mean-field free-energy approach to the lattice Boltzmann method for liquid-vapor and solid-fluid interfaces, *Phys. Rev. E*, **69**, No. 3 (2004), 032602-1–032602-4.
- [15] *J. E. Broadwell*, Study of rarefied shear flow by the discrete velocity method, *J. Fluid Mech.*, **19**, (1964), 401–414.
- [16] *J. E. Broadwell*, Shock structure in a simple discrete velocity gas, *Phys. Fluids*, **7**, (1964), 1243–1247.
- [17] *Y. H. Qian, D. d’Humières, P. Lallemand*, Lattice BGK models for Navier — Stokes equation, *Europhys. Lett.*, **17**, No. 6 (1992), 479–484.
- [18] *P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, M. K. Krook*, A model for collision process in gases. I. Small amplitude process in charged and neutral one-component system, *Phys. Rev.*, **94**, No. 3 (1954), 511–525.

- [19] *S. Wolfram*, Cellular automaton fluids 1: Basic theory, *J. Stat. Phys.*, **45**, No. 3/4 (1986), 471–526.
- [20] *Y. Chen, H. Ohashi, M. Akiyama*, Thermal lattice Bhatnagar–Gross–Krook model without nonlinear deviations in macroscopic equations, *Phys. Rev. E*, **50**, No. 4 (1994), 2776–2783.
- [21] *A. L. Kupershtokh*, Calculations of the action of electric forces in the lattice Boltzmann equation method using the difference of equilibrium distribution functions, *Материалы 7-й Международн. науч. конф. «Современные проблемы электрофизики и электрогидродинамики жидкостей»*, Санкт-Петербург, СПбГУ, 2003, 152–155.
- [22] *A. L. Kupershtokh*, New method of incorporating a body force term into the lattice Boltzmann equation, *Proc. 5th International EHD Workshop, Poitiers, France, 2004*, 241–246.
- [23] *А. Л. Куперштох*, Учет действия объемных сил в решеточных уравнениях Больцмана, *Вестник НГУ, Серия: математика, механика и информатика*, **4**, № 2 (2004), 75–96.
- [24] *X. He, X. Shan, G. D. Doolen*, Discrete Boltzmann equation model for nonideal gases, *Phys. Rev. E*, **57**, No. 1 (1998), R13–R16.
- [25] *L.-S. Luo*, Unified theory of lattice Boltzmann models for nonideal gases, *Phys. Rev. Lett.*, **81**, No. 8 (1998), 1618–1621.
- [26] *L.-S. Luo*, Theory of the lattice Boltzmann method: Lattice Boltzmann models for nonideal gases, *Phys. Rev. E*, **62**, No. 4 (2000), 4982–4996.
- [27] *A. J. C. Ladd, R. Verberg*, Lattice-Boltzmann simulations of particle-fluid suspension, *J. Stat. Phys.*, **104**, No. 5/6 (2001), 1191–1251.
- [28] *Z. Guo, C. Zheng, B. Shi*, Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method, *Phys. Rev. E*, **65**, No. 4 (2002), 046308-1–046308-6.
- [29] *X. He, G. D. Doolen*, Thermodynamic foundation of kinetic theory and lattice Boltzmann models for multiphase flows, *J. Stat. Phys.*, **107**, No. 1/2 (2002), 309–328.