

用格子 Boltzmann 模型模拟垂直平板间的热对流^{*}

赵 颖^{1,2)} 季仲贞¹⁾ 冯 涛¹⁾

¹⁾中国科学院大气物理研究所大气科学和地球流体力学数值模拟国家重点实验室,北京 100029)

²⁾中国人民解放军理工大学理学院,南京 211101)

(2003 年 5 月 26 日收到,2003 年 7 月 9 日收到修改稿)

引入一个新的能量分布函数,利用该能量分布函数与粒子速度分布函数耦合来求解一个热流场.因而,这一能量分布函数与粒子速度分布函数和 Boltzmann 方程构成了一个新的格子 Boltzmann 模型.这一模型满足质量、动量和能量守恒的准则.用该模型对垂直平板间的狭缝热对流进行了数值模拟,数值结果表明,在 Prandtl 数为 1, Grashof 数在 $1.3 \times 10^2 - 1 \times 10^6$ 之间时,流场将出现多个旋涡结构的流型.得出了与 Lee 相一致的结论.

关键词:能量分布函数, Boltzmann 方程, 热对流

PACC: 0340, 0340G, 0340K

1. 引 言

从微观的观点出发,宏观的流体是由大量微观粒子所构成,正是由于微观粒子的无规则热运动才使流体产生各种复杂的物理现象.流体的流动总是伴随着能量、动量以及扩散输送等过程,在这一不可逆过程中任一瞬时系统总是处于非平衡状态.在非平衡态的统计理论中,关键问题是求粒子状态分布函数.目前人们在研究非平衡态问题时都采用非平衡态的粒子速度分布函数所满足的微积分方程——Boltzmann 方程.格子 Boltzmann 模型是以 Boltzmann 方程为基本动力学方程并借助于现代计算机技术发展而来的一种数值流体力学方法.格子 Boltzmann 模型作为一种完全时间、空间离散的动力学模型,不需要建立和求解复杂的偏微分方程,它为各种复杂现象的理论探讨和计算机模拟提供了有效手段.同时,格子 Boltzmann 模型作为一种数值计算方法,符合当代计算方法研究的基本法则——问题原型的基本特征在离散后应尽可能地得到保持,即该模型严格地满足质量守恒、动量守恒和能量守恒准则^[1-3].另外,格子 Boltzmann 模型也适合于处理各种复杂边界条件,因而,该模型在模拟各种复杂系统物理现象等方面得到了广泛的应用.

本文在文献 [4-11] 的基础上引入了一个新的具有三阶精度的内能分布函数,使微观和宏观守恒理论更加完善.改进后的模型不仅保持了数值稳定、精度好的优点,并且能够克服热格子 Boltzmann 模型受流体内能变化范围小的限制以及其不稳定的缺点.这一模型能更有效、更适合于一般热流场的数值模拟.

热对流的数值计算在机械和建筑设计等领域得到了广泛的应用.动力设备中的冷却散热系统、热变换器、精密半导体集成电路、水暖系统以及各种化工设备中传热散热热流场都具有狭缝热对流的特征,因此对狭缝热流场的研究引起了广泛的注意. Lee 和 Korpela 利用宏观流体力学的差分方法对二维垂直狭缝间的热流场做了较详细的研究,给出了在各种不同的 Grashof 数 Gr 条件下流场的温度和流动结构特征. Feng 等人用格子 Boltzmann 模型对水平放置的两平板间 Rayleigh-Benard 对流流场做了数值计算并给出了几个不同 Grashof 数条件下温度和流场的结构流形. Gustavsen 用红外仪器测量法和数值软件解析法对具有铝窗户框以及 PVC 塑料窗户框结构的双层玻璃间的热流场进行了研究,得出了很多有实用价值的实验结果.本文用该格子 Boltzmann 模型同样对垂直平板间的狭缝热对流进行了数值计算研究,并给出了温度场、流场和涡度场随时间的变

^{*} 国家重点基础研究发展规划项目(批准号:G1999032801)资助的课题.

