

УДК 532.517.4

## Исследование феномена распада вихря в несмешиваемых средах методом решёточных уравнений Больцмана\*

М.В. Сальников<sup>1</sup>, К.С. Кинзин<sup>1,2</sup>, И.В. Наумов<sup>1,2</sup>, Р.И. Мулляджанов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск

<sup>2</sup>Новосибирский государственный университет

E-mail: salnikovitsbras@gmail.com

Проведено численное исследование вихревого течения двухкомпонентной жидкости в цилиндрической области. Используемая для численных расчетов модель основывается на методе решеточных уравнений Больцмана (LBM). Интеграл столкновения в данной модели определен приближением MRT. Взаимодействие компонент жидкостей описывается моделью диффузного интерфейса, где использовано приближение псевдопотенциалов. Основной недостаток подхода — дисбаланс дискретных сил межкомпонентного взаимодействия и, как следствие, возникновение псевдотоков в области перехода между двумя компонентами. В рамках проведенного численного исследования установлен качественный вид функции псевдопотенциала и величина коэффициента взаимодействия компонент жидкостей, для которых псевдотоки оказываются наименьшими, а диффузный переход — наиболее узким. Выполнено численное моделирование задачи вращения двух компонент в цилиндре и определены области параметров числа Рейнольдса и относительного удлинения цилиндра, при которых появляется рециркуляция на оси цилиндра. Показано, что результаты моделирования с хорошей точностью соответствуют экспериментальным данным.

**Ключевые слова:** многокомпонентная жидкость, решеточные уравнения Больцмана, закрученный поток, распад вихря.

### Введение

Цилиндр с вращающимся верхним основанием представляет собой элементарную модель для описания процессов в реакторах различного типа [1–5]. Его основание неподвижно вдоль оси цилиндра и выполнено из того же материала, что и стенки рабочего объема [6–8]. Цилиндр полностью заполнен жидкостью, герметично закрыт и теплоизолирован. Качественный вид течения зависит от относительного удлинения цилиндра  $h/R$  и числа Рейнольдса  $Re = \Omega R^2/\nu$ , где  $\nu$  — кинематическая вязкость жидкости,  $\Omega$  — угловая скорость вращения торца.

---

\* Работа выполнена при поддержке РНФ (грант № 19-19-00083). Расчет выполнен в рамках государственного задания на кластере «Каскад» Института теплофизики СО РАН.

В результате действия центробежных сил жидкость растекается от оси цилиндра к боковым стенкам и опускается вниз вдоль его боковых стенок. При достижении нижнего основания жидкость сходится к оси, образуя восходящий закрученный поток. При определенных значениях параметров  $h/R$  и  $Re$  структура вихревого течения изменяется [3, 4, 9–11]: в центральном восходящем вихре возникает устойчивая рециркуляционная зона возвратного течения [12]. В работе [13] для  $h/R = 1,0–3,5$  было зафиксировано и систематизировано появление зон с противотоком. Эти зоны не участвуют в общей циркуляции жидкости, поэтому их появление влияет на эффективность процессов в реакторах [1, 2].

В вихревых аппаратах часто исследуются мультикомпонентные жидкости [3, 4, 7]. Параметры  $h/R$  и  $Re$ , при которых появляются зоны рециркуляции, для таких жидкостей не соответствуют однокомпонентному случаю [11]. Разработка численной модели для описания данной задачи важна, так как механизмы взаимодействия компонент жидкости между собой до конца не изучены. Кроме того, существует необходимость описания таких явлений, как искривление формы поверхности перехода [8, 14, 15], появление кривой гистерезиса в потоках [7, 16–18] и скачок скорости в области перехода двух жидкостей [11, 19, 20].

Метод решеточных уравнений Больцмана (Lattice Boltzmann Method, LBM) используется для моделирования широкого спектра задач: мультикомпонентных течений [21], многофазных течений [22], кипения [23, 24] и др. Отличительная черта метода заключается в локальном учете нелинейных эффектов [25]. Локальность взаимодействий в LBM позволяет достигать высокой производительности вычислений [26]. Также данный метод подходит для решения задач, где выполняется моделирование течений жидкости или газа вблизи объектов сложных геометрических форм [27–32]. Наиболее простым для описания криволинейной геометрии является подход Bounce Back [33, 34].

В настоящей работе исследуется вихревое ламинарное течение двухкомпонентной жидкости в замкнутом цилиндре для различных значений параметров  $h/R$  и  $Re$ . Численная модель сконструирована на основе открытого кода Palabos [35]. В качестве приближения интеграла столкновений используется подход MRT (multiple-relaxation-time) [24, 36, 37]. Взаимодействие компонент жидкости учитывается моделью псевдопотенциалов Шан-Чена (Shan–Chen) [38, 39]. Преимущество метода Шан–Чена заключается в автоматическом формировании поверхностей перехода между компонентами [40]. В работе проводится сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными и анализируется, насколько качественно использованная модель (LMRT-SC) описывает вихревое ламинарное мультикомпонентное течение.

## 1. Описание модели

В представленной работе используется метод решеточных уравнений Больцмана, с помощью которого выполняется моделирование эволюции дискретных функций распределения  $f_i(\vec{x}, t)$ . Распространение функций  $f_i(\vec{x}, t)$  в пространстве осуществляется согласно набору дискретных векторов  $\vec{c}_i = (c_{ix}, c_{iy}, c_{iz})$ . В данной модели используется набор скоростей D3Q27. Из набора популяции первые два момента восстанавливаются согласно формулам

$$\rho(\vec{x}, t) = \sum_i f_i(\vec{x}, t), \quad \rho u_\alpha(\vec{x}, t) = \sum_i c_{i\alpha} f_i(\vec{x}, t). \quad (1)$$

В классическом методе LBM набор независимых уравнений, с помощью которого моделируется движение однокомпонентной жидкости, определяется как

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t) + \Omega_i(\vec{x}, t). \quad (2)$$

Уравнение (2) моделирует поведение частиц жидкости, движущихся со скоростью  $\vec{c}_i$  к соседней точке  $\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t$  и достигающих ее ко времени  $t + \Delta t$ . Здесь  $\Omega_i(\vec{x}, t)$  — оператор столкновений.

Один из подходов для описания поведения многокомпонентной среды заключается в принятии предположения, что каждая компонента жидкости обладает своим набором популяций:

$$f_i^{(\sigma)}(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^{(\sigma)}(\vec{x}, t) + \Omega_i^{(\sigma)}(\vec{x}, t), \quad (3)$$

где  $\sigma$  — номер компоненты. Данная система уравнений подразделяется на два шага: столкновений и переноса, которые определяются следующим образом:

$$f_i^{*(\sigma)}(\vec{x}, t) = f_i^{(\sigma)}(\vec{x}, t) + \Omega_i^{(\sigma)}(\vec{x}, t), \quad (4)$$

$$f_i^{(\sigma)}(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^{*(\sigma)}(\vec{x}, t), \quad (5)$$

где  $f_i^*$  — промежуточное значение популяции после столкновения.

