arXiv:2302.04741v1 [physics.flu-dyn] 9 Feb 2023

采用格子玻尔兹曼方法对热可压缩流进行体力建模

李作旭和单晓文†
南方科技大学力学与航空航天工程系，
深圳 518055 ，中国

（收到日期：xx；修订日期：xx；接受日期：xx）

格子玻尔兹曼方法（LBM）中的体力建模已在不可压缩极限下得到广泛研究，但针对热可压缩流的讨论却很少。本文提出了一种在格子玻尔兹曼方法中引入力体的系统方法，该方法适用于热可压缩流和非平衡流动。具体而言，本文给出了一种针对能量方程具有二阶时间精度的 LBM 力项格式。该格式的新颖之处和关键所在是引入了力项的三阶矩贡献。通过 Chapman-Enskog分析可知，缺少这一贡献会导致热流出现误差，该误差与马赫数的平方成正比，并与温度变化呈线性关系。数值模拟验证了理论结果，并证明了三阶矩贡献的必要性。

关键词：格子玻尔兹曼方法

1. 引言

自然界和工程实践中广泛存在受体力作用的流动。例如，瑞利-贝纳德流中的重力诱导自然对流、受离心力和科里奥利力影响的旋转参考系中的流动、受电磁力影响的磁流体，以及其他许多流动。在快速发展的格子玻尔兹曼方法（LBM）中，正确引入体力尤为重要，因为体力也用于模拟粒子间相互作用，从而产生多相流的丰富现象（Shan与Chen 1993；He 等 1998*b*）。

虽然在流体动力学方程和玻尔兹曼方程中处理体力相当直接，但对于格子玻尔兹曼方法而言，经过大量研究并提出了十几种方案后，体力处理仍然是一个不容忽视、有时甚至颇具争议的问题（Mohamad与Kuzmin 2010；Bawazeer 等 2021）。可以说，难点在于格子玻尔兹曼方法从一开始就是作为一种离散动理学模型发展起来的，其设计是为了事后在宏观层面呈现Navier-Stokes-Fourier热流体力学。它缺乏一种第一性原理理论来规定离散分布函数在外力场中的演化。此外，从动力学理论的角度来看，构型-速度相空间被同时离散化，这使误差分析变得复杂。

早期的一种设想由Shan与Chen (1993提出：在碰撞项中平移平衡速度，以补偿动量变化；这是体力产生的首要阶效应。这种方法仅对离散分布函数的零阶和一阶矩施加条件。尽管在简单流动中相当有效，但在需要详细模拟体力效应的应用中，却出现了一些微妙问题。例如

† 通信邮箱：shanxw@sustech.edu.cn

多相流体就是一例，其中速度平移格式会导致平衡密度对弛豫时间产生不符合物理规律的依赖（Yu与Fan 2009）。Sbragaglia 等人(2009)通过同时平移温度，消除了平移速度导致的能量方程误差。Guo等人（2002）采用待定系数法，并将通过Chapman-Enskog计算得到的宏观方程与Navier-Stokes方程相匹配，提出了一种消除时空离散化所致离散格子效应的格式；该格式应用于多相模型时，也消除了对弛豫时间不符合物理规律的依赖。这类方法（另见Buick与Greated (2000）；Ladd与Verberg(2001）都依赖于与流体动力学方程进行事后匹配；应用于更复杂的碰撞模型和更高阶的流体动力学近似时，这种做法会变得繁琐难行。

另一种策略是从玻尔兹曼方程的体力项 $\boldsymbol{g}\cdot\nabla_\xi \mathrm{f}$ 入手。He *et al.* （1998*a*）用麦克斯韦-玻尔兹曼平衡态 $\mathrm{f}^{(0)}$ 近似 f，并采用梯形法则进行积分，以推进一个时间步。为消除隐式性，引入了一个辅助变量。Martys*et al.* （1998）通过考察体力的厄米展开指出，这种近似在二阶矩上是精确的。Kupershtokh （2004）注意到 $\nabla_\xi \mathrm{f}^{(0)} = -\nabla_u \mathrm{f}^{(0)}$，因此提出了精确差分法（EDM），将体力的作用建模为 $\mathrm{f}(0)(\rho,\boldsymbol{u}+\boldsymbol{g}\Delta t) - \mathrm{f}(0)(\rho,\boldsymbol{u})$，从而正确地将一个局部平衡态推进到具有平移速度的另一个平衡态。然而，该方法完全忽略了分布函数非平衡部分的影响。在这两种方案中，都对时空离散化进行了细致处理，以达到二阶精度。

尽管许多研究者已从理论上分析并通过数值方法考察了现有加力格式之间的差异、相似性及准确性（Kupershtokh 等2009；Mohamad与Kuzmin 2010；Huang 等2011；Silva与Semiao 2012；Li 等2012），究竟哪种格式最准确仍无定论，因为结果往往取决于可压缩性、稳态性等流动条件。造成差异的可能原因包括分布函数、碰撞项或体力项展开不足，这些因素都会导致恢复出的宏观方程中出现不同的误差项。更重要的是，随着格子玻尔兹曼方法扩展至热可压缩流，现有研究主要关注质量方程和动量方程的恢复，而除少数研究外（Sbragaglia等2009），很少讨论体力对能量方程的影响。

近来，研究者分两个独立步骤，运用连续介质中的动力学理论重新表述了格子玻尔兹曼方法（Shan& He 1998；Shan 等2006）。首先，将BGK模型方程投影到由厄米多项式张成的有限维希尔伯特空间中。选取一组构成高斯-厄米求积公式的离散速度坐标，并在这些速度处计算BGK方程，即可得到构形空间中一组离散分布函数的动力学方程；这些方程保留了连续分布函数的矩，因此也保留了BGK方程的流体动力学特性。其次，对离散分布函数方程进一步进行空间和时间离散化，从而得到格子玻尔兹曼方程。体力项的速度空间离散化只需将其展开为厄米多项式，Li 等(2022年)表明，对体力项的二阶厄米展开采用二阶时间积分，可以先验地恢复先验地力格式Guo等(2002年)。此外，该方法具有普适性，因此可应用于更高阶的矩展开，从而导出热动力学和非平衡动力学。

