平衡分布正值性对格子 Boltzmann 方法 数值表现影响分析^{*}

叶欢锋^{1)†} 金頔¹⁾ 匡波¹⁾ 杨燕华¹⁾²⁾

(上海交通大学核科学与工程学院,上海 200240)
 (国家电投中央研究院核电软件技术中心,北京 100029)
 (2019年4月26日收到:2019年8月6日收到修改稿)

在传统中, 格子 Boltzmann 离散模型的数值表现影响因素分析主要关注于平衡分布的矩精度, 而模型的 正值性(作为粒子分布描述,分布函数需恒为正)则仅作为模型的附属属性,用于计算时工况约束.随着部分 高斯-厄米特求积公式离散方案的提出,模型正值性被发现是独立于矩精度的模型属性,可以通过格子速度调 整. 研究人员推测平衡分布正值性对格子 Boltzmann 方法的数值表现存在显著影响, 可以通过改善平衡分布 正值性改善模型数值表现.相比提升模型矩精度方案,正值性改善方案具有计算量优势.然而鉴于高阶模型 边界处理的缺失,相关推测并未得到具体数值计算证实,本文采用周期边界的 Taylor-Green 涡算例,回避了 边界处理问题,详细分析了正值性对数值表现的影响,包括平衡分布正值区域内计算精度稳定性以及模型平 衡分布正值区域大小对计算影响,并与矩精度影响进行对比.计算结果显示,模型正值区域内计算精度并不 恒定,随着工况靠近正值区域上界,计算精度下降,但总体上均具备较好的精算精度.模型数值表现同时受到 矩精度与模型正值性影响,矩精度影响主要体现在模型是否满足 Galilean 不变性上,对于满足 Galilean 不变 性模型,其数值表现则取决于模型正值性.基于此,本文认为通过改善模型正值性提升格子 Boltzmann 方法 数值表现是切实可行的方案,并推荐基于满足 Galilean 不变性条件下选择具有最宽正值区域的模型,而不必 执着于模型矩精度.另外从本文的数值结果来看,高阶模型模型的数值表现均好于经典 D2Q9 模型,特别是 D2H3-2模型,是文中涉及模型的最优者,值得进一步深入研究.总体而言,通过数值分析首次系统性梳理了 模型正值性对计算影响,并与矩精度进行对比分析.本文证实了正值性对计算的影响,为离散模型选择和改 进提供了新的方向.

关键词: 格子 Boltzmann, 离散模型, 矩精度, 正值性 **PACS**: 47.11.-j, 02.70.-c

DOI: 10.7498/aps.68.20190624

1 引 言

最近几十年,格子 Boltzmann 方法在计算流 体领域受到了广泛的关注.作为一种介观尺度计算 方案,格子 Boltzmann 方法既能提供相较于宏观 计算方法更为深入的视角,又能避免纯粒子尺度计 算方法所需要的大量计算资源,因此在诸多传统方

© 2019 中国物理学会 Chinese Physical Society

法难以适用的复杂流体领域得到了广泛应用,如多 组分多相流^[1-4],微纳米尺度流^[5-7]、多孔介质流^[6,8]、 粒子悬浮流^[9,10]、血液流^[11,12]、湍流^[13-15]等.格子 Boltzmann 方法描述的是一群虚构粒子在流场内 迁移和碰撞的过程.流场内粒子信息通过粒子分布 函数来描述,而流场的宏观信息通过对粒子分布函 数做相应的速度矩积分得到.格子 Boltzmann 方 法的控制方程可以通过对 BGK 近似下的 Boltzmann

^{*} 国家科技重大专项 (批准号: 2017ZX06002002) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: huanfye@163.com

方程沿特征线积分得到^[16-18], 而具体的算法实现 则还需对得到的特征线积分在速度空间上进行离 散^[17,18], 如常见的速度离散模型 D2Q9 等. 然而低 阶矩精度速度离散模型在还原宏观控制方程式的 过程中会引入误差, 如 D2Q9 模型还原动量守恒方 程时会引入领外黏性项, 导致方程不满足 Galilean 不变性^[19-21]. 为解决该问题, 研究者们提出了高阶 速度离散模型, 如 Shan^[22,23] 和 Shim^[24] 的工作. 然 而由于方案实现的复杂性, 高阶速度模型数量非常 有限, 导致对于高阶模型数值表现的理解集中于模 型的矩精度.

最近 Ye 等^[25] 提出了部分高斯-厄米特求积公 式 (partial Gauss-Hermite quadrature, pGHQ), 显著简化了离散模型的构建. Ye 等^[25] 用该方案系 统性地搜索了矩精度介于{3-7}离散速度在[-10,10] 范围内的可行离散模型,结果显示可行模型的数量 非常丰富,远超预期,尤其是存在大量精度相同但 是离散速度不同的模型.这些模型从宏观角度分析 是等价的,即用 Chapman-Enskog 展开可以还原 出相同的宏观方程. 但是在微观上, 模型有着明显 的区别,特别是平衡分布的正值区域(所有分布为 正值的宏观速度区域). 为方便讨论, 本文用正值性 指代分布正值相关性质包括正值区域等,且在后续 讨论中不区分两者使用. 相对于传统理解中作为模 型用于计算时工况的约束条件,在 pGHQ 方案下, 平衡分布正值性可以看作是独立于矩精度的模型 属性,可以通过离散速度调整.鉴于负值平衡分布 违背格子 Boltzmann 方法的物理原则, 即粒子分 布不存在负值, Ye 等^[25] 认为离散模型的正值性将 对模型的数值表现有直接影响,可以通过选择模型 离散速度来改善计算.对比通过提升模型矩精度改 善格子 Boltzmann 方法数值表现的传统构想,调 整模型离散速度设想在计算量上存在优势. 然而鉴 于高阶模型的具体实现需要设计对应的边界处理, Ye 等^[25] 文章中并没给出具体数值验证. 本文选择 可以采用周期性边界处理的 Taylor-Green 涡算例, 回避了高阶离散模型边界处理匮乏的问题. 通过详 细的数值实验, 文章分析了平衡分布正值性对离散 模型数值稳定性和精度的影响,并与模型矩精度影 响进行对比,验证通过提升模型正值性来改善格 子 Boltzmann 方法数值表现的可行性.

