

可以恢复 Navier-Stokes 方程的 3 阶 格子 Boltzmann 作用力模型

胡开南^{1,2}, 张宏武¹, 耿少娟¹

(1. 中国科学院 工程热物理研究所 工业燃气轮机实验室, 北京 100190;

2. 中国科学院大学, 北京 100190)

摘 要: 为了给出能够恢复适用于低黏性流动的 Navier-Stokes 方程的 3 阶格子 Boltzmann 作用力模型,修正了 Shan 等人给出的 3 阶格子 Boltzmann 作用力模型,并重新定义了受作用力影响的流体速度和总能。使用修正后的 Shan 模型,通过 Chapman-Enskog 展开,可以将 lattice Bhatnagar-Gross-Krook (LBGK) 方程恢复到 Navier-Stokes 方程(含能量方程),且没有产生任何误差项。

关 键 词: 格子 Boltzmann 方法; Chapman-Enskog 展开; 热格子模型; 作用力模型; 格子离散效应; 低黏性流动

中图分类号: V231.3

文献标志码: A

A third order lattice Boltzmann force model capable of recoving the Naveir-Stokes equations

HU Kainan^{1,2}, ZHANG Hongwu¹, GENG Shaojuan²

(1. Industrial Gas Turbine Laboratory, Institute of Engineering Thermophysics,
Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;

2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

Abstract: In order to design a third order lattice Boltzmann force model capable of recovering the Navier-Stokes equations applied to low viscosity flow, the force model proposed by Shan, et al were amended. The fluid velocity and total energy affected by force were re-defined directly without any physical assumption. The Navier-Stokes equations (including the energy equation) were derived from lattice Bhatnagar-Gross-Krook (LBGK) equation via the Chapman-Enskog expansion without any error terms.

Key words: lattice Boltzmann method; Chapman-Enskog expansion;
thermal lattice model; force model; lattice discrete effect; low viscosity flow

最近 20 年多年以来,格子 Boltzmann 方法 (lattice Boltzmann method, LBM) 发展迅速^[1-7]。作为一种介观方法,LBM 和传统 CFD 相比,具有一些独特的优势。在一些传统 CFD 应用困难的领域,如多相流^[8-10]、多孔介质流^[11-12],LBM 可以

得到良好的结果。

LBM 用于受外力或者内力影响的流动时,lattice Bhatnagar-Gross-Krook (LBGK)^[13] 方程中包含外力项或者源项。此时离散 LBGK 方程中的作用力项需要用合适的方式在速度空间中离

收稿日期:2016-01-11

作者简介:胡开南(1977—),男,博士生,主要从事格子 Boltzmann 方法研究。

引用格式:胡开南,张宏武,耿少娟. 可以恢复 Navier-Stokes 方程的 3 阶格子 Boltzmann 作用力模型[J]. 航空动力学报,2017,32(8):1943-1949. HU Kainan,ZHANG Hongwu,GENG Shaojuan. A third order lattice Boltzmann force model capable of recoving the Naveir-Stokes equations[J]. Journal of Aerospace Power,2017,32(8):1943-1949.

散。适用于等温格子模型的作用力项的离散模型已经被非常详尽的讨论过^[14-17],适用于热格子模型的作用力模型的研究相对较少。Shan 等给出了一个 3 阶矩作用力模型^[18]。首先将作用力项用 Hermite 多项式展开,然后将离散后作用力项吸收进平衡态分布函数。Shan 作用力模型不能完全恢复到 Navier-Stokes(N-S)方程。

本文首先修正了 Shan 模型,然后证明,含有修正后的 Shan 模型的 LBGK 方程用 Chapman-Enskog(C-E)展开可以恢复到 N-S 方程。本文的主要工作是通过 C-E 展开,将含有修正后作用力项的 LBGK 方程恢复到 N-S 方程。

本文假设作用力项中的速度分布函数等于相应的平衡态分布函数。当黏性力对流动影响较小时,这个假设是合理的。本文只讨论黏性力较小的流动。

作用力项的实现有两种方式:第 1 种方式是将作用力项直接吸收进平衡态分布函数,Shan 采用了这种方式;第 2 种处理方式是在演化方程中增加作用力项。两种方式是等价的。Shan 模型省略了作用力项的 τ 高阶项。采用第 2 种作用力处理方式,不用省略 τ 的高阶项。