本文提出了一种系统的体力项离散化方案，该方案在空间和时间上均为二阶精度，且适用于任意阶矩。特别是，本文明确给出了能量方程中的相关力项，并通过Chapman-Enskog分析得出了因力项展开不足而导致的热流误差。数值验证表明，在温度变化剧烈的流动中，力项中的三阶矩贡献具有不可忽略的影响。本文其余部分

安排如下：第 2 节介绍如何系统地推导格子玻尔兹曼方法中的力项。本文推导了力项的三阶展开，并通过 Chapman-Enskog分析阐明了其在能量方程中的必要性。第 3 节介绍数值验证与分析。第 4 节将进行进一步讨论，

2. 力项的矩展开

我们首先简要回顾 LBM 的动理学理论表述。从带有 BGK 碰撞算子的玻尔兹曼方程出发

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\boldsymbol{\xi}\cdot\nabla f+\boldsymbol{g}\cdot\nabla_{\xi}f=\Omega(f)=-\frac{1}{\tau}\left[f-f^{(0)}\right], \tag{2.1}$$

其中， $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{\xi}$ 分别表示物理空间和速度空间中的坐标，t 表示时间，f ($\boldsymbol{x}$,$\boldsymbol{\xi}$,t) 表示单粒子分布函数， $\boldsymbol{g}$表示体力产生的加速度， ∇_{ξ} 表示速度空间中的梯度，Ω 表示碰撞项，τ 表示弛豫时间，$f^{(0)}$ 表示麦克斯韦-玻尔兹曼平衡分布函数：

$$f^{(0)}=\frac{\rho}{(2\pi)^{D/2}}\exp\left[-\frac{c^2}{2\theta}\right], \tag{2.2}$$

其中，D 为空间维数， $\boldsymbol{c}=\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{u}$ 和 $c^2=\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{c}$。流体密度 ρ、速度 $\boldsymbol{u}$和温度θ均为分布函数的速度矩

$$\{\rho,\rho\boldsymbol{u},D\rho\theta\}=\int f\left\{1,\boldsymbol{\xi},c^2\right\}d\boldsymbol{\xi}. \tag{2.3}$$

通过首先将方程（2.1）投影到由厄米多项式张成的有限维函数空间，再在离散速度处求值，即可将 LBM 表述为速度空间离散化；这些离散速度构成速度空间中的高斯-厄米求积公式（Grad 1949；Shan & He 1998；Shan 等人 2006年）。后一项要求确保离散分布函数的取值能够精确保留主导速度矩。该表述中的一个关键步骤是将方程（2.1）中的所有项展开为有限埃尔米特级数。假设 f 在实验室参考系中具有如下展开形式

$$f_N(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\xi},t)=\omega(\boldsymbol{\xi})\sum_{n=0}^{N}\frac{1}{n!}\boldsymbol{a}^{(n)}(\boldsymbol{x},t):\mathscr{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}), \tag{2.4}$$

其中，N 为展开阶数，‘:’ 表示两个张量之间的完全缩并， $\boldsymbol{a}^{(n)}$($\boldsymbol{x}$,t) 为展开系数，其表达式为

$$\boldsymbol{a}^{(n)}(\boldsymbol{x},t)=\int f_N(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\xi},t)\mathscr{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi})d\boldsymbol{\xi}. \tag{2.5}$$

体力项的相应展开由Martys 等人(1998年)给出，如下：

$$F(\boldsymbol{\xi})\equiv-\boldsymbol{g}\cdot\nabla_{\xi}f_N=\omega(\boldsymbol{\xi})\sum_{n=1}^{N+1}\frac{1}{n!}n\boldsymbol{g}\boldsymbol{a}^{(n-1)}:\mathscr{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}), \tag{2.6}$$

其中 $\boldsymbol{g}\boldsymbol{a}^{(n-1)}$ 是一个秩为n的对称张量，表示 对称积 运算 $\boldsymbol{g}$ 与$\boldsymbol{a}^{(n-1)}$之间的结果。注意到 $\boldsymbol{a}^{(0)}=\rho$且 $\boldsymbol{a}^{(1)}=\rho\boldsymbol{u}$，方程（2.6）中的前两项可计算为

$$F(\boldsymbol{\xi})\cong\omega\rho\left[\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{\xi}+(\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{\xi})(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\xi})-\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{u}\right]. \tag{2.7}$$

我们注意到，现有的大多数力格式都基于上述表达式（Li 等人 2022年）。为将体力扩展到更高阶矩，可使用方程（2.5）计算高阶项，例如

$$\boldsymbol{a}^{(2)}=\int f_N\left(\boldsymbol{\xi}^2-\boldsymbol{\delta}\right)d\boldsymbol{\xi}=\rho\left(\boldsymbol{u}^2-\boldsymbol{\delta}\right)+\int f_N\boldsymbol{ccd}\boldsymbol{\xi}. \tag{2.8}$$

最后一项是动量通量密度张量，它可以分解为法向压力 $\rho\boldsymbol{\delta}$ 和无迹偏应力张量 $\boldsymbol{\sigma}$，即

$$\int f_N\boldsymbol{ccd}\boldsymbol{\xi}=p\boldsymbol{\delta}-\boldsymbol{\sigma}. \tag{2.9}$$

