

## 池沸腾中气泡生长过程的格子 Boltzmann 方法模拟\*

曾建邦<sup>1)2)</sup> 李隆键<sup>1)†</sup> 廖全<sup>1)</sup> 蒋方明<sup>2)</sup>

1)(重庆大学低品位能源利用技术及系统教育部重点实验室,重庆 400030)

2)(中国科学院可再生能源与天然气水合物重点实验室,广州 510640)

(2010年9月5日收到;2010年10月5日收到修改稿)

在通过引入精确差分方法的单组分多相格子 Boltzmann 模型的基础上耦合能量方程,并考虑流体与固壁间的相互作用力来调节气泡与固壁间的接触角,从而建立了一种新的描述气液相变的格子 Boltzmann 理论模型. 为验证该模型的正确性,利用其对工质为水的相变过程进行了模拟,发现模拟结果与实验值符合良好;进而利用其验证 Laplace 定律,发现计算所得的水的表面张力与实验值甚为符合. 为考察该模型处理复杂相变问题的能力,利用其对工质为水的池沸腾中的气泡生长过程进行模拟,发现气泡脱离直径与  $g^{-0.5}$  成正比,脱离频率与  $g^{0.75}$  成正比( $g$  均为重力加速度),这与经验关系式及文献结果符合良好;此外,接触角的变化对气泡脱离直径影响不大,但气泡脱离频率与接触角成指数关系.

**关键词:** 格子 Boltzmann 方法, 池沸腾, 气泡生长过程, 接触角

**PACS:** 64. 60. av, 64. 60. Q - , 63. 70. + h, 68. 35. Rh

## 1. 引言

研究气泡成核、长大及脱离的整个生长过程在饮料、食品、制药、冶金工业中<sup>[1]</sup>,尤其是在生物系统及电子器件中更具研究意义<sup>[2,3]</sup>. Bestion 等<sup>[4]</sup>于 2008 年提出至今人们对沸腾现象中所涉及的气泡生长过程,以及伴随该过程的对流现象和微尺度传输现象还未完全弄清. 因此,须进一步提高对两相流的认识及预测能力,这对详细了解在工业应用中所涉及的沸腾现象具有重要意义. Dhir<sup>[5]</sup>在 2006 年指出近 70 年来人们在沸腾机理方面进行了大量的理论和实验研究,积累了大量的基础数据,并建立了许多经验和半经验模型,以期来解释和预测沸腾相变换热现象. 但由于该现象非常复杂,对于气泡生长过程中所涉及的受力分析,相变,界面运动等均难以准确描述,因而对沸腾换热现象和相关机理还未从理论上完全弄清,至今还没有一个统一准确的理论模型. 因此气泡生长过程仍然是当今的研究热点之一,以往人们对此大都从理论<sup>[6,7]</sup>及实

验<sup>[8,9]</sup>方面开展研究,近年来随着计算机技术和数值模拟方法的迅猛发展,人们开始对气泡生长过程进行模拟研究<sup>[10,11]</sup>,对于该复杂过程,学者们提出了大量简化理论模型. 如针对气泡生长过程的不同阶段所具有的特性,将其划分成两个阶段:前期由于气泡直径太小而采用微观方法;后期随着气泡的增大,直径处于宏观尺寸范畴,而采用宏观方法<sup>[12]</sup>. 此外,假设气泡周围液体饱和<sup>[13]</sup>. 除此之外,以往的数值计算方法还需额外增加追踪气液界面的控制方程,如 VOF (volume of fluid) 方法<sup>[14]</sup>和 Level-set 方法<sup>[12]</sup>等.

格子 Boltzmann 方法 (LBM) 是近 20 年来飞速发展起来的一种流体系统建模和模拟新方法,和传统的数值计算方法相比,它具有许多独特优点,如天然的并行性,编程简单及边界条件容易实现等,尤其是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,因而可自动追踪相界面(无需增加追踪气液界面的控制方程),为此在多相流,相变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>[15]</sup>. 但以往的模型大都是等温相变模型,因此在多相格子 Boltzmann 模

\* 国家自然科学基金(批准号:51076172)、中国核动力研究设计院重点实验室基金(批准号:9140C710901090C71,9140C7101020802)和中央高校基本科研业务费(批准号:CDJXS1142232)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: longjian@cqu.edu.cn

模型中如何求解能量方程,至今还没得到很好的解决. 1999年 Bruce 等<sup>[16]</sup>在自由能模型的基础上耦合能量方程,但该方法求解起来非常复杂,且保留了自由能模型的所有缺点;2003年 Tentner 等<sup>[17]</sup>提出利用 Zhang 模型求解流场及有限差分方法求解能量方程,该模型在管道内的流动沸腾中得到验证,但 Zhang 模型温度变化范围小,且伪速度大等缺点导致其应用前景不容乐观;2007年 Gonnella 等<sup>[18]</sup>在有限差分格子 Boltzmann 模型的基础上耦合能量方程,并利用其模拟两相流间的热运动,虽然其减小了伪速度,增大了温度变化范围,但该模型处理起来复杂,需构建合理的平衡态分布函数. 2008年 Gabor 等<sup>[19]</sup>在 Shan-Chen 模型的基础上耦合能量方程,并利用其模拟气泡生长过程,取得一定的结果,但 Shan-Chen 模型具有计算结果与理论值偏差大,温度变化范围和气液两相密度比小等缺点.

为此本文在总结以往模型的基础上,提出通过引入精确差分方法的单组分多相格子 Boltzmann 模型<sup>[20]</sup>的基础上耦合能量方程<sup>[19]</sup>,并考虑流体与固壁间的相互作用力来调节气泡与固壁间的接触角<sup>[21]</sup>,从而建立了一种新的描述气液相变的格子 Boltzmann 理论模型. 为验证模型的正确性,利用其对工质为水的相变过程进行模拟,发现模拟结果与实验值符合良好. 进而利用其验证 Laplace 定律,发现计算所得的水的表面张力与实验值甚为符合. 此外,本文还利用其对工质为水的池沸腾中气泡生长过程进行模拟,从而获得气泡脱离直径和脱离频率受重力加速度及接触角的影响,并与经验关系式<sup>[22,23]</sup>及文献结果<sup>[19]</sup>进行对比.

