

耦合不可压流场输运方程的格子 Boltzmann 方法研究*

苏进 欧阳洁[†] 王晓东

(西北工业大学应用数学系, 西安 710129)

(2011 年 5 月 4 日收到; 2011 年 9 月 15 日收到修改稿)

基于格子 Boltzmann 方法, 提出了求解耦合不可压缩流场输运方程的一种改进数值方法. 该方法使用格子 Boltzmann 方法求解流场方程, 并根据流场格子模型的密度分布函数构建了输运方程的二阶离散格式. 通过二维平板通道流场输运系统验证了该方法的有效性. 数值结果表明, 该方法可以有效地减少计算过程中出现的非物理耗散, 并克服了传统模型所需巨大存储量的缺点.

关键词: 格子 Boltzmann 方法, 输运方程, 二阶格式

PACS: 47.11.Qr, 47.10.ab, 02.60.Cb

1 引言

在实际应用中, 一些多物理场多尺度问题的数学模型都可归结为耦合不可压缩流场的输运方程. 例如, 描述高聚物分子作用力的本构方程^[1,2]、液晶聚合物复杂流动的取向张量方程^[3,4]都具有如下的输运方程形式

$$\frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t) = F(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\tau}), \quad (1)$$

其中 $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t)$ 是张量输运函数, 源项 $F(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\tau})$ 是关于 \mathbf{u} 与 $\boldsymbol{\tau}$ 的非线性函数, \mathbf{u} 是由如下无量纲守恒方程

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (3)$$

确定的流场速度, 这里 p 是压力, ν 是 Newton 黏度系数. 研究该耦合流场的输运系统须先求解流场方程 (2), (3), 然后在此基础上考虑相应输运方程 (1) 的求解策略.

格子 Boltzmann 方法 (lattice Boltzmann method, 简记为 LBM)^[5,6] 是一种求解流场方程的介观数值

方法. LBM 的基本演化方程可从 Boltzmann 方程导出, 又可经多尺度展开技术得到二阶近似的 Navier-Stokes 方程, 它能更深刻地反映流体的物理本质. 该方法自 20 世纪 80 年代提出后引起学者们广泛的兴趣, 现已被应用于湍流、多相流、空气动力学和一些具有化学反应和复杂边界流场的计算^[7,8]. 于是, 在 LBM 求解流场的框架下, 如何构造耦合流场输运方程 (1) 的数值模型得到了许多学者的关注.

Denniston 等^[9] 在模拟液晶聚合物的流动问题中, 针对输运方程 (1) 提出如下求解思想: 对于流场守恒方程引入标量分布函数 $f_i(\mathbf{x})$ 构造 LBM 格式, 而对于形如方程 (1) 的序张量输运方程, 则通过单独引入张量分布函数 $G_i(\mathbf{x})$ 来构造输运函数 $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{x}, t)$ 的 LBM 格式. 然而此方法存在如下局限性: (1) 鉴于动量方程和取向张量方程的时间尺度不同, 须取其中最小的时间尺度作为时间划分, 致使其计算效率低下; (2) 由于引入张量分布函数 $G_i(\mathbf{x})$, 导致计算所需的存储量很大, 所以对于实际的复杂问题将面临巨大挑战. 为了克服引入张量

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2012CB025903) 和国家自然科学基金 (批准号: 10871159) 资助的课题.

[†] E-mail: jieouyang@nwpu.edu.cn

分布所需巨大储量的缺点, Marenduzzo 等^[10,11] 在模拟胆甾晶相生长过程的研究中提出 LBM 耦合有限差分法 (finite difference method, 简记为 FDM) 的思想求解输运方程, 即对于流场守恒方程引入标量分布函数 $f_i(\mathbf{x})$ 构造 LBM 格式, 而对于形如方程 (1) 的序张量输运方程则采用有限差分法进行求解. Marenduzzo 等采用预估校正格式的有限差分法与标准的 LBM 耦合, 所以有限差分法只能采用标准的差分格式, 即格子方法和差分法共用一套网格. 但对于具有复杂区域的问题, 这种方法耦合的适应性较差, 若采用非标准的 LBM, 就必须考虑另外一种合适的有限差分法.

