

应用格子 Boltzmann 模型模拟一类二维偏微分方程*

何郁波^{1)†} 林晓艳¹⁾ 董晓亮²⁾

1) (怀化学院数学系, 怀化 418008)

2) (北方民族大学信息与计算科学学院, 银川 750021)

(2013 年 5 月 1 日收到; 2013 年 6 月 29 日收到修改稿)

针对一类含源的二维非线性偏微分方程, 通过 Chapman-Enskog 展开技术和多尺度分析提出了带修正项的简单格子 Boltzmann 模型. 用模型模拟了几类二维偏微分方程, 数值模拟结果与精确解相符合. 成功将格子 Boltzmann 方法应用到二维偏微分方程的数值求解中.

关键词: 二维非线性偏微分方程, 格子 Boltzmann 模型, Chapman-Enskog 多尺度展开

PACS: 47.11.-j, 47.11.Qr, 47.55.Kf

DOI: 10.7498/aps.62.194701

1 引言

以应用为目的, 或以物理、力学等其他学科问题为背景的微分方程的研究, 不仅是传统应用数学中一个最主要的内容, 也是当代数学的一个重要组成部分. 它是数学理论与实际应用之间的一座重要桥梁, 研究工作一直十分活跃, 研究领域日益扩大.

目前微分方程研究的主体是非线性偏微分方程 (NLPDE). 很多意义重大的自然科学和工程技术问题都可归结为非线性偏微分方程的研究. 现实生活的许多领域内数学模型都可以用 NLPDE 来描述, 很多重要的物理、力学等学科的基本方程本身就是 NLPDE. 而对于求 NLPDE 的精确解, 近 20 多年来, 虽然人们已建立和发展了一些求解非线性偏微分方程的方法^[1-8], 但对非线性演化方程目前仍无统一的求解方法. 一般的非线性偏微分方程只在很特殊的初边值条件下才有解析解, 而在通常情况下只能进行数值求解.

格子 Boltzmann 方法 (LBM) 是近年发展起来的一种新的流体计算方法, 在流体力学的研究中取得了很多成果, 参见文献 [9—20]. 格子 Boltzmann 方法源于格子气自动机 (lattice gas automata, LGA). LGA 方法是原胞自动机 (CA) 在流体力学中的具

体应用, 是空间、时间和速度空间都离散的一个虚拟微观模型, 与以连续微分方程为基础的传统计算流体力学方法有着本质的不同. 但是, LGA 方法也有许多不足之处. 由于含有随机因素, LGA 的计算结果往往包含很大的统计噪声, LGA 的宏观方程也不是标准的流体运动宏观方程. 格子 Boltzmann 方法正是为了克服 LGA 方法的一些不足而发展起来的一种新方法. LBM 的主要特点是以一个单粒子分布函数取代 LGA 方法中的布尔变量. LBM 不但克服了 LGA 的缺点, 继承了 LGA 方法的主要优点, 而且还有许多新的优点, 如计算量小、计算效率高、变成简单等.

至今在流体力学研究方面利用格子 Boltzmann 方法的成果, 大部分都是对 1+1 维非线性偏微分方程进行了数值求解. 文献 [21, 22] 研究了二维扩散方程和二维对流扩散方程的格子 Boltzmann 模型, 在此基础上, 本文研究一类二维含源的非线性偏微分方程初值问题:

$$\begin{aligned} u_t + au^n \cdot \nabla u + b\Delta u &= F(u), \quad (x, y) \in \Omega, t \in (0, T], \\ u(x, y, 0) &= u_0(x, y), \\ u &= 0, \quad (x, y) \in \Gamma = \partial\Omega, \quad t > 0, \end{aligned} \quad (1)$$

* 湖南省教育厅重点项目 (批准号: 08A503)、湖南省教育厅青年骨干教师和国内访问学者基金 (批准号: 湘教通 [2012]510 号) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: heyinprc80@hotmail.com

其中

$$au^n \cdot \nabla u = u^n \left(a_1 \frac{\partial u}{\partial x} + a_2 \frac{\partial u}{\partial y} \right),$$

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2},$$

$u \geq 0$ 是密度函数, $a = (a_1, a_2)^T$, b 为常数, 记 $X = (x, y) \in \Omega$. 若在问题 (1) 中取

1) $a = (1, 1)^T$, $b = -0.001$, $F(u) = \phi(u, t) = -u^2 + G(x, y, t) = -u^2 + txy(1-x)(1-y)e^{x+y}$, $n = 0$, 则方程 (1) 是二维对流扩散问题.

