

# 格子 Boltzmann 方法分布函数重构算子的应用

栾辉宝 陈 黎 周文静 孙 杰 何雅玲 陶文铨

(西安交通大学能源与动力工程学院, 教育部热流科学与工程重点实验室, 陕西 西安 710049)

**摘 要** 给出了格子 Boltzmann 方法 (LBM) 密度分布函数和温度分布函数的两个重构算子, 解决了 LBM 与其它方法耦合的关键难题。构造了 LBM 与有限容积法 (FVM) 以及 LBM 与分子动力模拟方法 (MD) 的两个耦合模型。通过方腔自然对流以及平板通道内的泊肃叶流动对耦合模型进行验证。结果表明, 基于重构算子的耦合模型可以正确地应用于 LBM 与其它方法的耦合计算中。

**关键词** 格子 Boltzmann 方法; 多尺度; 耦合; 重构算子

**中图分类号:** TK123 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-231X(2011)06-0997-05

## Applications of Reconstruction Operators for Lattice Boltzmann Method Distribution Functions

LUAN Hui-Bao CHEN Li ZHOU Wen-Jing SUN Jie HE Ya-Ling Tao Wen-Quan

(Key Laboratory of Thermal Fluid Science and Engineering of MOE, School of Energy & Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

**Abstract** Two analytic expressions have been proposed to solve the key difficulty of coupling LBM with other methods. These are called density distribution reconstruction operator and temperature distribution reconstruction operator. The mesoscopic LBM is coupled upward with macroscopic FVM and downward with microscopic MD. FVM-LBM coupled model is validated by 2D natural convection in a square cavity. LBM-MD coupled model is applied to simulate Poiseuille flows. The results are in good agreement with benchmark results, which verifies the validation of the coupled models based on the reconstruction operators.

**Key words** LBM; multiscale; couple; reconstruction operator

## 0 引 言

世界的本质是多尺度的。自然界与工程领域中的许多物理现象, 其常常发生在涵盖几个数量级的空间及时间范围内, 我们将其统称为多尺度物理现象<sup>[1~3]</sup>。目前有关多尺度现象的研究已经遍布到数学、物理、化学化工、材料科学、生物学等很多领域。数值模拟为研究多尺度现象提供了一条很好的途径。常见的数值模拟方法根据其适用范围通常可以分为 3 个层次: 宏观层次<sup>[4~5]</sup>, 如有限差分法 (FDM), 有限容积法 (FVM), 有限元法 (FEM); 介观层次, 如格子 Boltzmann 方法 (LBM)<sup>[6~8]</sup>, 直接模拟蒙特卡洛法 (DSMC); 微观层次, 如分子动力学模拟法 (MD), 量子力学 (QM)。每种数值方法对应着一定的努森数 ( $Kn$ ) 取值范围。在模拟多尺度问题时, 构造宏观 - 介观、介观 - 微观以及宏观 - 介观 - 微观多种层次上方法的耦合体系, 可以得到很好的效果。LBM 具有物理图像清晰, 边界条件易于

实施, 并行效率高等突出优点。将 LBM 与其它方法耦合的难点是如何由耦合界面上的宏观信息重构出 LBM 中采用的粒子分布函数。为了解决此问题, 文中给出密度分布函数及温度分布函数的两个二阶重构算子, 并构建了 LBM-FVM 以及 LBM-MD 耦合模型, 阐述了基本原本及具体实施步骤。选取方腔自然对流以及微通道内的泊肃叶流动对耦合模型进行了验证。

## 1 分布函数的重构算子

采取“分区建模, 界面耦合”的耦合方法。设  $U$  代表宏观物理量,  $u$  代表介观/微观物理量, 两种层次物理量之间的传递通过压缩算子  $C$  (Compression operator) 和重构算子  $R$  (Reconstruction operator) 进行。如式 (1) 所示

$$U = C(u), u = R(U) \quad (1)$$

收稿日期: 2011-01-15; 修订日期: 2011-05-18

基金项目: 国家自然科学基金重点项目 (No.50636050); 国家 863 项目 (No.2009AA01A131)