В настоящей работе в качестве интеграла столкновений используется приближение MRT. Комплекс уравнений LMRT (Lattice MRT, т.е. LBM с интегралом столкновений, описанным приближением MRT) выводится из уравнения (3) и имеет общий вид:

$$f_i^{(\sigma)}(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^{(\sigma)}(\vec{x}, t) - M^{-1,(\sigma)} \hat{S}^{(\sigma)} M^{(\sigma)} [f_i^{(\sigma)}(\vec{x}, t) - f_i^{(\sigma),\text{eq}}(\vec{x}, t)] \Delta t, \quad (6)$$

где  $M$  — матрица преобразования популяций в пространство моментов,  $M^{-1}$  — обратная матрица,  $\hat{S}$  — матрица частот релаксаций,  $f_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t)$  — равновесные популяции, определяющиеся формулой

$$f_i^{\text{eq}} = w_i \rho \left( 1 + \frac{u_a c_{ia}}{c_s^2} + \frac{(u_a c_{ia})^2}{2c_s^4} - \frac{u_a u_a}{2c_s^2} \right), \quad (7)$$

где  $c_s^2 = (1/3)\Delta x^2/\Delta t^2$  — скорость звука,  $w_i$  — дискретная весовая функция для популяций сорта  $i$  [36].

Идея подхода MRT заключается в преобразовании набора функций  $f_i(\vec{x}, t)$ , принадлежащих пространству популяций, в набор  $m_i(\vec{x}, t)$ , принадлежащих пространству моментов. Затем для каждой отдельной функции  $m_i(\vec{x}, t)$  выполняется релаксация с частотой  $\omega_i$ , определенной матрицей  $\hat{S}$ . Это позволяет гарантировать выполнение законов сохранения массы и импульса в объеме жидкости.

Вид матриц  $\hat{S}$  и  $M$  приводился в работе [36]. Здесь частоты релаксаций были выбраны в виде:

$$\omega_{0-3} = \frac{1}{\Delta t}, \quad \omega_4 = \frac{1}{\Delta t}, \quad \omega_{5-9} = \left( \frac{\nu}{c_s^2 \Delta t} + 0,5 \right)^{-1}, \quad \omega_{10-26} = \frac{1}{\Delta t}, \quad (8)$$

где  $\nu$  — кинематическая вязкость, определяемая условиями задачи.

В присутствии сил, таких как сила гравитации или сила межкомпонентного взаимодействия, выражение (6) запишется в виде:

$$f_i^{(\sigma)}(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^{(\sigma)}(\vec{x}, t) - M^{-1,(\sigma)} \hat{S}^{(\sigma)} M^{(\sigma)} \left[ f_i^{(\sigma)}(\vec{x}, t) - f_i^{(\sigma),eq}(\vec{x}, t) \right] \Delta t + S_{MRT}^{(\sigma)} \Delta t, \quad (9)$$

где  $S_{MRT}$  — член источника сил, определяемый как

$$S_{MRT}^{(\sigma)} = M^{-1,(\sigma)} \hat{S}_{force}^{(\sigma)} M^{(\sigma)} F_i^{(\sigma)}, \quad (10)$$

$$\hat{S}_{force,i}^{(\sigma)} = 1 - \frac{\omega_i^{(\sigma)} \Delta t}{2}, \quad (11)$$

где  $F_i^{(\sigma)}$  — вектор внешних сил. Для определения внешних сил в представленной работе применялся подход Гую:

$$F_i = w_i \left( \frac{c_{i,\alpha} - u_{fluid,\alpha}}{c_s^2} + \frac{(c_{i,\beta} \times u_{fluid,\beta}) c_{i,\alpha}}{c_s^4} \right) F_{ext,\alpha}, \quad (12)$$

где  $u_{fluid,\alpha}$  — физическая скорость жидкости,  $F_{ext,\alpha}$  — суперпозиция векторов внешних сил, действующих на элемент жидкости.

Для моделирования взаимодействия двух компонент жидкости использовался метод Шан – Чена [38–40]. В этом подходе частицы жидкости в соседних ячейках решетки обмениваются импульсом, который определяется согласно силе

$$\vec{F}_{ext}^{(\sigma)}(\vec{x}) = \vec{F}_{SC}^{(\sigma)}(\vec{x}) = -\psi^{(\sigma)}(\vec{x}) \sum_{\vec{\sigma} \neq \sigma} G_{\vec{\sigma}\sigma} \sum_i w_i \psi^{(\vec{\sigma})}(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t) \vec{c}_i \Delta t, \quad (13)$$

где  $G_{\vec{\sigma}\sigma}$  — коэффициент взаимодействия двух компонент, определяющий силу этого взаимодействия.

В формуле (13) функция  $\psi^{(\sigma)}(\vec{x})$  — псевдопотенциал, который определялся тремя способами:

$$\begin{aligned} \psi^{(\sigma)}(\vec{x}) &= \rho^{(\sigma)}(\vec{x}), \\ \psi^{(\sigma)}(\vec{x}) &= \rho_0 \left[ 1 - \exp(-\rho^{(\sigma)}(\vec{x}) / \rho_0) \right], \\ \psi^{(\sigma)}(\vec{x}) &= \rho_0^2 \rho^{(\sigma)2}(\vec{x}) / \left[ 2(\rho_0 + \rho^{(\sigma)}(\vec{x}))^2 \right]. \end{aligned} \quad (14)$$

Физическая скорость жидкости, используемая в (12), определяется согласно [41]:

$$\vec{u}_{fluid} = \frac{1}{\rho} \sum_{\sigma} \left( \sum_i f_i \vec{c}_i + \frac{\vec{F}_{ext}^{(\sigma)} \Delta t}{2} \right), \quad \rho = \sum_{\sigma} \left( \sum_i f_i \right), \quad (15)$$

она также называется барицентрической.

Подход Шан – Чена является моделью диффузной переходной зоны между компонентами жидкости (интерфейса). От того, насколько велико значение  $G_{\vec{\sigma}\sigma}$ , какой вид функции  $\psi^{(\sigma)}$  и какой способ учета сил используются, зависит ширина интерфейса между двумя компонентами жидкости.

Формула (13) верна для объема жидкости. Если к ячейке, где находится жидкость, примыкает твердая среда, то внешняя сила дополняется слагаемым

$$\begin{aligned}\bar{F}_{\text{ext}}^{(\sigma)}(\bar{x}) &= \bar{F}_{\text{SC}}^{(\sigma)}(\bar{x}) + \bar{F}_{\text{SC,solid}}^{(\sigma)}(\bar{x}) = \\ &= \bar{F}_{\text{SC}}^{(\sigma)}(\bar{x}) + \left(-\psi^{(\sigma)}(\bar{x})\right) G_{\sigma,\text{solid}} \sum_i w_i \psi^{(\bar{\sigma})}(\rho_s) \bar{c}_i \Delta t,\end{aligned}\quad (16)$$

где  $\rho_s$  — плотность в ячейке твердой среды, член  $\bar{F}_{\text{SC}}^{(\sigma)}(\bar{x})$  определяет смачиваемость. В настоящей работе плотность  $\rho_s$  устанавливается таким образом, чтобы при  $G_{\sigma,\text{solid}} = G_{\bar{\sigma}\sigma}$  на твердой границе области выполнялось условие симметрии для пространственного распределения псевдопотенциала  $\psi^{(\sigma)}$ , что гарантирует установление контактного угла  $\theta = 90^\circ$  между твердой стенкой и компонентами жидкости.

