

文章编号:1000-582x(2000)02-0092-04

69  
92-95

# 13-Bit 格子气自动机模型的并行运行

035

石万元<sup>1</sup>, 郑忠<sup>2</sup>, 高小强<sup>2</sup>

TP301.1

(1. 重庆大学热能工程学院, 重庆 400044; 2. 重庆大学材料科学与工程学院, 重庆 400044)

**摘要:**采用按“位”编码和计算,把流体粒子的运动和碰撞过程处理为运动状态的转贮和节点信息的回送两个过程,得以实现并行运算,建立了计算速度快、可包含节点量较大的 13-Bit 格子气自动机模型的运行机制。焦炭多孔介质流体流场模拟结果表明该机制是正确有效的。

**关键词:**流体流动;数值模拟;格子气自动机

**中图分类号:** O 357; TP 311

**文献标识码:** A

并行运行

1972年,法国 J. Hardy, Y. Pomeau 和 O. de Pazzis 为解决二维流体力学中输运系数发散问题,提出第一个完全离散的格子气自动机模型(Lattice gas automata, 缩写为 LGA)模型 HPP 以来<sup>[1]</sup>,格子气自动机模型得到迅猛发展。先后产生了单速模型(其中包括 FHP II 模型)、多速模型、高维模型等。LGA 模型处理流体流动问题的特点是将流体及其存在的时间、空间完全离散,把流体想象成由大量只有质量没有体积的流体粒子组成,所有这些粒子同步地随着离散的整时间步长,依据给定的简单碰撞规则在网格节点上相互作用,沿网格线在节点之间运动。它认为流体运动的宏观特征是由微观流体粒子相互碰撞而在整体上表现出来的统计规律。

LGA 模型是微观模型,模拟空间内的微观流体粒子运动状态瞬息万变。但每个粒子的运动和碰撞须遵循质量守恒定律、动量守恒定律和能量守恒定律,粒子运动时还遵循 Pauli 不相容原理。模拟一个运动过程时,预先将大量粒子全方向或仅在流动方向上随机投放于模拟区域内,格子气自动机经过一段时间的运行,粒子的分布状态最终在整体上会达到一种动态平衡,经过进一步的统计分析,可以获得流体流场及相关宏观统计量,如雷诺数、速度等,即宏观统计规律。它可以用数值实验方法处理理论分析、传统数值模拟方法难以处理的非线性、不规则几何边界等流体流动问题,它既可以描述复杂边界流动问题的宏观流动特征,又能

得出流动的微观细节。由它所得的流动的详尽信息,是其它方法望尘莫及的<sup>[2]</sup>。为了能较充分描述流体流动的复杂性和模拟传热过程,文献[3,4]提出和研究了一种新型的多速模型——13-Bit 格子气自动机模型。

## 1 13-Bit 格子气自动机模型

该模型在不改变 FHP II 模型正六边形网格(如图 1 所示)划分的基础上,只增加一种能量较 1 速粒子(在一个时间步运动一个空间步长)高的 2 速粒子(在一个时间步运动两个空间步长),并设计相应的碰撞规则。大量的数值实验证明,13-Bit LGA 模型能够有效模拟典型绕流等复杂几何边界流体流动,模型的通用性较强<sup>[3,4]</sup>。初始条件和边界条件易于调整。

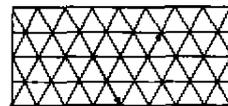


图 1 13-Bit LGA 模型的网格划分

13-Bit LGA 模型源于 FHP II 模型,但它并不是 FHP II 模型的简单推广。引入 2 速粒子后,粒子的运动和碰撞——格子气自动机的运行相对复杂。首先,粒子种类增加,不但涉及同类粒子的碰撞,还包括不同类粒子的碰撞,以及粒子间的动量交换、能量交换等。其次,单个节点所包含的粒子状态信息更复杂,所需存贮量更大,分析计算更繁琐。最后,需要在时间和空间两

收稿日期:1999-07-19

基金项目:国家自然科学基金资助项目(59604008)

作者简介:石万元(1970-),男,重庆璧山人,重庆大学助教,硕士,从事热能工程领域内传热传质,流体力学的研究工作。

方面对不同种类的流体粒子作统计平均,才能获得流体运动的宏观规律。如图 2 所示,对网格节点的粒子信息采用二进制编码,图中 0~12 方向分别与从右至左不同“位”对应。其中“0”方向代表静止粒子,“1~6”代表 1 速粒子,“7~12”代表 2 速粒子; $s(x, t)$ 中“0”代表所对应的方向没有粒子,“1”代表所对应的方向存在粒子。这能较好解决大量粒子信息的存贮,也为计算机模拟粒子的运动和碰撞提供了方便,很容易计算统计规律。

