

文章编号:1000-582X(2002)05-0093-04

13-bit 格子气自动机模型对流场的模拟*

石万元¹, 曾丹苓¹, 郑忠², 高小强²

(1. 重庆大学 动力工程学院, 重庆 400044; 2. 重庆大学 材料科学与工程学院, 重庆 400044)

摘要:13-bit 格子气自动机模型是一种基于 FHP II 模型基础上的新模型, 为了验证其正确性, 文中通过建立在该模型基础上的数值试验方法, 对圆柱绕流、方柱绕流和多柱体绕流等典型流体流动, 采用该模型模拟了它们的流场分布, 与文献中用有限差分、有限元、边界元等方法的模拟结果相比较, 发现 13-bit 格子气自动机模型能够较为真实、客观、详细的模拟流体流场; 并进一步采用该模型模拟了焦炭多孔介质内流体流动, 发现其能够便捷、清晰地模拟具有复杂几何边界条件的流场。

关键词:格子气自动机; 流场; 多孔介质

中图分类号: O357.3

文献标识码: A

流体及其运动特性的描述目前主要有 3 个层次^[1]: 1) 宏观层次, 即在连续介质假定基础上建立起来的 Navier-Stokes 方程组。由此形成了系统的流体力学。现有的大多数流场的数值计算都要对该方程组作离散化处理, 而流体本来是由离散的分子组成的, 该方法实际上绕了一个圈, 即离散→连续→离散。2) 分子层次, 如 Monte Carlo (MC) 方法和分子动力学模拟 (molecular dynamics simulation) 方法。它直接对由大量分子 (原子、分子或其它微粒的统称) 组成的系统中的每一个分子的运动进行描述。该方法所需的计算机内存较大, 目前还无法用到复杂的流场计算中^[1]。3) 介观层次, 这是根据分子运动理论建立起来的简化了的动力学模型, 模型计算是对许多格子 (Lattice) 进行的, 这些格子的尺度远比分子平均自由程要大, 但又比有限差分的步长或有限容积法中的控制容积宽度要小; 在格子之间有许多粒子在按一定规则运动, 这些粒子既比分子大, 但其质量又比有限容积法中的控制容积质量要小得多, 宏观物理量 (如速度、密度等) 需要对这些粒子的有关特性值作统计平均才能获得, 这就是格子气自动机 (Lattice gas automata, 缩写为 LGA) 模型。1972 年, 法国的 J. Hardy, Y. Pomeau 和 O. de Pazzis 提出了第一个格子气自动机模型^[2], 后来以他们的姓名命名为 HPP 模型。

随后, LGA 模型迅速发展, 主要应用于复杂几何边

界流体流动、多孔介质流、多相流及非等温流等的模拟^[3]。它处理流体流动问题时将流体及其存在的时间、空间完全离散, 把流体也想象成大量只有质量没有体积的离散的流体粒子组成。所有这些粒子同步地随着离散的整时间步长依据预先制定的简单碰撞规则在网格节点上相互运动 (碰撞), 并沿网格线在节点之间运动。碰撞规则在遵循质量、动量和能量守恒定律基础上制定。根据统计物理学原理获得大量的粒子表现出来的宏观流动特征, 如速度、密度等。

LGA 模型发展了单速模型 (包括 HPP、FHP II 模型)、9-bit 多速模型、高维模型等^[3]。这些模型有的只有 2 种粒子 (静止粒子和运动粒子), 难于模拟热运动; 有的虽有多种粒子, 但模型本身较复杂。为了增加粒子种类, 以期望获得更接近客观实际的粒子行为, 以便模拟更真实的流体运动和热运动。文献 [4] 在 FHP II 模型 (只包含静止粒子和速度为 1 的粒子) 基础上提出了一种新型的 13-bit LGA 多速模型, 它增加了速度为 2 的粒子。文中通过数值实验来验证该新型模型的正确性。

1 13-bit 格子气自动机模型

模型采用正六边形网格划分, 如图 1 所示。与 FHP II 模型不同, 它增加了一种能量较 1 速粒子 (在一个时间步运动 1 个空间网格步长, 用“1v”表示) 高的 2

* 收稿日期: 2002-01-22

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, 重庆大学讲师, 博士研究生, 主要从事传热学及热能工程领域研究。