Alexander^[12] 在模拟非 Newton 流体的湍流性质时, 针对该输运问题提出如下方法: 对于流场守恒方程引入标量分布函数 $f_i(\mathbf{x})$ 构造 LBM 格式, 然后直接利用流场模型的分布函数 $f_i(\mathbf{x})$ 构造输运函数 $\tau(\mathbf{x}, t)$ 的 LBM 离散模型, 其主要思想是通过 Taylor 展开方法来建立输运方程与流场密度

$$\mathbf{e}_\alpha = \begin{cases} (0, 0) & \alpha = 0, \\ c \left(\cos[(\alpha - 1)\frac{\pi}{2}], \sin[(\alpha - 1)\frac{\pi}{2}] \right) & \alpha = 1, 2, 3, 4, \\ \sqrt{2}c \left(\cos[(2\alpha - 1)\frac{\pi}{4}], \sin[(2\alpha - 1)\frac{\pi}{4}] \right) & \alpha = 5, 6, 7, 8, \end{cases} \quad (4)$$

其中 $c = \frac{\delta x}{\delta t}$ 表示格子速度, δx 表示格子的空间步长, δt 表示时间步长.

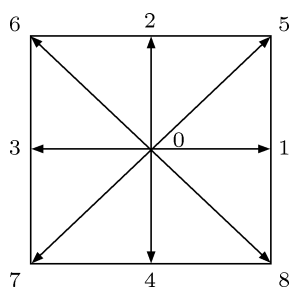


图1 D2Q9 格子模型

演化格式是

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha \delta t, t + \delta t) - f_\alpha(\mathbf{x}, t) = \Omega_\alpha(f(\mathbf{x}, t)), \quad (5)$$

这里, $f_\alpha(\mathbf{x}, t)$ 表示在 t 时刻空间点 \mathbf{x} 处的粒子分布函数, $\Omega_\alpha(f(\mathbf{x}, t))$ 为 BGK 碰撞模型, 即

$$\Omega_\alpha(f(\mathbf{x}, t)) = -\frac{1}{\lambda} [f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{(eq)}(\mathbf{x}, t)], \quad (6)$$

分布函数 $f_i(\mathbf{x})$ 之间的对应关系. 这种方法具有以下优点: 不仅克服了 Denniston 等单独引入张量分布函数而导致巨大存储量的缺点, 而且也避免了 Marenduzzo 等的有限差分法与标准 LBM 耦合适应性差的不足. 但是, Alexander 的格式仅具有一阶精度, 数值耗散非常明显. 为克服 Alexander 算法的不足, 本文在 Alexander 格式的基础上, 提出一种基于 LBM 框架的二阶精度改进格式. 该模型不仅可以很大程度地克服 Alexander 格式的数值耗散性, 而且克服了传统方法所需巨大存储量的缺点.

2 LBM 数值模型

2.1 二维不可压流场的 LBGK 模型

首先介绍求解二维不可压缩流场 Navier-Stokes 的 LBGK 模型. 考虑二维 D2G9 模型^[13] (如图 1 所示) 的速度配置, 粒子速度 \mathbf{e}_α 可以表示为

其中 λ 是松弛时间, $f_\alpha^{(eq)}(\mathbf{x}, t)$ 是平衡态分布函数, 其定义如下:

$$f_\alpha^{(eq)}(\mathbf{x}, t) \equiv E_\alpha(\mathbf{u}) = \begin{cases} \rho_0 - (1 - \omega_0) \frac{p}{c_s^2} + s_0(\mathbf{u}), & \alpha = 0, \\ \omega_\alpha \frac{p}{c_s^2} + s_\alpha(\mathbf{u}), & \alpha = 1, \dots, 8, \end{cases} \quad (7)$$

这里

$$s_\alpha(\mathbf{u}) = \omega_\alpha \left[\frac{\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2c_s^2} \right], \quad (8)$$

权系数

$$\omega_0 = \frac{4}{9}, \omega_1, \dots, \omega_4 = \frac{1}{9}, \omega_5, \dots, \omega_8 = \frac{1}{36}, c_s^2 = \frac{c^2}{3}, \quad (9)$$

其中 $c_s = c/\sqrt{3}$ 是声速, p 和 \mathbf{u} 分别是流体的压力和速度.

宏观物理量定义如下

$$\rho_0 = \sum_{\alpha=1}^8 f_\alpha(\mathbf{x}), \quad (10)$$

$$\mathbf{u} = \sum_{\alpha=1}^8 \mathbf{e}_{\alpha} f_{\alpha}(\mathbf{x}), \quad (11)$$

$$p = \frac{c_s^2}{1 - \omega_0} \left(\sum_{\alpha=1}^8 f_{\alpha}(\mathbf{x}) + s_0(\mathbf{u}) \right). \quad (12)$$

LBGK 模型和流体动力学 Navier-Stokes 方程是对流体系统守恒性在不同尺度上的描述. 通过 Chapman-Enskog 多尺度分析 [13] 可以验证二者在 (10)—(12) 的条件下是等价的, 此时方程 (3) 中 $\nu = c_s^2(\lambda - 1/2)\delta t$ 表示黏性系数.