作者简介: 栾辉宝 (1983-), 男, 山西运城人, 博士, 主要从事传热与流动问题的多尺度数值模拟。

两个算子之间满足  $CR = I$ ,  $I$ (Identity operator) 是恒等算子。

通常情况下重构算子  $R$  并不唯一, 原因为微观量比宏观量包含更多的信息。相反情况下, 压缩算子  $C$  是唯一的, 宏观量均是由大量的微观信息经统计平均后得到的。将 LBM 与其他方法耦合的难点在于: 如何将耦合界面上的宏观信息量准确地传递给 LBM 中需要的分布函数, 即得到重构算子。

LBM 采用双分布函数 (Double Distribution Function, DDF) 格子模型<sup>[6~8]</sup>, 其中密度分布函数  $f_i(x, t)$  用于模拟速度场, 而温度分布函数  $g_i(x, t)$  用于模拟温度场。离散速度采用二维九速 D2Q9 模型。在模拟方腔自然对流问题时, 为便于处理由于温差引起的浮升力项, 常常采用 Boussinesq 假设<sup>[4,6]</sup>。重力项中的密度可以表示为

$$\rho = \rho_0 [1 - \beta(T - T_0)] \quad (2)$$

式中,  $\rho_0$  和  $T_0$  是冷面的密度和温度,  $\beta$  为体胀系数。从而重力项可以表示为

$$\mathbf{G} = \rho_0 \mathbf{g} - \rho_0 \mathbf{g} \beta (T - T_0) \quad (3)$$

式中,  $\mathbf{g}$  为重力加速度 (方向垂直向下)。

Boussinesq 方程使用 LBM 求解可以通过在演化方程右侧加入外力项来实现<sup>[7]</sup>, 如式 (4) 所示

$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(x, t) - \frac{1}{\tau_f} [f_i(x, t) - f_i^{(eq)}(x, t)] + F_i \quad (4)$$

式中,  $F_i$  定义为

$$F_i = \omega_i \rho \left( 1 - \frac{1}{2\tau_f} \right) \left[ \frac{3}{c^2} (c_i \cdot \mathbf{F}) + \frac{9}{c^4} (c_i \cdot \mathbf{F})^2 - \frac{3}{c^2} \mathbf{F}^2 \right] \quad (5)$$

式中,  $\mathbf{F} = -\mathbf{g} \beta (T - T_0)$ ,  $\omega$  为 D2Q9 模型的权系数,  $\tau$  为松弛时间。

下面分别给出重构密度分布函数的重构算子<sup>[9~10]</sup>(式 (6)) 和温度分布函数的重构算子<sup>[11]</sup>(式 (7))。可以由温度、速度和密度等宏观信息重构出密度分布函数  $f_i$  以及温度分布函数  $g_i$  等。

$$f_i = f_i^{(eq)} [1 - \tau_f \Delta t U_{i\beta} c_s^{-2} (U_{i\alpha} \partial_{x\alpha} u_\beta + \nu \partial_{x\alpha}^2 u_\beta + \nu \rho^{-1} S_{\alpha\beta} \partial_{x\alpha} \rho)] \quad (6)$$

$$g_i = g_i^{(eq)} [1 - \tau_g \Delta t T^{-1} (U_{i\alpha} \partial_{x\alpha} T + \alpha_T \partial_{x\alpha}^2 T)] + \frac{\tau_g \omega_i T c_{i\beta}}{\tau_f U_{i\beta}} \frac{[f_i - f_i^{(eq)}]}{f_i^{(eq)}} + \tau_g \Delta t \omega_i c_{i\beta} T \rho^{-1} \partial_{x\beta} \rho \quad (7)$$

式中,  $U_{i\alpha} = c_{i\alpha} - u_\alpha$ ,  $S_{\alpha\beta} = \partial_{x_\beta} u_\alpha + \partial_{x_\alpha} u_\beta$ 。上标 eq 表示平衡态, 下标  $f, g$  分别表示密度以及温度分布

函数,  $i$  表示离散速度方向,  $\alpha, \beta$  分别表示坐标方向编号,  $\Delta t$  为时间步长,  $T$  为温度,  $u$  为速度,  $\rho$  为密度,  $c$  为格子速度,  $\nu$  为运动黏度,  $\alpha_T$  为热扩散率。

