

气泡成核过程的格子 Boltzmann 方法模拟*

曾建邦¹⁾ 李隆键^{2)†} 蒋方明^{1)‡}

1) (中国科学院广州能源研究所先进能源系统实验室, 中国科学院可再生能源重点实验室, 广州 510640)

2) (重庆大学动力工程学院, 低品位能源利用技术及系统教育部重点实验室, 重庆 400030)

(2013年3月19日收到; 2013年5月14日收到修改稿)

利用精确差分格子 Boltzmann 模型探讨水在特定温度下的亚稳态及不稳定平衡态, 获得等温相变过程中形成气泡和液滴的条件, 模型预测结果与理论解符合良好. 在该等温模型的基础上耦合能量方程, 通过调节流体-壁面相互作用力获得不同的气泡与固壁间接触角, 从而建立了一种新的描述气液相变的格子 Boltzmann 理论模型. 利用该新模型模拟不同流体-壁面相互作用力下凹坑气泡成核过程, 再现了气泡成核过程中的三阶段特性; 探讨了接触角、曲率半径及气泡体积随气泡成核过程的变化关系, 获得了与文献结果定性符合的曲率-气泡体积关系曲线.

关键词: 格子 Boltzmann 方法, 气泡成核过程, 气液相变, 接触角

PACS: 64.60.qe, 63.70.+h, 68.35.Rh

DOI: 10.7498/aps.62.176401

1 引言

亚稳态两相流动过程研究, 对相变成核机理和反应堆事故暂态过程研究十分有用, 常用于解释反应堆失水事故喷放过程中遇到的一些现象^[1]. 而相变成核又是沸腾传热学研究的重要内容, 更是沸腾传热学最基础的问题. 因此, 研究气泡成核过程具有重要理论及工程意义. 稍显遗憾的是人们至今对气泡成核过程所基于的微尺度传输机理还未完全弄清^[2]. 此外, 在实际工程中, 沸腾表面大多数包含自然的或机械加工形成的凹坑、刻痕等, 呈半圆槽和沟槽形状, 大小从肉眼可见到微观尺寸^[3]. Clark 等^[4]用显微镜观察到活化凹坑尺寸大约 10 μm 到 100 μm , 要描述如此小的范围内的气泡成核过程, 宏观数值求解方法是很难胜任的. 因此, 学者们另辟蹊径, 以求在理论上有所突破, 但至今无论是从理论还是实验上, 只能探寻气泡成核条件, 以及活化核心的相互作用, 而无法了解气泡成核过程中所涉及的具体物理信息 (如曲率半径、接触角及气泡体积等随气泡成核过程的

变化). Bankoff^[5]首次建立气泡成核理论, 并提出沸腾表面凹坑成核条件; Griffith 和 Wallis^[6]测出了工程表面上水的静态接触角对气泡成核过程的影响, 并定性地给出了气泡体积随曲率的变化关系; Sato 和 Matsumura^[7]针对 Bankoff^[5]成核理论进行改进, 提出了新的预测沸腾壁面过热度的公式; 随后 Davis 和 Anderson^[8]将 Sato 和 Matsumura^[7]的预测公式推广到非圆形气泡成核条件; Lorenz 等^[9]在 Bankoff^[5]理论上引入新的凹坑半径条件; Wang 等^[10]通过最小化单个沸腾系统的赫尔姆兹自由能, 改进了接触角条件; Mikic 和 Rohsenow^[11], Judd 和 Hwang^[12]以及 Dhir^[13]先后讨论了相邻活化核心间存在相互作用; Kenning 和 Yan^[14]在池沸腾实验中发现气泡生长形成的过冷区域大小等于该点上气泡脱离时的投影范围. Zhang 和 Shoji^[15]对人工凹坑实验的活化核心间相互作用进行分类.

要数值模拟气泡成核过程, 首先必须寻求适合该尺寸范围的数值建模方法, 而作为介观尺度方法之一的格子 Boltzmann 方法 (lattice Boltzmann method, LBM) 是近 20 年来飞速发展起来的一种流

* 国家自然科学基金青年基金 (批准号: 51206171)、国家自然科学基金 (批准号: 51076172)、中国科学院广州能源研究所所长创新基金 (批准号: y207r31001) 和中国科学院“百人计划”资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: longjian@cqu.edu.cn

‡ 通讯作者. E-mail: jiangfm@ms.giec.ac.cn

体系统建模和模拟新方法, 和传统的数值计算方法相比, 它具有许多独特优势, 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 [16–20]. 然而, 以往的模型大都是等温相变模型, 如何构建适合描述非等温相变的格子 Boltzmann 模型至今仍是个难点. 1999 年 Bruce 等 [21] 在自由能模型的基础上耦合能量方程试图实现对非等温相变的模拟, 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 [22] 提出利用 Zhang [23] 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 [23] 模型适用的温度变化范围小、且伪速度大, 这些缺点导致其应用前景不被看好; 2007 年 Gonnella 等 [24] 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传热, 虽然该方法减小了伪速度, 增大了适用温度变化范围, 但其需构建合理的平衡态分布函数、较难于处理; 2008 年 Gabor 等 [25] 在 Shan 和 Chen 提出的单组分多相模型 (SC 模型) [26] 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 SC 模型具有计算结果与理论值偏差大, 适用温度范围窄, 能够处理的气液两相密度比小等缺点 [27]. 2010 年, 我们通过引入精确差分方法对单组分多相格子 Boltzmann 模型实施改进, 发现精确差分格子 Boltzmann 模型较 SC 模型 [28] 在适用温度变化范围和能够处理的气液两相密度比等方面均取得较大的改进; 最近, 我们又在精确差分格子 Boltzmann 模型的基础上耦合能量方程, 以及通过调节流体 - 壁面相互作用力获取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 [29], 新模型的先进性在模拟池沸腾气泡生长过程中得到验证.

本文应用我们在文献 [28] 中提出的精确差分格子 Boltzmann 模型探讨水在特定温度下的亚稳态及不稳定平衡态, 进而应用我们在文献 [29] 中建立的非均相相变格子 Boltzmann 模型, 针对人造核化穴, 对不同流体 - 壁面相互作用力下的凹坑气泡成核过程进行模拟研究; 根据模型结果, 我们重点探讨了接触角、曲率半径及气泡体积在气泡成核过程的变化.

