

Решеточный метод Больцмана в задачах кондуктивного теплопереноса с учетом химических реакций в материале

Александр Э. Ни¹ nee_alexander@mail.ru  0000-0002-7928-0329
Ксения Б. Ким² kmkkseniya@yandex.ru  0000-0001-5564-8267

1 Томский политехнический университет, просп. Ленина, 30, г. Томск, 634034, Россия

2 Воронежский государственный университет инженерных технологий, пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394036, Россия

Аннотация. Проведено математическое моделирование процесса теплопроводности в полимерном материале с учетом экзотермических и эндотермических реакций в трехмерной постановке. Краевая задача кондуктивного теплопереноса формулировалась с точки зрения мезоскопического решеточного метода Больцмана (LBM). Дискретизация уравнения Больцмана осуществлялась при помощи D3Q7 схемы. При этом для аппроксимации интеграла столкновения использовалась единовременная релаксация, предложенная Бхатнагаром-Гроссом-Круком. Верификация результатов численного моделирования проводилась путем сравнения с эталонными данными, полученными традиционным методом конечных разностей (FDM). Уравнение теплопроводности аппроксимировалось явными схемами второго порядка по пространству. Для удобства анализа экзотермических и эндотермических реакций мощность внутренних источников выделения и поглощения теплоты задавалась в диапазоне. Выявлено, что температура в ядре материала увеличивается в условиях экзотермической реакции и понижается при учете эндотермической с течением времени. Установлено, что при относительно малом значении времени равном 100 с тепловой эффект эндотермической реакции незначителен. Как результат, значение температуры в ядре практически равно начальной и перенос энергии осуществляется только у границ материала. Показано, что атипичный решеточный метод Больцмана воспроизводит аналогичные типичному методу конечных разностей поля температур. Во всех рассмотренных случаях LBM дает корректные профили температуры, а отклонения локальных значений лежат в пределах 5%. Такая погрешность может быть обусловлена неявной конвертацией макроскопических граничных условий первого рода посредством мезоскопической функции распределения. Также установлено, что решеточный метод Больцмана существенно проигрывает в скорости исполнения расчетной программы традиционному методу конечных разностей при количестве узлов больше 61^3 .

Ключевые слова: решеточный метод, уравнение Больцмана, экзотермическая реакция, эндотермическая реакция, теплопроводность

Lattice Boltzmann method for heat conduction problems with chemical reactions

Alexander E. Nee¹ nee_alexander@mail.ru  0000-0002-7928-0329
Kseniya B. Kim² kmkkseniya@yandex.ru  0000-0001-5564-8267

1 National Research Tomsk Polytechnic University, prosp. Lenina, 30, Tomsk, 634034, Russia

2 Voronezh State University of Engineering Technologies, Revolution Av., 19 Voronezh, 394036, Russia

Abstract. Mathematical modeling of heat conduction in a polymer material is carried out taking into account exothermic and endothermic reactions in a three-dimensional formulation. The boundary value problem of conductive heat transfer was formulated in terms of the mesoscopic lattice Boltzmann method (LBM). The discretization of the Boltzmann equation was carried out using the D3Q7 scheme. In this case, the single relaxation time scheme proposed by Bhatnagar-Gross-Krook was used to approximate the collision integral. The numerical simulation results were verified by comparison with the reference data obtained by the traditional finite difference method (FDM). The heat conduction equation was approximated by explicit schemes of the second order in space. For the convenience of analyzing exothermic and endothermic reactions, the power of internal volumetric sources of heat release and absorption was set in the range of $-10^5 \leq q_v \leq 10^5$. It was revealed that the temperature in the core of the material increases under the conditions of an exothermic reaction and decreases when the endothermic one is taken into account over time. It was found that at a relatively short time of 100 s, the heat effect of the endothermic reaction is insignificant. As a result, the value of the temperature in the core is practically equal to the initial one and the energy transfer occurs only at the boundaries of the material. It is shown that the atypical lattice Boltzmann method reproduces the temperature fields similar to the typical finite difference method. In all considered cases, LBM gives correct temperature profiles, and deviations of local values are within 5%. Such an error may be due to an implicit conversion of macroscopic boundary conditions of the first kind by means of a mesoscopic distribution function. It was also found that the lattice Boltzmann method significantly loses in the execution speed of the computational program to the traditional method of finite differences when the number of nodes is more than 61^3 .

Keywords: lattice method, Boltzmann equation, exothermic reaction, endothermic reaction, thermal conductivity

Введение

Решеточный метод Больцмана (Lattice Boltzmann method или LBM) является относительно новым инструментом для решения задач газовой динамики и тепломассопереноса [1–4]. Ядром этого метода является решеточное уравнение Больцмана, которое представляет собой особую форму кинетического уравнения Больцмана, дискретизированного по пространству и времени. LBM можно рассматривать как подход статистической физики, существенно отличающийся от «традиционных» макроско-

пических методов механики сплошной среды, которые обычно применяются при моделировании процессов химической инженерии.