速粒子(在一个时间步运动 2 个网格空间步长,用“2v”表示)。

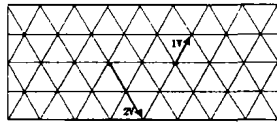
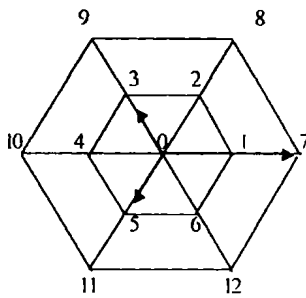


图 1 13-bit LGA 模型的网格划分

网格节点的粒子分布信息用二进制编码串表示,如图 2。图中 0~12 方向分别与 $s(x, t)$ 从右至左不同“位”(即计算机中二进制数的 bit)对应。“0”方向标识静止粒子,“1~6”标识 1 速粒子,“7~12”标识 2 速粒子; $s(x, t)$ 中“0”代表所对应的方向没有粒子,“1”代表所对应的方向有粒子。



二进制表示:

$$S(x, t) = 10,0,0,0,0,1,0,1,0,1,0,0,0,1$$

图 2 13-bit LGA 模型的节点状态信息编码及表示

根据质量、动量和能量守恒设计具有一般性的节点粒子碰撞规则,即来自不同方向的粒子汇聚到同一节点发生碰撞后新的运动方向的分布规则。这样的规则因粒子在节点的分布状态(即粒子在各方向的相对位置)的不同而不同,同一类的分布状态只需一种碰撞规则,并排除一些无效碰撞(碰撞前后分布规律不变)。因此,整个 13-bit 模型的粒子运动只需简单的几条碰撞规则即可描述。粒子碰撞后随即运动到下一个节点位置,这样,节点粒子就完成了 1 步运行,即格子气自动机运行 1 步。如此处理模拟空间所有节点就完成一次迭代。然后开始新的一次迭代,如此重复直至满足要求为止。将这一过程设计成相应的计算程序即建立起该 LGA 模型^[4-7]。模拟开始时需预先在这些网格节点上随机投放若干运动粒子。

模拟时,密度、速度、内能等宏观参数可以通过以下方程统计获得^[3,7]:

$$\text{流体密度 } \rho: \rho(x, t) = \sum_{\alpha} n_{\alpha}(x, t)$$

$$\text{宏观速度 } u: \rho u(x, t) = \sum_{\alpha} e_{\alpha} n_{\alpha}(x, t)$$

比内能 ϵ :

$$\rho \epsilon(x, t) = \sum_{\alpha} n_{\alpha}(x, t) \frac{1}{2} (e_{\alpha} - u) \cdot (e_{\alpha} - u)$$

其中 e_{α} 表示节点的 α 方向($\alpha = 0, 1, 2, \dots, 12$)上粒子的速度, $n_{\alpha}(x, t)$ 表示 t 时刻 x 节点上 α 方向的粒子状态, $n_{\alpha}(x, t) = 1$ 或 0(对应有或无粒子)。 $s(x, t)$ 表示 t 时刻 x 节点的所有各个方向的粒子状态, $s(x, t) = \{n_{\alpha}(x, t); \alpha = 0, 1, 2, \dots, 12\}$ 。雷诺数 Re 、粘度 μ 或 ν 等其它参数的计算,均借鉴 FHP II 模型的相应公式,因计算涉及内容较多,这里不再罗列,具体内容见参考文献^[3,5]。

数值试验发现,增加了 2 速粒子后,能更清晰地表现流场的细节,下文的模拟结果中也可观察到这一规律。然而,该模型的正确性尚需讨论,文中正是基于此而从数值试验的角度验证模型的正确性。

2 13-bit LGA 模型对典型流场的模拟

首先以较为典型、简单的几种流体流动为例,采用该新型模型进行模拟,与文献中采用传统数值方法所得模拟结果进行比较。

图 3 是采用该新型模型模拟的平板间圆柱绕流,模拟参数为: 128×64 节点,迭代 400 次,统计 50 次,圆柱直径 $d = 84$ pixels, $Re = 49.3$ 。图 4 是 C. Conca, C. Pares 等人用有限元法模拟的在基本相同物理模型下流动^[8]。从这 2 个图上不难看出,在相近的雷诺数 Re 下,它们的流场分布规律相似。其中 pixels 代表图像的长度单位,为显示器上一点的宽度,即像素。

