

LBM 与宏观数值方法界面信息耦合的重构算子

徐辉, 栾辉宝, 陶文铨

(西安交通大学能源与动力工程学院, 710049, 西安)

摘要: 基于数学上的多尺度逐级逼近, 给出了一种简单并且有效的方法来通过宏观物理量重构格子 Boltzmann 方法(LBM)的单粒子分布函数. 所给出的重构算子为工程中基于宏观和介观模型的多尺度计算奠定了基础. 通过耦合有限体积法(FVM)和 LBM 对顶盖驱动流进行数值计算, 考核了此重构算子. 计算结果与文献结果符合很好, 并且耦合区域流线光滑过渡, 速度矢量精确重合. 计算结果证明, 文中提出的重构算子可以准确有效地应用于 LBM 和宏观方法的耦合计算, 并且其实施简单.

关键词: 格子 Boltzmann 方法; 有限体积法; 重构算子; 分布函数; 多尺度; 耦合

中图分类号: TK124 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-987X(2009)11-0006-05

A Reconstruction Operator for Interface Coupling Between LBM and Macro-Numerical Methods of Finite-Family

XU Hui, LUAN Huibao, TAO Wenquan

(School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: An effective and simple way to reconstruct the lattice Boltzmann method (LBM) distribution functions by macro-scale parameters has been proposed on the basis of the mathematical multiscale-approach in this paper. The reconstruction operator offers a fundamental approach to multiscale computation in engineering application. The numerical computation on lid-driven cavity flow by the coupling between the results of LBM and the finite-volume method (FVM) is performed to verify the proposed reconstruction operator. The computation results are in agreement with the data in literature, and the smoothness of the streamlines in the coupled region is reasonable and the velocity vectors have an exact overlap. In addition, the results show that the present reconstruction operator can be adopted in the coupling computation of LBM and the macro-scale method easily and reliably.

Keywords: LBM; FVM; reconstruction operator; distribution functions; multiscale; coupling

自 20 世纪 90 年代以来, 格子 Boltzmann 方法(LBM)已经吸引了越来越多科学家和工程师的关注. 特别地, LBM 已经被广泛用来求解流体流动问题及其复杂的湍流问题^[1]. 基于统计框架, LBM 的计算结果为科学家和工程师提供了一个对于流体流动现象的基本解释^[1-3]. LBM 是一种介观方法, 其演化在物理上是基于伪粒子的流动和碰撞的基础之上, 因此它处理边界条件时异常简单和灵活. 同时,

LBM 具有天然的并行特点, 使得对于多尺度 LBM 耦合计算的研究非常有意义^[1]. 目前, LBM 除了在一般的流体力学问题中得到了成功应用外, 在多相流、化学反应扩散、渗流、粒子悬浮流和磁流体等领域也得到了成功应用^[1]. 此外, 在微尺度流动模拟方面, LBM 也得到了广泛应用^[4-5].

众所周知, 在使用 LBM 进行流体流动问题求解时, 一般情况下需要对分布函数进行初始化. 若待

研究的流动现象是物理上稳态的,分布函数可以简单地初始化为平衡态分布函数或者是摄动的平衡态分布函数,因为这种稳态问题对于初始分布函数的精度要求不高. 尽管如此,对于分布函数不恰当的初始化,会对求解的问题产生一个初始层(初始计算的误差),这种初始层不会随着计算的进行而消失,反而会随着 LBM 的演化逐渐向后传播,使得最终的结果也产生偏差^[6]. 另一方面,当采用 LBM 与有限类型方法(有限容积法、有限元法等)进行耦合计算时,由于 LBM 的自由度大于宏观算法的自由度,这使得在界面上如何由宏观数值方法得出的解来建立介观计算的信息成为一个关键问题. 本文基于 Enskog-Chapman 的多尺度展开建立了介观模型与宏观模型的多尺度耦合方法(重构算子).

