

模拟可压缩流体的格子 Boltzmann 模型

俞慧丹¹⁾²⁾ 赵凯华¹⁾

¹⁾(北京大学物理系, 北京大学非线性科学中心, 北京 100871)

²⁾(浙江师范大学物理系, 金华 321004)

(1998 年 12 月 16 日收到)

在简单声速可调模型的基础上, 通过在演化方程中引入一个吸引势来降低有效声速从而提高 Mach 数, 建立高 Mach 数下的可压缩格子 Boltzmann 模型. 利用 Chapman-Enskog 渐进展开法推导相应的宏观流体力学方程. 与粘滞流体的 Navier-Stokes 方程比较表明, 该模型有降低声速的功能. 模拟结果表明, 该模型可将 Mach 数提高到 3 以上, 且与理论值符合. 该模型的建立为用格子气模拟可压缩流体打开广阔前景.

PACC: 4720N; 4720; 0270; 5110

1 引 言

在物理学中对流体的描述有三个层次: 1) 分子层次, 立足于分子动力学, 研究分子碰撞微观机理; 2) 动理学层次, 这是用非平衡态统计物理的方法来研究流体, 经典的动理方程是玻耳兹曼方程; 3) 流体力学层次, 这是宏观层次, 所用的基本方程是连续方程, Euler 方程和 Navier-Stokes 方程, 有时还得用到热导方程. 传统的计算流体力学是基于流体的宏观连续统描述, 运用某种数值离散方法求解连续统的 Navier-Stokes 方程; 格子气自动机(LGA)^[1]和格子 Boltzmann 方法(LBM)^[2]则是以流体的分子运动论描述为基础, 根据微观运动过程的某些基本特征建立简化的、时间和空间完全离散的动力学模型, 而模型的宏观平均行为又符合宏观的微分方程, 实际上这是介于微观与宏观之间的中介模型. 由于此类模型源于分子运动论描述, 分子动力学的一些优点便得以保持, 如物理图象清晰, 边界处理容易和完全并行等, 这些是传统数值方法所没有的. 因此这种方法从 80 年代中期开始发展迅速, 渗透到流体力学的多个领域. 对许多物理问题建立了相应的格子气模型, 其中包括质量扩散^[3], 热传导^[4], 多孔介质^[5], 多相流^[6]等等, 在模拟流体流动和建模方面目前已经发展成为与传统计算流体方法并驾齐驱的数值方法.

格子气是一种虚构的气体, 由于时间空间的离散以及过分追求计算上的有效性, 导致失去了真实气体运动的一些重要特征, 使目前的模型只能计算近不可压缩的流动. 由于网格是离散的, 只能有几种速度, 同时考虑几何上的要求, 致使格子气的声速较大(一般为 1 的数量级), 而流体的流速应远小于 1, 导致 Mach 数只能局限在很小的范围之内. 目前, 构造高 Mach 数的可压缩模型, 主要有 4 种方法: 1) Alexander, 陈十一等^[7,8]利用平衡分布函数中的待定参数构造了一种声速可调模型, 这个模型中声速可以调节. 通过调小声速来提高 Mach 数, 使用 Chapman-Enskog 展开, 在长波近似下导致一个可压缩流体的 Navier-