将离散作用力项直接加入演化方程中,须要考虑格子离散效应。在本文中,给 Shan 作用力模型增加了格子效应系数。此外,考虑作用力对动量和总能的影响,流体速度 $\mathbf{u}$ 、总能 E 与速度分布函数 $f(\mathbf{x}, \xi, t)$ 的关系会发生变化,流体速度 $\mathbf{u}$ 和总能 E 应当重新定义。Shan 给出了受作用力影响的流体速度定义式。Shan 给出的流体速度定义是通过物理假设推导得出的,证明从现有条件可以直接导出受外力作用的流体速度定义式,不需要任何新的物理假设。此外,用相同的方式重新定义了受外力影响的总能 E 。

1 修正后 3 阶作用力模型

在用 C-E 展开恢复 N-S 方程之前,首先给出带有离散作用力项 F_i 的 LBGK 方程,即演化方程

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{c}_i, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)] + \Delta t F_i \quad (1)$$

$$i = 0, 1, 2, \dots, n$$

式中 $f_i(\mathbf{x}, t)$ 为 t 时刻、位于空间位置 $\mathbf{x}$ 、离散速度为 $\mathbf{c}_i$ 的离散粒子速度分布函数, Δt 为时间步长, $f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)$ 为相应的平衡态分布函数, τ 为无量纲松

弛时间, $\Delta t F_i$ 为离散后的作用力项, i 为离散粒子速度的方向, n 为离散粒子速度的数量。

考虑作用力对流体速度 $\mathbf{u}$ 和总能 E 的影响,流体速度 $\mathbf{u}$ 和总能 E 重新定义为

$$\rho \mathbf{u} = \sum_i \mathbf{c}_i f_i + \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{F} \quad (2a)$$

$$\rho E = \sum_i \frac{1}{2} c_i^2 f_i + \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{F} \cdot \mathbf{u} \quad (2b)$$

式中 c_i 为 $\mathbf{c}_i$ 的范数;流体速度 $\mathbf{u}$ 和总能 E 的定义式与不考虑作用力 $\mathbf{F}$ 影响的定义式不同。新的流体速度和总能定义式对完全恢复 N-S 方程是必要的。如果不考虑作用力的对流体速度和总能的影响,不重新定义流体速度和总能,就无法通过 C-E 展开将 LBGK 方程完全恢复到 N-S 方程。考虑格子离散效应,定义式(2a)和式(2b)可以从已有条件直接推导出,而无需任何新的物理假设。Shan 得到的同样的速度定义式,但做了新的物理假设。附录 A 中给出了具体推导过程。

总能由式(2b)确定后,温度 T 可以从关系 $E = (D R_g T + u^2)/2$ 求出,其中 D 是维度, R_g 是通用气体常数。

平衡态分布函数 f^{eq} 由式(2a)和式(2b)定义的流体速度 $\mathbf{u}$ 和总能 E (温度 T) 确定。也就是说,流体速度、总能(温度)与平衡态分布函数中的速度、总能(温度)是相同的。有的作用力模型定义的流体速度、总能(温度)与平衡态分布函数中的速度、总能(温度)不一致。这导致这些模型不能恢复到 N-S 方程^[16]。

重新定义流体速度和总能(温度)之后, LBGK 方程中的离散作用力项 F_i 可以表示为离散速度 $\mathbf{c}_i$ 的 Hermite 多项式

$$F_i = \omega_i \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left\{ \frac{\mathbf{F} \cdot \mathbf{c}_i}{\theta_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{\mathbf{F} \mathbf{u} \cdot (\mathbf{c}_i^2 - \mathbf{I} \theta_0)}{\theta_0^2} + \frac{1}{6} \cdot \frac{[\mathbf{F} \mathbf{u} \mathbf{u} + (\theta - 1) \mathbf{I} \theta_0] \cdot (\mathbf{c}_i^3 - \mathbf{I} \theta_0 \mathbf{c}_i)}{\theta_0^3} \right\} \quad (3)$$

式中 ω_i 为格子模型的权重系数, θ_0 为特征温度, $\theta = T/\theta_0$ 为无量纲温度, $\mathbf{I}$ 为单位 2 阶张量。式(3)使用了 Grad 给出的完全对称张量概念及其简写方式^[19]。例如 $\mathbf{F} \mathbf{u} \mathbf{u}$ 为 $F_r u_i u_l + F_l u_i u_r + F_i u_r u_l$, $\mathbf{c}_i^3$ 表示张量直积 $\mathbf{c}_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i$, 而不是向量范数的三次方 c_i^3 。此外,“ $\cdot$ ”为内积算符。