本文首先回顾 Ye 等^[25] 提出的 pGHQ 离散模 型构造方案,并选择了部分离散模型用作具体计 算. 然后本文用选择的模型计算 Taylor-Green 涡, 分析平衡分布正值性对格子 Boltzmann 方法计算 稳定性和精度的影响,并与模型矩精度影响进行对 比,验证通过提升模型正值性来改善格子 Boltzmann 方法数值表现的可行性. 最后总结本文工作.

2 pGHQ 速度离散方案

pGHQ 速度离散方法基于 Hermite 展开理论^[26],即平衡分布可以通过对 Maxwell 分布以 Hermite 多项式形式展开构造.以一维为例,对于 m 阶精度的平衡分布,其分布函数可以通过如下方式构造:

$$f_{\alpha}^{\text{eq}} = w_{\alpha}\rho \sum_{i=0}^{m} H_i\left(\frac{v_{\alpha}}{\sqrt{2}c_{\text{s}}}\right) \frac{u^i}{\left(\sqrt{2}c_{\text{s}}\right)^i i!},\qquad(1)$$

式中 ρ 和 u分别为密度和宏观流速, v_{α} 和 w_{α} 为离 散格子速度和对应的权重系数, $1/\sqrt{2}c_{s}$ 在 Hermite 展开理论中被称为无量纲网格常数 c, 而 $H_{i}(x)$ 则 为 i阶物理 Hermite 多项式, 表 1 罗列了前 5 阶物 理 Hermite 多项式的具体表达. 无量纲网格常数 c, 离散格子速度 v_{α} 和对应的权重系数 w_{α} 是通过求解 对应的0 – 2m阶数值积分方程得到,

$$I^{k} = \int \frac{1}{\sqrt{\pi}} \mathrm{e}^{-\xi^{2}} \xi^{k} \mathrm{d}\xi = \sum_{\alpha=0}^{q-1} w_{\alpha} \xi^{k}_{\alpha}, \quad k \in [0, 2m],$$
(2)

式中 $\xi_{\alpha} = v_{\alpha}c.$ 方程 (2) 是高阶非线性方程组,为 减少其求解难度, Shan^[22,23]和 Shim^[24]预先定义了 对称格子速度集 {0, $\pm v_1, \cdots$ },使得方程组转变为 仅包含无量纲网格常数 c 和权重系数 { w_{α} }未知量 的方程,并假定 m阶矩精度平衡分布构造需要 2m - 1个格子速度.至此离散速度模型构造转变为 构造 {0, $\pm v_1, \cdots, \pm v_{m-1}$ }并求解其对应方程组 (2). 尽管 Shan 和 Shim 等通过预定义格子速度集

表 1 前五阶物理 Hermite 多项式 Table 1. The first five physicists' Hermite polyno-

Hermite 多项式阶数 The degree of Hermite polynomial	多项式表达式 Hermite polynomial
0	$H_0\left(x\right) = 1$
1	$H_1\left(x\right) = 2x$
2	$H_2\left(x\right) = 4x^2 - 2$
3	$H_3\left(x\right) = 8x^3 - 12x$
4	$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$

mials.

{0,±v₁,…,±v_{m-1}}显著简化了离散速度模型构 造,但是求解代入格子速度集后的方程组 (2) 依旧 繁琐而复杂,无法大规模验证可行的格子速度集. 因此现有的高阶可行离散模型数量十分有限,这阻 碍了对于格子 Boltzmann 速度离散模型的进一步 研究.另外对于模型矩精度与格子速度数量之间的 关系也没经过系统而深入地分析.因此在 Shan 和 Shim 的研究中,其重点更偏重于突破高阶离散模 型的缺失,并未形成高阶模型系统性认识.这使得 对于高阶模型的认知依旧局限于传统"模型阶数决 定模型数值表现"的猜测,即模型阶数越高数值计 算表现越好.

Ye 等 ^[25] 通过改造 Gauss-Hermite 求积公式, 给出了方程 (2) 的等价求积公式,即 pGHQ 求积 公式. 根据 pGHQ 求积公式,互不相同的 q 节点 ξ_{α} 和其权重系数 w_{α} 若要满足方程组 (2),只需保证其 节点多项式 $W_q(\xi)$ 基于 Hermite 多项式表述时,仅 涉及 2m - q + 1 到 q 阶之间的 Hermite 多项式,

$$W_{q}(\xi) = \prod_{\alpha=0}^{q-1} (\xi - \xi_{\alpha}) = \sum_{i=2m-q+1}^{2m-1} A_{i}H_{i}(\xi) + \frac{1}{2^{q}}H_{q}(\xi),$$
(3)

而对应的权重系数计算公式则为

$$w_{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int e^{-\xi^2} \prod_{\beta=0, \ \beta \neq \alpha}^{q-1} \frac{\xi - \xi_{\beta}}{\xi_{\alpha} - \xi_{\beta}} d\xi.$$
(4)

完整的推导可参考文献 [25]. 不同于 (2) 式同时包 含节点 ξ_{α} 和权重系数 w_{α} , (3) 式仅为节点 ξ_{α} 的函 数.因此当给定格子速度集 { v_{α} }时,可以根据 (3) 式直接得到网格常数 c的约束方程,其具体流 程是将格子速度集代入其节点多项式并展开多 项式,

$$W_q(\xi) = \prod_{\alpha=0}^{q-1} (\xi - v_{\alpha}c) = \sum_{i=0}^{q} b_i \xi^i, \qquad (5)$$

其中 b_i 是网格常数c的多项式,引入次方项 ξ^i 与 Hermite 多项式的关系式,

$$\xi^{i} = \frac{i!}{2^{i}} \sum_{l=0}^{\lfloor i/2 \rfloor} \frac{1}{l! (i-2l)!} H_{i-2l} \left(\xi\right), \tag{6}$$

