研究热流体的 13 速格子 Bhatnagar-Gross-Krook 模型*

李华兵
(桂林电子工业学院基础部,桂林 541004)
孔令江 刘慕仁 何 云
(广西师范大学物理与电子科学系,桂林 541004)
(1999 年 2 月 10 日收到;1999 年 7 月 13 日收到修改稿)

采用 13 速六方格子 Bhatnagar-Gross-Krook 模型研究热流体力学. 在根据 Fourier 热导定律确定局域平衡分布函数的系数时,可引入参数 k,使热导系数 $\lambda=(2\rho\epsilon+9k)\left(\tau-\frac{1}{2}\right)$,切粘滞系数与热导系数之比的 Prandtl 数不再局限于常数 1/2,从而扩大了模型的应用范围. 该模型可用于高雷诺数的热流体的模拟.

PACC:0540;0351

1 引 言

在格子气自动机模型基础上发展起来的格子 Boltzmann(LB)方法[1],已被成功地用来模拟没有温度影响的流场分布[2—6]. 但是对于实际的粘滞流,只要存在速度梯度就必然存在热量的产生和输运,因而很有必要把 LB 方法进一步扩展到热流体领域. 文献[7—11]用 LB 方法对热流体性质进行研究,得到了一些有意义的结果. 但在这些研究热流体的模型中,切粘滞系数 $\mu=\rho\epsilon\left(\tau-\frac{1}{2}\right)$,热流矢量 $\boldsymbol{q}^{(1)}$ 取 $\boldsymbol{q}^{(1)}=2\rho\epsilon\left(\tau-\frac{1}{2}\right)\nabla\epsilon$,使热导系数 $\lambda=2\rho\epsilon\left(\tau-\frac{1}{2}\right)$,切粘滞系数 μ 和热导系数 λ 之比的 Prandtl 数 $P_r=\mu/\lambda=1/2$,因此,模型的应用范围受到了限制.

本文将用速度大小为 0,1,$\sqrt{3}$的 13 速六方格子 Bhatnagar-Gross-Krook(BGK)模型(图 1)研究热流体运动. 该模型由于对称性高,因此只要满足能量守恒和伽利略不变性,则压力与速度无关自动得到满足. 同时在由热流矢量确定局域平衡分布函数的系数时,取 $\boldsymbol{q}^{(1)}=(2\rho\epsilon+9k)\left(\tau-\frac{1}{2}\right)\nabla\epsilon$ 的形式,即引入了参数 k,使 $P_r=\mu/\lambda$ 随 k 的取值可以小于、等于或大于 1/2,从而扩大了模拟热流体的范围,实际模拟表明,该模型可以有效地降低切粘滞系数,从而用于高雷诺数的热流体的模拟. 最后用该模型模拟了 Couette 流,模拟结果与理论结果符合.

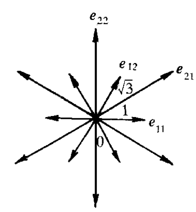


图 1 13 速六方格子示意图

2 13 速六方形格子 BGK 模型

模型如图 1 所示,图中 e_{21}为 e_{11},e_{12}的矢量和. 单粒子密度分布函数 $f_{p\alpha}(\boldsymbol{r},t)$的动力学方程采用 BGK 模型,即单弛豫演化方程

$$f_{p\alpha}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{e}_{p\alpha},t+1)-f_{p\alpha}(\boldsymbol{r},t)$$
$$=-\frac{1}{\tau}\left(f_{p\alpha}(\boldsymbol{r},t)-f_{p\alpha}^{eq}(\boldsymbol{r},t)\right),\qquad(1)$$

* 国家自然科学基金(批准号:19762001)及广西壮族自治区自然科学基金(批准号:96130057)资助的课题.

其中 $f_{p\alpha}^{eq}(\boldsymbol{r},t)$ 为局域平衡分布函数，$p=0,1,2$ 为速度的大小，$\alpha=1,\cdots,6$ 表示速度的方向，并约定 $p=0$，$\alpha=0$ 时，$e_{00}=0$，τ 为弛豫时间，稳定性要求 $\tau>0.5$.