化规律,得出了与 Lee 和 Korpela 较一致的数值结果,从而验证了改进后这一格子 Boltzmann 模型的可靠性.

2. 格子 Boltzmann 模型

根据 Boltzmann 的 H 定理,处在非平衡状态的系统总是以绝对的优势概率趋向平衡态.正因为如此,格子 Boltzmann 模型才能简化为如下的动力学演化方程:

$$f_{ki}^c(r_\alpha, t) = f_{ki}(r_\alpha, t) - \Omega_{ki}, \quad (1a)$$

$$E_{ki}^c(r_\alpha, t) = E_{ki}(r_\alpha, t) - \Omega_{eki}, \quad (1b)$$

$$f_{ki}(r_\alpha + c_{kia}\delta t, t + \delta t) = f_{ki}^c(r_\alpha, t) + F_{kia} \quad (2a)$$

$$E_{ki}(r_\alpha + c_{kia}\delta t, t + \delta t) = E_{ki}^c(r_\alpha, t), \quad (2b)$$

$$i = 0, 1, 2, \dots, b; k = 1, 2, 3, \dots, n,$$

式中 $f_{ki}(r_\alpha, t)$ 和 $E_{ki}(r_\alpha, t)$ (≥ 0) 为粒子速度和能量分布函数, $f_{ki}^c(r_\alpha, t)$ 和 $E_{ki}^c(r_\alpha, t)$ 为碰撞后的粒子速度和能量分布函数, c_{kia} 为沿 i 方向运动的粒子速度, i 为粒子运动方向数, k 为流体种类, c_{kia} 在所有方向上都有一个相同的模, $|c_{kia}| = c_k = \text{const.}$, $c_{k0\alpha} = 0$, α 为坐标指数, Ω_{ki} 和 Ω_{eki} 为碰撞函数,表示由于碰撞过程而引起 $f_{ki}(r_\alpha, t)$ 和 $E_{ki}(r_\alpha, t)$ 的改变率, F_{kia} 为浮力效应^[8-10],

$$F_{kia} = \begin{cases} \delta \text{tg} \eta \frac{f_{ki}}{c_{kia}}, \\ 0, & i = 0, \end{cases}$$

α 取与重力垂直的方向指标, g 为重力加速度, η 为浮力强度系数, δt 为离散时间步长.

格子 Boltzmann 模型把流体运动分成两部分:流体微团碰撞和迁移过程.其中方程(1a)和(1b)代表流体微团的碰撞过程,方程(2a)和(2b)代表碰撞后流体微团的迁移过程. $f_{ki}^c(r_\alpha, t)$ 和 $E_{ki}^c(r_\alpha, t)$ 沿 i 方向运动并与其相邻的格子点做质量和能量交换;在流体微团碰撞松弛过程中,每个格点处的分布函数 $f_{ki}(r_\alpha, t)$ 和 $E_{ki}(r_\alpha, t)$ 都向它的局部平衡状态松弛.即 BGK(Bhatnagar, Gross, Krook)单一粒子分布函数松弛模型^[2,3]:

$$\Omega_{ki} = \frac{1}{\tau} [f_{ki}(r_\alpha, t) - f_{ki}^{\text{eq}}(r_\alpha, t)],$$

$$\Omega_{eki} = \frac{1}{\tau} [E_{ki}(r_\alpha, t) - E_{ki}^{\text{eq}}(r_\alpha, t)],$$

