

MODELADO Y SIMULACIÓN DE FLUJO MULTIFÁSICO MEDIANTE EL MÉTODO DE LATTICE-BOLTZMANN

MULTIPHASE FLOW SIMULATION USING LATTICE-BOLTZMANN METHOD

Ezequiel O. Fogliatto^{a,c}, Federico E. Teruel^{a,b,c} y Alejandro Clause^{a,b,d}

^a*Comisión Nacional de Energía Atómica, Argentina*

^b*CONICET, Argentina*

^c*Instituto Balseiro, 8400 San Carlos de Bariloche, Argentina*

^d*Universidad Nacional del Centro, 7000 Tandil, Argentina*

Palabras clave: Lattice-Boltzmann, flujo multifásico

Resumen. En el presente trabajo se analiza la separación de fases en un fluido Van der Waals empleando el método de lattice-Boltzmann. En particular, se introduce una extensión de un problema analítico que permite determinar la distribución de densidad en una cavidad unidimensional bajo la acción de la gravedad, y se usa dicha solución para validar el modelo pseudopotencial de Li et al. (Li et al., *Phys Rev E* 85(7) (2013)). Los resultados muestran que el modelo es capaz de reproducir satisfactoriamente los perfiles de densidad en diferentes condiciones de simulación, mientras que el problema analítico constituye una base robusta para la verificación de modelos LB multifásicos del tipo pseudopotencial.

Keywords: Lattice-Boltzmann, multiphase flows

Abstract. In this paper we simulate phase separation of a Van der Waals fluid using lattice-Boltzmann method. An extension of an analytical solution for density profiles in a one-dimensional problem with gravity force is presented as a benchmark case and is used to validate the pseudopotential model of Li et al. (Li et al., *Phys Rev E* 85(7) (2013)). Simulations show that the model is able to precisely reproduce density profiles under different simulation conditions.

1. INTRODUCCIÓN

Los flujos multifásicos tienen una presencia importante tanto en procesos naturales como industriales, hecho que ha motivado el estudio y desarrollo de técnicas numéricas que permitan llevar a cabo un análisis adecuado de la compleja fenomenología involucrada. Los métodos computacionales convencionales, es decir aquellos que involucran la discretización de las ecuaciones macroscópicas gobernantes, han sido utilizados satisfactoriamente en el estudio de sistemas multifásicos, aunque el tratamiento del acople interfacial continúa siendo un tema motivo de análisis. Sin embargo, desde su aparición hace más de dos décadas (Higuera y Jiménez, 1989; McNamara y Zanetti, 1988), el método de lattice-Boltzmann (LB) ha probado ser una técnica numérica viable y confiable, capaz de lidiar con flujos complejos de manera simple y eficiente. Su naturaleza permite que la física esencial que tiene lugar en escalas microscópicas o mesoscópicas pueda ser incorporada de manera directa a la vez que se recuperan leyes y propiedades macroscópicas con un costo computacional aceptable (Li et al., 2016).

Los modelos LB multifásicos pueden clasificarse en cuatro categorías generales, entre las cuales los llamados *phase-field* y pseudopotencial han demostrado un mejor comportamiento en la simulación de flujos con relación de densidades elevada y número de Reynolds relativamente alto. En el caso del modelo pseudopotencial, regiones de fluido vecinas se vinculan a través de un potencial de interacción, el cual permite lograr una separación de fases automática sin necesidad del uso de técnicas que permitan reconstruir o capturar la interface (Sukop y Or, 2004). Esta familia de modelos LB multifásicos ha evolucionado desde su creación (Shan y Chen, 1994), buscando mejorar problemas asociados a la llamada inconsistencia termodinámica, corrientes espúreas en la interface y limitaciones en el máximo cociente de densidades alcanzable (ρ_l/ρ_g). En particular, en el trabajo reciente de Li et al. (2013) se presenta el desarrollo de una versión del modelo pseudopotencial para una grilla de dos dimensiones y nueve velocidades (D2Q9) empleando un esquema de colisión con múltiples tiempos de relajación (MRT). El mencionado modelo permite controlar la condición de estabilidad mecánica, es decir la densidad alcanzada por cada fase después de la separación, a través de un parámetro libre σ . Además, permite lograr simulaciones estables con una relación de densidades elevada ($\rho_l/\rho_g \sim 750$) (Li et al., 2013).

