

基于能量均分原理的微颗粒布朗运动 LBM 模拟

张鸿雁, 姜继鼎, 朱洪宇, 崔海航, 陈 力

(西安建筑科技大学 环境与市政工程学院, 陕西 西安 710055)

摘要: 基于格子 Boltzmann 方法(LBM)结合 Ghost Fluid 边界格式和格线反弹格式建立了模拟微颗粒布朗运动的动力学模型, 在不添加能量方程的情况下, 利用能量均分原理对郎之万方程中的布朗力直接执行修正, 相对于涨落 LBM 模型大幅降低了计算量, 降低了 LBM 的人工压缩性和等温假设带来的误差, 提高了计算精度. 本文模拟了二维圆型颗粒和三维球型颗粒的布朗运动, 结果表明, 采用该方法模拟所得颗粒运动的平动温度与转动温度均可以达到稳定的热平衡, 且与周围流体的温度基本一致, 颗粒运动的均方位移与观察时间间隔符合实验结果和理论解, 验证了该方法的可行性与准确性.

关键词: 布朗运动; 格子 Boltzmann 方法; Ghost Fluid; 郎之万方程

中图分类号: O359

文献标志码: A

文章编号: 1006-7930(2017)04-0561-04

LBM simulation of microparticle brownian motion based on the energy equipartition principle

ZHANG Hongyan, JIANG Jiding, ZHU Hongyu, CUI Haihang, CHEN Li

(School of Environment and Municipal Engineering, Xi'an Univ. of Arch. & Tech., Xi'an 710055, China)

Abstract: This paper built a dynamic model for the simulation of micro-particles Brownian motion, which combined the lattice Boltzmann method(LBM) and a Ghost Fluid / Link-bounce-back boundary scheme. Without the addition of the energy equation, the Brownian force in the Langevin equation was directly corrected by the energy equipartition principle. With the premise of ensuring the accuracy and reducing the compressibility of error, this means greatly reduced the price of computation relative to fluctuation LB method. The article simulated a Brownian motion of two-dimensional circular particle and three-dimensional spherical particles. The results showed that the translational temperature and rotational temperature of micro-particle motion using the method could satisfy stable thermal equilibrium, and agree with the temperature of surrounding fluid eventually. The mean square displacement of the particle motion and the observation time interval satisfied the Einstein relation. The method was proved to be reasonable and practicable.

Key words: Brownian motion; lattice Boltzmann method; Ghost Fluid; Langevin equation

悬浮于流体中的微小颗粒会永不停息地做无规则运动, 即布朗运动^[1]. 其本质是分子热运动的涨落现象, 做布朗运动的粒子尺寸一般都在微米量级以下. 考虑到布朗运动的颗粒处于微纳尺度, 所以宏观模拟方法存在局限性. 目前数值模拟研究手段主要以微观方法为主, 如分子动力学方法、布朗动力学方法和蒙特卡罗方法等. 而格子 Boltzmann 方法(Lattice Boltzmann Method, LBM)是最近发展起来的一种可以高效处理复杂流动问题的数值模拟方法^[2]. 该方法具有编程简单, 易于并行计算, 方便处理复杂运动边界等优点, 为研究微颗粒布朗运动提供了新的思路.

随着 LBM 的兴起, 涨落动力学(Fluctuating Hydrodynamics)被引入 LBM 中, 形成了涨落-格子 Boltzmann 模型^[3](Fluctuating Lattice Boltzmann, FLB), 其通过在控制方程中附加随机应力项来描述流体中的热涨落, 颗粒受到的布朗力直接由流体分子的热运动产生, 因此涨落动力学方法比布朗动力学等方法更接近物理事实, 目前已经成功用于模拟微颗粒的运动, 但由于该方法需要额外的算法来生成附加随机应力项, 大幅增加了计算开销. 相比之下, 基于郎之万方程的数值模拟方法直接在运动方程中引入了布朗力和力矩, 相对于普通的粒子运动问题几乎没有增加计算量,

收稿日期: 2016-04-08 修改稿日期: 2017-07-15

基金项目: 国家自然科学基金应急管理项目理论物理专款(11447133); 国家自然科学基金青年基金(11602187); 陕西省教育厅专项科研计划(15JK1385); 陕西省自然科学基金基础研究计划青年人才项目(2016JQ1008)

第一作者: 张鸿雁(1961—), 女, 博士, 教授, 主要从事环境流体力学方面的研究, E-mail: zhanghongyan@xauat.edu.cn

通讯作者: 陈 力(1985—), 男, 博士, 讲师, 主要从事环境流体力学方面的研究. E-mail: jasonchencl@163.com

计算效率明显高于 FLB 方法.