В рамках решеточного метода Больцмана анализируется микродинамика условных частиц с помощью упрощенных кинетических моделей. Кинетическая природа привносит многие отличительные особенности LBM от «традиционных» численных методов, такие как простота численной реализации и естественный параллелизм. Во многом эти особенности и привлекают исследователей к использованию LBM.

Для цитирования

Ни А.Э., Ким К.Б. Решеточный метод Больцмана в задачах кондуктивного теплопереноса с учетом химических реакций в материале // Вестник ВГУИТ. 2021. Т. 83. № 3. С. 191–197. doi:10.20914/2310-1202-2021-3-191-197

For citation

Nee A.E., Kim K.B. Lattice Boltzmann method for heat conduction problems with chemical reactions. *Vestnik VGUET* [Proceedings of VSUET]. 2021. vol. 83. no. 3. pp. 191–197. (in Russian). doi:10.20914/2310-1202-2021-3-191-197

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution 4.0 International License

Следует отметить, что рассматриваемый метод преимущественно используется для решения задач гидрогазодинамики [5, 6]. В этой связи, представляет интерес оценка возможности применения LBM для анализа процесса теплопроводности в твердом материале с учетом химической реакции. Таким образом, целью настоящей работы является математическое моделирование процесса кондуктивного теплопереноса мезоскопическим решеточным методом Больцмана.

Материалы и методы

Рассматривается краевая задача пространственного кондуктивного теплопереноса. Область решения представлена в виде, например, полимерного материала кубической формы (рисунок 1).

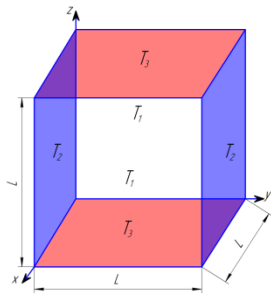


Рисунок 1. Область решения

Figure 1. Solution domain

Предполагается, что теплофизические свойства материала не зависят от температуры. На границах задаются краевые условия первого рода. Макроскопическое уравнение теплопроводности для рассматриваемого случая имеет следующий вид:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \cdot \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \frac{q_v}{c \cdot \rho}, \quad (1)$$

где T – температура, К; t – время, с; a – коэффициент температуропроводности, $\text{м}^2/\text{с}$; x, y, z – декартовы координаты, м;

$q_v = q_{\text{хим}} \cdot k_0 \cdot \rho \cdot \exp\left(-\frac{E}{R \cdot T}\right)$ – объемный источник выделения или поглощения теплоты за счет химической реакции, $\text{Вт}/\text{м}^3$; c – удельная изобарная теплоемкость, $\text{Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$; ρ – плотность, $\text{кг}/\text{м}^3$.

Уравнение (1) замыкается следующими начальными и граничными условиями:

$$t = 0: T(x, y, z, 0) = T_0, \quad (2)$$

$$t > 0, x = 0, 0 < y < L, 0 < z < L: T = T_1, \quad (3)$$

$$t > 0, x = 1, 0 < y < L, 0 < z < L: T = T_1, \quad (4)$$

$$t > 0, y = 0, 0 < x < L, 0 < z < L: T = T_2, \quad (5)$$

$$t > 0, y = 1, 0 < x < L, 0 < z < L: T = T_2, \quad (6)$$

$$t > 0, z = 0, 0 < x < L, 0 < y < L: T = T_3, \quad (7)$$

$$t > 0, z = 1, 0 < x < L, 0 < y < L: T = T_3. \quad (8)$$

Рассматриваемый процесс можно также описать при помощи кинетического уравнения Больцмана вида:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \cdot \nabla f = \Omega, \quad (9)$$

где f – функция распределения, $\text{кг}/\text{м}^3$; Ω – интеграл столкновения, $\text{кг}/(\text{с} \cdot \text{м}^3)$; u – вектор скорости, $\text{м}/\text{с}$.

Применяя трехмерную семискоростную схему (рисунок 2) и BGK аппроксимацию, получим решеточные уравнения Больцмана:

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + u \cdot \nabla f_k = \omega (f_k^{\text{eq}} - f_k) + S_k, \quad (10)$$

где f^{eq} – равновесная функция распределения, $\text{кг}/\text{м}^3$; $S_k = w_k \cdot \rho$ – источниковый член, $\text{кг}/(\text{с} \cdot \text{м}^3)$; ω – частота релаксации, $1/\text{с}$; $k = 1..7$.