A pesar que existen problemas numéricos que permiten verificar la implementación y validez de los modelos LB multifásicos, son pocos los que permiten evaluar el comportamiento de dichos esquemas cuando existen fuerzas externas como la gravedad. Por lo tanto, el objetivo de este trabajo consiste en introducir una extensión de un problema analítico originalmente desarrollado por Berberan-Santos et al. (2002), que permite calcular el perfil de densidad en una columna estática de un fluido Van der Waals en un campo gravitatorio. Este caso es resuelto empleando el modelo LB de Li et al. (2013), mostrando que puede convertirse en una alternativa sencilla pero robusta para evaluar la sensibilidad y respuesta de modelos LB pseudopotenciales.

2. FLUIDO VAN DER WAALS EN UN CAMPO GRAVITATORIO

En el trabajo de Berberan-Santos et al. (2002) se analizó la estratificación de un fluido Van der Waals (VdW) en una cavidad unidimensional bajo fuerza gravitatoria, encontrando una ecuación diferencial ordinaria que permite determinar el perfil de densidad en dicha región. En particular, el gradiente de presión en la coordenada y está determinado por el balance hidrostático mediante

$$\frac{dP}{dy} = -gMC(y) \quad (1)$$

donde P es la presión, g la gravedad, M el peso molecular, $C = 1/v$ la concentración molar y v el volumen molar. La presión se encuentra relacionada con la densidad y temperatura T mediante la ecuación de estado de un fluido VdW:

$$P = \frac{RT}{1/C - b} - aC^2 \quad (2)$$

donde R es la constante de gases, y a y b son los parámetros VdW. Si se introducen los parámetros adimensionales $E_r = Mgy/RT_c$, $c = Cv_c$, $P_r = P/P_c$ y $T_r = T/T_c$, con el subíndice c denotando el estado crítico, y se combinan las Ecs. (1) y (2) considerando además la posibilidad de un perfil de temperatura arbitrario, puede obtenerse una ecuación adimensional para la distribución de concentración molar reducida

$$\frac{dc}{dE_r} = - \left[c + \frac{dT_r}{dE_r} \left(\frac{c}{1 - c/3} \right) \right] \left[\frac{1}{\frac{T_r}{(1 - c/3)^2} - \frac{9}{4}c} \right] \quad (3)$$

Si se calculan las concentraciones de coexistencia para la fase líquida (c_l) y gaseosa (c_g) usando la construcción de Maxwell (Huang y Wu, 2015), entonces puede integrarse la Ec. (3) desde una interface ubicada en $E_r(h_0)$, tomando como condición inicial $c(E_r(h_0)) = c_l$ para $E_r < E_r(h_0)$ y $c(E_r(h_0)) = c_g$ para $E_r > E_r(h_0)$. Finalmente, la posición de la interface dentro de la cavidad puede determinarse utilizando la masa inicial del sistema, es decir

$$\int_0^{E_r(h_0)} c_l(E_r) dE_r + \int_{E_r(h_0)}^{E_r(H)} c_g(E_r) dE_r = \bar{C} v_c \frac{MgH}{RT_c} \quad (4)$$

en donde \bar{C} es la concentración molar promedio en la cavidad.

3. MODELO PSEUDOPOTENCIAL CON OPERADOR DE COLISIÓN MRT

En el modelo LB de Li et al. (2013) la ecuación de evolución para la distribución de densidad está dada por:

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta_t, t + \delta_t) = f_\alpha(\mathbf{x}, t) - \bar{\Lambda}_{\alpha\beta} \left(f_\beta - f_\beta^{(eq)} \right)_{(\mathbf{x}, t)} + \delta_t (S_\alpha - 0,5 \bar{\Lambda}_{\alpha\beta} S_\beta)_{(\mathbf{x}, t)} \quad (5)$$

