

# 格子 Boltzmann 方法解扩散方程的 复杂边界条件研究\*

黄俊涛<sup>1,2</sup>, 张 力<sup>1</sup>, 雍稳安<sup>2</sup>, 王沫然<sup>1</sup>

(1. 清华大学 航天航空学院 工程力学系, 北京 100084;

2. 清华大学 周培源应用数学研究中心, 北京 100084)

**摘要:** 对格子 Boltzmann 方法求解含第三类边界条件的扩散方程进行了理论和数值研究, 构造了一种新的基于 bounce-back 的边界处理数值格式, 用来处理复杂边界问题. 借助渐近分析, 证明了新方法的数值相容性. 用数值算例从不同角度分析了算法的精度和稳定性等, 与已有算法相比, 新方法在精度、稳定性和效率方面均有较大提高. 最后通过一个复杂边界反应扩散的示例演示了新方法应用于复杂多孔介质内多物理化学输运模拟的可行性和有效性.

**关键词:** 格子 Boltzmann 方法; 扩散方程; 第三类边界条件; 渐近分析; 复杂边界

**中图分类号:** O242.5; O357.3 **文献标志码:** A

**doi:** 10.3879/j.issn.1000-0887.2014.03.009

## 引 言

微尺度流动与传热传质是当前力学与热物理研究的前沿, 也有重要的实际应用背景<sup>[1-2]</sup>. 微尺度运输的最大特点是界面作用主导, 同时可能耦合多种物理化学的复杂过程, 包括: 流体流动、离子扩散、电势作用以及化学反应等, 从而使得动力学的控制方程以复杂的方式相互耦合, 具有极大的非线性. 在某些重要应用中, 例如碳埋藏、页岩气开采以及防腐抑垢中化学反应起关键作用<sup>[3-6]</sup>, 反应后会造造成不规则的几何边界, 且边界会随着化学反应的进行不断变化, 使得若采用传统的有限差分、有限元等方法来求解非常困难, 不仅计算量大, 还会造成算法的不稳定. 近些年来研究者们开始从传统数值方法转向新方法, 例如格子 Boltzmann 方法(LBM). LBM 简单的演化模型和灵活的边界处理适合求解这种多物理化学过程耦合且边界不规则的问题<sup>[7-11]</sup>. 随着格子 Boltzmann 相关方法及理论的发展, 以及它在求解多相流动及多孔介质输运问题上<sup>[12-16]</sup>的成功, 很多的研究者将 LBM 视作分析多物理化学的输运过程微观机理的更好途径<sup>[17-18]</sup>.

本文主要针对使用格子 Boltzmann 方法求解含第三类边界条件的扩散方程进行了系统研究, 构造了一种新的基于 bounce-back 思想的边界处理数值格式, 用来处理复杂边界. 接着借助

\* 收稿日期: 2013-09-25; 修订日期: 2013-12-17

基金项目: 国家自然科学基金(51176089); 国家重点基础研究发展计划(973 计划)(2013CB228301)

作者简介: 黄俊涛(1991—), 男, 湖北人, 博士生(E-mail: huangjt13@mails.tsinghua.edu.cn);

王沫然(1977—), 男, 吉林人, 教授, 博士, 博士生导师(通讯作者. Tel: +86-10-62787498;

E-mail: mrwang@tsinghua.edu.cn).

数学工具渐近分析,证明了新方法的数值相容性.最后通过多个算例,从不同角度分别讨论了算法的精度和稳定性等.同已有的算法比较,新方法在精度、稳定性和效率方面均有较大的提高.最后通过一个稍复杂边界反应扩散的算例演示,证明了新方法应用于复杂多孔介质内多物理化学输运模拟的可行性和有效性.

## 1 数学描述及数值格式

### 1.1 数学方程

考察二维求解域  $\Omega \subset R^2$  上关于浓度  $C(t, \mathbf{x})$  的含源项的扩散方程:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \nabla^2 C + S(t, \mathbf{x}, C), \quad (t, \mathbf{x}) \in [0, T] \times \Omega, \quad (1)$$

其中,  $D$  是扩散系数,源项  $S$  可以依赖于时间  $t$ 、空间坐标  $\mathbf{x}$  以及当地浓度  $C$ . 给定初始条件:

$$C(0, \mathbf{x}) = C_0(\mathbf{x}). \quad (2)$$

在边界  $\partial\Omega$  上, 给定第三类边界条件:

$$\alpha_1 C + \alpha_2 \frac{\partial C}{\partial \mathbf{n}} = \alpha_3, \quad (3)$$

其中  $\alpha_1, \alpha_2$  和  $\alpha_3$  是关于  $t$  和  $\mathbf{x}$  的函数,  $\mathbf{n}$  是指向域外的单位法向量.