则(5)式可以表达为

$$W_{q}(\xi) = \sum_{i=0}^{q} b_{i}\xi^{i} = \sum_{i=0}^{q-1} a_{i}H_{i}(\xi) + \frac{1}{2^{q}}H_{q}(\xi).$$
 (7)

而根据 pGHQ (3) 式, 要使得格子速度满足 m 阶

矩精度离散模型构造,其节点多项式基于 Hermite 多项式表述时,应当仅涉及 2m - q + 1到 q 阶之间 的 Hermite 多项式,即0到 2m - q 阶 Hermite 多项 式系数为0,

$$\{a_i = 0 | i \leq 2m - q\}.$$
 (8)

而系数*a_i*和*b_i*一样,是仅包含网格常数*c*的多项 式.因此(8)式事实上是给定格子速度集{*v_α*}的网 格常数*c*约束方程组.求解(8)式,若方程组有解, 则将求解的网格常数以及格子速度代入(4)式,即 可得到对应的权重系数.将网格常数,格子速度以 及权重系数代入(1)式,即可得到*m*阶矩精度离散 模型.

在 Hermite 展开理论中,高维模型可以通过对 一维模型做张量乘积得到. 以二维为例,其平衡函 数构造即为

$$f_{\alpha}^{\text{eq}} = \rho w_{\alpha x} w_{\alpha y} \left(\sum_{i=0}^{m} H_i \left(\frac{v_{\alpha x}}{\sqrt{2}c_{\text{s}}} \right) \frac{u_x^i}{\left(\sqrt{2}c_{\text{s}}\right)^i i!} \right) \\ \times \left(\sum_{i=0}^{m} H_i \left(\frac{v_{\alpha y}}{\sqrt{2}c_{\text{s}}} \right) \frac{u_y^i}{\left(\sqrt{2}c_{\text{s}}\right)^i i!} \right), \tag{9}$$

对应的格子速度为

$$(v_{\alpha x}, v_{\alpha y}) = \{(v_{\beta}, v_{\gamma}) | v_{\beta}, v_{\gamma} \in \{v_{\alpha}\}\}.$$
 (10)

Shan^[22,23]和 Shim^[24]的离散方案, pGHQ速度 离散方法显著简化了离散模型构建过程.其算法的 简洁和通用性让系统性研究格子速度集成为可能. Ye 等^[25]用该方案系统性地搜索了矩精度分别为 {3—7},离散速度在[-10,10]范围内的可行离散模 型,得到了大量等矩精度的离散模型.这些模型矩 精度相同,但是正值性存在显著差别.鉴于负值平 衡分布违背格子 Boltzmann 方法的物理原则,即 粒子分布不存在负值,Ye 等^[25]认为模型正值性会 影响模型的数值表现,并推测可以通过选择格子速 度集改善模型正值性的方式改善格子 Boltzmann 方法的计算稳定性和精度.

为验证该推论的可行性,本文选择了表 2 所列 的离散模型,模型以维度 n 和速度矩精度 m 来表 示,即 DnHm. 文章主要从如下几个方面验证正值 性影响:1)平衡分布正值性对于数值表现影响,是 否在正值区域内,模型都能保持计算的稳定性和相 应的精度;2)平衡分布正值性与模型矩精度对数 值表现影响对比;3)通过调整平衡分布正值性改 善数值表现可行性.鉴于非对称网格对于平衡分布 表 2 格子 Boltzmann 离散模型.为方便展示,表格罗列的是用于对应构造高阶模型的一维模型参数.实际计算中需根据 (9) 式和 (10) 式对表格中的参数进行张量构造.另外需注意的是表格中罗列的是网格常数 c,其与格子声速 c_s 存在如下换算关系 $c = 1/\sqrt{2}c_s$

Table 2. Discrete model description of lattice Boltzmann method. For the seeking of space saving, the parameters illustrated in this table are of the corresponding unidimensional models. In numerical implementations, they require tensor product illuminated in Eq. (9) and Eq. (10). It should be noted that the table lists the lattice constant c instead of the lattice sonic speed c_s , which can be expressed as $c = 1/\sqrt{2}c_s$.

Model name	Discrete velocity set { v_{α} }	Lattice constant c	Weights $\{w_{\alpha}\}$
D2H2	$\set{0,\pm1}$	1.2247×10^{0}	$\{6.6667 \times 10^{-1}, 1.6667 \times 10^{-1}\}$
D2H3-1	$\set{0,\pm1,\pm3}$	5.5343×10^{-1}	$\{ 7.4464 \times 10^{-2} , \; 4.1859 \times 10^{-1} , \; 4.4182 \times 10^{-2} \}$
D2H3-2	$\set{0,\pm2,\pm5}$	3.4420×10^{-1}	$\{ 3.1044 \times 10^{-1} , \; 3.0997 \times 10^{-1} , \; 3.4812 \times 10^{-2} \}$
D2H4	$\set{0,\pm 1,\pm 2,\pm 3}$	8.4639×10^{-1}	$ \{ 4.7667 \times 10^{-1} , 2.3391 \times 10^{-1} , 2.6938 \times 10^{-2} , \\ 8.1213 \times 10^{-4} \} $
D2H5	$\{0,\pm 1,\pm 2,\pm 3,\pm 5\}$	4.7940×10^{-1}	$ \begin{array}{l} \{ 1.6724 \times 10^{-1} , 3.0315 \times 10^{-1} , 5.3303 \times 10^{-2} , \\ 5.7922 \times 10^{-2} , 2.0013 \times 10^{-3} \} \end{array} $
D2H6	$\{0,\pm 1,\pm 2,\pm 3,\pm 4,\pm 5\}$	6.8590×10^{-1}	$ \{ \begin{array}{l} 3.8694 \times 10^{-1} , 2.4178 \times 10^{-1} , 5.8922 \times 10^{-2} , \\ 5.6153 \times 10^{-3} , 2.0652 \times 10^{-4} , 3.2745 \times 10^{-6} \} \end{array} $