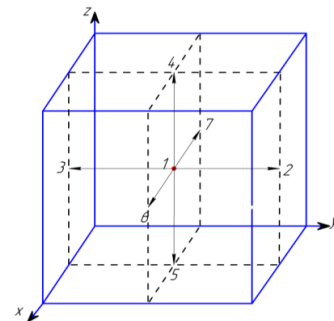


Рисунок 2. Схема D3Q7

Figure 2. D3Q7 scheme

Уравнение (10) может быть дискретизировано как:

$$f_k(x + c_k \cdot \Delta t, t + \Delta t) = f_k(x, t) + \Delta t \cdot \omega \cdot [f_k^{\text{eq}}(x, t) - f_k(x, t)] + \Delta t \cdot S_k. \quad (11)$$

Равновесная функция распределения для D3Q7 схемы рассчитывается как:

$$f_k^{\text{eq}} = w_k \cdot \rho \cdot \left[1 + 3 \cdot (c_k \cdot u) + \frac{9}{2} \cdot (c_k \cdot u)^2 - \frac{3}{2} \cdot (u \cdot u) \right], \quad (12)$$

Поскольку рассматривается процесс теплопроводности, вектор скорости равен нулю. В этом случае равновесная функция распределения принимает частный вид:

$$f_k^{\text{eq}} = w_k \cdot T. \quad (13)$$

Весовые коэффициенты w_k и скорости частиц для схемы D3Q7 имеют следующие значения:

$$w_k = \begin{cases} \frac{1}{4}; & k = 1, \\ \frac{1}{8}; & k = 2..7. \end{cases}$$

Согласно теории Чепмена–Энскога температура восстанавливается из функции распределения следующим образом:

$$T(x, t) = \sum_{k=1}^7 f_k(x, t). \quad (14)$$

Частота релаксации рассчитывалась как:

$$\omega = \frac{1}{\frac{a}{c_s^2 \cdot \Delta t} + \frac{1}{2}}, \quad (15)$$

где c_s – скорость звука в узлах решетки, м/с

На границах задаются следующие условия для функции распределения:

$$t > 0, x = 0, 0 < y < L, 0 < z < L: f_7 = T_1(w_6 + w_7) - f_6, \quad (16)$$

$$t > 0, x = 1, 0 < y < L, 0 < z < L: f_6 = T_1(w_6 + w_7) - f_7, \quad (17)$$

$$t > 0, y = 0, 0 < x < L, 0 < z < L: f_2 = T_2(w_2 + w_3) - f_3, \quad (18)$$

$$t > 0, y = 1, 0 < x < L, 0 < z < L: f_3 = T_2(w_2 + w_3) - f_2, \quad (19)$$

$$t > 0, z = 0, 0 < x < L, 0 < y < L: f_5 = T_3(w_4 + w_5) - f_4, \quad (20)$$

$$t > 0, z = 1, 0 < x < L, 0 < y < L: f_4 = T_3(w_4 + w_5) - f_5 \quad (21)$$

Упрощенный алгоритм решения краевой задачи при использовании решеточного метода Больцмана состоит из следующих частей:

- Задаются начальные параметры.
- Начало итерационного цикла.
- Рассчитываются равновесная функция распределения и теплота химической реакции.
- Процедура “Collision” в LBM.
- Процедура “Streaming” в LBM.
- Рассчитывается функция распределения на границах полости.

• Восстанавливается макроскопическая температура из мезоскопической функции распределения.

• Шаги 2 – 7 повторяются до достижения заданного количества итераций.

Результаты и обсуждение

Математическое моделирование процесса кондуктивного теплопереноса проведено при варьировании объёмного источника выделения и поглощения теплоты. Для удобства анализа экзотермических и эндотермических реакций q_v будет задаваться, а не рассчитываться. Значения входных параметров приведены в таблице 1.

Таблица 1.

Входные данные

Table 1.

Input data	
L	0,1
a	$6,22 \times 10^{-7}$
C	750
ρ	1500
T0	298
T1	283
T2	273
T3	323
q_v	$10^4; 10^5; -10^4; -10^5$

На рисунке 3 приведены поля температур в динамике. Как и можно было предположить, температура в ядре материала увеличивается в условиях экзотермической реакции и понижается при учете эндотермической с течением времени.