### 1.2 数值格式

用如下的格子演化格式可以求解扩散方程(1):

$$g_i(t + \delta_t, \mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t) = g_i(t, \mathbf{x}) + \frac{1}{\tau} (g_i^{\text{eq}}(t, \mathbf{x}) - g_i(t, \mathbf{x})) + \delta_t \omega_i S(t, \mathbf{x}, C), \quad (4)$$

其中平衡态分布函数  $g_i^{\text{eq}}$  如下给出:

$$g_i^{\text{eq}} = g_i^* C, \quad (5)$$

宏观量  $C$  的运算为

$$C = \sum_{i=1}^5 g_i, \quad (6)$$

$\mathbf{e}_i$  表示格子速度,  $\delta_t$  表示时间步长,  $\tau$  表示弛豫时间. 对于二维五速度 (D2Q5) 格子系统, 系数  $\omega_i$  和  $g_i^*$  满足如下等式:

$$\omega_i = g_i^* = \begin{cases} 1/3, & i = 1, \\ 1/6, & i = 2, 3, 4, 5. \end{cases} \quad (7)$$

### 1.3 计算流程

计算框架可以分为以下几个步骤:

a) 分布函数初始化

$t = 0$  时刻的分布函数的初值设置为

$$g_i(0, \mathbf{x}) = g_i^{\text{init}}(0, \mathbf{x}), \quad (8)$$

其中

$$g_i^{\text{init}}(0, \mathbf{x}) = g_i^* C_0(\mathbf{x}) - h \tau g_i^* (c_i \cdot \nabla) C_0(\mathbf{x}), \quad (9)$$

$h$  表示格子长度.

b) 碰撞过程

用  $\tilde{g}_i(t, \mathbf{x})$  表示碰撞后的分布函数:

$$\tilde{g}_i(t, \mathbf{x}) = g_i(t, \mathbf{x}) + \frac{1}{\tau}(g_i^{\text{eq}} - g_i) + \delta_t \omega_i S. \quad (10)$$

c) 迁移过程

对于每个给定的空间坐标  $\mathbf{x}$ , 若  $\mathbf{x} - \mathbf{e}_i \delta_t$  处于求解域内部, 则

$$g_i(t + \delta_t, \mathbf{x}) = \tilde{g}_i(t, \mathbf{x} - \mathbf{e}_i \delta_t); \quad (11)$$

若  $\mathbf{x} - \mathbf{e}_i \delta_t$  处于求解域外部, 则,

$$g_i(t + \delta_t, \mathbf{x}) = \frac{-\alpha_1 h + \frac{\alpha_2}{\tau - 1/2}}{\alpha_1 h + \frac{\alpha_2}{\tau - 1/2}} \tilde{g}_i(t, \mathbf{x}) + \frac{2g_i^* \alpha_3 h}{\alpha_1 h + \frac{\alpha_2}{\tau - 1/2}}. \quad (12)$$

d) 计算宏观量

用更新之后的分布函数计算宏观量:

$$C(t + \delta_t, \mathbf{x}) = \sum_{i=1}^5 g_i(t + \delta_t, \mathbf{x}). \quad (13)$$

e) 若  $t + \delta_t = T$ , 或达到稳态, 则计算终止. 否则重复步骤 b) ~ d).

#### 1.4 相容性分析

用扩散尺度来分析方程(4), 令时间步长  $\delta_t = ah^2$ ,  $h$  表示格子长度,  $a$  为一个常数, 可以在给定空间步长的情形下调节时间步长. 于是方程(4)变为如下方程:

$$g_i(t + ah^2, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i h) = g_i(t, \mathbf{x}) + \frac{1}{\tau}(g_i^{\text{eq}} - g_i) + ah^2 \omega_i S, \quad (14)$$

其中  $\mathbf{c}_i$  为归一化之后的格子速度. 方程(14)中  $g_i(t, \mathbf{x}; h)$  的渐近级数展开为

$$g_i(t, \mathbf{x}; h) \sim g_i^{(0)}(t, \mathbf{x}) + \sum_{k=1}^{\infty} h^k g_i^{(k)}(t, \mathbf{x}). \quad (15)$$