## 2. 基本模型

### 2.1. 格子 Boltzmann 模型

单组分多相格子 Boltzmann 方程为<sup>[17,20]</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,与物质的粘性  $\nu$  相关<sup>[15,17]</sup>,即  $\nu = (2\tau - 1)c\Delta x/6$ ;  $c = \Delta x/\Delta t$  为粒子迁移速率; $\Delta x$  为格子长度; $\Delta t$  为格子离散的时间步长; $\Delta f_i(\mathbf{x}, t)$  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<sup>[15]</sup>

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

式中:  $w_0 = 4/9$ ,  $w_i = 1/9$ ,  $i = 1, \dots, 4$ ,  $w_i = 1/36$ ,  $i = 5, \dots, 8$ ;  $c_s$  为声速;宏观密度和速度分别为

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

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

如何将粒子间相互作用力引入格子 Boltzmann 模型中直接关系到模型的稳定性. 为此,学者们投入了大量的精力来研究该问题<sup>[24-26]</sup>,以期避免由体积力的引入而引起模型的不稳定性,如 Shan 等提出的模型在计算体积力时引入了根号,但无法确保其根号内部为正,若对其添加绝对值,计算结果又与理论解偏差太大<sup>[25]</sup>;Zhang 等提出的模型未对速度进行修正,因而伪速度过大,影响模型的稳定性<sup>[25]</sup>. 为此本文选择由 Kupershtokh 等<sup>[26]</sup>提出的精确差分方法来计算体积力

$$\Delta f_i(\mathbf{x}, t) = f_i^{\text{eq}}(\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \Delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) - f_i^{\text{eq}}(\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)). \quad (4)$$

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

$$\Delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \Delta M / \rho(\mathbf{x}, t) = \mathbf{F}_{\text{total}}(\mathbf{x}, t) \Delta t / \rho(\mathbf{x}, t). \quad (5)$$

式中  $\mathbf{F}_{\text{total}}(\mathbf{x}, t)$  源于流体粒子间相互作用力  $\mathbf{F}_{\text{cohesive}}(\mathbf{x}, t)$ 、流体与壁面间的吸附力  $\mathbf{F}_{\text{adhesive}}(\mathbf{x}, t)$  和外力项  $\mathbf{F}_{\text{external}}(\mathbf{x}, t)$  (如重力等),因此有

$$\mathbf{F}_{\text{total}}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{F}_{\text{cohesive}}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{F}_{\text{adhesive}}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{F}_{\text{external}}(\mathbf{x}, t). \quad (6)$$

为使两相分离,须考虑异相间相互作用力, Zhang 等<sup>[27]</sup>直接利用状态方程来获取

$$\mathbf{F}_{\text{cohesive}}(\mathbf{x}, t) = -\nabla U(\mathbf{x}, t), [U(\mathbf{x}, t) = p(\rho(\mathbf{x}, t), T(\mathbf{x}, t)) - \rho(\mathbf{x}, t)RT_0]. \quad (7)$$

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  $\varphi^2(\mathbf{x}, t) = |U(\mathbf{x}, t)|$ . 因此有

$$\mathbf{F}_{\text{cohesive}}(\mathbf{x}, t) = 2\varphi(\mathbf{x}, t) \nabla \varphi(\mathbf{x}, t). \quad (8)$$

为考察流体与壁面间的相互作用力,文中参考了文献[21]中处理方式,其表达式为

$$\mathbf{F}_{\text{adhesive}}(\mathbf{x}, t) = -G_w \rho(\mathbf{x}, t) \sum_i s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t) \mathbf{e}_i. \quad (9)$$

若  $\mathbf{x} + \mathbf{e}_i$  处在固体节点上,则  $s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t) = 1.0$ , 否

则  $s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t) = 0$ . 参数  $G_w$  是控制流体与固壁间相互作用强度, 它可以改变流体与壁面间的接触角, 即体现流体在此壁面上的润湿能力. 对于处理流体与固壁间的相互作用力, 还有其他处理方式, 详见文献[28].

外力项(如重力)可表示为

$$\mathbf{F}_{\text{external}}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{g}. \quad (10)$$

式中  $\mathbf{g}$  为流体运动的加速度. 而流体的真实速度可通过下式求得:

$$\rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{U}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{F}_{\text{total}}(\mathbf{x}, t)\Delta t/2 + \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i f_i(\mathbf{x}, t). \quad (11)$$

据文献[20]所知, 相比较 Zhang 等提出的模型, 该模型改变了求取体积力的方式, 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, 使得模型应用范围更加广泛.

## 2.2. 能量方程

此前 Qin<sup>[29]</sup> 通过引进热力学扰动的形式来实现对均相气泡成核过程的模拟, 他指出为实现对初始状态为饱和液体的系统相变过程的模拟, 其热力学扰动须足够大, 以便驱使系统由饱和态向亚稳态方向发展. 因此模拟真实流体的沸腾现象, 首先须选择适合描述该工质的状态方程. 据文献[20]可知, Peng-Robinson(P-R)状态方程的饱和密度曲线与水的气液两相密度值甚为符合, 为此下文将考察工质为水(用 P-R 状态方程描述)的沸腾现象. 而考察非均相沸腾现象须考虑能量的传输过程, 在格子 Boltzmann 模型中处理能量方程的思路大致有下述两种<sup>[19]</sup>: 一是通过引入介观能量守恒方程, 利用有限差分或有限容积法求解温度场, 该思路非常直观, 很具有吸引力, 但可惜的是经过学者们的不断探索, 此类模型至今还是具有计算稳定性差的限制<sup>[17]</sup>; 二是将能量与动量方程进行整体耦合求解<sup>[19]</sup>, 通过引入下述分布函数, 其演化方程如下:

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - g_i(\mathbf{x}, t) = - (g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t))/\tau_2 - w_i \Delta t q. \quad (12)$$

式中  $q$  为热流密度, 平衡态分布函数如下:

$$g_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = w_i [T + T(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})/c_s^2 - \tilde{D}_T(\mathbf{e}_i \cdot \nabla T)/c_s^2], \quad (13)$$

式中  $\tilde{D}_T = D_T + (2\tau_2 - 1)c\Delta x/6$ ,  $D_T$  为温度扩散系数, 温度定义为

$$T(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^8 g_i(\mathbf{x}, t). \quad (14)$$