2) $a = 0, b = -1$, $F(u) = \phi(u(x, y, t), t)$, $u_0(x, y) = 100xy^2$, 其中

$$\phi(u(x, y, t), t) = -100x(y^2 + 2)\exp(-t),$$

$$\Omega = \{(x, y) | 0 \leq y \leq 1, y \leq x \leq y + 0.5\}.$$

则方程 (1) 是二维抛物型方程初边值问题.

3) $a = (0, 0)^T, F(u) = 0$, 则方程 (1) 是二维扩散问题.

在本文数值模拟部分将针对这三种问题进行解析解与数值解的比较.

2 格子 Boltzmann 方法

采用 D2Q4 模型, 离散速度方向为

$$[e_1, e_2, e_3, e_4] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (2)$$

在二维模型中, 每个节点与周围最邻近的 4 个节点相连, 沿每一格线运动的粒子分布函数为 $f_i(X, t)$, ($i = 1, 2, 3, 4$). 引入小参数 ε 作为时间步长和 Knudsen 数. 这样构造的 2+1 维格子 Boltzmann 方程为

$$f_i(X + c\varepsilon e_i, t + \varepsilon^2) - f_i(X, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(X, t) - f_i^{eq}(X, t)] + \varepsilon h_i(X, t) + \frac{\varepsilon^2 d}{4} F(u), \quad (3)$$

其中 $\varepsilon h_i(X, t)$ 是修正项, τ 是弛豫时间, $f_i^{eq}(X, t)$ 为局部平衡态分布函数, c, d 为常数. 修正函数 $h_i(X, t)$ 定义为

$$h_i(X, t) = \begin{cases} \lambda_1 u^2, & i = 1, \\ \lambda_2 u^2, & i = 2, \\ -\lambda_1 u^2, & i = 3, \\ -\lambda_2 u^2, & i = 4, \end{cases} \quad (4)$$

这里 λ_1, λ_2 是常数. 物理量 $u(X, t)$ 定义为

$$u(X, t) = \sum_{i=1}^4 f_i(X, t) = \sum_{i=1}^4 f_i^{(0)}(X, t), \quad (5)$$

其中 $f_i^{(0)}(X, t) = f_i^{eq}(X, t)$, 给定

$$f_i^{(0)}(X, t) = \frac{1}{4} u(X, t). \quad (6)$$

将方程 (3) 左边作 Taylor 展开到 ε^2 项得

$$\varepsilon^2 \frac{\partial f_i}{\partial t} + c\varepsilon e_i \cdot \nabla f_i + \frac{1}{2} c^2 \varepsilon^2 (e_i \cdot \nabla)^2 f_i = -\frac{f_i - f_i^{(0)}}{\tau} + \varepsilon h_i + \frac{\varepsilon^2 d}{4} F(u). \quad (7)$$

应用 Chapman-Enskog 多尺度展开技术, 令

$$f_i = \sum_{n=0}^n \varepsilon^n f_i^{(n)} = f_i^{(0)} + \varepsilon f_i^{(1)} + \varepsilon^2 f_i^{(2)} + \dots, \quad (8)$$

其中 $f_i^{(1)}, f_i^{(2)}$ 满足守恒律

$$\sum_i f_i^{(1)}(X, t) = \sum_i f_i^{(2)}(X, t) = 0. \quad (9)$$

将 (8) 式代入 (7) 式, 得

$$\varepsilon^2 \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial t} + c\varepsilon e_i \cdot \nabla f_i^{(0)} + c\varepsilon^2 e_i \cdot \nabla f_i^{(1)} + \frac{1}{2} c^2 \varepsilon^2 (e_i \cdot \nabla)^2 f_i^{(0)} + O(\varepsilon^3) = -\frac{\varepsilon}{\tau} (f_i^{(1)} - h_i) - \frac{\varepsilon^2}{\tau} \left(f_i^{(2)} - \frac{\tau d}{4} F(u) \right). \quad (10)$$

