

# 格子 Boltzmann 方法在相变过程中的应用<sup>\*</sup>

曾建邦 李隆键<sup>†</sup> 廖 全 陈清华 崔文智 潘良明

(重庆大学动力工程学院 重庆 400030)

(2009 年 4 月 28 日收到, 2009 年 5 月 30 日收到修改稿)

提出了一种新的描述气液相变过程的单组分格子 Boltzmann 模型, 利用该模型模拟水以及氦分别在 R-K, RKS 和 P-R 状态方程控制下的相变过程, 发现相对于 R-K 和 RKS 状态方程, 水以及氦在 P-R 状态方程控制下模拟结果均与实验值更接近, 特别地, P-R 状态方程更适合描述氦. 为验证该模型处理两相问题的能力, 利用该模型模拟不同温度下水以及氦在 P-R 状态方程控制下的界面密度梯度, 所得的结果与经典的界面理论相符. 为此, 进一步探讨了气泡(液滴)与周围液体(气体)处于力平衡和热平衡时, 气泡(液滴)内外压力差在不同温度下与其半径之间的关系, 所得的结果满足 Laplace 定律, 并得到了不同温度下水以及氦的表面张力, 发现均与实验值符合得很好, 且与表面张力临界理论甚为相符.

关键词: 格子 Boltzmann 方法, 相变过程, Laplace 定律, 表面张力

PACC: 0570, 6400

## 1. 引 言

多相流以及相变流等涉及界面现象的问题, 在自然界以及工程实际中极为常见. 但传统的数值方法很难模拟其界面动力学行为, 因而无法刻画出其流动细节<sup>[1-4]</sup>. 作为介观尺度方法之一的格子 Boltzmann 方法(LBM)是近 20 几年来发展起来的一种流体系统建模和模拟新方法, 由于其介观背景使得流体内部的相互作用在 LBM 中可以方便地描述, 以及自动追踪相界面, 因而在多相流, 相变流和界面动力学等微观相互作用明显的流体系统方面得到了成功的应用<sup>[5, 6]</sup>. 但建模时需选取能准确地描述气液两相的状态方程, 并将其以简单和有效的方式引入到格子 Boltzmann 模型中, 使得模拟结果更加真实可靠, 且温度变化范围更广, 密度比更大.

在描述相变问题的单组分多相格子 Boltzmann 模型发展中, 主要有以下三种常见的模型: 1993 年 Shan 和 Chen<sup>[7]</sup>基于场均理论提出的伪势模型, 该模型在引入状态方程时需对有效密度进行特殊处理<sup>[8, 9]</sup>, 以确保其根号内表达式严格为正; 同年 Swift 等人<sup>[10]</sup>基于自由能泛函提出的自由能模型, 该模型

确保相界面厚度为一定值, 且表面张力与温度的关系与实际不符, 2003 年 Zhang 等人<sup>[11]</sup>基于系统每个节点上的体积力都源于粒子间相互作用势的思想而建立的模型, 该模型巧妙地避开了有效密度及其梯度的计算, 且状态方程可任意选取, 但由于该模型未对速度进行修正, 导致伪速度过大, 从而影响模型的稳定性. 本文基于 Zhang 等人的思想, 利用其定义的粒子间相互作用势来刻画相变过程, 并引进了由 Kupershtokh 等人<sup>[12, 13]</sup>提出的精确差分方法(EMD)来计算体积力而建立一种新的单组分格子 Boltzmann 模型, 该模型对速度进行了修正, 因而其温度取值范围和密度比, 较上述模型均具有较大的改进.

目前格子 Boltzmann 相变模型大都是基于理论研究, 具体结合实际物质相变过程的研究文献非常少. 为此, 本文探索性地利用该模型模拟水以及氦分别在 Redlich-Kwong(R-K), Redlich-Kwong Soave(RKS)和 Peng-Robinson(P-R)状态方程控制下的相变过程, 发现水以及氦在 P-R 状态方程控制下模拟结果均与其实验值更接近, 且 P-R 状态方程更适合描述氦. 为验证该模型处理两相问题的能力, 利用该模型模拟不同温度下水以及氦的界面密度梯度, 模拟结果与经典的界面理论相符. 为此, 本文进一步探讨了气泡

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号 50406012)和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(批准号 9140C710901090C71 和 9140C7101020802).

<sup>†</sup> E-mail: longjian@cqu.edu.cn

(液滴)与周围液体(气体)处于力平衡和热平衡的情况下,气泡(液滴)内外压力差在不同温度下与其半径的关系,所得的结果满足 Laplace 定律,得到了水以及氩在不同温度下的表面张力,发现均与实验值符合得很好,且与表面张力的临界理论甚为相符.本文所得结果具有重要的理论和工程价值.理论上本文提出的模型发展了格子 Boltzmann 多相模型,改进了模型的稳定性和适用性;工程上,通过对现有不同理论状态方程的评价,得到了较为理想地描述水以及氩的状态方程,模拟水以及氩在该状态方程控制下不同温度下的界面密度梯度和气泡(液滴)的内外压力差与半径的关系,得到了水以及氩在不同温度下的表面张力.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.