式(3)的离散作用力模型的主体部分是 Shan 给出的,但是本文做了 3 点修改。

首先,式(3)中的流体速度 $\mathbf{u}$ 和总能 E 采用

了新的定义。新的流体速度和总能定义直接从已有条件中导出而无须做任何物理假设。

第二,式(3)给出的作用力模型假定作用力项中的 $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \approx f^{\text{eq}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$, 略去了 Shan 给出的离散速度模型 F_i 中的黏性力 $\boldsymbol{\sigma}$ 。当黏性力 $\boldsymbol{\sigma}$ 较小时,这个假设是合理的。但这也意味着本文讨论的作用力模型仅仅适用于黏性力较小的情形。

第三,考虑格子离散效应,在 Shan 给出的表达式前增加格子离散系数 $(1 - \tau/2)$ 。此系数由 Guo 等给出^[20]。

2 从修正后的作用力模型恢复到 N-S 方程

为了用 C-E 展开从含有作用力项的 LBGK 方程恢复 N-S 方程,需要计算离散作用力项 F_i 的 0 阶速度矩到 3 阶速度矩。经过繁复的计算之后,从式(3)出发,得到

$$\sum_i F_i = 0 \quad (4a)$$

$$\sum_i F_i \mathbf{c}_i = \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \mathbf{F} \quad (4b)$$

$$\sum_i F_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i = \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) (\mathbf{F} \mathbf{u} + \mathbf{u} \mathbf{F}) \quad (4c)$$

$$\sum_i \frac{1}{2} F_i c_i^2 = \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \mathbf{F} \cdot \mathbf{u} \quad (4d)$$

$$\sum_i \frac{1}{2} F_i c_i^2 \mathbf{c}_i = \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \left[(\mathbf{F} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{u} + E \left(\frac{p}{\rho}\right) \mathbf{F} \right] \quad (4e)$$

式中 p 为流体压力,定义为 $\rho R_g T$ 。在这个表达式中,没有使用 Grad 的简写记号。例如, $\mathbf{F} \mathbf{u}$ 仅为一个 2 阶张量,表示 $F_i u_j$,而不是 $F_i u_j + F_j u_i$ 。附录 B 给出了式(4e)的详细推导过程。

用 Kundsens 数 ϵ 将离散粒子速度分布函数 f_i 及其时间导数、空间导数展开

$$f_i = f_i^{(0)} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)} + \dots \quad (5a)$$

$$\partial_t = \epsilon \partial_{t_1} + \epsilon^2 \partial_{t_2} \quad (5b)$$

$$\nabla = \epsilon \nabla_1 \quad (5c)$$

并假设 $\mathbf{F} = \epsilon \mathbf{F}_1$, 从而有 $F_i = \epsilon F_{1i}$ 。对式(1)即 LBGK 方程做泰勒展开,将式(5)代入,比较相同阶 ϵ ,可得

$$O(\epsilon^0): f_i^{(0)} = f_i^{\text{eq}} \quad (6a)$$

$$O(\epsilon^1): D_{1i} f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau \Delta t} f_i^{(1)} + F_{1i} \quad (6b)$$

$$O(\epsilon^2): \partial_{t_2} f_i^{(0)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) D_{1i} f_i^{(1)} = -\frac{1}{\tau \Delta t} f_i^{(2)} - \frac{\Delta t}{2} D_{1i} F_{1i} \quad (6c)$$

式中 $D_{1i} = \partial/\partial t_1 + \mathbf{c}_i \cdot \nabla_1$ 。根据平衡态速度分布函数的特性

$$\sum_i f_i^{\text{eq}} = \rho \quad (7a)$$

$$\sum_i f_i^{\text{eq}} \mathbf{c}_i = \rho \mathbf{u} \quad (7b)$$

$$\sum_i f_i^{\text{eq}} \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i = \rho \mathbf{u} \mathbf{u} + p \mathbf{I} \quad (7c)$$

$$\sum_i \frac{1}{2} f_i^{\text{eq}} c_i^2 = \rho E \quad (7d)$$

$$\sum_i \frac{1}{2} f_i^{\text{eq}} c_i^2 \mathbf{c}_i = (\rho E + p) \mathbf{u} \quad (7e)$$

$$\sum_i f_i^{(\text{eq})} \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i = \rho \mathbf{u} \mathbf{u} \mathbf{u} + p \mathbf{u} \mathbf{I} \quad (7f)$$

$$\sum_i \frac{1}{2} f_i^{(\text{eq})} c_i^2 \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i = p(R_g T + E) \mathbf{I} + (2p + \rho E) \mathbf{u} \mathbf{u} \quad (7g)$$