## 2 耦合模型

### 2.1 FVM 与 LBM 耦合模型

宏观部分的模拟 FVM 部分采用基于同位网格的 IDEAL<sup>[12]</sup> 程序。图 1 给出了二维情况下的耦合模型, 计算区域被划分为两块, 上部分采用 LBM 求解, 下部分采用 FVM 求解, 中间是重合区。MN 是 FVM 方法的上边界, AB 是 LBM 区域的下边界。MN 边界上值可以由 LBM 区域对应点上的宏观值得到, 然而 AB 边界上的粒子分布函数就不能直接由 FVM 区域对应点上的宏观量直接得到。需要根据重构算子进行重构。

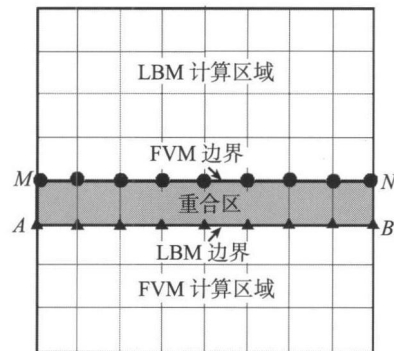


图 1 方案 A 与 D 冷却结构的改进  
Fig. 1 Couple structure between FVM and LBM

FVM 与 LBM 耦合模型计算步骤:

- (1) 设定 MN 边界上初值, 利用 FVM 求解下部区域;
- (2) 根据上步计算结果, 获取 AB 边界上的宏观值, 通过重构算子式 (6) 和式 (7) 将其转化为分布函数, 利用 LBM 求解上部区域;
- (3) 更新 MN 边界上的信息, 重复以上步骤, 直至结果收敛。

### 2.2 LBM 与 MD 耦合模型

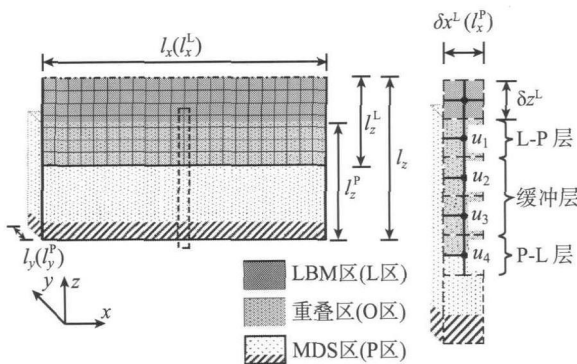
将 LBM 与 MD 耦合用于模拟微通道内的泊肃叶 (Poiseuille) 流动, 耦合模型如图 2(a) 所示。由于对称性, 仅取通道的一半进行研究。近壁面处采用 MD, 以期捕捉界面处的滑移现象, 主流部分用 LBM 模拟。模拟工质为液态氩 (Ar), 通道壁面由金属铂 (Pt) 构成。按照所采用的求解方法不同可将计算区域分为粒子区 (P 区)、重叠区 (O 区) 与连续区 (L 区)。

粒子区 (P 区) 采用三维 MD 求解方法。流体内部分子之间 (fluid-fluid) 的作用选择改进型的 L-J

势能函数进行描述<sup>[13~14]</sup>(式(8))。流固粒子(fluid-solid)之间的作用采用(式(9))的势能函数进行描述,能量和长度参数分别以 $\varepsilon_{fs}$ 和 $\sigma_{fs}$ 表示。恒壁温采用影像法,P区的时间步长以 $\delta t^P$ 表示。连续区(L区)采用LBM进行模拟,时间步长以 $\delta t^L$ 表示。重叠区(O区)的细节如图2(b)所示,可分为L-P层、缓冲层和P-L层。

$$\varphi(r) = 4\varepsilon \left\{ \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] + \left[ 6 \left( \frac{\sigma}{r_c} \right)^{12} - 3 \left( \frac{\sigma}{r_c} \right)^6 \right] \left( \frac{r}{r_c} \right)^2 - \left[ 7 \left( \frac{\sigma}{r_c} \right)^{12} - 4 \left( \frac{\sigma}{r_c} \right)^6 \right] \right\} \quad (8)$$

$$\varphi_{fs}(r) = 4\varepsilon_{fs} \left\{ \left[ \left( \frac{\sigma_{fs}}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{fs}}{r} \right)^6 \right] + \left[ 6 \left( \frac{\sigma_{fs}}{r_c} \right)^{12} - 3 \left( \frac{\sigma_{fs}}{r_c} \right)^6 \right] \left( \frac{r}{r_c} \right)^2 - \left[ 7 \left( \frac{\sigma_{fs}}{r_c} \right)^{12} - 4 \left( \frac{\sigma_{fs}}{r_c} \right)^6 \right] \right\} \quad (9)$$