比较两端小参数 ε 的同阶项得

$$c e_i \cdot \nabla f_i^{(0)} - h_i = -\frac{f_i^{(1)}}{\tau}, \quad (11)$$

$$\frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial t} + c e_i \cdot \nabla f_i^{(1)} + \frac{1}{2} c^2 (e_i \cdot \nabla)^2 f_i^{(0)} = -\frac{f_i^{(2)} - \frac{\tau d}{4} F(u)}{\tau}. \quad (12)$$

将 (11) 式代入 (12) 式得

$$\frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial t} + \tau c e_i \cdot \nabla h_i - c^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right) (e_i \cdot \nabla)^2 f_i^{(0)} = -\frac{f_i^{(2)}}{\tau} + \frac{d}{4} F(u). \quad (13)$$

对 (13) 式关于 i 求和, 并利用守恒性质得

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \tau c \sum_{i=1}^4 e_i \cdot \nabla h_i - c^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \sum_{i=1}^4 (e_i \cdot \nabla)^2 f_i^{(0)} = dF(u), \quad (14)$$

而

$$\sum_{i=1}^4 e_i \cdot \nabla h_i = 4\lambda_1 u \frac{\partial u}{\partial x} + 4\lambda_2 u \frac{\partial u}{\partial y}, \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^4 (e_i \cdot \nabla)^2 f_i^{(0)} &= \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 (e_i \cdot \nabla)^2 u \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = \frac{1}{2} \Delta u. \end{aligned} \quad (16)$$

将 (15),(16) 式代入 (14) 式得

$$\begin{aligned} u_t + 4\lambda_1 \tau c u \frac{\partial u}{\partial x} + 4\lambda_2 \tau c u \frac{\partial u}{\partial y} \\ - \frac{1}{2} c^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \Delta u = dF(u). \end{aligned} \quad (17)$$

为了恢复方程 (1), 取

$$\begin{aligned} 4\lambda_1 \tau c = a_1, 4\lambda_2 \tau c = a_2, d = 1, \\ \frac{c^2}{2} \left(\frac{1}{2} - \tau \right) = b \end{aligned} \quad (18)$$

即可. 令

$$\Delta x = \Delta y = c\varepsilon = h, \quad \Delta t = \varepsilon^2. \quad (19)$$

由 (18), (19) 式可得

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{1}{2} - \frac{2b\Delta t}{h^2}, \\ \lambda_1 &= \frac{a_1 \sqrt{\Delta t}}{4\tau h}, \quad \lambda_2 = \frac{a_2 \sqrt{\Delta t}}{4\tau h}. \end{aligned} \quad (20)$$

将 (19), (20) 式代入 (3) 式即得到显式迭代格式.

3 数值模拟

为检验模型的误差精度, 定义整体相对误差

(global relative error, GRE) 为

$$\text{GRE}(t) = \frac{\sum_{i,j} |u(x_i, y_j, t) - u^*(x_i, y_j, t)|}{\sum_{i,j} |u^*(x_i, y_j, t)|},$$

其中 $u(x_i, y_j, t), u^*(x_i, y_j, t)$ 分别为数值解和解析解, 在所有格点进行求和.

在方程 (1) 中取 $a = (1, 1)^T, b = -0.001, F(u) = \phi(u, t) = -u^2 + G(x, y, t) = -u^2 + txy(1-x)(1-y)e^{x+y}, n = 0$, 则方程 (1) 是如下的线性对流扩散问题.

算例1 对流扩散问题

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + a \cdot \nabla u - b \Delta u &= F(u), \\ (x, y) \in \Omega &= [0, 1] \times [0, 1], t \in (0, T], \\ u(x, y, t) &= 0, \quad (x, y) \in \partial\Omega, t \in (0, T], \\ u(x, y, 0) &= 0, \quad (x, y) \in \Omega. \end{aligned}$$

模型中采用均匀网格, 格子数 $N_x \times N_y = 100 \times 100$. 边界处理方法为非平衡态外推格式, 模型参数分别取为 $\Delta t = 0.0001, c = 10, \Delta x = \Delta y = 0.01, b = -1, \tau = 0.52$. 图 1, 图 2 分别给出了 $t = 0.1$ s 和 $t = 10$ s 时的数值解和解析解的三维可视化对比. 表 1 列出了不同时刻对流扩散问题的数值解与解析解之间的整体相对误差.