При решении рассматриваемой задачи также учитывалась сила гравитации, которая определялась для каждой жидкости как

$$\begin{aligned}\bar{F}_g^{(\sigma)}(\bar{x}) &= \rho_{\text{ratio}}^{(\sigma)} \rho^{(\sigma)}(\bar{x}) \bar{g}, \\ \rho_{\text{ratio}}^{(\sigma)} &= \rho_{\text{fluid}}^{(\sigma)} / \rho_0^{(\sigma)},\end{aligned}\quad (17)$$

где  $\rho_{\text{ratio}}^{(\sigma)}$  — отношение плотности компоненты жидкости и плотности, на которую проведено обезразмеривание силы гравитации. Нормировка выбиралась таким образом, чтобы данный коэффициент был меньше 1, то есть для более тяжелой жидкости  $\rho_{\text{fluid}} = \rho_0$ ,  $\rho_{\text{ratio}} = 1$ .

В качестве граничных условий использовалось условие прилипания, моделируемое с помощью подхода Bounce Back. Рассмотрим ячейку жидкости  $x_b$ , к которой примыкает твердая среда. Если твердая среда покоится, то популяции в ячейке  $x_b$  на каждом шаге вычислений (после шагов столкновения (4) и переноса (5)) переопределяются следующим образом:

$$f_i^-(\bar{x}_b, t + \Delta t) = f_i^*(\bar{x}_b, t), \quad (18)$$

где дискретные скорости популяций  $f_i^-$  и  $f_i^*$  удовлетворяют соотношениям  $\bar{c}_i^- = -\bar{c}_i^*$ .

На основании подхода Bounce Back можно также записать условие Дирихле для постоянной скорости:

$$f_i^-(\bar{x}_b, t + \Delta t) = f_i^*(\bar{x}_b, t) - 2w_i \rho_w \frac{c_{ia} u_w}{c_s^2}, \quad (19)$$

где  $u_w$  — скорость границы,  $\rho_w$  — плотность на границе системы. Криволинейные поверхности определены в качестве ступенчатых последовательностей (staircase-like structure).

Полный алгоритм модели, используемый в данной работе, запишется следующим образом:

1. Определяются начальные плотности и скорости компонент жидкости в пространстве. Согласно им, рассчитываются начальные популяции  $f_i^{(\sigma)}(\bar{x}, t)$  по формуле (7). С помощью (16), (17) определяются начальные силы, действующие на каждую ячейку жидкости.
2. Выполняются шаги столкновения (4) и переноса (5), согласно подходу MRT в присутствии внешней силы (9).
3. Выполняются граничные условия (18), (19).

4. Вычисляются новые значения плотности (1), сил (16), (17) и барицентрической скорости (15) в каждой ячейке жидкости.

5. Переход к пункту 2.

Расчет выполняется до тех пор, пока жидкость в объеме не достигнет стационарного состояния.

## 2. Результаты и обсуждение

Суть подхода с использованием псевдопотенциалов Шан – Чена заключается в том, что взаимодействие компонент жидкости описывается локальным оператором взаимодействия частиц жидкости (16) [38–40]. Закон взаимодействия одной компоненты с другой определяется функцией псевдопотенциала (14). Исходя из установленного взаимодействия, в результате моделирования методом LBM в вычислительной области формируются объемы жидкости, в которых преимущественно находится одна из компонент. Между этими объемами формируются поверхности перехода из одной компоненты в другую.

Основное достоинство указанного подхода состоит в его относительной простоте — отсутствует необходимость напрямую рассматривать изменения в химическом потенциале и следить за параметром свободной энергии, как это требуется в моделях свободной энергии [41]. Однако у него есть и недостатки. Во-первых, необходимо подбирать параметр  $G_{\sigma\sigma}$  и вид функции псевдопотенциала  $\psi(x)$  таким образом, чтобы жидкости оказывались несмешиваемыми. Для каждого вида функции  $\psi(x)$ , указанного в формуле (14), значение параметра  $G_{\sigma\sigma}$  уникально. Во-вторых, формируемый переход является диффузным. Под этим подразумевается, что плотности компонент при переходе из одного объема в другой плавно спадают. Кроме того, минимальное значение плотности компоненты в объеме, где она не является доминирующей, достигает тысячных и сотых долей от величины плотности, которая формируется в собственном объеме данной компоненты. В результате недостаточности описания межкомпонентного взаимодействия жидкостей формулой (13), а именно: ввиду дискретности указанной силы в диффузном переходе возникает феномен, известный как ложные потоки или псевдоскорости [42, 43]. Эти скорости могут вносить существенные погрешности в пространственные распределения моментов. Названные недостатки критическим образом отличают результаты моделирования LBM от реальности, где ширина перехода достигает нанометров, плотности компонент полностью разделены, а псевдотоки на границе перехода отсутствуют.

Доля «остаточной» плотности, ширина и форма диффузного перехода, величина ложных токов зависят от разрешения  $N$  сетки LBM, параметра взаимодействия  $G_{\sigma\sigma}$  и выбранного вида псевдопотенциала  $\psi(\vec{x})$ .

Рассмотрим задачу, где две жидкости — легкая и тяжелая — покоятся в ограниченном цилиндре, при этом его верхняя крышка также покоится. Выберем параметры  $h_{\text{light}} = h_{\text{heavy}} = R$ ,  $\omega_{5-9} = 0,04/\Delta t$  и разрешение решетки LBM для всех осей  $N_x = N_y = N_z = 200$ ; определим  $\psi$  по формуле (14) в экспоненциальном виде и рассмотрим интервал параметра  $G_{\sigma\sigma} = 5-7$ , что отвечает несмешиваемым компонентам для экспоненциального псевдопотенциала. Рассмотрим срез пространственных распределений плотности  $\rho$  и скорости  $V_z$  в вычислительной области, выполненный по центральной оси цилиндра.