2.1　利用多尺度技术导出连续性方程、动量和能量方程

引进一个正的小参数 ε，将 $f_{p\alpha}(\boldsymbol{r},t)$ 按 ε 展开：

$$f_{p\alpha} = f_{p\alpha}^{eq} + \varepsilon f_{p\alpha}^{(1)} + \varepsilon^2 f_{p\alpha}^{(2)} + \cdots. \tag{2}$$

由质量、动量和能量守恒，有

$$\sum_{p\alpha} f_{p\alpha}^{(j)} = 0, \quad \sum_{p\alpha} \boldsymbol{e} f_{p\alpha}^{(j)} = 0,$$
$$\sum \frac{1}{2}\boldsymbol{e}^2 f_{p\alpha}^{(j)} = 0 \qquad j = 1,2,\cdots \tag{3}$$

引进 t_1，t_2 时间尺度和 r_1 空间尺度：$t_1=\varepsilon t$，$t_2=\varepsilon^2 t$，$\boldsymbol{r}_1=\varepsilon \boldsymbol{r}$. 将 $f_{\alpha\alpha}^{eq}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{e}_{p\alpha},t+1)$ 作 Taylor 展开，只保留 ε^2 项.

$$\left(\frac{\partial}{\partial t_1} + e_{p\alpha j}\frac{\partial}{\partial x_{1j}}\right) f_{p\alpha}^{eq} = -\frac{1}{\tau} f_{p\alpha}^{(1)}, \tag{4}$$

$$\frac{\partial}{\partial t_2} f_{p\alpha}^{eq} + \left(1-\frac{1}{2\tau}\right)\left(\frac{\partial}{\partial t_1} f_{p\alpha}^{(1)} + e_{p\alpha j}\frac{\partial}{\partial x_{1j}} f_{p\alpha}^{(1)}\right) = -\frac{1}{\tau} f_{p\alpha}^{(2)}. \tag{5}$$

由(4)和(5)式可以导出连续性方程、动量方程和能量方程：

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla\cdot\rho\boldsymbol{u} = 0, \tag{6}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho\boldsymbol{u} + \nabla\cdot\boldsymbol{\pi} = 0, \tag{7}$$

$$\frac{\partial\rho\epsilon}{\partial t} = -\nabla\cdot\boldsymbol{q} - \nabla\cdot(\rho\epsilon\boldsymbol{u}) + \mathbf{P}:\nabla\boldsymbol{u}, \tag{8}$$

其中 π 为动量通量张量，P 为压强张量，$\rho\epsilon$ 为内能，q 为热流矢量，分别为

$$\boldsymbol{\pi} = \sum_{p\alpha}\left[f_{p\alpha}^{eq} + \left(1-\frac{1}{2\tau}\right)\varepsilon f_{p\alpha}^{(1)}\right]\boldsymbol{e}_{p\alpha}\boldsymbol{e}_{p\alpha}, \tag{9}$$

$$\mathbf{P} = -\sum_{p\alpha}\left[f_{p\alpha}^{eq} + \left(1-\frac{1}{2\tau}\right)\varepsilon f_{p\alpha}^{(1)}\right](\boldsymbol{e}_{p\alpha} - \boldsymbol{u})(\boldsymbol{e}_{p\alpha} - \boldsymbol{u}), \tag{10}$$

$$\rho\epsilon = \sum_{p\alpha} f_{p\alpha}\frac{1}{2}(\boldsymbol{e}_{p\alpha} - \boldsymbol{u})^2, \tag{11}$$

$$\boldsymbol{q} = \sum_{p\alpha}\left[f_{p\alpha}^{eq} + \left(1-\frac{1}{2\tau}\right)\varepsilon f_{p\alpha}^{(1)}\right]\frac{1}{2}(\boldsymbol{e}_{p\alpha} - \boldsymbol{u})^2(\boldsymbol{e}_{p\alpha} - \boldsymbol{u}) = \boldsymbol{\pi} + \rho\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}. \tag{12}$$

