

Lattice Boltzmann Simulation of Heat and Mass Transfer Coupling with Phase Change in Porous Media*

Shiwei Fan, Jiugu Shao, Xia Li, Yousheng Xu[#]

College of Mathematics, Physics and Information Engineering, Zhejiang Normal University, JinHua
Email: [#]ysyou@zjnu.cn

Received: Nov. 15th, 2012; revised: Nov. 23rd, 2012; accepted: Dec. 8th, 2012

Abstract: Phase change is a basic problem in heat and mass transfer field, especially in porous media. In this work, as it's nonlinear characteristics, Lattice Boltzmann method (LBM) is used to numerically simulate the heat and mass transfer coupling with phase change in porous media, and results showed that different Darcy Numbers have some certain effects on phase change process in porous medium.

Keywords: Lattice Boltzmann Method; Porous Medium; Liquid-Solid Phase Change with Convection; Darcy Number

对流换热耦合相变渗流问题的格子玻尔兹曼方法研究*

范世炜, 邵九姑, 李霞, 许友生[#]

数理与信息工程学院, 浙江师范大学, 金华
Email: [#]ysyou@zjnu.cn

收稿日期: 2012年11月15日; 修回日期: 2012年11月23日; 录用日期: 2012年12月8日

摘要: 相变是传质传热中的一种典型情况。而多孔介质中物质的相变在工业生产和日常生活中十分常见。由于相变问题的非线性特点, 需要格子 Boltzmann 方法这种能够模拟流体运动以及为复杂物理现象建模的数值方法来处理它。本文运用格子 Boltzmann 方法对纯相变以及多孔介质内物质的对流相变过程进行了数值模拟, 并对数值结果加以研究和讨论。发现不同的达西数对多孔介质内的对流相变过程中有重要的影响。

关键词: 格子 Boltzmann 方法; 多孔介质; 有对流的固液相变; 达西数

1. 引言

多孔介质中质量、动量和能量的传递现象^[1]遍及于工农业生产的各个领域, 例如: 油气田开采中的渗流问题; 地热资源的开发与利用; 埋地电线相直流接地极的热耗散; 地源热泵和地冷空调中换热器埋管, 保温隔热材料的热物理过程, 食品、药材和农产品的对流干燥, 各种工业多孔填料中的液分蒸发及毛细抽吸现象; 工业废热改良土壤性能及农作物的增产增收; 农业生态系统中植物对能量、水分和养分的供求关系等。正是由于这些广泛的应用背景, 国内外许多

学者投入了大量的精力来研究多孔介质中的传输现象, 并建立了许多理论模型。从学科发展的前景来看, 多孔介质传热传质学已经渗透到许多学科和技术领域, 包括农业、能源、冶金、化工、材料、空间科学、环境科学、生命科学和医学。由于它涉及的领域极为广泛, 因而毫无疑问地成为交叉和边缘学科的一个潜在生长点。多孔介质传热传质的理论和应用研究, 是具有重要学术和应用价值的, 对学科发展和技术进步具有重大而深远影响的。

人们对多孔介质中能量、动量和质量传递现象的关注和研究由来已久。最初的研究领域是地下水勘探与预测。早在 1856 年, 达西(H. Darcy)曾对地下水源

*基金项目: 国家自然科学基金 0932010, 11072220 资助。

[#]通讯作者。

进行了研究,提出了著名的适用于一定条件下多孔介质中流体流动的达西定律^[2]。因此,多孔介质学科是发展较早的科学技术领域之一。但是,在此后一个很长的历史时期内,一直停留在土壤与岩层中水体流动这一类问题上,直到20世纪30年代,由于石油开采和运输业的迅速崛起,才加速了多孔介质传递科学技术的发展。50年代前后,许多学者对多孔物料干燥的原理与技术进行了较为全面、系统、深入的研究,使人们对多孔介质传热传质过程的认识与控制达到了一个新的高度。随着能源、化工、冶金、原子能、航空航天、制冷低温、食品加工、生物工程等领域中的技术发展,以及近代工农业生产的技术进步,又提出了大量更为复杂的多孔介质传递过程问题,从而更进一步促进了多孔介质传递科学技术的各种研究,使其成为当今科学技术中令人瞩目的研究热点之一。无论是科学的发展、技术的进步,还是现实的需求,多孔介质学科的形成和发展已成为了必然。

