

文章编号: 1005—0523(2006)05—0142—04

CIMA 系统的一种参数 LB 模型

王广超, 朱旭生

(华东交通大学 基础科学学院, 江西 南昌 330013)

摘要:提出了 CIMA 系统的一种参数格子波尔兹曼模型, 可从参数模型上导回了 CIMA 系统方程. 在模型中, 松弛因子可根据引入的参数确定, 增加了计算的灵活性. 对于 CIMA 系统的多种斑图, 本文选用不同参数进行了数值模拟, 给出了斑图图像.

关 键 词:格子 Boltzmann 模型; 参数模型; CIMA 系统; 斑图动力学

中图分类号: O241.8, TB115

文献标识码: A

1 简介

格子波尔兹曼^[1,2](Lattice Boltzmann, LB)方法是近十几年来发展起来的一种新的数值计算方法. 与以宏观连续方程的离散化为基础的传统数值方法不同, LB 方法的基础是微观模型与细观运动论方法. 它保留了分子运动学的许多优点, 如物理条件清晰, 边界条件易于实现, 具有完全并行性等. LBM 最近几年发展迅速, 除了在一般的流体力学问题中得到成功的验证外, 还在湍流, 多相流, 化学反应扩散等相关领域得到较好的应用.

反应扩散系统是很多理论研究和工程实际中常遇到的一类问题. 1952 年英国数学家图灵^[2]从数学角度证明了在反应扩散系统中, 稳定状态会在某些条件下失去稳定, 并自发产生空间定态图纹. 此过程被后人命名为图灵失稳(或图灵分岔)和图灵斑图. 图灵在论文中想说明某些生物的体表图纹的成因, 例如斑马身上的斑图是怎样产生的.

图灵关于图灵斑图的文章在此后很长一段时间内未得到人们的重视, 直到 20 世纪 80 年代末, Ouyang 与 Swinney 等^[3,4]在化学反应体系中找到了图灵斑图, 斑图理论与生成成为研究热点. Lengyel 和 Epstein^[5]提出了一个包含两个变量的反应扩散系统, 即次氯酸—碘化物—丙二酸(Chlorite—Iodide

—Malonic Acid 简记 CIMA)反应系统. 在此模型中, 碘与氯分别起催化剂与抑止剂的作用, 其动力学方程为:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} = d_1 \nabla^2 \rho_1 + R_1(\rho_1, \rho_2) \quad (1a)$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} = d_2 \nabla^2 \rho_2 + R_2(\rho_1, \rho_2) \quad (1b)$$

其中 ρ_1 与 ρ_2 分别表示无量纲化了的碘与氯的浓度, d_1 与 d_2 为扩散系数, ∇^2 为拉普拉斯算子, R_1 与 R_2 为反应项, 分别为:

$$R_1 = \frac{1}{\sigma} (a - \rho_1 - 4 \frac{\rho_1 \rho_2}{1 + \rho_1^2}) \quad (2a)$$

$$R_2 = b (\rho_1 - \frac{\rho_1 \rho_2}{1 + \rho_1^2}) \quad (2b)$$

其中, a, b, σ, b 为定值, 满足:

$$d_1 = \frac{1}{\sigma} \quad (3a)$$

$$d_2 = d \quad (3b)$$

对于图灵斑图的 LB 方法模拟, Dawson^[6]提出了一种反应扩散系统的 LB 模型, 并模拟了一些斑图现象; Blaak^[7]讨论了格子分化对反应扩散系统的影响; Li—Qing 等^[8,9]提出了各向同系数的 CIMA 系统的一种 D2Q5 模型, 并给出了不同类型的图灵斑图; 本文在其基础上, 提出了一种含参数的 LB 模型, 并给出了不同类型的斑图模拟图像.

收稿日期: 2006—01—24

基金项目: 华东交通大学校研基金与江西省自然科学基金(编号: 0611009)

作者简介: 王广超(1978—), 男, 山东微山人, 硕士, 讲师.
中国知网: <http://www.cnki.net>

2 参数 LB 模型

采用演化方程:

$$f_i(x+ce_i\Delta t, t+\Delta t)=f_i(x, t)-\frac{1}{\tau_1}(f_i(x, t)-f_i^{eq}(x, t))+\Delta t R_{1,i}(x, t)$$
 (4a)

$$g_i(x+ce_i\Delta t, t+\Delta t)=g_i(x, t)-\frac{1}{\tau_2}(g_i(x, t)-g_i^{eq}(x, t))+\Delta t R_{2,i}(x, t)$$
 (4b)