利用 Chapman-Enskog 展开技术或多尺度展开技术, 结合(3)式和(14)式, 忽略高阶项, 可知(1)式和(12)式对应的宏观连续性方程, 动量方程和能量方程, 它们分别如下:

$$\partial \rho / \partial t + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (15a)$$

$$\partial (\rho \mathbf{u}) / \partial t + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla (c_s^2 \rho) + \nu \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (15b)$$

$$\partial T / \partial t + \nabla \cdot (T \mathbf{u}) = \nabla (D_T \nabla T) - q. \quad (15c)$$

## 2.3. 热流密度

忽略黏性耗散, 熵平衡方程如下<sup>[30]</sup>

$$\rho T ds / dt = \nabla (\lambda \nabla T). \quad (16)$$

式中  $s$  为熵,  $\lambda$  为导热系数. 由热力学基本方程可知<sup>[31]</sup>

$$T ds = c_v dT + T(\partial p / \partial T)_v dv. \quad (17)$$

式中  $c_v$  为定容比热容. 若系统定压, 则上式可改写为

$$T ds = c_p dT - T(\partial p / \partial T)_p d\rho / \rho^2. \quad (18)$$

将上式结合(16)式可得

$$\rho c_p dT / dt = \nabla (\lambda \nabla T) + \rho T (\partial p / \partial T)_p (d\rho / dt) / \rho^2. \quad (19)$$

将上式与(15c)式对比, 可得温度扩散系数  $D_T = \lambda / (\rho c_p)$ , 及热流密度

$$q = -T(\partial p / \partial T)_p (d\rho / dt) / (\rho^2 c_p). \quad (20)$$

## 3. 模型验证

### 3.1. 状态方程

为使研究成果更具工程意义, 文中将结合实际物质来研究气泡生长过程. 文献[20]中已经验证流体在 P-R 状态方程(偏心因子  $\omega = 0.344$ )控制下, 其饱和密度曲线与水的气液两相密度实验值符合很好, 如图 1 所示. P-R 状态方程如下

$$p(\rho, T) = \rho RT / (1 - b\rho) - a\alpha(T)\rho^2 / (1 + 2b\rho - b^2\rho^2). \quad (21)$$

式中  $\alpha(T) = [1 + (0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2)(1 - \sqrt{T/T_c})]^2$ , 方程系数与临界参数之间的关系分别为:  $a = 0.45724R^2 T_c^2 / p_c$ ,  $b = 0.0778RT_c / p_c$ . 将 P-R 状态方程代入(8)式中, 可计算  $\mathbf{F}_{\text{cohesive}}(\mathbf{x}, t)$ .

为将格子单位转化成实际物理单位, 可利用对比态原理, 其关系式如下<sup>[20]</sup>:

$$\begin{aligned} p^{\text{lu}} / p_c^{\text{lu}} &= p^{\text{real}} / p_c^{\text{real}}, \\ T^{\text{lu}} / T_c^{\text{lu}} &= T^{\text{real}} / T_c^{\text{real}}, \\ \rho^{\text{lu}} / \rho_c^{\text{lu}} &= \rho^{\text{real}} / \rho_c^{\text{real}}. \end{aligned} \quad (22)$$

式中上标“lu”和“real”分别表示格子单位和实际物理单位. 临界温度  $T_c^{\text{real}}$  为 647.1 K; 临界压力  $p_c^{\text{real}}$  为 22.064 Mpa; 临界密度  $\rho_c^{\text{real}}$  为 321.9575 kg/m<sup>3</sup>. 计算时方程系数  $a, b$  和  $R$  分别取值 2/49, 2/21, 1.0; 则可获得格子单位下的各个临界参数  $T_c^{\text{lu}}$  为 0.0729;  $p_c^{\text{lu}}$  为 0.0596;  $\rho_c^{\text{lu}}$  为 2.995. 然后将计算结果通过(22)式转化成实际物理量纲. 文中  $\Delta x = \Delta t$ , 则  $c = 1.0, c_s = c/\sqrt{3} = 1.0/\sqrt{3}$ .

### 3.2. 表面张力

气泡稳定存在于液体中,其内外压力差应被作用于气液界面上的表面张力所平衡,但据文献[32]所知,若气泡的直径小于临界直径,气泡不能够稳定存在,因而探讨表面张力  $\sigma$  与气泡直径之间的关系就显得尤为重要. Laplace 定律表明<sup>[30]</sup>:当气泡与周围液体处于力平衡和热平衡的条件下,由于表面张力的作用,气泡内的压力  $p_{\text{in}}$  必大于气泡外的压力  $p_{\text{out}}$ . 根据力平衡条件,气泡内外压力差应被作用于气液界面上的表面张力所平衡,即

$$\Delta p = p_{\text{in}} - p_{\text{out}} = \sigma/r. \quad (23)$$

据文献[20]可知,工质为水的气泡内外压力差在不同温度下与半径  $r$  的倒数之间均呈线性关系,直线的斜率表征为表面张力  $\sigma$ . 将(23)式改写成如下形式就可获得表面张力

$$\sigma = \Delta p \times r. \quad (24)$$

利用 2.1 节的计算模型计算不同直径下的气泡的表面张力,模拟时在计算区域的中心给定一个半径为  $r$  的气泡,气泡周围均为该温度下的饱和液体,且在 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和分离密度,可从图 1 中获得. 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  $10^{-6}$ ,计算达到稳定状态. 图 2 给出了不同温度下,工质为水的气泡处于水中的表面张力与直径之间的关系,可以看出在温度一定的情况下,表面张力基本不受气泡的直径变化的影响,但当气泡的直径小于临界直径时,气泡直径逐渐减小,直至消失,如当温度为 183 °C 时,若气泡直径  $D < 22$ ,气泡会随演化时间的增加而减小,最终消失,这与文献[32]所得结果相符. 另外,当气泡直径一定时,气泡在不同温度下的表面张力的模拟值与实验值基本一致. 通过进一步的观察还可发现,随着温度的升高,表面张力变小,这与文献[20]中的结果和表面张力的临

界理论甚为相符.