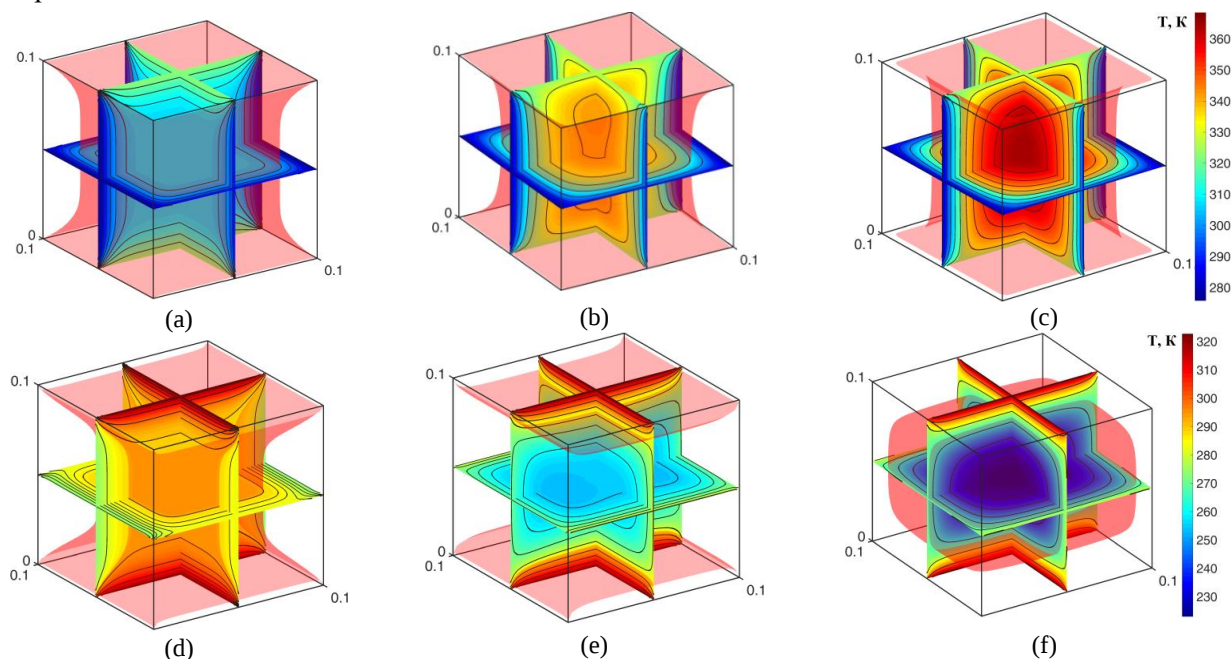


Рисунок 3. Поля температур с учетом экзотермической $q_v = 10^5$ (a, b, c) и эндотермической $q_v = -10^5$ (d, e, f) реакций при: (a), (d) $t = 100$; (b), (e) $t = 500$; (c), (f) $t = 1000$

Figure 3. Temperature fields taking into account exothermic $q_v = 10^5$ (a, b, c) and endothermic $q_v = -10^5$ (d, e, f) reactions at: (a), (d) $t = 100$; (b), (e) $t = 500$; (c), (f) $t = 1000$

Установлено, что при $t = 100$ тепловой эффект эндотермической реакции незначителен. Как результат, значение температуры в ядре практически равно начальной и перенос энергии осуществляется только у границ материала. С другой стороны, температура в центре области решения увеличивается примерно на 10 K при рассмотрении экзотермической реакции. С увеличением времени до 500 распределение температур в окрестности нижней и верхней границ изменяется несущественно, в то время как происходит модификация изотерм у других стенок материала при эндотермической реакции. При этом противоположные закономерности теплопереноса можно также выделить в условиях экзотермической реакции. Аналогичные паттерны наблюдаются и при дальнейшем увеличении времени. Для оценки достоверности результатов численного моделирования рассматриваемая краевая задача также решена традиционным методом конечных разностей (FDM). Поскольку решеточный метод Больцмана является явным, дифференциальные уравнения

второго порядка в частных производных аппроксимировались явными конечно-разностными схемами. Для временной производной использовалась схема Эйлера, а для диффузионных слагаемых – центральные разности второго порядка точности по пространству.

На рисунок 4 приведены распределения температур в характерных сечениях. На основании анализа представленных на рисунок 4 данных можно сделать вывод, что решеточный метод Больцмана адекватно воспроизводит рассматриваемые характеристики теплопереноса. При этом интересно отметить, что наилучшее совпадение результатов достигается в условиях эндотермических реакций. Во всех рассмотренных случаях LBM дает корректные профили температуры, а отклонения локальных значений лежат в пределах 5 %. Такая погрешность может быть обусловлена неявной конвертацией макроскопических граничных условий первого рода посредством мезоскопической функции распределения.

