

离散 Boltzmann 方程的求解: 基于有限体积法*

孙佳坤¹⁾ 林传栋^{1)2)3)†} 苏咸利¹⁾ 谭志城¹⁾ 陈亚楼¹⁾ 明平剑¹⁾

1) (中山大学中法核工程与技术学院, 珠海 519082)

2) (清华大学能源与动力工程系, 热科学与动力工程教育部重点实验室, 北京 100084)

3) (新加坡国立大学机械工程系, 新加坡 119260)

(2023 年 12 月 19 日收到; 2024 年 3 月 29 日收到修改稿)

近十年来, 离散 Boltzmann 方法在复杂非平衡流体系统领域的应用取得了显著的进展, 这种方法已逐步成为描述和预测流体系统行为的重要手段. 该方法的控制方程是一套简单统一的离散 Boltzmann 方程, 其离散格式的选取对于数值模拟的计算精度和稳定性有着直接影响. 为了提高数值模拟的可靠性, 本文引入有限体积法用于求解离散 Boltzmann 方程. 有限体积法是一种常用的数值计算方法, 具有守恒性强、精度高等特点, 可用于有效处理高速可压缩流体的数值计算问题. 本文采用 MUSCL 格式进行重构, 并引入了通量限制器以提高数值计算的稳定性. 最后, 对基于有限体积的离散 Boltzmann 方法进行了验证, 数值算例包括冲击波、Lax 激波管以及声波. 结果表明, 该方法能够准确刻画冲击波、稀疏波、声波, 以及物质界面的演化, 同时确保系统的质量、动量和能量守恒, 还可以准确测量流体系统的流体力学和热力学非平衡效应.

关键词: 离散 Boltzmann 方法, 有限体积法, 非平衡效应, 可压缩流**PACS:** 05.70.Ln, 47.11.Df, 47.70.Nd, 47.40.-x**DOI:** 10.7498/aps.73.20231984

1 引言

随着计算机科学的快速发展, 数值模拟在各类流体系统的研究中发挥着越来越重要的作用. 事实上, 这种发展趋势在计算流体动力学 (computational fluid dynamics, CFD) 的早期阶段就已经初现端倪, 当时 CFD 的发展正是始于计算机的出现, 并围绕如 Euler 方程等宏观方程的数值计算方法而不断发展^[1]. 传统的宏观方法基于连续介质假设, 将流体近似为空间上连续分布且宏观充分小的流体微团, 并且侧重于系统宏观演化过程的模拟研究. 实际上, 流体系统在演化过程中, 除了在宏观层次上表现出丰富多样的流体力学非平衡行为之外, 还在微介观层次具有与之时时伴随的诸多热力

学非平衡行为. 随着非平衡程度的增加, 仅关注近平衡模型中描述的宏观物理信息往往会表现出一定的局限性, 例如在描述非平衡流动方面的能力不足等^[2]. 与之相对, 微观层次可以准确描述系统的演化过程, 并且有效捕捉系统的演化细节. 比如, 分子动力学模拟可以实时追踪每个分子的运动轨迹并进行统计学处理, 给出宏观物理量的演化结果, 而且摆脱了局部平衡的假设, 可以弥补宏观模型在物理精度方面的不足, 但是其计算量通常会局限于纳米尺度的空间范围^[3].

作为联系宏观和微观的桥梁, 介观方法能够有效解决物理精度描述不足和数值计算效率不高之间的矛盾^[4]. 一种常用的介观方法是基于非平衡统计物理的基本方程, 即 Boltzmann 方程, 其中, 格子 Boltzmann 方法 (lattice Boltzmann method,

* 国家自然科学基金 (批准号: 51806116)、广东省基础与应用基础研究基金 (批准号: 2022A1515012116, 2024A1515010927) 和国家留学基金管理委员会 (批准号: 202306380288) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: linchd3@mail.sysu.edu.cn

LBM) 被当作是这样一种方法^[4,5]. 实际上, 根据具体应用的功能目标, LBM 可以分为两大类: 一类是在数学上用于有效求解各种偏微分方程(组); 另一类是在物理上用于复杂系统的高精度或者高效率的动理学建模. 另外, 从离散格式的角度来看, LBM 可以分为标准的 LBM 和非标准的 LBM. 在标准的 LBM 中, 时间步长、空间步长和离散速度大小绑定在一起, 即虚拟粒子在一个时间步长内只能从一个格点迁移到另外一个格点. 在非标准的 LBM 中, 时间步长、空间步长和离散速度大小解耦, 因此可以更加灵活地选取合适的离散格式, 如有限差分^[6]、有限体积^[7]、有限元^[8]等方法.

近十年发展的离散 Boltzmann 方法 (discrete Boltzmann method, DBM) 可以看作是一种非标准 LBM 的进一步发展, 其在早期又被称作 LBM 动理学模型^[9]. 在物理功能方面, DBM 不仅具有传统方法描述流体力学行为的能力, 同时继承了 Boltzmann 方程描述热力学行为的重要功能^[10-15]. 换言之, DBM 不仅在连续性极限条件下可以恢复宏观流体控制方程组, 而且还等价于描述热力学非平衡效应的粗粒化模型. 2014 年, Lin 等^[10]提出了可压缩流的极坐标 DBM, 该模型中对流项的空间离散采用修正的 Warming-Beam 格式. 2019 年, Zhang 等^[11]提出了一种基于 Shakhov 模型的 DBM 一般框架, 并采用一阶和二阶混合迎风格式处理空间偏导数. 2021 年, Ji 等^[12]针对非平衡可压缩反应流问题, 提出了一个三维多松弛时间离散 Boltzmann 方法, 并采用 WENO 格式处理空间偏导数. 2022 年, 林传栋^[13]提出了适用于超声速可压缩化学反应流的二维简化 DBM, 并使用无波动、无自由参数的耗散差分格式来处理空间偏导数. 2023 年, Lin 等^[14]针对外力场中比热比可调的可压缩系统, 建立了离散速度对称的离散 Boltzmann 方法, 并证明该模型具有更好的空间对称性和数值精度. 同年, Sun 等^[15]用 16 阶快速傅里叶变换方案来离散 DBM 中的空间偏导数, 并研究了两初始静止液滴聚并过程中的热力学非平衡效应, 详细分析了非平衡效应、总熵产生率与各种运动学和动力学物理量之间的关系.

需要说明的是, DBM 的演化方程涉及时间离散、空间离散和速度离散. 现有的 DBM 文献基本上都采用有限差分法处理空间离散. 不同于以往工作, 本文将有限体积法引入到 DBM. 对于有限体

积法, 每个控制体上的数值都对应着特定的物理量, 物理内涵清晰, 推导过程直观. 此外, 采用合适的数值格式, 有限体积法能够有效减少数值振荡和虚假振荡, 具有良好的数值稳定性, 从而确保计算结果的可靠性, 尤其是在处理具有强间断特性的流动问题时, 如激波、爆轰波等. 相较于基于有限差分法, 有限体积在处理不同几何结构的边界条件时也较为方便和灵活, 适应于各种复杂边界条件的系统. 因此, 有限体积法能够进一步拓宽 DBM 在实际应用中的适用范围. 后文的结构如下: 第 2 节简要介绍了 DBM 的基本理论; 第 3 节介绍了基于有限体积法的离散 Boltzmann 演化方程, 并引入了 MUSCL 通量限制器; 第 4 节对一些经典的可压缩流体问题进行了数值模拟, 以验证基于有限体积法的 DBM 模型的准确性; 第 5 节是结论.