## 2. 基本模型

### 2.1. 格子 Boltzmann 模型

单组分多相格子 Boltzmann 方程为<sup>[11]</sup>

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

式中  $\tau$  为无量纲松弛时间,与物质的黏性  $\nu$  相关<sup>[14]</sup>,即  $\nu = (2\tau - 1)c\Delta x/6$ ;  $c = \Delta x/\Delta t$  为粒子迁移速率;  $\Delta f_i(\mathbf{x}, t)$  为体积力项;  $f_i(\mathbf{x}, t)$ 、 $f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)$  分别是  $t$  时刻,位置  $\mathbf{x}$  处的粒子分布函数和平衡态粒子分布函数,在 D2Q9 模型中,平衡态粒子分布函数为

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

式中权重系数为  $w_0 = 4/9$ ,  $w_i = 1/9$ ,  $i = 1 \dots 4$ ,  $w_i = 1/36$ ,  $i = 5 \dots 8$ , 宏观密度和速度分别为

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^8 f_i(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^8 f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t),$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \left( \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i f_i(\mathbf{x}, t) \right) / \rho(\mathbf{x}, t). \quad (3)$$

为使两相分离,必须考虑不同相之间的相互作用力, Zhang 等<sup>[11]</sup>通过利用状态方程求取粒子间的相互作用力

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = -\nabla U(\mathbf{x}, t), \quad (4)$$

式中势函数  $U(\mathbf{x}, t)$  与选取的状态方程有关,取如下形式:

$$U(\mathbf{x}, t) = p(\rho(\mathbf{x}, t), T(\mathbf{x}, t)) - \rho(\mathbf{x}, t)RT_0, \quad (5)$$

式中  $T_0$  与选取的格子模型有关,在 D2Q9 模型中  $T_0$

$= 1/3$ ;  $R$  为通用气体常数;  $p$  为任意状态方程.定义粒子间的相互作用势为  $\varphi(\mathbf{x}, t)$ ,且有  $\varphi^2(\mathbf{x}, t) = |U(\mathbf{x}, t)|$ .故粒子间的相互作用力

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = 2\varphi(\mathbf{x}, t)\nabla\varphi(\mathbf{x}, t), \quad (6)$$

对上式梯度项的离散可采用六点格式,详见文献[5].

利用 LBM 模拟多相流时,如何将体积力引入格子 Boltzmann 模型中直接关系到模型的稳定性.为此,许多学者投入了大量的精力来研究该问题<sup>[7-14]</sup>,以期避免由体积力的引入而引起模型的不稳定性.因而本文引进了由 Kupershtokh 等人<sup>[12,13]</sup>提出的精确差分方法(EMD)来计算体积力

$$\Delta f_i(\mathbf{x}, t) = f_i^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \Delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) - f_i^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)), \quad (7)$$

式中速度改变量  $\Delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  可通过下式求得:

$$\Delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \Delta M / \rho = \mathbf{F}(\mathbf{x}, t) \Delta t / \rho, \quad (8)$$

式中  $\Delta M$  为每个时间步内的动量改变量.在特定的  $t$  时刻(7)式和(8)式中密度  $\rho$  在计算区域内特定的位置  $\mathbf{x}$  处均为一定值,而流体的真实速度可通过下式计算:

$$\rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{F}(\mathbf{x}, t)\Delta t/2 + \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i f_i(\mathbf{x}, t). \quad (9)$$

相比较 Zhang 等人提出的模型,该模型改变了求体积力的方式,使得模型求解更加简单,且对速度进行了修正,因而减小了伪速度,提高了模型的稳定性,使得模型的应用范围更加广泛.

### 2.2. 引入状态方程

(5)式中压力  $p$  在本文中选取 R-K, RKS 和 P-R 状态方程,分别为

R-K 状态方程:

$$p = \rho RT(1 - b\rho) - a\rho^2 \sqrt{T}(1 + b\rho), \quad (10)$$

方程系数与临界参数之间的关系为

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

RKS 状态方程:

$$p = \rho RT(1 - b\rho) - a\alpha(T)\rho^2(1 + b\rho), \quad (11)$$

式中  $\alpha(T) = [1 + (0.480 + 1.574\omega - 0.176\omega^2)(1 - \sqrt{T/T_c})]^2$ ,  $\omega$  为偏心因子,与工质本身有关.方程系数与临界参数之间的关系为

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

P-R 状态方程:

$$p = \rho RT(1 - b\rho) - a\alpha(T)\rho^2$$

$$\chi(1 + 2b\rho - (b\rho)^2), \quad (12)$$

式中  $\alpha(T) = [1 + (0.375 + 1.542\omega - 0.270\omega^2)\chi(1 - \sqrt{T/T_c})]^2$ ,  $\omega$  仍为偏心因子, 与工质本身有关. 方程系数与临界参数之间的关系为

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

可通过如下关系式将格子单位转化成实际物理单位:

$$\begin{aligned} p^{lu}/p_c^{lu} &= p^{real}/p_c^{real}, \\ T^{lu}/T_c^{lu} &= T^{real}/T_c^{real}, \\ \rho^{lu}/\rho_c^{lu} &= \rho^{real}/\rho_c^{real}, \end{aligned} \quad (13)$$

式中上标“lu”和“real”分别表示格子单位和实际物理单位. 上式中对于水在实际物理单位下的临界参数取值为: 压力 22.064 MPa, 温度 373.99°C, 密度 321.9575 kg·m<sup>-3</sup>; 而对于氨在实际物理单位下的临界参数分别为: 压力 11.3332 MPa, 温度 132.3°C, 密度 234.8797 kg·m<sup>-3</sup>. 本文在计算时采用格子单位, 然后将计算结果通过上式转化成实际物理单位.

