

用格子 Boltzmann 模型模拟激波现象*

冯士德¹⁾ 鸟原道久²⁾

¹⁾中国科学院大气物理研究所,北京 100029)

²⁾神户大学自然科学研究科计算物理研究室,神户市 nada 区六甲台 1-1,日本)

(2000 年 9 月 22 日收到,2000 年 10 月 13 日收到修改稿)

根据微观和宏观之间的质量、动量、能量守恒准则,建立了一个两维的 $D2Q13$ 格子 Boltzmann 模型,可从该 $D2Q13$ 模型出发推导出宏观的流体力学方程,所得动量方程和 Navier-Stokes 方程相比,在黏性输运项上有明显的改进,用该模型对冲击波在障碍物表面上的折射和反射现象的数值模拟都得到了比较满意的结果,而且数值稳定性也很好,证明了 $D2Q13$ 模型的适宜性.

关键词: Boltzmann 模型,分布函数,冲击波,流体力学方程

PACC: 0340, 0340G, 0340K

1 引 言

从微观的观点出发,宏观的流体是由大量的微观粒子所构成的,正是由于微观粒子的无规则热运动才使流体产生各种复杂的物理现象. 格子 Boltzmann 模型(Lattice Boltzmann Equation Models, LBE)就是以统计物理和 Cellular Automata^[2,3]原理为基础发展而来的一种模拟各种复杂系统物理现象的新方法. LBE 模型是利用 Boltzmann 方程来研究在空间离散格子点上由微观粒子所组成的粒子微团运动规律,规定粒子微团沿离散的格子线移动,在格子点上发生碰撞. 而宏观流体的物理变量用粒子微团和它的运动速度来定义. LBE 模型在模拟各种复杂系统物理现象等方面得到了广泛的应用,但它也存在一些不足,在模拟超音速流动现象时效果不是很理想,只是对模拟简单的管内冲击波现象时效果比较满意. 对于冲击波在障碍物表面上的折射和反射现象的数值模拟还没有取得成功. 针对这一不足,在这一研究里我们将建立一个两维的 $D2Q13$ 格子 Boltzmann 模型,这一模型采用关于流体速度三阶精度的 Maxwell 形粒子速度平衡分布函数^[5,7],粒子运动的控制方程采用简化的 Boltzmann 方程即 BGK 方程^[3],模型严格满足质量守恒、动量守恒和能量守恒

的准则,可从该模型出发推导出宏观的流体力学方程. 令人感兴趣的是从该模型推导出的动量方程和 Navier-Stokes 方程相比,对黏性输运项有明显的改进,在 Navier-Stokes 黏性输运项的基础上增加了非定常的动量通量项. 这一项可能在模拟流体的旋涡运动时起着重要的作用. 利用这一 LBE 模型对冲击波在障碍物表面上的折射和反射现象的数值模拟都得到了比较满意的结果,而且数值稳定性也很好. 因而该模型完全适用于冲击波和普通流体流动现象的数值模拟.

2 格子 Boltzmann 模型

粒子微团运动的控制方程是 Boltzmann 方程, Boltzmann 方程能比较真实地描述微观粒子微团的运动规律. 微观粒子微团由粒子速度分布函数 f_{ki} 代表,它定义为:在位置 r_{α} ,时刻 t 和粒子运动速度为 $c_{k\alpha}$ 的微团内所包含的粒子数量,下标 k 是代表在一个格子点上所含的粒子种类数, i 是粒子运动方向数, α 代表坐标指数. 在 LBE 模型中,如果采用不同的离散网格,那么当地平衡粒子速度分布函数的选取也不同. 在这里采用如图 1 所示的六角格子,在每个离散的格子点上含有两种速度不同的粒子,每一种粒子在所有方向的运动速度都有一个相同的

*教育部和中国科学院大气物理研究所留学回国人员启动基金(批准号:8-1502 A-200060,7-200053),中国科学院大气物理研究所 LASG 优秀国家重点实验基金(批准号:49823002 和 KZCX2-203)资助的课题.

