УДК 532.536

МОДЕЛЮВАННЯ ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩ МЕТОДОМ ҐРАТЧАСТОГО МЕТОДУ БОЛЬЦМАНА

Авраменко А.О., член-кореспондент НАН України, Тирінов А.І., доктор техн. наук, Домашев В.Є., Коваленко О.В.

Інститут технічної теплофізики НАН України, вул. Капніст, 2а, Київ, 03057, Україна

<https://doi.org/10.31472/ttpe.3.2020.2>

Розглянуто принципи моделювання тепломасообміну та гідродинаміки течій у пористих середовищах за допомогою методу ґрат Больцмана. Показано методику реалізації закону Дарсі для методу ґрат Больцмана.

Рассмотрены принципы моделирования тепломассообмена и гидродинамики течений в пористых средах с помощью метода решеток Больцмана. Показано методику реализации закона Дарси для метода решеток Больцмана.

The principles of modeling of heat mass transfer and hydrodynamics of flows in porous media using the Lattice Boltzmann Method are considered. The method of implementation of the Darcy law for the Lattice Boltzmann Method is shown.

Бібл. 19, рис. 2.

Ключові слова: теплообмін, гідродинаміка, пористе середовище, метод ґрат Больцмана.

H – ширина каналу;
 f – функція розподілу частинок;
 f_T – функція розподілу енергії;
 F – сила;
 L – довжина каналу;
 t – час;
 T – температура;
 u – швидкість;
 x, y – декартові координати;
 ε – внутрішня енергія;
 ϕ – пористість середовища;

μ – динамічна в'язкість;
 ρ – щільність;
 τ – безрозмірний час релаксації для руху;
 τ_T – безрозмірний час релаксації для енергії;

Безрозмірні параметри:

Da – число Дарсі;
 K_n – число Кнудсена;
 M – параметр, враховуючий пористість середовища;
 Nu – число Нуссельта.

Ґратчастий метод Больцмана (ГМБ) є одним з методів обчислювальної гідродинаміки для моделювання рідин. На відміну від багатьох інших методів, ГМБ не базується на розв'язанні рівняння Нав'є – Стокса, а моделює потік ньютонівської рідини дискретним кінетичним рівнянням Больцмана.

Звичайно, традиційні методи чисельних розрахунків дозволяють отримати достовірні результати. Наприклад, в роботі [1] представлено чисельне дослідження стійкої природної конвекції в невеликій пропорції циліндричної порожнини з круглим перерізом. А в роботі [2] розглядається нестабільність потоків Діна нанофлюїдів у вигнутих каналах, обмежених двома концентричними циліндрами при постійному градієнті азимутального тиску методом колокації. Отримані результати добре узгоджувались з експериментальними даними.

За допомогою традиційних підходів також у [3, 4] розглядаються масоперенос у пористих мікроканалах,

а в [5 - 7] суспензія мікроорганізмів у системах, що складається з рідини та пористих шарів з використанням методу Гальоркіна. Але для отримання результатів необхідно було використати складні методи чисельного розв'язання рівнянь Нав'є – Стокса. На даний момент, ґратчастий метод Больцмана є реальною на альтернативою традиційним чисельним методам моделювання потоків рідини та моделювання фізики в рідинах. ГМБ є особливо успішним в застосуванні до потоку рідини, що включає міжфазну динаміку та складні границі.

На відміну від традиційних чисельних схем, заснованих на дискретизації рівнянь суцільного середовища, ґратчастий метод Больцмана базується на мікроскопічних моделях та мезоскопічних кінетичних рівняннях. Фундаментальна ідея ГМБ полягає в побудові таких спрощених кінетичних моделей, що включають істотну фізику мікроскопічних або мезоскопічних процесів, щоб макроскопічні усереднені властивості

відповідали бажаним макроскопічним рівнянням. Основна передумова використання цих спрощених методів полягає в тому, що макроскопічна динаміка рідини є результатом колективної поведінки багатьох мікроскопічних частинок системи.