无论是基于 FLB 还是郎之万方程的方法在常用的 LBM-BGK 纯流动模型中计算所得的颗粒平动和转动温度与周围流体温度都不一致, 误差约 5%~20%^[4]. 因此, 本文将从提高计算效率和降低计算误差两个角度着手展开工作. 此外, 曲面边界及动边界处理是 LBM 需要解决的难点问题. 本文采用的 Ghost Fluid 浸没边界格式属于锐化浸没边界(Sharp-interface Immersed Boundary)格式^[5], 其可以有效避免数值滑移现象, 保证计算精度和稳定性.

综上所述, 本文基于目前 LBM 中最常用的“DnQb 模型”^[6], 在不添加能量方程的前提下, 利用能量均分原理, 通过修正郎之万方程中的布朗力项来降低上述颗粒温度误差, 并借助 Ghost Fluid 浸没边界格式处理动边界, 通过动量交换方法计算流体对颗粒的阻力和阻力矩来模拟颗粒运动.

1 格子 Boltzmann 方法

1.1 格子 Boltzmann 方法概述

LBM 的演化方程为

$$f_i(x+c_i\delta_t, t+\delta_t)-f_i(x, t)=-\frac{1}{\tau}[f_i(x, t)-f_i^{eq}(x, t)] \quad (1)$$

式中: x 为空间坐标; c_i 为 i 方向的格子速度; δ_t 为离散时间步长; f_i 是以速度 c_i 运动的速度分布函数; τ 为松弛时间. 在确定初始条件以及边界条件后, 流场计算只是按式(1)演化. 其中平衡态分布函数 $f_i^{eq}(x, t)$ 可表示为^[6]

$$f_i^{eq}(x, t)=\omega_i\rho\left[1+\frac{c_i\cdot u}{c_s^2}+\frac{(c_i\cdot u)^2}{2c_s^4}-\frac{u^2}{2c_s^2}\right] \quad (2)$$

式中: ρ 为流体密度; u 为流体速度; 定义格点速度 $c=\delta_x/\delta_t$; δ_x 为空间步长; c_s 为声速; ω_i 为权系数. 宏观量可以由分布函数积分得到:

$$\rho=\sum_i f_i, \rho u=\sum_i c_i f_i \quad (3)$$

1.2 流固界面边界格式

边界条件的流体力学研究的一个重要领域, 在 LBM 中同样也占有重要的地位. 下面我们主要介绍应用中较为常见的几种无滑移边界条件.

格线反弹格式(Link-bounce-back, LBB)首先由 Ladd^[7]用 LBM 模拟粒子沉降流时提出, 其基本思想是将曲面边界简化为格线之间的折线, 然后对于折线边界两侧的格点进行半步长反弹, 并且加入壁面的运动对流体分布函数的影响修正项. 实

际上格线反弹格式将光滑的曲边界变成了粗糙的边界, 如果网格分辨率足够高, 它的确是一种简单稳定的边界处理方法. 在流动步中, 所有流向固体的粒子点都会反弹回来, 其他的流体节点则做正常的流动.

Ghost Fluid 浸没边界格式(Ghost Fluid immersed Boundary Method)由 Tiwari^[5]等人从 Tseng 课题组提出的有限差分法的 Ghost Fluid 方法^[8]中引入, 它利用镜像关系求解边界未知固体点的方法来实现流固边界的处理. 但其计算开销多于 LBB 格式, 且实现也较为复杂.

