浅水动力学的格子 Boltzmann 模拟^{*}

刘 峰 胡 非.

(中国科学院大气物理研究所 北京 100029;防化指挥工程学院 北京 102205) (中国科学院大气物理研究所 北京 100029)

建立了| 个格子 Boltzmann 模型,经过 Chapman-Enskog 展开可以恢复出守恒形式的浅 提要 水动力学方程组。理论分析和数值试验的结果都表明,本模型严格地满足质量守恒定律和动 量定理。数值模拟了| 维和二维溃坝流动,分别与理论解和文献值进行了对比,结果相当吻 合。本模型具有很好的并行计算性能,在海洋、大气等大规模数值计算领域有着广阔的发展前 景.

关键词 格子 Boltzmann 方法,浅水方程,守恒定律,并行计算 中图分类号 P731

格子 Boltzmann 方法(LBM) 是一种近年迅速发 展起来的计算流体力学方法, 与一般 CFD 方法不 同. 它的出发点不是基于连续流体的 Navier Stokes 方程,而是基于分子运动论的 Boltzmann 方程。 Chapman 等(1939) 证明了描述理想流体的 Euler 方 程和描述粘性流体的 Navier-Stokes 方程分别可以看 作是 Boltzmann 方程的零阶和一阶近似。原始的 Boltzmann 方程是复杂的积分 微分方程, 求解极其困 难, Bhatnager 等(1954) 提出著名的 BGK 近似, 简化 了碰撞项的计算;近年来 MacNamara 等(1988), Chen 等(1991), Qian 等(1992) 将 BGK 近似后的 Boltzmann 方程和格子气方法相结合,提出格子 Boltzmann 模 型,这是一种离散运动论模型,有限的粒子在格点上 沿着既定的轨线迁移和碰撞,通过分布函数的演变 来描述各种复杂的流体力学现象。虽然原始的 Boltzmann 方程是针对气体运动的, 但是由干流体运 动规律的相似性,格子 Boltzmann 方法已经被推广并 应用到计算流体力学的多个领域:可压缩流动、不可 压缩流动、多相流动等(Shiyi Chen et al, 1998),都得 到了和原有计算方法结果相当甚至更好的结果。关 于格子 Boltzmann 方法的详细介绍,请参看综述文献 Shivi Chen 等(1998)。到目前为止,格子 Boltzmann 方法在大气、海洋、河流、湖泊等大尺度流体运动中 的应用还不多见。程永光(2000) 曾经用格子 Boltzmann 方法模拟了溃坝现象,但是所用的模型是一维 的。作者已经建立了一个描述正压大气的模型 (刘峰等,2003),成功地模拟了大气运动中的气旋 等现象。由于正压大气方程本质上就是浅水方程 (谭维炎, 1999), 故在这一模型的基础上加以修改, 并应用于浅水动力学的模拟。

1 从离散动力学模型还原出浅水方程组

首先证明,从离散动力学模型可以精确地还原 出浅水方程组。

由于浅水动力学方程组不同于普通的二维流体 力学方程,它考虑均质不可压缩的流体,因而方程中 不出现密度,而代之以自由面高度 h,侧面压力项是 由于流体质量水平分布不均匀的重力效应引起的, 形式上也不同于普通流体力学方程中的压强。因 此。必须重新建立适合于描述浅水运动的模型。作 者采用的格子 Boltzmann 模型是用米字形格子,9种 粒子,可以沿8个方向移动,也可以静止不动,如图 1 所示。离散动力学方程如下:

 $f_i(t + \&t, x_a + c_{ia}\&t) - f_i(t, x_a) = \Omega_i + F_i\&t \quad (1)$ 其中

 $\Omega_{i} = -\frac{1}{T} (f_{i}(t, x_{\alpha}) - f_{i}^{eq}(t, x_{\alpha})), i = 0, 1, ..., 8$

为了描述方便,对空间坐标采用了张量形式的 记法。其中粒子分布函数 f_i 的定义是:在时刻 t_i 位

收稿日期: 2003-01-28,收修改稿日期: 2003-09-26 1994-2012 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