式(7f)中 $\mathbf{u} \mathbf{I} = \mathbf{u}_r \mathbf{I}_s + \mathbf{u}_l \mathbf{I}_r + \mathbf{u}_l \mathbf{I}_s$ 。由式(2)、式(5)和式(6a)得到

$$\sum_i f_i^{(k)} = 0, \quad k > 0 \quad (8a)$$

$$\sum_i \mathbf{c}_i f_i^{(1)} = -\frac{1}{2} \Delta t \mathbf{F}_1, \quad \sum_i f_i^{(k)} = 0, \quad k > 1 \quad (8b)$$

$$\sum_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i f_i^{(1)} = -\frac{1}{2} \Delta t \mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{u}, \quad (8c)$$

$$\sum_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i f_i^{(k)} = 0, k > 1$$

注意到离散速度分布函数 f_i 的 1 阶近似 f_i^{eq} 的 1 阶矩、2 阶矩不为零。附录 B 给出了式(8b)和式(8c)的推导过程。

2.1 恢复连续方程

做了以上的准备工作后,可以从式(6)恢复 N-S 方程。首先恢复连续方程。对式(6b)左右两边取 0 阶矩,得到

$$\partial_{t_1} \rho + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} = 0 \quad (9)$$

对式(6c)左右两边取 0 阶矩

$$\partial_{t_2} \rho = 0 \quad (10)$$

合并式(9)和式(10)可得连续方程

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} = 0 \quad (11)$$

2.2 恢复动量方程

从离散 LBGK 方程恢复动量方程的过程是类似的。对式(6b)左右两边取 1 阶矩,化简后可得

$$\partial_{t_1} \rho \mathbf{u} + \nabla_1 \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u} + p \mathbf{I}) = \mathbf{F} \quad (12)$$

这是时间尺度 $t_1 = \epsilon t$ 的和空间尺度 $\mathbf{x}_1 = \epsilon \mathbf{x}$ 上的动量方程。求取时间尺度 $t_2 = \epsilon^2 t$ 上的动量方程更复杂一些。下面给出详细的推导过程。

时间尺度 t_2 上的动量方程可以由式(6c)的 1 阶矩得到。对式(6c)左右两边取 1 阶矩,可得

$$\partial_{t_2} \sum_i f_i^{(0)} \mathbf{c}_i + \sum_i \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) D_{1i} f_i^{(1)} \mathbf{c}_i = -\frac{1}{\tau \Delta t} \sum_i f_i^{(2)} \mathbf{c}_i - \frac{\Delta t}{2} \sum_i D_{1i} F_{1i} \mathbf{c}_i \quad (13)$$

所得方程左边第 1 项化简后为 $\partial_{t_1} \rho \mathbf{u}$, 右边第 1 项为 0, 左边第 2 项为

$$\sum_i \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) D_{1i} f_i^{(1)} \mathbf{c}_i = \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \left(-\frac{1}{2} \Delta t \partial_{t_1} \mathbf{F}_1 + \nabla \cdot \sum_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i f_i^{(1)}\right) \quad (14)$$

根据式(6b)

$$f_i^{(1)} = -\tau \Delta t (D_{1i} f_i^{(0)} - F_{1i}) \quad (15)$$

将式(15)代入式(14), 经过一些代数计算后

$$\begin{aligned} & \sum_i \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) D_{1i} f_i^{(1)} \mathbf{c}_i = \\ & \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \left\{ -\frac{1}{2} \Delta t \partial_{t_1} \mathbf{F}_1 - \Delta t \tau \nabla \cdot \right. \\ & \left. \left[\partial_{t_1} (\rho \mathbf{u} \mathbf{u} + p \mathbf{I}) + \nabla \cdot \sum_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i f_i^{(0)} - \sum_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i F_{1i} \right] \right\} \end{aligned} \quad (16)$$

为了得到 t_2 时间尺度上的动量方程, 需要先求得 t_1 时间尺度上的能量方程。对式(6b)取 2 阶矩, 化简得

$$\partial_{t_1} (\rho E) + \nabla_1 \cdot (\rho E + p) \mathbf{u} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{u} \quad (17)$$

此即时间尺度 t_1 上的能量方程。后面推导能量方程的时候还会用到。将式(7f)、式(9)、式(12)、式(17)代入式(16)

$$\begin{aligned} & \sum_i \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) D_{1i} f_i^{(1)} \mathbf{c}_i = \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \cdot \\ & \left(-\frac{1}{2} \Delta t \partial_{t_1} \mathbf{F}_1\right) + \Delta t \left(\tau - \frac{1}{2}\right) \nabla \cdot \\ & \left[p (\nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla) - \frac{2}{D} p \mathbf{I} \right] - \\ & \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \nabla \cdot (\mathbf{F} \mathbf{u} + \mathbf{u} \mathbf{F}) \end{aligned} \quad (18)$$