### 3. 模型的应用

本文的计算区域均取 66.7 nm × 66.7 nm, 采用 200 × 200 的计算网格, 每个网格宽度记为 1 lu (格子单位), 所以有 1 lu = 0.33 nm. 在格子单位下状态方程中各参数取值为  $R = 1.0$ ;  $a = 2/49$ ;  $b = 2/21$ <sup>[8]</sup>, 水以及氨的偏心因子分别为  $\omega_{水} = 0.344$ ,  $\omega_{氨} = 0.256$ .

#### 3.1. 相变过程的模拟

根据 2.1 节的计算模型, 并将 2.2 节中的状态方程引入到计算模型中, 模拟水以及氨在不同状态方程控制下的相变过程. 根据状态方程参数与临界

参数的关系, 可求各个状态方程在格子单位下的临界参数: R-K 状态方程的为: 温度 0.1961, 压力 0.1784, 密度 2.988; RKS 状态方程的为: 温度 0.0869, 压力 0.079, 密度 2.404; P-R 状态方程的为: 温度 0.0729, 压力 0.0596, 密度 2.995. 模拟时, 松弛时间均取值 1.0, 四周采用周期性边界条件; 为使方程演化, 均给初始密度一个 1% 的小扰动.

图 1 给出了水分别在 R-K, RKS 和 P-R 状态方程控制下的饱和密度曲线与实验值<sup>[15]</sup>的对比. 可看出 RKS 和 P-R 状态方程的温度取值范围相差不大, 约为 [90°C, 373.99°C], 而 R-K 状态方程的温度取值范围小很多, 约为 [140°C, 373.99°C]. 在可取的温度范围内, 相对于 R-K, RKS 状态方程, 水在 P-R 状态方程控制下的饱和密度曲线与实验值更为接近, 尤其是在气相分支端基本与实验值一致. 在液相分支端, 水在 P-R 状态方程控制下的饱和密度曲线与实验值的最大相对误差仅为 18.07% (在临界温度附近), 且随着温度的降低模拟结果不断靠近实验值, 相对误差减小, 而 R-K 和 RKS 状态方程的最大相对误差分别为 21.88%、21.62%, 且随着温度升高 RKS 状态方程模拟的结果越偏离实验值.

图 2 给出了氨分别在 R-K, RKS 和 P-R 状态方程控制下的饱和密度曲线与实验值<sup>[16]</sup>的对比. 可看出 RKS 和 P-R 状态方程的温度取值范围相差不大, 约为 [-30°C, 132.3°C], 而 R-K 状态方程的温度取值范围小很多, 约为 [-5°C, 132.3°C]. 在可取的温度范围内, 相对于 R-K, RKS 状态方程, 氨在 P-R 状态方程控制下的饱和密度曲线与实验值更为接近, 尤其是在气相分支端基本与实验值一致. 在液相分支端, 氨在 P-R 状态方程控制下的饱和密度曲线与实验值的最大相对误差仅为 13.59% (在临界温度

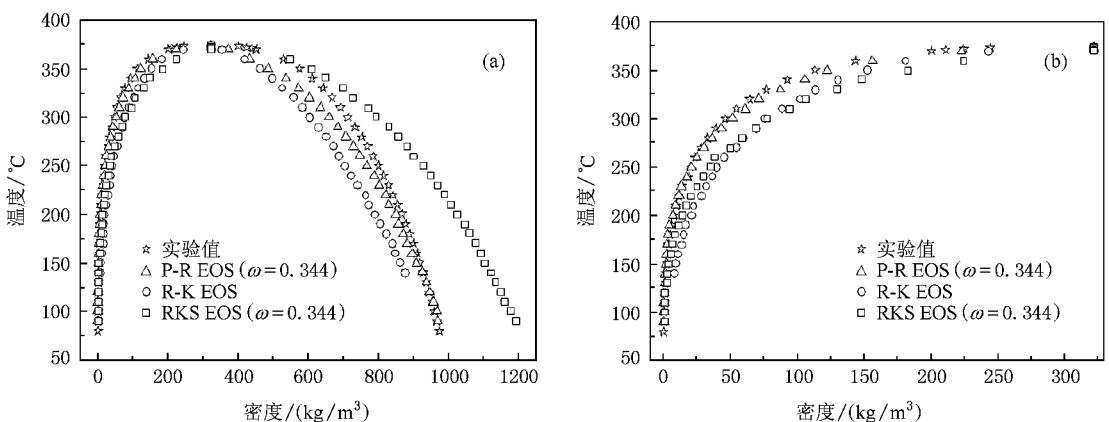


图 1 水在不同状态方程控制下的饱和密度曲线与实验值的对比 (a) 气相和液相分支 (b) 气相分支

附近) ,且随着温度的降低模拟结果不断靠近实验值 ,而 R-K 和 RKS 状态方程的最大相对误差分别为

16.24% 22.76% ,且随着温度升高 RKS 状态方程模拟的结果越来越偏离实验值 .