在能量方程(8)中，等号左边为能量的时间变化率，右边第一项为热扩散的贡献，第二项为热传导的贡献，第三项为粘滞热产生的贡献. 而 q 可以写为

$$\boldsymbol{q} = \boldsymbol{q}^{eq} + \boldsymbol{q}^{(1)}, \tag{13}$$

其中

$$\boldsymbol{q}^{eq} = \sum_{p\alpha} f_{p\alpha}^{eq}\frac{1}{2}(\boldsymbol{e}_{p\alpha} - \boldsymbol{u})^2(\boldsymbol{e}_{p\alpha} - \boldsymbol{u}), \tag{14}$$

$$\boldsymbol{q}^{(1)} = \sum_{p\alpha}\left(1-\frac{1}{2\tau}\right)\varepsilon f_{p\alpha}^{(1)}\frac{1}{2}(\boldsymbol{e}_{p\alpha} - \boldsymbol{u})^2(\boldsymbol{e}_{p\alpha} - \boldsymbol{u}). \tag{15}$$

同理

$$\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\pi}^{eq} + \boldsymbol{\pi}^{(1)}, \tag{16}$$

其中

$$\boldsymbol{\pi}^{eq} = \sum_{p\alpha} f_{p\alpha}^{eq}\boldsymbol{e}_{p\alpha}\boldsymbol{e}_{p\alpha}, \tag{17}$$

$$\boldsymbol{\pi}^{(1)} = \sum_{p\alpha}\left(1-\frac{1}{2\tau}\right)\varepsilon f_{p\alpha}^{(1)}\boldsymbol{e}_{p\alpha}\boldsymbol{e}_{p\alpha}. \tag{18}$$

2.2　局域平衡分布函数 $f_{p\alpha}^{eq}$ 的确定

由统计物理，局域平衡分布函数可表示为局域平衡量的函数，因此可把 $f_{p\alpha}^{eq}$ 展开为 u 的幂级数(保留到 u^3 项)：

$$f_{p\alpha}^{eq} = A_p + B_p\boldsymbol{e}_{p\alpha}\cdot\boldsymbol{u} + C_p\boldsymbol{u}^2 + D_p(\boldsymbol{e}_{p\partial}\cdot\boldsymbol{u})^2 + E_p(\boldsymbol{e}_{p\alpha}\cdot\boldsymbol{u})^3 + F_p\boldsymbol{e}_{p\alpha}\cdot\boldsymbol{u}^3 + O(\boldsymbol{u}^4). \tag{19}$$

$f_{p\alpha}^{eq}$ 中的展开系数可根据守恒律和动力学规律的要求来确定.

由质量、动量、能量守恒及伽利略不变性可得

$$\rho = A_0 + 6A_1 + 6A_2,$$
$$C_0 + 6C_1 + 6C_2 + 3D_1 + 9D_2 = 0, \tag{20}$$

$$3B_1 + 9B_2 = \rho,$$
$$\frac{9}{4}E_1 + \frac{81}{4}E_2 + 3F_1 + 9F_2 = 0, \tag{21}$$

$$\rho\epsilon = 3A_1 + 9A_2,$$
$$3C_1 + 9C_2 + \frac{3}{2}D_1 + \frac{27}{2}D_2 - \frac{1}{2}\rho = 0, \tag{22}$$

$$\frac{3}{2}D_1 + \frac{27}{2}D_2 = \rho. \tag{23}$$

在局域平衡下

$$\boldsymbol{q}^{eq} = 0, \tag{24}$$

可得

$$\frac{3}{4}B_1 + \frac{27}{4}B_2 = \rho\epsilon, \tag{25}$$

$$3F_1 + 27F_2 + \frac{9}{4}E_1 + \frac{243}{4}E_2 = \rho, \tag{26}$$

而

$$q_i^{(1)} = \left(\frac{1}{4} - \frac{\tau}{2}\right)\left(-4\epsilon^2\frac{\partial}{\partial x_i}\rho - 4\rho\epsilon\frac{\partial}{\partial x_i}\epsilon\right.$$