(a) LBM-MDS 耦合模型 (b) 重叠区细节图

图 2 LBM-MD 耦合模型

Fig. 2 Couple structure between LBM and MD

LBM-MD 耦合模型实施步骤:

(1) 在  $t=0$  时刻, P 区和 L 区分别进行初始化。随后,  $t=0 \sim t_0$  的时间用来使 P 区分子达到热力学平衡状态;

(2) 当  $t = t_0$  时刻, 耦合迭代开始, 首先经过  $p\delta t^P (= \delta t^L)$  时间由 P 区统计得到宏观信息  $u_1$ ;

(3) P 区将此信息传递给 L 区作为边界条件, L 区通过重构算子将其转化为边界上的分布函数, 并进行计算得到下一  $p\delta t^P$  的 P 区边界宏观信息  $u_4$ ;

(4) L 区将此信息传递给 P 区作为边界条件, P 区在此边界约束条件下<sup>[13~14]</sup>进行演化, 进而得到下一  $\delta t^P$  时刻的系统状态, 在 P 区分子进行演化的同时有关信息被记录在内存中, 当演化至下一个  $p\delta t^P$  时刻, 统计获得新的  $u_1$ ;

(5) 重复步骤(3)~(4), 直至结果收敛。

### 3 结果与讨论

#### 3.1 方腔自然对流

为了验证分布函数重构算子能否正确应用于模拟传热流动问题, 选取具有基准解的方腔自然对流来进行研究。图3给出了计算模型, 左壁面为高温壁面 ( $T_h = 1$ ), 右壁面为低温壁面 ( $T_c = 0$ ), 上下壁面绝热。方腔被分为左右两个区域, 左侧采用 FVM 进行求解, 右侧采用 LBM 进行求解, 两者在耦合界面上进行信息传递。区域尺寸取为  $1 \times 1$ , 网格数目取为  $201 \times 201$ 。流体的普朗特数 ( $Pr = \nu/a$ ) 固定为 0.71, 密度取为  $\rho = 1.0 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$  运动黏度为  $\nu = 1.3 \times 10^{-5} \text{ m}^2\cdot\text{s}^{-1}$  和重力加速度  $g = 9.8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$ (方向垂直向下)。选取瑞利数 ( $Ra = g\beta^3\Delta T/av$ ) 为  $10^4$ , 并将耦合模型结果同商业软件 FLUENT 的结果进行了对比。

图4(a)与图4(b)给出  $Ra=10^4$  时计算得到的流线和等温线图, 可以看出耦合模型结果同 FLUENT 模拟出的结果符合得很好。耦合模型中流线和等温线在耦合界面处连续且光滑过渡。