的正值性影响主要在于平移正值区域,其在理论上 更适合具有主流速度的计算问题.而本文采用的 Taylor-Green 涡流场是对称性,其主流速度为 0, 因此并不适合针对于非对称网格的分析.而从本文 研究目标来看,单纯采用对称离散模型足够确认相 关结果.因此本文在模型选择上并不涉及非对称离 散模型.同时为验证 Hermite 展开理论的实用性, 本文还额外采用了经典 D2Q9 模型作为比较,

$$f_{\alpha}^{\text{eq}} = w_{\alpha}\rho\left(1 + \frac{\boldsymbol{v}_{\alpha}\cdot\boldsymbol{u}}{c_{\text{s}}^{2}} + \frac{\left(\boldsymbol{v}_{\alpha}\cdot\boldsymbol{u}\right)^{2}}{2c_{\text{s}}^{4}} - \frac{u^{2}}{2c_{\text{s}}^{2}}\right), \quad (11)$$

其中格子速度,权重系数以及格子声速 c_s的取值与 D2H2 模型相同.

对于 DnHm 类型的模型, 其正值区域是比较 容易分析的,即只需分析对应一维模型的所有分布 保持正值性的流体速度区域,高维模型的正值区域 即为该区域的张量乘积结果. 对于本文涉及的 {0, ±v1, ···, ±vm-1}类型一维模型, 其正值区域具 有对称性. 经过张量乘积后, 该对称性在高维下依 旧得到保留,因此本文以一维正值区域上限来指代 模型正值区域,符号记为Upps.以本文 D2H2 模型 对应的一维模型为例,其平衡分布在[-0.82,0.82]之 间均为正值,超过该范围后则分布出现负值.而D2H2 模型是一维模型的张量乘积结果,因此流体速度在 [-0.82, 0.82] × [-0.82, 0.82] 区间内, D2H2 模型均为 正值,即 D2H2 模型正值区域为[-0.82, 0.82]×[-0.82, 0.82], 其Upos = 0.82. 通过同样分析可以得到本文 其他 DnHm 型的正值区域. 比较特殊的是 D2Q9 模型,不同于 DnHm 类型模型的正值区域为一维

张量乘积结果, D2Q9 模型下不同方向的流体速度 是相互关联的.为方便分析, 取 D2Q9 模型正值区 域中最大 U_{pos},即在[-U_{pos},U_{pos}] × [-U_{pos},U_{pos}]上满 足 D2Q9 正值性的最大 U_{pos}值.本文涉及模型的正 值区域如图 1 所示.

3 数值分析

两维 Taylor-Green 涡作为等温不可压 Navier-Stokes 方程组的有限几组精确解,是流体计算中常用的经典算例,其控制方程为:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} &+ \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial u}{\partial t} &+ u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &+ u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right). \end{aligned}$$
(12)

其解为

$$u = -u_0 \sqrt{k_y/k_x} \cos(k_x x) \sin(k_y y) e^{-t/T_d},$$

$$v = u_0 \sqrt{k_x/k_y} \sin(k_x x) \cos(k_y y) e^{-t/T_d},$$

$$p = p_0 - \rho_0 \frac{u_0^2}{4} \left(\frac{k_y}{k_x} \cos(2k_x x) + \frac{k_x}{k_y} \cos(2k_y y) \right) e^{-2t/T_d},$$

(13)

式中 ρ_0 为流体常物性密度; p_0 为参考压力; u_0 为 Taylor-Green 涡特征速度; k_x , k_y 为周期因子; T_d 为衰减特征时间,其计算式为 $1/T_d = \nu (k_x^2 + k_y^2)$.为方便讨论,本文将周期因子恒定选



图 1 格子 Boltzmann 离散模型正值性分析 虚线框表示模型正值区域,其涵盖区域为 [-Upos, Upos] × [-Upos, Upos], 模型 Upos标 注在图中模型名称之后

Fig. 1. Positivity analysis of lattice Boltzmann discrete models. The dash squares denote the positive areas of each lattice Boltzmann discrete model, which are constructed as $[-U_{pos}, U_{pos}] \times [-U_{pos}, U_{pos}]$. The U_{pos} values of each model are annotated after the model names.

择为 $k_x = k_y = 1$. 根据两维 Taylor-Green涡的解, 当流场初始速度和压力分布满足:

$$u = -u_0 \cos x \sin y,$$

$$v = u_0 \sin x \cos y,$$

$$p = p_0 - \rho_0 \frac{u_0^2}{4} [\cos(2x) + \cos(2y)].$$
 (14)

其速度场和压力场分别以指数 exp(-t/T_d)和 exp(-2t/T_d)衰减,且速度场和压力场在流场内分 别以2π和π为周期成周期分布. Taylor-Green 涡解 十分有标识性,统一的指数衰减形式非常适合用于 测试算法的稳定性. 而周期分布避免了边界处理, 适用于验证目前边界处理缺乏的高阶离散模型.

本文用格子 Boltzmann 计算了流域为[0,2n]× $[0, 2\pi]$ 的 Taylor-Green 涡演变. 流体的运动黏性_{ν} 为 $0.1 \text{ m}^2/\text{s}$,特征速度 u_0 为1 m/s.网格密度为 200×200. 模拟采用单松弛因子格子 Boltzmann 方程,

$$f_{\alpha} \left(\boldsymbol{r} + \Delta t \boldsymbol{v}_{\alpha}, t + \Delta t \right)$$

= $f_{\alpha} \left(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{t} \right) - \frac{1}{\tau} \left[f_{\alpha} \left(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{t} \right) - f_{\alpha}^{\text{eq}} \left(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{t} \right) \right],$ (15)