与 $\mathrm{f}^{(0)}$ 的厄米展开进行比较，我们可以看出

$$\boldsymbol{a}^{(2)}=\boldsymbol{a}_0^{(2)}-\boldsymbol{\sigma}, \tag{2.10}$$

其中，$\boldsymbol{a}_0^{(n)}$ 表示 $\mathrm{f}_{(0)}$ 的厄米系数。利用 $\mathscr{H}(3)=\boldsymbol{\xi}^3-3\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\delta}$，可以得到三阶项

$$\begin{aligned}\boldsymbol{g}\boldsymbol{a}^{(2)}:\mathscr{H}^{(3)}=&\rho\left\{(\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{\xi})\left[(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\xi})^2-u^2+(\theta-1)(\xi^2-D-2)\right]-2(\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{u})(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\xi})\right\}\\&-(\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{\xi})\boldsymbol{\sigma}:\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}+2\boldsymbol{\sigma}:\boldsymbol{g}\boldsymbol{\xi}.\end{aligned} \tag{2.11}$$

这里可以作出两点说明。首先，等式右侧的第一项是 0 的贡献，与 u^2 或 $\theta-1$ 成$\boldsymbol{a}^{(2)}$正比。与 $\boldsymbol{\sigma}$ 成正比的各项则是分布函数非平衡部分的贡献。其次，体力以流体整体运动的形式产生动量和总动能，但不会产生任何热量，这一点可以从其热产生率看出

$$\int(\boldsymbol{g}\cdot\nabla_\xi f)\,c^2d\boldsymbol{\xi}=\boldsymbol{g}\cdot\int c^2\nabla_\xi f d\boldsymbol{\xi}. \tag{2.12}$$

积分　　通过分部积分，并注意到当 $\xi\to\infty$ 时，f 比 ξ 的任意次幂都更快地趋于零，我们得到

$$\int c^2\nabla_\xi f d\boldsymbol{\xi}=-\int f\nabla_\xi c^2 d\boldsymbol{\xi}=-2\int f(\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{u})d\boldsymbol{\xi}=0. \tag{2.13}$$

注意，对于截断后的 f_N，上述等式成立当且仅当 $\mathrm{N}\geqslant 2$。

一旦将其限制在有限维厄米空间中，公式（2.1）可进一步离散化，从而得到格子玻尔兹曼方程（Shan等 2006年）。设 w_i和 $\boldsymbol{\xi}_i$，其中 $i\in\{1,\cdots,d\}$分别为次数为 Q 的高斯-厄米求积公式的权重和节点，即对于任意次数不超过$p(\boldsymbol{\xi})$且不超过Q的多项式，我们有

$$\int\omega(\boldsymbol{\xi})p(\boldsymbol{\xi})d\boldsymbol{\xi}=\sum_{i=1}^{d}w_i p(\boldsymbol{\xi}_i). \tag{2.14}$$

对于公式（f_N）中的 2.4，f_N/ω 是一个次数为 N 的多项式。若 $Q\geqslant 2N$，公式（2.5）可化为求和形式

$$\boldsymbol{a}^{(n)}=\int\omega\left[\frac{f_N}{\omega}\mathscr{H}^{(n)}\right]d\boldsymbol{\xi}=\sum_{i=1}^{d}f_i\mathscr{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_i),\quad\forall n\leqslant N, \tag{2.15}$$

其中，f_i 是定义为如下形式的离散分布函数

$$f_i(\boldsymbol{x},t)\equiv\frac{w_i f_N(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\xi}_i,t)}{\omega(\boldsymbol{\xi}_i)},\quad i\in\{1,\cdots,d\}. \tag{2.16}$$

特别地，作为式（2.15）的特例，式（2.3）变为

$$\rho=\sum_i f_i,\quad\rho\boldsymbol{u}=\sum_i f_i\boldsymbol{\xi}_i,\quad\rho\left(u^2+D\theta\right)=\sum_i f_i\xi_i^2. \tag{2.17}$$

通过将式（2.1）取在 $\boldsymbol{\xi}_i$处的值，可以得到$_i$ 的控制方程

$$\frac{\partial f_i}{\partial t}+\boldsymbol{\xi}_i\cdot\nabla f_i=\Omega_i(f)+F_i,\quad i\in\{1,\cdots,d\}. \tag{2.18}$$

其中 $F_i\equiv w_iF(\boldsymbol{\xi}_i)/\omega(\boldsymbol{\xi}_i)$。结合式（2.8）和（2.11），离散体力截至三阶矩为

$$F_i=w_i\rho(\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{\xi}_i)\left\{1+\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\xi}_i+\frac{1}{2}\left[(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\xi}_i)^2-u^2+(\theta-1)(\xi_i^2-D-2)\right]\right\}-w_i\rho(\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{u})(1+\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\xi}_i)$$
$$-\frac{w_i}{2}\left[(\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{\xi}_i)\boldsymbol{\sigma}:\boldsymbol{\xi}_i\boldsymbol{\xi}_i-2\boldsymbol{\sigma}:\boldsymbol{g}\boldsymbol{\xi}_i\right]. \tag{2.19}$$

进一步通过采用二阶格式对式（2.18）进行积分，对时空进行离散（He 等人1998年a；Li 等人2022年），得到含体力项的格子玻尔兹曼方程

$$f_i(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\xi},t+1)-f_i(\boldsymbol{x},t)=-\frac{1}{\hat{\tau}}\left[f_i-\overline{f_i^{(0)}}\right]+\left[1-\frac{1}{2\hat{\tau}}\right]\overline{F_i}, \tag{2.20}$$