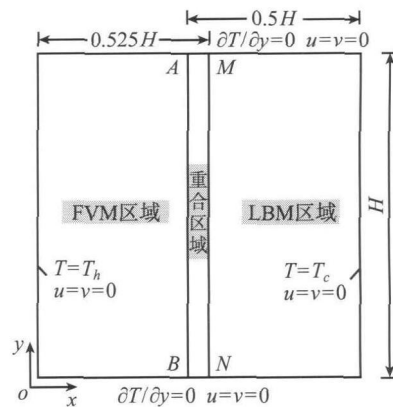


图 3 方腔自然对流示意图

Fig. 3 Natural convection in a square cavity

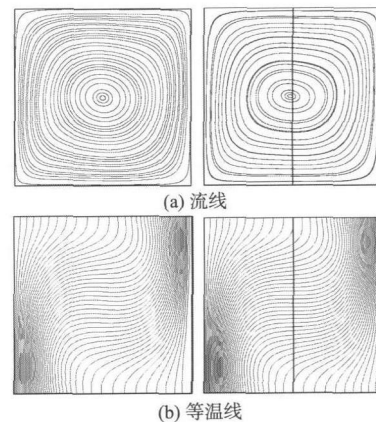


图 4  $Ra=10^4$  时, FLUENT(左侧)与耦合模型(右侧)结果对比

Fig. 4 Results of FLUENT and CFVLBM at  $Ra=10^4$

图 5 给出了水平中线上  $v$  速度以及垂直中线上  $u$  速度值的分布情况。我们可以看出耦合模型同 FLUENT 结果符合得很好。

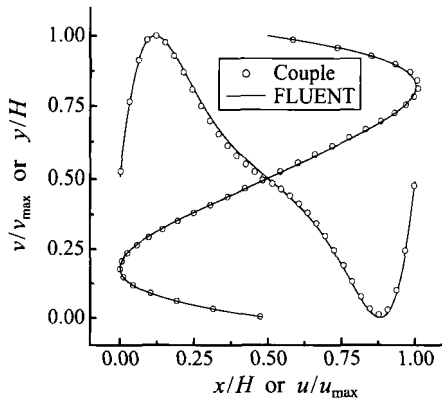


图 5  $Ra=10^4$  时, 中心线上的速度比较图

Fig. 5 Comparisons of center-line velocities at  $Ra=10^4$

### 3.2 微通道内的泊肃叶流动

采用 LBM-MD 耦合模型计算流体在微/纳米通道内的泊肃叶流动 (Poiseuille flow) 如图 2 所示。由于流动的对称性, 总计算区域为流道的一半  $l_x = 61.3\sigma$ ,  $l_y = 13.6\sigma$ 。保持粒子区的高度  $61.3\sigma$  不变, 通过调整连续区的高度达到改变整个计算通道尺寸。本文中通道高度  $H(=2l_z)$  在  $245\sigma \sim 2044\sigma$  范围内变化。P 区的流体分子数为 8960, 固体分子数为 1188。势能函数的表达式如式 (8) 和式 (9), 其中能量参数  $\epsilon = 1.67 \times 10^{-21} \text{J}$ , 特征尺度参数  $\sigma = 0.34 \text{ nm}$ , 截断半径  $r_c = 2.5\sigma$ , 流-固长度特征参数  $\sigma_{fs} = 0.91\sigma$ , 能量特征参数  $\epsilon_{fs} = \beta\epsilon$ , 此处  $\beta$  用以调节壁面润湿性。P 区的时间步长  $\delta t^P = 0.005\tau$ , L 区的时间步长  $\delta t^L = 2.14\tau$ , 其中  $\tau = 2.161 \text{ ps}$ 。

图 6 ~ 图 8 给出了不同润湿系数  $\beta$ , 通道高度

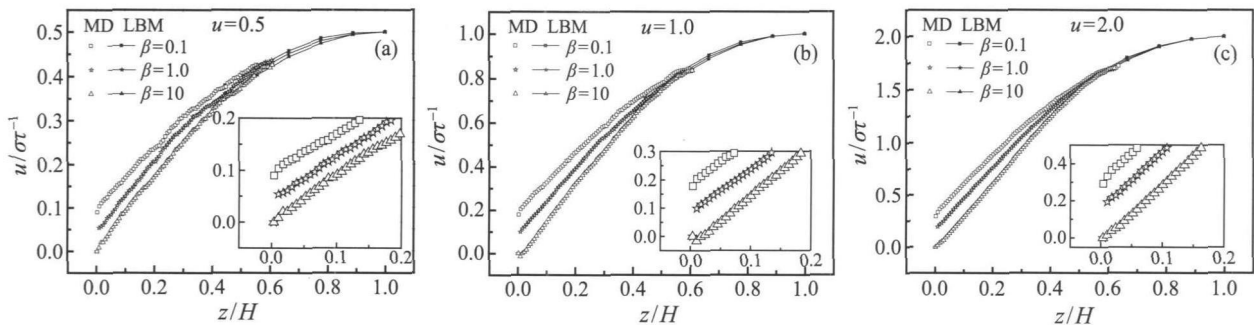


图 6  $H=245\sigma(83.42 \text{ nm})$  时的速度分布  
Fig. 6 Velocity profiles at  $H=245\sigma(83.3 \text{ nm})$