2 计算模型

2.1 格子 Boltzmann 模型

单组分多相格子 Boltzmann 方程为 [23,28–30]

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -(f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)) / \tau_1 + \Delta f_i(\mathbf{x}, t), \quad (1)$$

式中 τ_1 为无量纲松弛时间, 与物质的黏性 ν 相关, 即 $\nu = (2\tau_1 - 1)c\Delta x/6$; $c = \Delta x/\Delta t$ 为粒子迁移速率; Δx 为格子长度; Δt 为时间步长; \mathbf{e}_i 为离散方向 i 上的速度矢量, 在 D2Q9 模型中, $\mathbf{e}_0 = [0, 0]$,

$$\mathbf{e}_i = [\cos((i-1)\pi/2), \sin((i-1)\pi/2)],$$

$$i = 1, 2, 3, 4,$$

$$\mathbf{e}_i = \sqrt{2}[\cos((i-5)\pi/2 + \pi/4),$$

$$\sin((i-5)\pi/2 + \pi/4)], \quad i = 5, 6, 7, 8;$$

$\Delta f_i(\mathbf{x}, t)$ 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分布函数, 在 D2Q9 模型中, 粒子平衡态分布函数为 [30]

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

式中, $w_0 = 4/9$, $w_i = 1/9$, $i = 1, 2, 3, 4$, $w_i = 1/36$, $i = 5, 6, 7, 8$; 声速 $c_s = c/\sqrt{3}$; 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 [23,26,27,30], 以期避免由体积力的引入而引起模型的不稳定性, 如 SC 模型 [26] 在计算体积力时引入了根号, 但却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; Zhang 等 [23] 提出的模型未对速度进行修正, 导致伪速度过大, 影响模型的稳定性. 为此, 本文选择由 Kupershtokh 等 [30] 提出的精确差分法来计算体积力

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

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 ΔM 为每个时间步内的动量改变量; $F_{\text{total}}(\mathbf{x}, t)$ 源于流体粒子间相互作用力 $F_{\text{cohesive}}(\mathbf{x}, t)$ 、流体与壁面间的吸附力 $F_{\text{adhesive}}(\mathbf{x}, t)$ 和外力项 $F_{\text{external}}(\mathbf{x}, t)$ (如重力等); 因此有

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

为使两相分离, 须考虑异相间相互作用力, Zhang 等 [23] 直接利用状态方程来获取

$$F_{\text{cohesive}}(\mathbf{x}, t) = -\nabla U(\mathbf{x}, t), \quad (7)$$

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

$$U(\mathbf{x}, t) = p(\rho(\mathbf{x}, t), T(\mathbf{x}, t)) - \rho(\mathbf{x}, t)RT_0, \quad (8)$$

式中 $p(\rho(\mathbf{x}, t), T(\mathbf{x}, t))$ 为任意状态方程; $T(\mathbf{x}, t)$ 为温度; R 为通用气体常数, T_0 与格子模型有关, 在 D2Q9 模型中 $T_0 = 1/3$. 定义粒子间相互作用势为 $\varphi(\mathbf{x}, t)$, 且 $\varphi^2(\mathbf{x}, t) = |U(\mathbf{x}, t)|$. 因此有

$$F_{\text{cohesive}}(\mathbf{x}, t) = 2\varphi(\mathbf{x}, t)\nabla\varphi(\mathbf{x}, t). \quad (9)$$

为考察流体与壁面间的润湿效应, 我们参考了文献 [28] 中处理方式.

$$F_{\text{adhesive}}(\mathbf{x}, t) = -G_w\rho(\mathbf{x}, t)\sum_i S(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t)\mathbf{e}_i. \quad (10)$$

若 $\mathbf{x} + \mathbf{e}_i$ 处在固体节点上, 则有效密度 $S(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t) = 1.0$, 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 [32].

外力项 (如重力) 可表示为

$$F_{\text{external}}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{g}, \quad (11)$$

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:

$$\begin{aligned} & \rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \\ &= F_{\text{total}}(\mathbf{x}, t)\Delta t/2 + \sum_{i=0}^8 \mathbf{e}_i f_i(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (12)$$

据文献 [28] 所知, 相比较 Zhang 等提出的模型 [23], 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 [33] 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 [28] 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. 考察非均相沸腾现象就必须考虑能量的传输过程, 而在格子 Boltzmann 模型中处理能量方程的思路大致有下述两种 [25]: 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, 此类模型计算稳定性仍然较差 [27]; 二是将能量与动量方程进行整体耦合求解 [25], 通过引入下述分布函数, 其演化方程如下:

$$\begin{aligned} & g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i\Delta t, t + \Delta t) - g_i(\mathbf{x}, t) \\ &= -(g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t))/\tau_2 - w_i\Delta tq, \end{aligned} \quad (13)$$

式中 q 为热流密度, 平衡态分布函数如下:

$$\begin{aligned} g_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) &= w_i[T + T(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})/c_s^2 \\ &\quad - \bar{D}_T(\mathbf{e}_i \cdot \nabla T)/c_s^2], \end{aligned} \quad (14)$$

式中 τ_2 为无量纲松弛时间, 与温度扩散系数 D_T 和平衡态分布函数中的系数 \bar{D}_T 相关, 即 $D_T = \bar{D}_T - (2\tau_2 - 1)c\Delta x/6$. 若 $\Delta x = \Delta t$, 则 $c = 1.0$, $c_s = 1/\sqrt{3}$. 温度定义为

$$T(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^8 g_i(\mathbf{x}, t). \quad (15)$$

利用 Chapman-Enskog 多尺度展开技术, 结合式 (3) 式和 (15) 式, 忽略高阶项, 可得 (1) 式和 (13) 式对应的宏观连续性、动量和能量守恒方程, 如下:

$$\partial\rho/\partial t + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}) = 0, \quad (16a)$$

$$\partial(\rho\mathbf{u})/\partial t + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla(c_s^2\rho) + \nu\nabla^2\mathbf{u}, \quad (16b)$$

$$\partial T/\partial t + \nabla \cdot (T\mathbf{u}) = \nabla(D_T\nabla T) - q. \quad (16c)$$

2.3 热流密度

忽略黏性耗散, 熵平衡方程如下 [34]:

$$\rho T ds/dt = \nabla(\lambda\nabla T), \quad (17)$$

式中 s 为熵, λ 为导热系数. 由热力学基本方程可知 [35]

$$T ds = c_v dT + T(\partial p / \partial T)_v dv, \quad (18)$$

式中 c_v 为定容比热容. 若系统定压, 则上式可改写为

$$T ds = c_v dT - T(\partial p / \partial T)_\rho d\rho / \rho^2. \quad (19)$$

将上式结合 (17) 式可得

$$\begin{aligned} & \rho c_v dT / dt \\ & = \nabla(\lambda \nabla T) + \rho T(\partial p / \partial T)_\rho (d\rho / dt) / \rho^2. \end{aligned} \quad (20)$$

将上式与 (16c) 式对比, 可得温度扩散系数 $D_T = \lambda / (\rho c_v)$, 及热流密度

$$q = -T(\partial p / \partial T)_\rho (d\rho / dt) / (\rho^2 c_v). \quad (21)$$

2.4 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成核过程. 作者在文献 [28] 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良好. P-R 状态方程如下:

$$\begin{aligned} p = & \rho RT / (1 - b\rho) \\ & - a\alpha(T)\rho^2 / (1 + 2b\rho - b^2\rho^2), \end{aligned} \quad (22)$$

式中

$$\begin{aligned} \alpha(T) = & [1 + (0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2) \\ & \times (1 - \sqrt{T/T_c})]^2, \end{aligned}$$

方程系数与临界参数之间的关系分别为

$$a = 0.45724R^2T_c^2/p_c, b = 0.0778RT_c/p_c.$$

将 P-R 状态方程代入 (9) 式中, 可计算 $F_{\text{cohesive}}(\mathbf{x}, t)$.