Из рис. 1а видно, что переход между двумя компонентами является плавным. В измерении  $G_{\sigma\sigma} = 7$  он составляет 3 ячейки в ширину. Для самого малого значения  $G_{\sigma\sigma} = 5$  число ячеек, участвующих в переходе, достигает 10. Кроме того, в центре диффузного

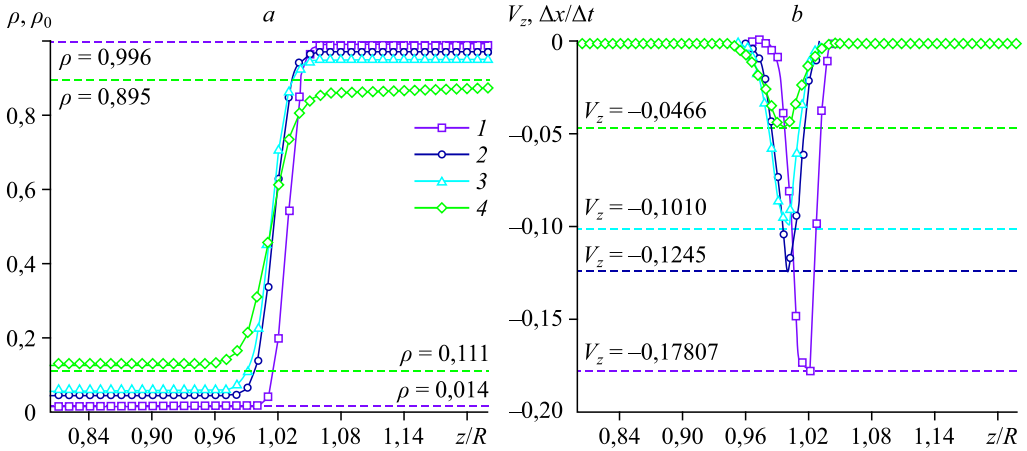


Рис. 1. Пространственные распределения плотности  $\rho$  (a) и скорости  $V_z$  (b), измеренные на центральной оси цилиндра, для параметров  $h_{\text{light}} = h_{\text{heavy}} = R$ ,  $\omega_{5-9} = 0,04/\Delta t$ ,  $G_{\tilde{\sigma}\sigma} = 5-7$ ,  $\psi = 1 - \exp(-\rho)$  при  $G = 7$  (1), 6 (2), 5,5 (3), 5 (4).

перехода возникают сильные псевдотоки (см. рис. 1b). Скорость псевдотокана тем выше, чем больше значение коэффициента взаимодействия компонент  $G_{\tilde{\sigma}\sigma}$ . При достижении скоростью значения  $0,15\Delta x/\Delta t$  возникают погрешности сжимаемости [41]. Величина скорости выше  $0,5\Delta x/\Delta t$  считается критической. Таким образом, чем больше коэффициент взаимодействия  $G_{\tilde{\sigma}\sigma}$ , тем чище объемы жидкостей от примесей, соответственно, тем более высокой становится численная неустойчивость и тем существеннее становятся псевдотоки. Наиболее оптимальным случаем является  $G_{\tilde{\sigma}\sigma} = 6$ , в котором длина диффузного перехода равна 5–6 ячейкам. При этом псевдоскорости здесь меньше порогового значения  $0,15\Delta x/\Delta t$ . Исходя из этого, для дальнейших измерений выбран именно вариант  $G_{\tilde{\sigma}\sigma} = 6$  для случая, когда псевдопотенциал определен в экспоненциальном виде.

Вид псевдопотенциала также влияет на форму перехода и величину псевдоскоростей. Рассмотрим радиальные срезы пространственных распределений плотности и скорости  $V_z$ ,

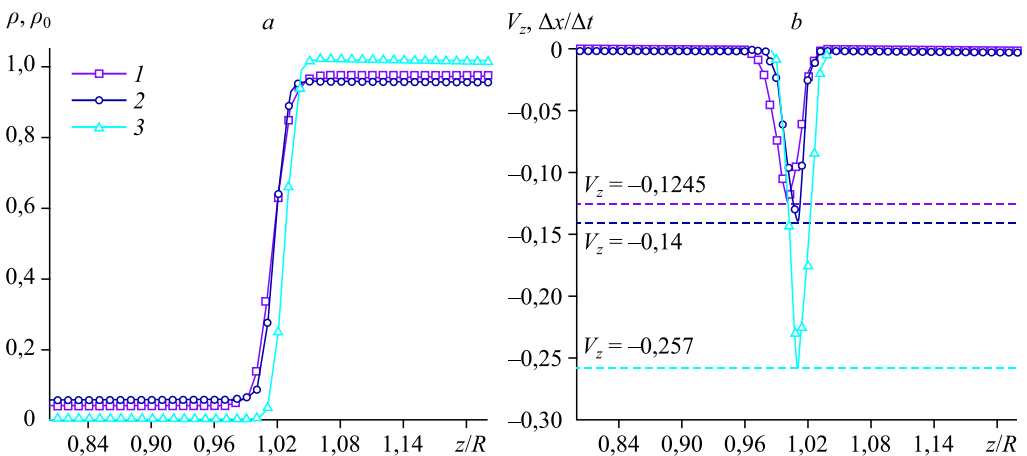


Рис. 2. Пространственные распределения плотности  $\rho$  (a) и скорости  $V_z$  (b), измеренные на центральной оси цилиндра, для параметров  $h_{\text{light}} = h_{\text{heavy}} = R$ ,  $\omega_{5-9} = 0,04/\Delta t$  при различных значениях  $G_{\tilde{\sigma}\sigma}$  и видах функции  $\psi$ .

1 —  $G = 6$ ,  $\psi = 1 - \exp(-\rho)$ ; 2 —  $G = 325$ ,  $\psi = \rho^2/[2(1 + \rho)^2]$ ; 3 —  $G = 4,5$ ,  $\psi = \rho$ .

измеренных для псевдопотенциалов  $\psi(\vec{x})$  различного вида (14). При этом  $G_{\tilde{\sigma}\sigma}$  для этих измерений выбраны равными 4,5, 6 и 325 соответственно. Из рис. 2 видно, что квадратичный потенциал при  $G_{\tilde{\sigma}\sigma} = 325$  приводит к появлению почти той же по величине псевдоскорости на интерфейсе, что и в случае экспоненциального псевдопотенциала, однако чистота плотностей оказывается хуже. В качестве достоинства квадратичного потенциала можно отметить, что ширина переходной зоны оказывается меньше на одну ячейку, чем у экспоненциального при исследованных параметрах. Потенциал вида линейной плотности при  $G_{\tilde{\sigma}\sigma} = 4,5$  достигает большей чистоты плотности, однако псевдоскорость оказывается значительнее, чем у экспоненциального потенциала для коэффициента  $G_{\tilde{\sigma}\sigma} = 7$ . С учетом вышеизложенного наиболее оптимальным выбором вида функции  $\psi(\vec{x})$  была признана экспонента. Кроме того, как отмечалось в работе [41], такая форма псевдопотенциала обладает наибольшей численной стабильностью.