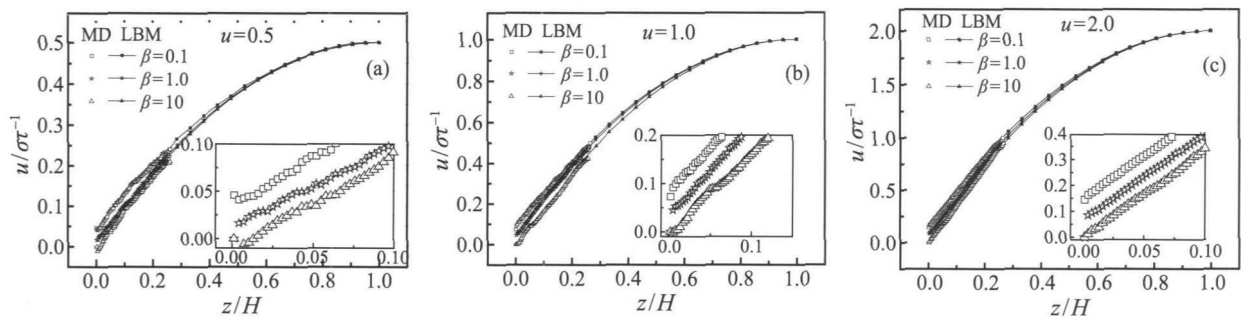


图 7  $H=572\sigma(194.77 \text{ nm})$  时的速度分布  
Fig. 7 Velocity profiles at  $H=572\sigma(194.77 \text{ nm})$

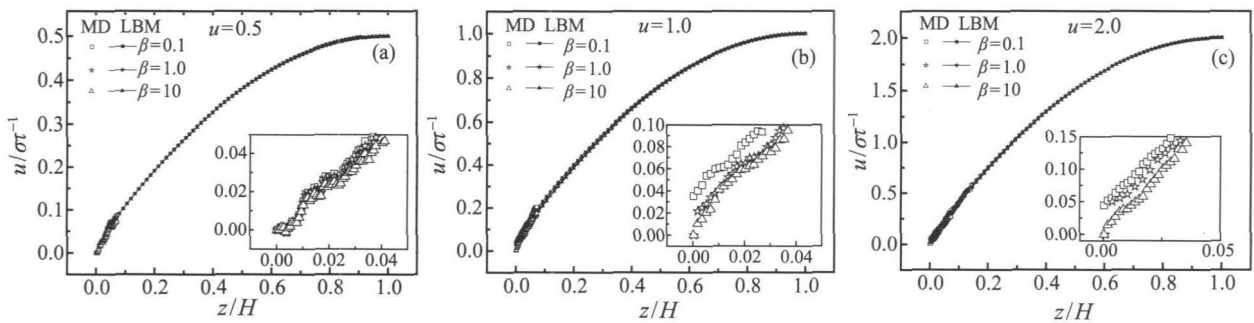


图 8  $H=2044\sigma(695.98 \text{ nm})$  时的速度分布  
Fig. 8 Velocity profiles at  $H=2044\sigma(695.98 \text{ nm})$

$H$  以及来流平均速度  $u_{in}$  下的速度分布情况。可以看出: 壁面处的滑移速度  $u_s$  随着  $\beta$  增大而减小, 随  $H$  的增大而减小, 随  $u_{in}$  的增大而增大。

### 3.3 FVM-LBM-MD 耦合模型

为了进一步体现 LBM 在宏观以及微观算法之间的桥梁作用, 在图 2 的基础上, 用 FVM-LBM 耦合模型替代原来的 L 区, 进而构成 FVM-LBM-MD 三种方法的耦合模型。我们选取  $\beta=5$ ,  $H=245\sigma$ ,  $u_{in}=1.0$  进行计算, 计算出来的速度分布如图 9 所示, 可以看出 FVM, LBM 以及 MD 在各自区域同解析解都符合得很好。

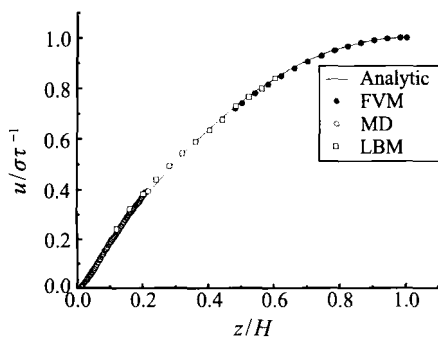


图 9 FVM-LBM-MD 耦合结果

Fig. 9 Result of FVM-LBM-MD model

## 4 结 论

(1) 构建了 FVM-LBM 耦合模型, 并将其应用于模拟方腔自然对流问题, 耦合结果同 FLUENT 计算一致, 同时耦合界面处速度与温度连续且光滑过渡。

(2) 构建了 FVM-MD 耦合模型以及 FVM-LBM-MD 耦合模型, 并将其应用于计算微/纳米通道内的泊肃叶流动问题。耦合模型可以捕捉到壁面处的滑移现象, 壁面处的滑移速度  $u_s$  随着  $\beta$  增大而减小, 随  $H$  的增大而减小, 随  $u_{in}$  的增大而增大。