最后, 得到式(13)的右边第 2 项

$$\begin{aligned} & -\frac{\Delta t}{2} \sum_i D_{1i} F_{1i} \mathbf{c}_i = -\frac{\Delta t}{2} \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \cdot \\ & [\partial_{t_1} \mathbf{F} + \nabla \cdot (\mathbf{F} \mathbf{u} + \mathbf{u} \mathbf{F})] \end{aligned} \quad (19)$$

将求得的式(13)的左右各项代入式(13), 经过冗长的代数计算得到

$$\partial_{t_2} \rho \mathbf{u} = \nabla \cdot \mu \left[(\nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla) - \frac{2}{D} \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u} \right] \quad (20)$$

式中 $\mu = \Delta t (\tau - 1/2) p$ 为黏度。式(20)是时间尺

度 t_2 上的动量方程。合并式(20)和式(12), 得到含有作用力项的动量方程

$$\begin{aligned} & \partial_{t_2} \rho \mathbf{u} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u} + p \mathbf{I}) = \\ & \nabla \cdot \mu \left[(\nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla) - \frac{2}{D} \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u} \right] + \mathbf{F} \end{aligned} \quad (21)$$

2.3 恢复能量方程

恢复能量方程的过程比恢复动量方程的过程更复杂一些。对式(6c)左右两边取 2 阶矩并缩并

$$\begin{aligned} & \partial_{t_2} \sum_i \frac{1}{2} f_i^{(0)} c_i^2 + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) D_{1i} \sum_i \frac{1}{2} f_i^{(1)} c_i^2 = \\ & -\frac{1}{\tau \Delta t} \sum_i \frac{1}{2} f_i^{(2)} c_i^2 - \frac{\Delta t}{2} D_{1i} \sum_i \frac{1}{2} F_{1i} c_i^2 \end{aligned} \quad (22)$$

根据式(6a)和式(7d), 式(22)左边第 1 项简化为

$$\partial_{t_2} \sum_i \frac{1}{2} f_i^{(0)} c_i^2 = \partial_{t_2} \rho E \quad (23)$$

式(22)左边第 2 项为

$$\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \nabla_1 \cdot \sum_i \frac{1}{2} c_i^2 \mathbf{c}_i f_i^{(1)} \quad (24)$$

根据式(14)

$$\begin{aligned} & \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \nabla_1 \cdot \sum_i \frac{1}{2} c_i^2 \mathbf{c}_i f_i^{(1)} = \\ & \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \nabla_1 \cdot \sum_i \frac{1}{2} c_i^2 \mathbf{c}_i (\tau \Delta t F_{1i} - \tau \Delta t D_{1i} f_i^{(0)}) \end{aligned} \quad (25)$$

化简得到

$$\begin{aligned} & \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \nabla_1 \cdot \sum_i \frac{1}{2} c_i^2 \mathbf{c}_i f_i^{(1)} = \\ & \tau \Delta t \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \nabla_1 \cdot \left\{ \sum_i \frac{1}{2} c_i^2 \mathbf{c}_i F_{1i} - \right. \\ & \left. \left[\left(\frac{D+2}{2} R_g T + \frac{1}{2} u^2 \right) \mathbf{F} \right] + (\mathbf{F} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{u} + \right. \\ & \left. p \mathbf{u} \left(\nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla - \frac{2}{D} \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) + p (c_v + R_g) \nabla T \right\} \end{aligned} \quad (26)$$

式(22)右边第 1 项是 0, 右边第 2 项为

$$\begin{aligned} & -\frac{\Delta t}{2} D_{1i} \sum_i \frac{1}{2} F_{1i} c_i^2 = \\ & -\frac{\Delta t}{2} \partial_{t_2} \sum_i \frac{1}{2} F_{1i} c_i^2 - \frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot \sum_i \frac{1}{2} F_{1i} c_i^2 \mathbf{c}_i \end{aligned} \quad (27)$$

式中 $\frac{1}{2} \sum_i c_i^2 \mathbf{c}_i F_{1i}$ 可以由式(4e)给出。合并式(23)、式(26)和式(27)

$$\begin{aligned} & \partial_{t_2} \rho E = \nabla_1 \cdot \\ & \left[\mathbf{u} \cdot \mu \left(\nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla - \frac{2}{D} \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) \right] + \nabla_1 \cdot \lambda \nabla T \end{aligned} \quad (28)$$