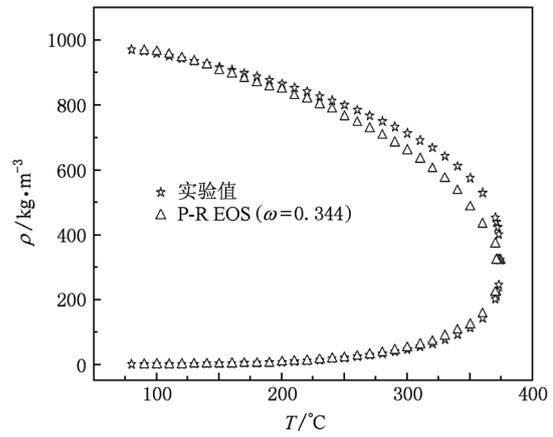


图 1 饱和密度曲线与实验值的对比

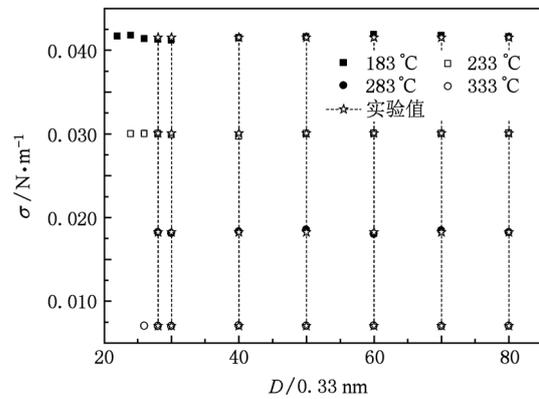


图 2 表面张力随气泡直径变化

## 4. 模型的应用

### 4.1. 接触角

据文献[7]所知,气泡脱离直径和脱离频率与接触角  $\theta$  (见图 3) 具有很大的关系. 因而在研究池沸腾时,探讨气泡与固壁间的接触角(表征润湿能力)就显得尤为重要. 本文利用格子 Boltzmann 模型探讨工质为水的气泡与固壁间的接触角. 计算时采用  $150 \times 300$  的网格; 松弛时间为 1.0; 左右采用周期性边界条件,上边界采用定压边界条件,下边界采用半反弹格式来实现无滑移边界条件; 初始温度为  $0.86T_c$ , 液相和气相饱和密度分别为 6.4838, 0.3113; 初始赋半个半径均为 50 lu 的气泡位于下壁面中心位置. 将其转化成实际物理单位,即初始温

度为 283 ℃, 液相和气相饱和密度分别为 996.9923 kg/m<sup>3</sup>, 33.4672 kg/m<sup>3</sup> (如图 1 所示)<sup>[20]</sup>, 半径为 16.67 nm. 通过改变  $G_w$  来获取工质为水的气泡与固壁间的接触角  $\theta$ . 如图 4 所示, 随着  $G_w$  减小, 接触角  $\theta$  不断增大, 当  $G_w = -10.5$  时, 接触角  $\theta = 180^\circ$  (见图 4(e)), 当  $G_w = -3.5$  时, 接触角  $\theta = 30^\circ$  (见图 4(a)). 此外接触角还可表征流体在固壁上的润湿能力, 即随着  $G_w$  增大, 气泡与固壁间的接触角减小, 表明气泡在此固壁上的润湿能力变强. 图 5 给出了工质为水的气泡与固壁间的接触角随参数  $G_w$  的变化图, 从图中也可看出随着  $G_w$  增大, 气泡与固壁间的接触角减小, 且其变化趋势基本呈线

性关系, 这与文献[33]中的结果符合良好. 此外, 当  $G_w > -3.5$  和  $G_w < -10.5$  时, 则气泡不能稳定存在. 为此只需确保气泡能够稳定存在, 可任意调节参数  $G_w$ , 从而获得所需的气泡与固壁间的接触角.

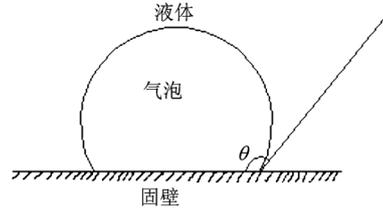


图3 气泡与固壁间的接触角示意图

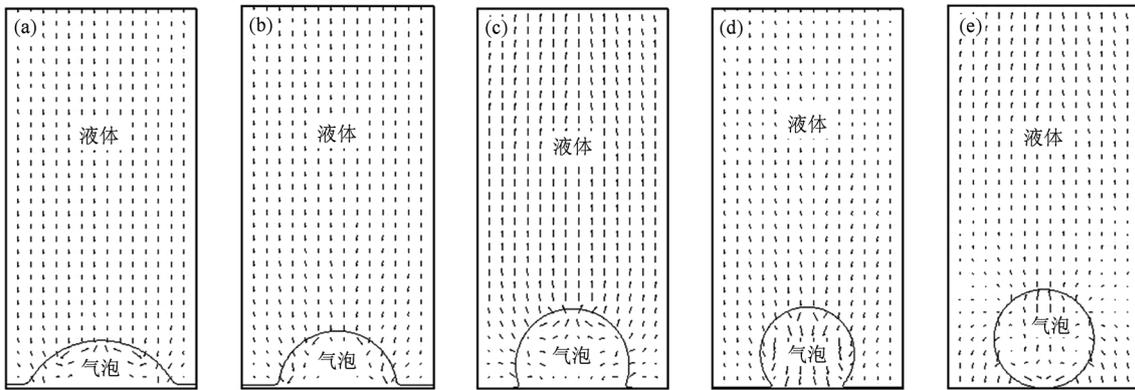


图4 气泡与固壁间的接触角  $\theta$  (a)  $G_w = -3.5$ , (b)  $G_w = -4.5$ , (c)  $G_w = -6.5$ , (d)  $G_w = -7.5$ , (e)  $G_w = -10.5$

## 4.2. 气泡生长过程

### 4.2.1. 初始及边界条件

模拟池沸腾时: 计算区域均为方形, 且上边界均采用定压边界, 其密度和温度均为对应饱和压力下的物理量; 下边界采用半反弹格式来实现无滑移边界, 热流密度由下边界中心处导入, 左右采用周期性边界. 计算初始温度为  $0.86T_c$ , 两相初始密度均可从图 1 中获得, 气泡与固壁间的接触角可通过调节  $G_w$  来获取, 其对应的表面张力见图 2. 计算时区域内部的流体均处于饱和状态, 且热流由下边界中心处导入, 因此围绕下边界中心的流体节点率先发生相变. 因而计算的初始时刻并不需要给定气泡的核化半径, 这是因为当热流足够大时, 围绕下边界中心的流体会被迅速核化, 若此时表面张力足够大, 在下壁面中心处会形成气核, 随着热流的进一步导入, 气核逐渐长大成气泡, 当气泡直径长到脱离直径时, 气泡将脱离下壁面.