Stokes 方程. 陈十一等在平衡分布函数中引入常数项, 在声速很小时用来保证正的平衡分布函数, 这个模型也允许很小的声速甚至零声速存在. 2) 作用力模型(或势函数模型)通过在分布函数的迭代过程中附加一个作用力来降低有效声速从而提高 Mach 数. 钱等^[9]引入一个非线性响应项, 指出这一项与粘性项的比值为 Mach 数平方量级, 因而在 Mach 数不小的情况下该项可以很大. 3) 李元香等^[10]的广义模型是对速度空间重整化, 计算了可压缩问题的一维激波管, 结果在定性上符合实际情况. 4) Cornille^[11]的离散 Boltzmann 气体在速度空间的离散上引入了复杂机制, 成为离散的 Boltzmann 气体, 这已经失去了格子气的计算有效性. 但是在具体模拟时可以发现, 平衡分布函数恒正限制简单声速可调模型声速任意小, 因而 Mach 数不可能很大, 而含常数项的声速可调模型在 Mach 数较大时, 密度涨落也较大, 在某些速度较大的格点上, 平衡分布函数的某些分量将很小, 若要模拟一个真实的流体边界, 即允许某些格点的密度为零时, 将出现这些密度为零的格点仍具有不为零的动量, 这是非物理的. 若人为地把这些格点的动量扔掉, 由于平衡分布函数中的常数项, 会出现一个非零的平衡分布函数, 在密度趋向于零时, 平衡分布函数不连续, 出现一个台阶. 因此含常数项的声速可调模型实际上不能模拟有意义的流体问题; 作用力模型是在分布函数的迭代过程中附加一个作用力来抵消一个较大项保留较小项而使有效声速降低, 由于实际的分布函数偏离平衡分布函数, 当声速很小时, 两个大项之差的残余项的涨落将很大, 导致有效声速不能跟着降低. 而 3) 和 4) 两种模型其复杂性已经超出了格子气的应用范围.

本文通过在演化方程中引入一个吸引势, 建立一个模拟可压缩流体格子 Boltzmann 模型. 利用 Chapman-Enskog 渐进展开法推导相应的宏观流体力学方程. 与粘滞流体的 Navier-Stokes 方程比较, 表明该模型有软化声速的功能. 模拟结果表明该模型可将 Mach 数提高到 3 以上, 且与理论值符合. 该模型的建立为用格子气模拟可压缩流体打开广阔前景.

2 可压缩流体的格子 Boltzmann 模型

用离散取值的 \mathbf{x} 代表格点的位矢, 用离散且只取正值的 t 代表时间, 用 $f_{\alpha}(\mathbf{x}, t)$ 来描述速率为 \mathbf{c}_{α} ($\sigma = c^2$), 朝着 a 方向运动的第 σ 类粒子在时空 (\mathbf{x}, t) 里的分布. 不失一般性, 我们用 FHP7-bit 模型^[5]作为网格模型. FHP7-bit 模型是一个二维六角网格, 有 6 个速度矢量 \mathbf{e}_a ($a = 1, \dots, 6$) 和一个 $a = 0$ 的静止粒子.

在 t 时刻, 引入吸引势

$$\Phi_a = \frac{1}{3} g c_s^2 \mathbf{e}_a \cdot \Delta \rho, \quad (1)$$

其中 g 和 c_s 分别为吸引强度调节参数和声速.

令

$$f_a^*(\mathbf{x}, t) = f_a(\mathbf{x}, t) + \Phi_a(\mathbf{x}, t), \quad (2)$$

f_a 与宏观参量 ρ 和 \mathbf{u} 之间满足

$$\rho = \sum_a f_a, \quad (3)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_a \mathbf{e}_a f_a, \quad (4)$$

则 f_a^* 与宏观参量 ρ 和 \mathbf{u} 之间的关系为

$$\sum_a f_a^* = \sum_a f_a + \sum_a \Phi_a = \rho, \quad (5)$$

$$\sum_a \mathbf{e}_a f_a^* = \sum_a \mathbf{e}_a f_a + \sum_a \mathbf{e}_a \Phi_a = \rho \mathbf{u} + g c_s^2 \Delta \rho = \rho \mathbf{u}^*. \quad (6)$$

于是 f_a 的演化方程为

$$f_a(\mathbf{x} + \mathbf{e}_a, t + 1) = f_a(\mathbf{x}, t) + \Phi_a(\mathbf{x}, t) + \Omega_a^*(\mathbf{x}, t), \quad (7)$$

其中

$$\Omega_a^* = -\omega(f_a^* - f_a^{\text{eq}}), \quad (8)$$

ω 代表平均碰撞频率.

