

熵格子 Boltzmann 方法模拟高 Reynolds 数流动

徐 辉 陶文铨

(西安交通大学动力工程多相流国家重点实验室, 陕西 西安 710049)

摘 要 本文研究熵格子 Boltzmann 方法 (ELBM) 对于高 Reynolds 数流动问题的适用性。ELBM 由于其满足热力学第二定律, 使得它比标准的格子 Boltzmann 方法 (LBM) 具有更高的数值稳定性。ELBM 在计算过程中, 通过调节松弛参数来确保系统符合熵 H 定律。在调节松弛参数时, 必须求解一个非线性方程组, 这使得计算量加大。本文基于 Ehrenfest 理论, 根据简单的正性约束来保证 H 定律的成立。在数值实例部分, 对顶盖驱动流进行了研究, 给出了此方法与上述方法计算效率和正确性的一个比较, 并且研究了全局熵的变化。

关键词 LBM; ELBM; 高雷诺数; 数值稳定性

中图分类号: TK124 **文献标识码**: A **文章编号**: 0253-231X(2009)01-0129-03

SIMULATIONS OF HIGH REYNOLDS NUMBER FLUID FLOW BASED ON ENTROPIC BOLTZMANN METHOD

XU Hui TAO Wen-Quan

(The State Key Lab. of Multiphase Flow in Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract The focus of this paper is on the applicability of entropic lattice Boltzmann method (ELBM) for high Reynolds number fluid flows. ELBM satisfies the second principle of thermodynamics, so ELBM possesses a stronger numerical stability compared with standard lattice Boltzmann method (LBM). In the process of implementing ELBM, the relaxation parameter is modified such that the population distributions of fluid systems satisfy the entropic H -theorem. When the relaxation parameter is adjusted, a nonlinear equation must be solved. So, ELBM need much more computation costs than that of the standard LBM. Based on Ehrenfest's theory, a simple positivity-enforcing constraint is adopted to guarantee the H -theorem. Numerical simulation of the lid-driven fluid flows is conducted to show the feasibility and efficiency of the proposed method.

Key words LBM; ELBM; high Reynolds number; numerical stability

0 引 言

LBM 方法以其简单高效的特性, 近年来在计算流体领域获得了广泛应用并取得了很大的成功^[1]。LBM 通过介观动力学方法来求解流体的宏观流动问题。尽管 LBM 取得了很大的成功, 但是在处理低粘性流动问题的时候, LBM 存在较为严重的数值不稳定性问题, 标准的 LBM 在计算 $Re=2000$ 的顶盖驱动流就很不稳定了, 这就限制了它在高 Reynolds 数流体流动中的应用^[2]。近年来发展的一些方法能部分地解决此问题, 其中有多松弛方法 (MRT), ELBM 和基于 Ehrenfest 的粗粒化方法^[4~5]。本文中, 我们主要比较后两种方法在高雷诺数顶盖驱动流中计算效率和稳定性。

1 ELBM 思想

对于标准 LBM, 已有很多文献可供参考^[1]。下面我们来解释 ELBM 的主要思想, 在此给出时空离散的格子系统:

$$f_i(x+e_i\delta t, t+\delta t) = f_i(x, t) + \gamma[f_i^{eq}(x, t) - f_i(x, t)] \quad (1)$$

其中, f_i, f_i^{eq}, γ 和 e_i 分别是单粒子分布函数, 平衡态分布函数, 松弛参数和离散格子速度分量。对于一个格子系统, 最主要的问题就是选取合适的平衡态分布, 使其在统计意义下满足必要的物理意义, ELBM 要求使得系统熵最大。方便起见, 我们给出如下态矢量定义:

$$|f\rangle = \{f_i\}_{i=0, \dots, b} \quad (2)$$

相应的两个态矢量的作用我们定义为:

收稿日期: 2008-01-10; **修订日期**: 2008-12-01

基金项目: 国家自然科学基金重点基金资助 (No.50636050)