其中 $\hat{\tau}=\tau+1/2$, $\mathrm{f}_{(0)i}\equiv \mathrm{w}_i\mathrm{f}_{(0)N}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\xi}_i,\mathrm{t})/\omega(\boldsymbol{\xi}_i)$，其中 $\mathrm{f}_{(0)N}$是 $\mathrm{f}^{(0)}$ 的有限厄米展开。上划线表示采用时间步中点处的密度、速度和温度值进行计算。注意到常规碰撞算子和体力项均守恒质量和热量，它们分别为 ρ、$\boldsymbol{u}+\boldsymbol{g}/2$ 和 θ。时间步中点处的偏应力张量 $\overline{\boldsymbol{\sigma}}$ 可通过下式计算：

$$\overline{\boldsymbol{\sigma}}=-\left(1-\frac{1}{2\hat{\tau}}\right)\left\{\sum_i\left[f_i-\overline{f_i^{(0)}}\right](\boldsymbol{\xi}_i-\boldsymbol{u})^2-\frac{\rho g^2}{2}\right\}. \tag{2.21}$$

然而，在准平衡态下，$f-f^{(0)}\ll f_{(0)}$，正如后文的数值验证和 Chapman-Enskog分析所示，上述贡献可以全部忽略。我们注意到，对于任意阶的展开，为了计入分布函数的高阶矩，都可以得到类似于式（2.19）的表达式。特别是，如果只保留二阶矩贡献，则式（2.20）与 Guo 等人 (2002年）提出的力项格式完全相同。

现在，我们通过 Chapman-Enskog分析来分析力项的宏观效应。正如 Shan等人 (2006年) 此前所示，采用厄米展开分布函数和 BGK 碰撞算子进行 Chapman-Enskog 渐近分析，可得到不同阶厄米系数之间的递推关系。特别是对于最低阶近似（Navier-Stokes），有

$$\boldsymbol{a}_1^{(n)}=-\tau\left[\frac{\partial\boldsymbol{a}_0^{(n)}}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{a}_0^{(n+1)}+n\nabla\boldsymbol{a}_0^{(n-1)}-n\boldsymbol{g}\boldsymbol{a}_0^{(n-1)}\right]. \tag{2.22}$$

众所周知，上述方程能够得到正确的 Navier-Stokes-Fourier 方程（Huang 1987；Shan等人 2006年），通过考察右端（r.h.s.）最后一项的贡献，可以分析力项展开不足所导致的宏观方程误差。在大多数力格式中，该项仅保留至 $n\leqslant 2$ 阶。虽然这对动量方程而言是准确的，却会导致第一修正项的第三个 Hermite 系数出现误差 $\boldsymbol{a}_1^{(3)}=-3\tau\boldsymbol{g}\boldsymbol{a}_0^{(2)}$，进而造成以下热流误差

$$\begin{aligned}\boldsymbol{q}_{err}&=\frac{1}{2}\int f_{err}c^2\boldsymbol{c}d\boldsymbol{\xi}=\frac{1}{12}\boldsymbol{a}_1^{(3)}:\int\omega(\boldsymbol{\xi})\mathscr{H}^{(3)}(\boldsymbol{\xi})c^2\boldsymbol{c}d\boldsymbol{\xi}\\&=-\frac{1}{2}\rho\tau\left\{[u^2+(\theta-1)(D+2)]\boldsymbol{g}+2(\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{u})\boldsymbol{u}\right\},\end{aligned} \tag{2.23}$$

该误差关于 u为二阶，关于 $\theta-1$为一阶，在热效应强烈的流动中不可忽略。然而，方程（2.19）中的非平衡部分 $-3\boldsymbol{g}\boldsymbol{\sigma}$对热流的贡献为

$$\boldsymbol{q}_{err}=\frac{1}{2}\tau\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{\sigma}\approx\frac{1}{2}\tau^{2}p\boldsymbol{g}\cdot\left[\nabla\boldsymbol{u}+(\nabla\boldsymbol{u})^{T}-\frac{2}{D}(\nabla\cdot\boldsymbol{u})\boldsymbol{\delta}\right], \tag{2.24}$$

其量级为 $O(\tau^2)$，在连续介质流动中可以忽略，但在非平衡流动中可能产生显著影响。

3. 数值验证

为验证上述分析，我们进行了两项数值测试，即：横向重力作用下的可压缩泊肃叶流，以及离心力作用下两个同心圆柱之间的传热。这些流动之所以被选中，是因为其偏应力不会因构型而自动消失。在所有格子玻尔兹曼方法模拟中，平衡分布函数均展开至四阶，并采用二维九阶精度的 D2Q37求积规则（Shan 2016）。由于该模型包含多层离散速度，我们开发了一种多速率质量守恒边界条件（BC），相关内容将另行发表。就本文而言，结果对边界条件的实现方式并不敏感。

3.1. 横向加速度作用下的可压缩泊肃叶流

考虑均匀恒定重力 $\boldsymbol{g}=(g_x,g_y)$作用下两无限水平平板之间的二维稳态层流，其中 x 和 y 分别为水平方向和竖直方向。假设流动为稳态一维流动，速度仅沿 x 方向，且所有物理量均为 y 的函数。因此有 $u_y=0$，且 $\partial/\partial x=\partial/\partial t=0$。纳维–斯托克斯–傅里叶方程可化简为

$$-\mu\frac{\partial^{2}u_x}{\partial y^{2}}=\rho g_x,\quad \frac{\partial\rho\theta}{\partial y}=\rho g_y,\quad \text{and}\quad \mu\left(\frac{\partial u_x}{\partial y}\right)^{2}+\lambda\frac{\partial^{2}\theta}{\partial y^{2}}=0, \tag{3.1}$$

其中，ρ、u_x 和 θ 分别为密度、速度和温度，μ和 λ 分别为动力黏度和热导率，二者均假定为常数。在底部和顶部边界（分别位于 $y=0$ 和 H）上，对 u_x 和 θ施加狄利克雷边界条件

$$u_x|_{y=0}=U_b,\quad u_x|_{y=H}=U_t,\quad \theta|_{y=0}=\theta_b,\quad \theta|_{y=H}=\theta_t, \tag{3.2}$$

