

# 用 12bit 格子气自动机模型模拟静止流 和 Couette 流的温度分布\*

刘慕仁 孔令江

广西师范大学物理系, 桂林 541001

1992 年 8 月 5 日收到

为了理解格子气自动机的热性质, 本文用 12bit 六方格子多重速度模型模拟了静止流和 Couette 流的流场分布和温度分布. 模拟结果与理论结果进行了比较, 得出了有益的结论.

PACC: 0540

## 一、引 言

自从 1986 年, Frish, Hasslecher, Pomeau (FHP) 提出用格子气自动机<sup>[1]</sup>模拟 Navier-Stokes 方程以来, 经几年的研究和发展, 大量的理论和模拟结果证明格子气自动机是求解偏微分方程有效的数值方法<sup>[2]</sup>. 由于格子气自动机独特的优点, 使其被广泛地应用于其它领域, 如反应扩散<sup>[3]</sup>, 晶体生长<sup>[4]</sup>, 地震<sup>[5]</sup>, 成为揭示复杂行为的有力工具.

对于 FHP 模型, 所有的粒子有相同的质量和相同的速度. 所以质量守恒和能量守恒等价, 这样在模型中不能引入温度<sup>[1]</sup>. 为了克服这种弱点, 文献[6, 7]考虑了四方格子上的多重速度模型. 由于四方格子缺乏足够的对称性, 因此只能模拟静止流的热传导性质. 最近文献[8]提出了一个能模拟流动流热传导现象的模型. 它是一个三重速度, 三种质量, 反应型的 13bit 六方格子模型.

本文考虑一个 12bit 多重速度六方格子模型, 这种模型具有足够的对称性, 能引入温度因此能用来模拟流动流的热传导现象. 与文献[8]的模型相比, 格子交点上, 12bit 模型只占用 12bit 而文献[8]模型占用 13bit, 因此 12bit 的模型能节约一倍的内存; 粒子的质量都一样, 因此不用涉及粒子间的化学反应; 各种边界条件, 尤其是温度边界容易施加, 而不会违反粒子数、质量、动量、能量守恒.

## 二、模 型

12bit 的模型如图 1 所示, 即在 FHP 单速模型的基础上加上六个大小为  $\sqrt{3}$  的速度方向. 每时刻粒子均处于格子的交点上, 每个交点最多可容纳 12 个速度大小及方向不同的粒子. 粒子的运动按两个步骤进行: (1) 粒子之间按规定的规则进行碰撞, 碰撞过程中

\* 国家自然科学基金资助的课题.

动量、质量、能量均守恒。(2)各粒子以其具有的速度运动到相邻的交点上,本文中的碰撞规则这样来取,速度大小相同的粒子之间可进行二粒子、三粒子、四粒子碰撞,规则与文献[9]给出的一个,两种速度大小不同的粒子之间按图 2 所示的规则进行碰撞。(如果为了降低沾滞系数以提高雷诺数还可考虑不同速度之间三粒子、四粒子等多种碰撞规则)。

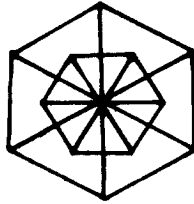


图 1 本文采用的  
12bit 模型



图 2 速度大小不同的粒子之  
间的碰撞规则

格子上的粒子状态可用单粒子分布函数  $f(\mathbf{r}, \mathbf{e}_a, t)$  来描写<sup>[9]</sup>, 它表示  $t$  时刻速度为  $\mathbf{e}_a$  的粒子在  $\mathbf{r}$  处出现的概率. 在本文中,  $|\mathbf{e}_a|^2$  可取 1, 3 两种值,  $a$  可从 0 取到 11. 按统计物理方法, 粒子密度定义为

$$\rho = \sum_{a=0}^{11} f(\mathbf{r}, \mathbf{e}_a, t) \quad (1)$$

动量密度定义为

$$\rho \mathbf{u} = \sum_{a=0}^{11} \mathbf{e}_a f(\mathbf{r}, \mathbf{e}_a, t) \quad (2)$$

能量密度定义为

$$\rho \epsilon = \frac{1}{2} \sum_{a=0}^{11} f(\mathbf{r}, \mathbf{e}_a, t) (\mathbf{e}_a - \mathbf{u})^2 \quad (3)$$

