

沸腾过程的格子 Boltzmann 方法模拟

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, 400030, 重庆)

摘要: 提出了一种新的描述气液相变过程的格子 Boltzmann 理论模型, 并利用该模型对液化和蒸发过程进行了模拟. 对液化过程的计算结果表明, 气相的体积分数、液相和气相的密度与理论解的最大相对误差分别为 1.18%、0.23%、0.32%, 而蒸发过程的计算结果相应的最大相对误差分别为 0.08%、0.48%、0.20%, 较前人研究的结果更接近理论解. 为进一步验证该模型模拟复杂相变问题的可行性, 利用该模型对池内沸腾和垂直管道中的流动沸腾现象进行了模拟, 观察到气泡随时间变化不断长大, 气泡受浮升力的影响脱离壁面, 以及气泡在液相中上升时发生碰撞、聚合等现象.

关键词: 格子 Boltzmann 方法; 相变; 池内沸腾; 流动沸腾

中图分类号: TK124 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-987X(2009)07-0025-05

Simulation of Boiling Process with Lattice Boltzmann Method

ZENG Jianbang, LI Longjian, LIAO Quan, CUI Wenzhi, CHEN Qinghua, PAN Liangming

(College of Power Engineering, Chongqing University, Chongqing 400030, China)

Abstract: A new lattice Boltzmann model is proposed to describe liquid-vapor phase transitions, and then the simulation on condensation and vaporization is performed. The simulation results show that the maximum relative error of the volume fraction of vapor phase, the liquid phase density, and the vapor phase density is 1.18%, 0.23%, and 0.32%, respectively, for the process of condensation and 0.08%, 0.48%, and 0.20%, respectively, for the process of vaporization. Compared with previous results, the present results are more close to analytical solutions. In order to further confirm the feasibility to simulate complicated phase transitions with the present model, the simulation on pool boiling and boiling flow in a vertical pipe is conducted. It is observed from the results that small and spherical bubbles grow near the wall and rise due to buoyancy, and collisions and coalescences of the bubbles occur occasionally while the bubbles rise.

Keywords: lattice Boltzmann method; phase transition; pool boiling; boiling flow

在沸腾传热过程中, 对气泡形成、长大、脱离、形变及运动等现象的研究具有显著的重要性, 因此在过去的几十年中, 沸腾传热过程成为大量理论研究、实验研究和数值模拟的主要对象. 格子 Boltzmann 方法(LBM)是最近几年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, 可以方便地描述相间的相互作用, 清晰地捕捉到气液界面. 对 LBM 在多相流方面的研究主要经历了 3 个阶段: 1991 年 Gunstensen 等提出了着色模

型^[1], 1993 年 Shan 等提出了基于均场理论的伪势模型^[2], Swift 等提出了自由能模型^[3]. 伪势模型提出时只适用 D2Q7 格子和四维面心超立方体格子(FCHC)^[4], 本文改变了伪势模型中的平衡态分布函数, 使其满足 D2Q9 格子, 选取新的格林函数形式, 并考虑外力的存在而建立了新的模型. 利用该模型对液化和蒸发过程进行模拟, 发现该模型计算的结果较文献^[5]的结果更接近理论解. 为此, 利用该模型对池内沸腾和垂直管道中的流动沸腾进行初步

探讨, 所得结果对模型的改进提供了一定的依据。

1 基本模型

1.1 多相流动格子 Boltzmann 模型

多相流动格子 Boltzmann 演化方程^[5]为

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

式中: $\sigma=1, 2, \dots, S$ 表示 S 种不同的相; $\mathbf{x}$ 表示位置矢量; $i=0, 1, 2, \dots, b$ 表示每个格点不同的离散速度方向; $\mathbf{e}_i$ 表示各个离散方向上的速度矢量; Δt 表示格子离散的时间步长; τ_σ 表示第 σ 相的归一化松弛时间; Γ_i^σ 表示相变项。本文选取 D2Q9 模型, 主要是因为其基于正方形网格, 而 D2Q7 模型则基于三角形网格, 正方形网格比三角形网格数值实施起来更方便。另外, 许多数值实验表明 D2Q9 的稳定性要比 D2Q7 好。因此, Maxwell 平衡态分布函数^[6]为