$$+\rho\frac{\partial}{\partial x_i}\epsilon+\epsilon\frac{\partial}{\partial x_i}\rho+18\frac{\partial}{\partial x_i}A_2-2\boldsymbol{u}^2\frac{\partial}{\partial x_i}\rho\epsilon$$
$$+18\frac{\partial}{\partial x_i}C_2\boldsymbol{u}^2+\frac{27}{2}\frac{\partial}{\partial x_i}D_2\boldsymbol{u}^2-2u_j\frac{\partial}{\partial x_i}\rho\epsilon u_j$$
$$-6\frac{\partial}{\partial x_j}\rho\epsilon u_iu_j+\frac{\partial}{\partial x_i}\rho u_iu_j+27\frac{\partial}{\partial x_j}D_2u_iu_j\Big).$$

根据 Fourier 热导定律要求：$q_i^{(1)}=-\lambda\nabla\epsilon$，即

$$\frac{\partial A_2}{\partial\rho}=\frac{1}{18}(4\epsilon^2-\epsilon),$$

令 $A_2=A_2(\rho,\epsilon)$，可得

$$A_2=\frac{1}{18}\rho\epsilon(4\epsilon-1)+f(\epsilon),\qquad(27)$$

同理可以求出

$$C_2=\frac{1}{18}\rho\left(\frac{1}{2}-2\epsilon\right)\text{（取积分常数为零）},\qquad(28)$$

$$D_2=\frac{1}{27}\rho(6\epsilon-1)\text{（取积分常数为零）},\qquad(29)$$

最后得

$$q_i^{(1)}=\left(\frac{1}{4}-\frac{\tau}{2}\right)\left[(4\rho\epsilon+18f'(\epsilon))\frac{\partial}{\partial\chi_i}\epsilon-3\boldsymbol{u}^2\frac{\partial}{\partial x_i}\rho\epsilon\right].$$

在压差不大的情况下略去三阶小量

$$q_i^{(1)}=-\lambda\frac{\partial\epsilon}{\partial x_i}=-\lambda\nabla\epsilon,$$

其中 $\lambda=-\left(\frac{1}{4}-\frac{\tau}{2}\right)[4\rho\epsilon+18f'(\epsilon)]$. 取 $f(\epsilon)=k\epsilon$，可得 $f'(\epsilon)=k$. 就有 $\lambda=(2\rho\epsilon+9k)\left(\tau-\frac{1}{2}\right)$.

联立求解方程(20—(29)，可得 $f_{p\alpha}^{eq}$ 的系数的一组解：

$$A_0=\rho\left(1-\frac{8}{3}\epsilon+\frac{8}{3}\epsilon^2\right)+12k\epsilon,$$

$$A_1=\frac{1}{6}\rho\epsilon(3-4\epsilon)-3k\epsilon,$$

$$A_2=\frac{1}{18}\rho\epsilon(4\epsilon-1)+k\epsilon,$$

$$B_1=\rho\epsilon\left(\frac{1}{2}-\frac{2}{3}\epsilon\right),$$

$$B_2=\frac{1}{18}\rho(4\epsilon-1),$$

$$C_0=\frac{4}{3}\rho(2\epsilon-1),$$

$$C_1=\rho\left(\frac{1}{3}\epsilon-\frac{1}{4}\right),$$

$$C_2=\frac{\rho}{18}\left(\frac{1}{2}-2\epsilon\right),$$

$$D_1=\rho(1-2\epsilon),D_2=\frac{1}{27}\rho(6\epsilon-1),$$

$$E_1=-\frac{2}{9}\rho,\quad E_2=\frac{2}{81}\rho,$$

$$F_1=F_2=0.\qquad(30)$$

同时可得本构方程、Navier-Stokes 方程和热传导方程：

$$\mathbf{P}_{ij}=-p\delta_{ij}+2\mu\left[s_{ij}-\frac{1}{2}s_{kk}\delta_{ij}\right],\qquad(31)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho\boldsymbol{u}+\nabla\cdot\rho\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}+\nabla p-2\nabla\cdot\left[\mu\left(\hat{s}-\frac{1}{2}\nabla\cdot\boldsymbol{u}\hat{I}\right)\right]=0.\qquad(32)$$