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 [28]:

$$\begin{aligned} p^{\text{lu}} / p_c^{\text{lu}} & = p^{\text{real}} / p_c^{\text{real}}, \\ T^{\text{lu}} / T_c^{\text{lu}} & = T^{\text{real}} / T_c^{\text{real}}, \\ \rho^{\text{lu}} / \rho_c^{\text{lu}} & = \rho^{\text{real}} / \rho_c^{\text{real}}, \end{aligned} \quad (23)$$

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^{real} 为 647.1 K; 临界压力 p_c^{real} 为 22.064 MPa; 临界密度 ρ_c^{real} 为 321.9575 kg·m⁻³. 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^{lu} 为 0.0729; p_c^{lu} 为 0.0596; ρ_c^{lu} 为 2.995. 然后将计算结果通过 (23) 式转化成实际物理量纲.

3 模型应用

3.1 亚稳态和不稳定平衡态

所谓亚稳态是指体系受小扰动作用时状态保持不变, 若受较大扰动, 状态立刻发生变化. 曲面下相平衡时, 液相和气相都处于过热状态, 对于液相来说, 这是一种亚稳态. 可以利用状态方程的 P-V 图 (图 1) 讨论亚稳态和不稳定平衡态概念. 在两相区 be 段内, 气液两相平衡共存. 通常状况下, 处于 a 点的液相等温膨胀到压力 P_b 时发生沸腾. 但当液体非常纯, 容器表面非常光滑, 无凹坑, 可以膨胀到 c 点仍然保持液体状态. 类似地, 在蒸汽区, 处于 f 点的蒸汽等温压缩到 P_e 时发生冷凝, 但若蒸汽极纯, 过程平稳而缓慢, 蒸汽可以在低于饱和温度下继续存在至 d 点. 分支 bc 和 de 分别表示对应的过热液体亚稳态和过饱和蒸汽亚稳态. cd 分支, $(\partial p / \partial v)_T > 0$, 系不稳定的两相共存状态, 稍受扰动即会发生完全冷凝、或者完全蒸发. c 点和 d 点, 满足 $(\partial p / \partial v)_T = 0$, 系亚稳态平衡的极限点. 一旦达到 c 点或 d 点, 系统立刻形成气泡或发生冷凝 [1].

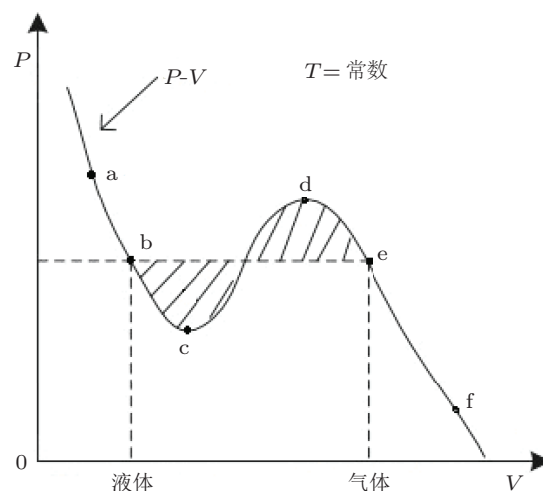


图 1 压力随比容的变化曲线

将 2.4 节的状态方程引入到 2.1 节的计算模型中, 探讨水在温度为 190 °C 和 290 °C 时的亚稳态和不稳定平衡态. 模拟时采用 200 lu × 200 lu 网格, 四周采用周期性边界, 为形成演化过程, 给初始密度一个 1% 的小扰动. 当 $T = 190$ °C 时, 若初始密度取值处于 [75.2488 kg/m³, 655.7398 kg/m³] 之间, 则气液两相分离, 如图 2 中的 c'd' 段所示, 否则系统仍处于单相区, 如图 2 中的 a'b'c' 和 f'e'd' 段所示. 而 (22) 式压力在温度为 190 °C 时, 对比容求导

可知, 若密度介于 $(72.3356 \text{ kg/m}^3, 663.5657 \text{ kg/m}^3)$ 之间, 则 $(\partial p/\partial v)_T > 0$, 系不稳定的两相共存状态; 若密度等于 72.3356 kg/m^3 或 663.5657 kg/m^3 , 则 $(\partial p/\partial v)_T = 0$, 说明上述两点系亚稳态平衡的极限点. 可看出在极限值方面, 模拟结果与理论计算值相差很小, 最大相对误差仅为 4%. 同理, 当 $T = 290 \text{ }^\circ\text{C}$ 时, 若初始密度处于 $[128.998 \text{ kg/m}^3, 515.992 \text{ kg/m}^3]$ 之间, 则气液两相分离, 如图 2 中的 cd 段所示, 否则系统仍处于单相区, 如图 2 中的 abc 和 fed 段所示. 而 (22) 式压力在温度为 $290 \text{ }^\circ\text{C}$ 时, 对比容求导可知, 若密度介于 $(123.279 \text{ kg/m}^3, 526.9568 \text{ kg/m}^3)$ 之间, 则 $(\partial p/\partial v)_T > 0$, 系不稳定的两相共存状态; 若密度等于 123.279 kg/m^3 或 526.9568 kg/m^3 , 则 $(\partial p/\partial v)_T = 0$, 说明上述两点系亚稳态平衡的极限点. 对于状态的极限点, 模拟结果与理论计算值相差非常小, 最大相对误差仅为

4.6%, 模拟结果与理论计算值符合良好.