其中, f_i, g_i 表示沿速度方向 i 的粒子分布函数; $c=\Delta x/\Delta t$, Δx 和 Δt 分别为空间和时间步长; e_i 表示粒子的运动方向, 考虑九速二维平面格子(参考图 1)

$$e_0=(0,0),$$

$$e_i=(\cos[(i-1)\pi/2], \sin[(i-1)\pi/2]), i=1, 2, 3, 4,$$
 (5)
$$e_i=\sqrt{2}(\cos[(i-5)\pi/2+\pi/4], \sin[(i-5)\pi/2+\pi/4]), i=5, 6, 7, 8,$$

τ_1, τ_2 为松弛时间, 取 $\omega_1=\frac{1}{\tau_1}, \omega_2=\frac{1}{\tau_2}; f_i^{eq}, g_i^{eq}$ 局部平衡态函数, 满足

$$\rho_1=\sum_{i=0}^8 f_i^{eq},$$
 (6a)

$$\rho_2=\sum_{i=0}^8 g_i^{eq},$$
 (6b)

$R_{1,i}, R_{2,i}$ 为反应项分布函数, 满足

$$R_1=\sum_{i=0}^8 R_{1,i},$$
 (7a)

$$R_2=\sum_{i=0}^8 R_{2,i},$$
 (7a)

根据粒子的运动方向 e_i 特点, 引入参数 α, β , 根据方程 6、7, $f_i^{eq}, g_i^{eq}, R_{1,i}, R_{2,i}$ 分别取值

$$f_i^{eq}=w_i\rho_1, g_i^{eq}=w_i\rho_2, R_{1,i}=w_iR_1, R_{2,i}=w_iR_2;$$
 (8)

其中

$$w_0=1-4\alpha-4\beta$$

$$w_1=w_2=w_3=w_4=\alpha$$

$$w_5=w_6=w_7=w_8=\beta$$

方程(8)、(9)与方程(4)即为含参数 α, β 的反应扩散 LB 模型. 若特殊的取 $\alpha=1/5, \beta=0$ 可得 Qing 等的各向同系数模型; 若特殊的取 $\alpha=1/9, \beta=1/36$, 即为 Blaak 等使用 LB 模型.

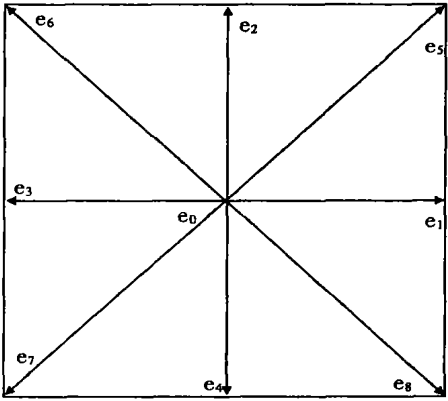


图 1 二维九速格子图

3 参数 LB 模型与 CIMA 系统

对分布函数 f_i 采用多尺度技术展开

$$f_i=f_i^{eq}+\epsilon f_i^{(1)}+\epsilon^2 f_i^{(2)}+\dots$$
 (10)

其中 $\epsilon\sim\Delta t$

$$\sum_{i=0}^8 f_i^{(n)}=0, n\geq 1$$
 (11)

记 $f_i^{eq}=f_i^{(0)}, \epsilon=\Delta t, R_{1,i}\sim\Delta t, D_i=\frac{\partial}{\partial t}+ce_i\cdot\nabla$ 由方程 4a 可得:

$$Df_i^{(0)}, \epsilon+Df_i^{(1)}+\frac{\epsilon}{2}Df_i^{(0)}=-\omega_1(f_i^{(1)}+g_i^{(2)})+R_{1,i}+o(\epsilon^2)$$
 (12)

对方程(12)采用一阶近似, 即得:

$$Df_i^{(0)}=-\omega_1 f_i^{(1)}+o(\epsilon)$$
 (13)

根据方程(13), 方程(12)可以改写为:

$$Df_i^{(0)}+\epsilon(1-\frac{\epsilon_1}{2})Df_i^{(1)}=-\omega_1(f_i^{(1)}+g_i^{(2)})+R_{1,i}+o(\epsilon^2)$$
 (14)

参见

对方程(13)两边关于方向 i 求和, 可得:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t}=o(\epsilon)$$
 (15)

对方程(14)两边关于方向 i 求和, 可得:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t}+\Delta t(1-\frac{\omega_1}{2})\sum_{i=0}^8 Df_i^{(1)}=R_1+o(\epsilon^2)$$
 (16)

又因为:

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^8 Df_i^{(1)} &= \frac{\partial}{\partial t} \sum_{i=0}^8 F_i^{(1)} + \nabla \cdot (\sum_{i=0}^8 ce_i f_i^{(1)}) \\ &= -\frac{1}{\omega_1} \nabla \cdot (\sum_{i=0}^8 ce_i (Df_i^{(0)})) + o(\epsilon) \\ &= -\frac{1}{\omega_1} \nabla \cdot (\sum_{i=0}^8 \frac{\partial}{\partial t} (ce_i f_i^{(0)})) + \nabla \cdot (\sum_{i=0}^8 c^2 e_i e_i f_i^{(0)}) + o(\epsilon) \end{aligned}$$

$$=-\frac{1}{\omega_1}(2\alpha+4\rho)c^2\nabla^2\rho_1+o(\epsilon)$$

从而:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t}=d_1\nabla^2\rho_1+R_1(o(\epsilon^2)) \tag{18}$$