作者简介: 徐 辉 (1981-), 男, 陕西宝鸡人, 博士研究生, 主要从事工程热物理方面的研究。

$$\langle X|Y \rangle = \sum_{i=0}^b x_i y_i \quad (3)$$

这里 X 和 Y 类似于 (2) 的定义。对于一个确定等温宏观流体系统必然有如下的两个基本守恒量:

$$\{\rho, \rho \bar{u}\} = \{\langle 1|f \rangle, \langle \bar{e}|f \rangle\} \quad (4)$$

其中, ρ 和 u 分别是流体的密度和动量。 $e = \{e_{i\alpha}\}_{i=0}^b$ 和 $\alpha = 1, \dots, D$, D 为系统的维数。方便起见, 定义如下算子 m 及其对应的宏观量 $M^{[4\sim 5]}$:

$$m(f) = M \quad (5)$$

对应于式 (4) 所定义宏观量。很显然, 我们定义了一个由微观状态到宏观状态的映射。下面我们定义如下的连续 H 熵函数和离散 H 函数^[2~3]:

$$H[f(x, v, t)] = - \int f(x, v, t) \ln[f(x, v, t)] dv \quad (6a)$$

$$H[f(x, t)] = - \sum_{i=0}^b f_i(x, t) \ln[f_i(x, t)/w_i] \quad (6b)$$

其中, w_i 为 Gauss-Hermiter 积分权数。那么我们要求解的平衡态分布, 就是要求解满足如下的约束极值问题:

$$H(f) \rightarrow \max, m(f) = M \quad (7)$$

对于 D2Q9 格子, 此问题所对应的平衡态分布解如下^[2~5]:

$$f_i^{eq} = \rho w_i \prod_{l=1}^2 \left(2 - \sqrt{1 + 3u_l^2} \right) \left[\frac{2u_l + \sqrt{1 + 3u_l^2}}{1 - u_l} \right]^{e_{il}} \quad (8)$$

对于标准 LBM, 松弛参数一般取定为常数, 而对于 ELBM, 松弛参数 γ 必须调节, 以使其满足 H 函数理论, 使得 H 函数满足极值条件。 H 函数单调性约束由两个过程组成^[2~3]: (1) 单粒子分布函数偏离平衡态的量 $\Delta_i = f_i^{eq} - f_i$, 此过程中 H 函数保持为常数; (2) 耗散步, 导致熵 H 函数增加。在 ELBM 中松弛参数定义为

$$\gamma = \alpha\beta \quad (9)$$

其中右端两个参数如下定义^[8]:

$$H(f) = H(f + \alpha\Delta) \quad (10)$$

$$\beta = \delta t / (2\tau + \delta t) \quad (11)$$

这里 τ 是标准 LBM 松弛时间。对于式 (10), 当系统趋于平衡时, α 的极限值为 $2^{[2~3]}$ 。对应于标准的 LBM, Navier-Stokes 方程中的运动粘性为

$$\nu = C_s^2 \delta t \left(\frac{1}{2\beta} - \frac{1}{2} \right) \quad (12)$$

当粘性消失的时候, 对应于参数 β 趋向于 0。要满足局部熵的最大化必须求解非线性方程 (10)。

一般的牛顿法常易失效, 在实际的求解过程中采用基于二分法的牛顿迭代法, 这使得工作量增大, 对于实际的应用来说, 不得不进行优化^[3]。为了节约工作量, 可采用基于 Ehrenfest 粗粒化的方法来进行优化。为行文之便, 以下将采用文献 [3] 所建议的优化方法实施的熵格子 LBM 方法简称为熵格子 LBM 方法, 而采用 Ehrenfest 粗粒化方法优化的实施方式称为 Ehrenfest 粗粒化法。