没有外场下, 单粒子分布函数满足如下输运方程:

$$\partial_t f(\mathbf{r}, \mathbf{e}_a, t) + \mathbf{e}_a \cdot \nabla f(\mathbf{r}, \mathbf{e}_a, t) = \Omega_a, \quad (4)$$

$\Omega_a$  是由于碰撞而引起的粒子分布的变化. 由于碰撞过程中粒子数、动量、能量均守恒, 因此它们是碰撞不变量, 满足

$$\sum_{a=1}^{11} \Omega_a = 0; \quad \sum_{a=0}^{11} \Omega_a \mathbf{e}_a = 0; \quad \sum_{a=0}^{11} \Omega_a \frac{1}{2} (\mathbf{e}_a)^2 = 0. \quad (5)$$

利用(1)——(5)式可导出

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (6)$$

$$\partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot \pi = 0 \quad (7)$$

其中

$$\pi_{ij} = \sum_{a=0}^{11} (\mathbf{e}_a)_i (\mathbf{e}_a)_j f(\mathbf{r}, \mathbf{e}_a, t), \quad (8)$$

$$\partial_t (\rho \epsilon) + \nabla \cdot (\rho \epsilon \mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{q} + P_i \nabla u = 0 \quad (9)$$

其中

$$q_i = \frac{1}{2} \sum_{a=0}^{11} f(\mathbf{r}, \mathbf{e}_a, t) (\mathbf{e}_a - \mathbf{u})^2 (\mathbf{e}_a - \mathbf{u})_i \quad (10)$$

$$p_{ij} = \sum_{a=0}^{11} f(r, e_a, t) (e_a - u)(e_a - u)_j \quad (11)$$

利用 Chapman-Enskog 展开方法<sup>[8,10]</sup>, 并利用  $\nabla \cdot u = 0$  的条件, 可导出流体力学方程

$$\partial_t u + g(\rho, \epsilon)(u \cdot \nabla)u = -\nabla p + \gamma \nabla^2 u \quad (12)$$

$$\partial_t \epsilon + h(\rho, \epsilon)u \cdot (\nabla \epsilon) = K \nabla^2 \epsilon + \gamma \nabla u : \nabla u. \quad (13)$$

一般情况下,  $g(\rho, \epsilon) \neq 1, h(\rho, \epsilon) \neq 1$ . 但在模拟静止流和 Couette 流时, 这两个因子不出现在方程中, 因此与通常的流体力学方程完全相同.

### 三、模拟结果与结论

为理解格子气自动机的热性质, 用如上模型模拟了二平行平板之间的静止流和 Couette 流. 所取的格子大小为  $150 \times 256$ . 其中  $y$  方向为 150,  $x$  方向为 256. 粒子密度测量根据下式:

$$\rho = \sum_{a=0}^{11} \sum_{(i,j)} n_a(i,j) / V \quad (14)$$

决定,  $(i, j)$  为粒子的位置,  $a$  为速度方向,  $(i, j)$  求和取遍子格子  $V$  内所有的点. 子格子  $V$  的大小为  $10 \times 256$ , 满足平均自由程的要求. 当  $(i, j)$  处有  $a$  方向速度的粒子, 则  $n_a(i, j) = 1$ , 否则为 0. 在所有的模拟中, 均取  $\rho = 2$ , 即平均而言每点上最多有两个粒子. 测量速度的方式为

$$u = \sum_{a=0}^{11} \sum_{(i,j)} n_a(i,j) e_a / \rho V \quad (15)$$

能量的测量方式为

$$\epsilon = \frac{\sum_{a=0}^{11} \sum_{(i,j)} n_a(i,j) e_a^2}{2\rho V} - \frac{1}{2} u^2 \quad (16)$$

由分子运动论知  $\epsilon = kT$ ,  $k_B$  为玻耳兹曼常数,  $T$  为温度. 为方便起见, 文中直接用  $\epsilon$  来表示  $T$ .

初始条件是一个均匀的静止流. 每个交点上每个方向的粒子均以  $1/6$  的概率出现就可实现这样的初始条件.

