

一维对流扩散方程的格子 Boltzmann方法*

A Lattice Boltzmann Method for One Dimension Convection-Diffusion Equation

刘慕仁 何云 陈若航 孔令江
Liu Muren He Yun Chen Ruohang Kong Lingjiang

(广西师范大学物理系 桂林市育才路 3号 541004)

(Dept. of Physics, Guangxi Normal Univ., 3 Yucailu, Guilin, Guangxi, 541004, China)

摘要 给出一维对流扩散方程的格子 Boltzmann方法, 并确定方法中的粘滞系数与对流系数的关系, 计算机模拟表明理论结果是正确的.

关键词 对流扩散方程 格子 Boltzmann方法 计算机模拟

中图分类号 O 241

Abstract A lattice Boltzmann Method for one dimension convection-diffusion equation is presented. The relationship between the convection coefficient and the diffusion coefficient in the Lattice Boltzmann Method (LBM) are determined. The theoretical results are demonstrated by computer simulation.

Key words convection-diffusion equation, lattice Boltzmann method, computer simulation

自从格子 Boltzmann方法被提出用来作为求解偏微分方程新的数值途径以来, 已取得了很大的进展, 特别在求解流体 Navier-Stokes方程上有了许多成果^[1]. 格子 Boltzmann方法现在已被广泛地应用在各种问题的研究上, 如多孔介质^[2]、不相溶流体^[3]、磁流体^[4]、反应扩散方程^[5,6]等领域.

扩散过程广泛存在于物理、化学、生物等领域中, 起着很重要的作用. 对流扩散方程是描述扩散过程的一个重要方程, 但在复杂的边界和初始条件下, 解析求解是很困难的. 为此本文提出一维的格子 Boltzmann方法以作为求解一维对流扩散方程的有效数值方法, 并给出了格子 Boltzmann方法中粘滞系数与对流系数的关系. 在此基础上可将该方法推广到高维情况去. 已知一维对流扩散方程为:

$$\partial_t d + T \partial_x d = \nu \partial_x^2 d \quad (1)$$

其中 d 是密度, 要求 $d \geq 0$; T 是对流系数; ν 是扩散系数, 要求 $\nu \geq 0$.

1 格子 Boltzmann方法

本文的格子 Boltzmann方法建立在一维的规则格子上, 格子间的距离为一个单位. 引入单粒子分布函数 $f(e, x, t)$, 它给出速度为 e 的粒子, t 时刻出现在 x 处的几率. e 可取值 $-1, 0, 1$, 分别对应粒子速

度方向向左、不动、向右三种情况, 并满足:

$$\sum_{e=-1}^1 e^i = \sum_{e=-1}^1 e^{i+1} = 0, \sum_{e=-1}^1 e^{2i} = \sum_{e=-1}^1 e^{i+1} = 2;$$

按统计物理, 分布函数遵守下格子 Boltzmann方程:

$$f(e, e+x, t+1) = f(e, x, t) - (f(e, x, t) - f^{(0)}(e, x, t)) / \tau, \quad (2)$$

$f^{(0)}(e, x, t)$ 是 t 时刻 x 处的局域平衡分布函数, τ 是弛豫时间, 为满足稳定性条件要求 $\tau \geq \frac{1}{2}$. 由 (2) 式可见, 如果给出 $f^{(0)}(e, x, t)$ 则可给出以后时间的分布函数 $f(e, x, t)$.

2 密度平衡方程

将分布函数 $f(e, x+e, t+1)$ 按格子空间和演化时间进行 Taylor级数展开到二级项得出:

$$\partial_x f_a + e \partial_x f_a + \frac{1}{2} \partial_x^2 f_a + e \partial_x \partial_x f_a + \frac{1}{2} e^2 \partial_x^2 f_a = -\frac{1}{\tau} (f_T - f^{(0)}). \quad (3)$$

采用多尺度展开技术

$$\partial = W \partial_{1+} + W \partial_{2+} + \dots; \partial_x = W \partial_x; f_T = f^{(0)} + W f^{(1)} + W^2 f^{(2)}, \quad (4)$$

此处 W 是个小参量. 将此展开技术 (4) 式代入 (3) 式, 在 W -一阶小量下有

$$\partial_1 f_T^{(0)} + e \partial_x f_T^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_T^{(1)}, \quad (5)$$

在 W -二阶小量下有

$$\partial_2 f_T^{(0)} + (1 - \frac{1}{2\tau}) (\partial_1 f_T^{(1)} + e \partial_x f_T^{(1)}) = -$$

1998-12-15收稿.

* 国家自然科学基金和广西自然科学基金资助项目.

$$\frac{1}{f} f^{(2)}, \quad (6)$$

长波和低频条件下,由统计物理,密度可由下式决定

$$d = \sum_{\tau} f_{\tau} = \sum_{\tau} f_{\tau}^{(0)}, \quad (7)$$

将(5)式和(6)式分别对下标求和可给出

$$\partial_t d + \partial_x \sum_{\tau} e_a f_{\tau}^{(0)} = 0, \quad (8)$$

$$\partial_t d + (1 - \frac{1}{2f}) \partial_x \sum_{\tau} e_a f_{\tau}^{(1)} = 0. \quad (9)$$

(8)、(9)即为时间 t 和 t^2 尺度下的密度平衡方程.