其中U_b、U_t 和 θ_b，θ_t 分别为底部和顶部边界处的切向速度和温度。由于式（3.1）难以进行解析求解，我们采用附录A中详述的有限差分格式作为参考解。

所有可压缩泊肃叶流的格子玻尔兹曼方法模拟均在 $L_x\times L_y$ 格子上进行，其中 $L_x=3$ 和 $L_y=150$。因此，通道高度为 $H=L_y c$，其中 $c\approx1.19698$ 为 D2Q37（Shan 2016）的格子常数。两侧壁面的速度均设为 $U_t=U_b=0$。为研究温度梯度的影响，针对 $\theta_b=1.0$、$\theta_t=1.1$ 和$\theta_b=0.7$、$\theta_t=1.4$进行了两组模拟，分别对应总横跨通道温度变化为 10% 和 100%。定义 $U_c=\rho_0 g_x H^2/8\mu$，当ρ和 θ 均匀时，它表示通道中心处的速度（同时也是相对于等温声速的马赫数）。相应的雷诺数为 $Re=\rho_0 U_c H/\mu$，其中ρ_0 为平均密度。设定 $U_c=1.5$、$Re=1800$ 和 $\rho_0=1$后，其他参数确定如下：$g_x=U_c^2/ReH$，$\mu=\rho_0 U_c H/Re$，以及$\lambda=c_p\mu/Pr$，其中，对于 BGK碰撞项，普朗特数 $Pr=1$，定压热容 $c_p=(D+2)/2$。为使 μ 和 λ 均保持为均匀常数，弛豫时间设为 $\tau=\mu/\rho\theta$。横向重力g_y方向向下，并设定为使 $g_y/g_x=-50$。

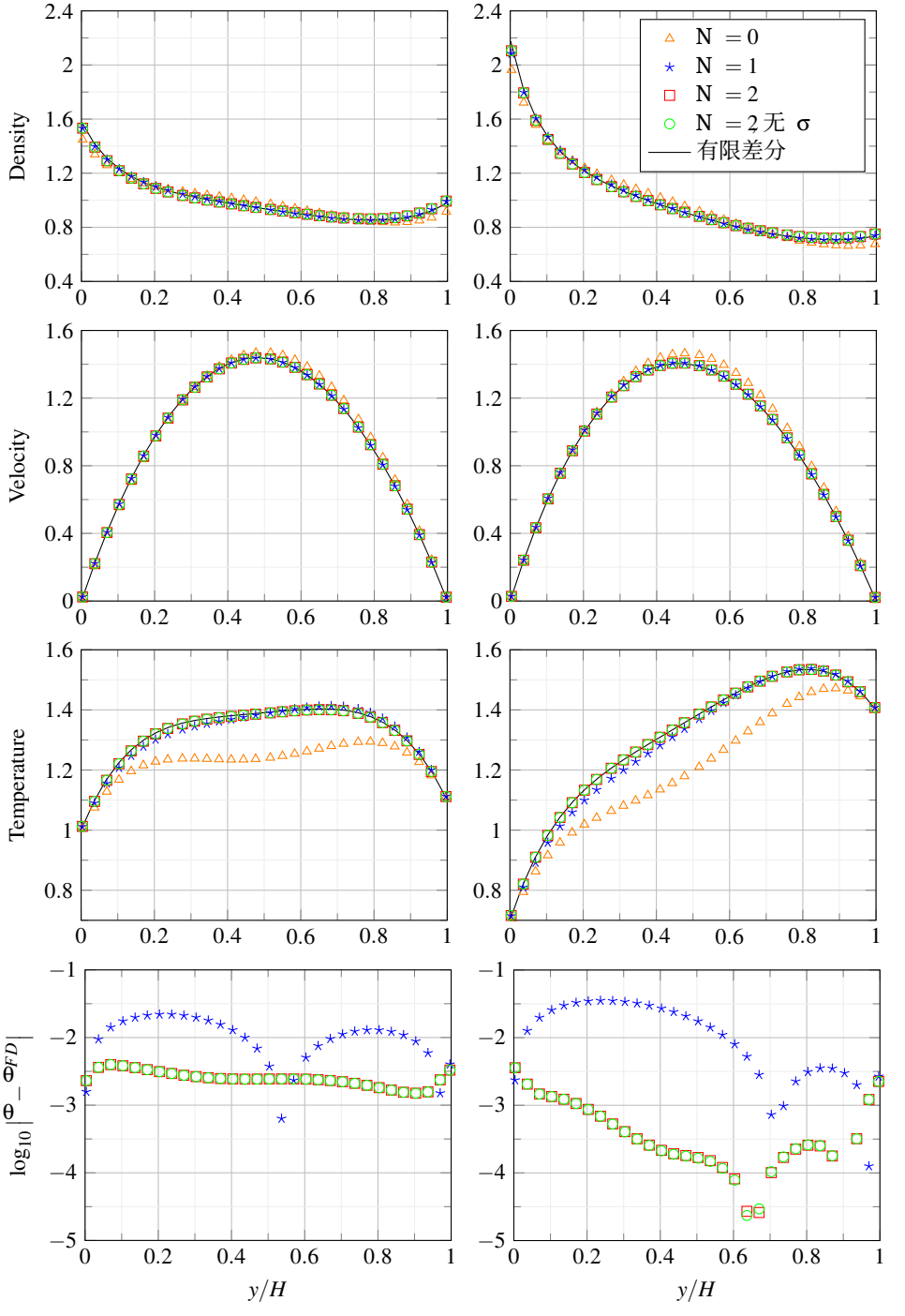

图1：具有横向重力和温度梯度的可压缩泊肃叶流。从上到下依次显示密度、速度、温度，以及由力项按对应于$N = 0$、1 和 2 阶展开后计算得到的温度误差，见方程（2.6）。同时还显示了作为参考的高精度有限差分解。左列为 $\theta_b = 1.0$，$\theta_t = 1.1$的结果，对应于 10% 的总温度变化；右列为 $\theta_b = 0.7$，$\theta_t = 1.4$的结果，对应于 100% 的总温度变化。