有了吸引势以后的平衡分布函数为

$$f_a^{\text{eq}} = \frac{\rho}{3} \left[c_s^2 + \mathbf{e}_a \cdot \mathbf{u}^* + 2(\mathbf{e}_a \cdot \mathbf{u}^*)^2 - \frac{1}{2} u^{*2} \right], \quad (9)$$

$$f_0^{\text{eq}} = \rho [1 - 2c_s^2 - u^{*2}]. \quad (10)$$

显然

$$\sum_a \Omega_a^* = 0 \quad (\text{碰撞中粒子数守恒}), \quad (11)$$

$$\sum_a \mathbf{e}_a \Omega_a^* = 0 \quad (\text{碰撞中动量守恒}). \quad (12)$$

3 Chapman-Enskog 展开

动理学的特征时空尺度是碰撞时间 τ 和平均自由程 λ , 流体力学的特征时空尺度要比这大得多, 两尺度之比 ε 叫做 Knudsen 数 ($\varepsilon \ll 1$). 将动理学方程中的所有物理量和微分算符都按小参量 ε 的幂次展开

$$\begin{aligned} f_a &= f_a^{(0)} + \varepsilon f_a^{(1)} + O(\varepsilon^2), \\ \partial_t &= \varepsilon \partial_t^{(1)} + \varepsilon^2 \partial_t^{(2)} + O(\varepsilon^3), \\ \Delta &= \varepsilon \Delta^{(1)} + \varepsilon^2 \Delta^{(2)} + O(\varepsilon^3), \\ \Omega_a^* &= \Omega_a^{*(0)} + \varepsilon \Omega_a^{*(1)} + \varepsilon^2 \Omega_a^{*(2)} + O(\varepsilon^3). \end{aligned} \quad (13)$$

选 $f_a^{(0)} = f_a^{\text{eq}}$, (13) 式代入(8)式, 得到

$$\Omega_a^{*(0)} = 0, \quad (14)$$

$$\Omega_a^{*(1)} = -\omega f_a^{*(1)}. \quad (15)$$

对(7)式作 Taylor 展开, 略去 3 阶以上高次项, 得粒子分布函数 f_a 演化的动理方程

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_a \cdot \Delta \right] f_a + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{e}_a \cdot \Delta \right]^2 f_a = \Omega_a^* + \Phi_a. \quad (16)$$

(13) 式代入(16)式并逐次近似展开:

ε^1 级近似

$$(\partial_t^{(1)} + \mathbf{e}_a \cdot \Delta^{(1)}) f_a^{\text{eq}} = \Omega_a^{*(1)} = -\mathcal{G} f_a^{*(1)} + \Phi_a^{(1)}. \quad (17)$$

ε^2 级近似

$$(\partial_t^{(2)} + \mathbf{e}_a \cdot \Delta^{(2)}) f_a^{\text{eq}} + (\partial_t^{(1)} + \mathbf{e}_a \cdot \Delta^{(1)}) f_a^{(1)} + \frac{1}{2} (\partial_t^{(1)} + \mathbf{e}_a \cdot \Delta^{(1)})^2 f_a^{\text{eq}} = \Omega_a^{*(2)} + \Omega_a^{(2)}. \quad (18)$$

f_a 的约束条件(3), (4)式分解为

$$\sum_a f_a^{\text{eq}} = \rho, \quad (19)$$

$$\sum_a \mathbf{e}_a f_a^{\text{eq}} = \rho \mathbf{u} \quad (20)$$

和

$$\sum_a f_a^{(1)} = 0, \quad (21)$$

$$\sum_a \mathbf{e}_a f_a^{(1)} = 0. \quad (22)$$

从(8)式容易得到, 略去 2 阶以上高次项, $f_a^{*(1)} = f_a^{(1)}$. 利用(11), (12), (17), (18)式分别对 a 求和, 以及乘 \mathbf{e}_a 后对 a 求和, 并注意到(19), (20)式, 得到

ε^1 级方程

$$\partial_t^{(1)} \rho + \Delta^{(1)} \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (23)$$

$$\partial_t^{(1)} (\rho u_i) + \Delta_j^{(1)} \pi_{ij}^{(0)} = \Phi_a^{(1)}. \quad (24)$$

ε^2 级方程

$$\partial_t^{(2)} \rho + \Delta^{(2)} \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (25)$$

$$\partial_t^{(2)} (\rho u_i) + \Delta_j^{(2)} \pi_{ij}^{(0)} + \Delta_j^{(1)} (\pi_{ij}^{(1)} + \tilde{\pi}_{ij}^{(1)}) = \Phi_a^{(2)}, \quad (26)$$