2 Ehrenfest 粗粒化的方法

在实际的计算过程中, 在每一个节点求解一个非线性方程, 显然是非常浪费时间的尽管只需花费 3~10 步的迭代时间。Ehrenfest 粗粒化方法主要是确保粒子分布函数靠近其准平衡态流形, 在每一个格点上检测非平衡态熵变化 $\Delta H^{[4\sim 5]}$:

$$\Delta H = H(f^{eq}) - H(f) \quad (13)$$

在进行碰撞和迁移过程中, 我们需要设置一个熵的阈值确保熵增, 使得偏离准平衡态流形的状态回到平衡态流形^[4~5]。其具体的实施步骤如下:

$$f_i(x+e_i\delta t, t+\delta t) = \begin{cases} (1-\gamma)f_i(x, t) + \gamma f_i^{eq}(x, t), & \Delta H > \sigma \\ \Delta H > \sigma \\ (1-\gamma)f_i(x, t) + \gamma \tilde{f}_i(x, t), & \Delta H \leq \sigma \end{cases} \quad (14)$$

其中, σ 为熵的阈值,

$$\tilde{f}_i(x, t) = 2f_i^{eq}(x, t) - f_i(x, t) \quad (15)$$

3 时间发展的 H 熵函数

对 H 熵的评估是检查各种方法的一种手段, 下面我们给出全局离散 H 熵函数及其相应的简单结果。在每一个时间步, 全局离散 H 熵函数如下

$$H(t) = - \sum_x \sum_{i=0}^b f_i(x, t) \ln[f_i(x, t)/w_i] \quad (16)$$

对式 (16) 作简单的数学变换可以得如下的式子:

$$H(t) = S(f, f^{eq}) + S(f^{eq}, w) + S_d(f^{eq}, f) \quad (17)$$

$$S(f, f') = - \sum_x \sum_{i=0}^b f_i \ln(f_i/f'_i) \quad (18)$$

$$S_d(f, f') = - \sum_x \sum_{i=0}^b (f_i - f'_i) \ln(f_i/w_i) \quad (19)$$

其中, $S(f, f^{eq})$ 就是著名的 Kullback 熵, 其用来度量 f 与 f^{eq} 之间的距离。

4 数值检验

我们主要对 $Re=3200$ 的顶盖驱动流做数值研究。计算所采用的格子为 100×100 , 密度为 $\rho = 1$,

计算结果如图 1。由图 1 可见熵格 Boltzmann 方法和基于 Ehrenfest 方法计算结果都能正确地描述 $Re=3200$ 时的顶盖驱动流, 正确地模拟出了流动所产生的二级涡位置。图 2 和图 3 给出了基准解^[7]和计算解的比较, 两者吻合得比较好。