^{*} 中国科学院知识创新工程资助项目, KZCX2-204 号。刘 峰,博士, E-mail: liuf@mail lapc ac cn

置 x_a 处, 运动速度为 c_{ia} 的粒子数密度。指标 i 表示 粒子的种类, f_i^{eq} 是局地平衡分布函数, a = x, y 表示 两个坐标方向, & 是时间步长, τ 是无量纲弛豫时间 系数, F_i 是考虑外力项, 如地形坡度力, 底摩擦力, 风应力, 科氏力等, 满足 $\sum_i F_i c_{ia} = hF_a$, 其中 F_a 为单 位质量流体上作用的合外力, F_i 还应满足 $\sum F_i = 0$

才不会破坏质量守恒。本文中取 $F_i = \frac{f_i}{F_{ao}}$



图 1 离散格子及粒子运动轨迹 Fig. 1 Discrete lattice and the trajectory of particles

Ω_i 为碰撞项, 这里采用的是 BGK 近似。在每个 格点上, 粒子从周围 8 个方向迁移过来并发生碰撞, 各种粒子的分布函数(即各种粒子所占的比例) 也 发生变化, Ω_i 描述了由于碰撞所引起分布函数的变 化。整个碰撞过程满足质量和动量的守恒, 即

$$\sum_{i} \Omega_{i} = 0, \quad \sum_{i} \Omega_{i} c_{i\alpha} = 0 \quad (2)$$

$$\int h = \sum f_{i}$$

$$h = \sum_{i}^{n} f_{i} c_{i\alpha}$$

$$(3)$$

其中 h 是自由面距离水底面的高度, u_{α} 是宏观速度 分量。

利用式(2) 容易得到
$$\begin{cases} h = \sum_{i} f_{i}^{eq} \\ hu_{\alpha} = \sum_{i} f_{i}^{eq} c_{i\alpha} \end{cases}$$
(4)

通常的格子 Boltzmann 模型事先都作了无量纲 化处理, 以便在分析过程中正确判断各项的相对大 小以决定取舍。本模型中取参考量 L, T, C, H, 其中 L, T 分别为流体运动的空间和时间特征尺度, 且满 足L = TC, H 是参考厚度, $C = |c_{ia}| = \sqrt{3gH}$ 是粒 子运动的速度, 进行无量纲化:

$$t = t/T$$
, $x_{\alpha} = x_{\alpha}/L$, $h = h/H$, $u_{\alpha} = u_{\alpha}/C$

纲量的"-"号。

由于实行了无量纲化处理,时间步长 & 就成了 一个小量。

原始 Boltzmann 方程是源于气体分子运动论的 观点,理想气体的平衡分布函数是 Maxwell 分布,离 散 Boltzmann 模型中的平衡分布函数则是源自 Maxwell 分布对速度的二阶Tailor展开(Shiyi Chen *et al*, 1998)。当然,用离散模型来逼近连续模型,需要 重新确定系数,一般的,取如下形式的平衡分布函 数:

$$f_{i}^{eq} = w_{i}h(A_{0} + A_{1}c_{i\alpha}u_{\alpha} + A_{2}c_{i\alpha}C_{i\beta}u_{\alpha}u_{\beta} + A_{3}U^{2}),$$

$$i = 1, 2, \dots, 8$$

$$f_{0}^{eq} = h(B_{0} + B_{3}U^{2})$$
(5)

其中 α , β 表示坐标分量, 一项中相同下标表示求 和。 $U = \sqrt{u^2 + v^2}$ 为宏观速度的绝对值。

(5) 式中各系数的取值因所模拟的动力学方程 而异。由于浅水动力学方程与通常的流体力学方程 不完全一致,因此,在系数上也应当作相应修改。确 定系数的原则是要使得建立的模型能够以高精度逼 近宏观动力学方程和连续性方程,一般可用待定系 数的办法,结合质量和动量守恒准则(4)并考虑对 称性定出每一个系数,最后应用 Chapman-Enskog 展 开以验证模型的正确性。建立格子 Boltzmann 模型比 较繁琐,在一定程度上要靠经验,但是应用模型进行 数值计算却比较简单,这是它的优点之一。