Изыян возникновения псевдоскорости невозможно искоренить полностью, но его можно минимизировать. Для этого существует несколько стратегий. Первая из них заключается во введении адаптивного сгущения [44, 45] решетки вблизи поверхности перехода. Во втором случае используется подход multirange [46], где полная сила взаимодействия компонент определяется по формуле

$$\begin{aligned} -\vec{F}_{\text{ext}}^{(\sigma)}(\vec{x}) &= \vec{F}_{\text{SC}}^{(\sigma)}(\vec{x}) + \vec{F}_{\text{SC,solid}}^{(\sigma)}(\vec{x}) = \\ &= -\psi^{(\sigma)}(\vec{x}) \sum_{\tilde{\sigma} \neq \sigma} G_{1,\tilde{\sigma}\sigma} \sum_{i1} w_{i1} \psi^{(\tilde{\sigma})}(\vec{x} + \vec{c}_{i1} \Delta t) \vec{c}_{i1} \Delta t - \\ &\quad -\psi^{(\sigma)}(\vec{x}) \sum_{\tilde{\sigma} \neq \sigma} G_{2,\tilde{\sigma}\sigma} \sum_{i2} w_{i2} \psi^{(\tilde{\sigma})}(\vec{x} + \vec{c}_{i2} \Delta t) \vec{c}_{i2} \Delta t - \\ &\quad -\psi^{(\sigma)}(\vec{x}) G_{1,\sigma,\text{solid}} \sum_{i1} w_{i1} \psi^{(\tilde{\sigma})}(\rho_s) \vec{c}_{i1} \Delta t - \\ &\quad -\psi^{(\sigma)}(\vec{x}) G_{2,\sigma,\text{solid}} \sum_{i2} w_{i2} \psi^{(\tilde{\sigma})}(\rho_s) \vec{c}_{i2} \Delta t, \end{aligned} \quad (20)$$

здесь коэффициенты  $G_{1,\tilde{\sigma}\sigma}$  и  $G_{1,\sigma,\text{solid}}$  определяют взаимодействия на расстоянии одной ячейки, а  $G_{2,\tilde{\sigma}\sigma}$  и  $G_{2,\sigma,\text{solid}}$  — на расстоянии двух ячеек. Такой подход способен уменьшить величину псевдотоков, а отношение коэффициентов  $G_1$  и  $G_2$  в нем определяется подбором. Другой путь определения сил в multirange-методе заключается в задании весовых функций для расширенного набора, например, D2Q25 [47], при этом используется единственный коэффициент межкомпонентного взаимодействия  $G$ .

В настоящей работе представлено сравнение зон существования локальной рециркуляции в объеме мультикомпонентной жидкости, рассчитанных методом LMRT-SC и полученных экспериментально. Экспериментально существование рециркуляционных зон определялось в работе [11]. Здесь эксперименты проводились в цилиндрическом рабочем объеме радиуса  $R = 144$  мм и переменной высоты  $h_{\text{total}} = h_o + h_g = 50 - 600$  мм. В качестве жидкостей в данном эксперименте использовались вода плотностью  $\rho_w = 1000$  кг/м<sup>3</sup> и подсолнечное масло плотностью  $\rho_o = 920$  кг/м<sup>3</sup>, вязкости которых составляли  $\nu_w = 1,011$  мм<sup>2</sup>/с,  $\nu_o = 54,86$  мм<sup>2</sup>/с. В указанной работе приведены основные результаты данного эксперимента. Определению области существования зоны обратного тока для случая однокомпонентной жидкости посвящались работы [1, 13, 48]. Было показано, что сила тяжести не оказывает существенного влияния на развитие структуры течения. Вычислительная область и схема течения представлены на рис. 3.

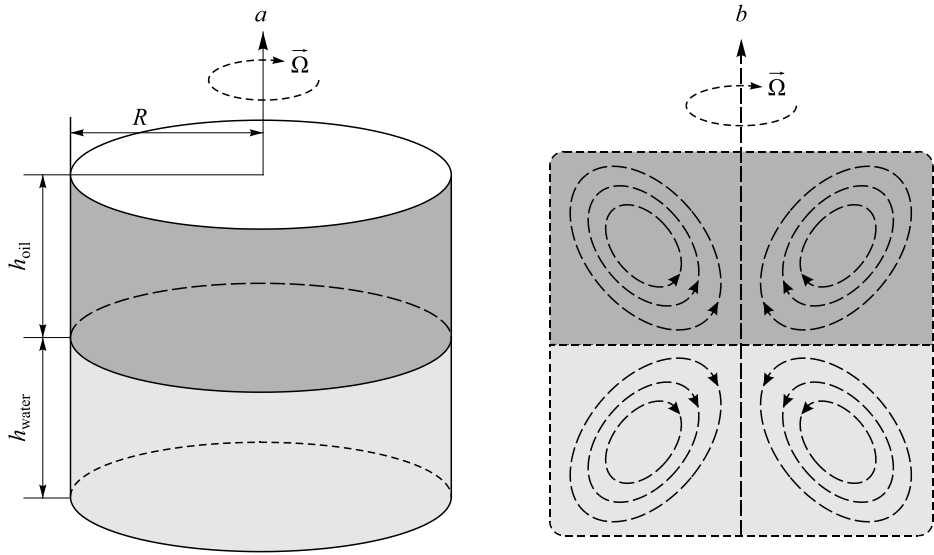


Рис. 3. Вычислительная область (a) и схема течения многокомпонентной жидкости (b).

В модели LMRT-SC были установлены следующие параметры: высота столба жидкости  $h_{total} = h_o + h_g = (2-5)R$ , число Рейнольдса  $Re = Re_o = Re_w = 500-2000$ . Форма решетки вычислительной области представляла собой прямую четырехугольную призму. Разрешение решетки по осям  $x$  и  $y$  составляло  $N_x = N_y = 400$ . По оси  $z$  число ячеек определялось согласно параметру относительного удлинения цилиндра и для каждого отдельного расчета рассчитывалось из соотношения  $N_z = N_x h_o / R$ . Такое разрешение решетки обуславливалось необходимостью локализации межкомпонентного перехода, который для выбранных параметров занимал 5–6 ячеек в ширину.

В физическом эксперименте параметр  $Re$  существенно отличается для разных сортов жидкости. В используемой модели число Рейнольдса определяется согласно [41]:

$$Re = \frac{N\Delta x}{\nu}, \quad (21)$$

здесь  $N\Delta x$  определяет радиус цилиндра  $R$ ,  $N = N_x/2 = N_y/2$  — число ячеек, которыми производится дискретизация длины цилиндра,  $u = \Omega R$  — величина характерной скорости,  $\Omega$  — угловая скорость,  $\nu$  — вязкость, которая связана с частотами релаксации  $\omega_{5-9}$  согласно (8). Для корректного моделирования физического эксперимента (где в качестве жидкостей рассматривались масло и вода [11]) необходимо, чтобы соотношение вязкостей (при одинаковых для двух компонент характерной скорости и разрешения решетки) было приблизительно равным 50. При числе Рейнольдса менее плотной жидкости (масла)  $Re_o = 500$  число Рейнольдса более плотной жидкости (воды) должно составлять  $Re_w = 25000$ . В таком случае значения  $\omega_{5-9}$  при установленных частоте дискретизации ( $N = N_x/2 = N_y/2 = 200$ ) и характерной скорости ( $u \approx 0,15\Delta x/\Delta t$ ) достигают  $\approx 1,985$ . В представленной модели критическое значение  $\omega_{5-9}$ , при достижении которого вычисление оказывается нестабильным, составляет  $\approx 1,92$ . Это ограничивает возможности исследования соотношения вязкостей, больших 8.