2. 用 Lattice Boltzman 方法处理多孔介质内有对流的固液相变

2.1. 模型与理论

2.1.1. 控制方程

由融化过程中的自然对流是一个缓慢的过程。液相区的自然对流是由重力作用引起的。Boussinesq 近似后,多孔介质中对流相变的控制方程写为(Guo^[3]和 Jiaung^[4]):

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \left(\frac{\mathbf{u}}{\phi} \right) = -\frac{1}{\rho_l} \nabla(\phi p) + \nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{u}) + \mathbf{F} \quad (2)$$

$$\sigma \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\alpha \nabla T) - \frac{L}{C} \frac{\partial f_l}{\partial t} \quad (3)$$

方程(1)(2)(3)式中, \mathbf{u} 是流体的速度矢量, p 是压力, ν 是粘性系数, ϕ 是多孔介质的孔隙度, α 是热扩散系数, β 是热膨胀系数, 纯净物与多孔介质的热熔比 $\sigma = \phi + (1-\phi)\rho_s c_{ps} / \rho_f c_{pf}$, c 为热容比, 它们的下标 s, f, p 分别表示固体、流体和恒压, 这里 σ 等于 1。另外, 外力项 \mathbf{F} 为

$$\mathbf{F} = -\frac{\phi \nu}{K} \mathbf{u} - \frac{\phi F_\phi}{\sqrt{K}} |\mathbf{u}| \mathbf{u} - \phi \mathbf{g} \beta (T - T_0) \quad (4)$$

(4)式中的第一项表示流体与多孔介质之间的相互作用力, 第二项代表几何结构的影响, 最后一项代表重力作用。

$$F_\phi = \frac{1.75}{\sqrt{150\phi^3}}, K = \frac{\phi^3 d^2}{150(1-\phi)^2} \quad (5)$$

$\Phi = \frac{L}{C} \frac{\partial f_l}{\partial t}$ 是相变过程中的热源项。

这里有 3 个描述控制方程的无量纲参数:

$$D_a = \frac{K}{l^2}, P_r = \frac{\nu}{\alpha}, R_a = \frac{g \beta \Delta T l^3}{\nu \alpha} \quad (6)$$

(6)式中 D_a 为达西数, P_r 为普朗特数, R_a 为瑞利数。其中 l 为特征长度。

2.1.2. 多孔介质中对流相变的 LB 方程

图 1 为封闭方腔内多孔介质对流相变示意图。方腔内填充了孔隙度为 ϕ 的多孔介质。 ϕ 的值恒定不变。方腔左壁的温度始终保持在 T_1 。在这个多孔的方腔内充满了温度为 T_0 ($T_0 < T_1$) 的固态纯净物, 该纯净物在常压下的相变温度为 T_m ($T_0 < T_m < T_1$)。上下壁及右壁绝热。图 1 中的黑色曲线为相变界面, 它将方腔内的纯净物分为固相和液相两个区域。

该模型在速度场的 LB 方程可以写为^[5]:

$$\begin{aligned} & f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \cdot \Delta t, t + \Delta t) \\ & = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + \Delta t \cdot \mathbf{F}_i \end{aligned} \quad (7)$$

$f_i(\mathbf{x}, t)$ 是粒子的密度分布函数, 下标 i 表示速度方向, \mathbf{x} 是粒子的位置, t 是时间, $f_i(\mathbf{x}, t)$ 是时间间隔, τ 是速度场的弛豫时间。 $f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$ 是粒子的平衡态密度分布函数。

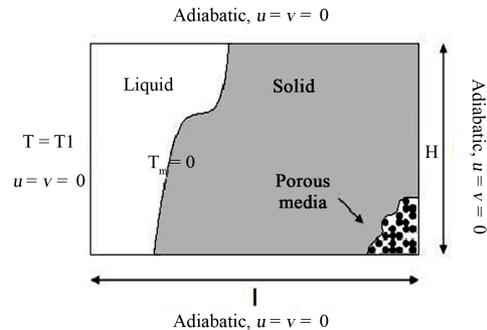


Figure 1. Schematic of the melting in a square with variable porosity medium
图 1. 多孔介质方腔内对流相变示意图