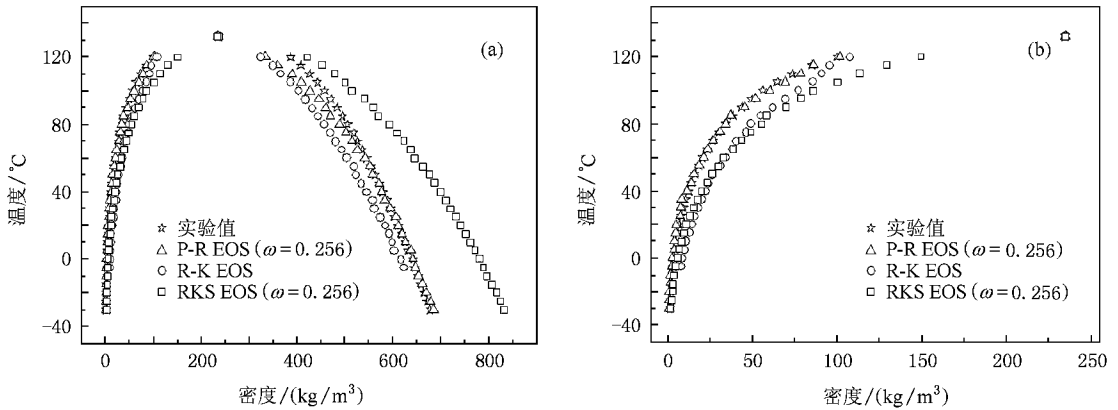


图 2 氨在不同状态方程控制下的饱和密度曲线与实验值的对比 ( a) 汽相和液相分支 ( b) 汽相分支

表 1 水以及氨在不同温度下的饱和分离密度与实验值<sup>[15,16]</sup>的比较

温度/℃	水				温度/℃	氨			
	$\rho_{liquid} / (kg/m^3)$		$\rho_{vapor} / (kg/m^3)$			$\rho_{liquid} / (kg/m^3)$		$\rho_{vapor} / (kg/m^3)$	
	模拟值	实验值	模拟值	实验值		模拟值	实验值	模拟值	实验值
373.99	321.9575	321.9575	321.9575	321.9575	132.3	234.8797	235.0176	234.8797	234.7418
370	371.7615	451.5080	223.2031	200.7260	120	333.7485	386.2495	101.7110	99.7009
360	432.5303	527.9190	156.4746	143.7195	115	360.2478	407.8303	85.9414	84.8896
350	485.484	574.6862	122.4191	113.7195	110	389.0478	426.0758	78.4328	73.3676
340	535.9652	610.7691	105.9289	92.6784	105	409.3151	442.2822	69.4585	64.6831
330	572.0954	640.9928	87.6004	77.0001	100	426.7198	457.0384	60.2491	56.0538
320	602.9581	667.3607	71.5724	64.6037	95	444.6188	470.3669	51.8078	49.3097
310	632.8857	690.9513	61.4546	54.5167	90	460.3206	482.8585	45.4435	43.4783
300	659.1153	712.4080	51.6852	46.1489	85	469.8076	494.5598	36.9709	38.3730
290	683.3131	732.1609	43.4508	39.1160	80	488.2952	505.5612	34.0317	33.8868
280	705.7695	750.5141	36.4419	33.1510	75	501.7920	517.8664	30.7006	29.9312
270	726.6887	767.6836	30.4650	28.0607	70	514.1196	526.3158	26.8366	26.4061
260	746.2534	783.8281	25.3481	23.6995	65	525.7803	535.9057	23.4820	23.2775
250	764.6356	799.0731	20.9729	19.9553	60	541.0348	545.2563	20.9661	20.4918
240	787.3832	813.5240	17.5975	18.9599	55	551.6047	554.3237	18.2307	18.0018
230	801.2818	827.2530	13.5770	13.9757	50	557.6469	562.7462	15.3774	15.7803
220	819.4598	840.3361	11.6098	11.6067	45	571.3321	571.4286	13.5437	13.4626
210	828.5971	852.8203	9.0836	9.5804	40	576.6445	579.7101	11.3726	12.0294
200	848.8821	864.7452	7.3421	7.8542	35	582.3101	587.5441	8.1983	10.4526
190	855.9447	876.1478	4.5579	6.3898	30	594.6455	595.2381	7.6810	9.0506
180	868.7155	887.0596	3.4722	5.1538	25	606.5337	603.1363	7.0775	7.8046
170	881.2928	897.5049	2.6445	4.1181	20	610.7867	610.5006	4.8202	6.7015
160	895.4718	907.4987	2.4402	3.2564	15	618.6573	617.6652	4.4048	5.7267
150	907.3504	917.0442	1.7845	2.5454	10	626.2454	625.0000	3.9816	4.8771
140	924.6254	926.1660	1.4835	1.9646	5	637.4038	631.7119	3.3546	4.1154
130	935.5356	934.1204	1.1072	1.4954	0	641.3430	642.6735	2.6335	3.4578
120	944.4696	943.1204	0.61274	1.1208	-5	647.6128	645.1613	2.2181	2.8862
110	955.4774	950.9681	0.5482	0.8260	-10	653.8747	651.8905	1.3324	2.3919
100	965.1738	958.3685	0.4730	0.5975	-15	661.1567	658.3278	1.3167	1.9670
90	967.7967	965.3162	0.1720	0.4234	-20	668.6584	664.8936	1.0003	1.6043
80	—	971.7890	—	0.2934	-25	678.4122	671.1409	0.9013	1.2967
70	—	977.7645	—	0.1982	-30	684.6035	677.5068	0.7132	1.0380