Очевидно, что задача моделирования двухкомпонентной жидкости, в которой вязкости компонент различаются в десятки раз, оказывается трудоемкой для подхода LMRT-SC. В силу этого будем рассматривать некие модельные жидкости одинаковой вязкости,

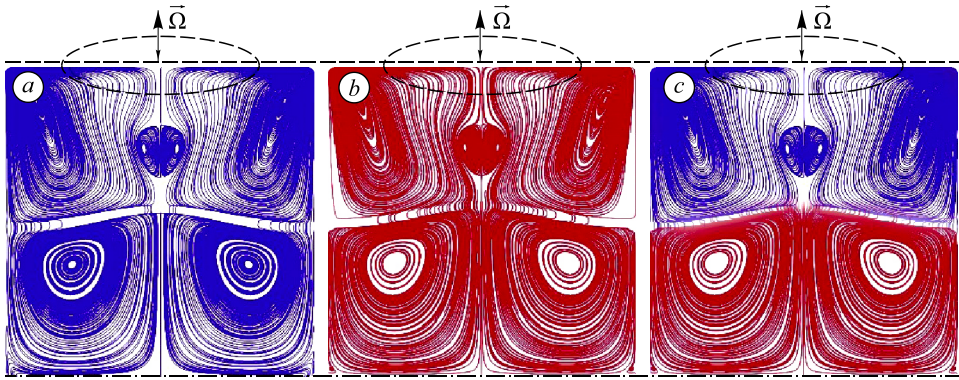


Рис. 4. Линии тока, рассчитанные для легкой компоненты жидкости (синие) (a), тяжелой компоненты жидкости (красные) (b), а также совмещенные линии тока двух компонент (c) для параметров  $Re = 700$ ,  $h_{total} = h_o + h_g = R$ .

одна из которых под действием силы гравитации (17) оказывается локализованной внизу. Данные жидкости будем далее именовать легкой (занимает верхнюю половину в столбе жидкости) и тяжелой (занимает нижнюю половину в столбе жидкости).

С помощью метода LMRT-SC рассмотрена область существования рециркуляций. Пример феномена распада вихря представлен на рис. 4, где показаны линии тока для легкой (синие линии) и тяжелой (красные линии) жидкостей для параметров  $Re = 700$ ,  $h_{total} = h_o = h_g = R$ . На рис. 4a и 4b изображены линии тока для легкой и тяжелой жидкостей соответственно, а на рис. 4c приведена графическая интерпретация, в которой удалены линии тока компонент жидкости там, где их плотности составляют сотые доли от суммарной плотности. В целом на рисунке различается присутствие нескольких областей течений. Так, в верхней его половине можно видеть, что от вращающейся поверхности отходит вихревое течение, которое затем вступает во взаимодействие с межкомпонентным интерфейсом. В результате этого взаимодействия при определенных параметрах возникает локальный феномен распада вихря или рециркуляции.

Согласно данным [49], область распада вихря появляется на оси в объеме более легкой жидкости в точке, которая равноудалена от твердой верхней стенки и жидкой нижней поверхности раздела. С увеличением числа  $Re$  эта локализованная область разрастается и опускается к поверхности раздела. На рис. 5 приведено сравнение течений для параметров  $Re = 700$ ,  $h_{total} = h_o = R$ , полученных в результате эксперимента и численного моделирования методом LMRT-SC (здесь области течения урезаны в целях удобства сравнения).

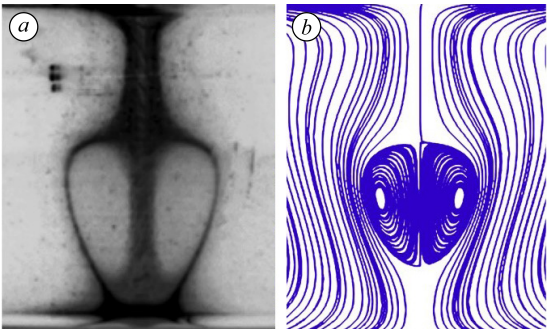


Рис. 5. Течение легкой компоненты жидкости, полученное в результате эксперимента (a) и в результате моделирования методом LMRT-SC (b) для параметров  $Re = 700$ ,  $h_{total} = h_o = R$ .

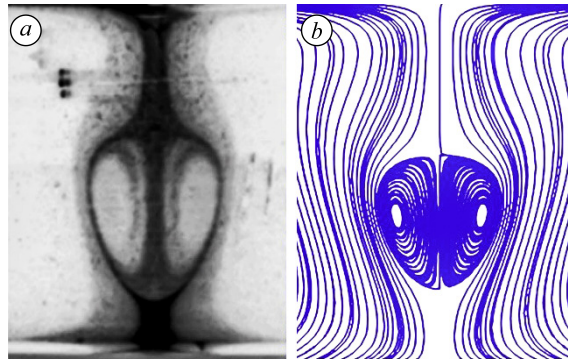


Рис. 6. Течение легкой компоненты жидкости, полученное при  $h_{\text{total}} = h_o = R$  в результате эксперимента для  $Re = 600$  (a) и в результате моделирования методом LMRT-SC для  $Re = 700$  (b).

Из рис. 5 видно, что рециркуляционные течения не совпадают. Согласно выводам о развитии феномена распада вихря, представленным в работе [49], течение, определенное результатами моделирования, находится в более ранней стадии развития относительно параметра  $Re$ . Другими словами, оно с большей точностью отвечает результату эксперимента для параметра  $Re = 600$ , сравнение с которым представлено на рис. 6. Из рис. 5 и 6 можно заключить, что течение, которое получено в результате моделирования методом LMRT-SC, демонстрирует «задержку» в развитии зоны рециркуляции. Эта задержка связана с тем, что в модельном расчете рассматриваются две жидкости с одинаковой вязкостью, в то время как в эксперименте их вязкости отличаются в 50 раз.

На рис. 7 представлено сравнение областей существования рециркуляций, рассчитанных путем численного моделирования методом LMRT-SC (для жидкостей с одинаковым параметром  $Re$ ) и полученных в результате серии экспериментов для случая двух компонент (для воды и масла) [11] и для случая одной компоненты [13, 50]. В подтверждение

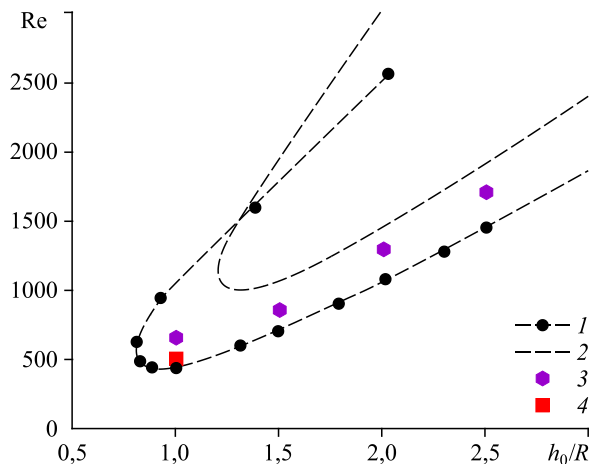


Рис. 7. Диаграмма наличия зон локализованных обратных рециркуляций.

Кривые соответствуют экспериментальным данным, полученным для двухкомпонентной среды (масло – вода) в работе [11] (1) и для однокомпонентной среды, изученной в работе [13] (2); 3 и 4 — результаты расчета методом MRT-SC при  $Re_w = Re_o$  и  $Re_w = 8Re_o$  соответственно.