2.2 输运方程的 LBM 二阶格式

为简化所求问题的复杂性, 这里仅考虑输运方程 (1) 中源项 $F(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \tau) = 0$ 的情况. 为使离散模型推导过程更加简洁, 这里将对流项表示为张量分量的形式, 即

$$\mathbf{u} \cdot \nabla \tau(\mathbf{x}, t) = u_i(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial x_i} \tau(\mathbf{x}, t), i = 1, 2, \quad (13)$$

故方程 (1) 转化为如下形式的对流问题

$$\frac{\partial}{\partial t} \tau(\mathbf{x}, t) + u_i(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial x_i} \tau(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (14)$$

对于方程 (14), 文献 [12] 中给出如下二阶离散格式:

$$\begin{aligned} &\tau(\mathbf{x}, t + \delta t) \\ &= \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x} - \mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) f_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t), \end{aligned} \quad (15)$$

可以证明离散格式 (15) 近似逼近于方程 (14), 且空间上具有 $o(\delta x)$ 阶精度. 引言中已经提到, 文献 [12] 的一阶格式存在严重的数值耗散性. 为克服文献中方法的缺点, 本文进一步考虑了相邻两个粒子对当前粒子演化信息的影响, 提出如下二阶精度改进格式

$$\begin{aligned} \tau(\mathbf{x}, t + \delta t) &= \tau(\mathbf{x}, t) + \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x} - \mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) \\ &\quad \times f_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) \\ &\quad - \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x}, t) f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \\ &\quad - \left[0.5 \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x}, t) f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \right. \\ &\quad \left. - \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x} - \mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) f_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) \right. \\ &\quad \left. + 0.5 \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x} - 2\mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) \right] \end{aligned}$$

$$f_{\alpha}(\mathbf{x} - 2\mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t). \quad (16)$$

通过 Taylor 展开方法可以证明离散格式 (16) 近似逼近于方程 (14), 且空间上具有 $o(\delta x)^2$ 阶精度, 详细推导参见附录.

3 数值算例与讨论

为验证本文 LBM 二阶数值格式求解耦合不可压缩流场输运方程的有效性, 下面针对标量输运系统

$$\frac{\partial}{\partial t} \tau(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u} \cdot \nabla \tau(\mathbf{x}, t) = 0, \mathbf{x} \in [0, 10] \times [0, 1] \quad (17)$$

进行测试. 其中 $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ 是平板通道中的流动速度. 图 2 给出了二维平板通道流动的示意图, 通道的宽度为 $h = 1$, 长度为 $L = 10h$. 当 $t < 0$ 时, 流场静止, 速度和应力均为 0; 当 $t = 0$, 在入口处施加一个速度 $u(y)$, 流体在这个速度驱动下流动. 数值计算中取 $Re = 1.0$, 流体在通道中流动时, 边界条件给定如下:

- 1) 假定流场在入口处充分发展, 给定速度 $u(y) = 0.1y(1 - y)$;
- 2) 假定管道足够长, 流场在出口处充分发展, 则出口速度按充分发展条件处理, 本文采用非平衡外推方法 [5] 确定;
- 3) 流体在管壁无滑移.

输运方程的边界条件: $\tau(0, y, t) = \tau(10, y, t)$, $\tau(x, 0, t) = \tau(x, 1, t) = 0$. 初始条件为

$$\tau(\mathbf{x}, 0) = \tau(x, y, 0) = e^{-\frac{(x-5)^2}{0.25}} e^{-\frac{(y-0.5)^2}{0.05}}.$$

图 3 给出了输运函数 τ 初始时刻的等值云图.

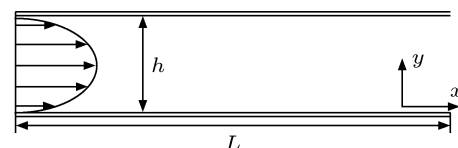


图 2 平板通道流动示意图

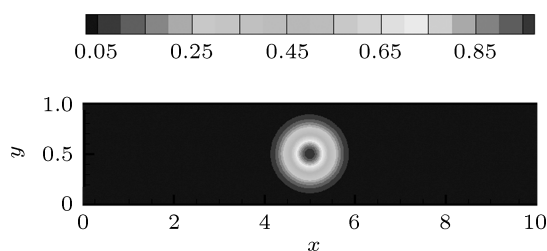


图 3 输运函数 τ 初始时刻的等值云图

图 4 给出了 LBM 求解二维不可压平板通道流动 u 速度的数值结果. 在二维平板通道流问题中, u 速度对运输系统的演化起主要作用, 所以这里只给出不同时刻 u 速度的分布. 图 5 给出了利用本文

二阶改进格式求解耦合二维不可压平板通道流运输系统 (17) 的数值结果. 其中图 5(a)—(d) 分别是随着流场演化运输函数值在不同时刻分布的等值线图. 图 4 和图 5 计算结果的网格尺度均为 80×800 .