$$\frac{\partial\rho\epsilon}{\partial t}=-\nabla\cdot(\lambda\nabla\epsilon)-\nabla\cdot(\rho\epsilon\boldsymbol{u})-p\nabla\cdot\boldsymbol{u}+2\mu\hat{s}:\nabla\boldsymbol{u}-2\mu(\nabla\cdot\boldsymbol{u})^2,\qquad(33)$$

其中 $p=\rho\epsilon$ 为有效压力，$s_{ij}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)$ 为变形速度对称张量，$\mu=\rho\epsilon\left(\tau-\frac{1}{2}\right)$ 为切粘滞系数，$\lambda=(2\rho\epsilon+9k)(\tau-0.5)$ 为热导系数.

2.3 参数 k 的讨论和确定

参数 k 是根据 Fourier 热导定律，在用热流矢量确定局域平衡分布函数 $f_{p\alpha}^{eq}(\boldsymbol{r},t)$ 中与质量守恒和能量守恒有关的系数(A_P,C_P,D_P)引入的.

该模型的切粘滞系数

$$\mu=\rho\epsilon\left(\tau-\frac{1}{2}\right),\qquad(34)$$

热导系数

$$\lambda=(2\rho\epsilon+9k)(\tau-0.5),\qquad(35)$$

由此可得如下结果：

1)由(35)式，$\lambda>0$，$\tau>0.5$，有 $2\rho\epsilon+9k>0$，从而 $k>-\frac{2\rho\epsilon}{9}$，即 k 的取值范围为 $-\frac{2\rho\epsilon}{9}<k<\infty$；

2)综合(34)和(35)式

$$k=\frac{\rho\epsilon\left(\frac{\lambda}{\mu}-2\right)}{9}\quad\text{或}\quad k=\frac{(\lambda-2\mu)}{9\left(\tau-\frac{1}{2}\right)},$$

$$P_r=\frac{\mu}{\lambda}\begin{cases}>\frac{1}{2},-\frac{2\rho\epsilon}{9}<k<0,\\=\frac{1}{2},k=0,\\<\frac{1}{2},k>0.\end{cases}$$

总之，给定了 ρ，ϵ 和描述热流体的 Prandt1 数，就可

求出 k 的具体数值，同样地，给定了 ρ，ϵ 和 k，则 prandtl 数也就确定了. 对比上式可见，文献[7—11]所研究的模型就是当 $P_r = 1/2$，$k = 0$ 的情况.

3　Couette 流的数值模拟

Couette 流流场区域如图 2 所示. 设上边界流速为 u_a，温度为 T_a，下边界流速为零，温度为 T_b（这里直接用温度表示内能），由(32)和(33)式可求出 Couette 流稳定时的解析解为

$$u_x = \frac{y}{h}u_a,\quad T = -\frac{1}{2}\frac{\mu}{\lambda}\left(\frac{u_a}{h}\right)^2 y^2 + \frac{T_a - T_b + \frac{1}{2}\frac{\mu}{\lambda}u_a^2}{h}y + T_b.$$