同理,  $C(t, \mathbf{x}; h)$  的渐近展开为

$$C(t, \mathbf{x}; h) \sim C^{(0)}(t, \mathbf{x}) + \sum_{k=1}^{\infty} h^k C^{(k)}(t, \mathbf{x}). \quad (16)$$

将渐近级数(15)和(16)代入方程(14)并进行 Taylor(泰勒)展开:

$$\sum_{k=0}^{\infty} h^k \sum_{s=0}^{\infty} D_{i,s} g_i^{(k-s)} - \sum_{k=0}^{\infty} h^k g_i^{(k)} = \frac{1}{\tau} \left( \sum_{k=0}^{\infty} h^k g_i^* C^{(k)} - \sum_{k=0}^{\infty} h^k g_i^{(k)} \right) + ah^2 \omega_i S, \quad (17)$$

其中算子  $D_{i,s}$  为

$$D_{i,s} = \sum_{2p+q=s} \frac{(a\partial_t)^p (\mathbf{c}_i \cdot \nabla)^q}{p! q!}, \quad (18)$$

$p$  和  $q$  均为非负整数.

匹配方程(17)两边的系数. 令弛豫时间  $\tau$  为

$$\tau = 3aD + \frac{1}{2}.$$

可以证明如下方程:

$$\frac{\partial C^{(0)}}{\partial t} = D \nabla^2 C^{(0)} + S,$$

即  $C$  渐近级数中的零阶项  $C^{(0)}$  满足宏观方程.

对边界条件进行渐近分析,即对于每个指标  $i$ ,定义指标  $\bar{i}$ ,使得  $c_{\bar{i}} = -c_i$ ,则

$$g_i\left(t + ah^2, \mathbf{x}_B + \mathbf{c}_i \frac{h}{2}\right) = \frac{-\alpha_1 h + \frac{\alpha_2}{\tau - 1/2}}{\alpha_1 h + \frac{\alpha_2}{\tau - 1/2}} \tilde{g}_{\bar{i}}\left(t, \mathbf{x}_B - \mathbf{c}_{\bar{i}} \frac{h}{2}\right) + \frac{2g_i^* \alpha_3 h}{\alpha_1 h + \frac{\alpha_2}{\tau - 1/2}}. \quad (19)$$

可以证明

$$\alpha_1 C^{(0)} + \alpha_2 \frac{\partial C^{(0)}}{\partial \mathbf{n}} = \alpha_3, \quad (20)$$

即,边界条件的相容性得证.

## 2 数值结果与讨论

### 2.1 Helmholtz 方程算例

选取有解析解的算例来验证新算法的精度和稳定性,并与已有算法进行对比.考察求解域  $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$  上的 Helmholtz 方程:

$$\nabla^2 C = \lambda^2 C, \quad (21)$$

其边界条件为

$$C(x, y) \Big|_{y=0} = \exp(-\gamma x), \quad C(x, y) \Big|_{y=1} = 0, \\ \left(\gamma C + \frac{\partial C}{\partial x}\right) \Big|_{x=0} = 0, \quad \left(\gamma C + \frac{\partial C}{\partial x}\right) \Big|_{x=1} = 0.$$

此时,方程解析解为

$$C(x, y) = \exp(-\gamma x) \frac{\sinh \mu(1-y)}{\sinh \mu}, \quad (22)$$

其中  $\mu = \sqrt{\lambda^2 - \gamma^2}$ .

图 1 显示了格子数为 200 时在  $y = 0.3475$  处解析解与数值解的对比,结果表明数值解和解析解吻合得非常好.

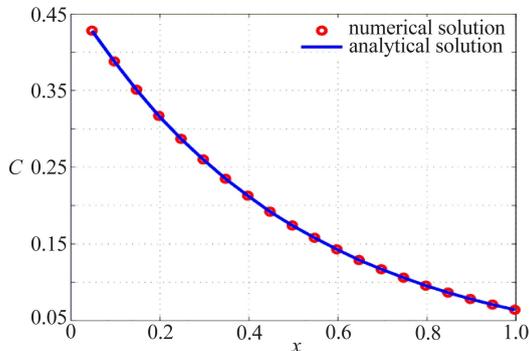


图 1 数值解与解析解对比

Fig.1 Numerical results compared with analytical results

图 2(a) 显示了格子数  $N = 40, 80, 120, 160, 200$  时的绝对误差,横纵坐标轴均采用了对数

坐标.可以看出,当格子数增大时,绝对误差减小.误差曲线斜率为 2,可以得知此算法的收敛阶数为 2.