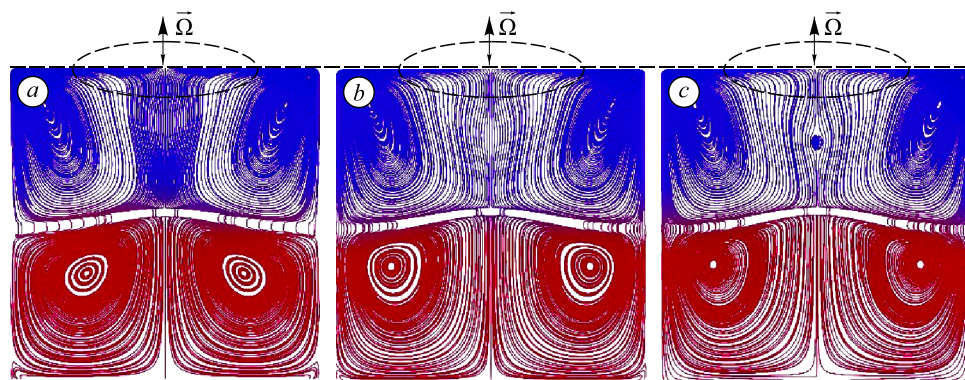


Рис. 8. Линии тока, рассчитанные для легкой (синие) и тяжелой (красные) компонент жидкости, для отношений чисел Рейнольдса  $Re_w/Re_o = 1$  (a), 4 (b), 8 (c).

предыдущих заключений о более медленном развитии течения рисунок демонстрирует, что точки появления зоны возникновения распада вихря при  $Re = Re_o = Re_w$  находятся выше тех точек, которые определены экспериментально, приблизительно на 10 %. Если же установить  $Re_w = 8Re_o$ , то для  $Re_o = 500$  и  $h_w = h_o = R$  будет зафиксировано образование области рециркуляции. С увеличением вязкости тяжелой жидкости область существования рециркуляционных зон стремится к области существования, отвечающей случаю однокомпонентной жидкости.

Зависимость линий тока от отношения чисел Рейнольдса двух жидкостей представлена на рис. 8. Видно, что с увеличением параметра  $Re_w$  линии тока в области течения легкой жидкости искривляются. При достижении соотношения  $Re_w = 8Re_o$  появляется область рециркуляции.

### Выводы

В представленной работе с помощью метода LMRT-SC изучены характеристики вихревого течения двухкомпонентной жидкости в замкнутом цилиндре с вращающимся верхним торцом. Выполнен анализ псевдопотоков, возникающих вблизи границы раздела двух жидкостей. Продемонстрировано, как интерфейс и псевдоскорости в нем зависят от вида функции псевдопотенциала, величины коэффициента взаимодействия и разрешения решетки. Установлено, что в данной постановке задачи наиболее подходящим для описания мультикомпонентной жидкости является экспоненциальный вид псевдопотенциала с коэффициентом взаимодействия, приблизительно равным 6. Показана необходимость реализации для рассматриваемой задачи большого разрешения решетки, что способствует локализации псевдотоков.

С помощью метода LMRT-SC изучена область появления зоны рециркуляции в легкой компоненте двухкомпонентной жидкости в зависимости от относительного удлинения цилиндра и числа Рейнольдса. Показано, что точки появления зоны обратного потока, рассчитанные методом LMRT-SC, оказываются выше по параметру числа Рейнольдса, чем те, которые получены экспериментально. Это объясняется тем, что в рассматриваемом варианте модели были выбраны идентичные по вязкости жидкости, в то время как в эксперименте вязкость отличалась в 50 раз. Результаты проведенного расчета для отношения вязкостей, равного 8, демонстрируют согласованность с экспериментальными данными.

## Список литературы

1. Наумов И.В., Миккельсен Р.Ф., Окулов В.Л. Формирование застойной зоны на оси замкнутого закрученного течения // Теплофизика и аэромеханика. 2014. Т. 21, № 6. С. 799–802.
2. Herrada M.A., Shtern V.N., Torregrosa M.M. The instability nature of vogel-escudier flow // J. Fluid Mech. 2015. Vol. 766. P. 590–610.
3. Liow Y.S., Thouas G., Tan B.T., Thompson M.C., Hourigan K. Modelling the transport of momentum and oxygen in an aerial-disk driven bioreactor used for animal tissue or cell culture // IFMBE Proceeding. 2008. Vol. 23. P. 1672–1675.
4. Liow Y.S., Tan B.T., Thouas G., Thompson M.C. CFD modeling of the steady-state momentum and oxygen transport in a bioreactor that is driven by an aerial rotating disk // Modern Physics Letters B. 2009. Vol. 23. P. 121–127.
5. Jacono L., Nazarinia M., Bröns M. Experimental vortex breakdown topology in a cylinder with a free surface // Phys. Fluids. 2009. Vol. 21. P. 111704-1–111704-4.
6. Shtern V.N. Counterflows. N. Y.: Cambridge University Press, 2012. 488 p.
7. Naumov I.V., Herrada M.A., Sharifullin B.R., Shtern V.N. Hysteretic growth and decay of a waterspout column // Phys. Rev. Fluids. 2018. Vol. 3. P. 024701-1–024701-23.
8. Fujimoto S., Takeda Y. Topology changes of the interface between two immiscible liquid layers by a rotating lid // Phys. Rev. E. 2009. Vol. 80. P. 015304(R)-1–015304(R)-4.
9. Bröns M., Voigt L.K., Sørensen J.N. Topology of vortex breakdown bubbles in a cylinder with a rotating bottom and a free surface // J. Fluid Mech. 2001. Vol. 428. P. 133–148.
10. Наумов И.В., Кашкарова М.В., Миккельсен Р.Ф., Окулов В.Л. Структура ограниченного закрученного течения при различных фазовых граничных условиях на неподвижном торце цилиндра // Теплофизика и аэромеханика. 2020. Т. 27, № 1. С. 93–98.
11. Naumov I.V., Herrada M.A., Sharifullin B.R., Shtern V.N. Slip at the interface of a two-fluid swirling flow // Phys. Fluids. 2018. Vol. 30, Iss. 7. P. 074101-1–074101-7.
12. Shtern V.N., Torregrosa M.M., Herrada M.A. Effect of swirl decay on vortex breakdown in a confined steady axisymmetric flow // Phys. Fluids. 2012. Vol. 24. P. 043601-1–043601-14.
13. Escudier M.P. Observations of the flow produced in a cylindrical container by a rotating endwall // Exp. Fluids. 1984. Vol. 2. P. 189–196.
14. Tsai C., Tao C.-Y., Sun Y.-C., Lai C.-Y., Huang K.-H., Juan W.-T., Huang J.-R. Vortexinduced morphology on a two-fluid interface and the transitions // Phys. Rev. E. 2015. Vol. 92. P. 031002-1(R)–031002(R)-5.
15. Carrión L., Herrada M.A., Shtern V.N. Topology and stability of a water-soybean-oil swirling flow // Phys. Rev. Fluids. 2017. Vol. 2. P. 024702-1–024702-14.
16. Naumov I.V., Sharifullin B.R., Shtern V.N. Capillary hysteresis in a confined swirling twofluid flow // J. Engng Thermophysics. 2017. Vol. 26. P. 391–398.
17. Naumov I.V., Sharifullin B.R. Shtern V.N. Hysteresis in a swirling two-fluid flow // J. Phys: Conf. Series. 2017. Vol. 899. P. 032015-1–032015-6.
18. Naumov I.V., Skripkin S.C., Gusev G.E., Shtern V.N. Hysteretic in a two-fluid whirlpool // Phys. Fluids. 2022. Vol. 34. P. 032108-1–032108-7.
19. Naumov I.V., Glavny V.G., Sharifullin B.R., Shtern V.N. Formation of a thin circulation layer in a two-fluid rotating flow // Phys. Rev. Fluids. 2019. Vol. 4. P. 054702-1–054702-17.
20. Naumov I.V., Skripkin S.C., Shtern V.N. Counterflow slip in a two-fluid whirlpool // Phys. Fluids. 2021. Vol. 33. P. 061705-1–061705-7.
21. Gunstensen K., Rothman D.H., Zaleski S., Zanetti G. Lattice Boltzmann model of im-miscible fluids // Phys. Rev. A. 1991. Vol. 43. P. 4320–4327.
22. Grunau D., Chen S., Eggart K. A lattice Boltzmann model for multi-phase fluid flows // Phys. Fluids A. 1993. Vol. 5. P. 2557–2562.
23. Li Q., Yu Y., Wen Z.X. How does boiling occur in lattice Boltzmann simulations? // Phys. Fluids. 2020. Vol. 32. P. 093306-1–093306-12.
24. Li Q., Kang Q.J., Francois M.M., He Y.L., Luo K.H. Lattice Boltzmann modeling of boiling heat transfer: the boiling curve and the effects of wettability // Intern. J. of Heat and Mass Transfer. 2015. Vol. 85. P. 787–796.
25. Higuerá F., Jimenez J. Boltzmann approach to lattice gas simulations // Europhys. Lett. 1989. Vol. 9. P. 663–668.
26. Succi S. The lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond. Oxford: Oxford University Press, 2001. 288 p.
27. Pan C., Luo L.S., Miller C.T. An evaluation of lattice Boltzmann schemes for porous medium flow simulation // Comput. Fluids. 2006. Vol. 35. P. 898–909.
28. Tiwari A., Vanka S.P. A ghost fluid Lattice Boltzmann method for complex geometries // Intern. J. Numer. Meth. Fluids. 2012. Vol. 69, P. 481–498.