选取

$$w_1 = w_2 = w_3 = w_4 = 1/9,$$

 $w_5 = w_6 = w_7 = w_8 = 1/36,$
 $A_0 = \frac{h}{2}, A_1 = 3, A_2 = 9/2,$
 $A_3 = -\frac{3}{2}, B_0 = 1-(5/18)h, B_3 = -\frac{3}{2}$

为了从离散动力学方程还原出浅水方程,先将 方程(1) 作 Taylor 展开到二阶

$$\begin{split} & \left\{ \frac{\partial}{\partial t} + c_{ia} \frac{\partial}{\partial x_{a}} \right\} f_{i} + \frac{\delta t^{2}}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} + c_{ia} \frac{\partial}{\partial x_{a}} \right]^{2} f_{i} \\ &= -\frac{f_{i} - f_{i}^{eq}}{\tau} + F_{i} \delta t \end{split}$$
(6)

方程(6) 可以看作是一个含有小参数 $\varepsilon = \hat{\alpha}$, 以 t, x_{α} 为自变量的关于 $f_i(x_{\alpha}, t; \varepsilon)$ 的偏微分方程。而 且当 $\hat{\alpha} \rightarrow 0$, 为了方程两边的平衡, 必然有 $f_i - f_i^{eq} \rightarrow 0$, 也就是说, 粒子分布函数必然非常地接近于相应 的平衡状态, 因此可以将它在平衡分布函数附近以 小参数 ε 展开:

◎ 在后面的分析中,为方便计算,忽略掉表示无量 ◎ 1994-2012 China Academic Journal Electronic Publishing House. All fights reserved. http://www.cnki.net 这便是著名的 Chapman-Enskog 展开(Chapman et al, 1939)。

由准则(4) 及 ϵ 的任意性, 有 $\sum f_i^{(n)} = 0, \sum f_i^{(n)} c_{ia} = 0, n = 1, 2, \dots$ (8)

将展开式(7) 代入式(6) 分别保留一阶和二阶 小量,得到(Feng et al, 2001)

$$\varepsilon^{1} \cdot \frac{\partial f_{i}^{eq}}{\partial t} + c_{i\alpha} \frac{\partial f_{i}^{eq}}{\partial x_{\alpha}} = -\frac{f_{i}^{(1)}}{\tau} + F_{i} \qquad (9)$$

$$\left[\frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial t} + c_{i\alpha} \frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial x_{\alpha}} \right] = -\frac{f_i^{(1)} + \mathcal{F}_i^{(2)}}{\tau} + F_i \quad (10)$$

方程(10) 比方程(9) 精度高一阶, 形式上更复 杂些。

如果只考虑一阶近似, 对方程(9) 求零次矩, 即 方程中每一项对指标 *i* 求和,

 $\sum_{i} \frac{\partial f_{i}^{\ eq}}{\partial t} + \sum_{i} c_{i\alpha} \frac{\partial f_{i}^{\ eq}}{\partial x_{\alpha}} = - \sum_{i} \frac{f_{i}^{(1)}}{\tau} + \sum_{i} F_{i}$

由于粒子速度 c_{ia} 和弛豫时间系数 τ 均为模型 参数,它们不随时间和空间变化,因此在推导中作为 常数处理。利用准则(4),可得左边第一项等于 $\frac{\partial h}{\partial t}$, 左边第二项等于 $\frac{\partial hu_a}{\partial x_a}$;利用准则(8),可得右边第一 项等于零,而右边第二项 $\sum_i F_i = 0$ 。因此得到宏观 的连续方程

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial h u \alpha}{\partial x \alpha} = 0 \tag{11}$$