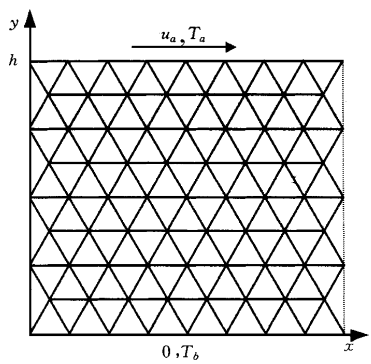
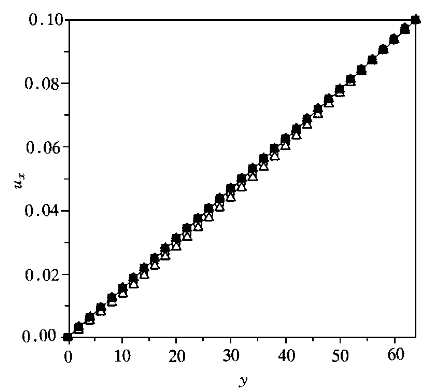


图 2　流场区域图

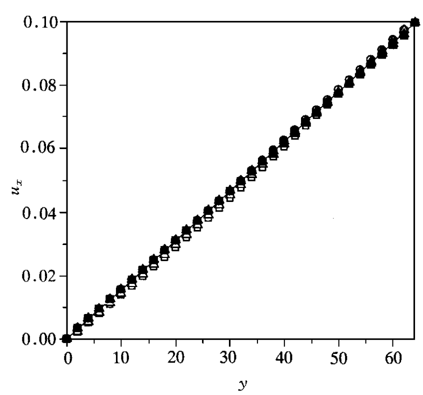
为了用本文的模型按(1)式模拟 Couette 流，把流场划分为 32×64 网格，左右边界采用周期性边界条件，以模拟水平方向为无限大的流场. 上、下边界是恒速、恒温边界，通过强制施加局域平衡分布来实现. 流场初始分布采用匀密度、匀温度的局域平衡分布（实验表明，初值的选取对最终结果并无影响，而只影响达到定态的时间步数）. Reynolds 数定义为 $R_e = \frac{u_a L}{\nu}$，其中 L = 网格的竖向尺寸 $\times\sqrt{3}/2$，ν 为运动粘滞系数，$\nu = \mu/\rho$，选择不同的 τ，可得不同的 R_e. 对 $R_e = 20$，$k = 0.1$，0，-0.13；$R_e = 3000$，$k = -0.1$，-0.13，-0.15，且上、下边界等温及上、下边界有温差的 Couette 流进行了模拟（模拟中初始密度取 2.6，初始温度取 0.5）. 理论、数值模拟的结果及有关数据示于图 3 和图 4.

4　小　　结

本文在用热流矢量确定局域分布函数的系数时，引进了参数 k，使热导系数 $\lambda = (2\rho\epsilon + 9k)(\tau - 0.5)$，因而描述热流体性质的 P_r 数随 k 的取值而异，所以该模型可以描述不同性质的热流体. 用该模型模拟 Couette 流时，图 3 所示的结果表明，流场中的速度分布的模拟结果与理论结果精确符合；而在如图 4 所示流场温度分布的模拟结果表明，在上、下边界等温的情况下，当 $R_e = 20$，$k = 0.1$；$R_e = 3000$，$k = -0.10$ 时，数值模拟结果与理论结果的相对误

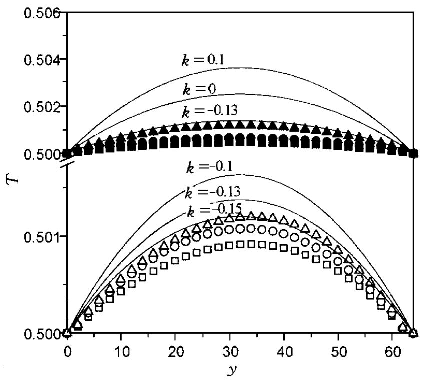


(a)上、下边界等温情况

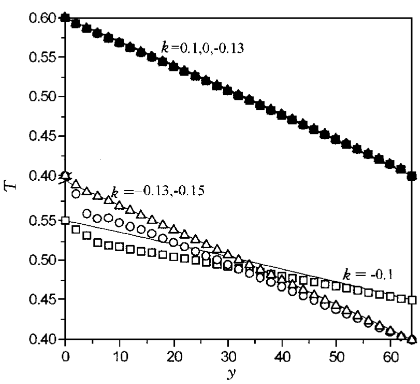


(b)上、下边界有温差情况

图 3　Couette 流的速度分布图　——为解析解；■，●，▲为 $R_e = 20$，k 分别为 0.1，0，−0.13 的模拟结果；□，○，△为 $R_e = 3000$，k 分别为 −0.1，−0.13，−0.15 的模拟结果