2 物理模型

DBM 的演化方程如下:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla f_i = \Omega_i, \quad (1)$$

其中, t 表示时间, f_i 是离散分布函数, $\mathbf{v}_i$ 是离散速度, $i = 0, 1, 2, \dots, N$ 用于标记离散速度, N 为离散速度总数, Ω_i 是碰撞项. 本文所使用的碰撞项是由 Bhatnagar, Gross 和 Krook 于 1954 年提出的 BGK 近似^[16]:

$$\Omega_i = -\frac{1}{\tau}(f_i - f_i^{\text{eq}}), \quad (2)$$

式中的 f_i^{eq} 代表离散化的局部平衡态分布函数, 其数学表达式采用矩阵求逆的方式计算^[17].

宏观物理量如密度 ρ , 流体的速度 $\mathbf{u}$, 以及能量 E , 可以根据离散分布函数 f_i 获得:

$$\rho = \sum_i f_i, \quad (3)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_i f_i \mathbf{v}_i, \quad (4)$$

$$E = \frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 + \frac{1}{\gamma - 1} \rho T = \frac{1}{2} \sum_i f_i (v_i^2 + \eta_i^2), \quad (5)$$

其中 $v_i = |\mathbf{v}_i|$ 表示离散速度的大小; γ 表示比热比, 其表达式如下:

$$\gamma = \frac{D + I + 2}{D + I}. \quad (6)$$

由 γ 的表达式可以看出, 该 DBM 具有灵活可调的比热比.

在本文中, 离散化的局部平衡态分布函数 f_i^{eq} 满足下面 7 个矩关系:

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

$$\sum_i f_i^{\text{eq}} v_{i\alpha} = \rho u_\alpha, \quad (8)$$

$$\sum_i f_i^{\text{eq}} (v_i^2 + \eta_i^2) = \rho [(D+I)T + u^2], \quad (9)$$

$$\sum_i f_i^{\text{eq}} v_{i\alpha} v_{i\beta} = \rho (\delta_{\alpha\beta} T + u_\alpha u_\beta), \quad (10)$$

$$\sum_i f_i^{\text{eq}} (v_i^2 + \eta_i^2) v_{i\alpha} = \rho u_\alpha [(D+I+2)T + u^2], \quad (11)$$

$$\begin{aligned} & \sum_i f_i^{\text{eq}} v_{i\alpha} v_{i\beta} v_{i\chi} \\ &= \rho (u_\alpha \delta_{\beta\chi} + u_\beta \delta_{\alpha\chi} + u_\chi \delta_{\alpha\beta}) T + \rho u_\alpha u_\beta u_\chi, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} & \sum_i f_i^{\text{eq}} (v_i^2 + \eta_i^2) v_{i\alpha} v_{i\beta} \\ &= \rho \delta_{\alpha\beta} [(D+I+2)T + u^2] T \\ &+ \rho u_\alpha u_\beta [(D+I+4)T + u^2], \end{aligned} \quad (13)$$

其中 $D=2$ 表示空间维度, I 是分子振动和 (或) 旋转所对应的额外自由度, 并且 η_i 用于描述振动和 (或) 旋转能量. 前三个矩关系代表质量、动量、能量守恒定律对应的守恒矩, 后四个矩关系代表高阶矩.

通过 Chapman-Enskog 多尺度分析可以证明, 在连续极限条件下, 该 DBM 能够恢复 Navier-Stokes 方程组. 除此之外, DBM 还具有描述热力学非平衡行为的功能. 具体来说, 可以使用 $(f_i - f_i^{\text{eq}})$ 非守恒动理学矩的独立分量为基来构建相空间, 并使用该相空间来描述系统的非平衡行为特征. 为此, 引入中心速度 $\mathbf{v}_i^* = \mathbf{v}_i - \mathbf{u}$, 并引入符号 Δ^* 表示中心矩, 那么非平衡量的表达式为

$$\Delta_2^* = \sum_i (f_i - f_i^{\text{eq}}) \mathbf{v}_i^* \mathbf{v}_i^*, \quad (14)$$

$$\Delta_{3,1}^* = \sum_i (f_i - f_i^{\text{eq}}) (\mathbf{v}_i^* \cdot \mathbf{v}_i^* + \eta_i^2) \mathbf{v}_i^*, \quad (15)$$

$$\Delta_3^* = \sum_i (f_i - f_i^{\text{eq}}) \mathbf{v}_i^* \mathbf{v}_i^* \mathbf{v}_i^*, \quad (16)$$

$$\Delta_{4,2}^* = \sum_i (f_i - f_i^{\text{eq}}) (\mathbf{v}_i^* \cdot \mathbf{v}_i^* + \eta_i^2) \mathbf{v}_i^* \mathbf{v}_i^*, \quad (17)$$

其中下标“2”表示二阶张量, 下标“3”用于标记三阶张量, 下标“3, 1”表示三阶张量缩并为一阶张量, 下标“4, 2”表示四阶张量缩并为二阶张量. 这些表达式分别对应不同的物理意义, 其中 Δ_2^* 对应黏性剪切和非组织动量通量, $\Delta_{3,1}^*$ 对应非组织能量和

热通量, Δ_3^* 对应非组织能量通量, $\Delta_{4,2}^*$ 对应非组织能量通量的通量.

另外, 本文使用的离散速度模型是 D2V16, 即二维十六速度模型. 图 1 描绘了离散速度与空间离散单元的示意图. 离散速度分为 4 组, 每组速度大小相同且可以调节, 但方向不同, 具体配置如下:

$$\mathbf{v}_i = \begin{cases} \text{cyc} : v_a(\pm 1, 0), & 1 \leq i \leq 4, \\ v_b(\pm 1, \pm 1), & 5 \leq i \leq 8, \\ \text{cyc} : v_c(\pm 1, 0), & 9 \leq i \leq 12, \\ v_d(\pm 1, \pm 1), & 13 \leq i \leq 16. \end{cases} \quad (18)$$

同时, 可调节参数 η_i 的配置如下:

$$\eta_i = \begin{cases} \eta_a, & 1 \leq i \leq 4, \\ \eta_b, & 5 \leq i \leq 8, \\ \eta_c, & 9 \leq i \leq 12, \\ \eta_d, & 13 \leq i \leq 16. \end{cases} \quad (19)$$

在 (18) 式和 (19) 式中, $v_a, v_b, v_c, v_d, \eta_a, \eta_b, \eta_c, \eta_d$ 为可调参数, 即通过调整这些参数的值优化模型, 确保模型具有较好的数值稳定性和精确度.