Kang 等在 2007 年提出了一种处理第三类边界条件的方法<sup>[10]</sup>,先用分布函数的一阶矩近似法向导数项,转化为第一类边界条件后再用 non-slip 方法.图 2(b) 中对比了格子数  $N = 40, 80, 120, 160, 200$  时新算法和已有算法的相对误差变化.图中纵轴采用了对数坐标.结果表明,新算法的相对误差明显小于已有算法.当  $N = 40$  时,已有算法的相对误差是新算法的 82.4 倍,而当  $N = 200$  时,已有算法的相对误差是新算法的 910.0 倍.新算法大大提高了计算精度和收敛速度.

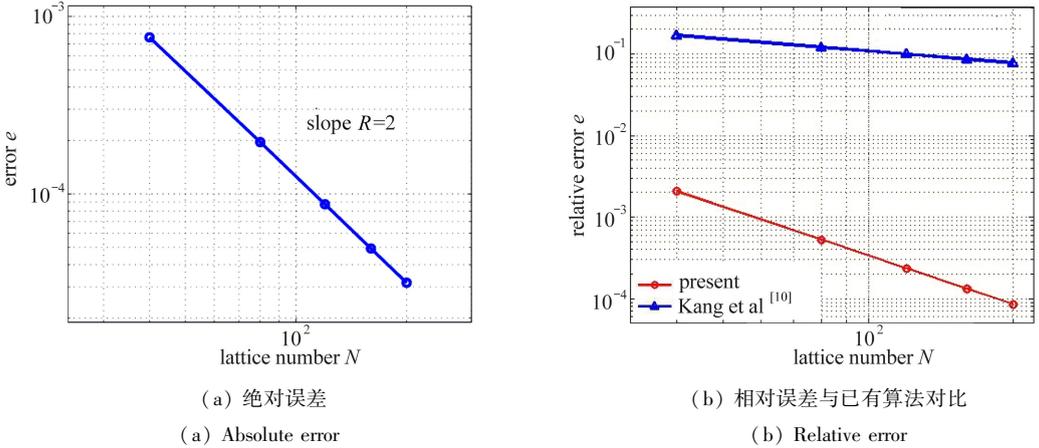


图 2 误差随空间步长变化的关系  
Fig.2 Numerical errors vs. lattice number

## 2.2 复杂算例演示

在通过简单算例验证了本文新算法及程序的正确性之后,笔者对一个在化工及地质中常见的多孔介质内反应扩散问题的复杂算例作初步研究,以演示新算例的适用性.考虑长直管道内,不规则放置有若干障碍物,障碍物表面有催化剂,发生如下简化的化学反应<sup>[10,19]</sup>:



其中  $A$  为一种溶剂,  $A_{(s)}$  为固态物质.若管道内物质流动缓慢,可不考虑对流效应,则溶剂  $A$  的浓度满足扩散方程.反应发生在固体表面.  $C$  表示溶剂  $A$  的浓度,若只考虑一阶动力学的反应,则在表面的边界条件为

$$-D \frac{\partial C}{\partial n} = k_r(C - C_{(eq)}), \tag{24}$$

其中  $C_{(eq)}$  为表面的平衡浓度,  $k_r$  为反应速率系数,  $D$  为扩散系数.

如图 3 所示,管道长度为  $L$ ,入口处给定高浓度  $C_{in}$ ,由于管道长宽比足够大,出口处可达到充分发展条件.管道上边界和下边界均给定零通量边界条件.此处引入一个重要参数 Damköhler 数 ( $Da$ ), 定义为

$$Da = \frac{k_r L}{D}, \tag{25}$$

此时  $Da$  表征了反应对扩散的相对强度.

取计算域为长宽比为 10 : 1 的长直管.图 4 中从上到下依次表示了  $t = 0.5, 2, 5, 20$  时刻的

浓度场(4张图中颜色浓度标识一致),左侧和右侧4张图分别对应  $Da = 0.48$  和  $Da = 4.8$  时的情形.从数值结果来看,随着时间的演化,溶剂逐渐由高浓度的管道入口向低浓度的管道内扩散.另外由于障碍物表面催化反应发生,在其表面可以清晰看到溶剂的浓度梯度.由图4的左右对比可以看出,当  $Da$  比较小的时候,由于扩散效应比较强,导致管道内整体浓度比较高.复杂边界的算例表明,数值模拟的结果基本和物理规律符合,并且能成功模拟非稳态过程.