对方程(9) 求一次矩, 即方程(9) 中每一项都乘上 *c_i*a 再对 *i* 求和

$$\begin{split} \sum_{i} c_{i\alpha} \frac{\partial f_{i}^{eq}}{\partial t} + \sum_{i} c_{i\alpha} c_{i\beta} \frac{\partial f_{i}^{eq}}{\partial x_{\beta}} &= -\sum_{i} c_{i\alpha} \frac{f_{i}^{(1)}}{\tau} + \sum_{i} c_{i\alpha} F_{i} \\ & \text{therefore and } \frac{\partial f_{i}}{\partial t} + \sum_{i} c_{i\alpha} F_{i} \\ & \text{therefore and } \frac{\partial f_{i}}{\partial t} + \sum_{i} c_{i\alpha} F_{i} \\ & \text{therefore and } \frac{\partial f_{i}}{\partial t} + \sum_{i} c_{i\alpha} F_{i} \\ & \text{therefore and } \frac{\partial f_{i}}{\partial t} + \sum_{i} c_{i\alpha} F_{i} \\ & \text{therefore and } \frac{\partial f_{i}}{\partial t} + \sum_{i} c_{i\alpha} F_{i} \\ & \text{therefore and } \frac{\partial f_{i}}{\partial t} + \sum_{i} c_{i\alpha} F_{i} \\ & \text{therefore and } \frac{\partial f_{i}}{\partial t} \\ & \text{therefore and } \frac{\partial f_{i}$$

程(10),将平衡分布函数(5)代入,分别求零次矩和 一次矩,得到的连续方程是相同的,而动量方程多了 一个高阶的粘性修正,即

$$\frac{\partial h u_{\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial h u_{\alpha} u_{\beta}}{\partial x_{\beta}} = - \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left[\frac{h^2}{6} \right] + h F_{\alpha} + \frac{\partial F_{\mu}}{\partial x_{\alpha}} \quad (13)$$

$$\nexists \Psi \qquad F_{\mu} = \frac{\partial}{3} \left[\tau_{-} \frac{1}{2} \right] \cdot \left[\frac{\partial h u_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} + \frac{\partial h u_{\beta}}{\partial x_{\alpha}} + \frac{\partial (h^2/2)}{\partial t} + 3 \cdot \frac{\partial h u_{\alpha} u_{\beta}}{\partial t} \right]$$

常见的浅水方程没有考虑粘性的作用,因为外 力项 F_{α} 的量级比之粘性项要大。为了检验本模型模 拟理想浅水方程的能力,不妨把上述粘性力的表达 式看作是本文中建立的模型与理想浅水方程的误差 项。可以看到,这一项与无量纲的时间步长(& = $\varepsilon \ll 1$)成正比,还与 $\left(\tau - \frac{1}{2} \right)$ 成正比,这样便可以通 过调节弛豫时间系数 τ ,来调节粘性力的大小。

注意到上面得到的宏观动力学方程组是无量纲的,所以形式上与通常的浅水方程组还不一致。为此,在连续方程两端同时乘上 $\frac{HC}{L}$,而在动量方程两端同时乘上 $\frac{HC}{T}$,考虑 $L = CT, C = \sqrt{3gH}$,故略去粘性力,并且把张量形式转化为普通形式,可以恢复出守恒形式的浅水方程组

$$\frac{\partial(hu)}{\partial t} + \frac{\partial(huu)}{\partial x} + \frac{\partial(hw)}{\partial y} = -\frac{1}{2}\frac{\partial(gh^2)}{\partial x} + hF_x$$
(14)

$$\frac{\partial(hv)}{\partial t} + \frac{\partial(huv)}{\partial x} + \frac{\partial(hvv)}{\partial y} = -\frac{1}{2}\frac{\partial(gh^2)}{\partial y} + hF_y$$
$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hu)}{\partial x} + \frac{\partial(hv)}{\partial y} = 0$$

由于从离散动力学模型还原出的浅水方程组自动具有守恒形式,可以推想该模型在数值模拟中也 会保持良好的守恒性质,这一点在后面的数值试验 中将得到充分的验证。

2 数值试验

2.1 一维溃坝现象

一维溃坝问题具有解析解,而且由于出现了间 断面(水激波),因此经常被用来检验格式的精度和 稳定性。作者采用苏铭德等(1999)中的参数,上游 水位为9m,下游水位为5m,不考虑摩擦、坡度等外 力因素,初始时刻速度为零,有一拦水坝将上、下水 面隔开。假设水坝突然完全崩溃,上、下游水位在原 来水坝的位置出现突变,从而激发出一个以固定速

如果要考虑粘性的作用,则要用二阶近似,从方,,,,度、固定高度向下游推进的水激波,在波前是未扰动

1期

流速 u(m/s)