## 参 考 文 献

- [1] E W N, Engquist B, Li X, et al. Heterogeneous Multiscale Methods: a Review [J]. Commun. Comput. Phys., 2007, 44: 367-450
- [2] TAO W Q, HE Y L. Recent Advances in Multiscale Simulations of Heat Transfer and Fluid Flow Problems [J]. Progress in Computational Fluid Dynamics, 2009, 9(3-5): 150-157
- [3] 陶文铨. 传热与流动问题的多尺度数值模拟: 方法与应用 [M]. 北京: 科学出版社, 2009  
TAO Wenquan. Multiscale Numerical Simulation in Heat

- Transfer and Fluid Flow Problems: Principle and Applications [M]. Beijing: Science Press, 2009
- [4] 陶文铨. 计算传热学的近代进展 [M]. 北京: 科学出版社, 2005  
TAO Wenquan. The Recently Progress in Numerical Heat Transfer [M]. Beijing: Science Press, 2005
- [5] 陶文铨. 数值传热学 [M]. 第 2 版. 西安: 西安交大出版社, 2001  
TAO Wenquan. Numerical Heat Transfer [M]. Second Edition. Xi'an: Xi'an Jiaotong University Press, 2001
- [6] 何雅玲, 王勇, 李庆. 格子 Boltzmann 方法的理论及应用 [M]. 北京: 科学出版社, 2008  
HE Yaling, WANG Yong, LI Qing. Lattice Boltzmann Method: Theory and Applications [M]. Beijing: Science Press, 2008
- [7] 郭照立, 郑楚光. 格子 Boltzmann 方法的原理及应用 [M]. 北京: 科学出版社, 2008  
GUO Zhaoli, ZHENG Chuguang. Theory and Applications of Lattice Boltzmann Method [M]. Beijing: Science Press, 2008
- [8] HE Y L, LI Q, WANG Y, et al. Lattice Boltzmann Method and its Application in Engineering Thermophysics [J]. Chinese Sci Bull, 2009, 54(22): 4177-4134
- [9] 徐辉, 栾辉宝, 陶文铨. LBM 与宏观数值方法界面信息耦合的重构算子 [J]. 西安交通大学学报, 2009, 43(11): 6-10  
XU Hui, LUAN Huibao, TAO Wenquan. A Reconstruction Operator for Interface Coupling Between LBM and Macro-numerical Method of Finite-Family [J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2009, 11: 6-10
- [10] LUAN H B, XU H, CHEN L, et al. Numerical Illustrations of the Coupling Between Lattice Boltzmann Method and Finite-Type Macro Numerical Methods [J]. Numer. Heat Transfer B, 2010, 57: 147-170
- [11] 栾辉宝, 徐辉, 陈黎, 等. 有限容积法与格子 Boltzmann 方法耦合模拟传热流动问题 [J]. 科学通报, 2010, 55(32): 3128-3140  
LUAN Huibao, XU H, CHEN L, et al. Coupling Between FVM and LBM for Heat Transfer and Fluid Flow Problems [J]. Chinese Sci. Bull (Chinese Ver), 2010, 55(32): 3128-3240
- [12] SUN D L, QU Z G, HE Y L, et al. An Efficient Segregated Algorithm for Incompressible Fluid Flow and Heat Transfer Problems-IDEAL (Inner Doubly Iterative Efficient Algorithm for Linked Equations) Part I: Mathematical Formulation and Solution Procedure [J]. Numer. Heat Transfer B, 2008, 53: 1-17
- [13] SUN J, HE Y L, TAO W Q. Scale Effect on Flow and Thermal Boundaries in Micro-/Nano-channel Flow using Molecular Dynamics-Continuum Hybrid Simulation Method [J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2010, 81(2): 207-228
- [14] 孙杰. 微观方法与多尺度耦合方法研究及其在微/纳米流动与传热领域中的应用 [D]. 西安: 西安交通大学, 2009  
SUN Jie. Study on Microscopic and Multi-Scale Coupling Methods and their Applications in Micro/Nano-Scale Fluid Flow and Heat Transfer [D]. Xi'an: Xi'an Jiaotong University, 2009