Існують два підходи до моделювання пористих середовищ за допомогою ГМБ. Перший з них полягає у моделюванні просторової структури об'єкта, що моделюється. Таким чином не потрібно враховувати ніяких додаткових факторів. Наприклад, у роботах [8, 9] вивчається вплив просторової форми пор на гідродинамічні характеристики потоку, а в [10, 11] наведено результати досліджень просторових форм пористого середовища на гідродинаміку багатофазних течій. У роботі [12] автори розраховували напруги зсуву стінок для згенерованих еталонних геометрій та продемонстрували корисність методу для зразків ґрунту з «випадковими» порами, отриманими за допомогою рентгенівської томографії.

Частіше за все моделювання з використанням першого підходу використовується для визначення інтегрованих характеристик пористого середовища. Ці характеристики потім використовуються при використанні другого підходу. Він полягає в тому, що інтегровані характеристики пористого середовища (закони Дарсі, Форхаймера) використовують для врахування впливу пористості на потік. В роботі [13] цей підхід використано для визначення впливу чисел Дарсі, Гартамана, Релея на гідродинаміку та теплообмін у пористому середовищі.

Мета даної роботи полягає в тому, щоб показати реалізацію лінійного закону гідродинамічного опору (Дарсі) у пористих середовищах для ГМБ. Далі розглянемо особливості застосування методу ГМБ у мікроканалах, заповнених пористим середовищем.

Рис. 1. Схема розрахункової області.

Фізична постановка задачі

Розглянемо потік рідини крізь пористий канал, що утворюється між двома плоскими стінками (рис. 1). Швидкість на вході в канал u_0 , температура середовища на вході T_0 , температура стінок T_w . Довжина каналу L , ширина H .

Метод ґрат Больцмана

Метод ґрат Больцмана ґрунтується на дискретизації рівняння Больцмана. При дискретизації рівняння постає питання дискретного виразу для інтегралу зіткнень. Найкращим, на даний момент, вважається наближення Bhatnagar – Gross – Krook (BGK) [14].

Основною ідеєю методу є дискретне розташування частинок середовища, тобто частинка може займати положення лише у комірках ґрат. Форма комірок ґрат, взагалі, може бути довільною, але для декартової системи координат найбільш прийнятною є прямокутна комірка.

Дискретні рівняння Больцмана для руху та енергії у наближенні BGK у вигляді кінцевих різниць мають наступну форму [15]

$$\begin{aligned} f(x_i + \Delta x_i, t + \Delta t) - f(x_i, t) &= \frac{f^e - f}{\tau} + F(x_i, t) \\ f_T(x_i + \Delta x_i, t + \Delta t) - f_T(x_i, t) &= \frac{f_T^e - f_T}{\tau_T}, \end{aligned} \quad (1)$$

де $\Delta x_i, \Delta t$ – просторові та часовий інтервали відповідно; τ і τ_T є безрозмірним часом релаксації для руху та енергії відповідно; f та f_T – функції розподілу частинок та енергії; f^e і f_T^e є рівноважними розподілами молекул та енергії, що відповідають розподілу Максвелла, $i = 1 \dots d$, де d – мірність простору; F – відображає вплив зовнішніх сил.

Оскільки розглядається потік у плоскому каналі, використовуємо двовимірну ґратку D2Q9 з дев'ятьма напрямками швидкості (рис. 2).

Згідно [16], вираз для зовнішньої сили у рівнянні (1), що враховує вплив пористого середовища, має наступний вигляд

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= -\frac{\phi \mu}{K \rho} \mathbf{u}, \\ K &= \text{Da} H^2, \end{aligned} \quad (2)$$

де ϕ – пористість середовища.

Рис. 2. Напрямки швидкості для ґратки D2Q9.