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

式中: $f^\sigma = \sum_i f_i^\sigma$ 表示第 σ 相的密度数; 权系数 $w_0 = 4/9, w_i = 1/9, i=1, \dots, 4, w_i = 1/36, i=5, \dots, 8$; 不考虑相间作用力, 可假设平衡速度 $\mathbf{u}_\sigma^{\text{eq}} = \mathbf{u}' = \sum_\sigma (\rho_\sigma \mathbf{u}_\sigma / \tau_\sigma) / \sum_\sigma (\rho_\sigma / \tau_\sigma)$, 其中 $\mathbf{u}_\sigma$ 是第 σ 相的宏观速度, $\rho_\sigma \mathbf{u}_\sigma = m_\sigma \sum_i f_i^\sigma \mathbf{e}_i$ 表示第 σ 相的动量, $\rho_\sigma = m_\sigma f^\sigma$ 表示第 σ 相的密度, m_σ 为第 σ 相的相对分子质量, 本文计算中均取值为 1.0。

根据文献[7-8], 要使气液两相分离, 就必须考虑相间相互作用力, 因此可以认为不同相间的斥力或引力 $\mathbf{F}_\sigma(\mathbf{x})$ 是源于某个相互作用的伪势函数

$$V_{\sigma\bar{\sigma}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = G_{\sigma\bar{\sigma}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_\sigma(f^\sigma(\mathbf{x})) \varphi_{\bar{\sigma}}(f^{\bar{\sigma}}(\mathbf{x}')) \quad (3)$$

式中: $\varphi_\sigma(f^\sigma(\mathbf{x})) = \varphi_\sigma(\mathbf{x}), \varphi_{\bar{\sigma}}(f^{\bar{\sigma}}(\mathbf{x}')) = \varphi_{\bar{\sigma}}(\mathbf{x}')$ 分别是 $\mathbf{x}$ 处的第 σ 相与 $\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \mathbf{e}_i$ 处的第 $\bar{\sigma}$ 相的有效密度。只考虑相邻节点间各向同性的相互作用力, 选取的格林函数如下

$$G_{\sigma\bar{\sigma}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \begin{cases} w_i G & |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = 1 \\ w_i G & |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = 2^{1/2} \\ 0 & \text{其他} \end{cases} \quad (4)$$

式中: $G_{\sigma\bar{\sigma}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = G_{\sigma\bar{\sigma}}(\mathbf{x}', \mathbf{x})$; G 为常数。若作用在第 σ 相上的外力为 $\rho_\sigma \mathbf{g}_\sigma$, 则第 σ 相受到的总作用力为

$$\mathbf{F}_\sigma(\mathbf{x}) = - \varphi_\sigma(\mathbf{x}) \sum_{i,\sigma} G_{\sigma\bar{\sigma}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_{\bar{\sigma}}(\mathbf{x}') \mathbf{e}_i + \rho_\sigma \mathbf{g}_\sigma \quad (5)$$

因此, 可改变式(2)中的平衡速度来反映表面张力的影响。新的平衡速度为

$$\rho_\sigma \mathbf{u}_\sigma^{\text{eq}} = \rho_\sigma \mathbf{u}' + \tau_\sigma \mathbf{F}_\sigma \quad (6)$$

假设系统等温, 相变过程的宏观表达式为

$$\partial \rho_b V_b / \partial t = - \Theta_{b \rightarrow r} \rho_b V_b + \Theta_{r \rightarrow b} \rho_r V_r \quad (7a)$$

$$\partial \rho_r V_r / \partial t = - \Theta_{r \rightarrow b} \rho_r V_r + \Theta_{b \rightarrow r} \rho_b V_b \quad (7b)$$