τ 为弛豫时间系数, f_{ki}^{eq} 为当地粒子平衡速度分布函数,碰撞函数 Ω_{ki} 满足局部质量、动量和能量守恒,

即 $\sum_k \sum_i \Omega_{ki} = \sum_k \sum_i \Omega_{eki} = 0$, $\sum_k \sum_i \Omega_{ki} c_{kia} = \sum_k \sum_i \Omega_{eki} c_{kia} = 0$.利用 Chapman-Enskog^[11]展开法, $f_{ki} = f_{ki}^{(0)} + f_{ki}^{(1)} + f_{ki}^{(2)} + \dots + O(\epsilon^n)$, $f_{ki}^{(0)} = f_{ki}^{\text{eq}}$, $\partial^n f_{ki}^{(n-1)} = O(\epsilon^n)$, $n = 1, 2, 3, \dots$,可以从定义方程^[1-3]得出微观粒子微团和宏观流体质量、动量和能量之间应该满足如下准则:

$$[\rho, \rho u_\alpha]^f = \left[\begin{array}{c} \sum_k \sum_i f_{ki}^{\text{eq}} \\ \sum_k \sum_i f_{ki}^{\text{eq}} c_{kia} \end{array} \right], \quad (3a)$$

$$[E, E u_\alpha]^f = \left[\begin{array}{c} \sum_k \sum_i E_{ki}^{\text{eq}} \\ \sum_k \sum_i E_{ki}^{\text{eq}} c_{kia} \end{array} \right], \quad (3b)$$

E 为流体的内能.为了能正确获得动量方程,动量通量、动能通量还应满足,

$$P \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta = \sum_k \sum_i f_{ki}^{\text{eq}} c_{kia} c_{ki\beta}, \quad (4)$$

$$P(u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\alpha\gamma} + u_\gamma \delta_{\alpha\beta}) + \rho u_\alpha u_\beta u_\gamma = \sum_k \sum_i f_{ki}^{\text{eq}} c_{kia} c_{ki\beta} c_{ki\gamma}, \quad (5)$$

$$\delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1, & \alpha = \beta, \\ 0, & \alpha \neq \beta, \end{cases}$$

式中 P 为压力, ρ 和 u_α 分别为流体的密度和速度.当地粒子平衡速度和能量分布函数采用如下 Maxwell 型分布^[4-8]:

$$f_{ki}^{\text{eq}} = W_i \rho_k \left(1 - 2B_k c_{kia} u_\alpha + 2B_k^2 c_{kia} c_{ki\beta} u_\alpha u_\beta + B_k u^2 - 2B_k^2 c_{kia} u_\alpha u^2 - \frac{4}{3} B_k^3 c_{kia} c_{ki\beta} c_{ki\gamma} u_\alpha u_\beta u_\gamma \right), \quad (6a)$$

$$E_{ki}^{\text{eq}} = W_i e_k \left(1 - 2B_k c_{kia} u_\alpha + 2B_k^2 c_{kia} c_{ki\beta} u_\alpha u_\beta + B_k u^2 - 2B_k^2 c_{kia} u_\alpha u^2 - \frac{4}{3} B_k^3 c_{kia} c_{ki\beta} c_{ki\gamma} u_\alpha u_\beta u_\gamma \right), \quad (6b)$$

式中 W_i 和 B_k 为由上述守恒准则决定的常系数, e_k 为流体的内能密度.将 f_{ki}^{eq} 代入准则方程(3a)(3b), (4)和(5),可相应地解得系数 W_i 和 B_k .这里只给出 D2Q9 型离散格子所对应的系数:

$$W_0 = \frac{18 - 5D}{18}, \quad W_1 = \frac{2D}{9b_1}, \quad W_2 = \frac{D}{18b_2},$$

$$B_k = -\frac{3}{2c_k^2}, \quad P = \frac{\rho c^2}{3},$$

式中 D 为空间维数, b_1 和 b_2 为格子方向线数, W_0 , W_1 和 W_2 分别为静止粒子的权和运动粒子的权.