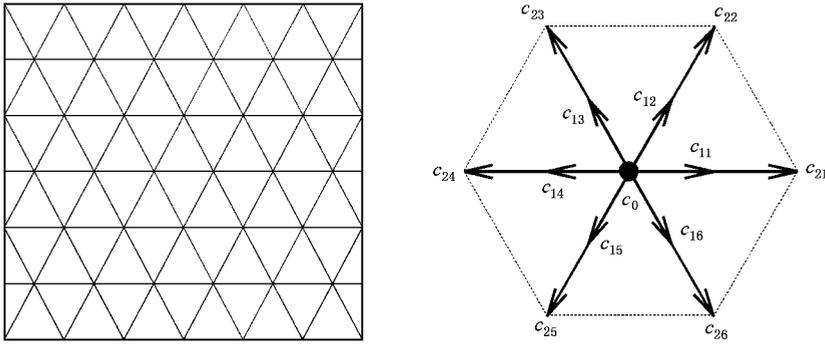


图 1 LBE D2Q13 模型的两维六角形离散格子(这里粒子速度 $c_{2i} = 2c_{1i}$)

模 $|c_{k\alpha}| = c_k = \text{const}$. 微观粒子微团和宏观流体质量、动量和能量之间应该满足如下准则^[4 8]:质量关系准则,

$$\rho = \sum_k \sum_i f_{ki}; \quad (1)$$

动量关系准则,

$$\rho u_\alpha = \sum_k \sum_i f_{ki} c_{k\alpha}; \quad (2)$$

能量关系准则,

$$\frac{1}{2} \rho u^2 + \rho e = \frac{1}{2} \sum_k \sum_i f_{ki} c_k^2. \quad (3)$$

为了能正确获得动量方程,动量通量还应满足

$$P \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta = \sum_k \sum_i f_{ki}^{\text{eq}} c_{k\alpha} c_{k\beta}, \quad (4)$$

$$\delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1, & \alpha = \beta, \\ 0, & \alpha \neq \beta. \end{cases}$$

能量通量

$$\left(\frac{1}{2} \rho u^2 + \rho e + P \right) u_\alpha = \frac{1}{2} \sum_k \sum_i f_{ki} c_k^2 c_{k\alpha}, \quad (5)$$

这里 P 是压力, ρ 是流体的密度, e 是单位质量流体的内能. 利用 Chapman-Enskog 展开法将粒子速度分布函数在当地平衡速度分布的邻域内渐近展开^[2 3], 可得

$$f_{ki} = f_{ki}^{\text{eq}} + f_{ki}^{\text{neq}}, \quad (6)$$

$$f_{ki}^{\text{neq}} = f_{ki}^{\langle 1 \rangle} + f_{ki}^{\langle 2 \rangle} + \dots + f_{ki}^{\langle n \rangle}, \quad (7)$$

$$f_{ki}^{\langle n \rangle} = O(\varepsilon^{\langle n \rangle}), \quad (8)$$

$$\partial^{\langle n \rangle} f_{ki}^{\langle n \rangle} = O(\varepsilon^{\langle n+1 \rangle}), \quad (9)$$

这里 $f_{ki}^{\langle 0 \rangle} = f_{ki}^{\text{eq}}$ 非平衡分布 f_{ki}^{neq} 对密度、动量、能量没有贡献^[1], 即

$$\sum_k \sum_i f_{ki}^{\langle n \rangle} = 0, \quad (10)$$

$$\sum_k \sum_i f_{ki}^{\langle n \rangle} c_{k\alpha} = 0, \quad (11)$$

$$\sum_k \sum_i f_{ki}^{\langle n \rangle} c_k^2 = 0. \quad (12)$$

当地粒子平衡速度分布函数 f_{ki}^{eq} 采用的 Maxwell 形分布

$$f_{ki}^{\text{eq}} = A_k \rho \exp[E (c_{k\alpha} - u_\alpha)^2], \quad (13)$$

将其在 $u_\alpha = 0$ 处展开,并精确到三阶^[6],可得

$$f_{ki}^{\text{eq}} = W_k \rho \left(1 - 2 E c_{k\alpha} u_\alpha + 2 E^2 c_{k\alpha} c_{k\beta} u_\alpha u_\beta + E u^2 - 2 E^2 c_{k\alpha} u_\alpha u^2 - \frac{4}{3} E^3 c_{k\alpha} c_{k\beta} c_{k\gamma} u_\alpha u_\beta u_\gamma \right) \quad (14)$$