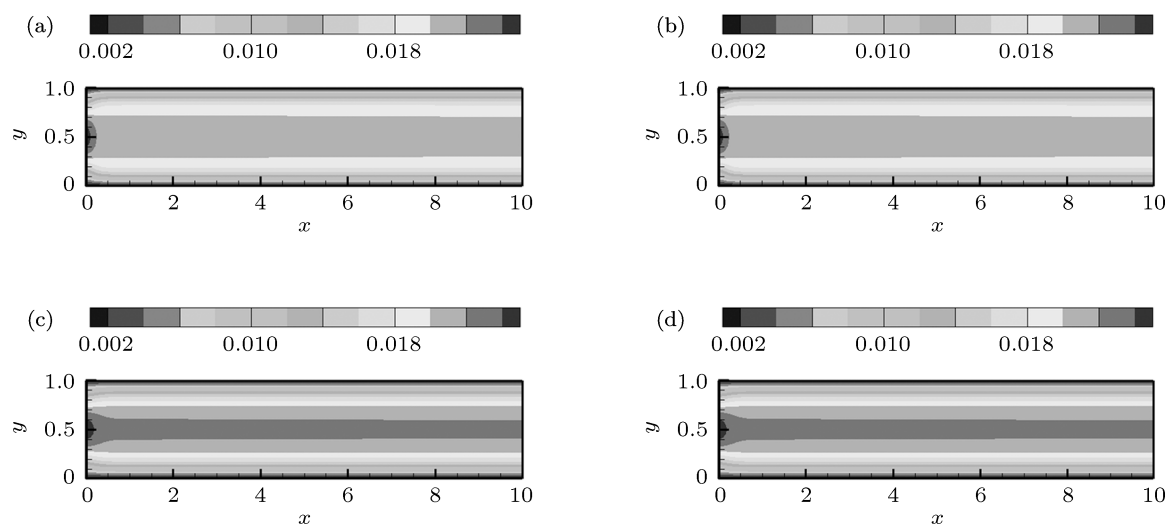


图 4 不同时刻 u 速度的等值线图 (a) $t = 2000\Delta t$; (b) $t = 3000\Delta t$; (c) $t = 4000\Delta t$; (d) $t = 5000\Delta t$

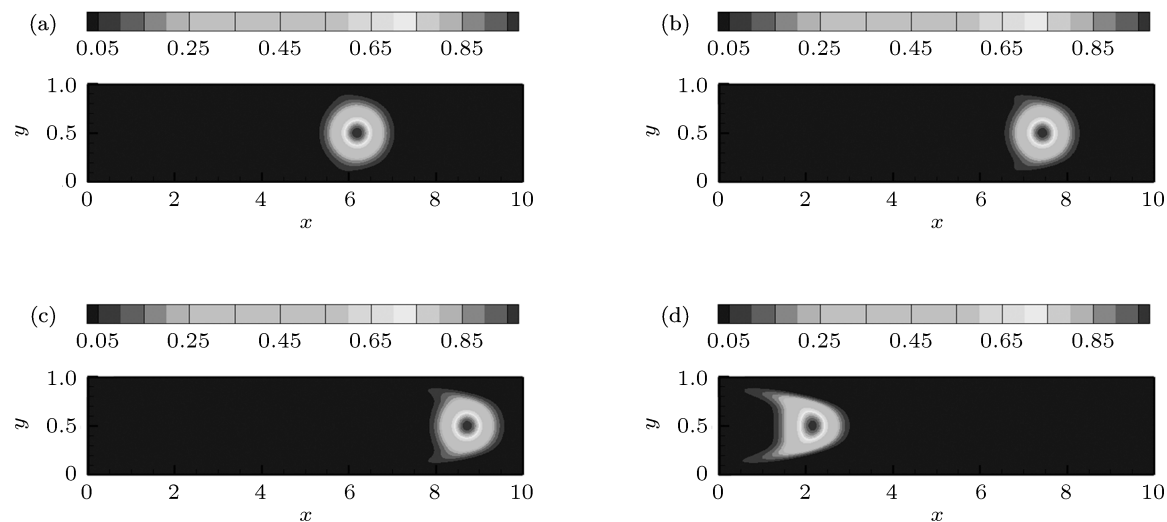


图 5 不同时刻运输函数 τ 的等值线图 (a) $t = 2000\Delta t$; (b) $t = 3000\Delta t$; (c) $t = 4000\Delta t$; (d) $t = 5000\Delta t$