表 1 不同时刻对流扩散问题的数值解与解析解的整体相对误差

t/s	0.1	10	50	100	150
GRE/ 10^{-6}	1.0846	6.4117	3.3807	1.4355	1.7397

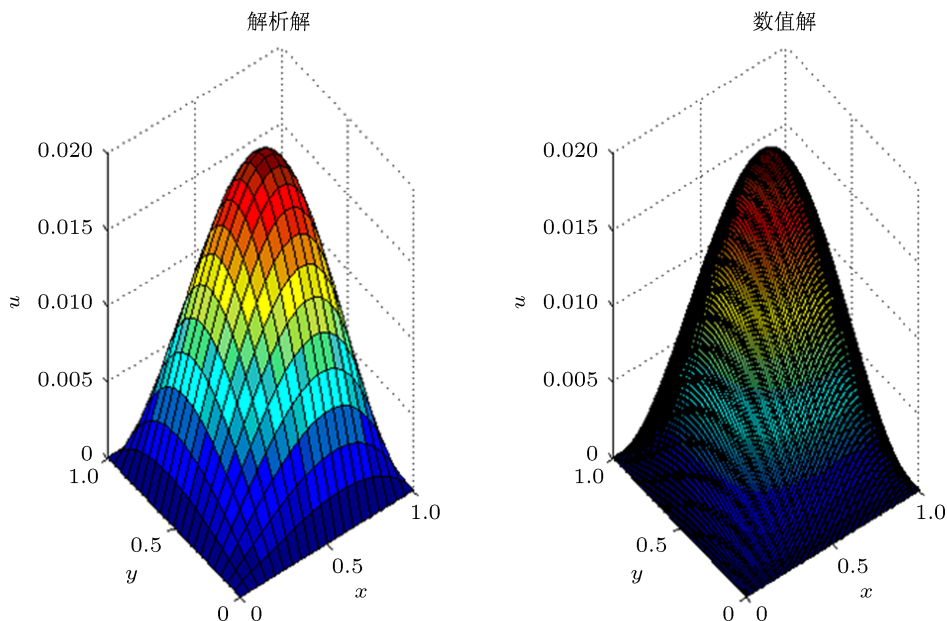


图 1 算例 1 在 $t = 0.1$ s 时解析解与数值解的可视化对比

从表 1 和图 1、图 2 可以看出, 本文所建立的带修正项的格子 Boltzmann 方法是十分有效的. 经过长时间的演化, 数值解与解析解十分符合且相对误差比较小.

在方程 (1) 中取

$$\begin{aligned} a &= 0, b = -1, \\ F(u) &= \phi(u(x, y, t), t), \\ u_0(x, y) &= 100xy^2, \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} \phi(u(x, y, t), t) &= -100x(y^2 + 2)\exp(-t), \\ \Omega &= \{(x, y) | 0 \leq y \leq 1, y \leq x \leq y + 0.5\}. \end{aligned}$$

则问题 (1) 是下面线性抛物型方程初边值问题.

算例 2 线性抛物型方程初边值问题

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u + \phi(x, y, t), \quad (x, y) \in \Omega, 0 \leq t \leq 1,$$

$$\begin{aligned} u(x, y, 0) &= 100xy^2, \quad (x, y) \in \Omega, \\ u(x, y, t) &= 100xy^2 \exp(-t), \\ (x, y) &\in \partial\Omega \setminus E, 0 \leq t \leq 1, \\ \frac{\partial u}{\partial n} &= 0, \quad (x, y) \in E = \{(x, y) | y = 0, 0 < x < 0.5\}. \end{aligned}$$

该问题有唯一真解为

$$u = u(x, y, t) = 100xy^2 e^{-t}.$$

模型中的参数分别取值

$$\begin{aligned} \Delta t &= 0.0001, \quad c = 100, \\ \Delta x = \Delta y &= 0.05, \quad b = -1, \quad \tau = 0.5. \end{aligned}$$

边界处理同算例 1, 在 $x = 0.5$ 处, 分别比较了解析解和数值解在时间 $t = 0.1, 1, 10, 20$ (s) 时二维横截面可视化对比, 结果见图 3.