式中: 下标 b, r 分别代表液相和气相; $\Theta_{b \rightarrow r}, \Theta_{r \rightarrow b}$ 分别表示气化和液化速率; ρ_b, ρ_r 分别表示液相和气相密度; V_b, V_r 分别表示液相和气相体积分, $V_b + V_r = 1.0$ 。引入介观相变率 $\theta_{i,b \rightarrow r}, \theta_{i,r \rightarrow b}$, 则介观相变方程可表示成如下形式

$$\Gamma_i^b = - \theta_{i,b \rightarrow r} f_i^b + \theta_{i,r \rightarrow b} f_i^r \quad (8a)$$

$$\Gamma_i^r = - \theta_{i,r \rightarrow b} f_i^r + \theta_{i,b \rightarrow r} f_i^b \quad (8b)$$

若 $\theta_{i,b \rightarrow r} = \Theta_{b \rightarrow r}, \theta_{i,r \rightarrow b} = \Theta_{r \rightarrow b}$ 表示各向相变率相同, 则有 $\sum_{\sigma,i} \Gamma_i^\sigma = \sum_{\sigma,i} \mathbf{e}_i \Gamma_i^\sigma = 0$ 。

使用 Chapman-Enskog 多尺度展开技术, 可得到宏观连续性方程和动量方程分别为

$$\partial \rho / \partial t + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (9a)$$

$$\partial \mathbf{u} / \partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = - \frac{\nabla p}{\rho} + \sum_{\sigma=1}^S x_\sigma \mathbf{g}_\sigma + \nu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (9b)$$

式中: $\rho = \sum_{\sigma=1}^S \rho_\sigma$ 为总密度; $x_\sigma = \rho_\sigma / \rho$; $p = \rho/3 + 3G_{\sigma\bar{\sigma}} \varphi(f^\sigma(\mathbf{x})) \varphi(f^{\bar{\sigma}}(\mathbf{x}))/2$ 为压力。

1.2 相变模型

在各向相变率同性的假设下, 将该模型应用在两相相变数值模拟中。在相变现象中能量方程和相变率都与温度和压力有关, 因此该模型只适合于饱和等温相变系统中, 相变仅与过热度和潜热有关, 为此相变率可定义为

$$\Theta = \Delta q / \Delta h \quad (10)$$

式中: Δq 为过热度; Δh 为潜热(在数值模拟中取值为 1.0)。在本文中, 分别考虑液化和蒸发过程, 通过求解式(7), 可求得液化和蒸发过程中的气相体积分随时间的变化过程分别为

$$V_{r,c} = e^{-\Theta_{r \rightarrow b} t} / (\gamma + (1 - \gamma) e^{-\Theta_{r \rightarrow b} t}) \quad (11a)$$

$$V_{r,v} = (1 - e^{-\Theta_{b \rightarrow r} t}) / (1 + (\gamma - 1) e^{-\Theta_{b \rightarrow r} t}) \quad (11b)$$

液化过程中液体和气体密度随时间的变化过程为

$$\rho_{b,c} = \rho_{r0} (\gamma + (1 - \gamma) e^{-\Theta_{r \rightarrow b} t}) / \gamma \quad (12a)$$

$$\rho_{r,c} = \rho_{r0} (\gamma + (1 - \gamma) e^{-\Theta_{r \rightarrow b} t}) \quad (12b)$$

蒸发过程中液体和气体密度随时间的变化过程为

$$\rho_{b,v} = \rho_{b0} (1 + (\gamma - 1) e^{-\Theta_{b \rightarrow r} t}) / \gamma \quad (13a)$$

$$\rho_{r,v} = \rho_{b0}(1 + (\gamma - 1)e^{-\Theta_{b \rightarrow r} t}) \quad (13b)$$

式中: γ 为气相和液相的密度比; ρ_{r0} 、 ρ_{b0} 分别表示气相和液相的初始密度. 液化和蒸发现象的介观相变方程分别为

$$f_i^b = f_i^{b0} + \theta_{i,r \rightarrow b} f_i^r; f_i^r = f_i^r - \theta_{i,r \rightarrow b} f_i^r \quad (14a)$$

$$f_i^b = f_i^{b0} - \theta_{i,b \rightarrow r} f_i^{b0}; f_i^r = f_i^r + \theta_{i,b \rightarrow r} f_i^{b0} \quad (14b)$$

式中: f_i^{b0} 、 f_i^r 是对应 f_i^b 、 f_i^r 前一时间步的分布函数.