综合图 1,2,发现水以及氨在 P-R 状态方程的控制下模拟结果均与实验值更接近,为此表 1 给出了水以及氨在 P-R 状态方程控制下的模拟结果与实验值的对比,可发现在气相分支端模拟结果与实验值均相差不大,而在液相分支端,模拟结果与实验结果均稍有偏差,尤其是在临界温度附近,模拟结果与实验值偏差稍大,但模拟氨时的最大相对误差仅为 13.59%,比模拟水时的最大相对误差(18.07%)小很多,因此 P-R 状态方程更适合描述氨的相变过程.但该模型还存在一定的局限性,即对于水的温度低于 90℃和氨的温度低于 -30℃时计算均不稳定,因此数值稳定性是需要面对的问题.

### 3.2. 界面现象的模拟

#### 3.2.1. 界面密度梯度

通过上述分析发现 P-R 状态方程比 R-K 和 RKS 状态方程更适合描述水以及氨,为此,本文利用 2.1 节的计算模型模拟不同温度下水以及氨在 P-R 状态方程控制下的界面密度梯度.模拟时在计算区域的中心给定一个半径为 30 lu(格子单位)的气泡(液

滴),气泡(液滴)周围均为该温度下的饱和液体(气体).四周采用周期性边界条件,松弛时间均取值为 1.0,初始密度均为对应温度下的饱和分离密度,可从表 1 或图 1,2 中获得.各经过 50000 个迭代时间步,前后两个时间步的速度相对误差均小于  $10^{-6}$ ,各参数的模拟结果均达到稳定状态.图 3 给出了水以及氨在 140℃,240℃,340℃时的界面密度梯度,从图中可看出,随着温度的升高,界面密度梯度越小,界面厚度越厚,反之,界面密度梯度越大,界面厚度越薄.通过进一步观察,在工质相同的情况下,还可以发现如果温度相同,不管是气泡在液相中,还是液滴在气相中,当计算达到稳定时,其气相与气相的密度值,液相与液相的密度值几乎一致;且温度越低,液相与气相的密度比越大,这与图 1,2 以及表 1 所显示的结果一致,且与经典的界面理论完全相符.

#### 3.2.2. Laplace 定律的验证

当气泡(液滴)与周围液体(气体)处于力平衡和热平衡的条件下,由于表面张力的作用,气泡(液滴)内的压力  $p_{in}$  必大于气泡(液滴)外的压力  $p_{out}$ .根据力平衡条件,气泡(液滴)内外压力差应被作用于气