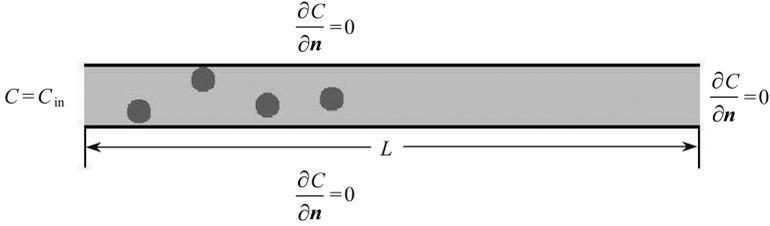


图3 数值算例示意图

Fig.3 Schematic of the reactive diffusion in porous structure

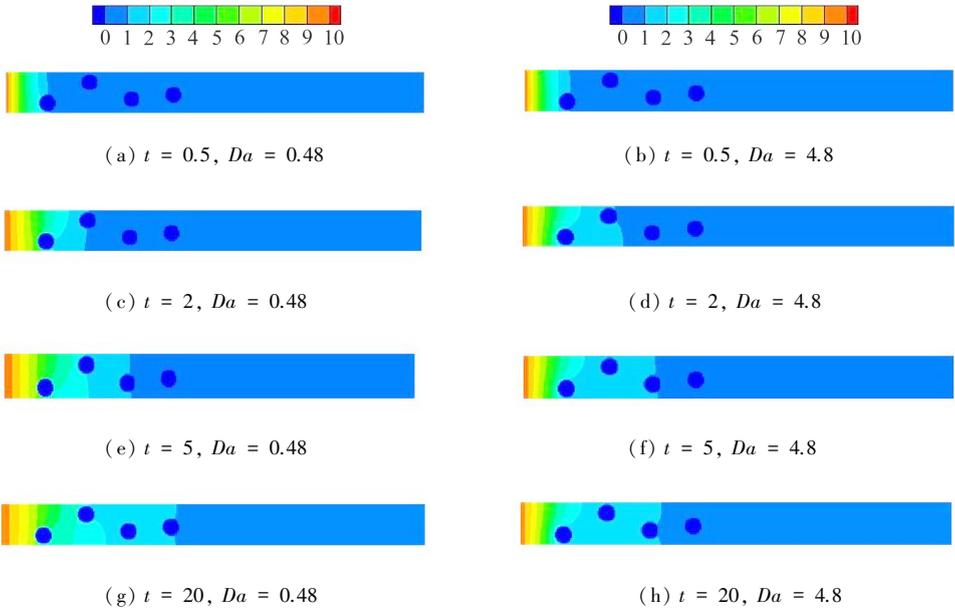


图4 不同  $Da$  下的浓度场演化过程

Fig.4 The evolutionary process of concentration fields with different  $Da$

### 3 结 论

本文对采用格子 Boltzmann 方法求解含第三类边界条件的扩散方程问题,构造了一种新的基于 bounce-back 的边界处理格式,可以用来处理复杂边界.使用渐近分析方法,理论上证明了算法的相容性(包括方程的相容性和边界条件的相容性).在验证了方法的正确性之后,与前人已有算法进行了对比,从精度、稳定性和效率三方面来看,新算法明显优于前人已有的算法.通过复杂边界算例演示,证明了新算法有望成功应用于含化学反应的复杂渗流模拟与分析,并为今后的工程应用提供支持.