此外, 从模拟结果中还可发现, 初始密度的大小还决定系统演化后到底是形成气泡还是液滴, 如图 3 所示, 图中黑色部分代表气相, 白色部分代表

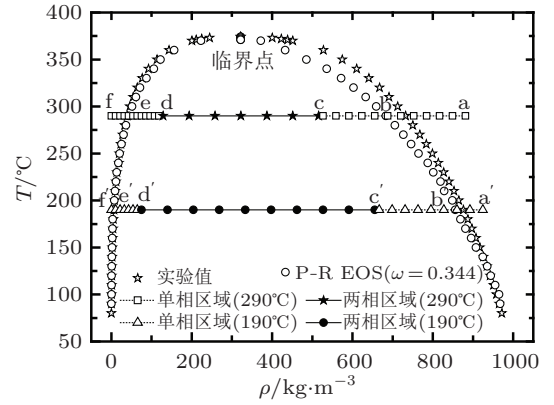
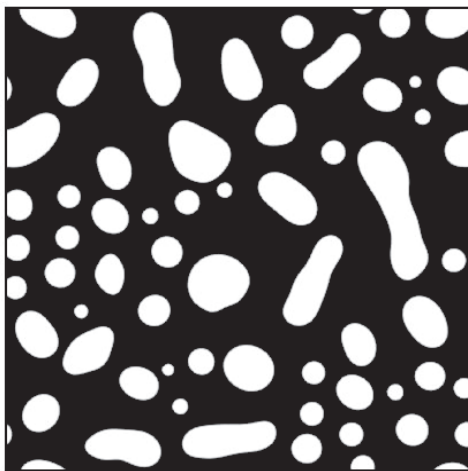


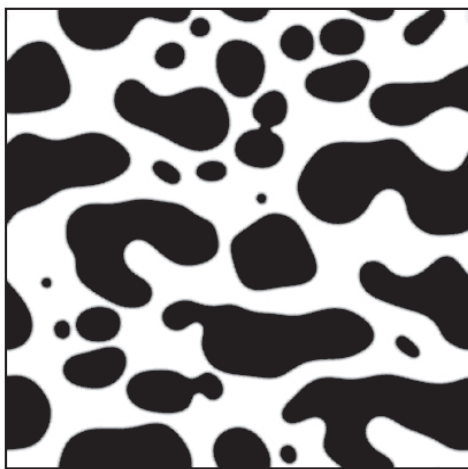
图2 亚稳态和 unstable 平衡态



(a) $190^\circ\text{C}, 268.75 \text{ kg/m}^3$



(b) $290^\circ\text{C}, 268.75 \text{ kg/m}^3$



(c) $190^\circ\text{C}, 376.24 \text{ kg/m}^3$



(d) $290^\circ\text{C}, 376.24 \text{ kg/m}^3$

图3 初始密度对相分布图的影响 (黑色部分代表气相, 白色部分代表液相)

液相. 当温度 $T = 190\text{ }^{\circ}\text{C}$ 时, 若初始密度介于 $[75.2488\text{ kg/m}^3, \rho_c]$ 之间, 则系统分离后形成液滴; 若初始密度处于 $(\rho_c, 655.7398\text{ kg/m}^3]$ 之间, 则系统分离后形成气泡, 如图 3(a), (c) 所示. 而当温度 $T = 290\text{ }^{\circ}\text{C}$ 时, 若初始密度介于 $[128.998\text{ kg/m}^3, \rho_c]$ 之间, 则系统分离后形成液滴; 若初始密度处于 $(\rho_c, 515.992\text{ kg/m}^3]$ 之间, 则系统分离后形成气泡, 如图 3(b), (d) 所示. 这种现象在文献 [36] 中也曾提到, 但其并未给出解释和依据. 产生上述现象的主要是因为给定的初始密度相当于系统的平均密度, 若初始密度小于临界密度, 说明系统的初始状态气相所占的比重较大, 一旦发生分离, 其气相所占据的区域较大, 受表面张力的作用, 因而形成液滴. 而初始密度大于临界密度时, 说明系统的初始状态液相所占的比重较大, 一旦发生分离, 其液相所占据的区域较大, 受表面张力的作用, 因而形成气泡.

3.2 凹坑成核过程

3.2.1 计算条件

工程实际中, 液体通常是在固体表面上被加热

沸腾, 气泡更容易在壁面上产生. 壁面的存在起着类似催化剂的作用, 大大地减小了核化所需的能量. 此外, 还有可能是壁面上积存有气体带来附加的影响 [3]. 在本文研究中只针对单个人造凹坑的气泡成核过程进行模拟, 模拟时假设壁面和液体容积内具有相同的温度, 且液体处于饱和状态, 凹坑的顶角 $\theta = 90^{\circ}$, 凹坑的宽度 $D = 50\text{ lu}$, 深度 $H = 25\text{ lu}$ (如图 4 所示), 凹坑内部均为饱和液体, 热流由凹坑的顶角处沿垂直方向向液体导入. 液体由于受热流的作用, 凹坑顶角附近的液体迅速发生相变, 产生气核, 并不断长大. 也就是说表面凹坑形状一定, 且凹坑内为饱和液体, 热流加热方式及大小一定, 不考虑凹坑气泡成核间的相互作用, 且不考虑重力的存在.

计算区域见图 5, 采用 $300\text{ lu} \times 300\text{ lu}$ 的网格, 上边界采用定压边界 (其密度和温度均为对应饱和和压力下的物理量), 下边界采用半反弹格式来实现无滑移边界, 左右采用周期性边界. 计算的初始温度为 290° , 其两相密度均可从图 2 中获得. 接触角 β 的大小可通过调节流体与壁面间的作用系数 G_w (见图 4).