在 D2Q9 模型中, 离散的粒子速度 \mathbf{e}_i 是给定的:

$$\mathbf{e}_i = \begin{cases} 0 & i = 0 \\ \left(\cos \frac{(i-1)\pi}{2}, \sin \frac{(i-1)\pi}{2} \right) & i = 1-4 \\ \sqrt{2} \left(\cos \left[\frac{(i-5)\pi}{2} + \frac{\pi}{4} \right], \sin \left[\frac{(i-5)\pi}{2} + \frac{\pi}{4} \right] \right) & i = 5-8 \end{cases} \quad (8)$$

考虑到多孔介质对流体流动的影响以及其他外力的作用, 公式(7)中的 \mathbf{F}_i 被表示为:

$$F_i = \omega_i \rho \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left[\frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{F}}{c_s^2} + \frac{\mathbf{u} \mathbf{F} : (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_i - c_s^2 \mathbf{I})}{\phi c_s^4} \right] \quad (9)$$

平衡态密度分布函数为

$$f_i^{eq} = \omega_i \rho \left[1 + 3(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}) + 4.5 \frac{(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{\phi} - 1.5 \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})}{\phi} \right] \quad (10)$$

权重 $\omega_0 = 4/9$, $\omega_i = 1/9 (i = 1-4)$, $\omega_i = 1/36 (i = 5-8)$ 。流体的密度被定义为

$$\rho = \sum_i f_i(\mathbf{x}, t) \quad (11)$$

粘滞系数 ν 为

$$\nu = c_s^2 \Delta t (\tau - 0.5) \quad (12)$$

经多尺度展开验证, LB 方程(7)式是正确的。

在多孔介质中温度场的 LB 方程与对流的影响耦合, 因而温度场的 LB 方程为

$$\begin{aligned} & g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \cdot \Delta t, t + \Delta t) \\ &= g_i(\mathbf{x}, t) - \frac{\Delta t}{\tau} \left[g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{(0)}(\mathbf{x}, t) \right] - \Delta t \omega_i \frac{L}{C} \frac{f_i' - f_i}{\Delta t} \end{aligned}$$

平衡态温度分布函数 g_i^{eq} 改为^[6]

$$g_i^{eq} = T \omega_i^T \left[1 + \frac{1}{c_s^2} (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{u}) \right] \quad (13)$$

热传导系数为

$$\alpha = c_s^2 (\tau_h - 0.5) \Delta t \quad (14)$$

这里 \mathbf{v}_i 和 \mathbf{u} 分别是格子速度和宏观流体流动速度。 τ_h 为温度场的弛豫时间

以上 LB 方程经多尺度展开^[4,7,8]后便可得到宏观能量方程式(3)式。

2.1.3. 边界条件

在 LB 方法中, 边界条件的选取将直接影响计算的精确性和简洁性, 选择一个适当的边界条件将使结果更加可靠。在这里, 我们选用了非平衡态外推条件来处理速度场的相变界面和二维方腔的四个壁面。假如格点 b 是边界上的点, 格点 f 是流场中的点, f 点和 b 点的位置关系是 $\mathbf{x}_f = \mathbf{x}_b + \mathbf{e}_i \cdot \Delta t$ 。速度 $\mathbf{u}(\mathbf{x}_b, t)$ 是已知的, 密度 $\rho(\mathbf{x}_b)$ 是未知的, 所以 b 点分布函数 $f_i(\mathbf{x}_b)$ 就可以从下式得到

$$f_i(\mathbf{x}_b) - f_i^{eq}(\mathbf{x}_b) = f_i(\mathbf{x}_f) - f_i^{eq}(\mathbf{x}_f) \quad (15)$$

温度场的边界条件与速度场相同, 因此 b 点温度分布函数为

$$g_i(\mathbf{x}_b) - g_i^{eq}(\mathbf{x}_b) = g_i(\mathbf{x}_f) - g_i^{eq}(\mathbf{x}_f) \quad (16)$$

2.2. 数值结果与讨论

对于融化过程, 能量的传递和流体的流动主要依靠热传导和重力作用。达西数是表征流体流过多孔介质时, 其流速与流动方向上的压力梯度成正比趋势的物理量, 在流体研究中具有重要意义。为了研究 Da 对流动的影响, 其他参数设定为: $\phi = 0.6$, $\phi = 0.6$, $R_a = 5 \times 10^5$, $S_i = 4.0$, $T_0 = -0.2$, $T_1 = 1.0$ 。该纯净物的相变温度 T_m 等于 0, 相变潜热 L 等于 0.25。以下是我们讨论分析了达西数在具体案例中的影响情况。