Згідно [16], форма виразу для зовнішньої сили по кожному напрямі швидкості F_j з точки зору механіки рідини є

$$F_j = w_j \rho \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left[\frac{3(e_j \cdot \mathbf{F})}{c^2} + \frac{9(\mathbf{u} \otimes \mathbf{F} : e_j \otimes e_j)^2}{\phi c^4} - \frac{3\mathbf{u} \cdot \mathbf{F}}{\phi c^2} \right]$$

де $\otimes$ – діадичний добуток двох векторів, $:$ – скалярний добуток двох векторів.

Для дискретної решітки макропараметри описуються наступними співвідношеннями [17]

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_j f_j, \\ \rho \mathbf{u} &= \sum_j c_j f_j, \\ p &= \frac{1}{3} \sum_j (c_j - \mathbf{u})^2 f_j, \\ \rho \varepsilon &= \sum_j f_{T,j}, \end{aligned} \quad (3)$$

де j – кількість швидкісних каналів,

$c = \sqrt{3R_g T}$ – молекулярна швидкість, R_g – газова константа.

$\varepsilon = \frac{3}{2} R_g T$ – внутрішня енергія.

Враховуючи, що

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a} = m \frac{d\mathbf{u}}{dt}$$

та беручи до уваги, що маса пропорційна густині, і що час релаксації τ є елементарним часом зіткнення моле-

кул, внесок зовнішньої сили у швидкість визначається формулою

$$\Delta \mathbf{u} = \frac{\tau \mathbf{F}}{\rho}$$

Значення функцій рівноважного розподілу f_j^e обчислюються за допомогою нового значення швидкості $\mathbf{u}^e$. Це скоригована швидкість, яка включає вплив зовнішніх сил. За відсутності зовнішніх сил, $\mathbf{u}^e = \mathbf{u}$. На основі скоригованої швидкості отримуємо

$$\mathbf{u}^e = \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u} \quad (4)$$

$$f_j^e = \psi_j \rho \left[1 + \frac{3(e_j \cdot \mathbf{u}^e)}{c^2} + \frac{9(e_j \cdot \mathbf{u}^e)^2}{2c^4} - \frac{3(\mathbf{u}^e)^2}{2c^2} \right]$$

де для двовимірної решітки D2Q9 вагові коефіцієнти

$$w_j = \begin{cases} 4/9, & j = 0, \\ 1/9, & j = 1, 2, 3, 4, \\ 1/36, & j = 5, 6, 7, 8 \end{cases}$$

та напрями векторів в руху

$$e_j = \begin{cases} (0, 0), & j = 0, \\ (1, 0)c, (0, 1)c, (-1, 0)c, (0, -1)c, & j = 1, 2, 3, 4 \\ (1, 1)c, (-1, 1)c, (-1, -1)c, (1, -1)c, & j = 5, 6, 7, 8 \end{cases}$$

Для моделювання нестисливого потоку в умовах наявності градієнта тиску використаємо підхід, сформульований у роботі [17]. З цієї метою введемо вираз для щільності вузла

$$\rho = \frac{p}{c_s^2 \rho_*},$$

де ρ_* – постійна щільність нестисливого середовища,

$c_s = c / \sqrt{3}$ – швидкість звуку.

Рівноважний розподіл енергії визначається виразом [18]

$$f_{T,j}^e = \begin{cases} -\frac{3\rho R_g T (\mathbf{u}^e)^2}{2c^2}, & j = 0 \\ \frac{\rho R_g T}{2} \left[3 + \frac{3(e_j \cdot \mathbf{u}^e)}{c^2} + \frac{9(e_j \cdot \mathbf{u}^e)^2}{c^4} - \frac{3(\mathbf{u}^e)^2}{c^2} \right], & j = 1 \dots 4 \\ \rho R_g T \left[3 + \frac{6(e_j \cdot \mathbf{u}^e)}{c^2} + \frac{9(e_j \cdot \mathbf{u}^e)^2}{2c^4} - \frac{3(\mathbf{u}^e)^2}{2c^2} \right], & j = 5 \dots 8 \end{cases}$$

де r та u^e визначаються за виразами (3) та (4) відповідно.