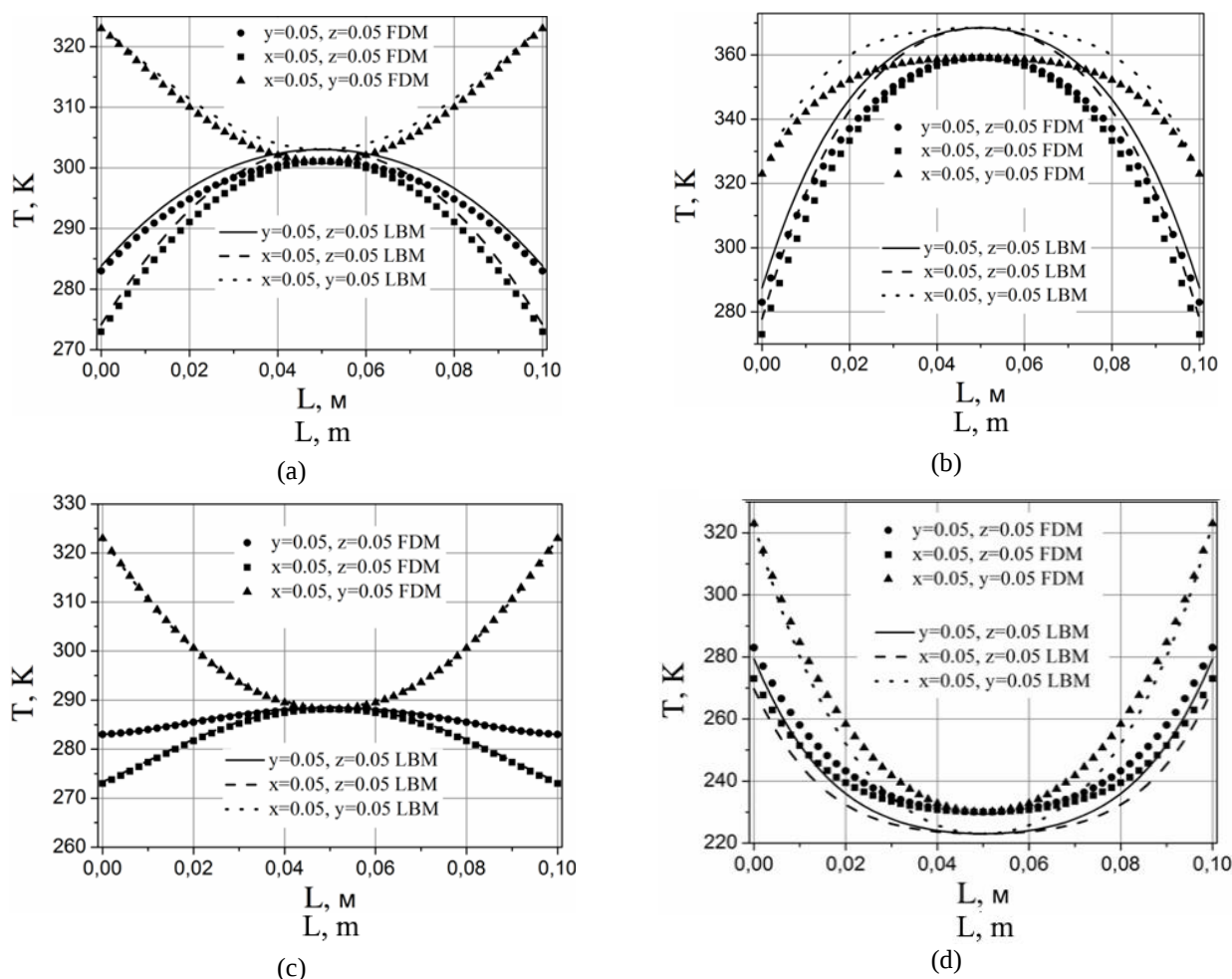


Рисунок 4. Распределения температур при: (a) $q_v = 10^4$; (b) $q_v = 10^5$; (c) $q_v = -10^4$; (d) $q_v = -10^5$

Figure 4. Distribution of temperatures at: (a) $q_v = 10^4$; (b) $q_v = 10^5$; (c) $q_v = -10^4$; (d) $q_v = -10^5$

Хорошо видно, что изотермические условия выполняются с ошибкой при LBM. Одним из вариантов решения этой проблемы представляется принудительное задание параметров на стенках материала после шага восстановления температуры из функции распределения. Также следует отметить, что решеточный метод Больцмана воспроизводит большие / меньшие значения температуры в условиях экзотермических / эндотермических реакций. Возможно, понижение частоты релаксации приведет к лучшему согласованию результатов численного моделирования. Известно, что при решении задач гидрогазодинамики LBM имеет преимущество перед традиционными численными методами в скорости расчета программы. В этой связи, представляет интерес оценка вычислительной производительности решеточного метода Больцмана при моделировании процесса теплопроводности.

На рисунке 5 представлены времена исполнения программ при варьировании количества узлов расчетной сетки.

На основании сравнительного анализа установлено, что решеточный метод Больцмана существенно проигрывает традиционному методу конечных разностей при количестве узлов $\geq 61^3$.