式中 $f_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{t}), f_{\alpha}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, \mathbf{t})$ 分别表示 t 时刻**r**节点上离 散速度 v_{α} 对应的粒子分布和平衡分布, $f_{\alpha}(r + \Delta t v_{\alpha})$, $t + \Delta t$)表示经过一个计算步, $t + \Delta t$ 时刻 $r + \Delta t v_{\alpha}$ 节点上离散速度 v_{α} 对应的粒子分布, τ 则是松弛因 子,其计算式为

$$\tau = \frac{1}{2} + \frac{\nu \Delta t}{c_{\rm s}^2 \Delta L^2},\tag{16}$$

其中 Δt 和 ΔL 分别为计算时间步长和网格长度, ν 为流体运动黏性, c, 为格子声速. 流场的初始分布为:

$$u_{LB} = -u_{LB,0} \cos x \sin y,$$

$$v_{LB} = u_{LB,0} \sin x \cos y,$$
(17)

其中 $u_{LB,0}$ 为 u_0 在格子 Boltzmann体系下的值, $u_{LB,0} = u_0 \Delta t / \Delta L$. 不同于初始流场引入, 初始压 力场的引入需经过转换处理.本文根据压力和密度 关系式 $p = \rho c_s^2$, 通过设置初始密度场来引入压力 初始条件,

$$\rho = \rho_{p_0} - \rho_0 \frac{u_{\text{LB},0}^2}{4c_8^2} \left(\cos\left(2x\right) + \cos\left(2y\right)\right).$$
(18)

为避免初始密度出现负值,本文统一取 $\rho_{p_0} = 10$, $\rho_0 = 1$. 从 Taylor-Green 涡的设置可以看出, 要验 证平衡分布正值性影响,可以通过调整 uLB.0 来实 现,即通过调整计算步长来改变u₀在格子 Boltzmann 体系下的值,人为控制流场初始时刻平衡分布的正 值性. 根据模型正值区域分析结果 (图 1), 本文设 计了如表 3 中所列的计算工况.

根据 Taylor-Green 涡的初始条件设置, 随着

Table 3. Case design for lattice Boltzmann method.				
Case name	Step time/s	$u_{LB,0}$		
a	1.570796×10^{-2}	0.5		
b	$3.141593 imes 10^{-2}$	1.0		
с	4.712389×10^{-2}	1.5		
d	6.283185×10^{-2}	2.0		

*u_{LB,0}*增大,格子 Boltzmann 的初始分布将开始出现负值,而具体的负值情况则取决于平衡分布模型.为方便分析和展现具体分布正值情况,本文设计了如下正值指标:

$$\kappa = \frac{\sum |f|}{\sum f} = \frac{\sum |f|}{\rho}.$$
(19)

当分布中存在负值时, κ 值将大于 1, 而不存在负 值时则 κ 值恒为 1. κ 偏离 1 的幅值可以看作分布 正值性破坏的严重程度. 该指标通过对 ρ 归一, 消 除了 Taylor-Green 涡流场内不同密度对正值性的 影响. 图 2 给出了设计计算工况下, 各模型初始分 布的 κ 值情况. 图中额外标注了对应工况下模型正 值区域值 u_{pos} 与设计 $u_{LB,0}$ 的差值, 记作 Δu ,

$$\Delta u = u_{\text{pos}} - u_{LB,0}.$$
 (20)

用以辅助理解设计计算工况对模型正值区域的偏 离程度. Δu值为正,表示计算工况完全位于模型 正值区域内,Δu值为负则表示计算工况超过正值 区域,部分网格出现负值分布.另外需注意的是, 图 2 对κ值的范围做了截断处理,即仅区别[1.0,2.0] 范围内变化,以方便观察分布正值性随设计工况而 遭到破坏的变化过程. κ值图显示,当Δu值为负 时,分布的正值性遭到破坏, κ 值大于 1,如 D2H2模型在b, c,d工况情况下所示.但是对于给 定负值 Δu ,平衡分布正值性遭到的破坏程度取决 于具体模型.以 D2H2和 D2H6模型为例, D2H2 在 Δu 值为-0.18时,初始 κ 分布出现了明显偏离1 值;而 D2H6模型在 Δu 值为-1.02时,初始 κ 分布 偏离1值的幅度依旧小于前述情况.

对于模型数值表现分析,本文主要考量计算的 流场分布以及误差演化.流场分布分析通过比较 Taylor-Green 涡初始流场强度衰减一半时 (*t* = 3.4657359 s)模型计算结果与理论解的速度平方和 *U*²等高线图实现,

$$U^2 = u^2 + v^2. (21)$$

鉴于速度平方和 U^2 在流域内成周期性分布,本文 仅截取周期区域[0.3775,0.6225] $\pi \times [0.3775,0.6225]\pi$ 内图像 (见图 3). 误差演化分析则关注模型计算结 果与理论解误差在t = 3.4657359 s时间内随时间的 演变 (图 4),其计算公式为

Error =
$$\frac{\sqrt{\sum (u - u_a)^2 + (v - v_a)^2}}{\sqrt{\sum u_a^2 + v_a^2}}$$
, (22)

式中ua和va为理论结果.



图 2 各格子 Boltzmann 模型在 Taylor-Green 涡设计计算工况下初始时刻计算流域 $[0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$ 内 κ 值色阶图 图中列对应 格子 Boltzmann 模型, 行则对应表 3 中计算工况; 每个色阶图上方的数值 Δu 值, 即正值区域值 u_{pos} 设计计算工况 $u_{LB,0}$ 差值;为 方便观察正值性随计算工况遭到破坏的变化过程, 图中对 κ 值做了截断处理, 仅区别 [1.0, 2.0]范围变化

Fig. 2. The initial κ filled contours of designed Taylor-Green vortex simulations for each lattice Boltzmann model in the fluid domain $[0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$. Each column is a simulation set of a lattice Boltzmann model with different designed cases. Each row is a set of a simulation case with different lattice Boltzmann models. The values in the contour panels are the values of Δu , i.e. the difference between the u_{pos} and the designed $u_{LB,0}$. For the sake of identifying the positivity violation process of a lattice Boltzmann model, the filled contours truncate the range of κ , limiting into [1.0, 2.0].