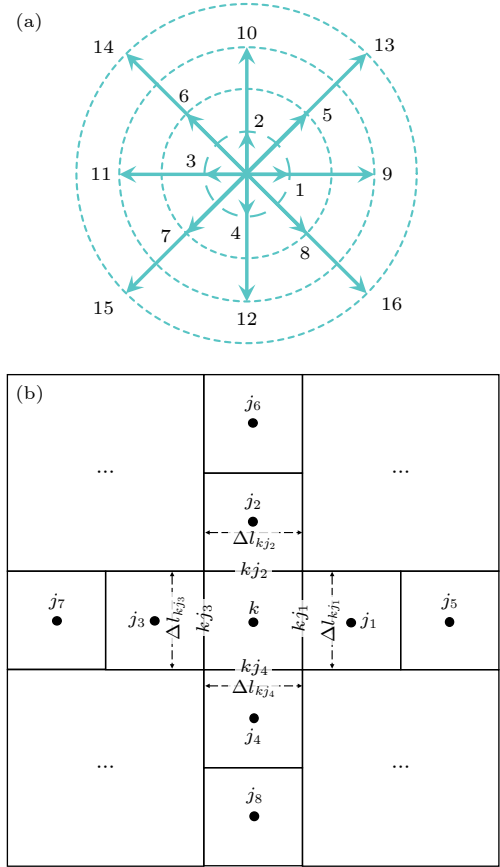


图 1 离散速度 (a) 与控制单元的示意图 (b)

Fig. 1. Sketches of discrete velocities (a) and control volumes (b).

3 有限体积法

本节介绍有限体积法在 DBM 中的具体应用. 对于有限体积法, 首先需要确定物理空间单元的编号以及它们之间的相邻关系. 由于计算区域是二维区域, 所以本文提到的控制体或控制单元的形状都是二维平面. 如图 1 所示, 整个流域被离散成相互不重叠的矩形单元, 其中单元 k 被认为是主单元, 而与单元 k 相邻的 j_1, j_2, j_3, j_4 四个单元被认为是邻单元. 物理量被存储在单元的几何中心处, 连接单元 k 与 j 的边界面被称为 kj 面.

确定好计算网格后, 下一步是在每个单元上对离散 Boltzmann 方程进行积分运算, 以实现方程的离散化和数值求解. 在积分的过程中, 由 S_k 表示第 k 个二维控制单元, 所以离散 Boltzmann 方程在控制单元 S_k 上进行积分可得:

$$\iint_{S_k} \frac{\partial f_{i,k}}{\partial t} dS + \iint_{S_k} \mathbf{v}_i \cdot \nabla f_{i,k} dS = \iint_{S_k} \Omega_{i,k} dS, \quad (20)$$

其中 $f_{i,k}$ 表示第 k 个控制单元的第 i 个离散速度分布函数, 碰撞项 $\Omega_{i,k}$ 同理. 由此可以看到 (20) 式包含三部分, 第一部分为时间项对空间的积分, 第二部分为对流项对空间的积分, 第三部分为碰撞项对空间的积分. 下文将讨论这三部分的处理方式.

3.1 碰撞项在控制体上的积分

对计算区域进行空间离散化的时候, 为了获得精确的数值结果, 需要让控制体单元足够小. 物理量在控制体单元内的空间变化非常小, 那么可以被认为是控制体上基本上是均匀分布的. 因此, 碰撞项的积分表达式可进行如下的推导:

$$\begin{aligned} \iint_{S_k} \Omega_{i,k} dS &= \iint_{S_k} -\frac{1}{\tau} (f_{i,k} - f_{i,k}^{\text{eq}}) dS \\ &= -\frac{1}{\tau} (f_{i,k} - f_{i,k}^{\text{eq}}) A_k, \end{aligned} \quad (21)$$

其中 $A_k = \iint_{S_k} dS$ 表示控制单元的面积. $f_{i,k}$ 与 $f_{i,k}^{\text{eq}}$ 分别代表 k 控制体中离散速度分布函数和平衡态离散速度分布函数的平均值 (本文控制单元中的物理量及其平均量采用相同的符号表示).

3.2 对流项在控制体上的积分

现在考虑对流项在控制体上的积分. 因为该部分在数学上为二重积分, 所以利用高斯定理可以将

对平面控制单元 S_k 的面积分转化为对闭合边界 ∂S_k 的环路积分:

$$\iint_{S_k} \mathbf{v}_i \cdot \nabla f_{i,k} dS = \oint_{\partial S_k} \hat{F}_{i,kj} d\mathbf{l}, \quad (22)$$

其中, $\hat{F}_{i,kj}$ 是 $f_{i,k}$ 穿过边界的微观通量, 其表达式为

$$\hat{F}_{i,kj} = (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n}) f_{i,k}, \quad (23)$$

其中, $\mathbf{n}$ 表示向外垂直于单元边界的单位法向量.

针对本文所使用的计算网格, 可以将闭合边界 ∂S_k 的环路积分进一步处理为 4 条边界上的通量之和:

$$\begin{aligned} \oint_{\partial S_k} \hat{F}_{i,kj} d\mathbf{l} &= \sum_{kj_n=1}^4 \hat{F}_{i,kj_n} \Delta l_{kj_n} \\ &= \hat{F}_{i,kj_1} \Delta l_{kj_1} + \hat{F}_{i,kj_2} \Delta l_{kj_2} \\ &\quad + \hat{F}_{i,kj_3} \Delta l_{kj_3} + \hat{F}_{i,kj_4} \Delta l_{kj_4}, \end{aligned} \quad (24)$$

其中 Δl_{kj_n} 表示控制单元边界的长度.

下面阐述界面微观通量的重构方法. 以 x 方向的通量 $\hat{F}_{i,kj_1}$ 和 $\hat{F}_{i,kj_3}$ 为例, 根据离散速度 $\mathbf{v}_i$ 的大小, 可以将 $\hat{F}_{i,kj_1}$ 和 $\hat{F}_{i,kj_3}$ 写成下列形式:

$$\hat{F}_{i,kj_1} = \begin{cases} (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n}) f_{i,kj_1}^L, & \mathbf{v}_i \geq 0, \\ (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n}) f_{i,kj_1}^R, & \mathbf{v}_i < 0. \end{cases} \quad (25)$$

$$\hat{F}_{i,kj_3} = \begin{cases} (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n}) f_{i,kj_3}^L, & \mathbf{v}_i \geq 0, \\ (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n}) f_{i,kj_3}^R, & \mathbf{v}_i < 0. \end{cases} \quad (26)$$

在满足二阶精度要求的前提下, 用边界面 kj_1 和 kj_3 中心点处的值来代替 kj_1 和 kj_3 面上的均值. 考虑到在计算单元交界处通量时, 可压缩流体可能存在不连续性, 需要利用交界面附近的控制单元来重构出不同的值 f_{i,kj_1}^L , f_{i,kj_1}^R 以及 f_{i,kj_3}^L , f_{i,kj_3}^R .