1 LBM 基础理论

LBM 是由有限离散速度求解单时间松弛 Boltzmann 方程的数值方法,其对连续 Boltzmann 方程的时间和速度变量进行了离散,形式如下^[1,7]

$$f_i(\mathbf{x} + \delta \mathbf{c}_i, t + \delta) - f_i(\mathbf{x}, t) = \Omega_i(f_i^{\text{eq}}, f_i) \quad (1)$$

式中: f_i 表示沿着 $\mathbf{c}_i$ 方向的单粒子分布函数; $\mathbf{c}_i$ 是离散速度集合 $V = \{\mathbf{c}_0, \dots, \mathbf{c}_n\}$ 的元素; $\Omega_i(f_i^{\text{eq}}, f_i)$ 表示碰撞算子. 在 LBM 中,体系的宏观物理量密度和速度定义如下^[1]

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^n f_i(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^n f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) \quad (2)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \sum_{\mathbf{c}_i \in V} \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \sum_{\mathbf{c}_i \in V} \mathbf{c}_i f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) \quad (3)$$

对于标准的 LBM,碰撞算子有下面所谓的 BGK 形式的碰撞项定义^[1,7]

$$\Omega_i(f_i^{\text{eq}}, f_i) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)] \quad (4)$$

局部平衡态分布函数 f_i^{eq} 由下式定义^[1,6-8]

$$f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = f_i^{1,(\text{eq})}(\mathbf{x}, t) + f_i^{Q,(\text{eq})}(\mathbf{x}, t) \quad (5)$$

式中: $f_i^{1,(\text{eq})}(\mathbf{x}, t)$ 和 $f_i^{Q,(\text{eq})}(\mathbf{x}, t)$ 分别表示局部平衡态分布函数的线性项和非线性项,其表达式如下

$$f_i^{1,(\text{eq})}(\mathbf{x}, t) = \omega_i \rho \left(1 + \frac{1}{C_s} \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \right) \quad (6)$$

$$f_i^{Q,(\text{eq})}(\mathbf{x}, t) = \omega_i \frac{1}{2C_s^2} \rho (\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) : \Sigma_i \quad (7)$$

其中 C_s 为模型的声速, ω_i 为模型的权数, Σ_i 为如下的二阶张量

$$\Sigma_{i\beta\gamma} = c_{i\alpha} c_{i\beta} - C_s^2 \delta_{\alpha\beta} \quad (8)$$

本文采用著名的 D2Q9 LBM 模型^[1,7], 根据 Chapman-Enskog 展开, 宏观模型方程可以恢复为如下的形式^[9]

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) + O(\delta^3) = 0 \quad (9)$$

$$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha P + \nu \partial_\beta (\rho (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha)) + O(\delta^3 + \delta u^3) \quad (10)$$

这里 3 阶项 $O(u^3)$ 的形式如下

$$O(u^3) = -\sigma \partial_\beta \partial_\gamma (\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma) \quad (11)$$

根据方程(9)、(10)很容易看出,它与标准的 Navier-Stokes 方程实际上是不同的. 由 Chapman-Enskog 展开所得到的宏观方程是弱可压的,因此在耦合 LBM 与宏观数值方法进行求解时,必须采用小 Mach 数的限制来达到更好的近似不可压缩 Navier-Stokes 方程的解.

从 LBM 框架式(1)的定义,平衡态分布函数式(5)很容易由宏观物理量来确定,但是分布函数却不能由宏观物理量来直接确定. 显然,一个合理的初场是必需的,这样才能保证在 LBM 框架下微量量正确演化.