При використанні ГМБ макропараметри, зазначені в граничних умовах, повинні бути пов'язані з мікропараметрами, які беруть участь у розрахунку функцій розподілу. Для моделювання течій у пористих середовищах можна використовувати будь-який з відомих типів граничних умов без ніякої додаткової адаптації.

В роботі [19] детально описано процес реалізації гідродинамічних та теплових граничних умов для потоку крізь пористий канал, а також наведено детальні результати моделювання.

За отриманими у [19] результатами сформовано вираз для значення числа Нусельта

$$Nu = \frac{48M^2 \cosh(\sqrt{M})(\sqrt{M} \cosh(\sqrt{M}) - \sinh(\sqrt{M}))}{2 - (9 + M)\sqrt{M} + 2(M - 6)\sqrt{M} \cosh(2\sqrt{M}) + 15\sinh(2\sqrt{M})}$$

Підсумки

В роботі показано два основних підходи до моделювання теплообміну та гідродинаміки в пористих середовищах. Першим є пряме моделювання геометрії пор, а другим – використання інтегральних характеристик середовища, що впливають на теплообмін та гідродинаміку. Визначено, що, зазвичай, основною метою прямого моделювання є визначення інтегральних характеристик пористого середовища.

Показано спосіб реалізації закону Дарсі в методі ґрат Больцмана.

Дана робота дозволить провадити моделювання теплообміну та гідродинаміки течій у пористих середовищах без використання комерційних пакетів.

ЛІТЕРАТУРА

1. Vargas M. et al. Steady natural convection in a cylindrical cavity //International communications in heat and mass transfer. – 2002. – Т. 29. – №. 2. – С. 213-221.
2. Avramenko A. A. et al. Dean instability of nanofluids with radial temperature and concentration non-uniformity //Physics of Fluids. – 2016. – Т. 28. – №. 3. – С. 034104.
3. Kuznetsov A. V., Avramenko A. A. A minimal hydrodynamic model for a traffic jam in an axon //International Communications in Heat and Mass Transfer. – 2009. – Т. 36. – №. 1. – С. 1-5.
4. Avramenko A. A. et al. Investigation of stability of a laminar flow in a parallel-plate channel filled with a fluid saturated porous medium //Physics of Fluids. – 2005. – Т. 17. – №. 9. – С. 094102.
5. Avramenko A. A., Kuznetsov A. V. The onset of convection in a suspension of gyrotactic microorganisms in superimposed fluid and porous layers: effect of vertical throughflow //Transport in porous media. – 2006. – Т. 65. – №. 2. – С. 159.
6. Kuznetsov A. V., Avramenko A. A. A 2D analysis of stability of bioconvection in a fluid saturated porous medium—estimation of the critical permeability value //International communications in heat and mass transfer. – 2002. – Т. 29. – №. 2. – С. 175-184.
7. Kuznetsov A. V., Avramenko A. A. Stability analysis of bioconvection of gyrotactic motile microorganisms in a fluid saturated porous medium //Transport in porous media. – 2003. – Т. 53. – №. 1. – С. 95-104.
8. Cheng Z. et al. The effect of pore structure on non-Darcy flow in porous media using the lattice Boltzmann method //Journal of Petroleum Science and Engineering. – 2019. – Т. 172. – С. 391-400.
9. Leclaire S. et al. Generalized three-dimensional lattice Boltzmann color-gradient method for immiscible two-phase pore-scale imbibition and drainage in porous media //Physical Review E. – 2017. – Т. 95. – №. 3. – С. 033306.
10. Liu H. et al. Multiphase lattice Boltzmann simulations for porous media applications //Computational Geosciences. – 2016. – Т. 20. – №. 4. – С. 777-805.
11. Sadeghi R. et al. Three-dimensional lattice Boltzmann simulations of high density ratio two-phase flows in porous media //Computers & Mathematics with Applications. – 2018. – Т. 75. – №. 7. – С. 2445-2465.
12. Hyväluoma J. et al. Lattice Boltzmann simulation of flow-induced wall shear stress in porous media //Transport in Porous Media. – 2018. – Т. 121. – №. 2. – С. 353-368.
13. Sheikholeslami M. Lattice Boltzmann method simulation for MHD non-Darcy nanofluid free convection //Physica B: Condensed Matter. – 2017. – Т. 516. – С. 55-71.
14. He X., Luo L. S. Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation //Physical Review E. – 1997. – Т. 56. – №. 6. – С. 6811.
15. P.L. Bhatnagar, E.P. Gross, M. Krook. A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems. Physical Review. 1954. No. 94. pp. 511-525.
16. Y. Peng, C. Shu, Y.T. Chew, A 3D incompressible thermal lattice Boltzmann model and its application to simulate natural convection in a cubic cavity, J. Comput. Physics 2004, 193 (1): 260-274.
17. A.I. Tyurin, A.A. Avramenko, B.I. Basok, B.V. Davydenko, Modeling of flows in a microchannel based on the Boltzmann lattice equation, J. Eng. Phys. Thermophys. 2012, 85 (1): 65–72.
18. C.H. Liu, K.-H. Lin, H.-C. Mai, C.-A. Lin. Thermal boundary conditions for thermal lattice Boltzmann simulations, Computers & Mathematics with Applications 2010, 59 (7):2178-2193.
19. Avramenko A. A. et al. Heat Transfer in Porous Microchannels with Second-Order Slipping Boundary Conditions //Transport in Porous Media. – 2019. – Т. 129. – №. 3. – С. 673-699.