3. 流体力学方程

一个格子 Boltzmann 模型是否能正确模拟宏观

流体力学现象,在理论上可通过还原流体力学方程的方法来证明.利用 Taylor 级数展开法将方程(2b)等号左侧的项关于时间 δt 和空间 $c_{kia} \delta t$ 分别展开到一阶和两阶,并借助于 Chapman-Enskog 展开和文献[1]的流体力学方程导出方法,可得由一阶小量构成的方程为

$$\alpha(\epsilon^1): \frac{\partial E_{ki}^{eq}}{\partial t} + c_{kia} \frac{\partial E_{ki}^{eq}}{\partial r_a} = -\frac{1}{\tau \delta t} E_{ki}^{(1)}, \quad (7)$$

由二阶小量构成的方程为

$$\alpha(\epsilon^2): \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \left(\frac{\partial E_{ki}^{(1)}}{\partial t} + c_{kia} \frac{\partial E_{ki}^{(1)}}{\partial r_a}\right) = -\frac{1}{\tau \delta t} E_{ki}^{(2)}, \quad (8)$$

将方程(7)代入方程(8)得

$$\alpha(\epsilon^2): -\tau \delta t \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \left(\frac{\partial^2 E_{ki}^{eq}}{\partial t^2} + 2c_{kia} \frac{\partial^2 E_{ki}^{eq}}{\partial t \partial r_a} + c_{kia} c_{kij} \frac{\partial^2 E_{ki}^{eq}}{\partial r_a \partial r_j}\right) = -\frac{1}{\tau \delta t} E_{ki}^{(2)}. \quad (9)$$

由方程(7)和(9)相加,得

$$\begin{aligned} & \alpha(\epsilon^1) + \alpha(\epsilon^2): \\ & \frac{\partial E_{ki}^{eq}}{\partial t} + c_{kia} \frac{\partial E_{ki}^{eq}}{\partial r_a} - \tau \delta t \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \\ & \times \left(\frac{\partial^2 E_{ki}^{eq}}{\partial t^2} + 2c_{kia} \frac{\partial^2 E_{ki}^{eq}}{\partial t \partial r_a} + c_{kia} c_{kij} \frac{\partial^2 E_{ki}^{eq}}{\partial r_a \partial r_j}\right) \\ & = -\frac{1}{\tau \delta t} E_{ki}^{neg}, \end{aligned} \quad (10)$$

对(10)式求和,得

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial Eu_a}{\partial r_a} &= \tau \delta t \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \\ & \times \left(\frac{\partial^2 E}{\partial t^2} + 2\frac{\partial^2 Eu_a}{\partial t \partial r_a} + \frac{c^2}{3} \frac{\partial^2 E}{\partial r_a^2} + \frac{\partial^2 Eu_a u_a}{\partial r_a^2}\right), \end{aligned} \quad (11)$$

即

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial Eu_a}{\partial r_a} &= \frac{c^2 \delta t}{3} \left(1 - \frac{1}{2}\right) \left(\frac{\partial^2 E}{\partial r_a^2} + E \frac{Du_a}{Dt}\right), \quad (12) \\ \kappa &= \frac{c^2 \delta t}{3} \left(1 - \frac{1}{2}\right), \quad \frac{Du_a}{Dt} = \frac{\partial u_a}{\partial t} + u_\beta \frac{\partial u_a}{\partial r_\beta}, \end{aligned}$$

式中 κ 为扩散系数.关于连续方程和动量方程的导出过程参阅文献[1—10]本文只给出结果.

$$\rho \frac{\partial u_a}{\partial t} + \rho u_\beta \frac{\partial u_a}{\partial r_\beta} = -\frac{\partial P}{\partial r_a} + \Delta \rho g k + \rho \nu \frac{\partial^2 u_a}{\partial r_a \partial r_\beta}, \quad (13)$$

$$\Delta \rho = \eta \rho = \rho - \rho_0,$$

$$\nu = \frac{c^2 \delta t}{3} \left(\tau - \frac{1}{2}\right),$$

式中 ρ_0 为在静平衡状态下的流体密度, ν 为动黏性系数, k 为单位垂直矢量.根据浮力原理,当方程(13)中的浮力强度系数 η 大于零时,流体趋向于上升,相对应的上升粒子数量趋向于增多,相反,当其小于零时,流体趋向于下沉,相对应的下降粒子数量也趋向于增多.对于热对流而言热流体是上升的,而冷流体是下沉的.