donde f_α es la distribución de densidad, $f_\alpha^{(eq)}$ es la distribución de equilibrio, t es el tiempo, \mathbf{x} la posición espacial, \mathbf{e}_α la velocidad discreta a lo largo de la dirección α , δ_t el paso de tiempo y S_α el término de fuerza en el espacio de velocidades. Para una grilla D2Q9, la matriz de colisión $\bar{\Lambda}$ se define como $\bar{\Lambda} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{\Lambda} \mathbf{M}$, donde \mathbf{M} es una matriz de transformación ortogonal y $\mathbf{\Lambda}$ una matriz diagonal dada por:

$$\mathbf{\Lambda} = \text{diag} (\tau_\rho^{-1}, \tau_e^{-1}, \tau_\zeta^{-1}, \tau_j^{-1}, \tau_q^{-1}, \tau_j^{-1}, \tau_q^{-1}, \tau_\nu^{-1}, \tau_\nu^{-1}) \quad (6)$$

El espacio de momentos puede obtenerse a través de la matriz de transformación \mathbf{M} y las distribuciones de densidad en dicho espacio se calculan mediante $\mathbf{m} = \mathbf{M} \mathbf{f}$ y $\mathbf{m}^{(eq)} = \mathbf{M} \mathbf{f}^{(eq)}$. El término equivalente al lado derecho de la Ec. (5) puede ser reescrito en el espacio de momentos como:

$$\mathbf{m}^* = \mathbf{m} - \mathbf{\Lambda}(\mathbf{m} - \mathbf{m}^{(eq)}) + \delta_t \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{\Lambda}}{2} \right) \bar{\mathbf{S}} \quad (7)$$

donde \mathbf{I} es la matriz de identidad, $\bar{\mathbf{S}} = \mathbf{M}\mathbf{S}$ el término de fuerza y el supraíndice * denota una etapa post-colisión. El proceso de *streaming* se realiza retornando al espacio de poblaciones mediante $\mathbf{f}^* = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{m}^*$. De esta manera, la densidad y velocidad macroscópicas pueden ser calculadas mediante:

$$\rho = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \quad (8)$$

$$\rho\mathbf{u} = \sum_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} f_{\alpha} + \frac{\delta_t}{2} \mathbf{F} \quad (9)$$

donde $\mathbf{F} = \mathbf{F}_b + \mathbf{F}_{int}$ es la fuerza total sobre el sistema, \mathbf{F}_b es la fuerza boyante y \mathbf{F}_{int} representa la fuerza de interacción que actúa a través de un potencial de interacción $\psi(\mathbf{x})$:

$$\mathbf{F}_{int} = -G\psi(\mathbf{x}) \sum_{\alpha=1}^N w(|\mathbf{e}_{\alpha}|^2) \psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_{\alpha}\delta_t) \mathbf{e}_{\alpha} \quad (10)$$

En este caso, se emplea

$$\psi(\rho) = \sqrt{\frac{2(p_{EOS} - \rho c_s^2)}{Gc^2}} \quad (11)$$

donde p_{EOS} es una ecuación de estado arbitraria. En el modelo de [Li et al. \(2013\)](#) el término de fuerza está dado por:

$$\bar{\mathbf{S}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 6\mathbf{u} \cdot \mathbf{F} + \frac{12\sigma|\mathbf{F}_{int}|^2}{\psi^2\delta_t(\tau_e-0,5)} \\ -6\mathbf{u} \cdot \mathbf{F} - \frac{12\sigma|\mathbf{F}_{int}|^2}{\psi^2\delta_t(\tau_c-0,5)} \\ F_x \\ -F_x \\ F_y \\ -F_y \\ 2(v_x F_x - v_y F_y) \\ (v_x F_y + v_y F_x) \end{bmatrix} \quad (12)$$

donde el parámetro libre σ puede utilizarse para ajustar las densidades de coexistencia en la interface de manera que satisfagan las determinadas por la construcción de Maxwell.