Однако, такой результат в некотором смысле предсказуем, поскольку при решении задач теплопроводности отсутствует необходимость решать стационарные уравнение неразрывности потока и Пуассона для поля давления на каждом шаге по времени как в случае численного анализа процессов газовой динамики. Более того, при использовании трехмерной семискоростной схемы решается семь уравнений для функции распределения, в то время

как при применении классического метода конечных разностей – одно уравнение энергии.

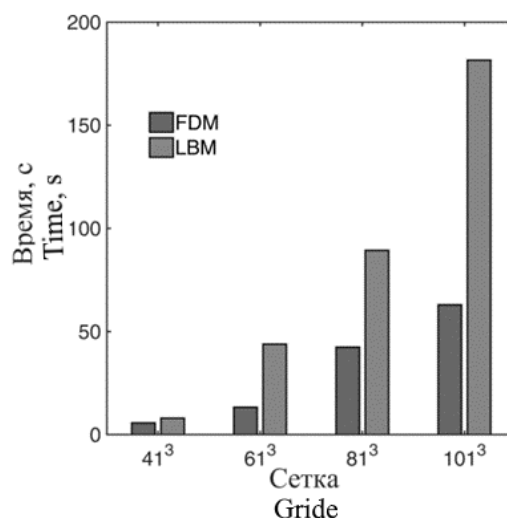


Рисунок 5. Время расчета программ при $t = 1000$

Figure 5. Time of calculation of programs at $t = 1000$

Закключение

Численно проанализирован пространственный процесс кондуктивного теплопереноса в полимерном материале с учетом экзотермических и эндотермических реакций. По результатам проведенных исследований установлено, что относительно новый решеточный метод Больцмана корректно воспроизводит поля температур. Однако при решении задач теплопроводности LBM уступает в скорости расчета традиционным численным методам. Дальнейшие направления исследований могут включать постановку нелинейных граничных условий и учет термического разложения материала.

Благодарности

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда № 21-79-00011.

Литература

- 1 Rahimi A., Kasaeipoor A., Amiri A., Doranehgard M.H. et al. Lattice Boltzmann method based on Dual-MRT model for three-dimensional natural convection and entropy generation in CuO–water nanofluid filled cuboid enclosure included with discrete active walls // Computers & Mathematics with Applications. 2018. V. 75. P.1795–1813. doi: 10.1016/j.camwa.2017.11.037
- 2 Dixit H.N., Babu V. Simulation of high Rayleigh number natural convection in a square cavity using the lattice Boltzmann method // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2006. V. 9. P. 727–739. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2005.07.046
- 3 Esfahani J.A., Norouzi A. Two relaxation time lattice Boltzmann model for rarefied gas flows // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2014. V. 393. P. 51–61. doi: 10.1016/j.physa.2013.08.058
- 4 Frapolli N., Chikatamarla S.S., Karlin I.V. Entropic lattice Boltzmann simulation of thermal convective turbulence // Computers & Fluids. 2018. V. 175. P. 2–19. doi: 10.1016/j.compfluid.2018.08.021
- 5 Zhuo C., Zhong Ch. LES-based filter-matrix lattice Boltzmann model for simulating turbulent natural convection in a square cavity // International Journal of Heat and Fluid Flow. 2013. V. 42. P. 10–22. doi: 10.1016/j.ijheatfluidflow.2013.03.013
- 6 Obrecht Ch., Kuznik F., Tourancheau B., Roux J. – J. Multi-GPU implementation of a hybrid thermal lattice Boltzmann solver using the TheLMA framework // Computers & Fluids. 2013. V. 80. P. 269–275. doi: 10.1016/j.compfluid.2012.02.014