本文采用二阶精度的单调迎风中心守恒律 (monotonic upwind scheme for conservation laws, MUSCL) 格式^[18]来进行重构. MUSCL 格式在处理间断和激波等相关问题时表现出明显的优势. 具体来说, f_{i,kj_1}^L , f_{i,kj_1}^R 以及 f_{i,kj_3}^L , f_{i,kj_3}^R 分别被确定为以下形式:

$$\begin{aligned} f_{i,kj_1}^L &= f_{i,k} + \frac{1}{4} [(1-b) \min \text{mod}(\Delta^-, \Delta^+) \\ &\quad + (1+b) \min \text{mod}(\Delta^-, \Delta^+)]_{k_x}, \end{aligned} \quad (27)$$

$$\begin{aligned} f_{i,kj_1}^R &= f_{i,j_1} - \frac{1}{4} [(1-b) \min \text{mod}(\Delta^-, \Delta^+) \\ &\quad + (1+b) \min \text{mod}(\Delta^-, \Delta^+)]_{j_1}, \end{aligned} \quad (28)$$

$$f_{i,kj_3}^L = f_{i,j_3} + \frac{1}{4}[(1-b) \min \text{mod}(\Delta^-, \Delta^+) + (1+b) \min \text{mod}(\Delta^-, \Delta^+)]_{j_3}, \quad (29)$$

$$f_{i,kj_3}^R = f_{i,k} - \frac{1}{4}[(1-b) \min \text{mod}(\Delta^-, \Delta^+) + (1+b) \min \text{mod}(\Delta^-, \Delta^+)]_{k_x}, \quad (30)$$

其中参数取值为 $b = \frac{1}{3}$; 函数 $\min \text{mod}(\Delta^-, \Delta^+)$ 为限制器, 其定义如下:

$$\min \text{mod}(\Delta^-, \Delta^+) = \begin{cases} \min(\Delta^-, \Delta^+), & \text{当 } \Delta^- > 0 \text{ 且 } \Delta^+ > 0 \text{ 时,} \\ \max(\Delta^-, \Delta^+), & \text{当 } \Delta^- < 0 \text{ 且 } \Delta^+ < 0 \text{ 时,} \\ 0, & \text{其他,} \end{cases} \quad (31)$$

式中, $(\Delta^-)_{k_x} = f_{i,k} - f_{i,j_3}$, $(\Delta^+)_{k_x} = f_{i,j_1} - f_{i,k}$; $(\Delta^-)_{j_1} = f_{i,j_1} - f_{i,k}$, $(\Delta^+)_{j_1} = f_{i,j_5} - f_{i,j_1}$; $(\Delta^-)_{j_3} = f_{i,j_3} - f_{i,j_7}$, $(\Delta^+)_{j_3} = f_{i,k} - f_{i,j_3}$. 需要说明的是, 限制器的作用是为了限制数值解的变化率, 即当发现数值解的变化率超过一定阈值时, 就会对其进行调整以抑制数值振荡.

3.3 时间项在控制体上的积分

如前所述, 有限体积法考虑的是在微小控制体内的平均物理量. 因此, 类似于 (21) 式的推导过程, 离散速度分布函数的时间偏微分具有以下关系:

$$\iint_{S_k} \frac{\partial f_{i,k}}{\partial t} dS = \frac{\partial f_{i,k}}{\partial t} \iint_{S_k} dS = A_k \frac{\partial f_{i,k}}{\partial t}. \quad (32)$$

将 (21) 式、(24) 式与 (32) 式代入到 (20) 式, 整理后可得到半离散形式的离散 Boltzmann-BGK 方程, 即仅时间项为偏导数的形式:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{i,k}}{\partial t} &= L(f_{i,k}) \\ &= -\frac{1}{A_k} \sum_{kj_n=1}^4 \hat{F}_{i,kj_n} \Delta l_{kj_n} - \frac{1}{\tau} (f_{i,k} - f_{i,k}^{\text{eq}}), \end{aligned} \quad (33)$$

其中, 引入符号 $L(f_{i,k})$ 来表示离散后的对流项与碰撞项之和. 最后, 使用二阶精度的龙格-库塔格式^[19]处理上述方程的时间偏微分:

$$f_{i,k}^{(0)} = f_{i,k}^t, \quad (34)$$

$$f_{i,k}^{(1)} = f_{i,k}^{(0)} + \Delta t L(f_{i,k}^{(0)}), \quad (35)$$

$$f_{i,k}^{(2)} = \frac{1}{2} f_{i,k}^{(0)} + \frac{1}{2} (f_{i,k}^{(1)} + \Delta t L(f_{i,k}^{(1)})), \quad (36)$$

$$f_{i,k}^{t+\Delta t} = f_{i,k}^{(2)}. \quad (37)$$

在 (34)—(37) 式中, 上角标 t 和 $t + \Delta t$ 代表时刻, Δt 代表时间步长, 上角标 (0), (1), (2) 代表二阶龙格-库塔格式中的中间变量.

4 模拟验证

本节将对基于有限体积法离散的 DBM 进行数值验证. 为此考虑 3 个典型算例: 冲击波、Lax 激波管和声波.

4.1 冲击波

现在考虑沿 x 方向向前传播的一维稳定冲击波, 其马赫数 $Ma = 2.0$, 比热比 $\gamma = 2.0$, 初始物理场设置为

$$\begin{cases} (\rho, u_x, u_y, T)_L = (2.66667, 1.47902, 0, 1.68750), \\ (\rho, u_x, u_y, T)_R = (1, 0, 0, 1), \end{cases} \quad (38)$$

其中下标 L 表示左侧 $0 \leq x \leq 0.01$ 的区域, R 表示右侧 $0.01 \leq x \leq 1.0$ 的区域. 时间步长设置为 $\Delta t = 5.0 \times 10^{-6}$, 松弛时间 $\tau = 5.0 \times 10^{-4}$, 离散参数为 $(v_a, v_b, v_c, v_d) = (3.3, 3.0, 2.5, 1.0)$ 和 $(\eta_a, \eta_b, \eta_c, \eta_d) = (3.0, 0, 0, 0)$. 另外, 在 x 方向上采用流入/流出边界条件, 在 y 方向上采用周期性边界条件.

首先来验证程序的网格无关性, 为此建立了 4 套网格进行分析, 在 x 方向选择的网格数 N_x 分别为 1000, 2000, 4000, 8000, 在 y 方向选择的网格数 N_y 均为 1, 图 2(a) 对比了 4 套网格下波阵面附近压强的计算结果, 其中黑色实线代表精确解, 其他颜色和线型代表不同网格数下的数值解. 可以看出随着网格数的增加, 计算结果逐渐收敛于精确解, 值得注意的是当 $N_x = 8000$ 时, 在数值结果与精确解偏离最大的位置处, 两者的相对误差仅为 0.26082%, 因此该 DBM 的网格无关性得到了有效验证.

为了定量分析当前模型在空间上精度, 图 2(b) 给出了相对误差与空间步长的关系, 其中相对误差的计算公式为

$$\text{Error}(\varphi) = \sqrt{\frac{\sum_{(x,y)} |\varphi_e(x, y, t) - \varphi_n(x, y, t)|^2}{\sum_{(x,y)} |\varphi_e(x, y, t)|^2}}, \quad (39)$$

式中 φ_e 和 φ_n 分别表示变量 φ 的精确解和数值解.

图 2(b) 中正方形代表 DBM 的计算结果, 直线代表拟合函数 $\ln(\text{Error}) = 1.99342\ln(\Delta x) + 9.99681$. 显然, 拟合函数的斜率近似等于 2.0, 这表明当前模型在空间上具有二阶收敛速率.

图 3 显示了在 $t = 0.375$ 时刻冲击波附近的物理量. 在冲击波波后稳定区域处, 密度、水平速度、温度和压强的 DBM 模拟结果分别为 $\rho = 2.66704$, $u_x = 1.47840$, $T = 1.68778$ 和 $p = 4.50137$, 与 Riemann 解的相对误差分别为 0.01387%, 0.04192%,

0.01659% 和 0.03044%. 另外, DBM 模拟的波速为 $u_s = 2.36286$, 而理论波速为 2.36643, 相对误差为 0.15086%. 可以看出本模型的结果与 Riemann 解符合良好, 说明其可以有效地捕捉冲击波.