(a)上、下边界等温情况



(b)上、下边界有温差情况

图 4 Couette 流的温度分布图 符号说明同图 3

差在 0.8% 以内,且当 k 变小时,其误差显著减小.在上、下边界存有温差的情况下,对于 $R_e=20$ 的数值模拟结果与理论结果精确符合;而在 $R_e=3000$,$k=-0.1$ 时,数值模拟结果与理论结果的相对误差的最大值在 3% 以内,随着 k 值变小,其误差也显著减小,当 $k=-0.15$ 时,数值模拟结果与理论结果也精确符合.综上所述,该模型在高 Reynolds 数的情况下仍能模拟流体的真实行为,因此该模型可望用于湍流的研究.

[1] G. R. McNamara, B. Alder, G. Zanetti, *Phys. Rev. Lett.*, **61** (1988), 2322.

[2] Y. H. Qian, D. d'Humieres, P. Lallemand, *Euro. Phys. Lett.*, **17** (1992), 479.

[3] H. Chen, S. Chen, W. H. Matthaeus, *Phys. Rev.*, **A45** (1992), 5339.

[4] 李元香等,计算物理,**12** (1995),457 [Li Yuan-xiang *et al.*, *Jisuan Wuli*, **12** (1995), 457 (in Chinese)].

[5] 聂小波,计算物理,**15** (1998),1 [Nie Xiao-bo, *Jisuan Wuli*, **15** (1998), 1 (in Chinese)].

[6] Fang Hai-ping, Lin Zhi-fang, Tao Rui-bao. *Chin. Phys. Lett.*, **14** (1997), 912.

[7] F. J. Alexander, S. Chen, J. D. Sterling, *Phys. Rev.*, **E47** (1993), R2249.

[8] Y. Chen, H. Ohashi, M. Akiyama, *J. Stat. Phys.*, **81** (1/2) (1995), 71.

[9] 李克平等,广西师范大学学报(自然科学版),**4** (1997),7 [Li Ke-ping *et al.*, *J. Guangxi Normal University* (*Natural Science Edition*), **4** (1997), 7 (in Chinese)].

[10] 熊盛武等,计算物理,**15** (1998),439 [Xiong Shen-wu *et al.*, *Jisuan Wuli*, **15** (1998), 439 (in Chinese)].

[11] He Guang, Zhao Kai-hua, *Commun. Theor. Phys.*, **29** (1998), 623.

A 13-SPEED LATTICE-BHATNAGAR-GROSS-KROOK MODEL IN THERMOHYDRODYNAMICS RESEARCH*

LI HUA-BING
(*Department of Guilin-Electronic-Industry-Institute*, *Guilin* 541004)
KONG LING-JIANG　LIU MU-REN　HE YUN
(*Department of Physics and Electronic Science*, *Guangxi Normal University*, *Guilin* 541004)
(Received 10 February 1999; revised manuscript received 13 July 1999)

ABSTRACT

A 13-speed lattice Bhatnagar-Gross-Krook model on hexagonal lattice is used to investigate thermohydrodynamics. An adjustable parameter k is introduced in the process to determine the parameter in local equilibrium distribution function according to Fourier law. As a result, the thermal conductivity is $\lambda = (2\rho\epsilon + 9k)(\tau - 0.5)$, so that the Prandtl number becomes tunable and Reynolds number can be raised effectively.

PACC: 0540; 0351

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 19762001) and the Natural Science Foundation of Guangxi Zhuang Autonomous Region of China (Grant No. 96130057).