2 重构算子及多尺度逼近

基于 LBM 框架,对于一个微观系统,由宏观量建立正确的微观分布函数是进行耦合计算的基础. 首先,在此引入重构算子及相关的压缩算子. 假定 $u(\mathbf{x}, t_0)$ 表示微观系统物理量的集合, $U(\mathbf{x}, t_0)$ 表示宏观系统物理量的集合. 重构算子 $R(\cdot)$ 定义如下^[10]

$$u(\mathbf{x}, t_0) = R(U(\mathbf{x}, t_0)) \quad (12)$$

相应的压缩算子定义为^[10]

$$U(\mathbf{x}, t) = C(u(\mathbf{x}, t)) \quad (13)$$

对于 LBM, $C(\cdot)$ 表示微观物理量在速度空间中的一个系综平均. 但是, $R(\cdot)$ 却难以直接构建,原因在于宏观系统的自由度小于微观系统的自由度,难以建立从宏观物理量到微观物理量的单一映射.

文献中已有很多文章来阐述如何构建^[6,8,11-12] $R(\cdot)$,但这些方法^[6,8]除了推导过于复杂(费时的迭代框架和复杂的数学推导)外,还存在构建的微观信息不足^[9]或者只针对特殊模型^[9-10]的缺点. 本文基于多尺度逼近及其复合导数求导的法则,由宏观物理量简易地构建 $R(\cdot)$.

为了构建 $R(\cdot)$,需借助于多尺度摄动展开^[1,7]. 时间导数根据小参数 ϵ (一般为 Knudsen 数) 展开为下列形式^[1]

$$\partial_t = \epsilon \partial_{t_1} + \epsilon^2 \partial_{t_2} + O(\epsilon^3) \quad (14)$$

空间导数根据 ϵ 展开如下^[1]

$$\partial_\alpha = \epsilon \partial_{1\alpha} + O(\epsilon^2) \quad (15)$$

单粒子分布函数基于 ϵ 摄动展开为^[1]

$$f_i(\mathbf{x}, t) = f_i^0(\mathbf{x}, t) + \epsilon^1 f_i^1(\mathbf{x}, t) + \epsilon^2 f_i^2(\mathbf{x}, t) + O(\epsilon^3) \quad (16)$$

基于泰勒展开, 方程(1)可表示为如下形式

$$\partial_t(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha)f_i(\mathbf{x}, t) + \partial_t^2(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha)^2 \cdot f_i(\mathbf{x}, t) + O(\partial_t^3) = \Omega_i \quad (17)$$

联合式(14)~(17), 可得到如下结果^[1,7]

$$f_i^0(\mathbf{x}, t) = f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) \quad (18)$$

$$f_i^1(\mathbf{x}, t) = -\tau \partial_t(\partial_{t_1} + c_{i\alpha}\partial_{1\alpha})f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) + \partial_t^3 \quad (19)$$

$$f_i^2(\mathbf{x}, t) = -\tau \partial_t \partial_{t_2} f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) - \partial_t^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right) (\partial_{t_1} + c_{i\beta}\partial_{1\beta})^2 f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) + O(\partial_t^3) \quad (20)$$

式(19)可以写成如下表达式

$$f_i^1(\mathbf{x}, t) = -\tau \partial_t(\partial_{t_1} + c_{i\alpha}\partial_{1\alpha})(f_i^{1(\text{eq})}(\mathbf{x}, t) + f_i^{Q(\text{eq})}) + O(\partial_t^3) \quad (21)$$

在式(20)中, 省略关于 $f_i^0(\mathbf{x}, t)$ 的 2 阶以上的高阶导数项, 可得到如下近似关系

$$f_i^2(\mathbf{x}, t) = -\tau \partial_t \partial_{t_2} f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) \quad (22)$$

$$f_i^2 = -\tau \partial_t(\partial_\rho f_i^{\text{eq}} \partial_{t_2} \rho + \partial_{u_\beta} f_i^{\text{eq}} \partial_{t_2} u_\beta) \quad (23)$$