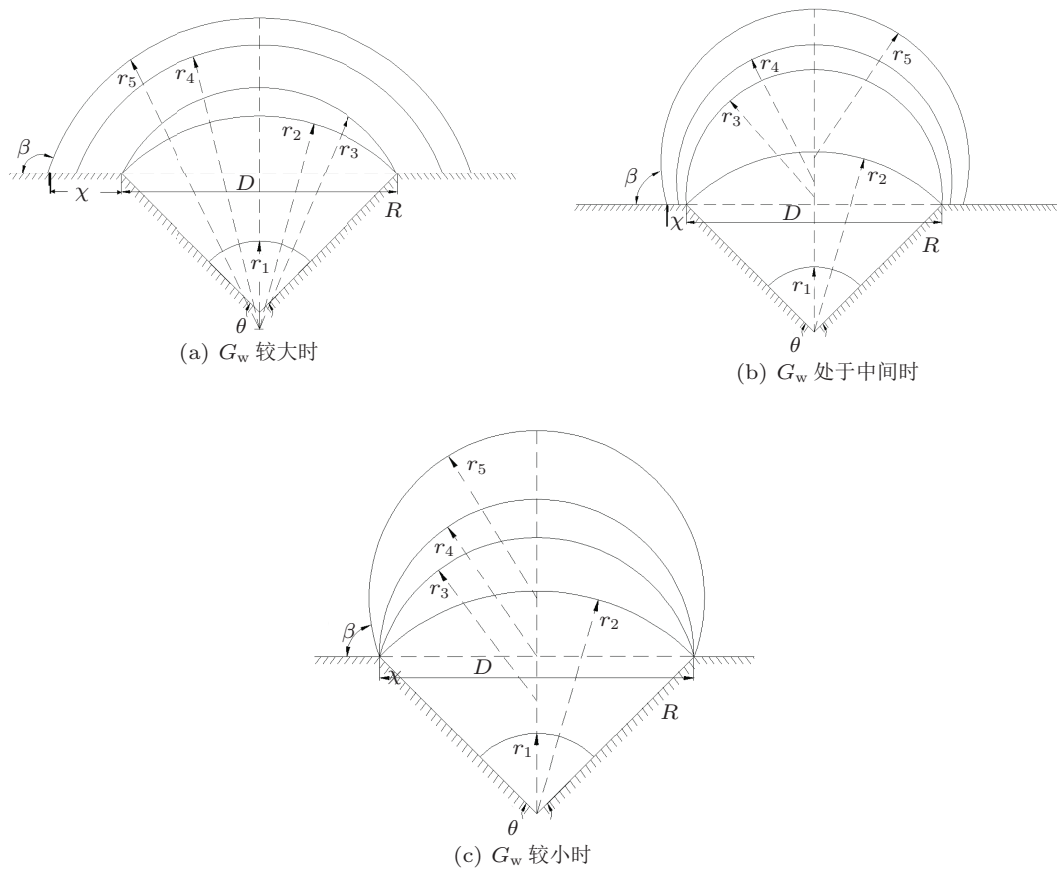


图 4 凹坑气泡成核过程的示意图

3.2.2 结果分析

从图 5 中可看出气泡成核过程的各个阶段形状图, 热流由凹坑顶点处导入, 因而顶点附近的流体首先发生相变, 形成气核, 如图 5(a), (b), (c) 中的位置 1 所示, 此时气泡的半径均用 r_1 表示; 随着热流的持续导入, 气泡在凹坑内不断增大, 直至气泡长大到凹坑出口处, 见图 5(a), (b), (c) 中的位置 2, 此时气泡的半径均用 r_2 表示; 之后, 气泡在凹坑出口处长大到如图 5(a), (b), (c) 中的位置 3, 之前的这三个时刻, 气泡演化的形状图十分相似, 但此后, 由于流体与壁面间的作用系数 G_w 不同, 气泡的演化形状发生巨大的变化, 如图 5(a), (b), (c) 中的位置 4, 5 所示; 在图 5(a) 中气泡的圆心始终处于凹坑出

口的下部, 但在位置 3 之后, 气泡与壁面的接触点将不断远离凹坑出口的中点处, 而在图 5(b), (c) 中, 则以位置 3 为分界线, 因为此时气泡的圆心就在凹坑出口的中点处, 其半径 $r_3 = D/2$; 也就是说气泡在位置 3 之前, 其圆心在凹坑出口以下, 而在位置 3 之后, 其圆心处在凹坑出口以上, 且在图 5(b) 中, 气泡在位置 3 之后, 气泡与壁面的接触点也将不断远离凹坑出口的中点处. 这再现了气泡成核过程的三个阶段^[6], 一是在凹坑内长大, 即在位置 1, 2 之间; 二是在凹坑出口处长大, 即在位置 2, 3 之间; 三是在位置 3 之后的气泡长大过程, 即在位置 3 之后. 图 4 为不同 G_w 对应的气泡成核过程示意图.

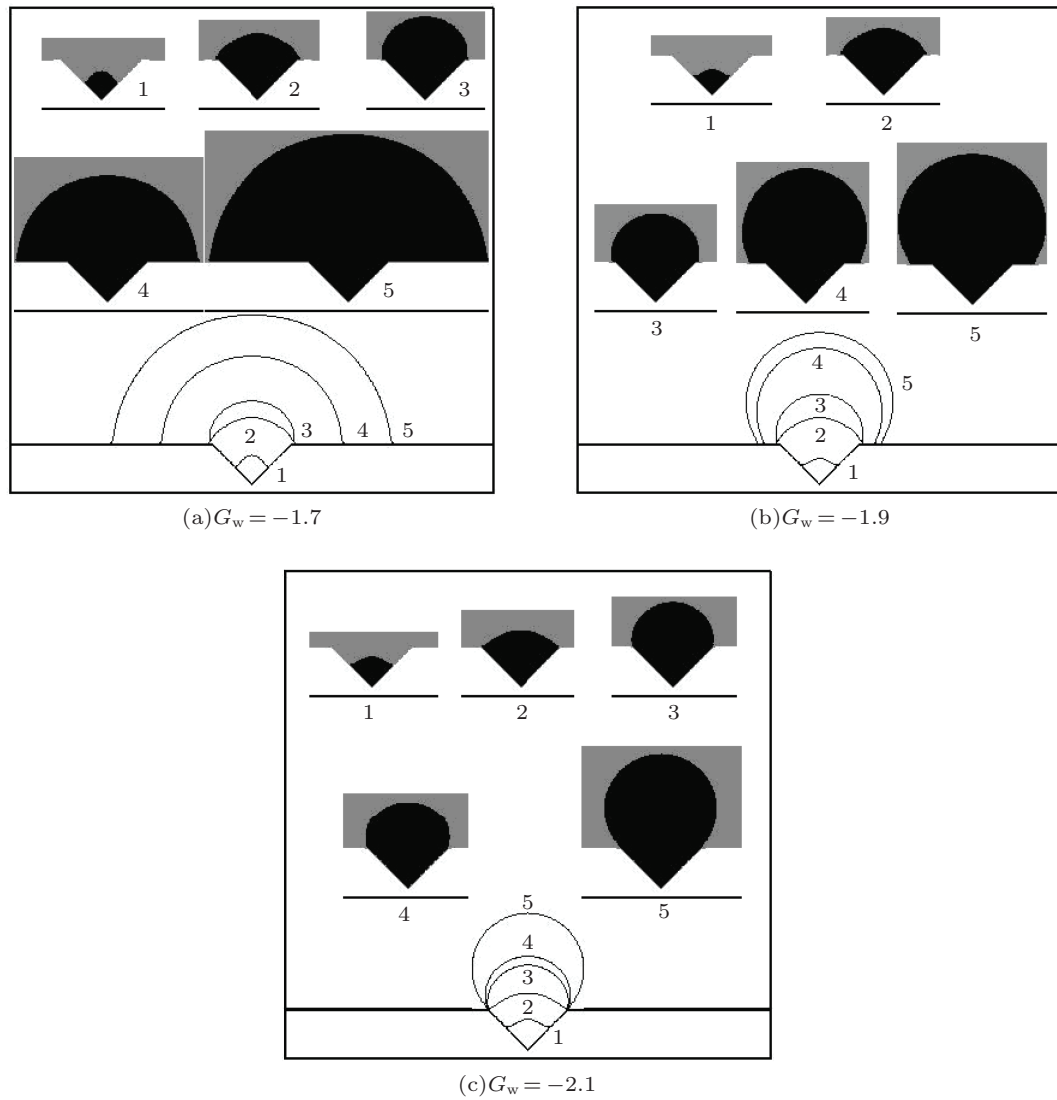


图 5 不同 G_w 对凹坑气泡成核过程的影响图

在探讨气泡成核过程所涉及的物理机理之前, 首先探讨一下, 气泡成核过程中不同阶段体积计算公式: 当 $G_w = -1.7$ 时 (见图 4(a)), 若气泡成长过程处于其第一阶段内, 则其体积计算公式为