### 4.2.2. 脱离直径

图 6 给出了在重力加速度为  $g = 1.5 \times 10^{-5}$  时, 气泡生长过程中一些特定时刻的气泡形状图. 从图中可发现, 由于高热流密度由下壁面中心处持续导入, 因而在下壁面中心处产生气核, 随着演化时间的不断进行, 气核不断长大成气泡, 当气泡直径长

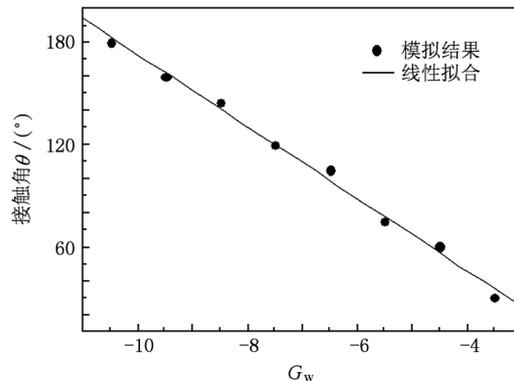


图5 接触角随  $G_w$  的变化

大到一定程度时,气泡在距离壁面处会形成一个气泡颈部,这个颈部非常重要,因为气泡脱离壁面时就是在此处断裂,下部形成小气泡仍然停留在下壁面,上部气泡脱离后由于受重力和表面张力的作用,气泡颈部迅速收缩,并做上升运动,且发生形变(详见图7(a)和(b)).

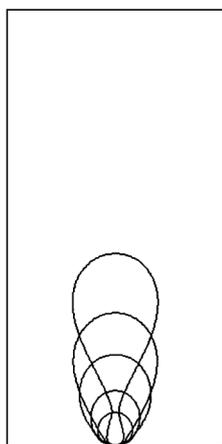


图6  $g = 1.5 \times 10^{-5}$  时的气泡生长过程

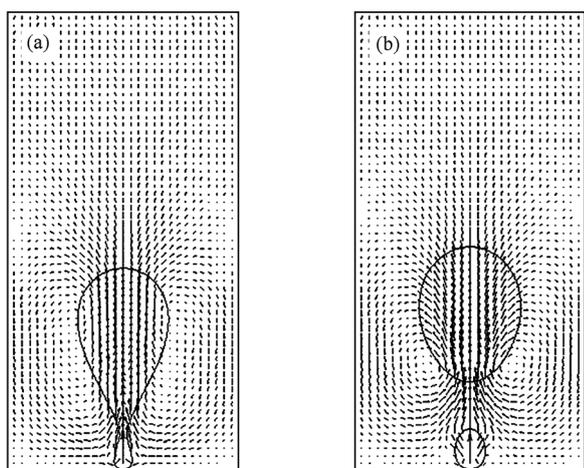


图7 速度场 (a)气泡脱离时, (b)气泡脱离后

图7(a)和(b)分别给出了气泡脱离前后计算区域内的速度场及形状图. 从图中可看出,在气泡周围均存在两个对称的漩涡,漩涡的作用是将冷的流体传输到气泡颈部,这与 Haider 等<sup>[34]</sup>提出的瞬态对流模型相类似. 气泡脱离前,由于在下壁面中心处的热流持续导入,气泡不断变大,此外气泡还受重力及壁面与流体之间的作用力,但合力方向向上,因而气泡在变大的同时还在向上运动,而处在气液界面附近的热流体则尾随气泡向上运动,从而

驱使冷流体向气泡颈部流动,导致在气泡的两侧产生两个对称的漩涡,见图7(a);同理,气泡脱离后,在气泡的两侧也会产生两个对称的漩涡,见图7(b),这与文献[19]中的结果完全不同, Gabor<sup>[19]</sup>指出气泡脱离后,气泡两侧会形成两个不对称的漩涡,但未给出解释. 此外,气泡脱离下壁面之后的一段时间内其形状并不稳定,若气泡脱离直径小于气泡的临界直径时,随着气泡的不断上升,其直径将会不断减小,直至消失. 如果气泡脱离直径很小,在气泡未到达上边界时,气泡就已经消失;反之,若气泡脱离直径足够大时,气泡最终会抵达上边界. 从上可知,气泡的长大过程是一个非稳态的强迫对流传热过程,因而在能量方程中需考虑对流项的存在(见(15c)式).

气泡脱离直径可通过利用静力学平衡法来求取,其表达式为<sup>[22]</sup>

$$D_{\text{departure}} = C_0 [\sigma / (g(\rho_l - \rho_g))]^{0.5}. \quad (25)$$

式中  $C_0$  为常数. Buyevich 等<sup>[35]</sup>怀疑上式导出的气泡脱离直径是否与实际情况相符; Dhir 在其综述文献中指出气泡脱离直径与  $g^{-1/3}$  成正比<sup>[5]</sup>; 最近一些学者提出气泡脱离直径的经验关系式中并没有重力加速度或是与重力加速度的关系非常复杂<sup>[36,37]</sup>.

为此,下文将利用文中提出的计算模型来探索气泡脱离直径与重力加速度的关系,计算时采用  $150 \times 300$  的网格. 通过改变重力加速度的大小,可获取其对应的气泡脱离直径. 从图8中可发现气泡脱离直径与重力加速度的关系,离散点代表模拟结果,曲线方程为  $0.2435 g^{-0.5}$ ,可以看出模拟结果均处在曲线方程附近,说明气泡脱离直径与  $g^{-0.5}$  成正比例关系. 这与(25)式及文献[19]中的结果符合良好,但与文献[19]中的重力加速度的取值范围不同,这主要是因为流体所满足的状态方程不一致.