2.2.1. 研究达西数 Da 对温度和流动的影响

图 2 是模型的等温度和流线图, 从上到下达西数 Da 依次是 5×10^{-5} 、 5×10^{-4} 、 5×10^{-3} 、 5×10^{-2} 、 5×10^{-1} 。五张等温线图中标记的在 $Y=3L/5$ 处的点的温度等于相变温度 $T = T_m = 0$ 。五张流线图中的空白处标明此区域为固相区, 没有发生对流。如图 2(左 1)所示, 当 $Da = 10^{-5}$ 时等温线几乎是垂直的, 这就意味着在低达西数下, 热传导对能量传递起主导作用, 而对对流的作用不明显。随着达西数 Da 的增大, 等温线的弯曲形状就越加明显。在高达西数 $Da = 5 \times 10^{-1}$ 下, 等温线弯曲已经十分明显, 这意味着在高达西数下对流起主要作用。

2.2.2. 达西数对相变界面位置的影响

相变界面的位置同样是相变研究中最关心的。Huber^[6]在 2008 年发表的文章中就验证了相变的对流情况, 但是在多孔介质中相变的界面位置又会

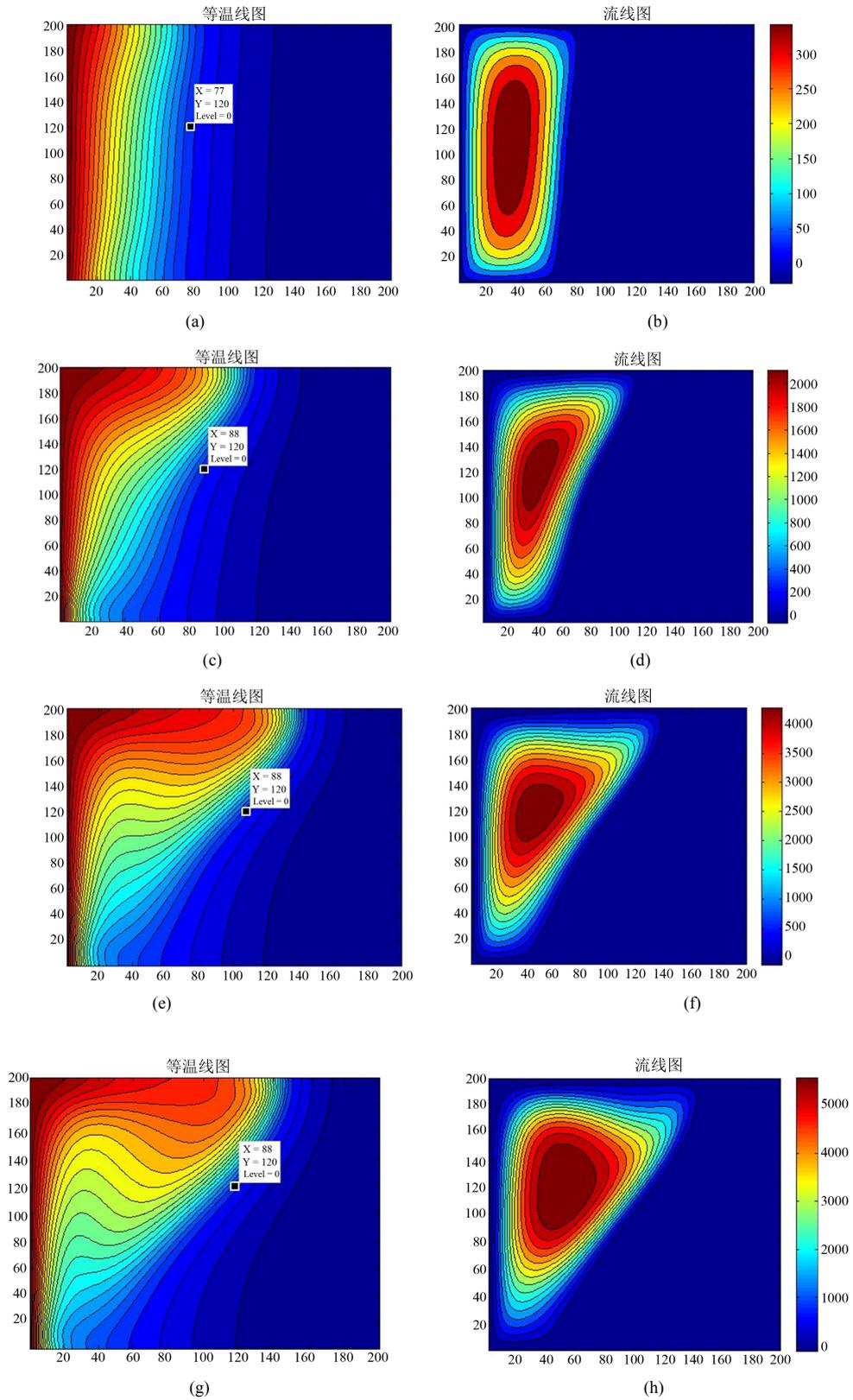


Figure 2. Isotherms (left) and streamlines (right) in the case of $\phi_0 = 0.6, Pr = 1.0, Ra = 1.0e + 5$; from top to bottom, $Da = 5.0e - 5, 5.0e - 4, 5.0e - 3, 5.0e - 2, 5.0e - 1$