图1 展示了两组具有不同温度变化的模拟中，密度、速度、温度分布以及温度误差的分布。为展示力项中各阶矩的影响，我们将力项分别展开至三种不同阶数进行模拟，对应于式（2.6 = 0）中的 1 和 2。此外，对于N = 2，我们还进行了包含和不包含式（$\boldsymbol{\sigma}$ 2.19）中贡献的模拟。作为参考解，图中还展示了高分辨率（N = 450）有限差分结果。首先注意到，由于存在横向重力和温度梯度，密度和温度相对于中心线呈非对称分布。速度峰值也小于U_c，且不在中心处。温度变化越大，这些效应越明显。

与理论分析一致，恢复动量方程和内能守恒需要二阶（$N = 1$）力项。模拟结果清楚地表明，仅保留一阶力项（$N = 0$）会导致显著的整体偏差。更常用的二阶（$N = 1$）近似对密度和速度给出了令人满意的结果，这与式（2.22）的理论预测一致。然而，二阶解与参考解之间在温度分布上存在明显差异，在温度变化较大的情况下尤为显著。三阶（$N = 2$）解消除了这一差异，证实了式（2.19）中三阶贡献的正确性和必要性。此外，在所有测试案例中，偏应力张量对力项的贡献似乎可以忽略，这证实了上一节的Chapman-Enskog分析。

3.2. 离心力作用下同心圆柱之间的传热

第二个测试是两个保持不同温度、以相同角速度旋转的同心圆柱之间的二维传热，α。在旋转参考系中，假设流体处于静止状态，并受到大小为 $\alpha^2 R$ 的向心加速度，其中 R 为径向坐标。纳维–斯托克斯–傅里叶方程具有如下的一维解

$$\theta = \theta_i + (\theta_o - \theta_i)\frac{\ln R/R_i}{\ln R_o/R_i}, \quad \text{and} \quad \rho = \frac{\rho_i \theta_i}{\theta}\exp\left[\int_{R_i}^{R} \frac{\alpha^2 r}{\theta(r)} dr\right], \tag{3.3}$$

其中，ρ、 θ分别表示密度和温度，下标 i 和 o 分别表示内圆柱和外圆柱处的值。密度的参考解通过高精度数值积分求得。所需的平均密度为 $\bar{\rho} = \rho_0$，ρ_i 通过对整个区域内的密度进行积分获得。

格子玻尔兹曼方法模拟在 $L \times L$ 格子上进行，其中 $L = 250$。径向向心加速度为 $-\alpha^2 R$。半径比 R_o/R_i 设为 5，其中 $R_o = Lc/2$。以环形区域的宽度 $R_o - R_i$作为特征长度，并以中心线速度 $U_c \equiv \alpha(R_o + R_i)/2$作为特征速度，雷诺数定义为 $Re = \rho_0 \alpha(R_o^2 - R_i^2)/2\mu$，其中$\mu$ 为动力黏度。与前一种情况一样，弛豫时间设为 $\tau = \mu/\rho\theta$，因此 μ 为常数。需要注意的是，流体处于静止状态，中心线速度 U_c用于通过等温马赫数衡量可压缩性，而雷诺数仅起无量纲黏度的作用。由于旋转参考系中不存在流动，所有物理量均与雷诺数无关。

图 2 展示了采用不同阶数展开的力项计算得到的密度、温度径向分布及其相应误差。参数为：雷诺数 = 100，U_c =0。3，以及 $\rho_0 = 1$。针对 $\theta_i = 1$， $\theta_o = 1.1$进行了两次模拟；针对 $\theta_i = 1.4$， $\theta_o = 0.7$也进行了两次模拟。注意，在此情况下，第一阶和第二阶展开相同，因为 $\boldsymbol{u} = 0$。可以看到，如果省略三阶矩贡献，温度分布的误差会很显著，尤其是在温度变化较大的情况下。结果还清楚地表明，三阶