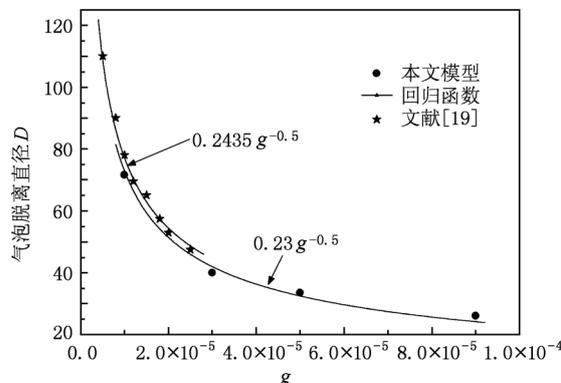


图8 气泡脱离直径与  $g$  的关系

4.2.3. 脱离频率

由于在气泡的核化点处具有持续的热流导入,因而气泡脱离过程具有一定的周期性,在模拟过程中,气泡由核化到脱离需要一定的时间,当第一个气泡脱离后,气泡颈部以下形成的小气泡仍然停留在下壁面处. 气泡脱离后,由于受重力和表面张力的作用,气泡发生形变并向上运动,这导致气液界面附近的热流体跟随气泡向上运动,从而促使上部冷流体向下运动,因此强化了流体在核化点处的传热,导致第二个气泡脱离时间比第一个短很多. 当第二个气泡脱离后,气泡颈部以下仍然形成小气泡停留在下壁面,随着演化时间的增加,气泡不断长大到脱离,这样不断重复下去. 在整个模拟过程中,下壁面中心处热流恒定,因而计算区域内温度场在持续变化. 为更好地计算出气泡脱离频率,文中将计算区域的高度升高,即采用  $150 \times 600$  的网格,其

他计算条件和 4.2.2 节一致. 图 9 选取了气泡生长过程中的一些气泡形状图,从图 9(a) 可看出计算区域内只有一个气泡,即计算刚开始不久;从图 9(b) 可看出,第一个气泡已经脱离,此时计算区域内部已有两个气泡;从图 9(c) 中可看出第二气泡也脱离了,因而计算区域内部有 3 个气泡存在;从图 9(d) 中可看出第一个脱离的气泡即将消失,这刚好验证了文献[32]中的理论;从图 9(e) 中可看出继第一个脱离的气泡消失后,第三个气泡也脱离了,因而区域内部仍为 3 个气泡;从图 9(f) 中可看出第四个气泡也即将脱离,而第二、三个脱离的气泡并未消失. 此外第一、第二、第三和四个气泡的脱离时间分别为 38000, 59000, 80000 和 101000 时间步,因而气泡脱离周期为 21000 个时间步. 此外,从图 9 中还可发现,脱离后每个气泡在同一时刻的形状并不一致,这主要是因为沿热流方向的温度场不一致.

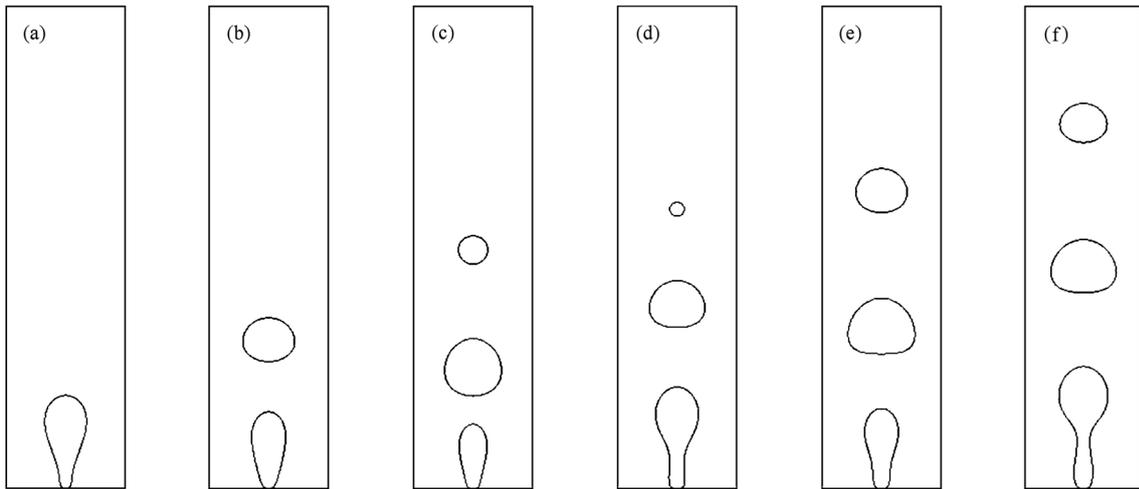


图 9  $g$  对脱离频率的影响

下面将考察重力加速度对气泡脱离频率的影响,Zuber 提出气泡脱离频率通常满足下式<sup>[23]</sup>

$$f^{-1} = C_1 D_{\text{departure}} [\sigma g (\rho_l - \rho_g) / \rho_l^2]^{-0.25}. \quad (26)$$

式中  $C_1$  为常数. 由 4.2.2 节可知,气泡脱离直径与  $g^{-0.5}$  成正比例关系. 因此,由上式可知气泡脱离频率与  $g^{0.75}$  成正比例关系,  $g$  为重力加速度. 通过改变重力加速度的大小,可得到气泡脱离频率与重力加速之间的关系,如图 10 所示,图中离散点代表模拟结果,曲线方程为  $5.2 g^{-0.75}$ ,模拟结果均在曲线附近,说明气泡脱离频率与  $g^{0.75}$  成正比例关系. 上述结果与 Zuber 提出的经验关系式及文献[19]中的结果符合良好.