其中

$$\pi_{ij}^{(0)} = \sum_a e_{ai} e_{aj} f_a^{\text{eq}},$$

$$\pi_{ij}^{(1)} = \sum_a e_{ai} e_{aj} f_a^{(1)},$$

$$\tilde{\pi}_{ij}^{(1)} = \frac{1}{2} \sum_a e_{ai} e_{aj} (\partial_t^{(1)} + \mathbf{e}_a \cdot \Delta^{(1)}) f_a^{\text{eq}}.$$

这里 $\pi_{ij}^{(0)}$ 是 0 级应力张量, $\pi_{ij}^{(1)}$ 是 1 级应力张量, $\tilde{\pi}_{ij}^{(1)}$ 与 $\pi_{ij}^{(1)}$ 同量级, 是网格尺寸效应引起的修正项.

由(11)式, 得到

$$f_a^{(1)} = -\frac{1}{\tau} (\partial_t^{(1)} + \mathbf{e}_a \cdot \Delta^{(1)}) f_a^{\text{eq}} + \mathbf{e}_a \text{ 的奇次项.}$$

因为

$$\begin{aligned} (\partial_t^{(1)} + \mathbf{e}_a \cdot \Delta^{(1)}) f_a^{\text{eq}} &\approx (\partial_t^{(1)} + \mathbf{e}_a \cdot \Delta^{(1)}) \left[\frac{\rho}{3} (c_s^2 + \mathbf{e}_a \cdot \mathbf{u}) \right] \\ &= \frac{\rho}{3} (e_{ai} e_{aj} \Delta_i^{(1)} u_j - c_s^2 \Delta \cdot \mathbf{u} + \mathbf{e}_a \text{ 的奇次项}), \end{aligned} \quad (27)$$

则

$$\begin{aligned} \pi_{ij}^{(1)} + \tilde{\pi}_{ij}^{(1)} &= \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{\omega} \right] \sum_a e_{ai} e_{aj} (\partial_i^{(1)} + \mathbf{e}_a \cdot \Delta^{(1)}) f_a^{\text{eq}} \\ &= \frac{\rho}{4} \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{\omega} \right] [\Delta_i^{(1)} u_j + \Delta_j^{(1)} u_i + (1 - 4c_s^2) \Delta \cdot \mathbf{u} \delta_{ij}], \end{aligned} \quad (28)$$

而

$$\pi_{ij}^{(0)} = \rho c_s^2 \delta_{ij} + \rho u_i u_j. \quad (29)$$

把(27), (28)式代入(24), (26)式得到

$$\partial_i^{(1)} (\rho u_i) + \Delta_j^{(1)} (\rho c_s^2 \delta_{ij} + \rho u_i u_j) = g c_s^2 \Delta^{(1)} \rho, \quad (30)$$

$$\begin{aligned} &\partial_i^{(2)} (\rho u_i) + \Delta_j^{(2)} (\rho c_s^2 \delta_{ij} + \rho u_i u_j) \\ &- \Delta_j^{(1)} \left[\frac{\rho}{4} \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{\omega} \right] [\Delta_i^{(1)} u_j + \Delta_j^{(1)} u_i + (1 - 4c_s^2) \Delta \cdot \mathbf{u} \delta_{ij}] \right] = g c_s^2 \Delta^{(2)} \rho. \end{aligned} \quad (31)$$

(30)式 $\times \varepsilon +$ (31)式 $\times \varepsilon^2$, 有

$$\begin{aligned} &\partial_i (\rho u_i) + \Delta_j (\rho c_s^2 \delta_{ij} + \rho u_i u_j) \\ &= \left[\frac{1}{4\omega} - \frac{1}{8} \right] [\Delta_j (\rho \Delta_i^{(1)} u_j + \rho \Delta_j^{(1)} u_i) + (1 - 4c_s^2) \Delta_j \cdot (\rho \Delta \cdot \mathbf{u})] + g c_s^2 \Delta \rho. \end{aligned} \quad (32)$$