其中:

$$d_1=(\frac{1}{\omega_1}-\frac{1}{2})(2\alpha+4\beta)c^2\Delta \tag{19}$$

参照以上相似过程,对方程(4b)展开可得:

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t}=d_2\nabla^2\rho_2+R_2(o(\epsilon^2)) \tag{20}$$

其中:

$$d_2=(\frac{1}{\omega_2}-\frac{1}{2})(2\alpha+4\beta)c^2\Delta \tag{21}$$

方程(18)、(20)联立,即为方程(1a)、(1b)。

4 数值模拟

在当前数值模拟中,取 $\sigma=50, d=1.07, dt=0.1, c=10$. 在数值计算模拟中,格式计算的稳定性,是衡量计算模型有效性的一个重要标准. 在 LB 计算模型中,当松弛因子 $\frac{1}{\tau} \rightarrow 2$ 时,计算模型变得不稳定. 表 I 给出了当前的参数 LB 模型中不同参数 α 、 β 下,松弛因子 ω_1 的值. 从表中可以看出,参数 α 、 β 的灵活选择,可以适当改变松弛因子数值,从而改善模型的稳定性.

表 I 不同参数 α 、 β 下松弛因子 $1/\tau$ 取值对照表

α	β	α, β	$1/\tau$
1/9	1/9	1,1	1.98807
1/8	1/16	2,1	1.98413
1/9	1/36	4,1	1.97628

对于不同参数下 CIMA 系统斑图模拟,选取计算区域 $0 \leq x_1, x_2 \leq 100$, 初始时刻,随机选取一半格点,取值为 $\rho_1(x, 0) = \frac{a}{5}, \rho_2(x, 0) = 1 + \frac{a^2}{25}$, 其它格点取值为 0, 分布函数 f_i, g_i , 在 e_0 方向分别取值 $\rho_1(x, 0), \rho_2(x, 0)$, 其它方向取值为 0. 边界条件采用周期边界条件.

图 2 给出了 H_0 型六角形蜂窝状斑图的形成过程,对应系统参数 $a=8.8, b=0.09$, 模型参数 $\alpha=1/9, \beta=1/9$, 选取,图中显示的是第一种反应物的浓度,灰度越大代表浓度越大;图 3 给出了条带型斑图的形成过程,对应系统参数 $a=10.0, b=0.16$, 模型参数选取 $\alpha=1/8, \beta=1/16$;图 4 给出了 H_π 型六角形蜂窝状斑图的形成过程,对应系统参数 $a=12$.

0, $b=0.39$, 模型参数选取 $\alpha=1/9, \beta=1/36$;图 5 给出了 D^2Q5 参数模型下两种混合斑图的模拟结果.

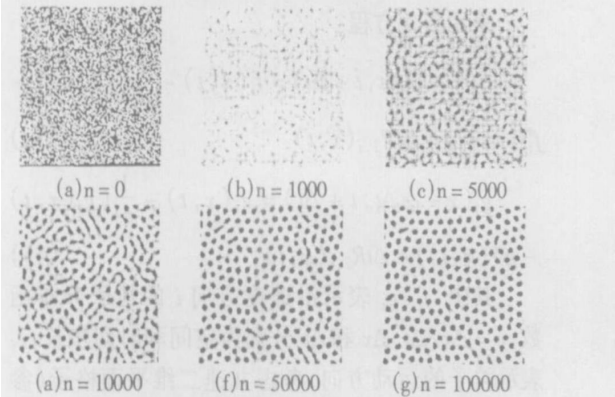


图 2 H_0 型六角形蜂窝状斑图(n 表示演化步数)

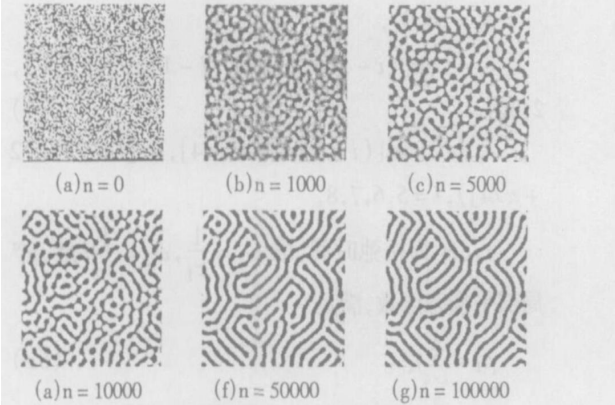


图 3 条带型斑图(n 表示演化步数)

