

文章编号:1000-582x(2001)02-0088-04

格子气自动机模型的影响因素

石万元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:以具有代表性的13-*Bit*格子气自动机模型为对象,通过大量的数值实验,分析了影响格子气自动机模型模拟结果的几个主要因素:迭代次数、赋值方式、统计次数及粒子密度。对13-*Bit*格子气自动机模型,沿主流方向赋初值需迭代300时步,沿所有方向随机赋初值需迭代3000时步,模拟才达到稳定;统计次数需在40时步以上;粒子密度需在1.0~3.0之间。分析这些影响因素对格子气自动机模型的深入运用奠定了基础。

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

格子气自动机(Lattice gas automata, 缩写为LGA)模型是应用非连续介质思想研究宏观物理现象的一种新方法。主要运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^[1,2]。它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(碰撞),沿网格线在节点之间运动,碰撞规则遵循质量、动量和能量守恒定律。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。它既可以描述复杂边界流动问题的宏观流动特征,如雷诺数、速度等,又能得出流动的微观细节,如流场等。

LGA模型先后发展了单速模型(包括HPP、FHP II模型)、多速模型、高维模型等。为了模拟非等温流,文献^[3,4]中介绍了一种新型的多速模型—13-*Bit*格子气自动机模型。笔者以此模型为对象,讨论影响格子气自动机模型模拟的主要因素,目前国内外这方面的研究尚少。

1 13-*Bit* 格子气自动机模型

此模型采用正六边形网格(如图1所示)划分,与

FHP II模型不同,这里增加了一种能量较1速粒子(在一个时间步运动一个空间网格步长)高的2速粒子(在一个时间步运动两个网格空间步长)。如图2所示,对网格节点的粒子存在信息用二进制编码串表示,图中0~12方向分别与从右至左不同“位”对应。其中“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”代表所对应的方向存在粒子^[3,4]。设计相应的碰撞规则^[3,4],该格子气自动机模型即建立起来。经过数值实验验证,13-*Bit* LGA模型能够有效模拟圆柱绕流等复杂几何边界流体流动^[3,4]。

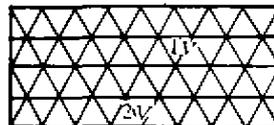


图1 13-*Bit* LGA模型的网格划分

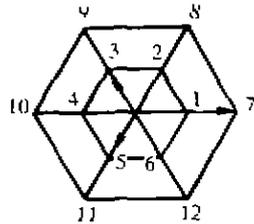
建立模型的目的是应用模型,而分析清楚模型的影响因素便于有针对性地应用模型。然而,不同的模型有其具体特点,例如,引入了2速粒子,粒子种类增加,模型相对更复杂,涉及更多更具体的因素。这里只

• 收稿日期:2000-09-21

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,博士生。从事传热学及热能工程领域研究。

讨论影响 LGA 模型的普遍因素,而 13-Bit LGA 模型是具有代表性的,若去掉 2 速粒子,它就是 FHP II 模型,再去掉静止粒子,就是 HPP 模型^[4]。



二进制表示:

$$S(x, z) = \{0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 0, 0\}$$

图 2 13-Bit LGA 模型的节点状态信息编码及表示

2 影响因素

2.1 迭代次数

根据数值实验结果比较,在 13-Bit LGA 模型中,采用沿流动方向(1、2、6、7、8、12)随机设置初始粒子时,至少需要迭代 300 时步以上才达到稳定,模拟结果才真实;而采用在所有方向(0~12)随机设置粒子时,至少需要迭代 3 000 时步以上才趋于稳定(见“(2)赋值方式”^[4])。图 3(a)、(b)和图 4(a)、(b)分别代表迭代 40 时步和 400 时步情况下的稳定性图和对应的流场图。

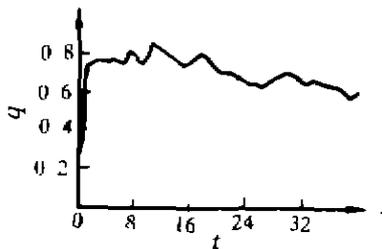


图 3(a) 稳定性图(迭代 40 时步)