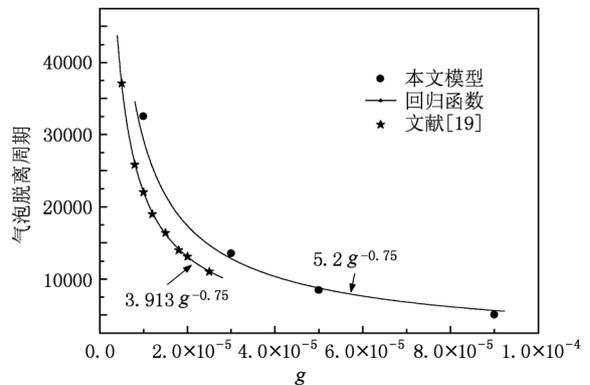


图 10 脱离频率与  $g$  的关系

#### 4.2.4. 接触角对气泡长大过程的影响

本节将探讨气泡脱离直径和脱离频率与接触角之间的关系. 在其他条件不变的情况下, 通过改变  $G_w$  来考察其对气泡生长过程的影响. 若重力加速度为零,  $G_w = -10.0$  时, 随着演化时间的增加, 气泡不断长大, 气泡与壁面间的接触角在不断增大, 但气泡与壁面间的接触面基本不变, 如图 11(a) 所示; 若  $G_w = -7.0$  时, 随着演化时间的增加, 气泡不断长大, 气泡与壁面间的接触角也稍有增大, 但气泡与壁面间的接触面刚开始不断增大, 之后基本维持不变, 如图 11(b) 所示. 此外还需指出, 文中在下壁面中心处具有持续的热流导入, 因而气泡会不断增大, 但由于计算初始时刻系统处于饱和状态, 在特定的温度下, 气泡的表面张力不变, 若表面张力不足以维持气泡所处的直径时, 气泡会自动破裂, 若重力加速度足够大, 选择好  $G_w$ , 则气泡会脱离壁面. 图 12 给出了重力加速度  $g = 1.2 \times 10^{-5}$  时, 通过改变  $G_w$  调节接触角的大小来考察接触角对气泡脱离直径的影响, 发现随着  $G_w$  的减小, 气泡与水平壁面接触角增大, 反之, 气泡与壁面间的接触角减小, 但最终趋于一个恒定值. 此外, 从图 12 还可发现, 改变  $G_w$  的大小对气泡脱离直径影响不大.

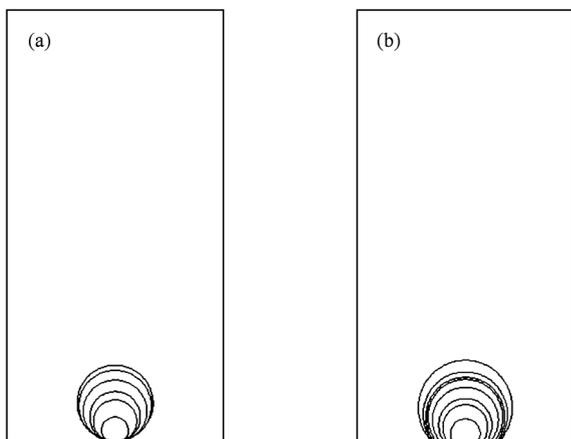


图 11  $G_w$  对气泡长大过程的影响 (a)  $G_w = -10.0$ , (b)  $G_w = -7.0$

但需要指出的是随着  $G_w$  的减小, 气泡与壁面间的接触角在不断增大, 这会导致气泡更易脱离<sup>[7]</sup>. 如图 13 所示, 图中离散点代表模拟结果, 曲线方程为模拟结果的拟合曲线, 可看出模拟结果均处在曲线附近, 也就是说模拟结果满足指数形式这与文献[19]中的结果相同, 且重力加速度一定, 随着接触角的增大, 气泡脱离频率增大.

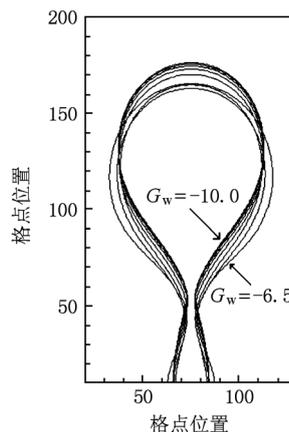


图 12  $g = 1.0 \times 10^{-5}$  时  $G_w$  对气泡脱离直径的影响

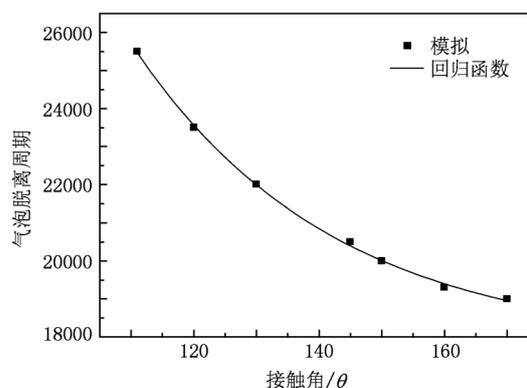


图 13  $g = 1.0 \times 10^{-5}$  时  $G_w$  对气泡脱离频率的影响

## 5. 结 论

本文在总结以往模型的基础上, 提出通过引入精确差分方法的单组分多相格子 Boltzmann 模型的基础上耦合能量方程, 并考虑流体与固壁间的相互作用力来调节气泡与固壁间的接触角, 而建立的一种新的描述气液相变的格子 Boltzmann 理论模型. 为验证模型的正确性, 利用其对工质为水的相变过程进行模拟, 发现模拟的气液两相密度与实验值符合良好. 进而利用其验证 Laplace 定律, 发现计算所得的水的表面张力与实验值甚为符合. 为验证该模型处理复杂相变问题的能力, 利用其对工质为水的池沸腾中的气泡生长过程进行模拟, 得到气泡脱离直径和脱离频率分别与  $g^{-0.5}$  和  $g^{0.75}$  成正比 ( $g$  均为重力加速度), 这与经验关系式和文献结果甚为符合. 此外, 接触角的变化对气泡脱离直径影响不大,

但气泡脱离频率与接触角成指数关系,接触角越大,脱离频率越大.而接触角的大小又和流体与壁面间的作用强度有关,即随着  $G_w$  的增大,接触角变小,脱离频率减小.

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,同时本文计算模型成功运用到实际物质的模拟中,具有重要的工程价值,推广了模型的应用范围,为进一步从介观尺度揭示实际工程沸腾现象的机理奠定了理论基础.