2 颗粒运动方程

2.1 郎之万方程

对于布朗运动来说, 颗粒所受流体的作用力可分成布朗力和流体阻力, 描述其颗粒运动的郎之万方程如下所示:

$$M\frac{dU}{dt}=F^S+F^B, J\frac{d\Omega}{dt}=T^S+T^B \quad (4)$$

式中: U 和 Ω 为布朗颗粒的速度和角速度; M 和 J 为颗粒的质量和转动惯量; F^S 和 T^S 为颗粒所受的流体阻力和阻力矩; F^B 和 T^B 为颗粒所受流体的布朗力和力矩.

对于流体作用于颗粒的阻力 F^S 与阻力矩 T^S , 本文通过 LBM 求解颗粒周围的流场, 采用动量交换的方法确定:

$$F^S=\sum_{x\in Q}\sum_{c_i\in\bar{c}_i}[f'_i(x, t)+f_i(x, t+\Delta t)]c_i \quad (5)$$

$$T^S=\sum_{x\in Q}\sum_{c_i\in\bar{c}_i}(x-x_c)\times[f'_i(x, t)+f_i(x, t+\Delta t)]c_i \quad (6)$$

式中: Q 是边界周围的流体格点中至少有一个速度方向指向固体虚拟点的集合; \bar{c}_i 是当前点指向虚拟点方向上的速度; \bar{i} 是 i 的反方向.

2.2 布朗力的确定

由于布朗力是一种随机力, 故假定布朗力 F_B 和布朗力矩 T_B 服从高斯白噪声分布, 对于给定格子时间步长 dt , 布朗力和力矩的计算可由下式确定:

$$F^B(1)=g_1\sqrt{2\xi_t k_B T/dt} \quad (7)$$

$$T^B(t)=g_2\sqrt{2\xi_r k_B T/dt} \quad (8)$$

式中: k_B 为 Boltzmann 常数; T 为流体温度; ξ_t 、 ξ_r 为平动摩擦系数和转动摩擦系数; g_1 、 g_2 为高斯随机向量, 其方向随机性由 g_1 、 g_2 的独立随机性体现.

关于布朗力的计算, 聂德明^[4]提出采用 Green-Kubo 关系式计算扩散系数, 通过数值模拟扩散系数修正布朗力, 并假定平动温度与转动温度相等, 这种方法虽然能在足够计算时间后使颗粒平动与转动处于相应的热平衡, 但不能满足颗粒温度与流体分子温度相同. 本文借鉴上述方法, 在模拟过程中先由式(7)~(8)对布朗力和布朗力矩设定初始值, 进行预模拟, 根据能量均分原理统计出颗粒的平动均方速度为 $k_B T^V/M$, 转动均方速度为 $k_B T^\Omega/J$, 进而得颗粒运动的平均温度 $\overline{T^V}$ 和 $\overline{T^\Omega}$, 然后依式(9)引入温度修正系数 α_1 和 α_2 , 对初始布朗力与布朗力矩执行修正, 最后进行正式模拟.

$$\alpha_1 = \sqrt{\frac{T}{\overline{T^V}}} \quad \alpha_2 = \sqrt{\frac{T}{\overline{T^\Omega}}} \quad (9)$$

表1 两次修正前后各参数的变化与误差

Tab. 1 Parameters changes and error before and after twice correction

参数	计算域	预模拟				正式模拟				理论值
		最大	误差	最小	误差	最大	误差	最小	误差	
F_B/g_1	200×200					0.017 8		0.017 2		~
	300×300		0.012(初始值)			0.018 0		0.017 6		
T_B/g_2	200×200					0.083 1		0.082 0		~
	300×300		0.056(初始值)			0.082 8		0.082 3		
$\langle U(0)U(0) \rangle^*$	200×200	0.765	23.43%	0.804	19.60%	1.036	3.56%	0.971	-2.87%	1
	300×300	0.796	20.32%	0.810	18.92%	1.020	2.05%	0.957	-4.34%	
$\langle V(0)V(0) \rangle^*$	200×200	0.781	21.89%	0.799	20.03%	1.013	1.31%	0.957	-4.28%	1
	300×300	0.772	22.78%	0.802	19.72%	1.023	2.32%	0.971	-2.87%	
$\langle \Omega(0)\Omega(0) \rangle^*$	200×200	0.806	19.31%	0.817	18.23%	1.014	1.42%	0.987	-1.29%	1
	300×300	0.755	24.39%	0.785	21.57%	1.001	0.14%	0.990	-1.05%	