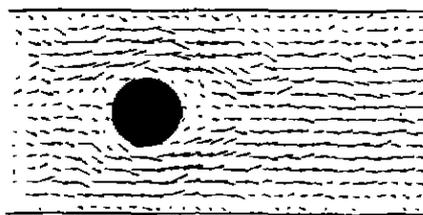


图 3(b) 网格步长 4 像素,128×64 个格子,粒子密度 1.5,速度放大倍数 1.0,统计空间步长 4×4,迭代 40 时步,统计 20 时步

从图 3(a)中看到由于迭代次数太少,出口截面流

量密度随时间波动大,没有达到稳定,反映在流场图 3(b)中,模拟结果在一些局部区域没能正确反映出流动规律,较图 4(b)差。这是因为:根据 LGA 模型原理,预先将大量粒子随机投放于模拟区域内,它们只有经过足够数量的时间步的运行(即迭代),这些粒子的分布状态才会在整体上达到一种动态平衡,从而正确表现出统计分布规律,即流场及与流场有关的宏观物理量。而图 3(a)、4(a)就是以出口截面流量密度为观察对象跟踪每一迭代时步所绘制的流量密度变化图(稳定性图),它直观地反映出迭代是否稳定,即出口截面流量密度随迭代的进行是否呈一条水平波动较小的曲线。图 4(a)中,在 300 时步后,流量密度的变化很小,迭代稳定。

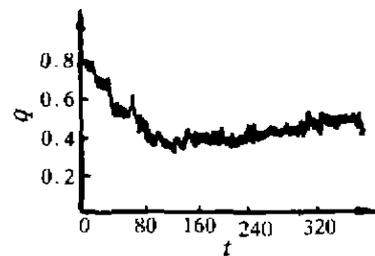


图 4(a) 稳定性图(迭代 400 时步)

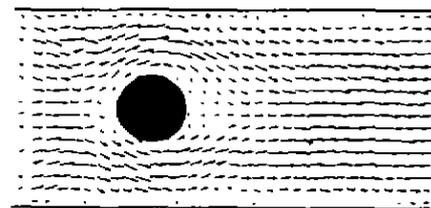


图 4(b) 迭代 400 时步,其余参数与图 3(b)一样

2.2 赋值方式

在模拟流体流动时,都要根据粒子密度给网格节点赋一定数量的流体粒子,如上文所述,在 13-Bit LGA 中,可以按所有方向(0~12)随机赋初值,也可以选定几个方向(1、2、6、7、8、12)随机赋值,但数值实验显示二者达到稳定所需的时间却不一样^[4]。如图 5 所示,除迭代次数外,网格步长、格子划分数、统计空间步长、统计时步数均与图 4(b)一样,最主要的区别在于图 5 在 0~12 方向上随机赋值,总的迭代次数为 3 500 时步,而图 4(b)仅在 1、2、6、7、8、12 六个方向随机赋值,迭代 400 时步。

从图 5 可见,它们趋于稳定的曲线趋势和时间不一样。在迭代时间上,图 4(a)在迭代 300 时步时其稳定性曲线已趋于一条水平脉动线;而图 5 显示在 2 800

时步时,迭代尚未稳定,到迭代大约3000时步后才充分稳定下来。

另一方面,曲线的走向上,图4(a)相应的模拟只在对应于水平向右主流方向的1、2、6、7、8、12方向随机赋值,与统计流量密度时所取的正方向一致。所以迭代一开始,截面流量密度迅速上升达最大值。随着迭代的进行,各节点上粒子相互碰撞而重新分布于各个可能方向上,因粒子数守恒,沿着水平向右的主流方向运动的粒子就会相对减少,因此以这个方向计算的截面流量密度会下降。同时,只沿着流动方向赋初值,这本身已经是一个亚稳态,因此只需较短时间迭代就达到稳定。图5对应的模拟随机地在0~12所有方向上随机赋值,在粒子密度相同的条件下,沿主流方向运动的粒子比图4(a)少,此方向的截面流量密度较小,故迭代开始时截面流量密度很小,随着迭代的进行,在入口压力的影响下,粒子因运动和碰撞而在整体上逐渐趋向于沿主流方向流动,截面流量密度逐步上升,但上升的幅度越来越缓慢,经过较长时间的迭代趋于稳定。