29. Pellerin N., Leclaire S., Reggio M. Equilibrium distributions for straight, curved, and immersed boundary conditions in the lattice Boltzmann method // Comput. Fluids. 2014. Vol. 101. P. 126–135.
30. Noble D.R., Chen S., Georgiadis J.G., Buckius R.O. A consistent hydrodynamic boundary condition for the lattice Boltzmann method // Phys. Fluids. 1995. Vol. 7. P. 203–209.
31. Yu D., Mei R., Shyy W. A unified boundary treatment in lattice Boltzmann method // AIAA Paper. 2003. No. 2003–0953.
32. Bouzidi M., Firdaouss M., Lallemand P. Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries // Phys. Fluids. 2001. Vol. 13. P. 3452–3459.
33. Chopard B., Droz M. Cellular automata modeling of physical systems. Cambridge: Cambridge University Press, 1998. 340 p.
34. Stahla B., Chopard B., Latt J. Measurements of wall shear stress with the lattice Boltzmann method and staircase approximation of boundaries // Computers and Fluids. 2010. Vol. 39, Iss. 9. P. 1625–1633.
35. Latt J., Malaspinas O., Kontaxakis D. et al. Palabos: parallel lattice Boltzmann solver // Computers and Mathematics with Applications. 2021. Vol. 81. P. 334–350.
36. Suga K., Kuwata Y., Takashima K., Chikasue R. A D3Q27 multiple-relaxation-time lattice Boltzmann method for turbulent flows // Computers and Mathematics with Applications. 2015. Vol. 69. P. 518–529.
37. Perumal D.A., Dass A.K. A review on the development of lattice Boltzmann computation of macro fluid flows and heat transfer // Alexandria Engng J. 2015. Vol. 54. P. 955–971.
38. Shan X., Chen H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components // Phys. Rev. E. 1993. Vol. 47. P. 1815–1819.
39. Shan X., Doolen G. Multicomponent lattice-Boltzmann model with interparticle interaction // J. Stat. Phys. 1995. Vol. 81. P. 379–393.
40. Shan X., Chen H. Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation // Phys. Rev. E. 1994. Vol. 49. P. 2941–2948.
41. Kruger T., Kusumaatmaja H., Kuzmin A., Shardt O., Silva G., Vigen E.M. The lattice Boltzmann method — principles and practice. N. Y.: Springer Intern. Publishing, 2017. 694 p.
42. Bao J., Schaefer L. Lattice Boltzmann equation model for multi-component multi-phase flow with high density ratios // Applied Mathematical Modelling. 2013. Vol. 37. P. 1860–1871.
43. Connington K., Lee T. A review of spurious currents in the lattice Boltzmann method for multiphase flows // J. of Mechanical Sci. and Technology. 2012. Vol. 26. P. 3857–3863.
44. Valero-Lara P., Jansson J. Multi-domain grid refinement for lattice-Boltzmann simulations on heterogeneous platforms // IEEE 18th Intern. Conf. on Computational Sci. and Engng 21-23 October. P. 1–8.
45. Lagrava D., Malaspinas O., Latt J., Chopard B. Advances in multi-domain lattice Boltzmann grid refinement // J. of Computational Physics. 2012. Vol. 231. P. 4808–4822.
46. Kuzmin A., Mohamad A. A multirange multi-relaxation time Shan–Chen model with extended equilibrium // Computers and Mathematics with Applications. 2010. Vol. 59. P. 2260–2270.
47. Chikatamarla S.S., Karlin I.V. Lattices for the lattice Boltzmann method // Phys. Rev. E. 2009. Vol. 79. P. 046701-1–046701-18.
48. Окулов В.Л., Наумов И.В., Соренсен Ж.Н. Особенности оптической диагностики пульсирующих течений // Журн. техн. физики. 2007. Т. 77, № 5. С. 47–57.
49. Carrión L., Naumov I.V., Sharifullin B.R., Herrada M.A., Shtern V.N. Formation of dual vortex breakdown in a two-fluid confined flow // Phys. Fluids. 2020. Vol. 32. P. 104107-1–104107-13.
50. Сальников М.В., Кинзин К.С., Ивашенко В.А., Наумов И.В., Мулляджанов Р.И. Закрученное течение в цилиндрическом контейнере: решеточные уравнения Больцмана и уравнения Навье–Стокса // Теплофизика и аэромеханика. 2022. Т. 29, № 4. С. 561–572.

*Статья поступила в редакцию 23 октября 2022 г.,  
после доработки — 31 января 2023 г.,  
принята к публикации 2 марта 2023 г.*