- [1] Hepworth N J, Boyd J W R, Hammond J R M, Varley J 2003 *Chem. Eng. Sci.* **58** 4071
- [2] Barbulovic-Nad I, Lucente M, Sun Y, Zhang M J, Wheeler A R, Bussmann M 2006 *Crit. Rev. Biotech.* **26** 237
- [3] Bolognesi A, Mercogliano C, Yunnus S, Civardi M, Comoretto D, Turturro A 2005 *Langmuir* **21** 3480
- [4] Bestion D, Anglart H, Caraghiaur D, Peteraud P, Smith B, Andreani M, Niceno B, Krepper E, Lucas E, Lucas D, Moretti F, Galassi M C, Macek J, Vyskocil L, Koncar B, Hazi G 2009 *Sci. Tech. Nucl. Installa.* **214512** 1
- [5] Dhir V K 2006 *J. Heat Transfer*. **128** 1
- [6] Chester A K 1977 *J. Fluid Mech.* **81** 609
- [7] Fritz W 1935 *Phys. Z.* **36** 379
- [8] Arlabosse P, Tadrist L, Tadrist H, Pantaloni J 2000 *Trans. ASME* **122** 66
- [9] Warriar G R, Basu N, Dhir V K 2002 *Int. J. Heat Mass Transfer* **45** 3947
- [10] Mukherjee A, Kandlikar S G 2007 *Int. J. Heat Mass Transfer* **50** 127
- [11] Fuchs T, Kern J, Stephan P 2006 *J. Heat Transfer* **128** 1257
- [12] Dhir V K 2001 *AIChE J.* **47** 813
- [13] Mei R W, Chen W, Klausner J 1995 *Int. J. Heat Mass Transfer* **38** 909
- [14] Son G, Ramanujapu N, Dhir V K 2002 *J. Heat Transfer* **124** 51
- [15] Guo Z L, Zheng C G 2008 *Theory and Application 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]
- [16] Bruce J P, David R R 2000 *Phys. Rev. E* **61** 5295
- [17] Tentner A, Chen H D, Zhang R Y 2006 *Phys. A* **362** 98
- [18] Gonnella G, Lamura A, Sofonea V 2007 *Phys. Rev. E* **76** 036703
- [19] Gabor H, Attila M 2009 *Int. J. Heat Mass Transfer* **52** 1472
- [20] Zeng J B, Li L J, Liao Q, Chen Q H, Cui W Z, Pan L M 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 178 (in Chinese) [曾建邦、李隆键、廖全、陈清华、崔文智、潘良明 2010 物理学报 **59** 178]
- [21] Martyrs N S, Chen H D 1996 *Phys. Rev. E* **53** 743
- [22] Xin M D 1987 *Boiling Heat Transfer and Enhanced Boiling Heat Transfer* (Chongqing: Chongqing University Press) p55 (in Chinese) [辛明道 1987 沸腾传热及其强化 (重庆:重庆大学出版社) 第 55 页]
- [23] Zuber N 1963 *Int. J. Heat Mass Transfer* **6** 53
- [24] Shan X W, Chen H D 1993 *Phys. Rev. E* **47** 1815
- [25] Zeng J B, Li L J, Liao Q, Cui W Z, Chen Q H, Pan L M 2009 *Chin. Sci. Bull.* **54** 1
- [26] Kupershtokh A L 2004 in: *Proceedings of the 5th International Electrostatic Workshop* August30—31, 2004 Poitiers-France 241
- [27] Zhang R Y, Chen H D 2003 *Phys. Rev. E* **67** 1
- [28] Peng Y, Schaefer L 2006 *Phys. Fluids* **18** 1
- [29] Qin R S 2007 *J. Chem. Phys.* **126** 114506
- [30] Yang S M, Tao W Q 1998 *Heat Transfer* (Beijing: Higher Education Press) p218 (in Chinese) [杨世铭、陶文铨 1998 传热学 (北京: 高等教育出版社) 第 218 页]
- [31] Shen W D, Jiang Z M, Tong J G 2001 *Engineer 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]
- [32] Sukop M C, Or D 2005 *Phys. Rev. E* **71** 046703
- [33] Peng Y 2005 *Ph. D. Dissertation* (Pittsburg: University of Pittsburg) p56
- [34] Haider S I, Webb R L 1997 *Int. J. Heat Mass Transfer* **40** 3675
- [35] Buyevich Y A, Werbon B W 1996 *Int. J. Heat Mass Transfer* **39** 2409
- [36] Yang C X, Wu Y T, Yuan X G, Ma C F 2000 *Int. J. Heat Mass Transfer* **43** 203
- [37] Kim J, Kim M H 2006 *Int. J. Multiphase Flow* **32** 1269

## Simulation of bubble growth process in pool boiling using lattice Boltzmann method\*

Zeng Jian-Bang<sup>1)2)</sup> Li Long-Jian<sup>1)†</sup> Liao Quan<sup>1)</sup> Jiang Fang-Ming<sup>2)</sup>

1) (Key Laboratory of Low-grade Energy Utilization Technologies and Systems of Ministry of Education, Chongqing University, Chongqing 400030, China)

2) (Key Laboratory of Renewable Energy and Gas Hydrate, Chinese Academy of Sciences, Guangzhou 510640, China)

(Received 5 September 2010; revised manuscript received 5 October 2010)

### Abstract

In this paper, a new single-component lattice Boltzmann model, which is based on exact difference method and extended with an energy transfer equation to model heat transfer, is proposed to describe liquid-vapor phase transition process. The wettability of the heated wall is modeled by an interaction force between solid wall and fluid. This new model is validated through the simulation of water phase transition process. It is found that the simulation results are in good agreement with the experimental data. The surface tension of water, which is obtained from simulation results at different temperatures, is closed to experimental data. These results are in agreement with those obtained from Laplace law. In order to demonstrate the availability of this model for dealing with phase transition and two-phase problems, the bubble growth process on a heated surface is simulated in pool boiling. It is found that the bubble departure diameter is proportional to  $g^{-0.5}$  and the release frequency scales with  $g^{0.75}$ , where  $g$  is the gravitational acceleration. These results are in good agreement with those obtained from the empirical relationship and reference results. Finally, simulation results show no relationship between the bubble departure diameter and the static contact angle, but the bubble release frequency increases exponentially with the latter.

**Keywords:** lattice Boltzmann method, pool boiling, bubble growth process, contact angle

**PACS:** 64.60.av, 64.60.Q-, 63.70.+h, 68.35.Rh

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51076172, 50406012), the National Key Laboratory of Bubble Physics and Natural Circulation of the Nuclear Power Institute of China (Grant Nos. 9140C710901090C71, 9140C7101020802), and the Fundamental Research Funds for the Central Universities of China (Grant No. CDJXS11142232).

† Corresponding author. E-mail: longjian@cqu.edu.cn