#### 1. 静止流

静止流  $u=0$ , 长时间后形成一稳定的随  $y$  变化的温度分布. 所以方程(13)变为

$$k \partial_y^2 \epsilon = 0. \quad (17)$$

设上下板温度分别为  $\epsilon_2, \epsilon_1$ , 则(17)式的解为

$$\epsilon = \epsilon_1 + (\epsilon_2 - \epsilon_1) y^* \quad (18)$$

$y^* = y/L$ . 因此理论上, 静止流的温度是一条直线.

在模拟中温度边界条件很容易施加, 低温边界条件对应一对具有  $\sqrt{3}$  速度的粒子变为一对具有 1 速度的粒子; 高温边界条件则相反, 一对具有 1 速度的粒子变为一对具有  $\sqrt{3}$  速度的粒子. 如图 3 所示.

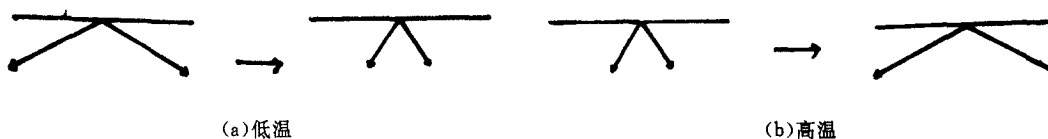


图 3 温度边界条件

这样施加的温度边界条件能严格保证质量守恒和  $x$  方向动量守恒条件, 因此比多种质量的模型优越. 在模拟中让上板具有最低温度 0.5, 下板具有最高温度 1.5. 为模拟无限长的平板, 左右两边采用周期边界条件.

模拟结果给出, 经 5,000 次演化后, 形成一稳定的温度分布, 如图 4 所示. 由图 4 可见, 除两板附近, 分布几乎为一直线, 因此与理论给出的方程(18)符合得较好.

在下板的模拟值比理论值小一些, 在上板的模拟值比理论值大一些, 这是由于平均自由程的残余效应造成的, 即不可能在两板处把所有的粒子都变成具有  $\sqrt{3}$  速度和 1 速度的粒子.

$x$  方向的速度分布正反方向的值都很小, 可以认为为零.  $y$  方向最初有一向上的分布使能量由底部传到上面, 当稳定分布形成后,  $y$  方向的速度变为零.

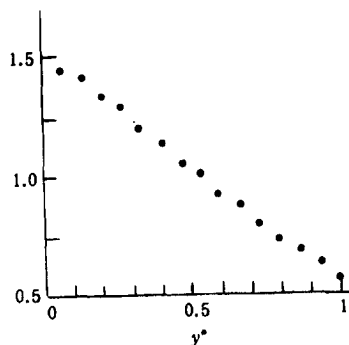


图 4 静止流的温度分布

虽然在推导方程时, 利用了不可压缩条件, 认为密度处处均匀. 但模拟结果给出密度随温度变化. 在高温的地方密度小, 在低温的地方密度大. 上下最大密度差为  $\Delta\rho = 0.3$ . 这种情况显示出模型与实际流体一样具有一定的压缩性. 这使我们有可能用格子气自动机模型模拟由于热传导引起的流体不稳定性. (如 Benard 不稳定性).

## 2. Couette 流

1) 绝热边界情况 在绝热情况下,  $\epsilon$  为常数, 在模拟中  $\epsilon = 1$ . 设上板静止, 下板以速度  $v_0$  向右移动. 这种情况下, 方程(12)变为

$$v \frac{\partial u}{\partial y^2} = 0 \quad (19)$$

其解为  $u = v_0(1 - y/L) = v_0(1 - y^*)$ . (20)

因此理论上速度分布也是一直线.

绝热边界很容易实现, 只要保持入射粒子速度与反射粒子速度大小一样. Couette 流的静止板用无滑移边界条件来模拟, 使入射粒子速度方向与反射粒子速度方向相反. 在下板用滑移边界条件, 使粒子在下板弹性反射. 并对粒子施加一个沿  $x$  方向的外力, 使其速度方向发生偏转. 如图 5 所示.

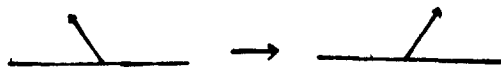


图 5 在下板施于粒子一偏转力, 用以模拟移动板.