为了说明二阶改进格式求解运输方程数值结果的可靠性, 下面采用文献 [10] 中算法的数值结果作为本文的比较依据, 也称参考解 (Reference, REF). 在文献 [10] 中, 流场采用 LBM 求解, 而运输方程利用 FDM 求解. 图 6(a)—(d) 分别给出在不同时刻 $y = 0.5$ 的中轴处, 本文二阶格式、文献 [12] 一阶格式求解运输函数 τ 的数值结果与参考解的比较. 由图 6 可以看出, 本文 LBM 二阶格式求解输

运函数结果与参考解相当符合, 即验证了本文算法的可靠性. 运输方程 (27) 是一个变系数的波动方程, 物理上反映了波形的平行移动, 但波幅无任何衰减的运动过程. 本文模型的结果也符合该问题的物理意义. 另外由图 6 易见, 与二阶格式的解相比, 文献 [12] 一阶格式数值解的波峰值随着时间的演化呈现出非常明显的衰减趋势, 即出现非常严重的数值耗散, 或称假扩散.

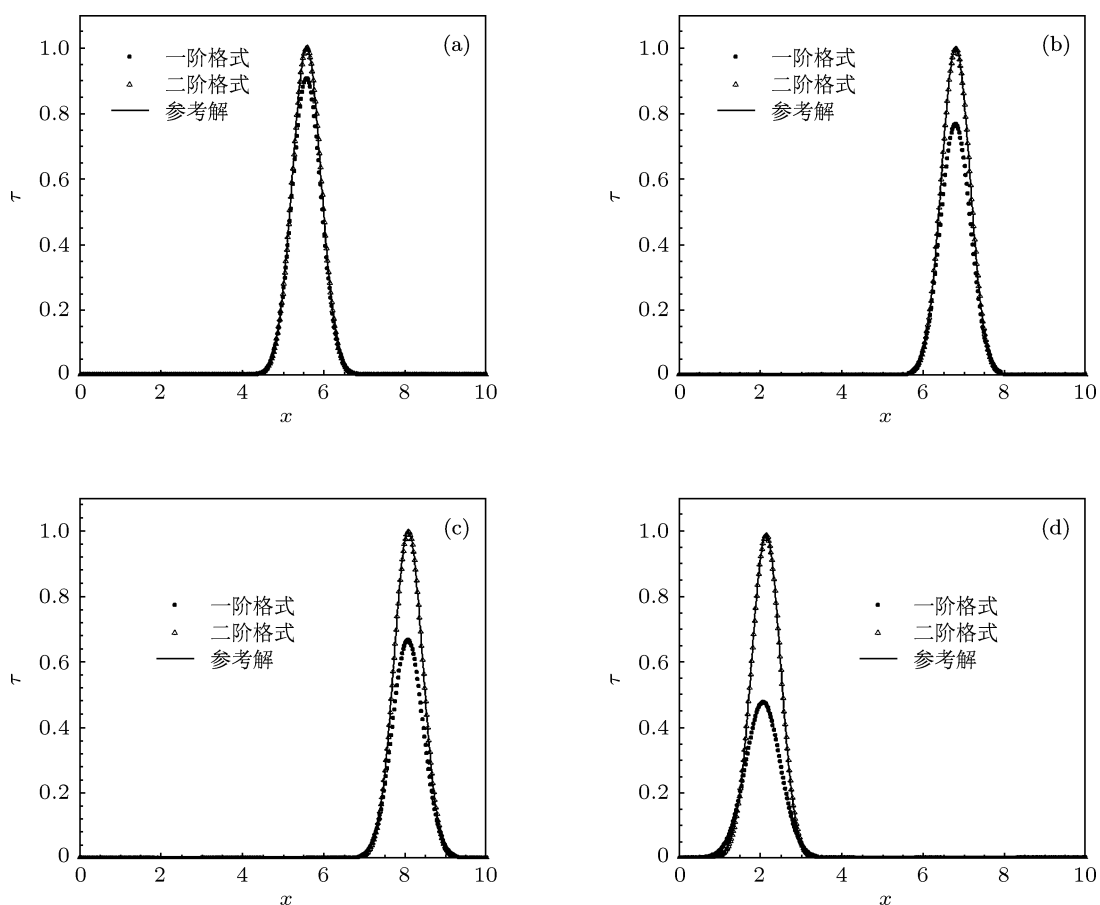


图6 在不同时刻 $y = 0.5$ 的中轴处, LBM 二阶格式、一阶格式与参考解的结果比较 (a) $t = 2000\Delta t$; (b) $t = 3000\Delta t$; (c) $t = 4000\Delta t$; (d) $t = 5000\Delta t$