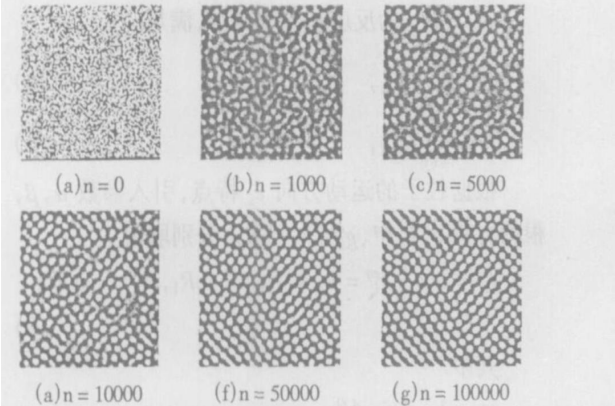


图 4 H_π 型六角形蜂窝状斑图(n 表示演化步数)

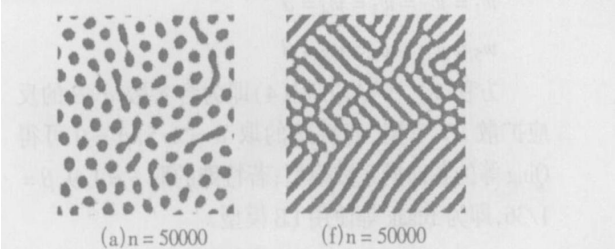


图 5 混合型斑图(n 表示演化步数):

(a) H_0+B 型斑图, $a=9.4, b=0.1, \alpha=1/6, \beta=0$;
(b) $H_\pi+B$ 型斑图, $a=12, b=0.34, \alpha=1/8, \beta=0$

5 结束语

由于参数 α, β 的选择, 本文给出的参数 LB 模型在数值模拟中提高了模型的灵活性, 并能适当改善松弛因子数值. 由于 CIMA 系统没有解析解, 本文仅对 CIMA 系统不同斑图进行了模拟, 对于不同参数下模型的比较, 还无法做出定量分析, 有待化学实验技术的进一步发展, 与其实验数据进行进一步比较.

参考文献:

[1] Chen S, Doolen G. Lattice Boltzmann Methods for Fluid Flows [J]. Annu Rev Fluid Mech, 1998 30:329—364.
[2] Turing, A. M. The chemical basis of morphogenesis[J]. Philo-
los. Trans. R. Lond. Ser. B, 1952, 237:37—72.
[3] Ouyang Q, Swinney H. L. Transition from a uniform state to

hexagonal and striped Turing patterns [J]. Nature. 1991,
352, 610—612.
[4] 欧阳颀. 反应扩散系统中的斑图动力学[M]. 上海: 上海
科技教育出版社, 2000.
[5] Lengyel I, Epstein I. R. Modeling of Turing structure in the
chlorite-iodide-malonic acid-starch reaction systems. Science [J]. 251:650—652(1991).
[6] Chen S, Dawson S. P., Doolen GD, etc. Lattice methods and
their applications to reacting systems[J]. Comp. Chem. Eng.
1995, 19:617—646.
[7] Blaak R, Sloot P. M. A. Lattice dependence of reaction-diffu-
sion in lattice Boltzmann modeling[J]. Comp. Phys. Comm.
2000, 129:256—266.
[8] Li Q, Zheng CG, Wang NC, Shi BC. LBGK simulation of
Turing patterns in CIMA model[J]. J. Scientific Computing.
2001, 16(2):121—134.
[9] 郭照立, 郑楚光, 李 青, 等. 流体动力学的格子 Boltz-
mann 方法[M]. 武汉: 湖北科学技术出版社, 2002.

A Parameter LB Model for CIMA Systems

WANG Guang-chao¹, ZHU Xu-sheng¹

(¹. School of Basic Science, East China Jiaotong University, Nanchang, 330013, China)

Abstract: A parameter lattice Boltzmann model for the CIMA systems is presented in the paper and the equations for the CIMA systems can be deduced from the model. For the model, the relaxation time factor can be computed from the parameter factor which makes the model is more flexible. Different parameter factors of the model are selected for the CIMA systems simulations, and images of the patterns are given in the paper.

Key words: lattice Boltzmann model; parameter model; CIMA systems; pattern dynamics

(上接第 138 页)

Projective Semimodules

QU Cong, WANG Song-sheng, ZHANG wei

(Institute of Mathematics and Informatics, Jiangxi Normal University, Nanchang 330027, China)

Abstract: In the first part, we proof that tensor product of projective semimodules is still projective; In second part, we construct the equivalence condition of projective semimodule and Hom exact sequence.

Key words: tensor product of semimodule; projective semimodule; exact sequence.