图 3 Taylor-Green 涡半衰时刻 t = 3.4657359 s, $[0.3775, 0.6225]\pi \times [0.3775, 0.6225]\pi$ 流域内,不同计算工况下理论解 (Theoretical) 与各格子 Boltzmann 模型的速度平方和 U^2 等高线图;图中列对应格子 Boltzmann 模型,行则对应表 3 中计算工况

Fig. 3. The U^2 contour lines of Taylor-Green vortex in fluid domain $[0.3775, 0.6225]\pi \times [0.3775, 0.6225]\pi$ at half-value decay time t = 3.4657359 s, including the theoretical solution (denoted as "Theoretical") and the numerical results of lattice Boltzmann models. Each column is a set of simulations under the designed cases. Each row is a set of simulations under selected lattice Boltzmann models including the theoretical solution.



图 4 各 Taylor-Green 涡设计计算工况下,各格子 Boltzmann 模型计算误差随时间演变,图中标号 a, b, c, d 分别对应表 3 各设 计计算工况;为方便表示,图中横坐标单位为 0.173286795 s

Fig. 4. The error evolution of each simulation. The panel a, b, c, d renders each designed case in Table 3 respectively. For the sake of rendering, the unit of the time axis is scaled as 0.173286795 s.

从计算结果来看,对于每个 DnHm 模型,其数 值精度随着 u_{LB,0} 增大而变坏,无论是计算结果等 高线与理论解的相似程度 (图 3),还是误差演化 (图 4)都体现了该趋势.但与模型正值性一受到破 坏计算即发散的 D2H2 模型不同的是,高阶 DnHm 模型对于模型正值性破坏并未体现出间断式的数 值表现变化.对于单个计算工况, DnHm 系列模型 除不满足 Galilean 不变性的 D2H2 模型外, 计算 精度随 upos 减小而变坏. 而 D2H2 模型精度则差于 所有高阶模型,包括正值区域更小的 D2H4 模型. 对比 D2H2 模型与其他高阶模型的数值表现,模型 的 Galilean 不变性对于模型的计算稳定性具有显 著影响.从这一角度而言,矩精度对模型数值表现 影响主要体现在模型是否满足 Galilean 不变性上. 对于满足 Galilean 不变性的模型, 矩精度影响不再显著, 模型数值表现主要受正值性影响.

分析模型正值区域内计算表现,即Δu大于 0的数值模拟,所有计算结果等高线与理论解均保 持较好的符合,而对比误差(图 5),计算结果未明 显表现出模型正值区域与精度之间跨工况相关性. 具体而言,在模型正值区域内,具有较宽正值区域



图 5 Taylor-Green 涡设计计算工况下, Δu 值为正值的 各格子 Boltzmann 模型数值模拟误差对比.图中实线,虚 线和虚点线分别为工况 a, b, c (见表 3)结果,离散模型则 用颜色和符号标注.为方便表示,图中横坐标单位为 0.173286795 s

Fig. 5. The error comparison of Taylor-Green vortex simulations with postive value of Δu . The designed configurations of Taylor-Green vortex are denoted with line styles, in which the solid, dashed and dash-dotted line indicates case a, b and c in Table 3 respectively, meanwhile the lattice Boltzmann models are labeled with line colors and markers. For the sake of rendering, the unit of the time axis is scaled as 0.173286795 s.

的模型并不对计算恒定保持优势精度,以 D2H3-2模型工况 b 为例,其计算差于所有其他 3 阶及 3 阶以上 DnHm 模型工况 a 计算结果.进一步而 言,在模型正值区域内,其计算精度并不是恒定的,计算工况越靠近正值区域上限,模型精度越低.因此模型正值区域优势主要体现在同一计算工况 对比.

在数值计算中,独立的精度指标是非常实用的 指示参量,即对于任意计算工况,只需保证该精度 指标一致,则计算精度一致.鉴于正值区域的精度 优势主要体现在同工况下模型之间的对比,无法表 征数值模拟的确切精度,本文尝试探索其他参量作 为精度指标的可能性.在 Taylor-Green 涡算例中, 文章设计了 Δu 值和 κ 值来表征模型在对应计算工 况下的正值性情况. 本文探索这两指标作为衡量计 算精度的可能性. 文章首先检验 Δu 值, 以 D2H4 模型工况 a, b, c与 D2H5 模型工况 b, c, d 为例, 两两分别具有近似的 Δu 值. 若格子 Boltzmann 方 法的数值表现与 Δu 值强相关,则 D2H4模型与 D2H5 模型对应算例精度将呈现明显的相关性. 从 图 6 (a) 来看, 对比 D2H3-2 模型随工况变化而导 致精度变化程度, 对应 D2H4 模型与 D2H5 模型结 果之间的精度差异幅度依旧明显,并不足以体现格 子 Boltzmann 方法计算精度与 Δu 值相关性. 另外 取 Δu 值在(-0.30 ± 0.6)附近计算结果(图 6 (b)),



图 6 Taylor-Green 涡数值模拟误差与 Δu 值相关性分析 (a) 对比了 Δu 接近的 D2H4 模型 a, b, c 工况与 D2H5 模型 b, c, d 工 况计算误差; (b) 对比了 Δu 在 -0.30 附近所有数值模拟计算误差. 所有图中均保留了 D2H3-2 模型在 a, b, c, d 工况下的计算误 差作为参照. 曲线上标注值为该数值模拟的 Δu 值. 图中 a, b, c, d 工况分别用实线, 虚线, 虚点线及点线标注, 而离散模型则用颜 色和符号标注. 为方便表示, 图中横坐标单位为 0.173286795 s

Fig. 6. The numerical performance of Taylor-Green vortex simulations vs the value of Δu . Panel a plots the numerical errors of model D2H4 under case a, b, c and model D2H5 under case b, c, d, which possess close value of Δu respectively. Panel b plots the numerical errors of simulations with a value of Δu around -0.30. The numbers labeled on the curves are their values of Δu . The simulation configurations are denoted with line style, in which solid, dashed, dash-dotted and dotted line indicates case a, b, c and d respectively, meanwhile the lattice Boltzmann models are labeled with line colors and markers. In all panels, the results of model D2H3-2 with four designed configurations are plotted for a reference. The designed configurations of Taylor-Green vortex are denoted with line styles, in which the solid, dashed, dash-dotted and dotted line indicates case a, b, c and d in Table 3 respectively, meanwhile the lattice Boltzmann models are labeled with line colors and markers. For the sake of rendering, the unit of the time axis is scaled as 0.173286795 s.