2 均相相变数值模拟

根据 1.2 节的计算模型, 采用 128×128 网格分别对液化和蒸发过程进行模拟. 在液化过程中, $\Delta q = -0.002$, 初始时刻整个区域充满密度 $\rho_{r0} = 5.0$ 的气体; 在蒸发过程中, $\Delta q = 0.002$, 初始时刻整个区域充满密度 $\rho_{b0} = 10.0$ 的液体. 文中 γ 均取值 0.5, τ_b 、 τ_r 均取值 1.0, G 均取值 0.3. 四周均采用周期性边界条件, 为使方程演化, 给 Δq 一个 1% 的小扰动, 并迭代 1 000 个时间步, 其中一个时间步的结果如图 1、2 所示.

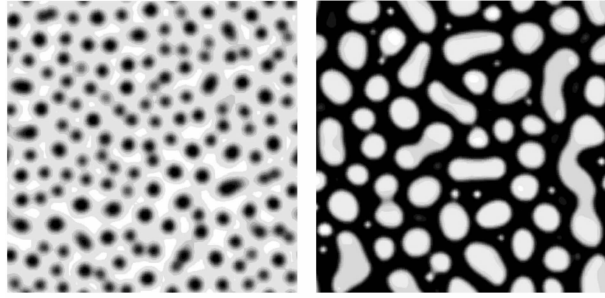
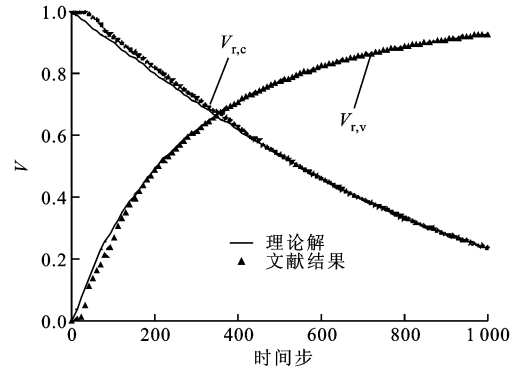


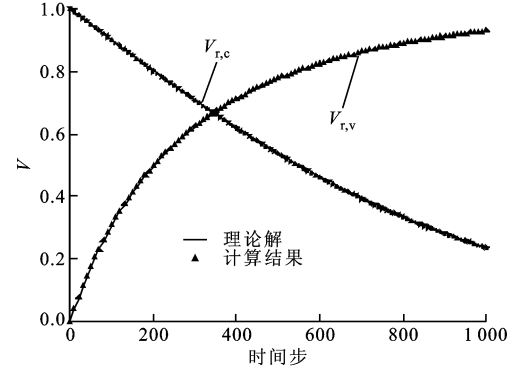
图 1 液化过程中迭代 800 步时的两相分布图 图 2 蒸发过程中迭代 600 步时的两相分布图

在图 1、2 中, 黑色代表气相聚集很少的区域, 白色表示气相聚集较多的区域, 可发现该模型能够清晰地捕捉到气液界面. 图 1 表示在液化过程中迭代 800 步时液相的分布图, 从图中可以看到在该时刻, 气相和液相已经出现了明显的分离现象, 并出现大小不一的小液滴, 说明液化后液滴伴有聚合过程. 图 2 表示蒸发过程中迭代 600 步时气相的分布图, 从图中可以看到在该时刻, 气相和液相已经出现了明显的分离现象, 并出现了大量的大小不一的气泡, 说明液体在蒸发的过程中, 气泡的长大是由相变和小气泡融合长大而成. 整个区域的空泡率随时间变化在不断增加.