需要说明的是, 能够描述系统的非平衡状态并且提取非平衡信息, 这是 DBM 的核心功能, 同时也是 DBM 超越传统流体模型的一个优点. 图 4 展示的是在冲击波演化过程中, 在 $t = 0.375$ 时刻非平衡量 $\Delta_{2,xx}^*$ 的精确解^[20]与数值解的对比, 其中正方形

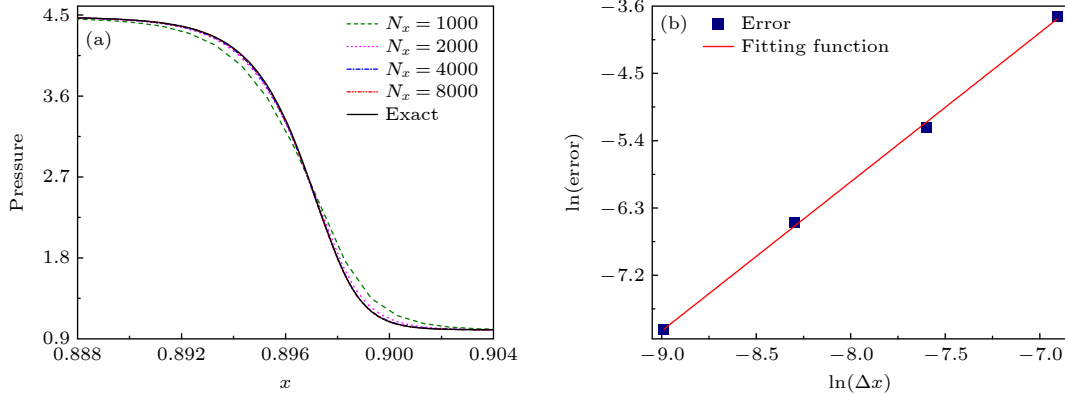


图 2 网格无关性验证 (a) 不同网格数下冲击波波阵面附近的压强分布; (b) 不同空间步长下的相对误差

Fig. 2. Grid-independence validation: (a) Pressure distribution in the vicinity of the shock wave for different grid numbers; (b) relative errors at different spatial steps.

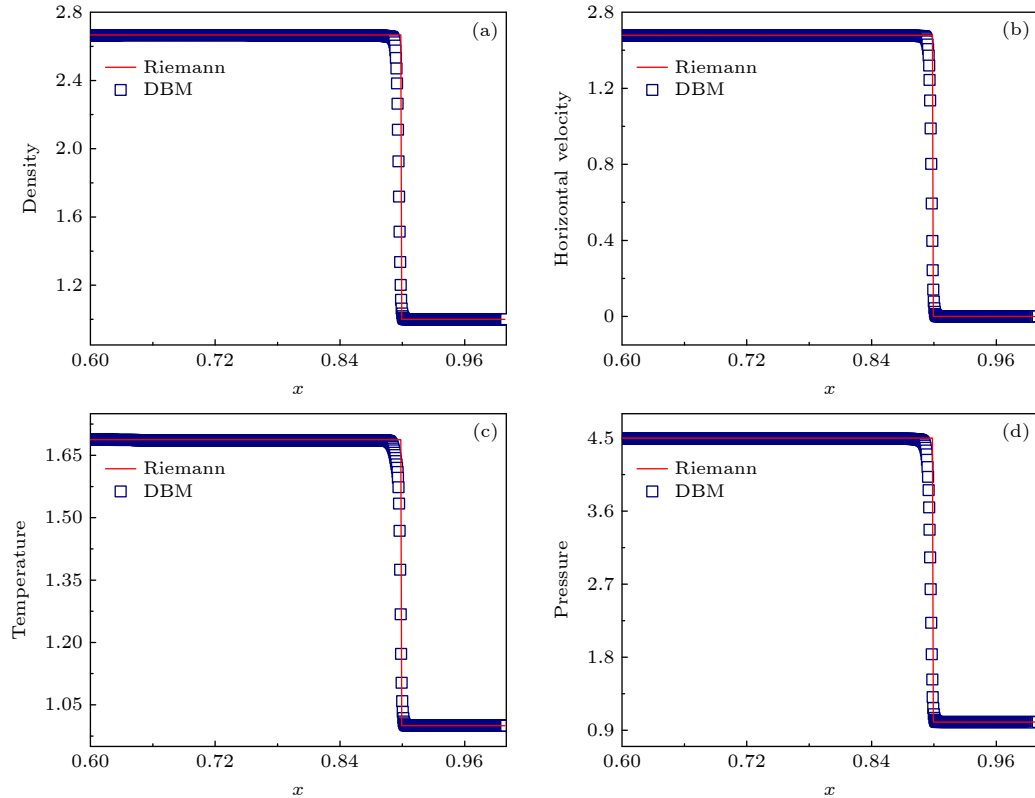


图 3 冲击波周围的物理量, $t = 0.375$ (a) 密度; (b) 水平速度; (c) 温度; (d) 压强

Fig. 3. Physical quantities around the shock wave, $t = 0.375$: (a) Density; (b) horizontal velocity; (c) temperature; (d) pressure.

代表计算的结果, 实线代表精确解. 可以看出, 在 $x = 0.9$ 附近系统明显偏离平衡态, 呈现出先上升再下降的趋势. 偏离平衡态最大位置处的 DBM 模拟结果为 0.70084, 而精确解为 0.70773, 相对误差达到 0.97354%, 本文模拟的结果与精确解高度一致, 这说明该模型可以准确地描述系统的非平衡行为.

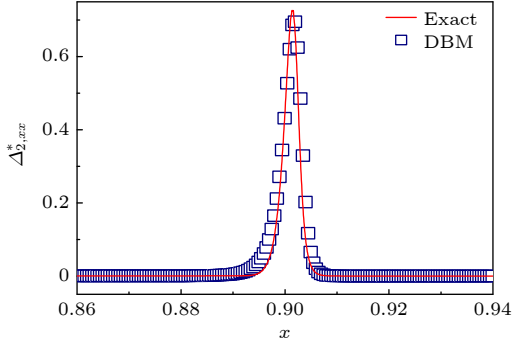


图 4 冲击波周围的非平衡量, $t = 0.375$

Fig. 4. Nonequilibrium quantities around the shock wave, $t = 0.375$.

4.2 Lax 激波管

接下来使用 Lax 激波管来进一步验证本模型能够描述可压缩流体系统的能力. Lax 激波管的初始参数设置为

$$\begin{cases} (\rho, u_x, u_y, T)_L = (0.445, 0.689, 0, 7.928), \\ (\rho, u_x, u_y, T)_R = (0.500, 0, 0, 1.142), \end{cases} \quad (40)$$

其中, 下标 L 和 R 分别表示 $0 \leq x \leq 0.5$ 和 $0.5 \leq x \leq 1.0$ 的计算区域. 本算例选择的计算网格为 $N_x \times N_y = 1000 \times 1$, 空间步长为 $\Delta x = \Delta y = 10^{-3}$, 时间步长为 $\Delta t = 2 \times 10^{-6}$, 比热比 $\gamma = 1.4$, 离散参数为 $(v_a, v_b, v_c, v_d) = (5.5, 5.0, 1.5, 1.5)$, $(\eta_a, \eta_b, \eta_c, \eta_d) = (0, 0, 0, 5.3)$. 在 x 方向上采用流入/流出边界条件, 在 y 方向上采用周期性边界条件.