- 7 Rahimi A., Azarikhah P., Kasaeipoor A., Hasani Malekshah E. et al. Lattice Boltzmann simulation of free convection's hydrothermal aspects in a finned/multi-pipe cavity filled with CuO-water nanofluid // *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*. 2019. V. 29. P. 1058–1078. doi: 10.1108/HFF-07–2018–0349
- 8 Izadi M., Mohebbi R., Chamkha A. et. al. Effects of cavity and heat source aspect ratios on natural convection of a nanofluid in a C-shaped cavity using Lattice Boltzmann method // *Int. J. Numer. Method H*. 2018. V. 28. P. 1930–1955. doi: 10.1108/HFF-03–2018–0110
- 9 Hammouda S., Amam, B., Dhahri H. Viscous dissipation effects on heat transfer for nanofluid flow over a backward-facing step through porous medium using lattice boltzmann method // *Journal of Nanofluids*. 2018. V. 7. P. 668–682. doi: 10.1166/jon.2018.1491
- 10 Lallemand P., Lou L-S. Hybrid finite-difference thermal lattice Boltzmann equation // *International Journal of Modern Physics B*. 2003. V. 17. P. 41–47.
- 11 Rahimi A., Kasaeipoor A., Amiri A., Hasani Malekshah E. et al. Lattice Boltzmann numerical method for natural convection and entropy generation in cavity with refrigerant rigid body filled with DWCNTs-water nanofluid-experimental thermo-physical properties // *Thermal Science and Engineering Progress*. 2018. V. 5. P. 372–387. doi: 10.1016/j.tsep.2018.01.005
- 12 Avramenko A.A., Tyrinov A.I., Shevchuk I.V., Dmitrenko N.P. et al. Mixed convection in a vertical flat microchannel // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2017. V. 106. P. 1164–1173. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.10.096
- 13 Avramenko A.A., Tyrinov A.I., Shevchuk I.V., Dmitrenko N.P., Kravchuk A.V., Shevchuk V.I. Mixed convection in a vertical circular microchannel // *International Journal of Thermal Sciences*. 2017. V. 121. P. 1–12.
- 14 Javaherdeh K., Azarbarzin T. Lattice boltzmann simulation of nanofluid mixed convection in a lid-driven trapezoidal enclosure with square heat source // *Journal of Nanofluids*. 2017. V. 6. P. 1188–1197. doi: 10.1166/jon.2017.1398
- 15 Arun S., Satheesh A., Chamkha A.J. Numerical Analysis of Double-Diffusive Natural Convection in Shallow and Deep Open-Ended Cavities Using Lattice Boltzmann Method // *Arab. J. Sci. Eng.* 2020. V. 45. P. 861–876. doi: 10.1007/s13369-019-04156-3
- 16 Sukop M.C., Thorne D.T, Jr. *Lattice Boltzmann Modeling An Introduction for Geoscientists and Engineers* // Springer-Verlag Berlin Heidelberg. 2006. V. 2007. P. 177.
- 17 Mohamad A.A. *Lattice Boltzmann Method Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes* // Springer-Verlag London Limited. 2011. P. 195. doi: 10.1007/978-0-85729-455-5
- 18 Succi S. *The Lattice Boltzmann Equation for fluid dynamics and beyond*. Clarendon Press. Oxford. 2001. 299 p.
- 19 Guo Zh., Shu Ch. *Lattice Boltzmann method and its applications in engineering*. World Scientific, Singapore, 2013. 420 p. doi: 10.1142/8806
- 20 Krüger T., Kusumaatmaja H., Kuzmin A., Shardt O. et al. *The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice*. Springer, Switzerland. 2017. 230 p.

References

- 1 Rahimi A., Kasaeipoor A., Amiri A., Doranehgard M.H. et al. Lattice Boltzmann method based on Dual-MRT model for three-dimensional natural convection and entropy generation in CuO–water nanofluid filled cuboid enclosure included with discrete active walls. *Computers & Mathematics with Applications*. 2018. vol. 75. pp.1795–1813. doi: 10.1016/j.camwa.2017.11.037
- 2 Dixit H.N., Babu V. Simulation of high Rayleigh number natural convection in a square cavity using the lattice Boltzmann method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2006. vol. 9. pp. 727–739. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2005.07.046
- 3 Esfahani J.A., Norouzi A. Two relaxation time lattice Boltzmann model for rarefied gas flows. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2014. vol. 393. pp. 51–61. doi: 10.1016/j.physa.2013.08.058
- 4 Frapoli N., Chikatamarla S.S., Karlin I.V. Entropic lattice Boltzmann simulation of thermal convective turbulence. *Computers & Fluids*. 2018. vol. 175. pp. 2–19. doi: 10.1016/j.compfluid.2018.08.021
- 5 Zhuo C., Zhong Ch. LES-based filter-matrix lattice Boltzmann model for simulating turbulent natural convection in a square cavity. *International Journal of Heat and Fluid Flow*. 2013. vol. 42. pp. 10–22. doi: 10.1016/j.ijheatfluidflow.2013.03.013
- 6 Obrecht Ch., Kuznik F., Tourancheau B., Roux J. – J. Multi-GPU implementation of a hybrid thermal lattice Boltzmann solver using the TheLMA framework. *Computers & Fluids*. 2013. vol. 80. pp. 269–275. doi: 10.1016/j.compfluid.2012.02.014
- 7 Rahimi A., Azarikhah P., Kasaeipoor A., Hasani Malekshah E. et al. Lattice Boltzmann simulation of free convection's hydrothermal aspects in a finned/multi-pipe cavity filled with CuO-water nanofluid. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*. 2019. vol. 29. pp. 1058–1078. doi: 10.1108/HFF 07–2018–0349
- 8 Izadi M., Mohebbi R., Chamkha A. et. al. Effects of cavity and heat source aspect ratios on natural convection of a nanofluid in a C-shaped cavity using Lattice Boltzmann method. *Int. J. Numer. Method H*. 2018. vol. 28. pp. 1930–1955. doi: 10.1108/HFF 03–2018–0110
- 9 Hammouda S., Amam, B., Dhahri H. Viscous dissipation effects on heat transfer for nanofluid flow over a backward-facing step through porous medium using lattice boltzmann method. *Journal of Nanofluids*. 2018. vol. 7. pp. 668–682. doi: 10.1166/jon.2018.1491
- 10 Lallemand P., Lou L-S. Hybrid finite-difference thermal lattice Boltzmann equation. *International Journal of Modern Physics B*. 2003. vol. 17. pp. 41–47.