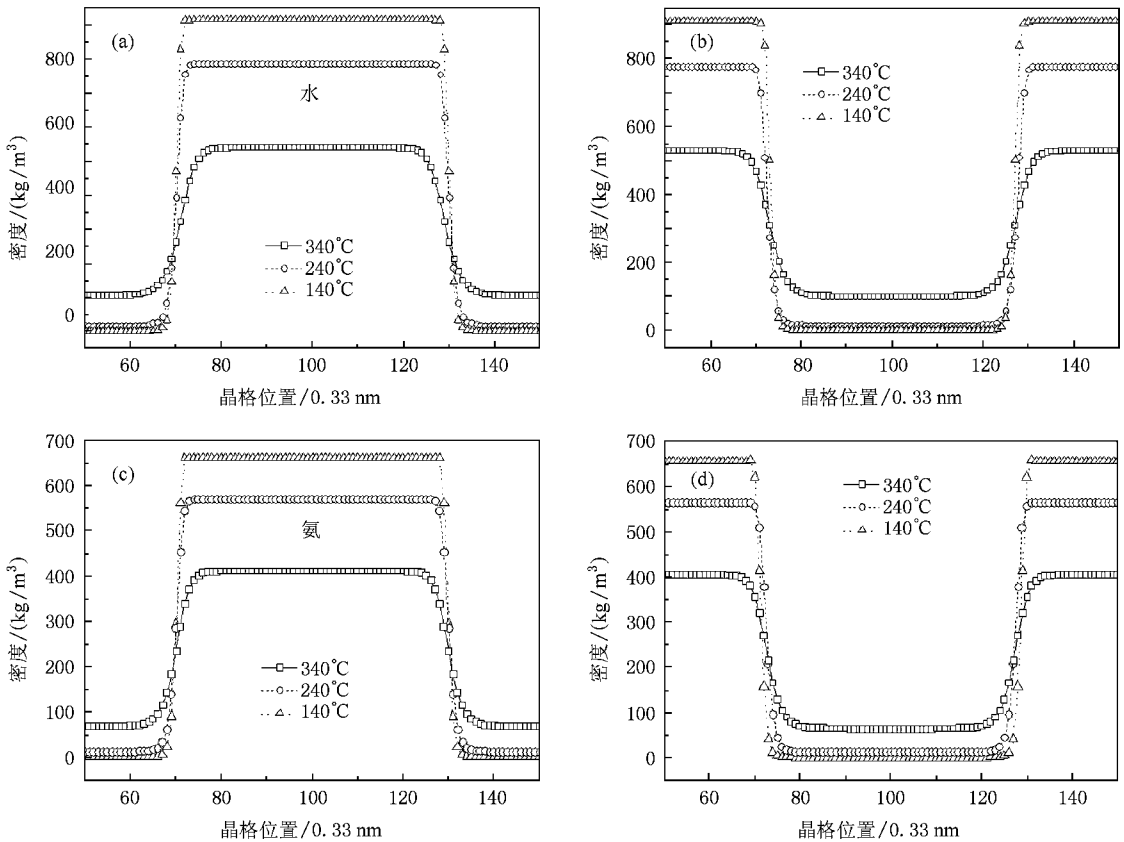


图 3 不同温度下水(氨)的界面密度梯度的对比 (a)液滴在水蒸气内 (b)气泡在水内 (c)氨液滴在氨蒸气内 (d)氨气泡在氨液体

液界面上的表面张力所平衡, 即 Laplace 定律<sup>[17]</sup>

$$\Delta p = p_{in} - p_{out} = \sigma/R. \quad (14)$$

模拟时在计算区域的中心分别给定一个半径为 30 lu, 40 lu, 50 lu 和 60 lu (格子单位) 的气泡(液滴), 气泡(液滴)周围均为该温度下的饱和液体(气体), 且均在 P-R 状态方程控制下. 四周采用周期性边界条件, 松弛时间为 1.0; 初始密度均为对应温度下的饱和分离密度, 可从表 1 或图 1, 2 中获得. 各经过 50000 个迭代时间步, 前后两个时间步的速度相对误差均小于  $10^{-6}$ , 计算均达到稳定状态. 图 4(a), (b) 给出了工质为水的气泡(液滴)处于水(蒸汽)中的内外压力差在不同温度下与半径之间的关系, 可看出气泡(液滴)内外压力差  $\Delta p$  与气泡(液滴)的半径成反比关系, 且在不同温度下直线的斜率不一样, 温度越高, 斜率越小. 图 4(c), (d) 给出了工质为氨的气泡(液滴)处于水(蒸汽)中的内外压力差在不同温度下与半径之间的关系, 其结果与水类似. 因此 Laplace 定律得到了验证. 通过进一步的观察还可以发现, 计算稳定后气泡(液滴)的半径与初始时刻给定的气泡(液滴)的半径并不相等, 且初始密度(图

1, 2 或表 1) 与稳定后对应区域的密度也稍有不同, 这主要是因为, 初始时刻气泡(液滴)并没有界面, 而经过演化后, 气泡(液滴)周围产生界面, 从而需对整个区域的密度分布进行调整.

### 3.2.3. 表面张力

通过上述分析得到了工质分别为水以及氨的气泡(液滴)内外压力差在不同温度下与半径之间均呈线性关系, 直线的斜率表征为表面张力  $\sigma$ . 将(14)式改写成如下形式就可获得表面张力:

$$\sigma = \Delta p \times R, \quad (15)$$

因而可获得水以及氨在不同温度下的表面张力.

图 5(a) 给出了工质为水的气泡(液滴)的表面张力随温度的变化关系与实验值<sup>[15]</sup>的对比, 从图中可以发现, 在本文所给定的假设条件下, 气泡和液滴的表面张力在温度相同的情况下基本一致, 且均与实验值符合得很好. 图 5(b) 给出了工质为氨的气泡(液滴)的在不同温度下的表面张力, 并与如下经验关系式所求得的结果<sup>[18]</sup>对比, 该关系式是根据实验数据拟合得到.