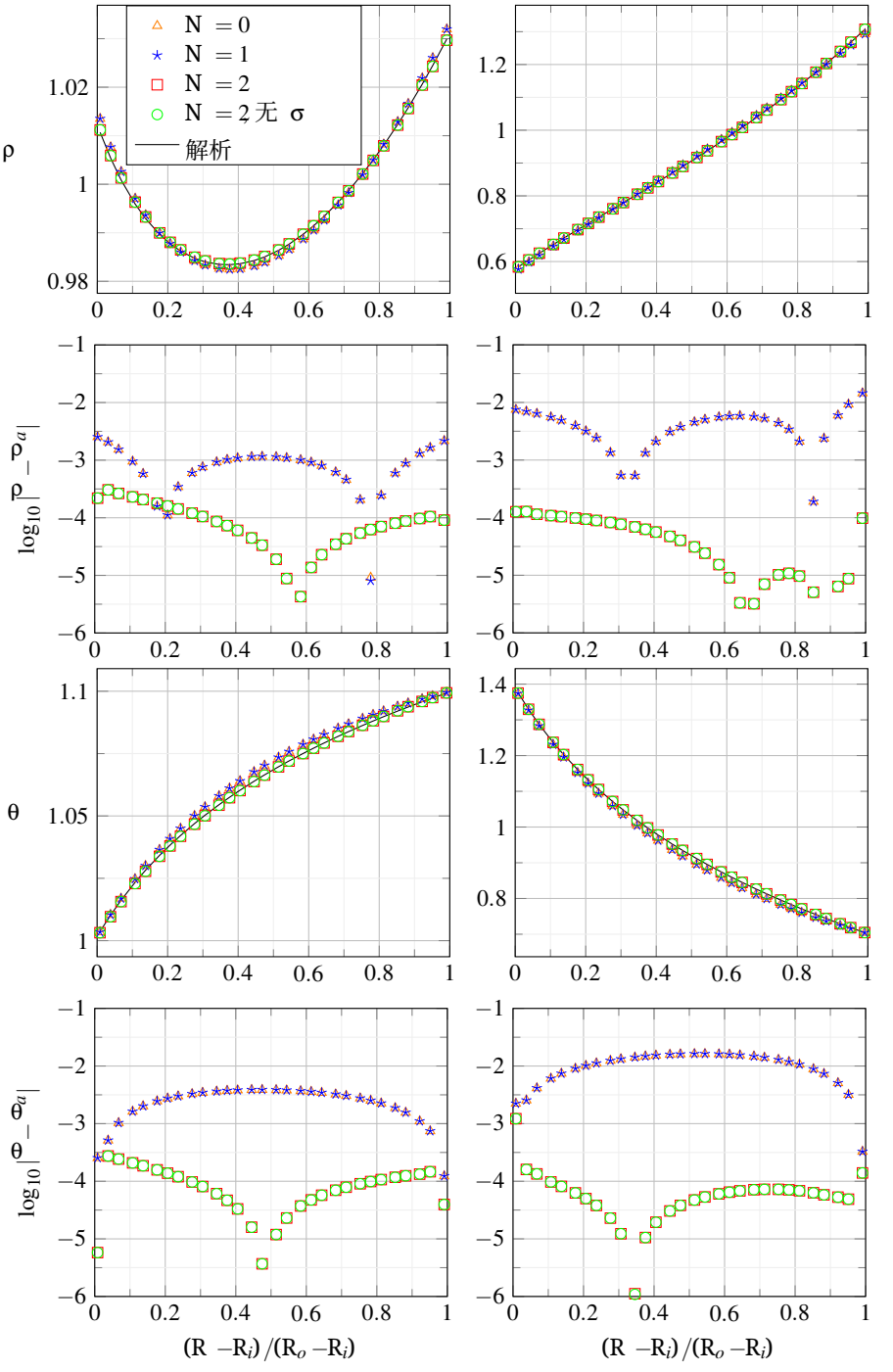

图 2：两个旋转同心圆柱之间的热传导。图中显示了密度和温度的径向分布，以及采用不同阶数展开的力项计算得到的相应误差。上标 a 表示解析解。左列显示 $\theta_i = 1$、$\theta_o = 1.1$ 的结果，右列显示 $\theta_i = 1.4$、$\theta_o = 0.7$ 的结果。

该贡献对于正确恢复能量方程是必要的。应力张量的贡献，$\boldsymbol{\sigma}$，在没有流体流动时会随着 $\boldsymbol{\sigma}$ 本身消失而消失。

4. 结论

总之，我们基于玻尔兹曼方程中力项的厄米展开，提出了一种在格子玻尔兹曼方法中引入体力的通用方法。具体而言，我们得到了适用于热可压缩流、具有二阶时间精度的新型 LBM 力项格式，其中包含力项的三阶贡献。通过 Chapman-Enskog分析，我们指出了常见做法中省略这一修正所导致的误差体现为热流误差。所有理论发现，包括新强迫项的正确性和必要性，均通过数值计算得到验证。

需要指出的是，本文方法既不依赖于平衡分布函数的形式，也不依赖于底层格子，并且可以直接扩展以纳入在非平衡流动中具有重要意义的高阶矩。为简便起见，本文采用了 BGK 碰撞模型。该方法也很容易适配更复杂的碰撞模型，例如谱多重弛豫时间模型。

附录A. 可压缩泊肃叶流的有限差分解

我们概述具有横向重力和温度梯度的稳态重力驱动可压缩泊肃叶流的一维有限差分解。沿通道高度，计算域划分为 N 个节点，其中 $\Delta y = H/(N-1)$。令 ρ_j, u_j, θ_j 分别表示第 j 个节点处的密度、速度和温度。对水平动量方程和能量方程采用二阶中心差分格式，对竖直动量方程采用一阶前向差分格式，将式（3.1）离散为：

$$u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1} = -\frac{g_x \Delta y^2}{\mu}\rho_j \qquad 2 \le j \le N-1, \qquad \text{(A 1}a\text{)}$$

$$\rho_{j+1}\theta_{j+1} - \rho_j\theta_j = \rho_j g_y \Delta y \qquad 1 \leqslant j \leqslant N-1, \qquad \text{(A 1}b\text{)}$$

$$\mu\left(u_{j+1} - u_{j-1}\right)^2 + 4\lambda\left(\theta_{j+1} - 2\theta_j + \theta_{j-1}\right) = 0 \qquad 2 \leqslant j \leqslant N-1. \qquad \text{(A 1}c\text{)}$$

狄利克雷边界条件规定

$$u_1 = U_b, \quad u_N = U_t, \quad \theta_1 = \theta_b, \quad \theta_N = \theta_t. \qquad \text{(A 2)}$$

质量守恒给出

$$\left(\frac{\rho_1}{2} + \sum_{j=2}^{N-1}\rho_j + \frac{\rho_N}{2}\right) = \rho_0(N-1). \qquad \text{(A 3)}$$