4. 数值计算

数值计算是模拟两块垂直平板狭缝间的非等温流场的热对流现象,这一流场类似于建筑物中双层玻璃间的温度场结构特征,其中左平板为高温加热面,其他三个面为低温面.在热流场中由于温度不同会引起密度波动进而形成浮力.浮力是流体运动的驱动力.自然对流就是在浮力驱动下的一种热流体扩散现象.在这里用红粒子 f_{ri} 代表热流体,冷流体用蓝粒子 f_{bi} 代表.其浮力效应 F_{kia} 与 Grashof 数的关系为^[8]

$$F_{kia} = \pm \frac{Gr \rho_0 c_k (\tau - 0.5) f_{ki}}{9 \rho N^3 c_{kia}},$$

式中 N 为离散的格子数.浮力效应 F_{kia} 的正负分别表示上升的热粒子 f_{ri} 和下沉的冷粒子 f_{bi} 的增多(下标 b 和 r 分别表示冷流体和热流体). Prandtl 数为

$$Pr = \frac{\nu}{\kappa} = 1.$$

在流场中计算的边界和初始条件设定为:取左右边界的长度作为特征长度 $X_{\max} = L = 1$,离散的格子数量 $N = 20$,左右垂直边界的高度为 $Y_{\max} = H = 20L$,初始流场为静止状态 $u_0 = 0.0$.冷流体 $\rho_b = 1.0$,冷粒子速度为 $c_b = 1.0$.热流体 $\rho_r = 0.15$,热粒子速度为 $c_r = 2.0$,弛豫时间系数 $\tau = 0.501$.上下边界采用绝热边界条件,左右边界采用热通量边界条件^[8].热通量边界条件设定为:当冷粒子与热边界相撞时,将有一部分冷粒子被加热而变成热粒子,相反,当热粒子与冷边界相撞时,将有一部分热粒子被冷却而变成冷粒子,即考虑在冷热边界上有热量输出和输入(文献[8]给出了热通量密度 q 与冷热粒子间转换系数的关系).在这一数值计算里,取左右两侧输入和输出的热通量相等,即系数 $\alpha_h = \alpha_c = 1.0$.

图1至图3分别给出对应于三个不同 Grashof 数的计算结果.在 $Gr = 13000$ 时,图1(a)给出多涡

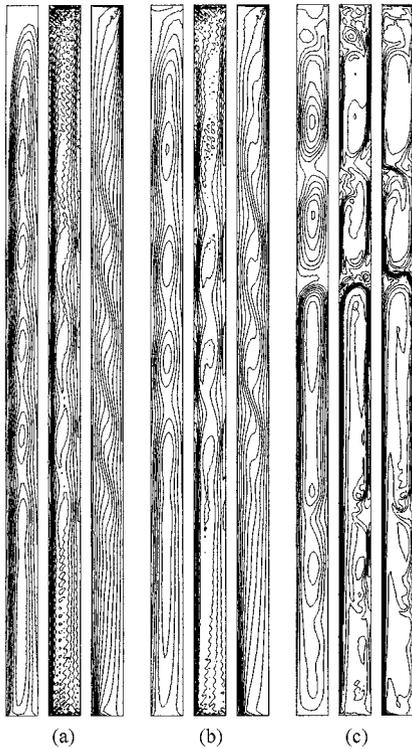


图1 计算时间 $t = 300000$ 步时的数值结果
Grashof 数分别为: (a) 13000, (b) 100000, (c) 1000000. 每一组图中从左到右分别为流线、等温度线和等内能线