图 5 显示的是 Lax 激波管在 $t = 0.15$ 时的数值解与 Riemann 解的对比. 从图 5 的子图中可以看出: 在左侧区域存在稀疏波, 该区域的波速较低, 并且随着时间的演化各物理量的梯度逐渐减小; 在中间区域存在接触间断, 在接触间断两侧, 密度和温度具有明显差异, 而压强和速度呈现均匀分布; 在右侧区域, 冲击波向右传播, 物理量 (包括密度、水平速度、温度和压强) 的梯度剧烈变化, 并且在波后的流速和密度较大. 在上述演化过程中, DBM 与 Riemann 解具有相当高的匹配度, 说明 DBM 能够精确地捕捉稀疏波、物质界面和冲击波的空间分布.

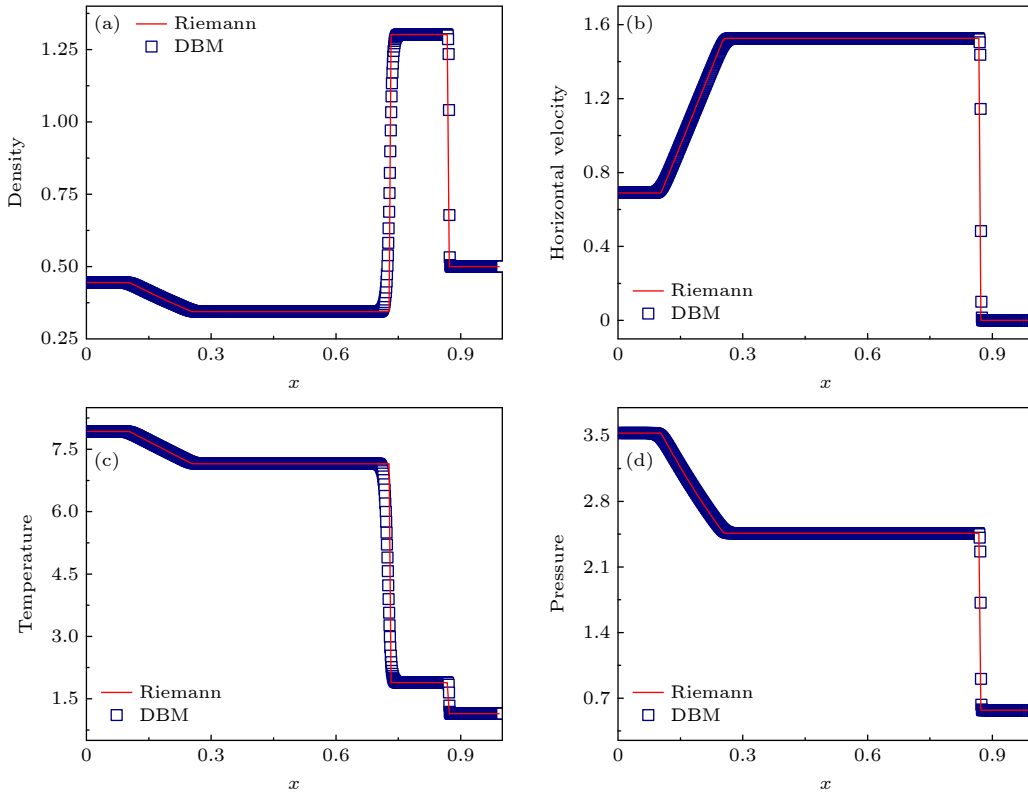


图 5 Lax 激波管中的物理量, $t = 0.15$ (a) 密度; (b) 水平速度; (c) 温度; (d) 压强

Fig. 5. Physical quantities in the Lax shock tube, $t = 0.15$: (a) Density; (b) horizontal velocity; (c) temperature; (d) pressure.

4.3 声波

本节讨论该模型的声波捕获能力. 设置一块正方形计算区域, 初始物理场设置为 $(\rho, u_x, u_y, P) = (1.0, 0, 0, 1.0)$. 在计算域中心处施加一个微弱的扰动 $(\rho, P) = (1.01, 1.01)$ 后, 声波会向四周进行传播, 传播速度为声速. 声速是比热比和温度的函数, 其计算公式为 $v_s = (\gamma T)^{1/2}$. 本算例中, 计算网格数为 $N_x \times N_y = 301 \times 301$, 网格精度设为 $\Delta x = \Delta y = 10^{-3}$, 时间步长为 $\Delta t = 10^{-4}$, 计算区域的边界施加镜面反射边界条件, 选择的离散参数为 $(v_a, v_b, v_c, v_d) = (1.4, 1.1, 1.1, 1.0)$, $(\eta_a, \eta_b, \eta_c, \eta_d) = (3.0, 0, 0, 0)$.

图 6 展示了 $t = 0, 0.05, 0.125, 0.15, 0.175, 0.2$ 时刻, 比热比 $\gamma = 1.4$ 以及温度 $T = 1.0$ 的压强演化过程. 如图所示, 该区域为一个温度均匀分布的计算区域, 并在其正中央设置了一个初始扰动.

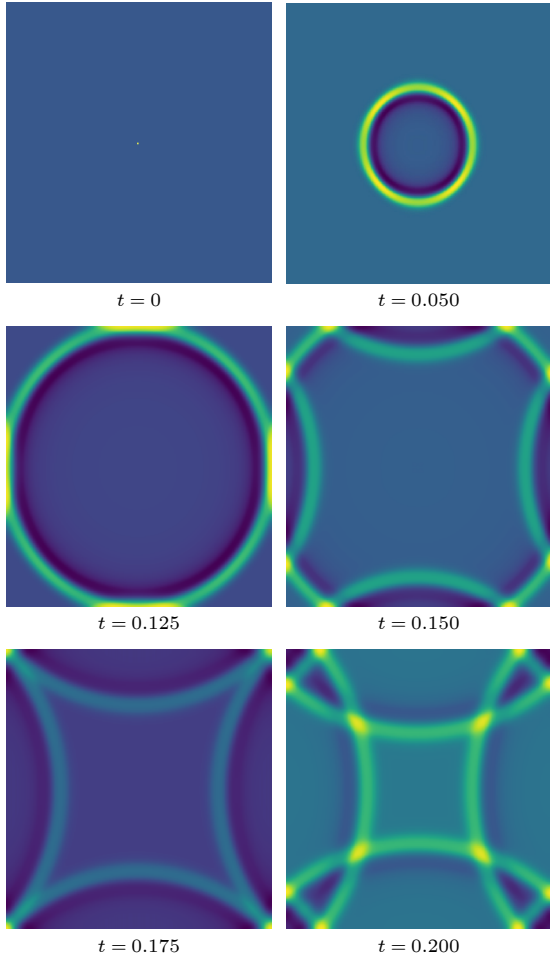


图 6 在声波传播过程中不同时刻的压强分布图, $\gamma = 1.4$, $T = 1.0$, $t = 0, 0.050, 0.125, 0.150, 0.175$ 和 0.200
Fig. 6. Pressure contours in the evolution of a sound wave at time instants $t = 0, 0.050, 0.125, 0.150, 0.175$, and 0.200 , respectively, $\gamma = 1.4$, $T = 1.0$.