MODELING OF POROUS MEDIA BY THE LATTICE BOLTZMANN METHOD

A.A. Avramenko, A.I. Tyrinov, V.E. Domashev,
A.V. Kovalenko

Institute of Engineering Thermophysics, National Academy of Sciences, Kiev 03057, Ukraine

<https://doi.org/10.31472/tpe.3.2020.2>

The principles of modeling heat and mass transfer and hydrodynamics of flows in porous media using the lattices Boltzmann method are considered. The methodology for implementing the Darcy law for the lattices Boltzmann method is shown.

In contrast to traditional numerical schemes based on discretization of continuous medium equations, the lattices Boltzmann method is based on microscopic models and mesoscopic kinetic equations. The fundamental idea of the lattices Boltzmann method is to build such simplified kinetic models that include the existing physics of microscopic or mesoscopic processes so that the macroscopic averaged properties correspond to the required macroscopic equations. The main premise of using this simplified method is that the macroscopic dynamics of a fluid is the result of the collective behavior of many microscopic particles of the system.

There are two approaches to modeling porous media using the lattices Boltzmann method. The first of them consists in modeling the spatial structure of the simulated system. Therefore, no additional factors need to be considered. The second approach is that the integrated characteristics of the porous medium (Darcy and Forheimer laws) are used to take into account the effect of porosity on the flow.

The purpose of this paper is to show the realization of the linear law of hydrodynamic drag (Darcy) in porous media for the lattices Boltzmann method. Usually, the main goal of direct modeling is to determine the integral characteristics of a porous medium.

The work considers the flow of fluid through a porous channel, which is formed between two flat walls. A method for implementing the Darcy law in the lattices Boltzmann method is shown.

This work will help to simulate the heat transfer and hydrodynamics of flows in porous media without the use of commercial packages.

References 19.

Key words: heat transfer, hydrodynamics, porous medium, lattice Boltzmann method.