$$V_1 = \frac{1}{3}\pi r^3(2 - \sqrt{2}). \quad (24)$$

若其处于第二阶段内, 则其体积计算公式为

$$V_2 = \frac{1}{3}\pi \left[\left(\frac{D}{2}\right)^3 + 2r^3 - \left(2r^2 + \left(\frac{D}{2}\right)^2\right) \times \sqrt{r^2 - \left(\frac{D}{2}\right)^2} \right], \quad (25)$$

$$\left(r = \frac{D/2}{\cos(\pi \times \beta / 180 - \pi/2)} \right).$$

若其处于第三个阶段内, 则其体积计算公式为

$$V_3 = \frac{1}{3}\pi \left[\left(\frac{D}{2}\right)^3 + 2r^3 - \left(2r^2 + \left(x + \frac{D}{2}\right)^2\right) \times \sqrt{r^2 - \left(x + \frac{D}{2}\right)^2} \right], \quad (26)$$

$$\left(r = \frac{D/2}{\cos(\pi \times \beta / 180 - \pi/2)} \right).$$

同样可以获得当 $G_w = -1.9$ 时 (见图 4(b)), 气泡成长过程三个阶段内的体积计算公式: 若气泡处于第一阶段内, 则其体积计算公式见 (24) 式; 第二阶段内的体积计算公式见 (25) 式; 第三阶段内的体积计算公式为

$$V_3 = \frac{1}{3}\pi \left[\left(\frac{D}{2}\right)^3 + 2r^3 + \left(2r^2 + \left(x + \frac{D}{2}\right)^2\right) \times \sqrt{r^2 - \left(x + \frac{D}{2}\right)^2} \right], \quad (27)$$

$$\left(r = \frac{x + D/2}{\sin(\pi \times \beta / 180)} \right).$$

而当 $G_w = -2.1$ 时 (见图 4(c)), 气泡处于第一阶段内的体积计算公式见 (24) 式; 第二阶段内的体积计算公式见 (25) 式; 第三阶段内的体积计算公式见 (27) 式, 但此时的 x 为 0. 在 (24) 式至 (27) 式中 r 均为气泡界面的曲率半径, 则 $1/r$ 均为曲率.

图 6 给出了在气泡成核过程中, 接触角 β 随演化时间的变化. 从图中可以看出, 在特定的流体与壁面间的作用系数 G_w 下, 随着演化时间的增加, 接触角 β 均在不断减小, 但最终均趋于一恒定值; 且 G_w 越大, 稳定后接触角 β 越大, 当 G_w 等于 -1.7 , -1.9 和 -2.1 时, 稳定后接触角 β 分别为 106° , 66° 和 46° , 详见图 7, 且稳定后接触角 β 与 G_w 呈线性

变化关系, 这与文献 [33] 中的结果完全符合; 但在气泡未长大到凹坑出口处时, 流体与壁面间的作用系数 G_w 对气泡的接触角 β 影响不大, 随着气泡长大到凹坑出口处时, G_w 对接触角 β 的影响就越发明显, 尤其是当气核圆心向凹坑出口上方移动, 或者是气泡与壁面的接触点离凹坑出口中心处越来越远时 (即图 5 中的位置 3 之后), G_w 对接触角 β 的影响更大. 此外, 还可以发现在文中给定的三个 G_w 情况下, 其接触角 β 随演化时间变化均出现了两次波动, 只是波动的位置稍有不同, 这正好验证了气泡成核过程划分为三个阶段的合理性.

图 8 给出了在气泡成核过程中, 曲率半径随演化时间的变化. 从图中可看出, 随着演化时间的不断增加, 气泡的曲率半径均遵循先迅速增大、后缓慢减小、而后再增大的变化趋势. 这是因为气泡刚开始是在凹坑内部长大, 其曲率半径不断增大, 且当 G_w 等于 -1.7 , -1.9 和 -2.1 时, 其变化趋势基本一致. 而当气泡长大到凹坑出口处时, 气泡的曲率半径为 r_2 , 之后气泡在凹坑出口处仍然不断长大, 且其曲率中心在不断上升, 也即气泡的曲率半径在不断减小, 但 G_w 越大, 其减小的程度反而减小, 也就是说当 G_w 等于 -1.7 时, 其曲率先到达极小值点, 当气泡曲率半径减小到最小 (见图 5 中的位置 3) 之后, 气泡的曲率半径将不断增大 (见图 5 中的位置 4, 5), G_w 越大, 其增长的趋势就越强烈, 但基本呈线性关系, 且当 G_w 等于 -1.7 时, 其斜率最大. 这也反映出气泡在凹坑处的成核过程可划分为三个阶段.

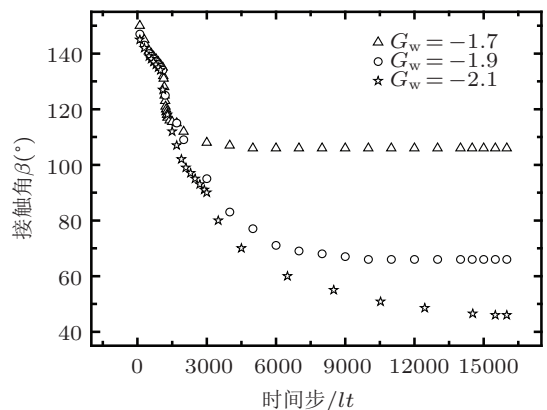


图 6 接触角随演化时间的变化

图 9 给出了在气泡成核过程中, 气泡体积随演化时间的变化. 从图中可以看出, 当 G_w 等于 -1.9 和 -2.1 时, 在气泡长大的初始阶段, 气泡体积快速长大, 当气泡长大到凹坑出口处, 即图 5(b), (c) 中

的位置 2 后, 气泡的曲率中心开始上移, 同时曲率半径开始减小 (见图 8), 于是气泡体积增长速度变慢. 图 5(b), (c) 中的位置 3 为临界点, 曲率中心在凹坑出口的中点处, 由于热流的持续导入, 气泡可以继续长大, 曲率半径又开始增大, 也即气泡体积仍然在不断长大. 而当 G_w 等于 -1.7 时, 在气泡成长的初始阶段, 其长大过程与 G_w 等于 -1.9 和 -2.1 时类似, 但当气泡长到凹坑出口处, 即图 5(a) 中的位置 2 后, 气泡由图 5(a) 中的位置 2 到位置 3 所需的演化时间非常短, 因此还未来的及长到凹坑出口中心处 (图 5(a) 中的位置 3), 气泡与壁面的接触点已经远离凹坑出口中心处 (见图 5(a) 中的位置 4, 5 处), 因而此时气泡体积随演化时间的变化就与 G_w 等于 -1.9 和 -2.1 时完全不同, 但随着演化时间的不断增大, 气泡体积也在不断增大. 但在总体上 G_w 越大, 其气泡体积增大的速度越快.