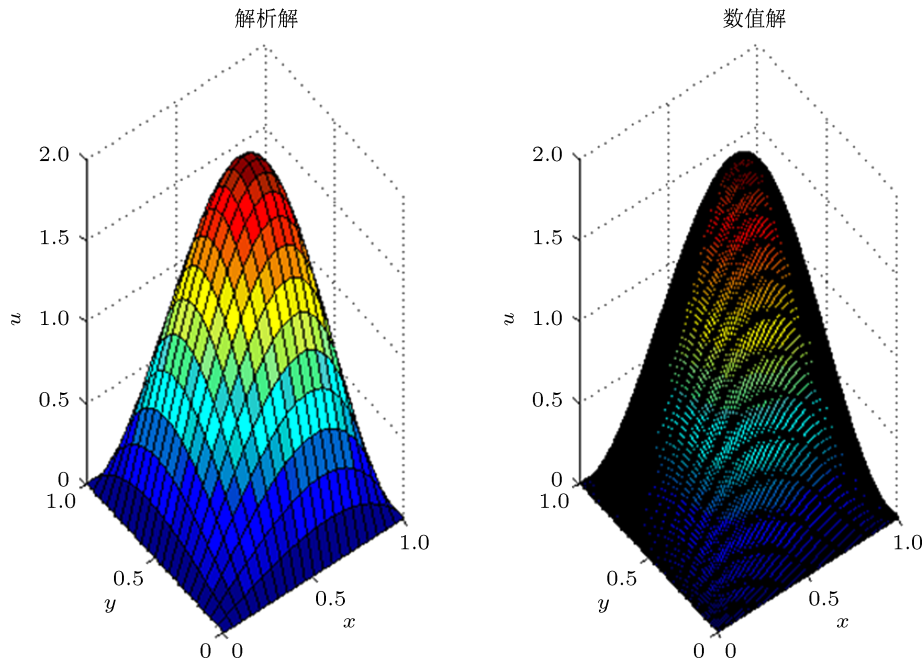


图 2 算例 1 在 $t = 10$ s 时解析解与数值解的可视化对比

在方程 (1) 中取 $a = (0, 0)^T, F(u) = 0$, 则问题 (1) 是下面二维扩散问题.

算例 3 二维扩散方程

$$\begin{aligned} u_t - \Delta u &= 0, \quad \Omega = (-1, 1) \times (-1, 1), \\ u(x, y, 0) &= \sin(\pi x) \sin(\pi y), \\ u(-1, y, t) &= u(1, y, t) = 0, \\ u(x, -1, t) &= u(x, 1, t) = 0. \end{aligned}$$

该方程的解析解为

$$u(x, y, t) = \exp(-2\pi^2 t) \sin(\pi x) \sin(\pi y).$$

给定的待参数值如下: $\Delta t = 0.0001, c = 10, \Delta x = \Delta y = 0.1, b = -1, \tau = 0.52$.

模型中采用均匀网格, 边界处理方法为非平衡态外推格式. 图 4, 图 5 分别给出了 $t = 0.2$ s 和 $t = 2$ s 时的数值解和解析解的三维可视化对比.

图 6 分别给出了 $y = 0.5, t = 0.2$ s, $y = 0.5, t = 0.1$ s 时解析解与数值解的比较.