2.40

2.40

的静止流体,波后流体则突然具有了速度,但是流速 远远小于波速;与此同时,下游向上游则有一个退水 波(稀疏波)传播,与激波水位突变不同,退水波水位 是缓变的。

本文中模拟了溃坝波的行进过程。由于本模型 是二维的,为了直接用于模拟一维问题,而计算量又 不要太大,作者采用了 900×5 的网格,网格尺度为 $\Delta x = 1m$,无量纲弛豫时间系数 T= 0.55,参考厚度 取为 *H* = 100m,粒子速度尺度 *C*= $\sqrt{3gH}$ = 54.2494 m•s⁻¹,时间步长 $\&a = \Delta x/C = 0.0184s$,在 *y* 方向取 周期边界条件,这样得到的结果在任意纵剖面都是 完全相同的,因此实质上还是一维的。其中 18.4s



项目

理论值

计算值





dam breaking(a) hydrograph (b) velocity

实线: 计算值; 虚线: 理论解

由于这个算例比较简单,正好可以用来校验本 离散模型与水流运动基本物理规律的吻合程度。 基本规律表现如下:

由于两侧流体是静止的,没有质量的流入流出,所以总质量应该守恒;

2) 根据动量定理, x 方向总动量的变化率应该
 等于 x 方向的合外力,即两侧压力之差;

3) 重力是保守力,其它外力均不做功,粘性力 (内力)做负功,因此总机械能(势能+动能)应该随 时间呈下降趋势,下降速率取决于粘性项的大小。

数值计算采用双精度, 总质量, 总能量、总动量 随时间的变化趋势如图 3、图 4 所示。计算中取 g=9.81ms⁻², $\rho=$ 1000kg•m⁻³, b= 5m 为侧边长。(其中 质量和能量用初始值归一化, 以便于比较)。 总质量 的最大相对误差为 9.3×10⁻¹⁴, 在整个计算过程中 极好地保持了守恒性质。由于粘性作用, 总机械能 最终损耗了 0.37%, 这反映在计算结果中是波阵面 拐角处的稍许抹平效应。总动量随时间是严格地线 性增长, 斜率为 1.3734×10⁶kg•ms⁻², 与两侧压力差 $\frac{\Omega_{2}b}{2}(H_{1}^{2}-H_{2}^{2})=1.3733\times10^{6}kg•ms⁻²+分精确地吻$ 合, 这就很好地体现了动量定理。

和 37.9s 时刻水位和速度如图 2 所示。图 2 中实线

是计算值, 虚线为理论值, 可以看到二者吻合的相当 好, 在陡峭的波阵面处, 既没有出现振荡, 也没有太

多的抹平,体现了精度和稳定性的统一。模拟的波

高、波速和波后流速的数值与理论值的对比如表1

表1 计算值与理论值的对比

Tab. 1 Comparison between theory and calculated results

8 92

8 93

激波水位 h(m) 激波移速 V(m/s)

所示,可以看到它们是十分接近的。

6.848

6.845

检验结果表明,本文中建立的模型精确地反映 了浅水运动的基本物理规律,这是它的本质属性,也 是获取计算精度和稳定性的根本保证。

2.2 二维溃坝流

当水坝只是部分溃决,或者是开闸泄洪时,流动 是二维的,这样的流动没有找到解析解。王如云等 (2002)模拟了一个水库溃坝的流动,本文中用相同 的数据进行了模拟。



图 3 总质量和总机械能的时间变化图





图4 x 方向总动量 $(\times 10^7)$ 随时间变化图

Fig. 4 Time history of total momentum ($\times 10^7$) in the x direction

模拟的区域为 200m × 200m, 中间用一个拦水坝 隔成相等的两部分, 左边水位为 10m, 右边为 5m, 在 95—170m 处发生溃坝, 计算参数为: $\Delta x = 1m$, $\hat{\alpha} =$ 0. 0184s, $\tau = 0.55$, 固壁边界处采用无滑的 bounce back 边界条件。模拟 7.2s 后的水位分布如图 5 所 示, 与王如云等(2002) 的结果进行对比, 二者具有相 当好的一致性。