$$W_k = A_k e^{E_k c_k^2},$$

这里 W_k 和 E 是由上述守恒准则决定的常数. 将 (6)(7)(10)(11)(12) 式和平衡分布函数 (14) 式代入到准则 (1)(2)(3)(4) 和 (5) 式当中去, 可相应的解得权 W_k 和系数 E 为

$$E = -\frac{D}{4e},$$

$$W_0 = 1 + \frac{2e^2(D+2) - 5Dec_1^2}{2Dc_1^4},$$

$$W_1 = \frac{8Dec_1^2 - 4e^2(D+2)}{3bDc_1^4},$$

$$W_2 = \frac{2e^2(D+2) - Dec_1^2}{6bDc_1^4},$$

$$P = \frac{2}{D} \rho e,$$

这里 D 是空间维数, b 是格子方向线数, W_0 和 W_k 分别是静止粒子的权和运动粒子的权.

3 流体力学方程

一个 LBE 模型是否能够正确的模拟宏观流体力学现象,在理论上可以通过还原流体力学方程的方法来给与证明. 本 D2Q13 模型采用简化的 BGK 方程

$$f_{ki}(r_\alpha + c_{kia} \delta t, t + \delta t) - f_{ki}(r_\alpha, t) = \Omega, \quad (15)$$

$$\Omega = -\frac{1}{\tau} [f_{ki}(r_\alpha, t) - f_{ki}^{\text{eq}}(r_\alpha, t)].$$

利用 Taylor 级数展开法将方程 (15) 左侧第一项关于时间 δt 分别展开到一阶和二阶, 可得

$$\delta t \cdot \frac{\partial f_{ki}}{\partial t} + c_{kia} \frac{\partial f_{ki}}{\partial r_\alpha} = -\frac{1}{\tau \delta t} [f_{ki} - f_{ki}^{\text{eq}}], \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \delta t^2 \cdot \frac{\partial f_{ki}}{\partial t} + c_{kia} \frac{\partial f_{ki}}{\partial r_\alpha} + \frac{\delta t}{2} c_{kia} c_{ki\beta} \frac{\partial^2 f_{ki}}{\partial r_\alpha \partial r_\beta} \\ + \delta t c_{kia} \frac{\partial^2 f_{ki}}{\partial t \partial r_\alpha} + \frac{\delta t}{2} \frac{\partial^2 f_{ki}}{\partial t^2} = -\frac{1}{\tau \delta t} [f_{ki} - f_{ki}^{\text{eq}}]. \end{aligned} \quad (17)$$

将 Chapman-Enskog 展开 (6) 和 (9) 式代入上式, 可得

$$\epsilon \cdot \frac{\partial f_{ki}^{\text{eq}}}{\partial t} + c_{kia} \frac{\partial f_{ki}^{\text{eq}}}{\partial r_\alpha} = -\frac{1}{\tau \delta t} f_{ki}^{\text{neq}}, \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \epsilon^2 \cdot \frac{\partial f_{ki}^{\text{eq}}}{\partial t} + c_{kia} \frac{\partial f_{ki}^{\text{eq}}}{\partial r_\alpha} + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \left(\frac{\partial f_{ki}^{\text{neq}}}{\partial t} \right. \\ \left. + c_{kia} \frac{\partial f_{ki}^{\text{neq}}}{\partial r_\alpha}\right) = -\frac{1}{\tau \delta t} f_{ki}^{\text{neq}}. \end{aligned} \quad (19)$$

对 (19) 式求和并考虑到 (1) 和 (2) 式, 可获得连续方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\alpha \rho u_\alpha}{\partial r_\alpha} = 0. \quad (20)$$

用粒子速度 c_{kia} 乘上 (19) 式再对其求和并考虑到 (2)(4)(11) 和 (18) 式, 可得动量方程

$$\rho \frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + \rho u_\alpha \frac{\partial u_\beta}{\partial r_\alpha} = -\frac{\partial P}{\partial r_\alpha} + \frac{\partial F_\mu}{\partial r_\alpha}, \quad (21)$$

$$P = \frac{2}{D} \rho e,$$

$$\begin{aligned} F_\mu = \rho \nu \frac{\partial u_\alpha}{\partial r_\beta} + \frac{2e\delta t}{D} \left(\frac{1}{2} - \tau\right) \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial r_\alpha} \\ + \frac{2\rho\delta t}{D} \left(\tau - \frac{1}{2}\right) \frac{\partial e}{\partial t} \delta_{\alpha\beta} + \delta t \left(\tau - \frac{1}{2}\right) \frac{\partial \rho u_\alpha u_\beta}{\partial t}, \\ \nu = \frac{2e\delta t}{D} \left(\tau - \frac{1}{2}\right), \end{aligned}$$