- 11 Rahimi A., Kasaeipoor A., Amiri A., Hasani Malekshah E. et al. Lattice Boltzmann numerical method for natural convection and entropy generation in cavity with refrigerant rigid body filled with DWCNTs-water nanofluid-experimental thermo-physical properties. Thermal Science and Engineering Progress. 2018. vol. 5. pp. 372–387. doi: 10.1016/j.tsep.2018.01.005
- 12 Avramenko A.A., Tyrinov A.I., Shevchuk I.V., Dmitrenko N.P. et al. Mixed convection in a vertical flat microchannel. International Journal of Heat and Mass Transfer. 2017. vol. 106. pp. 1164–1173. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.10.096
- 13 Avramenko A.A., Tyrinov A.I., Shevchuk I.V., Dmitrenko N.P., Kravchuk A.V., Shevchuk V.I. Mixed convection in a vertical circular microchannel. International Journal of Thermal Sciences. 2017. vol. 121. pp. 1–12.
- 14 Javaherdeh K., Azarbarzin T. Lattice boltzmann simulation of nanofluid mixed convection in a lid-driven trapezoidal enclosure with square heat source. Journal of Nanofluids. 2017. vol. 6. pp. 1188–1197. doi: 10.1166/jon.2017.1398
- 15 Arun S., Satheesh A., Chamkha A.J. Numerical Analysis of Double-Diffusive Natural Convection in Shallow and Deep Open-Ended Cavities Using Lattice Boltzmann Method. Arab. J. Sci. Eng. 2020. vol. 45. pp. 861–876. doi: 10.1007/s13369-019-04156-3
- 16 Sukop M.C., Thorne D.T, Jr. Lattice Boltzmann Modeling An Introduction for Geoscientists and Engineers. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. 2006. vol. 2007. pp. 177.
- 17 Mohamad A.A. Lattice Boltzmann Method Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes. Springer-Verlag London Limited. 2011. pp. 195. doi: 10.1007/978-0-85729-455-5
- 18 Succi S. The Lattice Boltzmann Equation for fluid dynamics and beyond. Clarendon Press. Oxford. 2001. 299 p.
- 19 Guo Zh., Shu Ch. Lattice Boltzmann method and its applications in engineering. World Scientific, Singapore, 2013. 420 p. doi: 10.1142/8806
- 20 Krüger T., Kusumaatmaja H., Kuzmin A., Shardt O. et al. The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice. Springer, Switzerland. 2017. 230 p.

Сведения об авторах

Александр Э. Ни к.ф.-м.н., доцент, Научно-Образовательный центр И.Н. Бутакова, Томский политехнический университет, пр-т. Ленина, 30, г. Томск, 634034, Россия, nee_alexander@mail.ru
 <https://orcid.org/0000-0002-7928-0329>

Ксения Б. Ким к.х.н., доцент, кафедра неорганической химии и химической технологии, Воронежский государственный университет инженерных технологий, пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394036, Россия, kmkseniya@yandex.ru
 <https://orcid.org/0000-0001-5564-8267>

Information about authors

Alexander E. Nee Cand. Sci. (Phys.-Math.), associate professor, Scientific and Educational Center I.N. Butakovt, Tomsk Polytechnic University, ave. Lenin, 30, Tomsk, 394036, Russia, nee_alexander@mail.ru
 <https://orcid.org/0000-0002-7928-0329>

Kseniya B. Kim Cand. Sci. (Chem.), associate professor, inorganic chemistry and chemical technology department, Voronezh State University of Engineering Technologies, Voronezh, Russian Federation, av. Revolution, 19, Voronezh, 394036, Russia, kmkseniya@yandex.ru
 <https://orcid.org/0000-0001-5564-8267>

Вклад авторов

Все авторы в равной степени принимали участие в написании рукописи и несут ответственность за плагиат

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Contribution

All authors are equally involved in the writing of the manuscript and are responsible for plagiarism

Conflict of interest

The authors declare no conflict of interest.

Поступила 27/07/2021	После редакции 17/08/2021	Принята в печать 03/09/2021
Received 27/07/2021	Accepted in revised 17/08/2021	Accepted 03/09/2021