关于 ϵ 和 ϵ^2 渐进逼近产生了如下形式的公式^[1]

$$\partial_{t_1} \rho + \partial_{1\alpha}(\rho u_\alpha) = 0 \quad (24)$$

$$\partial_{t_1}(\rho u) + \partial_{1\beta}(\rho u_\alpha u_\beta + C_s^2 \rho \delta_{\alpha\beta}) = 0 \quad (25)$$

$$\partial_{t_2} \rho = 0 \quad (26)$$

$$\partial_{t_2}(\rho u_\alpha) = \nu \partial_{1\beta}(\rho(\partial_{1\alpha} u_\beta + \partial_{1\beta} u_\alpha)) \quad (27)$$

对式(22)、(23)展开计算, 可得

$$f_i^1 = -\tau \partial_t \left[U_{i\alpha} \frac{1}{\rho} \partial_{1\alpha} \rho f_i^{\text{eq}} + U_{i\alpha} \partial_{1\alpha} u_\beta \rho \partial_i \left(\frac{1}{C_s^2} U_{i\beta} + \frac{1}{C_s^4} c_{i\beta} c_{i\gamma} u_\gamma \right) - f_i^{\text{eq}} \partial_{1\alpha} u_\alpha - \frac{1}{\rho} \partial_{1\beta} P \omega_i \rho \left(\frac{1}{C_s^2} U_{i\beta} + \frac{1}{C_s^4} c_{i\beta} c_{i\gamma} u_\gamma \right) \right] \quad (28)$$

$$f_i^2 = -\tau \partial_t \nu \omega_i \left[\frac{1}{C_s^2} U_{i\beta} + \frac{1}{C_s^4} c_{i\beta} c_{i\gamma} u_\gamma \right] \cdot \partial_{1\alpha} [\rho(\partial_{1\beta} u_\alpha + \partial_{1\alpha} u_\beta)] \quad (29)$$

式中: $U_{i\alpha} = c_{i\alpha} - u_\alpha$.

根据式(16), 可得重构的粒子分布函数如下

$$f_i = f_i^{\text{eq}} \left\{ 1 - C_s^{-2} \tau \partial_t \left[U_{i\beta} (U_{i\alpha} \partial_\alpha u_\beta + \nu \partial_\alpha^2 u_\beta + \nu \partial_\beta \partial_\alpha u_\alpha + \nu \frac{1}{\rho} \partial_\alpha \rho S_{\alpha\beta}) - C_s^2 \partial_\alpha u_\alpha \right] \right\} \quad (30)$$

对于无散度的速度场, 有如下的逼近形式

$$f_i = f_i^{\text{eq}} \left\{ 1 - C_s^{-2} \tau \partial_t U_{i\beta} (U_{i\alpha} \partial_\alpha u_\beta + \nu \partial_\alpha^2 u_\beta + \nu \frac{1}{\rho} \partial_\alpha \rho S_{\alpha\beta}) \right\} \quad (31)$$

式(30)、(31)就是根据宏观物理量获得的 LBM 分布函数的 $R(\cdot)$. 在文献[6,8,12]中也给出了与上述类似的结果, 但本文采用了不同的推导方法且推导过程非常简单.

3 耦合计算实例

为了验证所提出的重构算子的有效性, 采用式(31)进行多尺度耦合计算. 所采用的算例为顶盖驱动流, 宏观 Navier-Stokes 方程的求解方法为有限容积法(FVM). 计算区域的几何形状如图 1 所示, 计算区域被分割为重叠的两部分, 对两部分分别采用不同的数值方法进行计算(如图 1 中所标记). 为了验证界面信息的传递方法, 避免交界区域网格的不一致性而导致插值估计, 两个区域采用相同的网格结构(见图 2). 如果两个子区域在交界面上的网格不一致, 可采用空间插值来获取界面上需要的信息, 此时要求插值精度不低于两类计算方法的空间精度. 在图 2a 中, FVM 方法计算区域的边界 $\overline{MN}$ 落在 LBM 的计算区域中, LBM 方法计算区域的边界 $\overline{AB}$ 落在 FVM 的计算区域中. 在执行计算时, 首先假定 FVM 在计算边界 $\overline{MN}$ 上有一个任意的水平速度(方向与顶盖速度方向一致), 此边界上的速度应当足够小来保证低马赫数条件. 此时, 根据重叠区域 Schwartz 交替方法进行迭代计算, 直到达到所要求的收敛条件时停止计算.