随后, 该扰动引发了一个圆形声波并以声速向外扩散. 声波在传播过程中, 其形态保持圆形, 呈现良好的对称性. 在 $t = 0.125$ 时刻, 声波到达了计算区域的边界并被反射. 在后续的时刻, 反射后的声波与反射前的声波发生了叠加. 可以看出, DBM 能够有效描述声波的传播过程.

另外, 为了验证有限体积 DBM 的守恒性, 图 7 展示了在声波演化过程中平均密度 $\bar{\rho}$, x 方向平均动量 $\bar{J}_x$, y 方向平均动量 $\bar{J}_y$ 和平均能量 $\bar{E}$ 随时间的变化情况. 不同符号代表 DBM 对不同物理量的模拟结果, 实线代表对应的精确解: 平均密度 $\bar{\rho} = 1$, 平均动量 $(\bar{J}_x, \bar{J}_y) = (0, 0)$, 平均能量 $\bar{E} = 2.5$. 从图 7 可以清晰地观察到, 数值结果与精确解始终保持一致. 这充分说明有限体积 DBM 具有良好的守恒性特征.

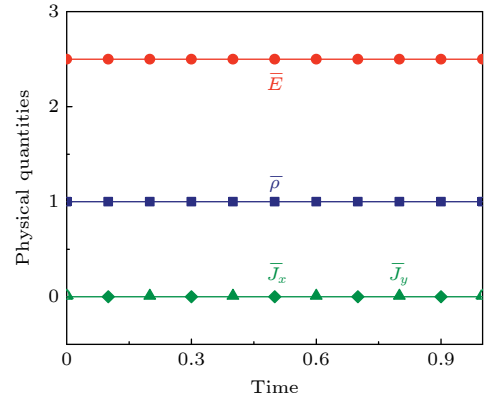


图 7 质量、动量和能量的守恒性验证: 正方形、菱形、三角形和圆形分别表示平均密度、 x 方向平均动量、 y 方向平均动量和平均能量. 实线代表对应的精确解

Fig. 7. Verification of the conservation of mass, momentum and energy. Squares, diamonds, triangles and circles represent the average values of density, momentum in the x direction, momentum in the y direction and energy, respectively. The solid lines denotes the corresponding exact solutions.

下面进一步验证在不同的比热比以及温度下, 该模型对声波的捕捉能力. 图 8(a) 展示了当比热比 $\gamma = 1.4$ 时, 在不同温度下声波传播的距离与时间的关系. 图 8(b) 是当温度 $T = 1.0$ 时, 在两个不同的比热比下的结果. 从图 8 可以明显看出, 随着时间的演进, 声波的传播距离呈线性增长, 拟合直线的斜率与理论值 $v_s = (\gamma T)^{1/2}$ 的相对误差均小于 0.01% , 模拟的结果与理论值 $x = v_s t$ 符合得比较好, 从而证实了本文提到的模型在不同温度和比热比下都具有捕获声波的能力.

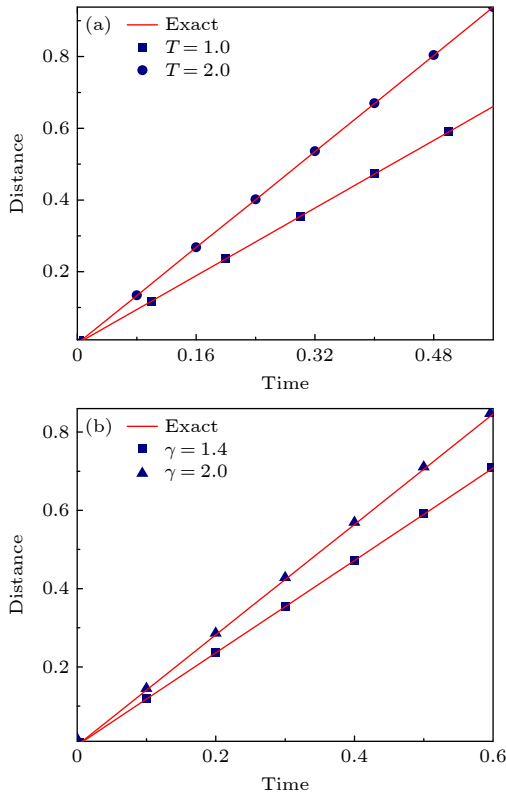


图 8 声波的传播 (a) $\gamma = 1.4$, 不同温度; (b) $T = 1.0$, 不同比热比

Fig. 8. Propagation of the sound wave: (a) $\gamma = 1.4$ with various specific heat ratios; (b) $T = 1.0$ with various temperatures.

5 结 论

本文采用有限体积法对离散 Boltzmann-BGK 方程进行数值求解, 该方法具有守恒性强和精度高等优点. 具体来说, 首先在控制体上分别对该方程的碰撞项、对流项以及时间项进行积分, 得到半离散形式的离散 Boltzmann-BGK 方程. 其中, 利用高斯定理, 对流项可以转换为微观通量的形式. 为了有效处理对流项, 本文采用二阶精度的 MUSCL 格式进行重构, 并引入了通量限制器以提高数值计算的稳定性. 然后, 使用二阶精度的龙格-库塔格式处理时间偏微分, 最终得到用于程序迭代运算的 DBM 演化方程.

为了对有限体积 DBM 进行数值验证, 本文使用了 3 个经典算例: 稳定冲击波、Lax 激波管和声波的传播. 首先, 通过冲击波算例对程序的网格无关性进行了验证, 验证了该方法能够准确测量可压

缩流体系统的流体力学和热力学非平衡效应; 然后, 通过 Lax 激波管算例, 验证了该方法能够准确描述冲击波、稀疏波以及物质界面的演化过程; 最后, 通过二维声波的传播算例, 验证了该方法能够在不同比热比和温度下对声波进行有效捕捉, 并且具有良好的守恒性特征.