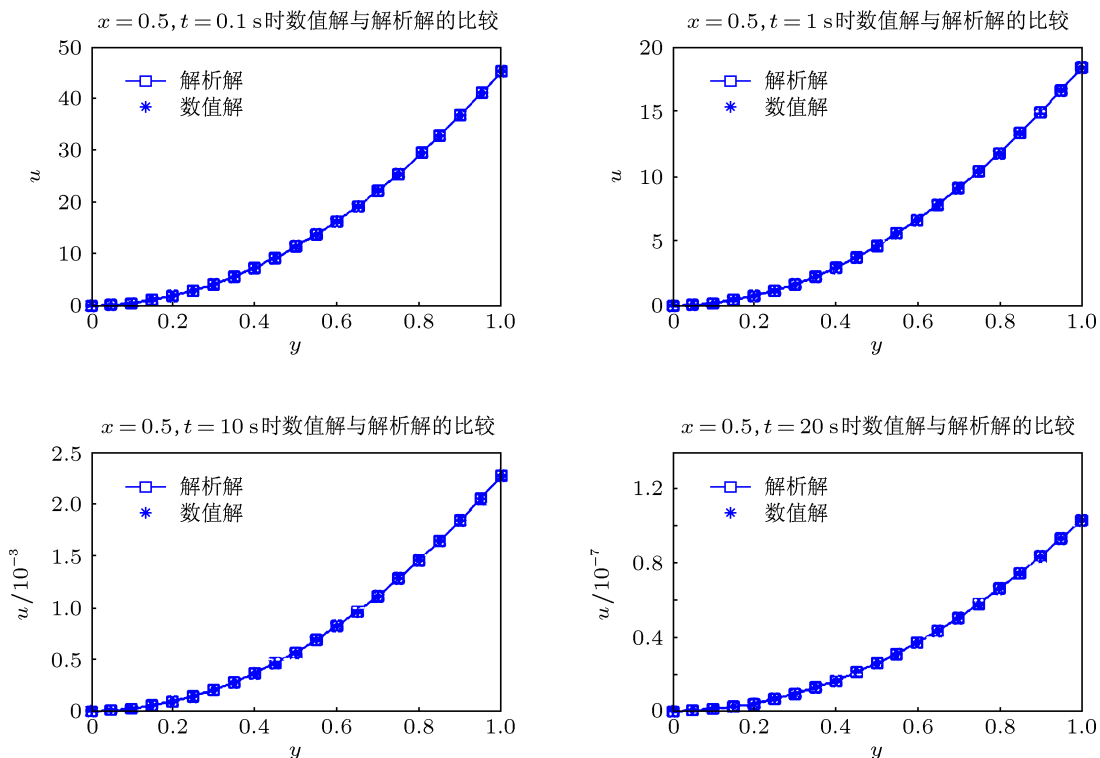


图3 算例2在 $x=0.5, t=0.1, 1, 10, 20$ (s) 时解析解与数值解的比较

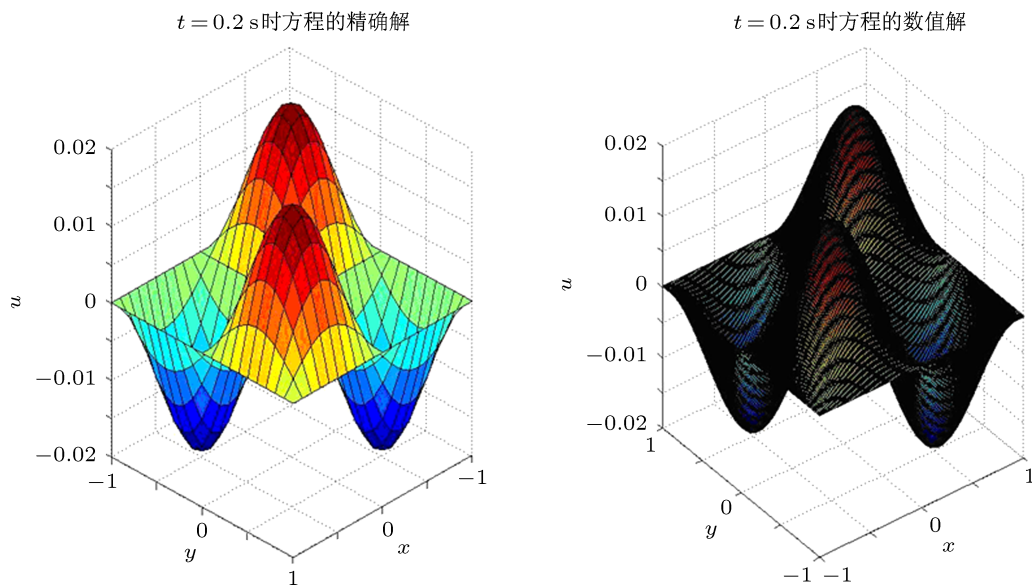


图4 $t=0.2$ s 时的数值解和解析解对比

4 结论

本文针对二维含源非线性偏微分方程, 构造了具有三阶精度的格子 Boltzmann 模型. 通过 Chapman-Enskog 多尺度展开技术, 几类二维偏微分方程从连续的 Boltzmann 方程中得到了还原. 通过与 3 个二维偏微分方程进行比较的数值算例, 我

们验证了本文所提模型的数值有效性. 在这 3 个数值试验中, 我们都保证了 $\tau \geq 0.5$, 以保证数值结果的稳定性, 这样基于实际的数值模拟经验, 尽量使方程 (1) 中 $b < 0$ 即可满足这一要求. 数值模拟结果表明, 经过较长时间的演化, 数值解与解析解仍然十分符合. 本文的模型可以推广到更复杂和维数更高的模型, 我们将在今后继续展开相关研究.