式中 $\lambda = \Delta t (\tau - 1/2) (c_v + R_g) p$ 为导热系数, c_v 为比定容热容. 式(28)是时间尺度 t_2 上的能量方程. 合并式(17)和式(28),即可得到能量方程

$$\begin{aligned} &\partial_t \rho E + \nabla \cdot (\rho E + p) \mathbf{u} = \\ &\nabla \cdot \left[\mathbf{u} \cdot \mu \left(\nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla - \frac{2}{D} \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) \right] + \quad (29) \\ &\nabla \cdot \lambda \nabla T + \mathbf{F} \cdot \mathbf{u} \end{aligned}$$

至此,用 C-E 展开从含有修正后 Shan 作用力模型的离散 LBGK 方程恢复了连续方程、动量方程和能量方程. 这表明修正后的 Shan 作用力模型可以正确的恢复到 N-S 方程,且不会产生误差项.

3 结 论

Shan 给出了的适用于热格子模型的 3 阶作用力模型,但 Shan 模型无法恢复到 N-S 方程. 对 Shan 模型做了一些修正,重新定义了总能,然后从含有修正后的作用力模型的 LBGK 方程恢复了 N-S 方程,并且没有产生任何误差项. 此外,用新的方式直接导出了受作用力影响的流体速度,且无须任何物理假设,并用同样的方式重新定义了受作用力影响的总能. 最后要强调的是,本文的主要工作是使用 C-E 展开,从含有修正后 Shan 作用力模型的 LBGK 方程恢复了 N-S 方程. 本文给出的作用力模型是第一个可以恢复 N-S 方程的 3 阶作用力模型. 本文的讨论仅限于低黏性流动.

参考文献:

[1] BENZI R, SUCCI S, VERGASSOLA M. The lattice Boltzmann equation; theory and applications[J]. Physics Reports, 1992, 222(3): 145-197.

[2] CHEN Shiyi, DOOLEN G D. Lattice Boltzmann method for fluid flows[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 1998, 30(1): 329-364.

[3] CHEN H, CHEN S, MATTHAEUS W H. Recovery of the Navier-Stokes equations using a lattice-gas Boltzmann method[J]. Physical Review A, 1992, 45(8): R5339-R5342.

[4] PHILIPPI P C, HEGELE L A, Jr., DOS SANTOS L O, et al. From the continuous to the lattice Boltzmann equation; the discretization problem and thermal models[J]. Physical Review E, 2006, 73(5): 056702. 1-056702. 12.

[5] ANSUMALI S, KARLIN I V, ÖTTINGER H C. Minimal entropic kinetic models for hydrodynamics[J]. Europhysics Letters, 2003, 63(6): 798-804.

[6] CHIKATAMARLA S S, KARLIN I V. Entropy and galilean invariance of lattice Boltzmann theories[J]. Physical Review Letters, 2006, 97(19): 190601. 1-190601. 4.

[7] CHIKATAMARLA S S, KARLIN I V. Lattices for the lattice Boltzmann method[J]. Physical Review E, 2009, 79(4): 046701. 1-046701. 4.

[8] SWIFT M R, ORLANDINI E, OSBORN W, et al. Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems[J]. Physical Review E, 1996, 54(5): 5041-5052.

[9] AIDUN C K, CLAUSEN J R. Lattice-Boltzmann method for complex flows[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 2010, 42(1): 439-472.

[10] SHAN X, CHEN H. Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation[J]. Physical Review E, 1994, 49(4): 2941-2960.

[11] PAN C, PRINS J F, MILLER C T. A high-performance lattice Boltzmann implementation to model flow in porous media[J]. Computer Physics Communications, 2004, 158(2): 89-105.

[12] GUNSTENSEN A K, ROTHMAN D H, ZALESKI S, et al. Lattice Boltzmann model of immiscible fluids[J]. Physical Review A, 1991, 43(8): 4320-4327.

[13] BHATNAGAR P L, GROSSE P, KROOK M. A model for collision processes in gases; I small amplitude processes in charged and neutral one-component systems[J]. Physical Review, 1954, 94(3): 511-525.

[14] SHAN X, DOOLEN G. Multicomponent lattice-Boltzmann model with interparticle interaction[J]. Journal of Statistical Physics, 1995, 81(1/2): 379-393.

[15] MARTYS N S, SHAN X, CHEN H. Evaluation of the external force term in the discrete Boltzmann equation[J]. Physical Review E, 1998, 58(5): 6855-6857.

[16] MOHAMAD A, KUZMIN A. A critical evaluation of force term in lattice Boltzmann method, natural convection problem[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2010, 53(5): 990-996.