表1给出了温度变量 $A=1 \times 10^{-5}$, 总时间步长 2×10^6 , 计算域为 200×200 和计算域为 300×300 时各参数在两次修正前后的变化与误差, 误差计算如式(11)所示:

$$error = \frac{|\varphi - \varphi_{theory}|}{\varphi_{theory}} \quad (11)$$

对比发现, 对于不同的计算域, 预模拟阶段平动均方速度和转动均方速度的误差都在 20% 左右, 且不同计算域的误差并没有明显差别, 说明此误差仅由颗粒运动的临近区域引起. 然而, 通过采用上述修正方法执行正式模拟后各参数误差均可有效控制在 5% 以内且不受计算域的影响, 由此可见采用能量均分定理修正布朗力和布朗力矩可有效减小模拟布朗运动的计算误差.

图1表示的是颗粒在温度变量 $A=1 \times 10^{-5}$ 时取不同初速度最终达到热平衡状态时的无量纲均方速度与 t^* 的关系, 分别设 $\langle U(0)U(0) \rangle = k_B T/M$ 、

引入修正系数后的郎之万方程为

$$M \frac{dU}{dt} = F^S + \alpha_1 F^B, \quad J \frac{d\Omega}{dt} = T^S + \alpha_2 T^B \quad (10)$$

3 结果与分析

3.1 二维颗粒布朗运动模拟

模拟中设为颗粒直径 $d=10$ (格子单位), 松弛时间 $\tau=1$, 流体密度 $\rho_f=1$, 颗粒密度 $\rho_p=1$, 动力粘度 $\mu=1/6$, 摩擦系数 $\xi_t=4.246$, $\xi_r=5.236$, 定义控制温度的变量 $A=2\mu k_B T$. 为了分析结果方便, 对时间和均方速度做无量纲化处理, 即: $t^* = \frac{tU}{d/2}$, $\langle U(0)U(0) \rangle^* = \frac{\langle U(0)U(0) \rangle}{k_B T/M}$, $\langle V(0)V(0) \rangle^* = \frac{\langle V(0)V(0) \rangle}{k_B T/M}$, $\langle \Omega(0)\Omega(0) \rangle^* = \frac{\langle \Omega(0)\Omega(0) \rangle}{k_B T/J}$.

$2k_B T/M$ 、 $3k_B T/M$, 其中 $k_B T/M = 3.820 \times 10^6$, 由布朗运动理论可知具有一定初速度的颗粒做布朗运动时, 会在一段时间之后遗忘本来的初速度而达到热平衡状态. 如图1所示, 虽然颗粒初速不同, 但当 t^* 大于 0.06 时, 颗粒速度会趋于一致而最终达到热平衡状态.

图2给出了初速度为 0 时不同温度下不同计算域颗粒运动的均方位移 (Mean Square Displacement, MSD) 与统计时间间隔 Δt 的关系, 这里的 Δt 是指上述对无量纲时间 t^* 的统计间隔. 由图可见, MSD 与统计时间间隔 Δt 趋于线性关系, 符合爱因斯坦布朗运动理论^[9]; 对比发现, 增大计算域, 颗粒运动的均方位移 MSD 范围不会改变, 同时上述关系也没有明显区别.

3.2 三维颗粒布朗运动模拟

模拟采用 D3Q15 模型, 计算域为 $50 \times 50 \times 50$ (格子单位), 直径为 6, 初始阶段直径 $2 \mu m$ 的球

坐标来看,四个类团的向心度都较低(都小于0.35),说明各类团与其他研究类团联系的数目和强度都比较小,其中建筑信息化类团和生产运行类团高于平均值,说明该两类研究内容处于我国BIM研究的中心地位.从战略坐标图纵坐标来看,四个类团的相对密度都较高(大于1),其中建筑信息化类团和生产运行类团高于平均值,表明类团内部的联系紧密,该两类研究趋于成熟,见图3.