共有 $3N-2$ 个方程和 $3N-2$ 个未知数。由于上述离散方程是非线性且相互耦合的，因此采用迭代法，其中非线性项 $\mu(u_{j+1} - u_{j-1})^2$ 使用上一次迭代的变量进行计算。第 t 次迭代的方程可写为：

$$u_{j+1}^{t}-2u_{j}^{t}+u_{j-1}^{t}+\frac{g_x\Delta y^2}{\mu}\rho_j^t=0, \qquad 2\ 6\ j\ 6\ N\ -1, \tag{A 4a}$$

$$\rho_{j+1}^{t}\theta_{j+1}^{t}-\rho_j^t\left(\theta_j^t+g_y\Delta y\right)=0, \qquad 1\leqslant j\leqslant N-1, \tag{A 4b}$$

$$\mu\left(u_{j+1}^{t-1}-u_{j-1}^{t-1}\right)^2+4\lambda\left(\theta_{j+1}^{t}-2\theta_j^t+\theta_{j-1}^{t}\right)=0, \qquad 2\leqslant j\leqslant N-1, \tag{A 4c}$$

$$\left(\frac{\rho_1^t}{2}+\sum_{j=2}^{N-1}\rho_j^t+\frac{\rho_N^t}{2}\right)=\rho_0(N-1). \tag{A 4d}$$

方程（A4）是一个线性方程组，按以下过程求解。选择u 的初始猜测为：

$$u=-\frac{g_x}{2\mu}y(y-H)+\frac{U_t-U_b}{H}y+U_b, \quad y\in[0,H]. \tag{A 5}$$

温度场可由方程（A4c）求解。随后根据方程（A 4b）–（A4d）求解密度场，最后根据方程（A 4a）求解速度场。该过程迭代进行，直至收敛。

致谢

本研究得到国家自然科学基金委员会项目（92152107）、广东省科学技术厅项目（2020B1212030001）以及深圳市科技计划项目（KQTD20180411143441009）的支持。

利益声明

作者声明不存在利益冲突。

参 考 文 献

BAWAZEER, SALEH A., BAAKEEM, SALEH S. & MOHAMAD, A. A. 2021 《格子玻尔兹曼方法中力项格式的批判性综述：1993–2019》。Arch. Comput. Methods Eng. 28 (7), 4405– 4423. BUICK, JAMES M & GREATED, C A 2000 格子玻尔兹曼模型中的重力。《物理评论E》61 (5), 5307–5320. GRAD, HAROLD 1949 稀薄气体动力学理论。《纯粹与应用数学通讯》2 (4), 331–407. GUO, ZHAOLI, ZHENG, CHUGUANG & SHI, BAOCHANG 2002 格子玻尔兹曼方法中强迫项的离散格子效应。《物理评论E》65 (4), 046308. HE, XIAOYI, CHEN, SHIYI & DOOLEN, GARY D. 1998a 不可压缩极限下格子玻尔兹曼方法的新型热模型。《计算物理学杂志》146 (1), 282–300. HE, XIAOYI, SHAN, XIAOWEN & DOOLEN, GARY D. 1998b 非理想气体的离散玻尔兹曼方程模型。《物理评论E》57 (1), R13–R16. HUANG, HAIBO, KRAFCZYK, MANFRED & LU, XIYUN 2011 单相及 Shan- Chen 型多相格子玻尔兹曼模型中的强迫项。《物理评论E》84 (4), 046710. HUANG, KERSON 1987 《统计力学》，第2版。纽约：John Wiley & Sons。KUPERSHTOKH, ALEXANDER L. 2004 将体力项引入格子玻尔兹曼方程的新方法。见 Proeedings 5th Int. EDH Work.，第241–246页。普瓦捷。KUPERSHTOKH, ALEXANDER L., MEDVEDEV, DMITRY & KARPOV, D.I. 2009 格子玻尔兹曼方法中的状态方程。《Comput. Math. with Appl.》58 (5), 965–974. LADD, ANTHONY J. C. & VERBERG, ROLF 2001 颗粒-流体悬浮体系的格子玻尔兹曼模拟。《J. Stat. Phys.》104 (September), 1191–1251。

LI, Q., LUO, KAI H. & LI, X. J. 2012 多相流伪势格子玻尔兹曼模型中的力格式。《物理评论E》86 (1), 016709. LI, XUHUI, DUAN, WENYANG & SHAN, XIAOWEN 2022 格子玻尔兹曼方法的二阶力格式，arXiv: 2212.07494. MARTYS, NICOS S., SHAN, XIAOWEN & CHEN, HUDONG 1998 离散玻尔兹曼方程中外力项的评估。《物理评论E》58 (5), 6855–6857. MOHAMAD, A. A. & KUZMIN, ALEXANDR 2010 对格子玻尔兹曼方法中力项的批判性评估：自然对流问题。《国际传热传质杂志》53 (5-6), 990–996. SBRAGAGLIA, MAURO, BENZI, ROBERTO, BIFERALE, LUCA, CHEN, HUDONG, SHAN, XIAOWEN & SUCCI, SAURO 2009 具有自洽热流体动力学平衡的格子玻尔兹曼方法。《流体力学杂志》628, 299. SHAN, XIAOWEN 2016 格子玻尔兹曼方法中格子的数学结构。《计算机科学杂志》17, 475–481. SHAN, XIAOWEN & CHEN, HUDONG 1993 用于模拟多相多组分流动的格子玻尔兹曼模型。《物理评论E》47 (3), 1815–1819. SHAN, XIAOWEN & HE, XIAOYI 1998 求解玻尔兹曼方程时速度空间的离散化。《物理评论快报》80 (1), 65–68. SHAN, XIAOWEN, YUAN, XUE-FENG & CHEN, HUDONG 2006 流体动力学的动力学理论表示：超越纳维–斯托克斯方程的一种途径。《流体力学杂志》550, 413. SILVA, GONCALO & SEMIAO, VIRIATO 2012 格子玻尔兹曼方法中的一阶和二阶强迫展开：以人工可压缩形式再现等温流体动力学。《流体力学杂志》698, 282–303. YU, ZHAO & FAN, LIANG-SHIH 2009 一种基于相互作用势、采用自适应网格细化（自适应网格细化）的两相流模拟格子玻尔兹曼方法。《计算物理学杂志》228 (17), 6456– 6478。