4. RESULTADOS

La integración de la Ec. (3) permite construir perfiles de concentración que pueden utilizarse para verificar la validez de los modelos LB. En particular, como se desea analizar el comportamiento del modelo D2Q9 de [Li et al. \(2013\)](#), se optó por la resolución de una cavidad de 3 unidades de grilla en la dirección horizontal (x) y $H = 600$ unidades en dirección vertical (y), con condiciones de contorno periódicas y *bounce-back* respectivamente. En este aspecto, es necesario destacar que si bien el esquema *bounce-back* presenta un orden de convergencia lineal (ver por ejemplo los trabajos de [Krüger et al. \(2017\)](#) y [Guo y Shu \(2013\)](#)), no se han observado diferencias respecto al uso de otros esquemas en los problemas analizados en esta sección. En todos los casos se aplicó el modelo de [Li et al. \(2013\)](#) con $G = -1$, $R = M = 1$, $a = 0,5$,

$b = 4,0$, $\tau_\rho = \tau_j = 1,0$ y $\tau_e^{-1} = \tau_\zeta^{-1} = \tau_\nu^{-1} = \tau_q^{-1} = 1,1$. Inicialmente la cavidad se encuentra llena con un fluido de densidad igual al valor crítico (ρ_c) con una perturbación aleatoria de $\pm 1\%$, y se deja evolucionar el sistema hasta alcanzar un estado estacionario.

Si se considera una cavidad sin gravedad y con temperatura uniforme, el modelo LB produce una separación del fluido en regiones de diferente densidad. Esto permite determinar la densidad de cada fase a ambos lados de la interface y así comparar ambos valores con los establecidos por la construcción de Maxwell. En la Fig. 1 se muestra la curva de coexistencia de fases calculada con diferentes valores de σ , es decir, los valores de concentración molar reducida ($c = \rho/\rho_c$) sobre la interface para distintos valores de temperatura reducida $T_r = T/T_c$. Puede verse que el uso de $\sigma = 1/8$ permite reproducir satisfactoriamente los valores teóricos dados por la construcción de Maxwell en un amplio rango de temperaturas.

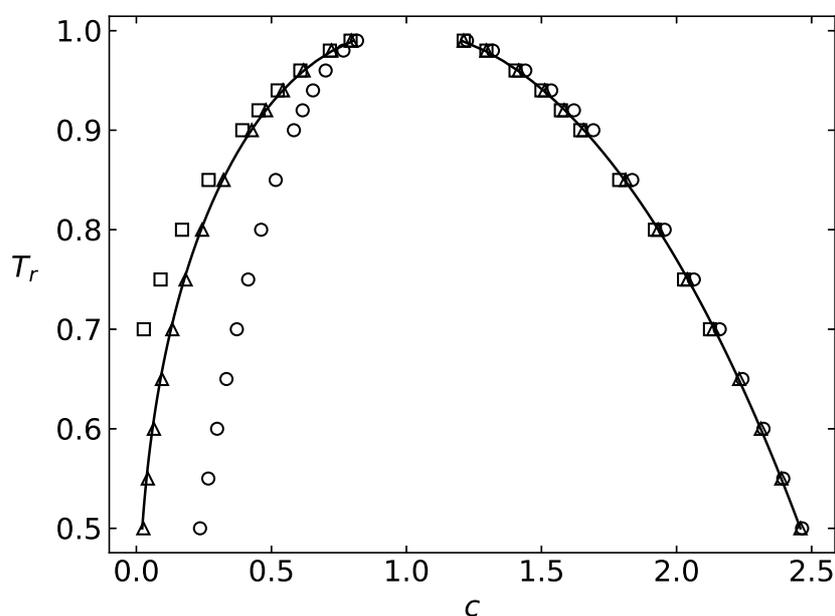


Figura 1: Curva de coexistencia de fases para un fluido VdW. Los símbolos corresponden a la simulación numérica con $\sigma = 1,25$ (\circ), $0,125$ (Δ), $0,0125$ (\square). La curva corresponde a la solución analítica dada por la construcción de Maxwell.

En los casos en que la fuerza gravitacional no sea nula en la dirección vertical, los resultados numéricos muestran dos regiones claramente diferenciadas, donde aquella con mayor densidad ocupa la parte inferior de la cavidad. En la Fig. 2 se muestra el perfil de concentración a lo largo de la coordenada vertical para cavidades con diferente temperatura uniforme T_r , fijando $\sigma = 1/8$ y determinando al valor de g a través de $E_r(H) = 0,01$. Asimismo, se muestran los perfiles de concentración para cada fase dados por la solución de la Ec. (3). Como puede observarse en la Fig. 2 el modelo LB produce perfiles de densidad continuos en la interface, donde el ancho de la misma disminuye a medida que la temperatura de la cavidad se aleja del valor crítico. Por otro lado, el uso de $\sigma = 1/8$ permite representar adecuadamente la distribución de concentración en el interior de cada fase.