模拟结果给出温度分布几乎处处相等, 可认为是均匀的. 速度分布如图 6 所示. 速度

随  $y$  的变化几乎为一直线, 所以与理论上预计的一样, 较好地模拟了 Couette 流的流场分布.

2) 有温差情况 设上板的温度为  $\epsilon_2$ , 下板的温度为  $\epsilon_1$ , 则方程(13)为

$$k \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial y^2} = -v \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right). \quad (21)$$

将(20)式代入(21)式中, 求出解为

$$\epsilon = \frac{1}{2} B (1 - y^*) y^* + (\epsilon_2 - \epsilon_1) y^* + \epsilon_1, \quad (22)$$

其中  $B = \gamma v_0^2 / k$ .

模拟时上板施加高温条件  $\epsilon_2 = 1.5$ , 下板为低温条件  $\epsilon_1 = 0.5$ . 温度分布如图 7 所示. 基本上与方程(22)预计的一样, 体现了 Couette 流的温度分布特征.

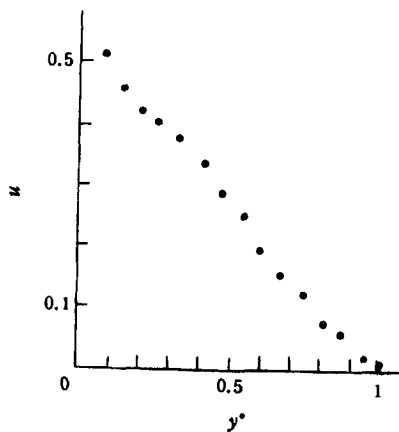


图 6 绝热边界下 Couette 流的速度分布

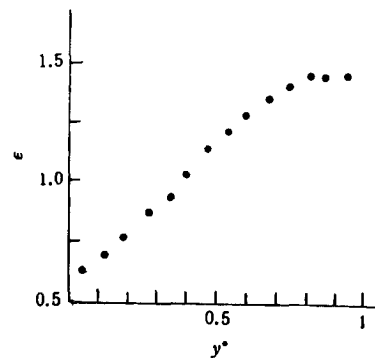


图 7 有温差时 Couette 流的温度分布

从上面的模拟结果看到, 12bit 模型的模拟结果与理论符合得比较好, 因此可以用来模拟流体的热传导现象. 由于格子气自动机的并行性, 无截断误差, 边界容易施加, 使其将在研究流体的行为中发挥一定的作用.

- [1] U. Frish, B. Hasslecher and Y. Pomeau, *Phys. Rev. Lett.*, **56**(1986), 1505.
- [2] G. D. Doolen, *Physica*, **47D**(1991), 1.
- [3] A. Lawnizak, D. Dab, R. Kapral and J. P. Boon, *Physica*, **47D**(1991), 132.
- [4] F. Lin and N. Goldenfeld, *Physica*, **47D**(1991), 124.
- [5] H. NaKaniski, *Phys. Rev.*, **A43**(1991), 6613.
- [6] B. Chapard and M. Droz, *Phys. Lett.*, **A26**(1988), 476.
- [7] S. Chen, M. Lee, K. H. Zhao and G. D. Doolen *Physica*, **37D**(1989), 42.
- [8] S. Chen, H. Chen, G. D. Doolen, S. Gutman and M. Lee *J. Stat. Phys.*, **62**(1992), 1153.
- [9] S. Wolfram, *J. Stat. Phys.*, **45**(1986), 471.
- [10] S. Chapman, *Philos. Trans. Roy. Soc. London Ser. A*, **216**(1916), 279.

**SIMULATION OF TEMPERATURE DISTRIBUTION IN REST  
FLOW AND COUETTE FLOW BY USING 12 BIT  
LATTICE GAS AUTOMATON MODEL**

LIU MU-REN KONG LING-JIANG

*Department of Physics, Guangxi Normal University, Guilin 541001*

(Received 5 August 1992)

**ABSTRACT**

To understand thermal properties in lattice gas automata, a twelve bit multispeed model on **hexagonal** lattice is used to simulate rest flow and Couette flow. Simulating results are compared with theoretical results and some useful conclusion are drawn.

**PACC:** 0540