图 3、4 分别给出了液化和蒸发过程中气相体积

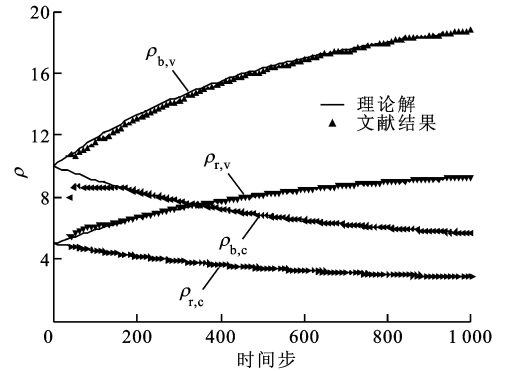


(a) 文献结果与理论解的对比

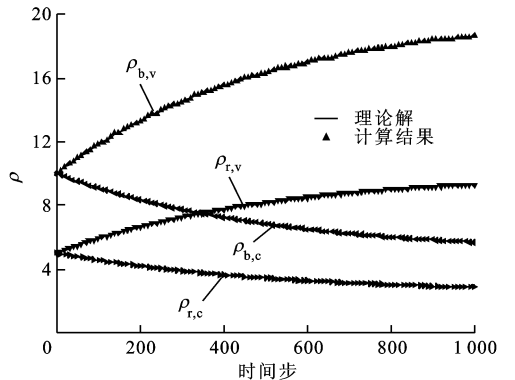


(b) 计算结果与理论解的对比

图 3 液化和蒸发过程中气相体积分数随时间的变化



(a) 文献结果与理论解的对比



(b) 计算结果与理论解的对比

图 4 液化和蒸发过程中液相和气相密度随时间的变化

分数、液相和气相密度随时间变化的数值计算结果及文献[5]结果分别与理论解的比较曲线. 该模型对液化过程的计算结果表明, 气相的体积分数、液相和气相的密度与理论解的最大相对误差分别为 1.18%、0.23%、0.32%, 文献[5]结果与理论解对应的最大相对误差分别为 3.80%、16.8%、0.32%. 同样, 蒸发过程的计算结果相应的最大相对误差分别为 0.85%、0.48%、0.20%, 而文献[5]结果与理论解对应的最大相对误差分别为 86.90%、3.30%、5.40%. 这说明该模型计算结果较文献[5]结果更接近理论解, 尤其是在计算的初始阶段, 文献[5]结果和理论解偏差较大, 而计算结果与理论解甚为一致.

3 沸腾现象的数值模拟

3.1 池内沸腾

由于沸腾传热过程非常复杂, 根据传热机理和数学模型很难得到严格的传热解析式, 研究其传热过程主要是采用半经验或纯经验关系式^[9]. 对池内沸腾的研究不仅对锅炉、蒸发器等传热设备的设计计算有实用意义, 并且还可以应用池内沸腾的研究结果去解释具有类似基本沸腾模式而实际复杂得多的流动沸腾现象. 为此, 利用本文提出的格子 Boltzmann 模型对池内沸腾进行探讨性研究具有十分重要的意义.

计算采用 200×200 网格, 初始时刻整个液池内

充满密度 $\rho_{b0} = 10.0$ 的液体, 左右采用周期性边界, 上下边界分别采用标准反弹和反弹边界. 为使方程演化, 给下壁面上的 Δq 施加一个 1% 的小扰动. 取 $\Delta q = 0.001$, $g_y = 0.0005$, $\tau_b = \tau_r = 1$, $G = 0.3$.

图 5 是池内沸腾过程中不同时刻的相分布图. 在模拟初始时刻, 受过热度扰动的影响, 在加热壁面附近产生很多小气泡, 气泡受相间作用力和浮力(由重力和相变引起)的影响开始上升. 随着迭代时间增加, 气泡受碰撞和聚合的影响表面出现变形, 其直径不断增大. 该现象和真正的池内沸腾现象十分相似, 但由于该模型并未考虑能量守恒方程, 因此这并不是一个实际的沸腾过程. 在后续的工作中将会把能量方程引入格子演化方程中进行求解.

3.2 垂直管道中的流动沸腾

垂直管道中的流动沸腾现象具有很强的实际工程应用背景. 气液两相介质在管道内的流动分布状态称为气液两相流型, 包括泡状流、弹状流、块状流、环状流和雾状流. 导致流型变化的原因是管道壁面受热, 壁面附近的流体相变, 从而产生气泡, 气泡受流体运动以及自身浮力的影响而不断变形、碰撞与聚合. 为进一步验证该模型处理复杂相变问题的可行性, 下面利用该模型来探讨垂直管道中的流动沸腾现象.