如果流场中 ρ 的变化很小, $\rho = \rho_0 + \rho'$, 我们只在压强项中考虑 ρ 的微小变化 ρ' , 其余项中的 ρ 都视为常量 ρ_0 , 得到流体力学方程

$$\partial_i \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \Delta) \mathbf{u} = - \frac{(1-g)c_s^2}{\rho_0} \Delta \rho + \left[\frac{1}{4\omega} - \frac{1}{8} \right] [\Delta^2 \mathbf{u} + 2(1-2c_s^2) \Delta (\Delta \cdot \mathbf{u})]. \quad (33)$$

粘滞流体的 Navier-Stokes 方程为

$$\partial_i \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \Delta) \mathbf{u} = - \frac{1}{\rho} \Delta P + \frac{\eta}{\rho} \Delta^2 \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \left[\zeta + \frac{D-2}{D} \eta \right] \Delta (\Delta \cdot \mathbf{u}), \quad (34)$$

式中 D 为维数 ($D=2$ 为二维).

两式相比较可知

$$\text{剪切粘滞系数为} \quad \eta = \frac{2\tau-1}{8} \rho, \quad (35)$$

$$\text{体粘滞系数为} \quad \zeta = \frac{4\tau-1}{8} (1-2c_s^2) \rho, \quad (36)$$

$$\text{而有效声速为} \quad c_s^* = \sqrt{1-g} c_s. \quad (37)$$

从(37)式可见, 只要取 $g < 1$, 就能使 $c_s^* < c_s$. 若取 $g=0$, $c_s^* = c_s$, 即为文献[7]提出的简单声速可调模型.

4 模拟结果与结论

取 $\omega=1$, 则演化方程(7)变成

$$f_a(\mathbf{x} + \mathbf{e}_a, t+1) = f_a^*(\mathbf{x}, t). \quad (38)$$

这个演化方程的优势是最大限度地减小分布函数出负的可能性.

在一个矩形流场中流体从左到右以水平速度 u_0 流动. 初始时刻每一格点有相同的

密度 ($\rho_0 = 1$) 和流速 u_0 . 让网格中心附近某一个格点的密度作周期性振动 $\rho = \rho_0 + A \sin(2\pi t/T)$. 四个边界上每个格点保持 $\rho_0 (= 1)$ 和 u_0 不变. 以 $u_0 = 0$ 时振动传播的速度为模拟声速, 用 c'_s 表示. 图 1 和图 2 是 c'_s (图中用圆点代表) 与由(37)式确定的理论值