同样对比 D2H3-2 模型随工况变化而导致精度变 化程度,选取的计算精度并未收敛于足够识别Δu 值影响的值域附近.从上述分析可以看出,Δu值 并不具备衡量格子 Boltzmann 方法数值精度的能 力.对于κ值,本文选取了模型正值性已遭受破坏 但初始κ值尚未体现显著偏离的计算结果 (图 7). 类似地,对比 D2H3-2 模型随工况变化而导致精度 变化程度,误差对比显示,选取算例并未显示显著 的收敛性,因此κ值也不具备衡量格子 Boltzmann 方法数值表现的能力.



图 7 Taylor-Green 涡数值模拟误差与初始 κ 值相关性分 析. 图中对比了在 Δu 值为负情况下,初始 κ 值偏离 1幅 值可忽略的算例计算误差,包括模型 D2H3-1 工况 c,模型 D2H3-2 工况 d,模型 D2H4 工况 b,模型 D2H5 工况 c,d和 模型 D2H6 工况 b,c.图中均保留了 D2H3-2 模型在 a,b,c, d 工况下的计算误差作为参照.曲线上标注值为该数值模 拟的 Δu 值.图中 a, b, c,d 工况分别用实线,虚线,虚点线 及点线标注,而离散模型则用颜色和符号标注.为方便表 示,图中横坐标单位为 0.173286795 s

Fig. 7. The numerical performance of Taylor-Green vortex simulations vs initial κ . The error evolutions of numerical simulations with negative values of Δu but negligible departure of initial κ from 1 are plotted, including model D2H3-1 under case c, model D2H3-2 under case d, model D2H4 under case b, model D2H5 under case c,d and model D2H6 under case b, c. The results of model D2H3-2 with four designed configurations are also plotted for a reference. The designed configurations of Taylor-Green vortex are denoted with line styles, in which the solid, dashed and dash-dotted line indicates case a, b and c in Table 3 respectively, meanwhile the lattice Boltzmann models are labeled with line colors and markers. For the sake of rendering, the unit of the time axis is scaled as 0.173286795 s.

对比经典的 D2Q9 模型, 在正值区域内, D2H2 模型结果与之惊人的一致, 如工况 a 下两者的等高 线 图 和 误 差 演 变 曲 线 所 示 . 但 在 稳 定 性 上 , D2H2 模型则略差于 D2Q9 模型. 而本文涉及的所 有高阶模型 (矩精度大于等于 3) 计算稳定性和精 度都优于 D2Q9 模型. 从本文数值计算结果来看, D2H3-2 模型具有最佳的计算稳定和精度, 同时对 比其他高阶 DnHm 系列模型,其计算量也具有明显优势.因此从数值计算来说,D2H3-2 模型值得进一步研究.

4 结 论

本文用 Taylor-Green 涡回避了高阶 DnHm 系列离散模型边界处理缺乏的现状,数值验证了 Ye 等^[25]提出的离散模型的精度受到模型的正值 性影响的推测.文章选择了矩精度为{2—6}的最紧 凑对称离散模型,以及具有较宽正值区间的 D2H3-2 模型作为分析对象,并与经典 D2Q9 模型进行比 较.根据涉及离散模型的正值区域,文章通过调整 时间步长设计了横跨各模型正值区域与非正值区 域的四个计算工况.分析各模型对四个计算工况数 值模拟的结果,文章得出了如下结论.

1) DnHm系列在正值区域内,均能维持不错的计算结果,但是并不能保证统一精度,即随着计算工况靠近正值区域上限计算精度会随之下降.在非正值区域计算时,模型的表现受模型是否满足Galilean不变性影响.具备Galilean不变性的模型,其在非正值区域上也具有一定的计算稳定性,并未出现间断式数值表现变化.而不具备Galilean不变性的模型,其计算精度在非正值区域存在间断式变化,即非正值区域计算直接发散.

2) 对于 DnHm 系列模型, 矩精度的影响主要 体现在是否满足 Galilean 不变性. 对于不满足 Galilean 不变性模型, 除了其在非正值区域数值精度存在间 断式变化外, 其正值区域内精度也差于正值区域更 小的高阶模型. 而对于满足 Galilean 不变性的模 型, 矩精度影响不再显著, 其数值表现主要取决于 正值区域.

3) 对于满足 Galilean 不变性的模型, 在相同 计算工况下, 模型精度与模型正值区域正相关, 即 模型正值区域越宽计算结果精度越好. 鉴于模型正 值性仅适合分析相同计算工况模型的相对数值精 度表现, 本文探索了 Δu值与κ值用于衡量格子 Boltzmann 方法数值表现的可能性, 从分析结果来 看, 两者并不具备表征能力.

4) D2H2 模型与经典的 D2Q9 模型有着非常 一致的精度表现,尽管稳定性略有不如.而高阶 DnHm模型在稳定性和计算精度上都优于 D2Q9 模型.特别是 D2H3-2 模型,在所有本文涉及的 DnHm模型中,具有最佳的稳定性和精度,是值得 深入研究的模型.