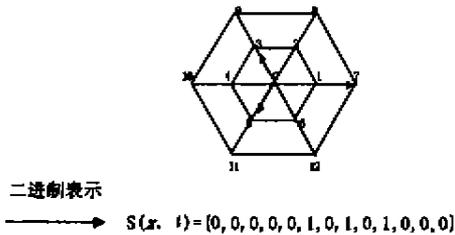


图 2 13-Bit LGA 模型的节点状态信息编码及表示

LGA 模型的完全建立,还包括:模拟对象中运动状态复杂多变的所有大量流体粒子,如何按照既定的规则各自都合理、高效地同步完成运动和碰撞过程,即格子气自动机的并行运行。且需经过成百上千时步的运行,才能得到合理的模拟结果<sup>[4]</sup>。所谓碰撞规则的建立、网格的划分等都是为 LGA 的运行作铺垫,并行运行是至关重要的一步。

运行得在计算机上进行,尤其对较复杂的 13-Bit LGA 模型,成千上万的网格节点及其多样的状态信息,需要有一套完善的并行运行机制才能实现。对此,笔者经过优化选择设计了一套能够较好满足这些要求的 13-Bit LGA 模型并行运行机制。

## 2 13-Bit LGA 的并行运行

### 2.1 运动状态转移

按照格子气自动机的基本原理,它的运行分为移动和碰撞两个过程,如图 3 所示。碰撞在一个节点上进行,因此,计算机在实现这一步时,只需在表示节点状态的数值  $s(x, t) = \{0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0\}$  的内部各位(元素)上进行,调整  $s(x, t)$  的值即可。

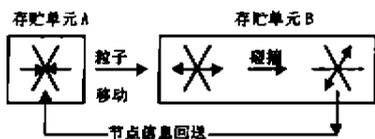


图 3 格子气自动机的并行运行

图 3 中,存贮单元 A 将模拟空间内所有节点的粒子状态信息保存下来,若某一个节点上的粒子发生运动而需要到达各自对应的邻居节点,那么,计算机在处理这个问题时,不能直接将单元 A 内相应节点的邻居节点的粒子状态值更改,而必须调整备用单元 B 内该节点所对应的邻居节点的状态值。因为,移动是在节点与节点之间进行的,一个节点上粒子的移动必然会影响到与之相邻的另一个节点的状态,而所有节点上粒子在物理意义上是在同时移动的,即并行的;若只在单元 A 内进行,那么,一个节点上粒子的移动必然会改变另一个或另几个节点的初始状态。因此,在移动过程中,必须保持单元 A 内的节点状态信息在计算机处理过程中的一个迭代时间步内不能被扰乱,这就靠备用单元 B 来暂存粒子移动后的节点信息,从而为计算机模拟格子气自动机的并行运行打下基础。

### 2.2 节点信息回送

从图 3 可见,单元 B 不仅可以起到暂存的作用,而且碰撞过程还可以在其中进行。碰撞过程是节点上粒子间的相互作用,它发生在节点内部,在碰撞这一瞬间,它与其它节点无关,只要按照碰撞规则,在有碰撞的情况下,调整各节点状态存贮单元内的值即可,而不必另设存贮空间。

LGA 的运行需要在计算机上经过成百上千时步,这正如传统的数值迭代,然后才能够获得模拟结果。只要有迭代过程,就必须处理好当前迭代与下一次迭代过程的数据交换问题。具体地,在 LGA 模型运行中,当前迭代所得结果,必须进行预处理,以供下一次迭代使用。如图 3,模拟空间内各节点碰撞发生后,为了下一步的迭代需要,需将单元 B 内经过一步运行后的节点信息回送于单元 A 内,进行新一轮处理。即:必须将某一时刻碰撞后(用上标“r”表示)处于迭代时步  $t$ 、节点  $x$  的粒子信息值  $s^r(x, t)$  转变为该时刻下一迭代时步  $t+1$  该节点碰撞前(用上标“p”表示)的粒子信息值  $s^p(x, t+1)$ ,把这一步称为“节点信息回送”。

通过这两步,LGA 模型的运行实现了并行化。经过反复迭代,直至达到动态平衡为止。其程序流程如图 4、5 所示。

### 2.3 模拟结果

采用以上 LGA 运行机制及图 4、5 所示的流程图,设计相应的 LGA 模型计算机程序,就可以模拟许多具有复杂几何边界的流体流场。这里以拍摄的焦炭多孔介质照片为对象,模拟该多孔介质内流体流场,如图 6、7 所示。其模拟结果翔实,清晰反映出复杂几何边