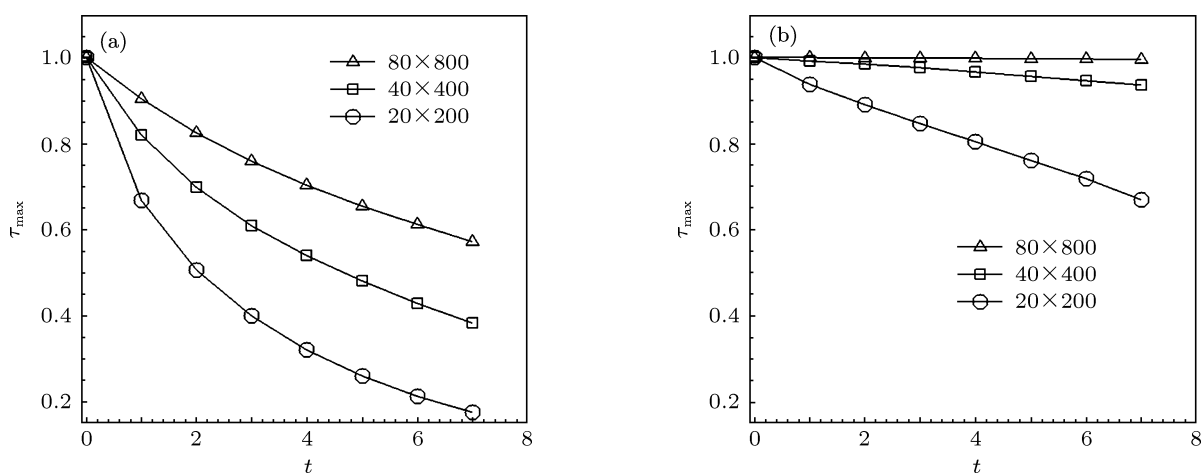


图7 在 $y = 0.5$ 的中轴处, 输运函数波峰值 τ_{\max} 随时间演化的衰减过程比较 (a) 一阶格式; (b) 二阶格式

为进一步考虑本文二阶格式和文献 [12] 一阶格式数值耗散性之间的差异, 图7给出 $y = 0.5$ 处, 不同网格下两种方法求解输运函数波峰值随时间

演化的衰减过程比较. 由图7可见, 采用二阶格式时, 使用 80×80 的网格, 计算结果已与参考解非常接近, 没有出现明显的数值耗散. 而采用一阶格式

时, 使用 80×800 网格时的耗散程度甚至高于采用二阶格式时使用 20×200 网格的耗散程度. 该结果表明, 在相同网格划分下, 采用一阶格式的数值耗散性远远高于采用本文模型的数值耗散. 所以, 与文献 [12] 已有的方法相比较, 本文的二阶数值格式可以很大程度地克服计算过程中的数值耗散.

表 1 分布函数变量存储量与传统方法 [9] 的比较

	D2Q9 模型		D3Q15 模型	
	分布函数	输运张量	分布函数	输运张量
本文方法	1×9	3	1×15	5
文献 [9] 的方法	1×9	3	1×15	5
	$+3 \times 9$		$+5 \times 15$	

另外, 与传统文献 [9] 的方法相比较, 本文方法的一个突出优点是节约巨大的存储量. 在实际物理问题应用中, 输运函数一般是一个张量, 即多变量问题. 这里举一个二阶对称张量的例子来说明. 表 1 给出了分布函数变量存储量个数的比较. 从表中的数据可以发现, 对于三维问题, 文献 [9] 的方法需要存储 6×15 个变量, 而本文的方法只需存储 1×15 个变量. 由于文献 [9] 引入张量分布函数, 导致计算所需的存储量很大, 所以对于解决实际的复杂问题将面临巨大挑战. 而本文提出的模型能够节约巨大的存储量, 可以适应较大系统的模拟.

本文提出的求解耦合复杂流场输运方程的数值模型是一种完全的介观尺度方法. 在传统的方法中 [9], 流场对输运方程的作用通过宏观量速度 \mathbf{u} 实施. 流场方程的 LBM 模型时间演化变量是介观尺度, 而输运方程的时间演化变量是宏观尺度. 鉴于二者耦合的时间尺度不同, 故须取其中最小的时间尺度作为时间划分, 致使传统的方法计算效率低下. 而在本文的模型中, 流场对输运方程的作用通过介观尺度的密度分布函数来传递, 由此避免了二者之间耦合的时间尺度差异.

4 结论

在一些实际的多物理多尺度耦合问题 (如液晶聚合物或高分子聚合物复杂流动) 中, 常会遇到一类耦合复杂流场的输运方程. 本文给出该输运方程的 LBM 数值求解方法. 其主要工作是在流场 LBM 框架的基础上, 构建了一种新的求解输运方程的二

阶数值格式. 针对耦合二维不可压缩流场平板通道的输运方程进行了数值模拟. 通过与参考解的对比, 验证了本文二阶格式的鲁棒性. 进一步分析可知, 与文献 [12] 中的一阶格式相比, 本文的算法可以很大程度地避免计算过程中存在的严重数值耗散. 该模型是一种完全的介观尺度模型, 避免了方程之间耦合的时间尺度差异. 而且, 其与传统方法 [9] 相比较能够节约巨大的存储量, 可以适应较大规模系统的模拟.