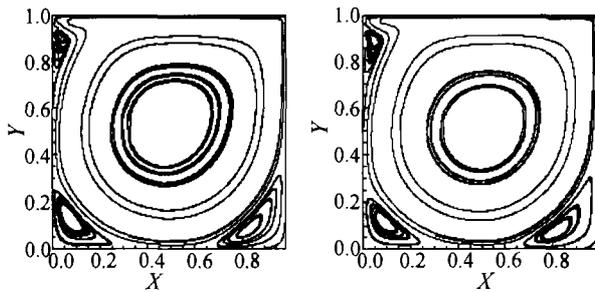


图 1 熵格子 Boltzmann 方法(左)和 Ehrenfest 方法(右)计算的流线

Fig.1 Streamlines from entropy LBM and Ehrenfest method

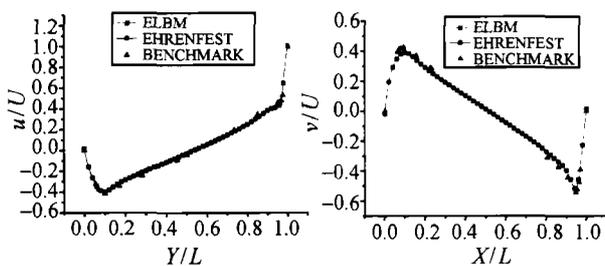


图 2 速度 u

Fig.2 Velocity u

图 3 速度 v

Fig.3 Velocity v

从图 4 和图 5 可看出, 两种方法所得到的 H 熵和 Kullback 熵的变化基本一致, 并且趋于稳定。这表明, 基于 Ehrenfest 粗粒化理论的方法得到了与 ELBM 相同的结果。本质上, 由于 ELBM 需要在每一步在每一个节点求解一个非线性方程, 尽管采用优化过的 ELBM 进行迭代计算只需 3~10 步左右^[3], 但是从计算角度来讲, 还是非常地耗费时间。因此

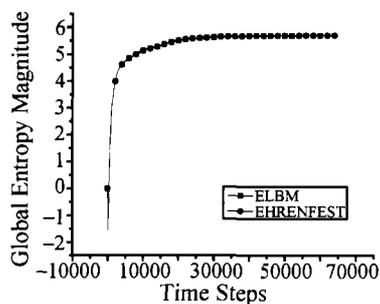


图 4 全局 H 熵

Fig.4 Global H entropy

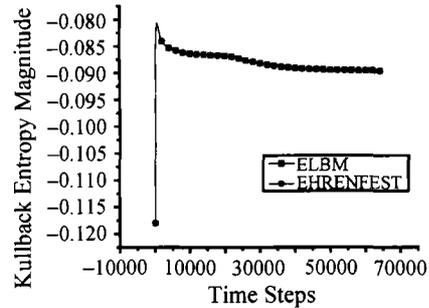


图 5 全局 Kullback 熵

Fig.5 Global Kullback entropy

基于 Ehrenfest 理论的方法更高效。以上述计算为例, ELBM 计算时间为 5478 s, 而 Ehrenfest 方法仅为 2392 s。如果继续提高 Reynolds 数到 10000, 保持网格数不变, Ehrenfest 方法会变得不稳定, 而 ELBM 仍然能够给出比较稳定和可信赖的解, 有关方面的内容作者将另行撰文。

5 结 论

本文研究了两种求解基于熵分布函数的 LBM 方法在求解高 Reynolds 数时有效性及其效率。对 $Re = 3200$ 的顶盖驱动流结果表明, 基于 Ehrenfest 理论的方法可获得与 ELBM 计算同样结果, 但是前者计算更高效。所以对于 $2000 < Re < 7500$ 的流体流动, 网格数不大情况下, 可采用 Ehrenfest 方法。

参 考 文 献

- [1] Succi S. Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond. Oxford: Clarendon Press, 2001
- [2] Tosi F, Ubertini S, Succi S, et al. Numerical Stability of Entropic Versus Positivity-Enforcing Lattice Boltzmann Schemes. Mathematics and Computers in Simulations, 2006, 72: 227-231
- [3] Tosi F, Stefano Ubertini, Succi S, et al. Optimization Strategies for the Entropic Lattice Boltzmann Method. J. Sci. Comput., 2006, 30(3): 368-387
- [4] Brownlee R A, Gorban A N, Levesley J. Stabilization of the Lattice Boltzmann Method Using the Ehrenfest's Coarse-Graining Idea. Phys. Rev. E, 2006, 74: 037703
- [5] Brownlee R A, Gorban A N, Levesley J. Stability and Stabilization of the Lattice Boltzmann Method. Phys. Rev. E, 2007, 75: 036711
- [6] Brownlee R A, Gorban A N, Levesley J. Nonequilibrium Entropy Limiters in Lattice Boltzmann Methods. (Unpublished), e-print cond-mat/0704. 0043, 2007
- [7] Ghia U, Ghia K N, Shin C T. High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method. J. Comput. Phys., 1982, 48: 387-411
- [8] Ansumali S, Karlin I V, Frouzakis C E, et al. Entropic Lattice Boltzmann Method for Microflows. Physica A, 2006, 359: 289-305