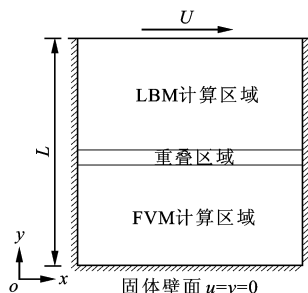


图1 顶盖驱动流的 FVM 和 LBM 计算区域

数值模拟采用的 Reynolds 数分别为 $Re=100, 400, 1\,000$. 矩形方腔的特征尺度定义为 $L=1$, 网格数目为 200×200 . 相对于 3 个 Re , 顶盖移动速度分别为 $3.33 \times 10^{-3}, 1.33 \times 10^{-3}, 3.33 \times 10^{-2}$. 固体壁面采用无滑移边界条件. 图 3~6 分别给出了 3 种不

同 Re 下的矢量图、流线图以及速度线图,可以看出两种方法在耦合区域所得到的速度光滑连接. 在图 7、8 中,给出了耦合计算解和 Ghia 基准解^[13]的比

较,耦合计算的结果和基准解吻合得很好. 由此,文中所提出的重构算子能够有效地用于 LBM 和宏观数值方法的耦合计算.

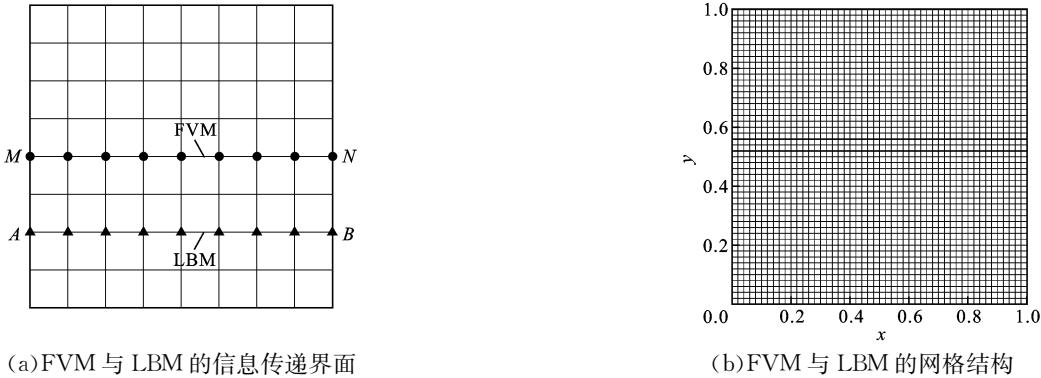


图 2 FVM 和 LMB 的界面示意及网格结构

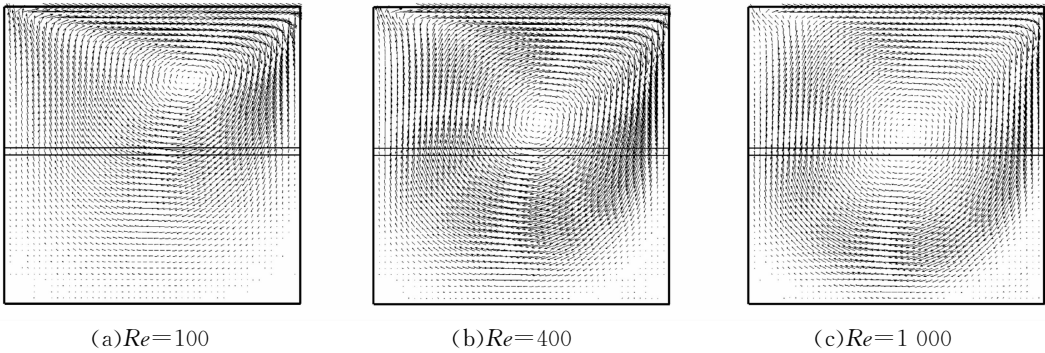


图 3 顶盖驱动流的矢量图

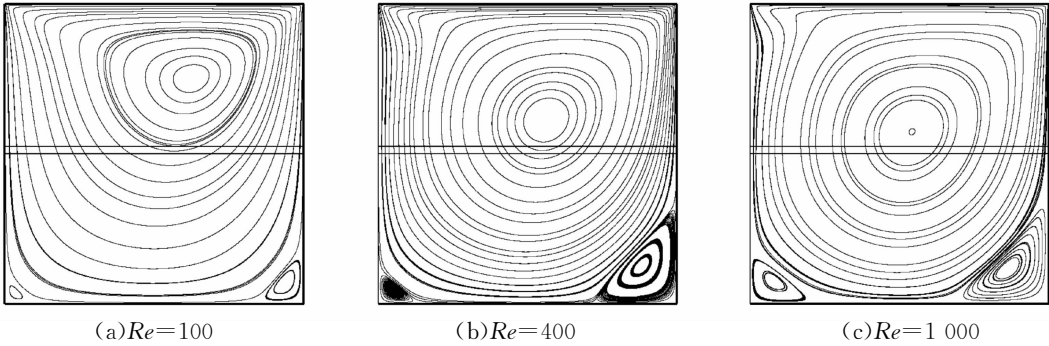


图 4 顶盖驱动流的流线图

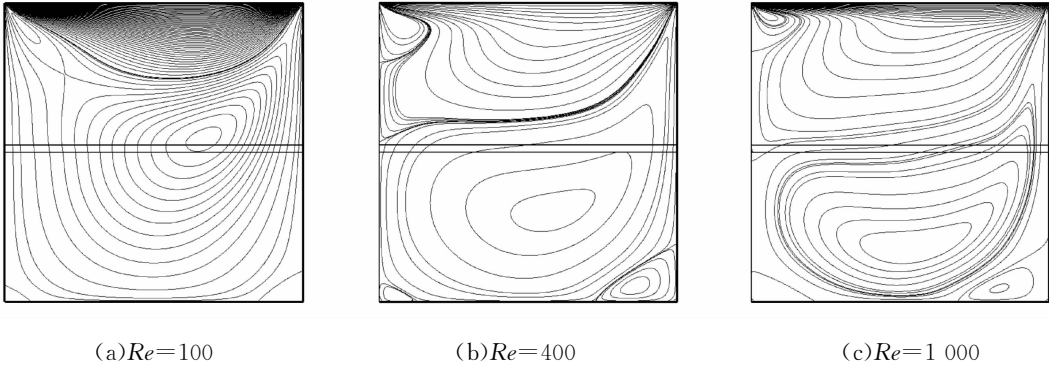


图 5 速度 u 线图

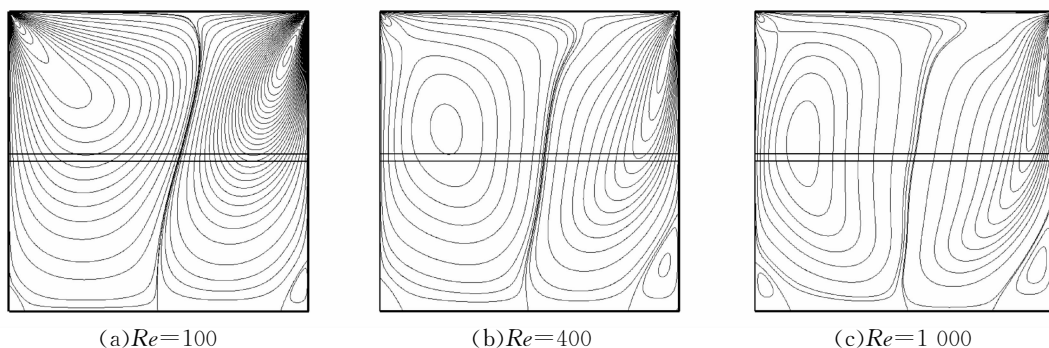
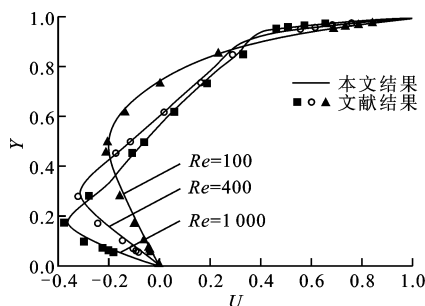
图6 速度 v 线图