附录: 改进模型的数学推导

文中给出的改进模型考虑了相邻两个粒子对当前粒子演化信息的影响, 设 $\delta x = \delta t$, 那么离散数值模型 (16) 近似逼近于方程 (14), 并且空间上具有 $o(\delta x)^2$ 阶精度. 下面给出具体的推导过程.

由 D2Q9 模型的流场速度可得

$$u_i(\mathbf{x}, t) = \sum_{\alpha=1}^8 (\mathbf{e}_\alpha)_i f_\alpha(\mathbf{x}), \quad (18)$$

根据 (18) 式, 有

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x}, t) f_\alpha(\mathbf{x}, t) (\mathbf{e}_\alpha)_i \delta t \\ &= \delta t \frac{\partial}{\partial x_i} \tau(\mathbf{x}, t) \sum_{\alpha=1}^m f_\alpha(\mathbf{x}, t) (\mathbf{e}_\alpha)_i \\ &= \delta t \frac{\partial}{\partial x_i} (\tau(\mathbf{x}, t) u_i(\mathbf{x}, t)). \end{aligned} \quad (19)$$

将 $\sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x} - \mathbf{e}_\alpha \delta t, t) f_\alpha(\mathbf{x} - \mathbf{e}_\alpha \delta t, t)$ 在空间点 $\mathbf{x} - \mathbf{e}_\alpha \delta t$ 的邻域 \mathbf{x} 处进行 Taylor 展开, 得

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x} - \mathbf{e}_\alpha \delta t, t) f_\alpha(\mathbf{x} - \mathbf{e}_\alpha \delta t, t) \\ &= \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x}, t) f_\alpha(\mathbf{x}, t) \\ & \quad - \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x}, t) f_\alpha(\mathbf{x}, t) (\mathbf{e}_\alpha)_i \delta t \\ & \quad + 0.5 \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x}, t) \\ & \quad \times f_\alpha(\mathbf{x}, t) (\mathbf{e}_\alpha)_i (\mathbf{e}_\alpha)_j (\delta t)^2 + o(\delta t)^2. \end{aligned} \quad (20)$$

再将 $\sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x} - 2\mathbf{e}_\alpha \delta t, t) f_\alpha(\mathbf{x} - 2\mathbf{e}_\alpha \delta t, t)$ 在空间点 $\mathbf{x} - 2\mathbf{e}_\alpha \delta t$ 的邻域 \mathbf{x} 处进行 Taylor 展开, 得

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x} - 2\mathbf{e}_\alpha \delta t, t) f_\alpha(\mathbf{x} - 2\mathbf{e}_\alpha \delta t, t) \\ &= \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x}, t) f_\alpha(\mathbf{x}, t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x}, t) f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) (\mathbf{e}_{\alpha})_i (2\delta t) \\
 & + 0.5 \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x}, t) \\
 & \times f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) (\mathbf{e}_{\alpha})_i (\mathbf{e}_{\alpha})_j (2\delta t)^2 + o(\delta t)^2. \quad (21)
 \end{aligned}$$

将方程 (20) 两边同乘以 2, 并且将方程两边同时减去方程 (21) 的两边, 也即 $2 \times (20) - (21)$, 得

$$\begin{aligned}
 & 0.5 \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x}, t) f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) (\mathbf{e}_{\alpha})_i (\mathbf{e}_{\alpha})_j (\delta t)^2 \\
 & = \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x} - \mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) f_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) \\
 & - 0.5 \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x}, t) f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \\
 & - 0.5 \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x} - 2\mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) f_{\alpha}(\mathbf{x} - 2\mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t). \quad (22)
 \end{aligned}$$

将 (22) 式代入 (20) 式, 整理得

$$\begin{aligned}
 & -\delta t \frac{\partial}{\partial x_i} (\tau(\mathbf{x}, t) u_i(\mathbf{x}, t)) \\
 & = \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x} - \mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) f_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) \\
 & - \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x}, t) f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \\
 & - 0.5 \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x}, t) \\
 & \times f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) (\mathbf{e}_{\alpha})_i (\mathbf{e}_{\alpha})_j (\delta t)^2 + o(\delta t)^2 \\
 & = \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x} - \mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) f_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) \\
 & - \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x}, t) f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \\
 & + \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x} - \mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) f_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) \\
 & - 0.5 \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x}, t) f_{\alpha}(\mathbf{x}, t)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -0.5 \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x} - 2\mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) \\
 & \times f_{\alpha}(\mathbf{x} - 2\mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) + o(\delta t)^2. \quad (23)
 \end{aligned}$$