[17] LUO L S. Unified theory of lattice Boltzmann models for nonideal gases[J]. Physical Review Letters, 1998, 81(8): 1618-1621.

[18] SHAN X, YUAN X F, CHEN H. Kinetic theory representation of hydrodynamics; a way beyond the Navier-Stokes equation[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2006, 550(7): 413-441.

[19] GRAD H. On the kinetic theory of rarefied gases[J]. Communications on Pure and Applied Mathematics, 1949, 2(4): 331-407.

[20] GUO Z, ZHENG C, SHI B. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method[J]. Physical Review E, 2002, 65(4): 046308. 1-046308. 6.

附录 A 受外力作用的流体速度 $\mathbf{u}$ 和总能 E 的重新定义

受作用力的影响, LBM 中的流体速度 $\mathbf{u}$ 和总能 E 需要重新定义. 受流体作用力影响的流体速度 $\mathbf{u}$ 的重新定义已经被讨论过, 总能 E 的重新定义尚未被讨论过.

Shan 等^[14]认为, 流体速度 $\mathbf{u}$ 应该定义为碰撞前速度 $\rho\mathbf{v} = \sum_i \mathbf{c}_i f_i$ 和碰撞后的速度 $\rho\mathbf{v}' = \sum_i \mathbf{c}_i f'_i = (1 - 1/\tau)\sum_i \mathbf{c}_i f_i + 1/\tau\sum_i \mathbf{c}_i f_i^{\text{eq}}$ 的平均值, 即

$$\rho\mathbf{u} = \frac{1}{2}\rho(\mathbf{v} + \mathbf{v}') = \sum_i \mathbf{c}_i f_i + \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{F} \quad (\text{A1})$$

Shan 从物理角度重新定义了受流体影响的流体速度. Shan 的这个定义也可以直接从已有条件中直接推导出, 而不需要任何新的假设条件. 首先计算 $\sum_i \mathbf{c}_i f_i^{(1)}$. 由

$$f_i^{(1)} = -\tau\Delta t(D_{1i}f_i^0 - F_{1i}) \quad (\text{A2})$$

由此可以得到

$$\sum_i f_i^{(1)} \mathbf{c}_i = -\tau\Delta t(\partial_{t_1} \sum_i \mathbf{c}_i f_i^{(0)} + \nabla \cdot \sum_i f_i^{(0)} \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i - \sum_i \mathbf{c}_i F_{1i}) \quad (\text{A3})$$

代入式(7b)、式(7c)、式(4b)和式(17), 化简后得到

$$\sum_i f_i^{(1)} \mathbf{c}_i = \tau\Delta t \left[\partial_{t_1} \rho\mathbf{u} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\mathbf{u} + p\mathbf{I}) - \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right)\mathbf{F} \right] = -\frac{\Delta t}{2}\mathbf{F} \quad (\text{A4})$$

f_i 的矩可以表达为 ϵ 的多项式. 如果省略掉 ϵ 的高阶项, 仅剩下 ϵ 的 0 阶项和 1 阶项, 则有

$$\sum_i \mathbf{c}_i f_i = \sum_i \mathbf{c}_i f_i^{(0)} + \sum_i \mathbf{c}_i f_i^{(1)} \quad (\text{A5})$$

由式 $\sum_i \mathbf{c}_i f_i^{(0)} = \rho\mathbf{u}$ 及式(A5), 得到受作用力影响的流体速度定义

$$\rho\mathbf{u} = \sum_i \mathbf{c}_i f_i + \frac{\Delta t}{2}\mathbf{F} \quad (\text{A6})$$

此流体速度定义和 Shan 给出的流体速度定义是相同的, 但是并没有用到任何物理假设, 而是直接从已有条件直接推导出.

用类似的方法, 可以重新定义受外力影响的总能 E . 首先, 求出 $1/2\sum_i c_i^2 f_i^{(1)}$

$$\sum_i \frac{1}{2}c_i^2 f_i^{(1)} = \sum_i \frac{1}{2}c_i^2 [-\tau\Delta t(D_{1i}f_i^{(0)} - F_{1i})] \quad (\text{A7})$$

即

$$\sum_i \frac{1}{2}c_i^2 f_i^{(1)} = -\tau\Delta t \left(\partial_{t_1} \sum_i \frac{1}{2}c_i^2 f_i^{(0)} + \nabla \cdot \frac{1}{2}c_i^2 \mathbf{c}_i f_i^{(0)} - \sum_i \frac{1}{2}c_i^2 F_{1i} \right) \quad (\text{A8})$$