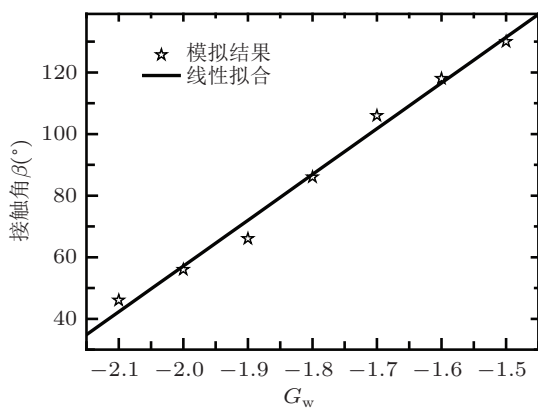


图 7 稳定后接触角随 G_w 的变化

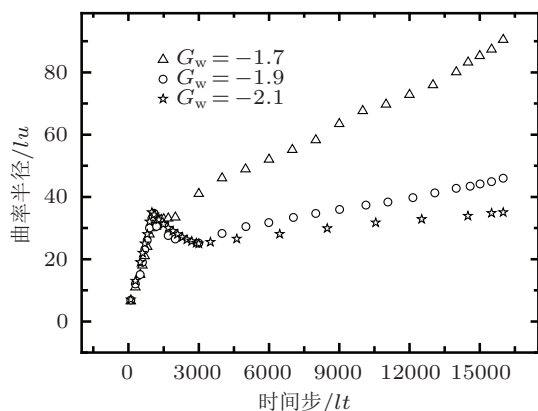


图 8 曲率半径随演化时间的变化

图 10 给出了在气泡成核过程中, 气泡的曲率随其体积的变化关系. 从图中可以看出, 随着气泡体积的增大, 其曲率均迅速减小, 对于 G_w 等于

$-1.7, -1.9$ 和 -2.1 时, 其极小值均相差不大; 随后缓慢增大, 但 G_w 越大, 其曲率率先到达极大值; 而后再减小, 且三者减小的趋势基本相同, 但在同一气泡体积下, G_w 越大, 曲率越小. 显然, 接触角对最大曲率具有较大的影响, 这与文献 [6] 中的结果定性相似, 如图 11 所示. 此外, 从图 10 中可以清楚地观察到气泡成核过程中三个不同阶段其曲率所具有的特性.

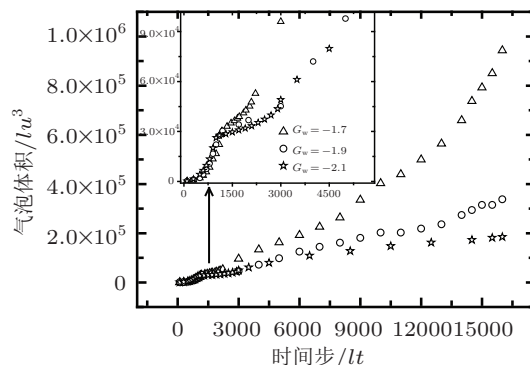


图 9 气泡体积随演化时间的变化

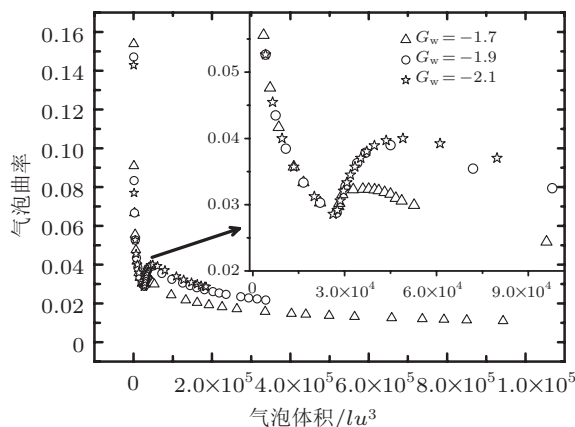


图 10 曲率随气泡体积的变化

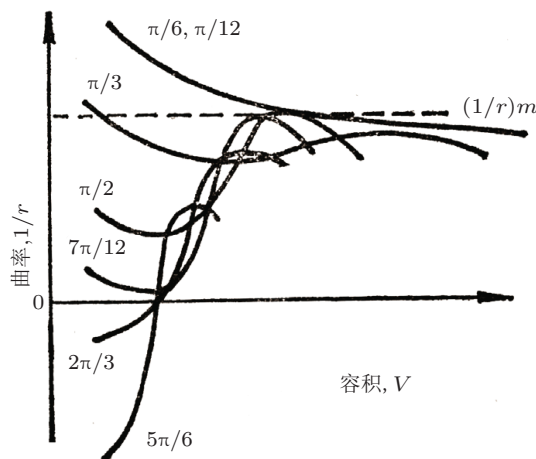


图 11 曲率随气泡体积的变化 [6]

4 结果与讨论

研究沸腾时气泡成核具有重要的工程意义,它不仅广泛地应用于机械、动力和石油化工等传统工业中,而且在航空航天技术、微电子技术和核反应堆技术等现代高科技中也有着广泛的应用前景.但或许由于过程本身的极其复杂性,以往的研究不管是采用理论推导、实验还是传统的数值模拟方法均无法再现气泡成核的整个过程,因而对该过程中所涉及的基础物理机理认识有限.本文采用介观模型方法之一的格子 Boltzmann 方法对气泡成核过程进行模拟.在模拟之前,我们总结评述了以往格子 Boltzmann 相变模型,通过引入精确差分方法改进单组分多相格子 Boltzmann 模型,并利用改进后的模型探讨水在特定温度下的亚稳态平衡和不稳定平衡态,获得在等温相变过程中形成气泡和液

滴的条件,数值计算结果与理论值符合良好.进一步,我们在该模型的基础上耦合能量方程,通过调节流体-固壁间相互作用力以改变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 模型.利用该新模型模拟不同流体-壁面相互作用力下的凹坑气泡成核过程,再现了气泡成核过程的三阶段特性;并得到了接触角、曲率半径及气泡体积在气泡成核过程的演化,提炼出了曲率-气泡体积变化的关系曲线,该曲线与文献结果定性符合.