$$\sigma = \sigma_{20} [(T_c - T)(T_c - 20)]^{-2}, \quad (16)$$

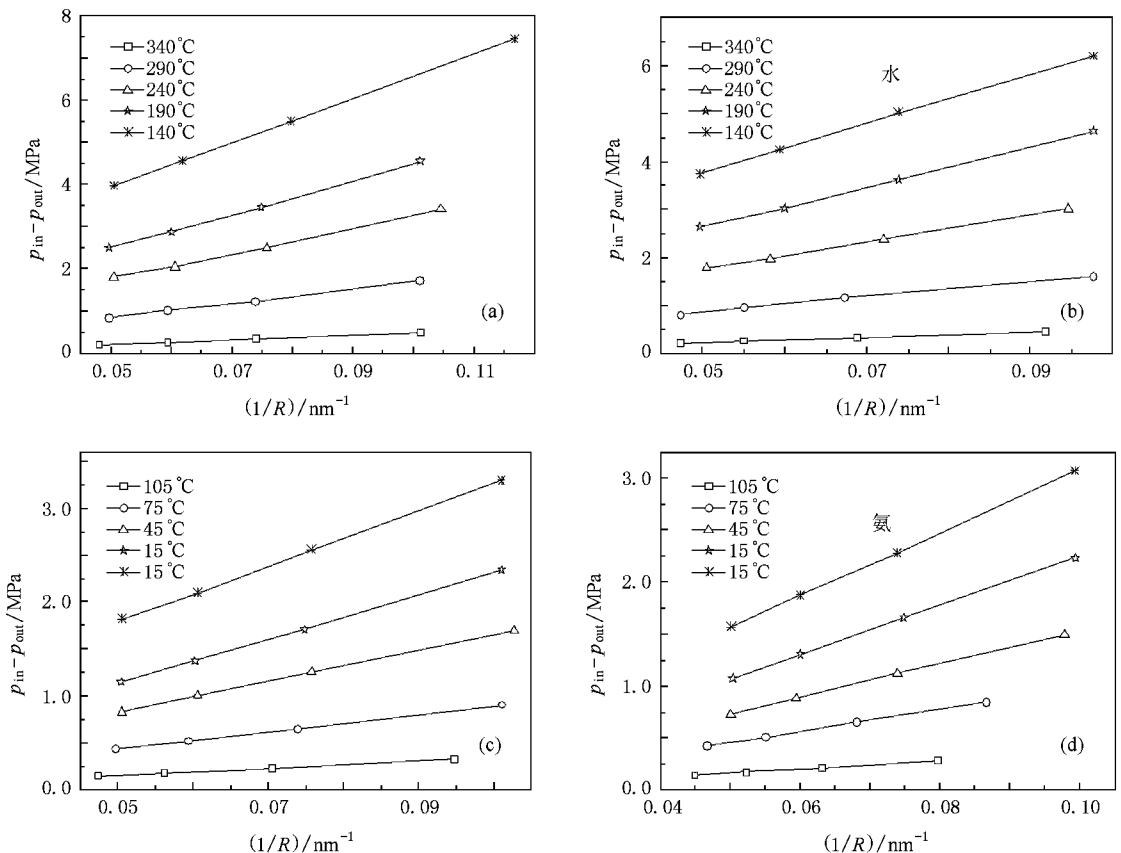


图 4 不同温度下气泡(液滴)内外压力差随半径变化的对比曲线 (a) 气泡在水内 (b) 液滴在水蒸气内 (c) 氨气泡在氨液体内; (d) 氨液滴在氨蒸气内

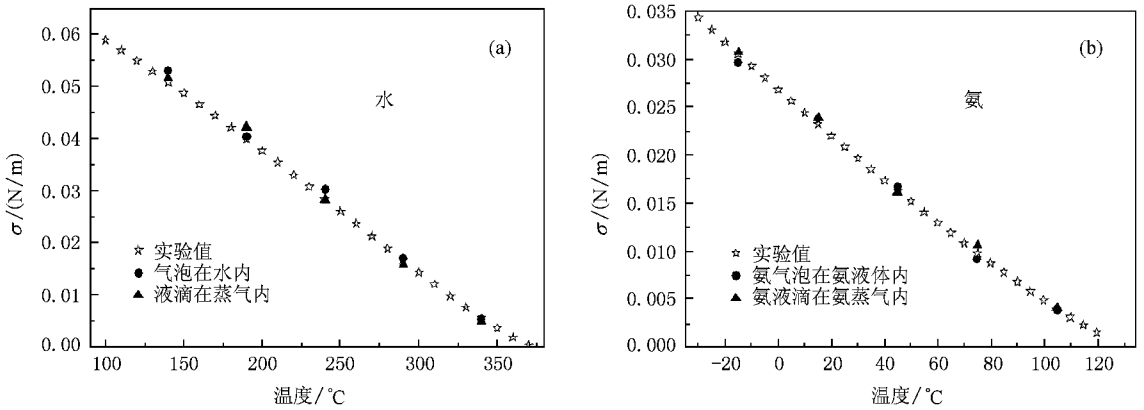


图5 表面张力在不同温度下的计算结果与实验值的对比 (a)水的表面张力与实验值的对比 (b)氨的表面张力与实验值的对比

该关系式是根据实验数据拟合得到,式中 $\sigma_{20}$ 表示20℃时的表面张力, $\sigma_{20} = 0.02203 \text{ N/m}$ ;  $T_c$ 为临界温度,温度为 $T$ ;从图中可以发现,气泡和液滴的表面张力在温度相同的情况下其值基本相同,且均与根据实验值拟合得到的经验关系式求得的结果符合得很好.综合图5(a)(b),可发现不管是水还是氨的表面张力,随着温度的升高,其值越小,当温度趋于与临界温度时其值均趋于零,这与表面张力的临界理论甚为相符.

## 4. 结 论

本文基于Zhang等人的思想,结合Kupershtokh等人提出的精确差分方法(EMD)计算体积力而建立了一种新的描述气液相变过程的单组分格子Boltzmann模型,该模型对速度进行了修正,因而其稳定性好,适用性更广.另外,本文还建立了格子单位与真实物理单位之间的对应关系,并从介观尺度模拟了水以及氨在不同状态方程控制下的相变过

程.评价了各状态方程优劣性,发现对于水以及氨这两种工质,P-R状态方程的模拟结果更为接近于其实验值,特别地,P-R状态方程模拟结果与氨的实验值更加接近.为验证该模型处理两相问题的能力,利用该模型模拟不同温度下水以及氨在P-R状态方程控制下的界面密度梯度,所得的结果与经典的界面理论相符,为此,本文还模拟工质分别为水以及氨的气泡(液滴)的内外压力差在不同温度下与其半径之间的关系,得到水以及氨在不同温度下的表面张力,且均与实验值甚为符合.

总的来说,本文提出的格子Boltzmann相变模型,发展了多相格子Boltzmann理论,在两相格子Boltzmann模型这个前沿领域迈进了一步,同时对水以及氨的模拟结果,具有重要的工程价值,将格子Boltzmann相变模型成功运用到实际物质的模拟中,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.但该模型也具有一定的局限性,即对于工质温度较低的相变过程而言,数值稳定性将是需要面对的问题.