## 参考文献(References):

- [1] Li D. *Encyclopedia of Microfluidics and Nanofluidics*[M]. Springer, 2008.
- [2] Squires T M, Quake S R. Microfluidics: fluid physics at the nanoliter scale[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2005, **77**(3): 977-1026.
- [3] Wang M, Kang Q, Viswanathan H, Robinson B. Modeling of electro-osmosis of dilute electrolyte solutions in silica microporous media[J]. *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, 2010, **115**: B10205.
- [4] Fathi E, Akkutlu I Y. Lattice Boltzmann method for simulation of shale gas transport in kerogen[J]. *SPE Journal*, 2013, **18**(1): 27-37.
- [5] Nordsveen M, Nešić S, Nyborg R, Stangeland A. A mechanistic model for carbon dioxide corrosion of mild steel in the presence of protective iron carbonate films — part 1: theory and verification[J]. *Corrosion*, 2003, **59**(5): 443-456.
- [6] Oliveira R, Melo L, Pinheiro M, Vieira M J. Surface interactions and deposit growth in fouling of heat exchangers[J]. *Corrosion Reviews*, 1993, **11**(1/2): 55-96.
- [7] Chen S Y, Doolen G D. Lattice Boltzmann method for fluid flows[J]. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 1998, **30**: 329-364.
- [8] Inamuro T, Yoshino M, Ogino F. Non-slip boundary-condition for lattice Boltzmann simulations[J]. *Physics of Fluids*, 1995, **7**(12): 2928-2930.
- [9] ZHANG Ting, SHI Bao-chang, GUO Zhao-li, CHAI Zhen-hua, LU Jian-hua. General bounce-back scheme for concentration boundary condition in the lattice-Boltzmann method[J]. *Physical Review E*, 2012, **85**(1): 016701.
- [10] Kang Q, Lichtner P C, Zhang D. An improved lattice Boltzmann model for multicomponent reactive transport in porous media at the pore scale[J]. *Water Resources Research*, 2007, **43**(12): W12S14.
- [11] Ziegler D P. Boundary conditions for lattice Boltzmann simulations[J]. *Journal of Statistical Physics*, 1993, **71**(5/6): 1171-1177.
- [12] Gabbanelli S, Drazer G, Koplik J. Lattice Boltzmann method for non-Newtonian (power-law) fluids[J]. *Physical Review E*, 2005, **72**(4): 046312.
- [13] PAN Chong-xun, LUO Li-shi, Miller C T. An evaluation of lattice Boltzmann schemes for porous medium flow simulation[J]. *Computers & Fluids*, 2006, **35**(8): 898-909.
- [14] SHAN Xiao-wen, CHEN Hu-dong. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components[J]. *Physical Review E*, 1993, **47**(3): 1815-1819.
- [15] Wang M, Chen S. Electroosmosis in homogeneously charged micro- and nanoscale random porous media[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2007, **314**(1): 264-273.
- [16] WANG Mo-ran. Structure effects on electro-osmosis in microporous media[J]. *Journal of Heat Transfer*, 2012, **134**(5): 051020.
- [17] WANG Mo-ran, PAN Ning. Predictions of effective physical properties of complex multiphase materials[J]. *Material Science and Engineering: R: Reports*, 2008, **63**(1): 1-30.
- [18] Huang H B, Lu X Y, Sukop M C. Numerical study of lattice Boltzmann methods for a convection-diffusion equation coupled with Navier-Stokes equations[J]. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 2011, **44**(5): 055001.
- [19] Succi S, Smith G, Kaxiras E. Lattice Boltzmann simulation of reactive microflows over cata-

lytic surfaces[J]. *Journal of Statistical Physics*, 2002, **107**(1/2): 343-366.

## On Complex Boundary Conditions of the Lattice Boltzmann Method for the Diffusion Equations

HUANG Jun-tao<sup>1,2</sup>, ZHANG Li<sup>1</sup>, YONG Wen-an<sup>2</sup>, WANG Mo-ran<sup>1</sup>

(1. *Department of Engineering Mechanics, School of Aerospace, Tsinghua University, Beijing 100084, P.R.China;*

2. *Zhou Pei-Yuan Center for Applied Mathematics, Tsinghua University, Beijing 100084, P.R.China*)

**Abstract:** The diffusion equation with the third-type boundary condition solved by the lattice Boltzmann method was theoretically and numerically studied. A new numerical algorithm based on the bounce-back method was constructed, to deal with the complex boundary problem. By asymptotic analysis, the compatibility of the numerical method was proved. The accuracy and stability of the algorithm were discussed via several numerical examples. Compared with the previous work, this numerical approach makes a significant improvement in the aspects of accuracy, stability and efficiency. Finally, through the numerical example of a reaction-diffusion problem with complex boundary, feasibility and effectiveness of the presented method are proved in the simulation of the multi-physical and chemical transport process in porous medium.

**Key words:** lattice Boltzmann method; diffusion equation; third-type boundary condition; asymptotic analysis; complex boundary

**Foundation item:** The National Natural Science Foundation of China(51176089); The National Basic Research Program of China (973 Program) (2013CB228301)