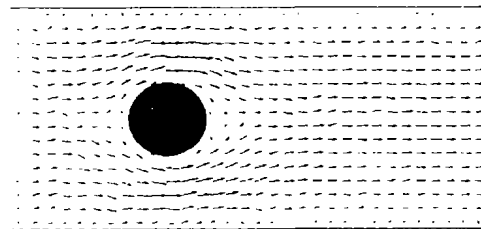


图 3 平板间圆柱绕流

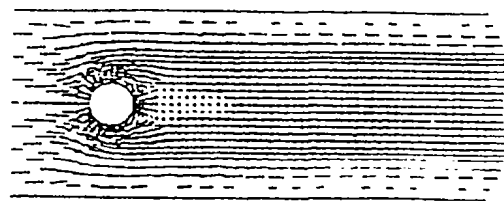


图 4 平板间圆柱绕流 ($Re = 40$, 有限元法)

图 5 是用 13-bit LGA 模型模拟的两平板间的长方柱绕流,模拟参数为: 128×64 节点,迭代 400 次,统计 50 次,方柱高 $H = 96$ pixels, 宽 $L = 64$ pixels, $Re =$

57.4.图6是用 damped artificial compressibility 迭代法模拟的长方柱绕流^[9]。它们的物理模型基本相同,图5和图6的 Re 相近。由图可见,它们的流场很相近,这表明 13-bit 格子气自动机模型能够较为真实地模拟出这样的流体流场。

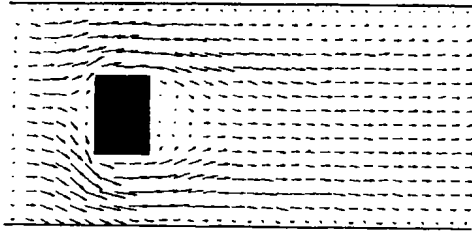


图5 方柱绕流

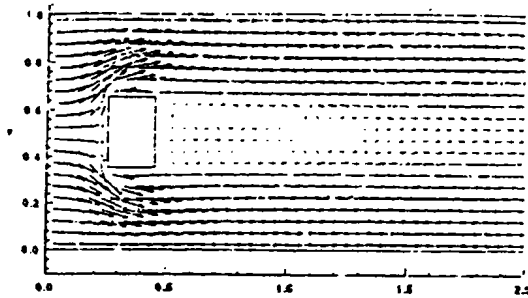


图6 长方柱绕流 ($Re = 50$)

图7是采用边界元法模拟所得的更复杂的多体绕流流场^[10],文献中基本没有告诉模拟参数。尽管如此,用该模型仍然模拟得到物理模型与之基本相似的三柱体绕流流场,如图8所示。模拟参数为: 128×64 节点,迭代 400 次,统计 50 次,圆柱直径 $d = 60$ pixels, $Re = 25.8$ 。这也表明了该模型是有效的。图7中第2个多柱体绕流因其不规则多柱体几何形状难于再现,因此这里没有对其作 13-bit LGA 模拟。

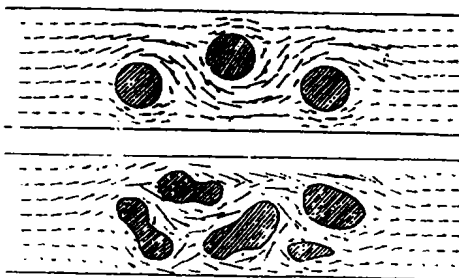


图7 多体绕流(边界元法)

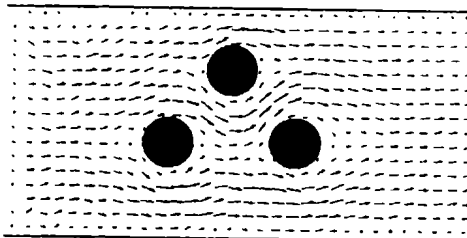


图8 三柱体绕流

实际上,以上3组例子文献中的模拟参数均不详细,想要获得 Re 数和其它几何物理参数与之完全一致的 13-bit LGA 模拟结果很难。这是因为 LGA 模型中的速度、粘度等宏观参数均为统计平均量,是经过统计计算而得,而非预先设定,故雷诺数等难以设定在某一数值。所以,以上3组例子中各自的参数相互均不尽相同,特别是 Re 数。文中所列 Re 数能够基本相近的3例乃从大量 LGA 数值模拟结果中选出。尽管如此,13-bit LGA 模型却仍然模拟得到如此相近的结果,从方法上看,表明该模型是能够真实、客观地模拟流体流场的。更多的数值试验结果均反应出这一结论^[5]。