图 2. 在 $\phi_0 = 0.6, Pr = 1.0, Ra = 1.0e + 5$ 下的等温线图(左)和流线图(右): 从上至下 $Da = 5.0e - 5, 5.0e - 4, 5.0e - 3, 5.0e - 2, 5.0e - 1$

怎样变化呢？图 3 是达西数分别为 $Da = 5 \times 10^{-3}$ ， 5×10^{-2} ， 5×10^{-1} 时不同达西数下，温度沿着 $y = 120$ 位置的横线变化情况。可以看到 $x = 50$ 后随着达西数的增大温度也随着增高，但是在 $x = 50$ 前，可以看到随着达西数的减少温度也增高的现象，而这正是对流对温度的影响，与我们之前在 2.2.1 中得出的结论相吻合。还可以看到在温度等于“0”位置，也就是相变界面，随着达西数的增大，相变界面的移动速度逐渐加快。

2.2.3. 研究达西数对温度场和速度场的影响

图 4(a)、(b) 分别是 $x = 50$ 位置的竖直线上速度和温度的变化情况。可以看到达西数的大小不仅会影响热传导，同样也会影响对流。在图 4(a) 中，速度在方腔顶部和底部附近最大和最小两个峰值。随着达西数 Da 的增大，两个峰值会变得更加陡峭。对流在顶部和底部最为活跃。在中间区域，速度随着高度 h 的增加而变大。在图 4(b) 中，方腔底部的温度是最低的。温度随着高度的上升而上升，在高度 $h = 200$ 时到达最大值。图 4(a) 和 (b) 解释了相变液相区中较热的流体上涌，较冷的流体由于重力作用下沉的现象。这个运动导致了速度产生最大和最小两个峰值，以及底部流体最冷，顶部最热。