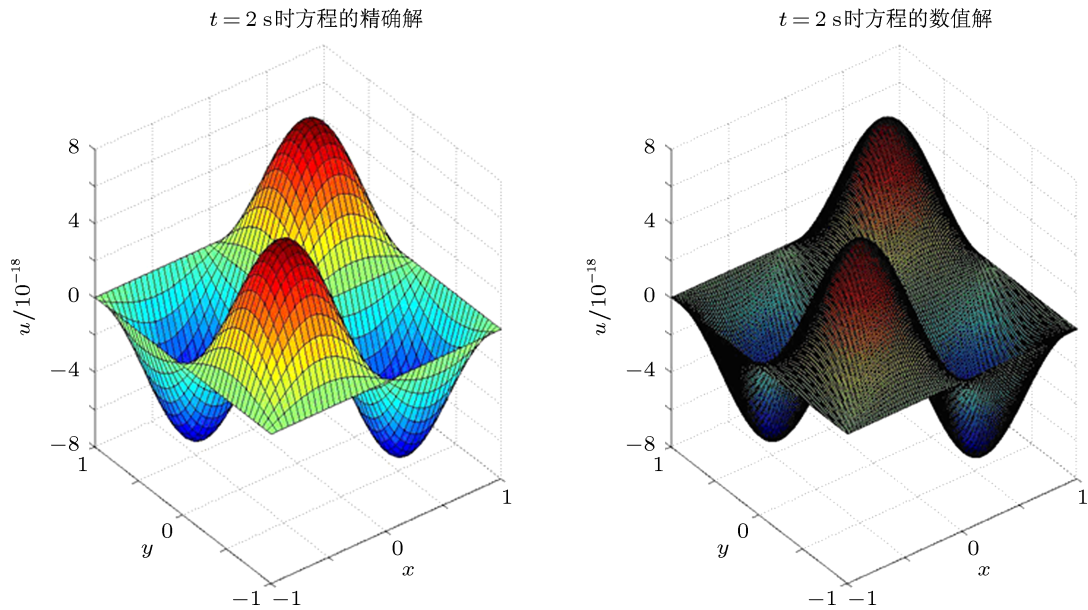


图5 $t = 2$ s时的数值解和解析解对比

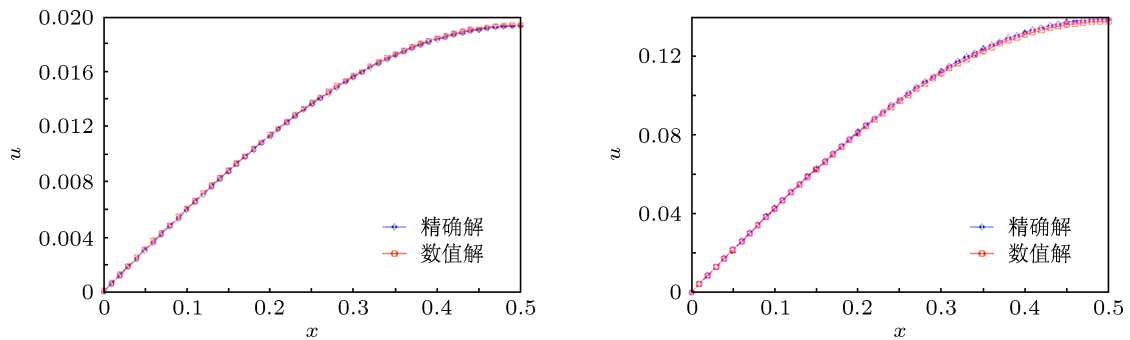


图6 $y = 0.5, t = 0.1, 0.2$ s时解析解与数值解的比较

[1] Taogetusang, Bai Y M 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 100201 (in Chinese) [套格图桑, 白玉梅 2013 物理学报 **62** 100201]