3 复杂几何边界流场的 LGA 模拟

以上分析可以看到格子气自动机模型可以正确处理有限差分、有限元、边界元等方法模拟的典型、简单流动问题。更重要的是,LGA 模型还可以处理以上这些方法难于处理的具有复杂几何边界的流动问题。

如图9、图10所示,它们是用 13-bit LGA 模型模拟所得焦炭多孔介质内流体流动。模拟参数均为: 128×64 节点,迭代 400 次,统计 50 次,粒子密度 3.0。由图可见,模拟结果符合客观实际,说明 13-bit LGA 模型模拟流体流动的独特性。

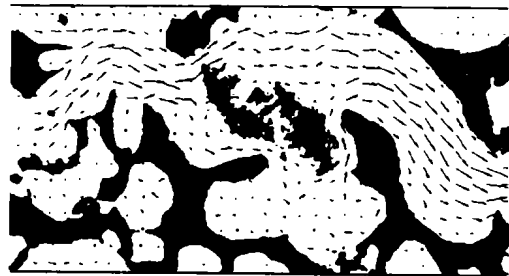


图9 焦炭多孔介质流场

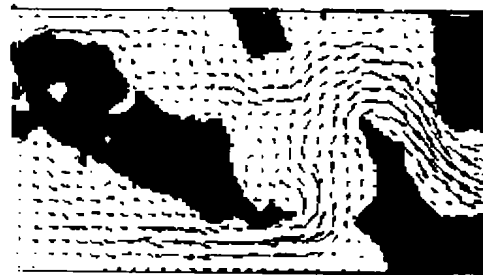


图10 焦炭多孔介质流场

4 结论

通过建立在 13-bit LGA 模型基础上的数值试验方法,对圆柱绕流、方柱绕流和多柱体绕流等典型流体流动,采用该模型模拟了它们的流场分布,与文献中用

有限差分、有限元、边界元等方法的模拟结果相比较,发现 13-bit 格子气自动机模型能够较为真实、客观、详细的模拟流体流场;并进一步采用该模型模拟了焦炭多孔介质内流体流动,发现其能够便捷、清晰地模拟具有复杂几何边界条件的流场。至于运用该模型模拟热现象,有待进一步研究。

参考文献:

- [1] 陶文铨. 计算传热学的近代进展[M]. 北京: 科学出版社, 2000, 417 - 427.
- [2] HARDY J, POMEAU Y. Thermodynamics and hydrodynamics for a model fluid[J]. J. Math, Phys., 1972, 13, 1 042 - 1 051.
- [3] 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.
- [4] 石万元, 郑忠, 高小强. 格子气自动机模型的影响因素[J]. 重庆大学学报(自然科学版), 2001, 24(2): 88 - 91.
- [5] 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]. 重庆: 重庆大学材料科学与工程学院, 1998.
- [6] 石万元, 郑忠, 高小强. 13 - Bit 格子气自动机模型的并行运行[J]. 重庆大学学报(自然科学版), 2000, 23(2): 92 - 95.
- [7] 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(自然科学版), 1999, 22(3): 117 - 121.
- [8] CONCA C, PARES C, PIRONOAU O, et al. Navier - Stokes equations with imposed pressure and velocity fluxes [J]. International journal for numerical methods in fluids, 1995, 20: 206 - 217.
- [9] MCHUGN P R, RAMSHAW J D. Damped artificial compressibility iteration scheme for implicit calculation of unsteady incompressible flow [J]. International journal for numerical methods in fluids, 1995, 21: 141 - 153.
- [10] 杨德全, 韩庆书. 二维粘性流动的边界元方法[J]. 水动力学研究与进展(A 辑), 1995, 10(1): 20 - 27.

Fluid Field Simulating by 13 - bit Lattice Gas Automata Model

SHI Wan - yuan¹, ZENG Dan - ling¹, ZHENG Zhong², GAO Xiao - qiang²

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

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

Abstract: The 13 - bit lattice gas automata is a new method based on FHP II model. The numerical experimentation way is used to verify this new model. The fluid flows around column, rectangular columniation and multi - columniation were simulated by 13 - bit lattice gas automata model. They were compared with other simulated results from some references by finite element method, finite difference method, boundary element method and other ways. All these numerical experimentations show a result that the 13 - bit lattice gas automata model can model fluid flow correctly and truly. It is also simulate the flow through the coke porous media with complex geometrical boundary correctly, which is convenience to deal with these problems.

Key words: lattice gas automata; fluid field; porous media

(责任编辑 陈移峰)