3. 结论

格子 Boltzmann 模型适合应用于多孔介质中对流相变问题。考虑到重力和多孔介质的外力的作用，我

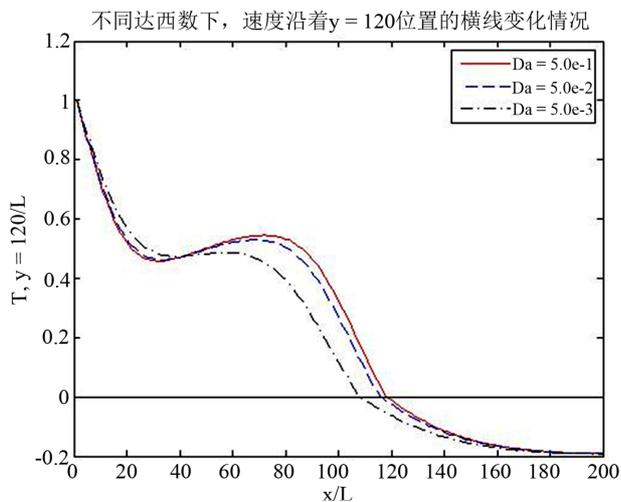
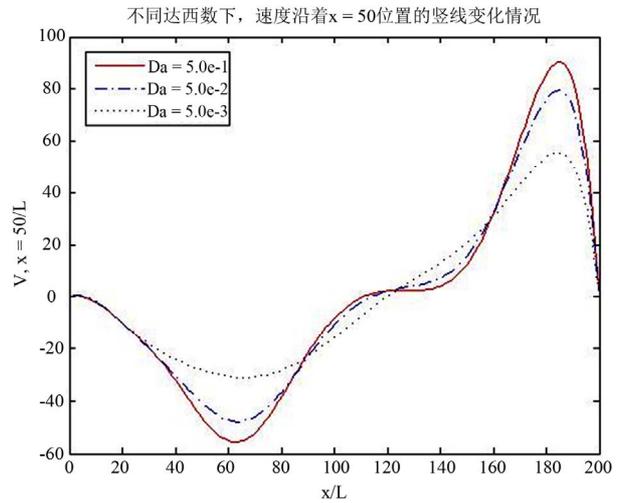
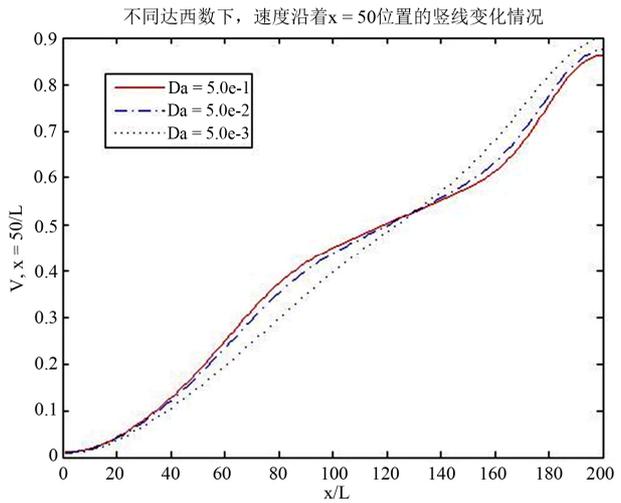


Figure 3. Temperature distribution along the horizontal line at $y = 3L/5$ with different Darcy Numbers in 200×200 lattices
图 3. 在 200×200 的格子不同达西数下，温度沿着 $y = 3L/5$ 位置的横线变化情况



(a)



(b)

Figure 4. T Comparison of velocity (a) and temperature (b) distribution along the vertical line at $x = L/4$ with different Darcy Numbers in 200×200 lattices

图 4. 在 200×200 的格子中，速度(a)和温度(b)沿着 $x = L/4$ 位置的竖直线的变化情况

们修改了 LB 方程和平衡态分布函数。根据模拟结果得出如下结论：

- 1) 随着达西数 Da 的增大，等温线的弯曲形状将越加明显；
- 2) 在高达西数 Da 下，融化过程中的自然对流传热有重要影响；
- 3) 达西数同样影响了对流和传热。当达西数增大时，相变界面向右移动变快；
- 4) 融化过程中，较热的流体上涌，较冷的流体由于重力作用下沉。这个运动导致了速度产生最大和最小两个峰值，以及底部流体最冷，顶部最热。

参考文献 (References)

- [1] 刘伟, 范爱武, 黄晓明. 多孔介质传热传质理论与应用[M]. 北京: 科学出版社, 2006.
- [2] 张鸿雁, 张志政, 王元. 流体力学[M]. 北京: 科学出版社, 2004.
- [3] Z. L. Guo, T. S. Zhao. Lattice Boltzmann model for incompressible flows through porous media. *Physical Review E*, 2002, 66(32): 36301-36304.
- [4] W. S. Jiaung, J. R. Ho and C. P. Kuo. Lattice Boltzmann method for the heat conduction problem with phase change. *Numerical Heat Transfer B*, 2001, 39(2): 167-187.
- [5] W. W. Yan, Y. Liu, Z. L. Guo and Y. S. Xu. Lattice Boltzmann simulation on natural convection heat transfer in a two-dimensional cavity filled with heterogeneously porous medium. *International Journal of Modern Physics C*, 2006, 17(6): 771-783.
- [6] C. Huber, A. Parmigiani, B. Chopard, M. Manga and O. Bachmann. Lattice Boltzmann model for melting with natural convection. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 2008, 29: 1469-1480.
- [7] U. Frisch, D. d'Humieres, B. Hasslacher, P. Lallemand, et al. Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions. *Complex Systems*, 1987, 1: 649-707.
- [8] U. Frisch, B. Hasslacher and Y. Pomeau. Lattice-gas automata for navier-stokes equations. *Physics Review Letters*, 1986, 56(14): 1505-1508.