这里 ν 是动黏性系数, F_μ 是黏性应力, 它和 Navier-Stokes 黏性输运项相比, 多了一个非定常的温度和动量通量项. McNamara^[4] 认为用 LBE 模型做湍流的数值计算要比传统的方法好, 可能就是因为黏性应力 F_μ 中的非定常的动量通量和非定常的温度项起到很大的作用, 它可能是引起流体的高度随机、非定常的旋涡运动的一个主要原因.

如果不考虑扩散作用, 用粒子速度 c_k 乘上 (18) 式再对其求和并考虑到 (3)(5) 和 (12) 式, 可获得能量方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho u_\alpha^2 + \rho e\right) + \frac{\partial}{\partial r_\alpha} \left(\left(\frac{1}{2} \rho u_\alpha^2 + \rho e + P\right) u_\alpha\right) = 0. \quad (22)$$

4 数值试验

格子 Boltzmann 模型对于模拟各种流场的适用性在很多文献里已经得到了证实, 但在模拟超音速流动现象时效果却很不理想, 只是对模拟简单的管内冲击波现象时效果比较满意. 然而用于模拟冲击波在障碍物表面上的折射和反射现象时还没取得成功. 在这个数值试验, 通过模拟冲击波在障碍物表面上的折射和反射现象来考察该 D2Q13 格子 Boltzmann 模型的数值稳定性和适用性.

图 2 给出了折射 (a) 和反射 (b) 现象的计算流场的结构草图^[9], 图中的数字表示在每个边上所取的格子点数. 计算的初始条件:

1. 关于冲击波的折射问题 (图 2(a)), 在图中左侧 800×200 范围内为高压区, 初始条件设定为 $(\rho_L, u_\alpha, e_L) = (25.0, 0.0, 0.40)$, 其余的为低压区, 初始条件设定为 $(\rho_R, u_\alpha, e_R) = (12.0, 0.0, 0.40)$. 缓冲时间系数取 $\tau = 0.60$, 在边界上采用无滑的反射 bounce-back 边界条件.

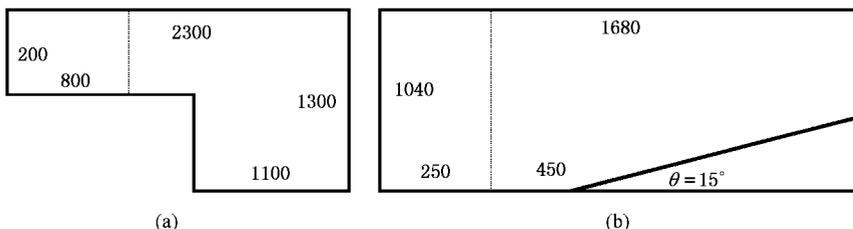


图 2 计算流场的结构草图

2. 关于冲击波的反射问题 (图 2(b)), 在图中左侧 250×1040 范围内为高压区, 初始条件设定为

$(\rho_L, u_\alpha, e_L) = (25.0, 0.0, 0.40)$,其余的为低压区,初始条件设定为 $(\rho_R, u_\alpha, e_R) = (12.0, 0.0, 0.40)$ 缓冲时间系数取 $\tau = 0.60$,在四周边界上采用无滑的 bounce-back 边界条件,在底部斜边上采用无滑的平衡分布边界条件.

图 3,图 4 给出了冲击波折射和反射现象的计算结果,图 3,图 4 清楚的再现了冲击波的传播以及在斜面 and 折角处的折射和反射现象,这一数值结果和两个实验结果^[10,11]也比较吻合,可以定性地说明该 D2Q13 模型适用于冲击波问题的数值模拟.