(3)从研究领域的整体发展态势及研究演进图谱来看,本文预测未来我国BIM研究的发展方向:一是基于大数据下的BIM研究,如Cloud-BIM;二是实现BIM在项目全生命周期的综合应用.

参考文献 References

- [1] 何清华,杨德磊,郑弦.国外建筑信息模型应用理论与实践现状综述[J].科技管理研究,2015(3):136-141.
HE Qinghua, YANG Delei, ZHENG Xian. Survey on foreign theory and practice about BIM implementation [J]. Science and Technology Management Research, 2015(3): 136-141.
- [2] 吕坤灿,秦旋,王付海.基于社会网络分析的项目BIM应用模式比较研究[J].建筑科学,2017(2):138-147.
LÜ Kuncan, QIN Xuan, WANG Fuhai. A comparative study on BIM application modes based on social network analysis [J]. Building Science, 2017(2): 138-147.
- [3] 刘启元,叶鹰.文献题录信息挖掘技术方法及其软件SATI的实现:以中外图书情报学为例[J].信息资源管理学报,2012(1):50-57.
LIU Qiyuan, YE Ying. A study on mining bibliographic records by designed software SATI: case study on library and information science [J]. Journal of Information Resources Management, 2012(1): 50-57.
- [4] BILAL S, WILLY S, ANTHONY W. Measuring BIM performance: five metrics [J]. Architectural Engineering and Design Management, 2012(8): 120-142.
- [5] 纪博雅,戚振强.国内BIM技术研究现状[J].科技管理研究,2015(6):184-189.
JI Boya, QI Zhenqiang. BIM technology research status In China [J]. Science and Technology Management Research, 2015(6): 184-189.
- [6] 乐云,郑威,余文德.基于Cloud-BIM的工程项目数据管理研究[J].工程管理学报,2015(1):91-96.
LE Yun, ZHENG Wei, YU Wende. Cloud-BIM based construction project lifecycle data management [J]. Journal of Engineering Management, 2015(1): 91-96.
- [7] 何清华,钱丽丽,段云峰.BIM在国内外应用的现状及障碍研究[J].工程管理学报,2012(1):12-15.
HE Qinghua, QIAN Lili, DUAN Yunfeng. Current situation and barriers of BIM implementation [J]. Journal of Engineering Management, 2012(1): 12-15.

(编辑 桂智刚)

(上接第564页)

参考文献 References

- [1] HIDA T. Brownian motion [J]. Applications of Mathematics, 1980, 11: 44-113.
- [2] ZHANG J, KWOK D Y. Lattice boltzmann method (LBM)[M]. New York: Springer, 2015.
- [3] LADD A J C. Short-time motion of colloidal particles: Numerical simulation via a fluctuating lattice-Boltzmann equation [J]. Physical Review Letters, 1993, 70(9): 1339-1342.
- [4] 聂德明.颗粒沉降及其在流场中做布朗运动的研究[D].杭州:浙江大学,2011.
NIE D M. Research on the particles sedimentation and Brownian motion [D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2011.
- [5] TIWARI A, VANKA S P. A ghost fluid Lattice Boltzmann method for complex geometries [J]. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 2011, 69(2): 481-498.
- [6] QIAN Y H, HUMIERES D, LALLEMAND P. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation [J]. Euro physics Letters, 1992, 17(6): 479-484.
- [7] LADD A J. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 1. Theoretical foundation [J]. Journal of Fluid Mechanics, 1994, 271(1): 285-309, 83.
- [8] TSENG Y H, FERZIGER J H. A ghost-cell immersed boundary method for flow in complex geometry [J]. Journal of Computational Physics, 2003, 192(2): 593-623.
- [9] EINSTEIN A. Investigations on the theory of the Brownian movement [M]. Mineola, New York: Dover Publications, 1956: 19-34.

(编辑 桂智刚)