平衡分布正值性对计算的影响可以从粒子分 布需保持正值得到解释:离散模型对于 Maxwell 分布全局正值性的破坏导致模型仅在有限范围有 效,该范围影响着模型的计算表现.需要指出的是, 该有限范围并不等同于模型正值区域,其原因是离 散模型在正值区域内也仅为 Maxwell 分布的近似. 因此计算中,模型正值区域内的精度并不一致.而 正值性与矩精度影响对比分析显示,三阶 Hermite 多项式展开近似即能很好近似 Maxwell 分布函数 形状.另外,本文对于离散模型的分析并不考虑模 型间 *Ma*数一致性问题,即计算工况在不同模型 下 *Ma*数并不相同.对于需要严格保持 *Ma*数一致 性的计算问题,相关结论还需进一步验证分析,本 文在此不过多展开.

总结而言,本文通过数值分析首次系统性梳理 了离散模型正值性对计算影响,并与矩精度进行对 比分析.文章证实了正值性对计算的影响,确认通 过提升模型正值性改善计算的可行性,为 pGHQ 离散方案中可行方案筛选与未来模型进一步改进 提供了方向.

参考文献

[1] Ammar S, Pernaudat G, Trepanier J 2017 J. Comput. Phys.

343 73

- [2] Li Q, Luo K H, Kang Q J, He Y L, Chen Q, Liu Q 2016 Prog. Energ. Combust. 52 62
- [3] Shan X W 2010 Phys. Rev. E 81 045701
- [4] Shan X W, Chen H D 1993 Phys. Rev. E 47 1815
- [5] Sheikholeslami M, Gorji-Bandpy M, Ganji D D 2014 Powder Technol. 254 82
- [6] Zhang X L, Xiao L Z, Shan X W, Guo L 2014 Sci. Rep. 4 4843
- [7] Shan X W 2011 IMA J. Appl. Math. 76 650
- [8] Kang Q J, Zhang D X, Chen S Y, He X Y 2002 *Phys. Rev. E* 65 036318
- [9] Mountrakis L, Lorenz E, Malaspinas O, Alowayyed S, Chopard B, Hoekstra A G 2015 J. Comput. Sci. 9 45
- [10]~ Ladd A J C, Verberg R 2001 J. Stat. Phys. 104~1191
- [11] Chopard B, Ouared R, Deutsch A, Hatzikirou H, Wolf-Gladrow D 2010 Acta Biotheor. 58 329
- [12] Hirabayashi M, Ohta M, Rjfenacht D A, Chopard B 2003 Phys. Rev. E 68 021918
- [13] Latt J, Chopard B 2007 Int. J. Mod. Phys. C 18 619
- [14] Yu H D, Luo L S, Girimaji S S 2006 Comput. Fluids **35** 957
- [15] Yu H D, Girimaji S S, Luo L S 2005 J. Comput. Phys. 209 599
- [16] He X Y, Chen S Y, Doolen G D 1998 J. Comput. Phys. 146 282
- [17] He X Y, Luo L S 1997 Phys. Rev. E 56 6811
- [18] Ye H F, Kuang B, Yang Y H 2019 Chin. Phys. B 28 014701
- [19] Dellar P J 2014 J. Comput. Phys. 259 270
- [20] Nie X B, Shan X W, Chen H D 2008 EPL-Europhys. Lett. 81 34005
- [21] Hazi G, Kavran P 2006 J. Phys. A 39 3127
- [22] Shan X W 2016 J. Comput. Sci. 17 475
- [23] Shan X W 2010 Phys. Rev. E 81 036702
- [24] Shim J W 2013 Phys. Rev. E 87 013312
- [25] Ye H F, Gan Z C, Kuang B, Yang Y H 2019 Chin. Phys. B 28 054702
- [26] Shan X W, He X Y 1998 Phys. Rev. Lett. 80 65

Effect of equilibrium distribution positivity on numerical performance of lattice Boltzmann method^{*}

Ye Huan-Feng^{1)†} Jin Di¹⁾ Kuang Bo¹⁾ Yang Yan-Hua¹⁾²⁾

1) (School of Nuclear Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

2) (State Power Investment Central Research Institute Nuclear Power Software Development Center, Beijing 100029, China) (Received 26 April 2019; revised manuscript received 6 August 2019)

Abstract

Traditionally, the numerical performance of the lattice Boltzmann method is mainly determined by the moment degree of a discrete equilibrium distribution. The equilibrium distribution positivity is merely considered as an ancillary property which is used to constrict the numerical configuration. With the newlydeveloped partial Gaussian-Hermite quadrature scheme, the positivity of equilibrium distribution is validated as an independent property like moment degree which can be adjusted by discrete velocities. Researchers speculated that the positivity should also be significant for the numerical performance by the lattice Boltzmann method and can be used to improve the performance. Comparing with the classical improvement through moment degree, the positivity approach will not bring additional computation. However, due to the lack of boundary treatment, the speculation has not been validated by detailed numerical simulations. In this paper, through employing a periodic case, the Taylor-Green vortex, to avoid the boundary issue, we in depth analyze the numerical effect of the model positivity, including the numerical accuracy in the model positive range, the influence of positivity on the numerical performance, and the significance comparison between positivity and moment degree. The results show that for a given model, the numerical accuracy is not consistent in the whole positive range. As the configuration is close to the border of positive range, the accuracy will degrade though it is still acceptable. The numerical performance of a model depends on both moment degree and positivity. The role that the moment degree plays lies mainly in the qualification of a model on Galilean invariance. Once a model fulfills the Galilean invariance, its numerical performance is solely dependent on the positivity. Hence, the improvement approach through modifying the model positivity is a viable solution, and a Galilean invariant model with wider positive range does possess a better numerical performance regardless of its moment degree. Furthermore, based on the numerical results in this paper, all DnHm models with high moment degree are better than the classical D2Q9 model. Of the above models, the D2H3-2 model has the best performance and deserves to be further studied

Keywords: lattice Boltzmann, discrete model, moment degree, positivity

PACS: 47.11.-j, 02.70.-c

DOI: 10.7498/aps.68.20190624

^{*} Project supported by the National Science and Technology Major Project of the Ministry of Science and Technology of China (Grant No. 2017ZX06002002).

[†] Corresponding author. E-mail: huanfye@163.com