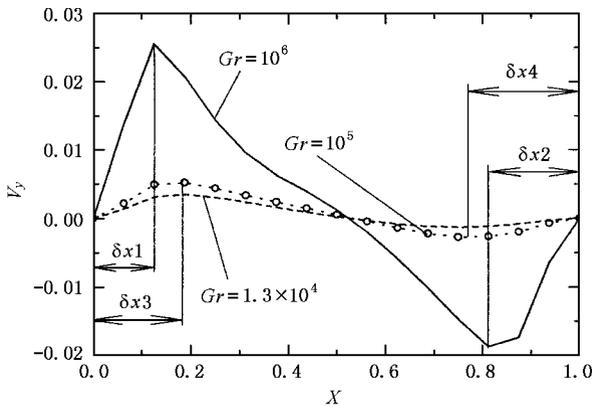


图2 计算时间 $t = 300000$ 步时,在垂直高度 $Y = H/2$ 处速度分量 V_y 沿坐标 X 轴的分布曲线

结构的流型,在流场中出现了5个漩涡.对于 $Gr = 11000$ 时,我们也做了计算,但并没有出现这种多涡结构的流型,流场仍然是稳定的.这说明 $Gr = 13000$ 可能已经接近其临界值.根据线性预测理论,对于以空气($Pr = 0.71$)为流体介质的这种垂直狭缝热对流而言,其判断流场不稳定的临界值为 $Gr =$

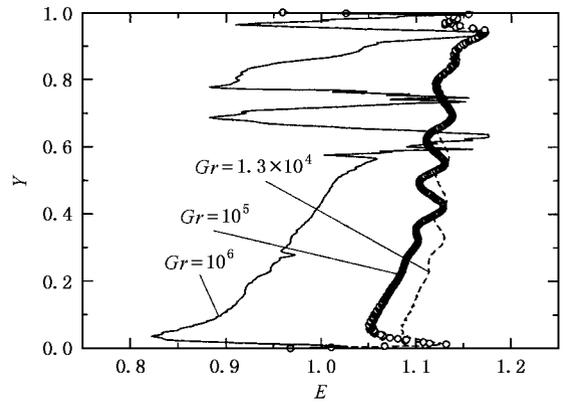


图3 计算时间 $t = 300000$ 步时,在靠近左侧加热面第一排格子点 $X = L/20$ 处内能沿坐标 Y 轴的分布曲线

8038^[11]. 我们给出的 Grashof 数临界值与理论值相差较大的主要原因应该是 Prandtl 数不同而引起的.理由是 Lee 和 Korpela 也给出了 $Pr = 0, Pr = 0.71$ 和流场长细比 $H/L = 20$ 的临界 Grashof 数分别为 $Gr = 8000$ 和 $Gr = 11000$. 他们给出的临界 Grashof 数与理论预测值同样相差较大,但与以空气为介质的物理模拟实验测定值 $Gr = 11000 \pm 510$ ^[11] 相一致. Lee 和 Korpela 的数值结果也说明临界 Grashof 数的大小是与 Prandtl 数的大小成正比,这是因为 Prandtl 数大说明流体介质的动黏性系数也大,流体不易流动,也就不易失去稳定性.因此,我们这一数值计算给出的临界 Grashof 数也比较准确.图2给出垂直速度分量 V_y 在流场中部 $Y = H/2$ 处分布数值计算结果.从图2可以看出,在热边界一侧的边界层厚度 $\delta x1$ 和 $\delta x3$ 明显地小于冷边界一侧的相对应的边界层厚度 $\delta x2$ 和 $\delta x4$. 在热边界一侧速度分量 V_y 的震动幅度也明显地大于冷边界一侧的幅度,而且其幅度是随着 Grashof 数的增大而增大.图3给出加热面附近边界层内的内能分布曲线.从图3可以看出,Grashof 数小时内能分布曲线的波动幅度也较小,当 Grashof 数达到 10^6 时,流场的上半部内能的波动幅度和频率明显加剧,从流线图(图1(c))中也可以看出,流动已接近湍流状态.边界层内能波动幅度强弱的位置也与流线图中的漩涡位置相对应,这是因为湍流对流传热起到了主要的作用.