[1] Guo Z L, Zheng C G, Li Q, Wang N C 2002 *Lattice Boltzmann Method of Hydrodynamics* (Wuhan: Hubei Technology Press) p157 (in Chinese) [郭照立、郑楚光、李青、王能超 2002 流体动力学的格子Boltzmann方法(武汉:湖北科学技术出版社)第157页]

[2] Liu C F, Ni Y S 2008 *Chin. Phys.* **17** 4554

[3] Feng S D, Tsutahara M, Ji Z Z 2001 *Chin. Phys. B* **10** 587

[4] Feng S D, Zhong H L, Gao S T, Dong P 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1238 (in Chinese) [冯士德、钟霖浩、高守亭、董萍 2007 物理学报 **56** 1238]

[5] Guo Z L, Zheng C G 2008 *Theory and Applications of Lattice Boltzmann Method* (Beijing: Science Press) p76 (in Chinese) [郭照立、郑楚光 2008 格子Boltzmann方法的原理及应用(北京:科学出版社)第76页]

[6] Zeng J B, Li L J, Liao Q, Cui W Z, Chen Q H, Pan L M 2009 *Journal of Xi'an Jiao Tong University* **43** 28 (in Chinese) [曾建邦、李隆键、廖全、崔文智、陈清华、潘良明 2009 西安交通大学学报 **43** 28]

[7] Shan X W, Chen H D 1993 *Phys. Rev. E* **47** 1815

[8] Yuan P, Schaefer L 2006 *Phys. Fluids* **18** 1

- [ 9 ] Qin R S 2006 *Phys. Rev. E* **73** 1
- [ 10 ] Swift M R ,Orlandini E ,Osborn W R , Yeomans J M 1996 *Phys. Rev. E* **54** 5041
- [ 11 ] Zhang R Y ,Chen H D 2003 *Phys. Rev. E* **67** 1
- [ 12 ] Kupershtokh A L 2004 *Proceedings of the 5th International EHD Workshop Poitiers-France* 241
- [ 13 ] Kupershtokh A L ,Medvedev D A 2006 *Journal of Electrostatics* **64** 581
- [ 14 ] Fang H P ,Wan R Z ,Fan L W 2000 *Chin. Phys.* **9** 515
- [ 15 ] Yu P A ,Zhu R A ,Yu Z W , Shen X Z 2002 *Reactor Thermal-Hydraulic Analysis* 2002 ( Shanghai :Shanghai Jiaotong University Press )p257 ( in Chinese ) [ 于平安、朱瑞安、喻真焯、沈秀中 2002 核反应堆热工分析(上海 :上海交通大学出版社)第 257 页 ]
- [ 16 ] Shen W D ,Jiang Z M ,Tong J G 2001 *Engineering Thermodynamics* ( Beijing :Higher Education Press ) p413 ( in Chinese ) [ 沈维道、蒋智敏、童均耕 2001 工程热力学(北京 :高等教育出版社)第 413 页 ]
- [ 17 ] Yang S M ,Tao W Q 1998 *Heat Transfer* ( Beijing :Higher Education Press ) p218 ( in Chinese ) [ 杨世铭、陶文铨 1998 热力学(北京 :高等教育出版社)第 218 页 ]
- [ 18 ] Wu Y Z ,Zhu R Q ,Li X Z , Li Y Z , Li J M 2004 *Technology Theory of Refrigeration and Cryogenic* ( Beijing :Higher Education Press ) p215 ( in Chinese ) [ 吴业正、朱瑞琪、李新中、厉彦中、李俊明 2004 制冷与低温技术原理(北京 :高等教育出版社)第 215 页 ]

## Application of lattice Boltzmann method to phase transition process \*

Zeng Jian-Bang Li Long-Jian<sup>†</sup> Liao Quan Chen Qing-Hua Cui Wen-Zhi Pan Liang-Ming

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

( Received 28 April 2009 ; revised manuscript received 30 May 2009 )

### Abstract

In this paper ,a new single-component lattice Boltzmann method is proposed to describe liquid-vapor phase transition process . Water and ammonia phase transition process are simulated by using this new model for Redlich-Kwong ,Redlich-Kwong Soave and Peng-Robinson equations of state . Compared with the experimental data of water and ammonia ,the results show that the Peng-Robinson equation of state is more suitable to describe the phase transitions process of water ,ammonia and other substance . In particularly ,the simulation results of ammonia with Peng-Robinson equation of state are more close to the experimental data . In order to demonstrate the capability of this model for dealing with two-phase problems ,the mass density profile across the interface of water or ammonia which is controlled by Peng-Robinson equation of state are simulated by this model for different temperatures . These simulation results agree with that of classical interface theory . Finally ,the relationship between the bubble ( droplet ) inside and outside pressure difference and its radius is simulated when the bubble ( droplet ) is in equilibrium environment at different temperatures . The results agree with Laplace law . The surface tension of water and ammonia is obtained from simulation results at different temperature ,which agree with experimental data and the critical theory of surface tension .

**Keywords :** lattice Boltzmann method , phase transition process , Laplace law , surface tension

**PACC :** 0570 , 6400

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 50406012 ) and the Nuclear Power Institute of China Key Laboratory of Vacuole Physical and Natural Circulation ( Grant No. 9140C710901090C71 and Grant No. 9140C7101020802 ) .

<sup>†</sup> E-mail :longjian@cqu.edu.cn