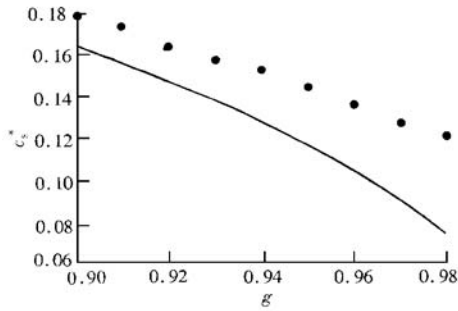


图 1 $c_s = 0.52, A = 0.1, T = 150$, 实线代表 c_s^* , 圆点代表 c'_s

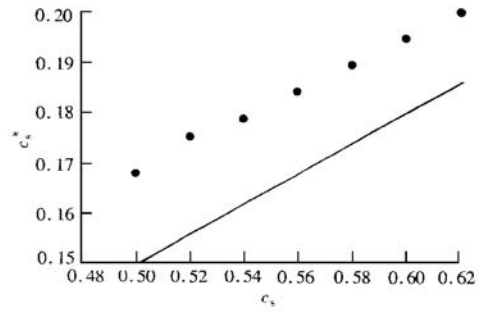


图 2 $g = 0.91, A = 0.1, T = 140$



$M = 1.43$



$M' = 1.90$



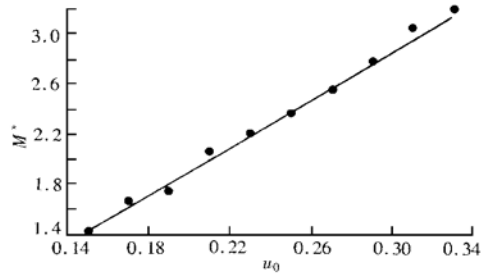
$M' = 2.57$



$M' = 3.14$

图 3 Mach 锥模拟

c_s^* (图中用实线代表) 的对比. 其中图 1 为给定 c_s 对应不同 g 的有效声速, 图 2 为取定 g 对应不同 c_s 的有效声速. $u_0 \neq 0$ 时, 将 $M' = u_0/c'_s$ 定义为模拟 Mach 数. 图 3 是 Mach 锥的模拟. Mach 数的理论值用 $M^* = 1/\sin\theta$ 来定义, 其中 θ 通过图 3 测量得到. 图 4 表示 M' 与 M^* 的对比. 图 1—4 中的所有物理量均已无量纲化.



我们在简单声速可调模型的基础上, 通过引入粒子间的吸引势来软化声速, 建立模拟高 Mach 数下可压缩流动的格子 Boltz- 图 4 $c_s = 0.52, A = 0.1, T = 150, g = 0.99$, 实线代表 M^* , 圆点代表 M'

mann 模型, 有效地提高了 Mach 数. 虽然图 1 和图 2 显示模拟降低声速值与理论预期的还有差距, 但是图 3 表示该模型已经能把 Mach 数提高到 3 以上. 适当调节参量, Mach 数还可以进一步提高. 该模型简单, 易操作, 而且物理图象清晰, 有一定的应用价值. 我们将利用该模型来模拟一些有意义的可压缩流动.

诚挚感谢北京大学力学系陈耀松教授和他的学生提供计算资源和技术指导.

- [1] U. Frish, B. Hasslacher, Y. Pomeau, *Phys. Rev. Lett.*, **56**(1986), 1505.
- [2] G. R. McNamara, G. Zanetti, *Phys. Rev. Lett.*, **61**(1988), 2332.
- [3] D. Bernardin, O. Serre-Guillaume, C. H. Sun, *Physica*, **D47**(1991), 169.
- [4] D. Bernardin, O. Serre-Guillaume, C. H. Sun, Thermal Conduction in 2D-Lattice Gases. In: A. S. Alves ed. *Discrete Model of Fluid Dynamics* (Singapore: World Scientific, 1990), p. 72.
- [5] A. Cancelliere, C. Chang, D. H. Rothman *et al.*, *Phys. Fluids*, **A2**(1990), 2085.
- [6] Appert Cercile, S. Zaleski, *Phys. Rev. Lett.*, **64**(1990), 1.
- [7] F. J. Alexander, H. Chen, S. Chen and G. D. Doolen, *Phys. Rev.*, **A46**(1992), 1967.
- [8] S. Chen, H. Chen and G. D. Doolen *et al.*, *Physica*, **D47**(1991), 979.
- [9] Y. H. Qian and S. A. Orzag., *Euro. Phys. Lett.*, **21**(1993), 255.
- [10] Y. X. Li, L. S. Kang and Z. J. Wu, *Neural Parallel and Scientific Computational*, **1**(1993), 43.
- [11] H. Cornille, Shock Waves for the Two Speeds 8Vi, 14Vi and 24Vi Discrete Boltzmann Models with Temperature in *Proceedings Euromesh Colloquium 267 Series on Advanced Mathematics for Applied Science*. Ed. by A. S. Alves (World Scient., Singapore, 1991), p. 131.

LATTICE BOLTZMANN MODEL FOR COMPRESSIBLE FLOW SIMULATION

YU HUF-DAN^{a)b} ZHAO KAI-HUA^a

^{a)} (*Department of Physics and Center for Nonlinear Sciences, Peking University, Beijing 100871*)

^{b)} (*Department of Physics, Zhejiang Normal University, Jinhua 321004*)

(Received 16 December 1998)

ABSTRACT

We present a Lattice Boltzmann model to simulate compressible flows by introducing an attractive potential based on the simple selectable sound speed model. The corresponding macro-dynamical equation from Chapman-Enskog expansion shows that this model has the advantage to soften sound speed effectively and then the Mach number is raised greatly (up to more than 3). Simulations of March cone and the comparison between theoretical expectations and simulations demonstrate that the scheme is effective in simulation of compressible flows with high Mach numbers, which would open many new applications.

PACC: 4720N; 4720; 0270; 5110