计算采用 100×800 网格, 上下采用周期性边界, 左右均采用标准反弹边界, 初始时刻整个液池内

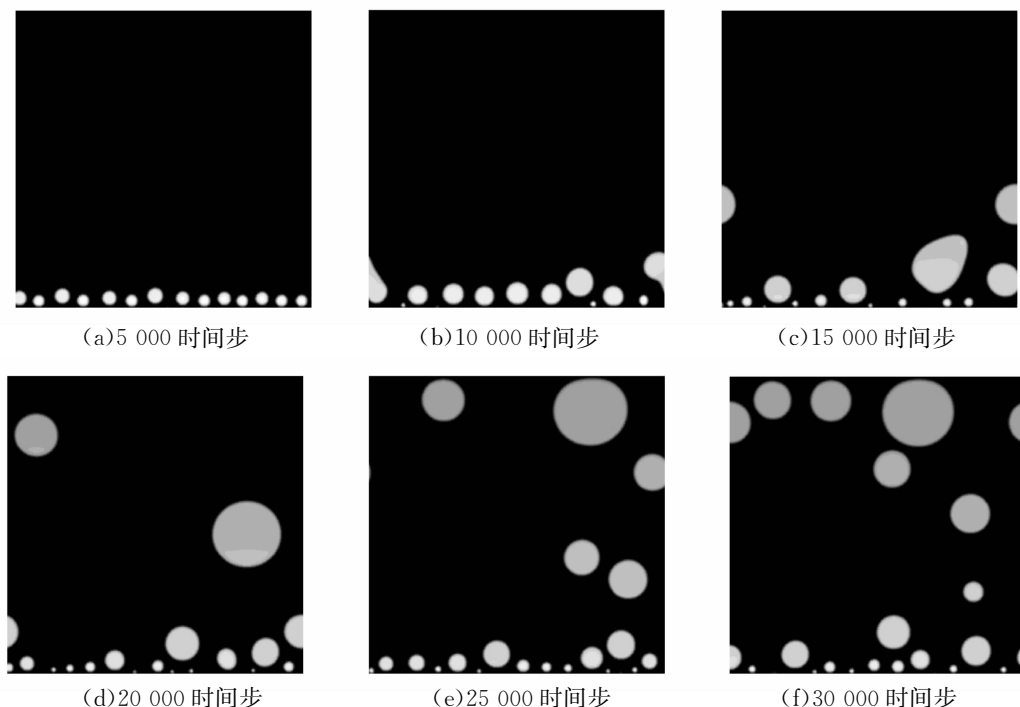


图 5 不同时刻的池内沸腾两相分布图

充满密度 $\rho_{b0}=10.0$ 的液体. 为使方程演化, 分别给左右壁面上的 Δq 施加一个 1% 的小扰动. 取 $g_y=0.000\ 05$, $G=0.3$, $\Delta q=0.1$, $\tau_b=\tau_r=1$.

图 6 是流动沸腾过程中不同时刻的相分布图. 在模拟初始阶段, 受过热度的影响, 左右侧面附近产生小气泡. 由于受流体流动及自身所受浮力的影响, 气泡不断上升和形变, 随着迭代时间增加, 气泡不断地碰撞和聚合, 其直径不断增大, 最后管道内气泡变成了椭圆形的块状流. 其流型经历了泡状流(见图 6a~6c)、弹状流(见图 6d、6e)、块状流(见图 6f). 整个模拟过程再现了两相流流型的变化过程, 考察了相变及气泡在液相中的碰撞、聚合和运动情况.