5. 结 论

在热流场计算中,人们所关心的特征参数是临界 Grashof 数,它是判断热流场从稳定状态向不稳定

流动状态转变的一个最基本特征参数。根据线性理论和实验结果^[14],对于水平放置并在底部加热的两平板间以空气($Pr = 0.71$)为介质的热流场而言,其临界 Grashof 数约为 $1700^{[14]}$ 。当上平板不存在而为自由表面时,其临界 Grashof 数约为 1100。实验结果和数值计算说明,流场加热位置的不同,临界 Grashof 数也会有很大差异。相同的流场将其旋转

90° 把从底部加热改变成侧面加热时,临界 Grashof 数会从 1700 变为 $11000 \pm 510^{[11]}$ 。我们对 $Pr = 1.0$ 的热流场计算所得出的结论是临界 Grashof 数为 13000。另外,从流线和等温度线也可以说明,利用能量分布函数与粒子速度分布函数耦合求解一个热流场的思路是可行的,本研究所建立的这一格子 Boltzmann 模型完全适合于热流场的数值模拟。

- [1] Frisch U *et al* 1987 *Complex Syst.* **1** 649
- [2] McNamara G and Alder B 1993 *Physica A* **194** 218
- [3] Alexander F J, Chen S and Sterling D 1993 *Phys. Rev.* **47** 2249
- [4] Feng S D and Tsutahara M 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1006 (in Chinese) 冯士德、鸟原道久 2001 物理学报 **50** 1006]
- [5] Feng S D *et al* 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1207 (in Chinese) [冯士德等 2001 物理学报 **50** 1207]
- [6] Feng S D and Tsutahara M 2001 *Chin. Phys. Lett.* **10** 587
- [7] Feng S D *et al* 2001 *Chin. Phys. Lett.* **10** 1106
- [8] Feng S D, Ren R C and Ji Z Z 2002 *Chin. Phys. Lett.* **19** 79
- [9] Feng S D, Yang J L and Gao X L 2002 *Chin. Phys. Lett.* **19** 358
- [10] Feng S D, Zhao Y, Gao X L and Ji Z Z 2002 *Chin. Phys. Lett.* **19** 814
- [11] Lee Y and Korpela S A 1983 *J. Fluid Mech.* **126** 91
- [12] Gustavsen A, Griffith B T and Arasteh D 2001 *ASHRAE Transactions* **107** 1
- [13] Champman S and Cowling T G 1970 *The Mathematical Theory of Non-Uniform* (Cambridge : Cambridge University Press)
- [14] Koschmieder E L 1993 *Bénard Cells and Taylor Vortices* (Cambridge : Cambridge University Press)

Simulation of thermal convection in a vertical slot using the lattice Boltzmann model^{*}

Zhao Ying^{1,2)} Ji Zhong-Zhen¹⁾ Feng Tao¹⁾

¹⁾ State Key Laboratory of Numerical Modelling for Atmospheric Sciences and Geophysical Fluid Dynamics, Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029, China)

²⁾ Institute of Science, PLA University of Science and Technology, Nanjing 211101, China)

(Received 26 May 2003 ; revised manuscript received 9 July 2003)

Abstract

A new distribution function of energy is introduced and coupled with a velocity distribution function of particle and applied to study a hot fluid field. Thus, a new lattice Boltzmann model is constructed by both energy and velocity distribution functions and Boltzmann equation in the BGK form, which satisfies the conservation criteria of mass, momentum and energy. Thermal convection in a vertical slot is calculated by using the present lattice Boltzmann model. The numerical results have shown that multi-vortexes in the flow field will take place for Prandtl number $Pr = 1$ and Grashof number $1.3 \times 10^2 < Gr < 1 \times 10^6$. The numerical results are in good agreement with Lee's studies.

Keywords : distribution function, Boltzmann equation, thermal convection

PACC : 0340, 0340G, 0340K

^{*} Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. G1999032801).