La Ec. (3) admite una distribución de temperatura no uniforme en el interior de la cavidad. Por lo tanto, se consideraron casos con un perfil de temperatura lineal a lo largo de la coordenada vertical, con $T_r(H) = 0,99$ y un valor paramétrico para $T_r(0)$. En la Fig. 3 se comparan los perfiles de densidad obtenidos con el modelo de Li et al. (2013) con los determinados por la

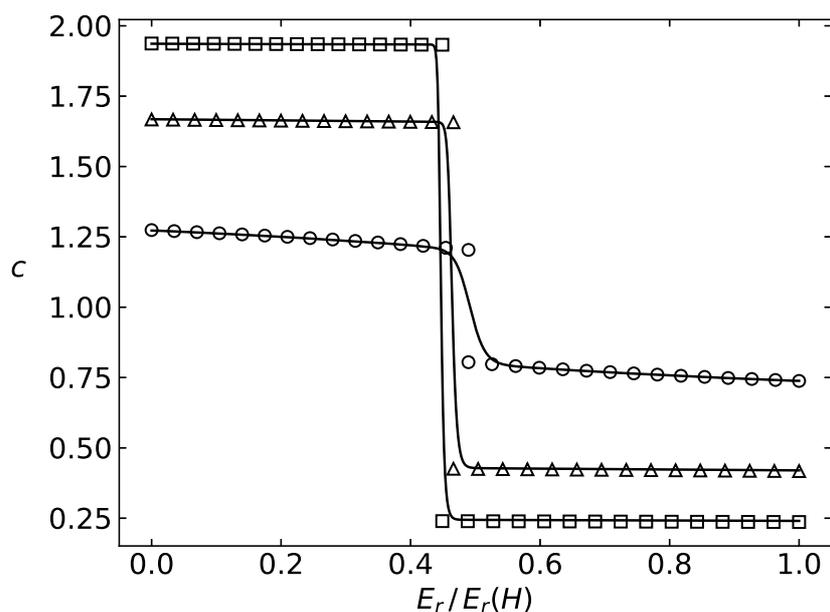


Figura 2: Perfil de concentración para una cavidad en un campo gravitacional en la dirección vertical con intensidad dada por $E_r = 0,01$. Los símbolos corresponden a la solución analítica dada por la Ec. (3) con $T_r = 0,99$ (\circ), $0,9$ (Δ), $0,8$ (\square). Las curvas corresponden a la solución numérica obtenida con $\sigma = 1/8$.

Ec. (3) con $E_r = 0,01$. Nuevamente, puede observarse que el modelo LB es capaz de reproducir satisfactoriamente los valores de densidad sobre la interface, su distribución dentro de cada fase, y la posición de la interface para cada valor de $T_r(0)$ empleado.