界流体流动的细节。运用该模型,还对其它许多典型流体流动(如单圆柱绕流、多圆柱绕流、矩形柱体绕流

等)进行了模拟,均得到满意的结果<sup>[3,4]</sup>。

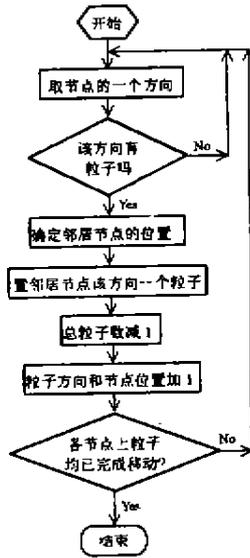


图4 网格节点上粒子移动流程图

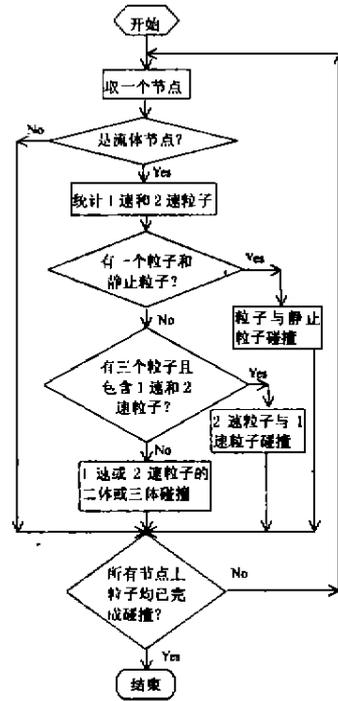
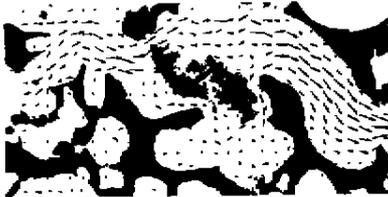
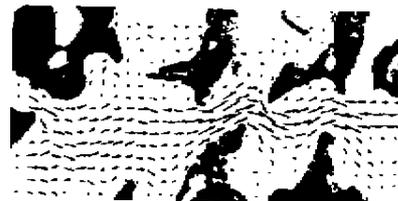


图5 网格节点粒子碰撞流程图



128 × 64 个格子,迭代 400 时步,统计 50 时步,统计空间步长 4 × 4,速度放大倍数 2.5,粒子密度 3.0

图6 焦炭多孔介质内流体流场



128 × 64 个格子,迭代 400 时步,统计 50 时步,统计空间步长 4 × 4,速度放大倍数 1.5,粒子密度 2.5

图7 焦炭多孔介质内流体流场

### 3 结论

作者所建立的 13-Bit LGA 模型的计算机并行运行机制,是将 13-Bit LGA 原理转换为完善的 13-Bit LGA 模型的桥梁,由该运行机制所建立的 LGA 模型客观、清晰、翔实地模拟出具有复杂几何边界的流体流场。这些数值模拟试验证明,该运行机制是有效的、正确的。

### 参 考 文 献

[1] 李元香. 模拟流体力学的离散运动论模型[J]. 数值计算与计算机应用, 1995, 16(3): 233 ~ 240.

[2] 李元香, 康立山, 陈毓屏. 格子气自动机[M]. 北京: 清华大学出版社, 1994.

[3] 郑忠, 高小强, 石万元 等. 13-Bit 多速正六边形格子气自动机模型[J]. 重庆大学学报, 1999, 22(3): 117 ~ 121.

[4] 石万元. 多速格子气自动机模型及其在冶金多孔介质中的应用[D]. [学位论文]. 重庆: 重庆大学材料科学与工程学院, 1998.

## Parallel Operating the 13-Bit Lattice Gas Automata Model

SHI Wan-yuan<sup>1</sup>, ZHENG Zhong<sup>2</sup>, GAO Xiao-qiang<sup>2</sup>

(1. College of Thermal Power Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044, China;

2. College of Material Science and Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044, China)

**ABSTRACT:** The parallel operation mechanism of 13-Bit lattice gas automata model, which can quickly compute and include more sites, is presented. Via coding and computing for particles of sites by bit, the parallel computing is achieved by transferring the particles propagation and collision into its backup and reloading. This mechanism can simulate correctly and validly some fluid motion with complex geometry boundary, such as flow through coke porous media.

**KEYWORDS:** fluid motion; numerical simulation / lattice gas automata

(责任编辑 刘道芬)

\* \* \* \* \*

(上接 82 页)

## Influence of Varying Humidity and Temperature Upon the Adsorption of Radon

YU Yi-qiao, LI Zheng-yin, BAI Ben-xuan, CHEN Jia-shen

(College of Civil Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044, China)

**ABSTRACT:** On the basis of theoretical analysis, this article describes the experiment of the absorption of Radon <sup>222</sup>Rn and Thoron <sup>220</sup>Rn in air on active charcoal under condition of varying humidity and temperature. The result of experiment shows that, under the condition of lower humidity, the absorption of <sup>222</sup>Rn reduce as the temperature raises. Since the half-life of <sup>220</sup>Rn is short, the influence of the temperature is small. But as the relative humidity raises, the absorption of <sup>222</sup>Rn and <sup>220</sup>Rn reduces significantly.

**KEYWORDS:** radon; absorption; temperature; humidity

(责任编辑 钟学恒)