[2] Fan E G 2000 *Phys. Lett. A* **277** 212

[3] Chen Y, Li B, Zhang H Q 2003 *Chin. Phys.* **12** 940

[4] Li D S, Zhang H Q 2004 *Chin. Phys.* **13** 1377

[5] Ma S H, Fang J P, Zhu H P 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4319 (in Chinese) [马松华, 方建平, 朱海平 2007 物理学报 **56** 4339]

[6] Liu Y P, Li Z B 2003 *Chin. Phys. Lett.* **20** 317

[7] Taogetusang, Sirendaorji 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3246 (in Chinese) [套格图桑, 斯仁道尔吉 2006 物理学报 **55** 3246]

[8] Zhu J M, Zheng C L, Ma Z Y 2004 *Chin. Phys.* **13** 2008

[9] Zhang T, Shi B C, Guo Z L, Chai Z H, Lu J H 2012 *Phys. Rev. E* **85** 016701

[10] Mao W, Guo Z L, Wang L 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 084703 (in Chinese) [毛威, 郭照立, 王亮 2013 物理学报 **62** 084703]

[11] Ma C F 2005 *Chin. Phys. Lett.* **22** 02313

[12] Ma C F, Tang J, Chen X H 2007 *Chinese Journal of Applied Mechanics* **24** 0519 (in Chinese) [马昌凤, 唐嘉, 陈小红 2007 应用力学学报 **24** 0519]

[13] He Y B, Ma C F, Liang Q 2007 *Acta Mathematicae Applicatae Sinica* **30** 1040 (in Chinese) [何郁波, 马昌凤, 梁茜 2007 应用数学学报 **30** 1040]

[14] Lai H L, Ma C F 2009 *Sci. China Ser. G* **52** 1053 (in Chinese) [赖惠林, 马昌凤 2009 中国科学: G 辑 **39** 1053]

[15] He Y B, Dong X L, Lin X Y 2012 *Computer Engineering and Applications* **48** 038 (in Chinese) [何郁波, 董晓亮, 林晓艳 2012 计算机工程与应用 **48** 038]

[16] Li B H, Fang H P 2004 *Chin. Phys.* **13** 2087

[17] Chen S Y, Fang H P 2004 *Chin. Phys.* **13** 47

[18] Shi B C, He N Z, Guo Z L 2004 *Chin. Phys.* **13** 40

[19] Lu D T, Liu Y, Xu Y S 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 034702

[20] Sun D K, Xiang N, Chen K, Ni Z H 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 024703 (in Chinese) [孙东科, 项楠, 陈科, 倪中华 2013 物理学报 **62** 024703]

[21] Lai H L, Ma C F 2008 *Journal of Fujian Normal University (Natural Sci. Edition)* **24** 015 (in Chinese) [赖惠林, 马昌凤 2008 福建师范大学学报 (自然科学版) **24** 015]

[22] Ruan H Y, Li H J 2006 *Journal of Ningbo University (NSEE)* **19** 222 (in Chinese) [阮航宇, 李慧军 2006 宁波大学学报 (理工版) **19** 222]

Use of lattice Boltzmann method to simulate 2-D partial differential equation*

He Yu-Bo^{1)†} Lin Xiao-Yan¹⁾ Dong Xiao-Liang²⁾

1) (*Department of Mathematics, Huaihua University, Huaihua 418008, China*)

2) (*School of Information and Computation Science, The North University for Ethnic, Yinchuan 750021, China*)

(Received 1 May 2013; revised manuscript received 29 June 2013)

Abstract

For a class of two-dimensional nonlinear partial differential equation with the source term, a simple lattice Boltzmann model with amending function is proposed and studied using the Chapman-Enskog expansion technique and multiple-scale analysis. In this paper, some partial differential equation are simulated, the numerical results and exact solutions are shown to be almost completely fitting with each other. The lattice Boltzmann method is further extended to two-dimensional partial differential equation.

Keywords: two-dimensional nonlinear partial differential equation, lattice Boltzmann method, Chapman-Enskog multi-scale expansion

PACS: 47.11.-j, 47.11.Qr, 47.55.Kf

DOI: 10.7498/aps.62.194701

* Project supported by the Research Foundation of Education Bureau of Hunan Province, China (Grant No. 08A503), the Young Core Instructor and Domestic Visitor Foundation from the Education-Commission of Hunan Province, China (Grant No. [2012]510).

† Corresponding author. E-mail: heyinpc80@hotmail.com