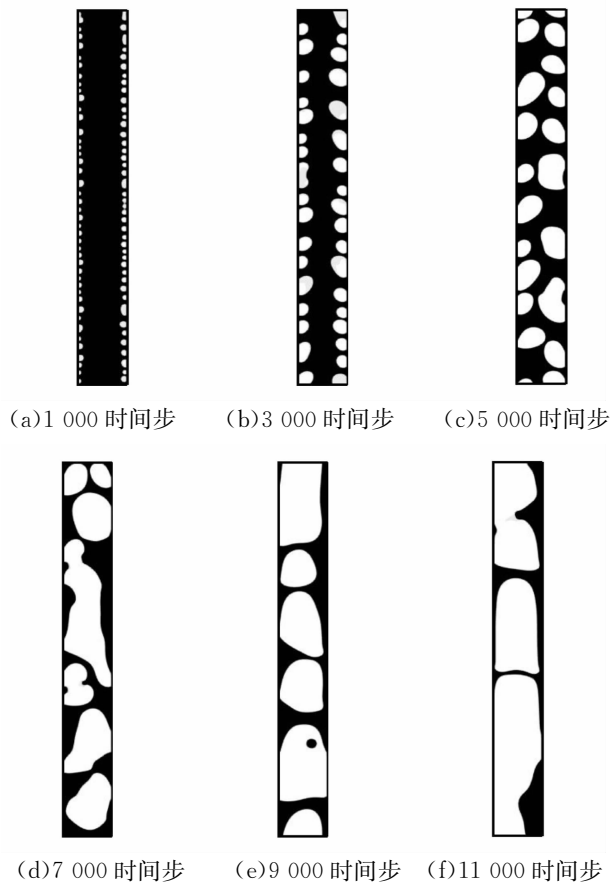


图 6 不同时刻竖直管道中的流动沸腾两相分布图

4 结果及讨论

(1) 本文采用 D2Q9 格子模型, 选取新的格林函数形式, 并考虑外力的存在而提出了一种新的格子 Boltzmann 相变模型, 该相变模型在对液化和蒸发现象的模拟中得到了验证.

(2) 为进一步探索该相变模型的适应能力, 将该相变模型应用在池内沸腾和垂直管道中的流动沸腾中, 可以观察到气泡随时间变化不断长大, 气泡受浮升力的影响脱离壁面以及气泡在液相中上升时发生的碰撞、聚合现象. 推广了模型的应用范围, 为模型的改进奠定了一定的基础.

(3) 该相变模型是在系统等温的前提条件下建立的, 因此并未考虑能量方程. 在进一步的工作中, 作者将结合能量方程提出更符合实际过程的算法, 使得格子 Boltzmann 相变模型能模拟符合实际的沸腾传热现象, 以探讨加热壁面气泡的脱离直径与脱离频率之间的关系.

参考文献:

- [1] GUNSTENSEN A K, ROTHMAN D H. A Galilean-invariant immiscible lattice gas [J]. *Physica: D*, 1991, 47(2): 53-63.
- [2] SHAN X W, GARY D. Multicomponent lattice Boltzmann model with interparticle interaction [J]. *Journal of Statistical Physics*, 1995, 81(1/2): 379-393.
- [3] MARTYS N, CHEN H D. Simulation of multicomponent fluids in complex three-dimensional geometries by the lattice Boltzmann method [J]. *Physical Review: E*, 1996, 53(1): 743-751.
- [4] SWIFT M, OSBORN W, YEOMANS J. Lattice Boltzmann simulations of nonideal fluids [J]. *Phys Rev Lett*, 1995, 75(5): 830-833.
- [5] KONO K, ISHIZUKA T, TSUDA H, et al. Application of lattice Boltzmann model to multiphase flows with phase transition [J]. *Computer Physics Communications*, 2000, 129(1/3): 110-120.
- [6] SHAN X W, GARY D. Diffusion in a multicomponent lattice Boltzmann equation model [J]. *Physical Review: E*, 1996, 54(4): 3614-3620.
- [7] SHAN X W, CHEN H D. Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase-transitions by the lattice Boltzmann equation [J]. *Physical Review: E*, 1994, 49(4): 2941-2948.
- [8] 郭照立, 郑楚光, 李青, 等. 流体动力学的格子 Boltzmann 方法 [M]. 武汉: 湖北科学技术出版社, 2002: 157-160.
- [9] 郭烈锦. 两相与多相流动力学 [M]. 西安: 西安交通大学出版社, 2002: 378-379.

(编辑 荆树蓉)