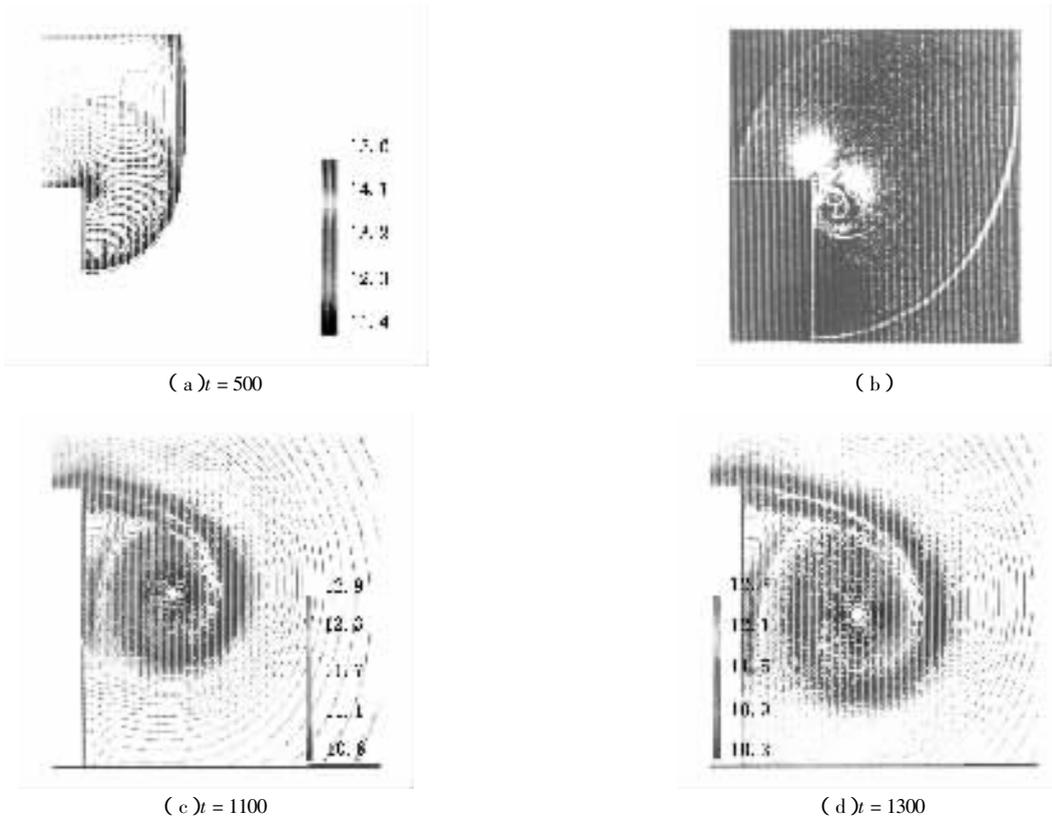


图 3 LBE 模型对冲击波折射问题的计算结果与实验结果的比较 (t 为积分时间步,图中曲线为等密度分布线)