由不可压条件

$$\frac{\partial}{\partial x_i} u_i(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (24)$$

可得

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial x_i} (\tau(\mathbf{x}, t) u_i(\mathbf{x}, t)) \\
 & = u_i(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial x_i} \tau(\mathbf{x}, t) + \tau(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial x_i} u_i(\mathbf{x}, t) \\
 & = u_i(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial x_i} \tau(\mathbf{x}, t). \quad (25)
 \end{aligned}$$

最后对 $\frac{\partial}{\partial t} \tau(\mathbf{x}, t)$ 进行一阶向前离散, 得

$$\frac{\partial}{\partial t} \tau(\mathbf{x}, t) = \frac{\tau(\mathbf{x}, t + \delta t) - \tau(\mathbf{x}, t)}{\delta t} + o(\delta t). \quad (26)$$

进而根据 (23), (25), (26) 式得

$$\begin{aligned}
 \tau(\mathbf{x}, t + \delta t) & = \tau(\mathbf{x}, t) + \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x} - \mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) \\
 & \times f_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) - \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x}, t) f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \\
 & - \left[0.5 \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x}, t) f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \right. \\
 & - \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x} - \mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) f_{\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) \\
 & \left. + 0.5 \sum_{\alpha=1}^m \tau(\mathbf{x} - 2\mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) \right. \\
 & \left. \times f_{\alpha}(\mathbf{x} - 2\mathbf{e}_{\alpha} \delta t, t) \right]. \quad (27)
 \end{aligned}$$

于是离散格式 (16) 逼近于方程 (14), 且空间上具有 $o(\delta x)^2$ 阶精度.

[1] Larson R G 1999 *The Structure and Rheology of Complex Fluid* (New York: Oxford University Press) p156

[2] Wu Q Y, Wu J A 2002 *Polymer Rheology* (Beijing: Higher Education Press) p78 (in Chinese) [吴其晔, 巫静安 2002 高分子材料流变学 (北京: 高等教育出版社) 第 78 页]

[3] Beris A N, Edwards B J 1999 *Rheol. Acta* **38** 117

[4] Bhave A V, Menon A K, Armstrong R C, Brown R A 1993 *J. Rheol.* **37** 413

[5] Guo Z L, Zhen C G 2008 *Theory and Applications of Lattice Boltzmann Method* (Beijing: Science Press) p77 (in Chinese) [郭照立, 郑楚光 2008 流体动力学的格子 Boltzmann 方法 (北京: 科学出版社) 第 77 页]

[6] Bhatnagar J, Gross E P, Krook M K 1954 *Phys. Rev.* **94** 511

[7] Zeng J B, Li L J, Liao Q, Chen Q H, Cui W Z, Pan L M 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 178 (in Chinese) [曾建邦, 李隆键, 廖全, 陈清华, 崔文智, 潘良明 2010 物理学报 **59** 178]

[8] Shi Z Y, Hu G H, Zhou Z W 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2595 (in Chinese) [石自媛, 胡国辉, 周哲玮 2010 物理学报 **59** 2595]

[9] Denniston C, Orlandini E, Yeomans J M 2001 *Phys. Rev. E* **63** 056702

[10] Marenduzzo D, Orlandini E, Cates M E, Yeomans J M 2007 *Phys. Rev. E* **76** 031921

[11] Henrich O, Marenduzzo D, Stratford K, Cates M E 2009 *Comput. Math. Appl.* **8** 47

[12] Alexander K 2005 *Ph. D. Dissertation* (Yale: Yale University)

[13] Guo Z L, Shi B C, Wang N C 2000 *J. Comput. Phys.* **165** 288

Lattice Boltzmann method for an advective transport equation coupled with incompressible flow field*

Su Jin Ouyang Jie[†] Wang Xiao-Dong

(Department of Applied Mathematics, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710129, China)

(Received 4 May 2011; revised manuscript received 15 September 2011)

Abstract

In this paper, an improved numerical scheme based on the lattice BGK method (LBM) is proposed for solving the advective transport equation coupled with an incompressible flow. We utilize the LBM to solve the equations of flow field and build a second order discrete scheme for the advective transport equations using the probability density function of LBM. Meanwhile, the validity of the method is verified by an advective transport in a planar channel flow. Numerical results show that the method reduces the numerical dissipation efficiently and it involves consistently smaller memory requirements compared with previous studies.

Keywords: lattice Boltzmann method, advective transport equation, second order scheme

PACS: 47.11.Qr, 47.10.ab, 02.60.Cb

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2012CB025903) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10871159).

[†] E-mail: jieouyang@nwpu.edu.cn