1. *Vargas M. et al.* Steady natural convection in a cylindrical cavity //International communications in heat and mass transfer. 2002, V. 29, No.2, P. 213–221

2. *Avramenko A. A. et al.* Dean instability of nanofluids with radial temperature and concentration non-uniformity // Physics of Fluids. 2016, V. 28, No.3, P. 034104.

3. *Kuznetsov A. V., Avramenko A. A.* A minimal hydrodynamic model for a traffic jam in an axon // International Communications in Heat and Mass Transfer. 2009, V.36, No.1, P. 1–5.

4. *Avramenko A. A. et al.* Investigation of stability of a laminar flow in a parallel-plate channel filled with a fluid saturated porous medium //Physics of Fluids. 2005, V.17, No.9, P. 094102.

5. *Avramenko A. A., Kuznetsov A. V.* The onset of convection in a suspension of gyrotactic microorganisms in superimposed fluid and porous layers: effect of vertical throughflow //Transport in porous media. 2006, V. 65, No2, P. 159.

6. *Kuznetsov A. V., Avramenko A. A.* A 2D analysis of stability of bioconvection in a fluid saturated porous medium—estimation of the critical permeability value // International communications in heat and mass transfer. 2002, V. 29, No2, P. 175–184.

7. *Kuznetsov A. V., Avramenko A. A.* Stability analysis of bioconvection of gyrotactic motile microorganisms in a fluid saturated porous medium //Transport in porous media. 2003, V. 53, No1, P. 95–104.

8. *Cheng Z. et al.* The effect of pore structure on non-Darcy flow in porous media using the lattice Boltzmann method //Journal of Petroleum Science and Engineering. 2019, V. 172, P. 391–400.

9. *Leclaire S. et al.* Generalized three-dimensional lattice Boltzmann color-gradient method for immiscible two-phase pore-scale imbibition and drainage in porous media // Physical Review E. 2017, V. 95, No3, P. 033306.

10. *Liu H. et al.* Multiphase lattice Boltzmann simulations for porous media applications //Computational Geosciences. 2016, V. 20, No4, P. 777–805.

11. *Sadeghi R. et al.* Three-dimensional lattice Boltzmann simulations of high density ratio two-phase flows in porous media //Computers & Mathematics with Applications. 2018, V. 75, No7, P. 2445–2465.

12. *Hyväluoma J. et al.* Lattice Boltzmann simulation of flow-induced wall shear stress in porous media //Transport in Porous Media. 2018, V. 121, No2, P. 353–368.

13. *Sheikholeslami M.* Lattice Boltzmann method simulation for MHD non-Darcy nanofluid free convection // Physica B: Condensed Matter. 2017, V. 516, P. 55–71.

14. *He X., Luo L. S.* Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation //Physical Review E. 1997, V. 56, No6, P. 6811.
15. *P.L. Bhatnagar, E.P. Gross, M. Krook.* A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems// Physical Review. 1954, No. 94, P. 511–525.
16. *Y. Peng, C. Shu, Y.T. Chew,* A 3D incompressible thermal lattice Boltzmann model and its application to simulate natural convection in a cubic cavity// J. Comput. Physics. 2004, V.193, No1, P. 260–274.
17. *A.I. Tyrinov, A.A. Avramenko, B.I. Basok, B.V. Davydenko,* Modeling of flows in a microchannel based on the Boltzmann lattice equation// J. Eng. Phys. Thermophys. 2012, V.85, No1, P. 65–72.
18. *C.H. Liu, K.-H. Lin, H.-C. Mai, C.-A. Lin.* Thermal boundary conditions for thermal lattice Boltzmann simulations// Computers & Mathematics with Applications, 2010, V.59, No7, P. 2178–2193.
19. *Avramenko A. A.* et al. Heat Transfer in Porous Microchannels with Second-Order Slipping Boundary Conditions //Transport in Porous Media. 2019, V.129, No3. P. 673–699.

Отримано 07.07.2020

Received 07.07.2020