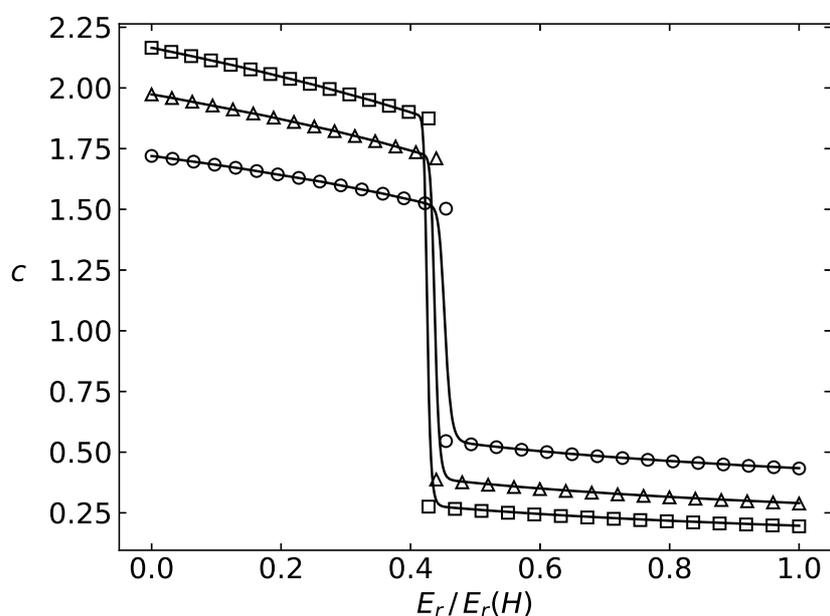


Figura 3: Distribución espacial de concentración con gravedad uniforme ($E_r = 0,01$) y perfil de temperatura lineal. La temperatura reducida en $y = H$ se encuentra fija en $0,99$. Los símbolos corresponden a la solución de la Ec. (3) con $T_r(0) = 0,7$ (\square), $0,8$ (Δ), $0,9$ (\circ). Las curvas corresponden a la solución numérica con $\sigma = 1/8$.

Los resultados numéricos muestran que el modelo LB es capaz de reproducir los perfiles de

densidad determinados por la solución analítica bajo diferentes condiciones de simulación. El parámetro σ puede ajustarse libremente para satisfacer en forma aproximada la condición de estabilidad mecánica, de forma de obtener una excelente concordancia lejos de la interface y un perfil continuo donde tiene lugar la separación de fases.

5. CONCLUSIONES

En este trabajo se presentaron los resultados de la simulación de un fluido Van der Waals en una cavidad unidimensional con fuerza de gravedad, empleando el método de lattice-Boltzmann. Los resultados numéricos fueron comparados con perfiles de densidad analíticos, incluyendo casos con temperatura uniforme y con distribución lineal dentro del dominio. Los resultados muestran que el modelo multifásico de Li et al. es capaz de reproducir satisfactoriamente los perfiles de densidad bajo diferentes condiciones de simulación, mientras que la solución analítica provee un caso simple pero confiable para ser usado en la verificación de características específicas de modelos LB multifásicos.

REFERENCIAS

- Berberan-Santos M.N., Bodunov E.N., y Pogliani L. Liquid–vapor equilibrium in a gravitational field. *American Journal of Physics*, 70(4):438, 2002. ISSN 00029505. doi: 10.1119/1.1424264.
- Guo Z. y Shu C. *Lattice Boltzmann method and its applications in engineering*. Advances in computational fluid dynamics. World Scientific, New Jersey, 2013. ISBN 978-981-4508-29-2.
- Higuera F.J. y Jiménez J. Boltzmann Approach to Lattice Gas Simulations. *Europhys. Lett.*, 9(7):663–668, 1989.
- Huang R. y Wu H. Lattice Boltzmann model for the correct convection-diffusion equation with divergence-free velocity field. *Physical Review E*, 91(3), 2015. ISSN 1539-3755, 1550-2376. doi:10.1103/PhysRevE.91.033302.
- Krüger T., Kusumaatmaja H., Kuzmin A., Shardt O., Silva G., y Viggen E.M. *The Lattice Boltzmann Method - Principles and Practice*. Graduate Texts in Physics. Springer International Publishing Switzerland, 2017. ISBN 978-3-319-44647-9.
- Li Q., Luo K., Kang Q., He Y., Chen Q., y Liu Q. Lattice Boltzmann methods for multiphase flow and phase-change heat transfer. *Progress in Energy and Combustion Science*, 52:62–105, 2016. ISSN 03601285. doi:10.1016/j.pecs.2015.10.001.
- Li Q., Luo K.H., y Li X.J. Lattice Boltzmann modeling of multiphase flows at large density ratio with an improved pseudopotential model. *Physical Review E*, 87(5), 2013. ISSN 1539-3755, 1550-2376. doi:10.1103/PhysRevE.87.053301.
- McNamara G.R. y Zanetti G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. *Physical Review Letters*, 61(20):2332, 1988.
- Shan X. y Chen H. Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation. *Physical Review E*, 49(4):2941, 1994.
- Sukop M.C. y Or D. Lattice Boltzmann method for modeling liquid-vapor interface configurations in porous media: LATTICE BOLTZMANN FOR INTERFACE CONFIGURATIONS. *Water Resources Research*, 40(1), 2004. ISSN 00431397. doi:10.1029/2003WR002333.