将式(7d)、式(7e)、式(4d)及式(17)代入, 化简后可得

$$\sum_i \frac{1}{2}c_i^2 f_i^{(1)} = -\tau\Delta t \left[\partial_{t_1} \rho E + \nabla \cdot (\rho E + p)\mathbf{u} - \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right)\mathbf{F} \cdot \mathbf{u} \right] = -\frac{\Delta t}{2}\mathbf{F} \cdot \mathbf{u} \quad (\text{A9})$$

与定义流体速度类似, f_i 的 2 阶矩可以用 ϵ 展开. 省略掉高阶项后, 保留 0 阶项和 1 阶项, 可以得到

$$\sum_i \frac{1}{2}c_i^2 f_i = \sum_i \frac{1}{2}c_i^2 f_i^{(0)} + \sum_i \frac{1}{2}c_i^2 f_i^{(1)} \quad (\text{A10})$$

将式(7d)及式(A9)代入式(A10), 可以得到受外力作用的总能定义式

$$\rho E = \sum_i \frac{1}{2}c_i^2 f_i + \frac{\Delta t}{2}\mathbf{F} \cdot \mathbf{u} \quad (\text{A11})$$

此即是式(2b). 这样, 从现有条件出发, 通过推导, 没有做任何物理假设, 直接得出了受外力作用的流体速度和总能定义式.

附录 B 离散作用力项 $\frac{1}{2} \sum_i c_i^2 \mathbf{c}_i F_{1i}$ 的导出过程

这里将给出求取 $\frac{1}{2} \sum_i c_i^2 \mathbf{c}_i F_{1i}$ 的详细过程。此处将使用 Grad^[19] 给出的简写记号。在计算 $\frac{1}{2} \sum_i c_i^2 \mathbf{c}_i F_{1i}$ 之前,首先给出 $\sum_i \omega_i \mathbf{c}_i^6$ 和 $\sum_i \omega_i \mathbf{c}_i^4$ 。这两个表达式在下一步推导过程中会用到。

$$\sum_i \omega_i \mathbf{c}_i^6 = \sum_i \omega_i (c_{ir} c_{is} \Delta_{lmn}^{(4)} + c_{ir} c_{ik} \Delta_{slm}^{(4)} + c_{ir} c_{il} \Delta_{skm}^{(4)} + c_{ir} c_{im} \Delta_{skln}^{(4)} + c_{ir} c_{in} \Delta_{sklm}^{(4)})$$

(B1)

式中 $\Delta_{klmn}^{(4)} = \mathbf{I}_{kl} \mathbf{I}_{mn} + \mathbf{I}_{ln} \mathbf{I}_{lm} + \mathbf{I}_{km} \mathbf{I}_{ln}$ 是 4 阶格子张量。缩并式(B1) 中的下标 m 和 n

$$\sum_i \omega_i \mathbf{c}_i^4 c_i^2 = \theta_0^3 (D + 4) \mathbf{I}^2$$

(B2)

类似地

$$\sum_i \omega_i \mathbf{c}_i^2 c_i^2 = \theta_0^2 (D + 2) \mathbf{I}$$

(B3)

对离散作用力项 F_i 取 3 阶矩并缩并其中任一对下标

$$\begin{aligned} \sum_i \frac{1}{2} F_i \mathbf{c}_i c_i^2 &= \sum_i \omega_i \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left\{ \frac{\mathbf{F} \cdot \mathbf{c}_i}{\theta_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{\mathbf{F} \mathbf{u} \cdot (\mathbf{c}_i^2 - \theta_0 \mathbf{I})}{\theta_0^2} + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{6} \cdot \frac{\mathbf{F} [\mathbf{u} \mathbf{u} + (\theta - 1) \theta_0 \mathbf{I}] \cdot (\mathbf{c}_i^3 - \theta_0 \mathbf{c}_i \mathbf{I})}{\theta_0^3} \right\} \mathbf{c}_i c_i^2 \frac{1}{2} \end{aligned}$$

(B4)

将式(B2) 和(B3)代入(B4),经过一些代数计算后

$$\sum_i \frac{1}{2} F_i \mathbf{c}_i c_i^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) [\mathbf{F} (D + 2) R_g T_0 + 2 (\mathbf{F} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \mathbf{F} + (R_g T - R_g T_0) (D + 2) \mathbf{F}]$$

(B5)

化简后可得

$$\sum_i \frac{1}{2} F_i \mathbf{c}_i c_i^2 = \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left[(\mathbf{F} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{u} + \left(E + \frac{p}{\rho} \right) \mathbf{u} \right]$$

(B6)

(编辑:陈 越)