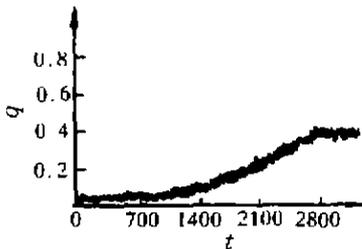


图5 稳定性曲线(0~12方向随机赋值)

分析这个影响因素,通过大量的数值实验,得到一个重要的结论:设置初速度的不同方式,只对达到稳定所需时间长短有影响,但都能达到稳定,在其它条件一样的情况下,也能够得到基本一致的数值模拟结果。这是格子气模型的优点之一。根据这个特点,采用沿主流方向(13-Bit LGA中对应1、2、6、7、8、12方向)比沿所有方向(13-Bit LGA中对应0~12方向)随机赋值迭代至稳定所需时间少。具体地,在13-Bit LGA中,从图4(a)和图5比较,二者相差10倍。因此,采用沿主流方向赋值可大大节省模拟时间。

2.3 统计次数

数值实验发现,统计次数对模拟结果也有影响^[4]。统计次数过少,所得结果将不符合实际情况。如图6所示,其统计次数为5时步。与图4(b)比较,图6中流场分布较紊乱,大量节点的速度分布不符合实际。这是因为模型需要对时间统计以反映宏观统计规律。随着统计次数的增加,则“噪声”消除,滤去了波

动,模拟结果“光滑”,更符合实际。实验证明,统计次数至少需要40时步,才能获得粒子运动的统计规律。

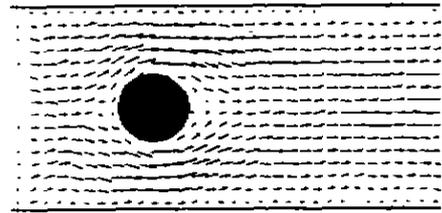


图6 网格步长4象素,128×64个格子,迭代40时步,统计5时步,统计空间步长4×4格子,子密度1.5,速度放大倍数1.0

2.4 粒子密度

为了使在各节点上的粒子能够发生有效碰撞,粒子密度一般为2~4个粒子/节点(FHP II模型)^[1]。实验证明,一般地,对于13-Bit LGA模型模拟典型的圆柱绕流、平行平板间流,粒子密度在1.0~3.0之间可以获得清晰的模拟结果^[4]。远离这个范围时则难以获得较好的结果,如图7所示,粒子密度为0.6,其它所有初始参数均和图4(b)的一样,而模拟结果却迥然不同。所以,粒子密度不能过小。同样,粒子密度也不能太大,否则,模拟空间内不能容纳所有的粒子,模拟无法进行。需要说明的是,粒子密度这一参数对模拟结果的影响,视不同的模拟对象有所差异,例如对于某些孔隙率较小的多孔介质内流动模拟,粒子密度则应更小。

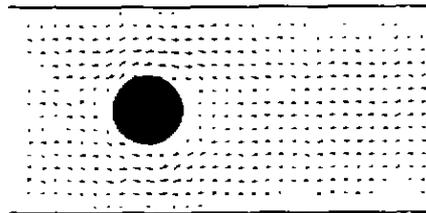


图7 网格步长4象素,128×64个格子,迭代400时步,统计空间步长4×4格子,速度放大倍数1.0,统计50时步,粒子密度 $\rho=0.6$

3 结论

通过一系列的格子气自动机模型数值实验发现,影响模拟结果的主要因素有迭代次数、赋值方式、统计次数及粒子密度等。其中,对于13-Bit LGA模型沿主流方向赋初值,需迭代300时步,所有方向随机赋初值需迭代3000时步;统计次数在40时步以上;对于13-Bit LGA模型,粒子密度在1.0~3.0之间。分析这些影响因素对格子气自动机模型的深入运用奠定了基础。