图7 水平速度分布

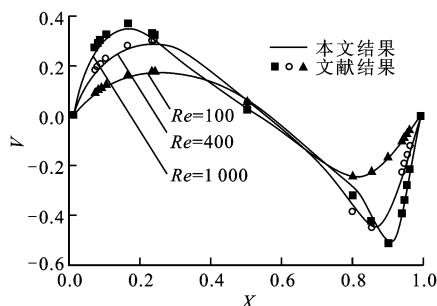


图8 垂直速度分布

4 结 论

本文根据多尺度逐级逼近的方法,给出了由宏观物理量重构出 LBM 中的分布函数的算子表达式,并采用顶盖驱动算例进行验证。结果表明,所给出的重构算子能够很好地进行 LBM 与宏观数值方法的耦合计算,证明了所给出的重构算子的正确性与可行性,并为 LBM 与宏观数值方法的耦合多尺度计算提供了一个基本途径。

参考文献:

- [1] SUCCI S. The lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond [M]. Oxford, UK: Oxford University Press, 2001.
- [2] ORSZAG S A, CHEN H, SUCCI S, et al. Turbulence effects on kinetic equations [J]. J Sci Comput, 2006, 28(2/3): 459-466.
- [3] CHEN H, KANDASAMY S, ORSZAG S A, et al. Extended Boltzmann kinetic equation for turbulent flows [J]. Science, 2003, 301: 633-636.
- [4] TANG G H, LI Z, WANG J K, et al. Electroosmotic flow and mixing in microchannels with the lattice Boltzmann method [J]. J Applied Physics, 2006, 100(9): 094908-094910.
- [5] TANG G H, TAO W Q, HE Y L. Gas slippage effect on microscale porous flow using the lattice Boltzmann method [J]. Phys Rev: E, 2005, 72(5): 056301-

056308.

- [6] CAIAZZO A. Analysis of lattice Boltzmann initialization routines [J]. J Stat Phys, 2005, 121: 37-48.
- [7] QIAN Y H, D'HUMIERES D, LALLEMAND P. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation [J]. Europhys Lett, 1992, 17(6): 479-484.
- [8] JUNK M, KLAR A, LUO L S. Asymptotic analysis of the lattice Boltzmann equation [J]. J Comput Phys, 2005, 210(2): 676-704.
- [9] HÁZI G, JIMÉNEZ C. Simulation of two-dimensional decaying turbulence using the incompressible extensions of the lattice Boltzmann method [J]. Computer & Fluids, 2006, 35: 280-303.
- [10] WEI E, ENGQUIST E. The heterogeneous multiscale methods [J]. Communications in Mathematical Science, 2003, 1(1): 87-133.
- [11] IMAMURA T, SUZUKI K, NAKAMURA T, et al. Acceleration of steady-state lattice Boltzmann simulation on non-uniform mesh using local time step method [J]. J Comput Phys, 2005, 202: 645-663.
- [12] SKORDOS P A. Initial and boundary conditions for the lattice Boltzmann method [J]. Phys Rev: E, 1993, 48(6): 4823-4841.
- [13] GHIA U, GHIA K N, SHIN C T. High-resolutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method [J]. J Comput Phys, 1982, 48: 387-411.

(编辑 荆树蓉)