参考文献

- [1] Yan C 2006 *Computational Fluid Dynamics Methods and Applications* (Beijing: Beihang University Press) pp1–14 (in Chinese) [阎超 2006 计算流体力学方法及应用 (北京: 北京航空航天大学出版社) 第 1–14 页]
- [2] Xu A G, Zhang G C, Gan Y B, Chen F, Yu X J 2012 *Front. Phys.* **7** 582
- [3] Leach A R 2001 *Molecular Modelling: Principles and Applications* (London: Pearson education) pp7–53
- [4] Guo Z L, Zheng C G 2009 *Theory and Applications of Lattice Boltzmann Method* (Beijing: Science Press) pp1–12 (in Chinese) [郭照立, 郑楚光 2009 格子 Boltzmann 方法的原理及应用 (北京: 科学出版社) 第 1–12 页]
- [5] He Y L, Wang Y, Li Q 2009 *Lattice Boltzmann Method: Theory and Applications* (Beijing: Science Press) pp1–7 (in Chinese) [何雅玲, 王勇, 李庆 2009 格子 Boltzmann 方法的理论及应用 (北京: 科学出版社) 第 1–7 页]
- [6] Zhang H X, Shen M Y 2003 *Computational Fluid Dynamics: Fundamentals and Applications of Finite Difference Methods* (Beijing: National Defense Industry Press) pp1–230 (in Chinese) [张涵信, 沈孟育 2003 计算流体力学: 差分方法的原理和应用 (北京: 国防工业出版社) 第 1–230 页]
- [7] Darwish M, Moukalled F 2016 *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics: an Advanced Introduction with OpenFOAM and Matlab* (Berlin: Springer) pp103–207
- [8] Zhang B Z, Yin J A, Zhang H J 2003 *Numerical Methods in Fluid Dynamics* (Beijing: China Machine Press) pp1–53 (in Chinese) [章本照, 印建安, 张宏基 2003 流体力学数值方法 (北京: 机械工业出版社) 第 1–53 页]
- [9] Xu A G, Zhang Y D 2022 *Complex Media Kinetics* (Beijing: Science Press) pp1–112 (in Chinese) [许爱国, 张玉东 2022 复杂介质动力学 (北京: 科学出版社) 第 1–112 页]
- [10] Lin C D, Xu A G, Zhang G C, Li Y, Succi S 2014 *Phys. Rev. E* **89** 013307
- [11] Zhang Y D, Xu A G, Zhang G C, Chen Z H, Wang P 2019 *Comput. Phys. Commun.* **238** 50
- [12] Ji Y, Lin C D, Luo K H 2021 *AIP Adv.* **11** 045217
- [13] Lin C D 2022 *Acta Aerodyn. Sin.* **40** 98 (in Chinese) [林传栋 2022 空气动力学学报 **40** 98]
- [14] Lin C D, Sun X P, Su X L, Lai H L, Fang X 2023 *Chin. Phys. B* **32** 110503
- [15] Sun G L, Gan Y B, Xu A G, Shi Q F 2023 arXiv: 2311.06546 [physics.flu-dyn]
- [16] Bhatnagar P L, Gross E P, Krook M 1954 *Phys. Rev.* **94** 511
- [17] Lin C D, Luo K H 2019 *Phys. Rev. E* **99** 012142
- [18] Van Leer B 1979 *J. Comput. Phys.* **32** 101
- [19] Gottlieb S, Shu C W 1998 *Math. Comput.* **67** 73
- [20] Lin C D, Luo K H, Xu A G, Gan Y B, Lai H L 2021 *Phys. Rev. E* **103** 013305

Solution of the discrete Boltzmann equation: Based on the finite volume method*

Sun Jia-Kun¹⁾ Lin Chuan-Dong^{1)2)3)†} Su Xian-Li¹⁾

Tan Zhi-Cheng¹⁾ Chen Ya-Lou¹⁾ Ming Ping-Jian¹⁾

1) (*Sino-French Institute of Nuclear Engineering and Technology, Sun Yat-sen University, Zhuhai 519082, China*)

2) (*Key Laboratory for Thermal Science and Power Engineering of Ministry of Education,
Department of Energy and Power Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China*)

3) (*Department of Mechanical Engineering, National University of Singapore, Singapore 119260, Singapore*)

(Received 19 December 2023; revised manuscript received 29 March 2024)

Abstract

Mesoscopic methods serve as a pivotal link between the macroscopic and microscopic scales, offering a potent solution to the challenge of balancing physical accuracy with computational efficiency. Over the past decade, significant progress has been made in the application of the discrete Boltzmann method (DBM), which is a mesoscopic method based on a fundamental equation of nonequilibrium statistical physics (i.e., the Boltzmann equation), in the field of nonequilibrium fluid systems. The DBM has gradually become an important tool for describing and predicting the behavior of complex fluid systems. The governing equations comprise a set of straightforward and unified discrete Boltzmann equations, and the choice of their discrete format significantly influences the computational accuracy and stability of numerical simulations. In a bid to bolster the reliability of these simulations, this paper utilizes the finite volume method as a solution for handling the discrete Boltzmann equations. The finite volume method stands out as a widely employed numerical computation technique, known for its robust conservation properties and high level of accuracy. It excels notably in tackling numerical computations associated with high-speed compressible fluids. For the finite volume method, the value of each control volume corresponds to a specific physical quantity, which makes the physical connotation clear and the derivation process intuitive. Moreover, through the adoption of suitable numerical formats, the finite volume method can effectively minimize numerical oscillations and exhibit strong numerical stability, thus ensuring the reliability of computational results. Particularly, the MUSCL format where a flux limiter is introduced to improve the numerical robustness is adopted for the reconstruction in this paper. Ultimately, the DBM utilizing the finite volume method is rigorously validated to assess its proficiency in addressing flow issues characterized by pronounced discontinuities. The numerical experiments encompass scenarios involving shock waves, Lax shock tubes, and acoustic waves. The results demonstrate the method's precise depiction of shock wave evolution, rarefaction waves, acoustic phenomena, and material interfaces. Furthermore, it ensures the conservation of mass, momentum, and energy within the system, as well as accurately measures the hydrodynamic and thermodynamic nonequilibrium effects of the fluid system. Compared with the finite difference method, the finite volume method is also more convenient and flexible in dealing with boundary conditions of different geometries, and can be adapted to a variety of systems with complex boundary conditions. Consequently, the finite volume method further broadens the scope of DBM in practical applications.

Keywords: discrete Boltzmann method, finite volume method, nonequilibrium effect, compressible flow

PACS: 05.70.Ln, 47.11.Df, 47.70.Nd, 47.40.-x

DOI: [10.7498/aps.73.20231984](https://doi.org/10.7498/aps.73.20231984)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51806116), the Guangdong Basic and Applied Basic Research Foundation, China (Grant Nos. 2022A1515012116, 2024A1515010927), and the China Scholarship Council (Grant No. 202306380288).

† Corresponding author. E-mail: linchd3@mail.sysu.edu.cn



离散Boltzmann方程的求解：基于有限体积法

孙佳坤 林传栋 苏咸利 谭志城 陈亚楼 明平剑

Solution of the discrete Boltzmann equation: Based on the finite volume method

Sun Jia-Kun Lin Chuan-Dong Su Xian-Li Tan Zhi-Cheng Chen Ya-Lou Ming Ping-Jian

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 110504 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20231984

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231984>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

一种新的可计算可压缩流动的预处理方法

A new preconditioning algorithm for computable compressible flow

物理学报. 2022, 71(12): 124701 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220102>

海洋可控源三维电磁响应显式灵敏度矩阵的快速算法

An efficient algorithm of three-dimensional explicit electromagnetic sensitivity matrix in marine controlled source electromagnetic measurements

物理学报. 2021, 70(6): 069101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201282>

有限线法及其在流固域间耦合传热中的应用

Finite line method and its application in coupled heat transfer between fluid-solid domains

物理学报. 2022, 71(19): 190201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220833>

非规则形状介质内辐射-导热耦合传热的间断有限元求解

Discontinuous finite element solutions for coupled radiation-conduction heat transfer in irregular media

物理学报. 2020, 69(3): 034401 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191185>

基于有限差分的部分饱和双重孔隙介质弹性波模拟与分析

Simulation and analysis of elastic waves in partially saturated double-porosity media based on finite difference method

物理学报. 2024, 73(10): 100201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240227>

注入光有限相干性对衰荡腔测试方法的影响及求解衰荡时间的强度积分法

Influence of finite coherence of injected light on ring-down cavity measurement method and intensity integral method for ring-down time determination

物理学报. 2023, 72(18): 184205 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230448>