3 局域平衡分布函数 $f^{(0)}(e_a, x, t)$ 的

Chapman-Enskog展开和对流扩散方程的推导

局域平衡条件下,分布函数可由局域宏观量决定,因此可将分布函数按 Chapman-Enskog 展开为密度的函数:

$$\begin{cases} f_a^{(0)} = V_1 d + V_2 e_a d & a = -1, 1, \\ f_a^{(0)} = V_0 d & a = 0, \end{cases} \quad (10)$$

此处 V_1, V_2, V_0 为待定参数,用如下方法将确定它们的取值.将(10)式代入(7)式,可得到:

$$V_0 + 2V_1 = 1. \quad (11)$$

为了出现对流项,我们令

$$Td = \sum_{\tau} f_{\tau}^{(0)} e_a, \quad (12)$$

由(12)、(18)式得到

$$V_2 = \frac{T}{2}, \quad (13)$$

$$\partial_t d + T \partial_x d = 0, \quad (14)$$

利用(5)式和(14)式,可得到

$$\sum_{\tau} e_a f_{\tau}^{(1)} = -f(-T \partial_x d + 2V_1 \partial_x d), \quad (15)$$

将(15)式代入(9)式,便得到

$$\partial_t d + (-f)(1 - \frac{1}{2f})(2V_1 - T) \partial_x d = 0, \quad (16)$$

将(14)式乘上 W , (16)式乘上 \bar{W} ,然后两式相加便可回到正常的时间空间尺度下的方程

$$\begin{aligned} \partial_t d + T \partial_x d &= v \partial_x d, \\ v &= (f - \frac{1}{2})(2V_1 - T), \end{aligned} \quad (17)$$

该方程与式(1)的形式完全一样.

由(11)、(13)和(17)式,可给出所有的待定系数:

$$\begin{aligned} V_2 &= T/2, \\ V_1 &= T/2 + v/2(f - 0.5), \\ V_0 &= 1 - 2V_1. \end{aligned}$$

4 对流系数 α 和扩散系数 ν 的关系

在对流扩散方程中,扩散系数和对流系数是互相独立的,但在 LBM 方法中它们却存在着一定的关系.在统计物理中,要求分布函数 $f_0^{(0)} \geq 0$,因此由

(11)式得出 $2V_1 \leq 1$.为保证 $f_{\pm}^{(0)} \geq 0$,要求 $V_1 \pm V_2 \geq 0$.从 V_1 和 V_2 的表示式,可得到 $T + v/(f - 0.5) \geq |T|$.考虑 $V_1 \leq 0.5$,我们最后得到 ν 和 T 的关系: $1 - T \geq v/(f - 0.5) \geq |T - T|$.

5 计算机模拟

为了验证如上的理论结果,我们进行了如下情况的计算机模拟实验.

$$\begin{aligned} \partial_t d + T \partial_x d &= v \partial_x d, \\ d(0, t) &= 0, \\ d(l, t) &= 0, \\ d(x, 0) &= \sin(\frac{Cx}{l}) e^{\frac{Tx}{2}}. \end{aligned}$$

该问题的解析解为

$$d(x, t) = e^{-(4(\frac{C}{T})^2 + (\frac{T}{v})^2) \frac{v^2}{4} \frac{Tx}{2}} \sin(\frac{Cx}{l}).$$

当 $f = 0.8, T = 0.25, v = 0.25, l = 30, t = 200$,我们在图 1 中给出了理论值和计算机模拟值.

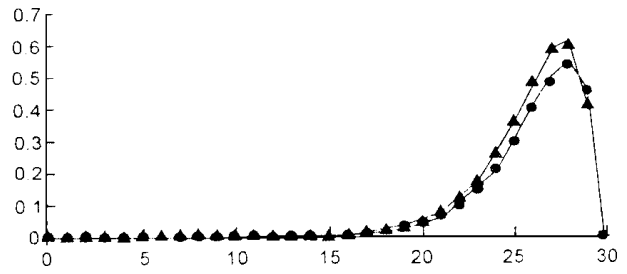


图 1 理论值与计算机模拟值的比较

Fig. 1 The comparison between theoretical results and computer simulation results

●——理论 Theoretical; ▲——模拟 Simulation.

由图 1 可见,除了在分布较陡峭的地方理论值和计算机模拟值有些误差外, LBM 方法较好的给出了对流扩散方程的解,另外所产生的误差可通过调整可调参数 τ 来进一步消除.

参考文献

- McNamara G, Zanetti G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. Phys Rev Lett, 1988, 61: 2332~ 2335.
- Rothman D H. Cellular automaton fluid—a model for flow in porous media. Geophysics, 1988, 53 (4): 509~ 518.
- Rothman D H, Keller J M. Immiscible cellular-automaton fluid. J Stat Phys, 1988, 52: 1119~ 1127.
- Chen H, Matthaeus W H. New cellular automaton model for magnetohydrodynamics. Phys Rev Lett, 1987, 58: 1845~ 1848.
- Karapiperis T, Blankleider B. Cellular automaton model of reaction-transport processes. Physica D, 1994, 78: 30~ 60.
- Wolf-Gladrow D. A lattice Boltzmann equation for diffusion. J Stat Phys, 1995, 79: 1023~ 1032.

(责任编辑:黎贞崇)