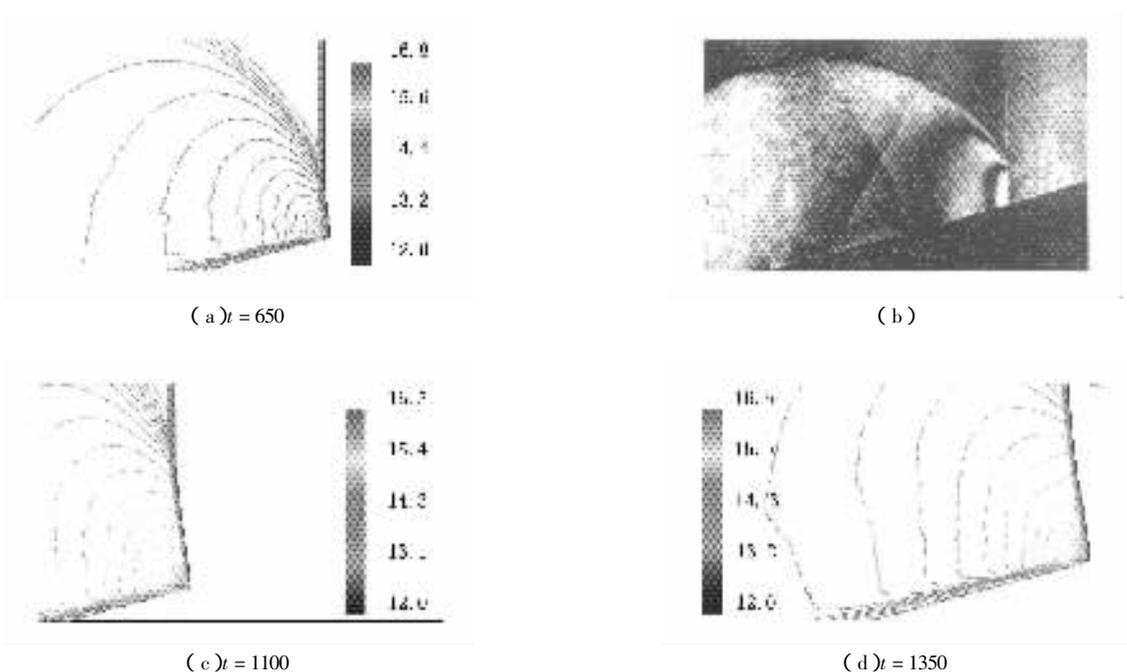


图 4 LBE 模型对冲击波在 15 度斜面上的反射问题的计算结果与实验结果的比较 (t 为积分时间步,图中曲线为等密度分布线)

5 结 论

本文建立的两维 D2Q13 格子 Boltzmann 模型严格的满足质量、动量、能量守恒原理, 从该 D2Q13 模型导出宏观的流体力学方程与 Navier-Stokes 方程相

比, 在黏性输运项上有明显的改进. 用该模型对冲击波在障碍物表面上的折射和反射现象的数值模拟都得到了比较满意的结果, 而且数值稳定性也很好. 从理论和试验两方面都证明了这一格子 Boltzmann 模型的适宜性.

-
- [1] U. Frisch , D. d 'Humières , B. Hasslacher , P. Lallemand , Y. Pomeau , J.P. Rivet , *Complex Systems* , **1**(1987) 649 .
- [2] S. Wolfram , *J. Stat. Phys.* , **45**(1986) 471 .
- [3] D.H. Rothman , S. Zaleski , *Lattice-Gas Cellular Automata* (Cambridge University , 1996) .
- [4] G. McNamara , B. Alder , *Physica* , **A194**(1993) 218 .
- [5] M. Tsutahara , S. Feng , *Comput. Phys. Commun.* , **129**(2000) , 131 .
- [6] S.D. Feng , Study of Density Stratified Flows by the Lattice Boltzmann Method (Kobe University , Japan , 1999) .
- [7] F.J. Alexander , S. Chen , D. Sterling , *Phys. Rev.* , **47**(1993) , 2249 .
- [8] P.L. Bhatnagar , E. P. Gross , M. Krook , *Phys. Rev.* , **94**(1954) , 511 .
- [9] S. Kawazu , Study of Compressible Fluid by the Lattice Boltzmann Method (in Japanese) (Kobe University , Japan , 1998) .
- [10] A. Sasoh , K. Takayama , T. Saito , *Shock Waves , An International Journal* , **2**(1992) 227 .
- [11] N. K. Uchiyama , T. Inoue , The 6th Workshop on Computational Fluid Dynamics (Tokyo (1992)) , p. 81 (in Japanese) .

SIMULATION OF SHOCK WAVES USING A LATTICE BOLTZMANN EQUATION MODEL *

FENG SHI-DE¹⁾ MICHIHISA TSUTAHARA²⁾

¹⁾ Institute of Atmospheric Physics , Chinese Academy of Sciences , Beijing 100029 , China)

²⁾ Division of Industrial Science , Graduate School of Technology and Science , Kobe University , Japan)

(Received 22 September 2000 ; revised manuscript received 13 October 2000)

ABSTRACT

A lattice Boltzmann equation model of D2Q13 form in two-dimensional space is developed according to the conservative criteria of mass , momentum and energy . The equations of fluid dynamics can be derived from the D2Q13 model , and the momentum equation is obviously improved in the viscosity transport term by comparison with Navier-Stokes equation . The shock wave reflection phenomena on the bevel edge and edge angle have been simulated by using the model so that the results and the numerical stability are very good . It is shown that the model is valid both in theory and in numerical experiment .

Keywords : Boltzmann Model , Distribution Function , Shock Waves , Momentum Equations

PACC : 0340 , 0340G , 0340K