3 结语

本文中建立了一个格子 Boltzmann 模型, 通过 Chapman-Enskog 展开可以得到守恒形式的浅水动力 学方程组, 与理想流体浅水方程组相比仅相差一个 可以灵活调整的粘性项。数值模拟一维溃坝激波和 二维溃坝急流, 结果与理论解和文献值吻合很好。 数值试验显示了本格式的精度和稳定性, 这与它严 格地满足质量和动量基本定律的本质特征是直接相 关的。由于本模型的计算过程完全是显式的,格子 间的相互作用是局地的,因此非常适合于并行计算, 这充分适应了当前计算技术发展的趋势和大规模数 值计算的需要。加之算法比较简单,容易编程实现, 易于修改和移植(如考虑了微观动力机制后可以有 效地对泥沙和多相污染物输送进行模拟),因而在海 洋湖泊动力学和环境污染等领域有着广阔的应用前 景。



参考文献

- 王如云, 邱建贤, 戴嘉尊等, 2002. 交错网格下的浅水方程高分辨 Gauss型格式.水科学进展, 13(4): 403-408
- 刘 峰, 胡 非, 2003. 用格子 Boltzmann 方法模拟正压大气运动. 中 国科学院研究生院学报, 20(2):168-171
- 苏铭德,徐 昕,朱锦林等,1999.数值模拟在钱塘江涌潮分析中的 应用II.计算结果和分析.力学学报,31(6):700-716
- 程永光,2000. Lattice Boltzmann 方法应用实例 —— 维溃坝波模拟.力 学与实践,22(1):47-48
- 谭维炎,1999. 浅水动力学的回顾和当代前沿问题. 水科学进展, 10(3):296-303
- Bhatnager P L, Gross E P, Krook M, 1954. A model for collision processes in gases I. Small amplitude processes in charged and neutral one component system. Phys Rev, 94: 511–524
- Chapman S, Cowing T G, 1939. The Mathematical Theory of Non-uniform Gases. Cambridge: Cambridge Univ Press, 448
- Chen S, Chen H D, Matinez D et al, 1991. Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics. Phys Rev Lett, 67: 3776-3779
- Feng S D, Mao J Y, Zhang Q, 2001. Lattice Boltzmann equation model in the coriolis field. Chinese Physics, 10(12):1103-1109
- M mamara G R, Zanetti G, 1988. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata, Phys Rev Lett, 61: 2331–2335
 Qian Y H, Dhumieres D, Lallemend P, 1992. Lattice BGK models for the

1期

Navier-Stokes equation: non-linear deviation in compressible regimes. Europhys Lett, 17: 479-484 Shiyi Chen, Gary D Doolen, 1998. Lattice Boltzmann method for fluid flows. Annu Rev Fluid Mech, 30: 329-364

LATTICE BOLTZMANN SIMULATION OF SHALLOW WATER DYNAMICS

LIU Feng, HU Fei

 (Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100029; Institute of Chemical Defense, Beijing, 102205)
 (Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100029)

Abstract A new lattice Boltzmann model was developed, which can recover the conservation equation of shallow water dynamics via Chapman-Enskog expansion. The theoretical analysis and numerical tests both show that this model strictly obeys the conservation law of mass and momentum. The dam breaking flow in 1-D and 2-D is simulated, and the results are compared with theoretical solutions and those from another paper. The agreements are satisfactory. The nature of the model means that **i** is good at parallel computation and has broad prospects in the numerical simulation of ocean and atmosphere.

Key words Lattice Boltzmann method, Shallow water equation, Conservation law, Parallel computing

征集《海洋与湖沼》封面彩色图片

为了使《海洋与湖沼》期刊封面能更好地与国际期刊接轨,又能体现出其学科特色,起到美化封面的效果,自 2004 年第 1 期开始,拟定每期更换一个彩色封面图片,故向广大海洋湖沼科技工作者组约附有较高学术价值的质优彩色图版的稿件,一旦选用,稿件优先发表。欢迎积极投稿。

来稿请寄:青岛市南海路7号《海洋与湖沼》编辑部收 E-mail: pychen@ms. qdio. ac. cn 电话: 0532-2898753