总的来说,本文发展形成的格子 Boltzmann 相变模型,延伸了多相格子 Boltzmann 理论,对多相格子 Boltzmann 模型领域有一定的贡献,文中还将该计算模型应用于模拟沸腾气泡成核过程,为进一步从介观尺度揭示气泡成核现象的机理奠定了基础,模拟结果也具有一定的工程实用价值.

- [1] Xu J Y 2011 *Boiling Heat Transfer and gas-liquid two phase flow* (Beijing: Atomic Energy Press) p211 (in Chinese) [徐济鏊 2001 沸腾传热和气液两相流 (北京: 原子能出版社) 第 211 页]
- [2] Bestion D, Anglart H, Peteraud P, Smith B, Andreani M, Niceno B, Krepper E, Lucas D, Moretti F, Galassi M C, Macek J, Vyskocil L, Koncar B, Hazi G 2009 *Sci. Tech. Nucl. Installa.* **214512** 1
- [3] Xin M D 1987 *Boiling Heat Transfer and Heat Transfer enhancement* (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]
- [4] Clark H B, Strenge P S, Westwater J W 1959 *Chem. Eng. Progress Symp.* **55** 103
- [5] Bankoff S G 1958 *AICHE J.* **4** 24
- [6] Griffith P, Wallis J D 1960 *Chem. Eng. Prog. Symp.* **30** 7673
- [7] Sato T, Matsumura H 1964 *Bulletin of JSME* **7** 392
- [8] Davis E J, Anderson G H 1966 *AICHE Journal* **12** 774
- [9] Lorenz J J, Mikic B B, Rohsenow, Warren M 1971 *M.I.T Engineering Projects Laboratory* **14091243** 29
- [10] Wang C H, Dhir V K 1993 *J. Heat Transfer* **115** 659
- [11] Mikic B B, Rohsenow W M 1969 *J. Heat Transfer* **91** 245
- [12] Judd R L, Hwang K S 1976 *Heat Transfer* **88** 623
- [13] Dhir V K 1991 *Int. J. Heat Fluid Flow* **12** 290
- [14] Kenning D B R, Yan Y Y 1996 *Int. J. Heat Mass Transfer* **39** 3117
- [15] Zhang L, Shoji M 2003 *Int. J. Heat Mass Transfer* **46** 513
- [16] 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]
- [17] Wang W X, Shi J, Qiu B, Li H B 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 8371 (in Chinese) [王文霞, 施娟, 邱冰, 李华兵 2010 物理学报 **59** 8371]
- [18] Shi Z Y, Hu G H, Zhou Z W 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2595 (in Chinese) [石自媛, 胡国辉, 周哲玮 2010 物理学报 **59** 2595]
- [19] Zhang X M, Zhou C Y, Islam S, Liu J Q 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 8406 (in Chinese) [张李明, 周超英, Islam Shams, 刘家琦 2009 物理学报 **58** 8406]
- [20] Zeng J B, Li L J, Liao Q, Huang Y P, Pan L M 2010 *Chin. Sci Bull.* **55** 3267
- [21] Bruce J P, David R R 2000 *Phys. Rev. E* **61** 5295
- [22] Tentner A, Chen H D, Zhang R Y 2006 *Physica A* **362** 98
- [23] Zhang R Y, Chen H D 2003 *Phys. Rev. E* **67** 1
- [24] Gonnella G, Lamura A, Sofonea V 2007 *Phys. Rev. E* **76** 036703
- [25] Gabor H, Attila M 2009 *Int. J. Heat Mass Transfer* **52** 1472
- [26] Shan X W, Chen H D 1993 *Phys. Rev. E* **47** 1815
- [27] Zeng J B, Li L J, Liao Q, Cui W Z, Chen Q H, Pan L M 2009 *Chin. Sci Bull.* **54** 1
- [28] 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]
- [29] Zeng J B, Li L J, Jiang F M 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 066401 (in Chinese) [曾建邦, 李隆键, 蒋方明 2011 物理学报 **60** 066401]
- [30] Kupershtokh A L 2004 *Proceedings of the 5th International Electrostatic Workshop August 30-31, 2004 Poitiers-France* 241
- [31] Martys N S, Chen H D 1996 *Phys. Rev. E* **53** 743
- [32] Yuan P, Schaefer L 2006 *Phys. Fluids* **18** 1
- [33] Qin R S 2007 *J. Chem. Phys.* **126** 114506
- [34] 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]
- [35] Shen W D, Jiang Z M, Tong J G 2001 *Higher Engineering Thermodynamics* (Beijing: Higher Education Press) p413 (in Chinese) [沈维道, 蒋智敏, 童钧耕 2001 高等工程热力学 (北京: 高等教育出版社) 第 413 页]
- [36] Yuan P 2005 *Ph.D. Dissertation* (Pittsburg: University of Pittsburg) p56

Numerical investigation of bubble nucleation process using the lattice Boltzmann method*

Zeng Jian-Bang¹⁾ Li Long-Jian^{2)†} Jiang Fang-Ming^{1)‡}

1) (*Laboratory of Advanced Energy Systems, CAS Key Laboratory of Renewable Energy, Guangzhou Institute of Energy Conversion, Chinese Academy of Sciences, Guangzhou 510640, China*)

2) (*Key Laboratory of Low-grade Energy Utilization Technologies and Systems of Ministry of Education, College of Power Engineering, Chongqing University, Chongqing 400030, China*)

(Received 19 March 2013; revised manuscript received 14 May 2013)

Abstract

In this paper, the state of metastable equilibrium and the state of unstable equilibrium of water at a certain temperature are explored using an exact difference lattice Boltzmann model and the conditions of bubble (droplet) formation are investigated in the isothermal phase transition processes. From these simulation results, it is found that the model predictions are in good agreement with analytical results. Based on these works, a new model, which is based on exact difference lattice Boltzmann model and extended with an energy transfer equation to model heat transfer, is proposed to describe liquid-vapor phase transition process. The effects of the wall-fluid interaction strength on the bubble nucleation process in a pit are investigated using this new heterogeneous phase transition model. Simulation results accurately reproduce the characteristics of three stages of the bubble nucleation process. The changes of the contact angle, curvature radius, and volume with the bubble nucleation process are explored, and the relationship curve between curvature and bubble volume from the simulations is in qualitative agreement with the previous results.

Keywords: lattice Boltzmann method, bubble nucleation process, liquid-vapor phase transition, contact angle

PACS: 64.60.qe, 63.70.+h, 68.35.Rh

DOI: 10.7498/aps.62.176401

* Project supported by the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51206171), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51076172), the Director Innovation Foundation of Guangzhou Institute of Energy Conversion, Chinese Academy of Sciences (Grant No. y207r31001), and the CAS "100 Talents" Plan.

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

‡ Corresponding author. E-mail: jiangfm@ms.giec.ac.cn