第 1 部分：《格子 Boltzmann 方法的理论及应用》的有关源程序

程序 1　格子张量

1.1 正多边形格子张量的性质及基本粒子速度模型

在格子 Boltzmann 模型的构造过程中，经常会遇到粒子速度的 n 阶张量

$$\boldsymbol{E}^{(n)}_{i_1 i_2 \cdots i_n} = \sum_{\alpha} \left(\boldsymbol{e}_\alpha\right)_{i_1} \cdots \left(\boldsymbol{e}_\alpha\right)_{i_n} \tag{1}$$

式中，$\boldsymbol{e}_\alpha$ ($\alpha = 1, 2, \cdots, M$)为一矢量序列，类似于格子 Boltzmann 模型中的粒子速度。对于正 M 边形网格，$\boldsymbol{e}_\alpha$ 的配置为：

$$\boldsymbol{e}_\alpha = e\left(\cos\frac{2\pi\alpha}{M}, \sin\frac{2\pi\alpha}{M}\right) \tag{2}$$

式中，$e = \left|\boldsymbol{e}_\alpha\right|$。由于 $\boldsymbol{e}_\alpha$ 具有**各向同性**（isotropic）的特点，其对应的张量 $\boldsymbol{E}^{(n)}$ 亦满足各向同性，具有如下性质[4, 5]：

（1）奇数阶 $\left(2n+1, n \ge 0\right)$ 的各向同性张量为 0；

（2）偶数阶 $\left(2n, n \ge 1\right)$ 的各向同性张量与 $\Delta^{(2n)}_{i_1 i_2 \cdots i_{2n}}$ 成比例。

对于性质（1），一阶张量 $\boldsymbol{E}^{(1)}$ 对应于矢量，由于 $\boldsymbol{e}_\alpha$ 具有各向同性，则其相对于坐标轴是对称的，将 $\boldsymbol{e}_\alpha$ 投射到坐标轴上并求矢量和，根据对称性其和 $\boldsymbol{E}^{(1)}$ 必然为 0。依次类推，其他奇数阶张量 $\boldsymbol{E}^{(n)}$ 同样为 0。性质（1）、（2）相应的数学表达为：

$$\boldsymbol{E}^{(2n+1)} = 0 \tag{3}$$

$$\boldsymbol{E}^{(2n)} = \frac{M}{d\left(d+2\right)\cdots\left(d+2n-2\right)} e^{2n} \Delta^{(2n)} \tag{4}$$

式中，张量算子 $\Delta^{(2n)}$ 为

$$\Delta^{(2)}_{ij} = \delta_{ij} \tag{5}$$

$$\Delta^{(4)}_{ijkl} = \delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk} \tag{6}$$

$$\Delta^{(6)}_{ijklpq} = \delta_{ij}\Delta^{(4)}_{klpq} + \delta_{ik}\Delta^{(4)}_{jlpq} + \delta_{il}\Delta^{(4)}_{jkpq} + \delta_{ip}\Delta^{(4)}_{jklq} + \delta_{iq}\Delta^{(4)}_{jklp} \tag{7}$$

并存在如下的递归关系：

$$\Delta^{(2n)}_{i_1 i_2 \cdots i_{2n}} = \sum_{j=2}^{2n} \delta_{i_1 i_j} \Delta^{(2n-2)}_{i_2 \cdots i_{j-1} i_{j+1} \cdots i_{2n}} \tag{8}$$

文献[5]对正多边形格子进行了相关的张量分析，得出了各向同性 $\boldsymbol{E}^{(n)}$ 的阶数与正多边形的边数之间的对应关系，详见表 1。

表 1 各向同性张量的阶数与正多边形边数 M 对应表

$\boldsymbol{E}^{(2)}$	$M > 2$
$\boldsymbol{E}^{(3)}$	$M \ge 2, M \ne 3$
$\boldsymbol{E}^{(4)}$	$M > 2, M \ne 4$
$\boldsymbol{E}^{(5)}$	$M \ge 2, M \ne 3,5$
$\boldsymbol{E}^{(6)}$	$M > 4, M \ne 6$
$\boldsymbol{E}^{(7)}$	$M \ge 2, M \ne 3,5,7$

从表 B.1 可以看到，当 M 不等于 n, n-2, n-4, …时， $\boldsymbol{E}^{(n)}$ 是各向同性的。同时，对于足够大的 M， $M > n$，其所对应的张量 $\boldsymbol{E}^{(n)}$ 一定是各向同性的。例如，正四边形最多能保证三阶格子张量是各向同性的，而其四阶张量则是各向异性的

$$E^{(4)}_{ijkl}\,|_{M=4} = 2\delta_{ijkl} \tag{9}$$

式中， δ_{ijkl} 为非对称张量，当且仅当 $i = j = k = l$ 时， $\delta_{ijkl} = 1$，否则为 0。

正方形格子中两种基本的粒子速度模型如图 1 所示。其中，图 1 中模型（a）对应正四边形；而图 1 中模型（b）则是从正八边形而来，其对应的各阶张量为图 2 所示正八边形的格子张量减去图中虚线对应的正四边形的格子张量。两种基本模型的格子张量详见表 2。许多二维多速模型都是由这两种基本粒子速度模型组合而成。

对于三维模型，其对应的为多面体，因此要比二维模型复杂得多，感兴趣的读者可参阅相关文献[5]。

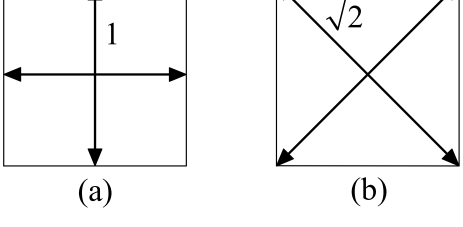

图 1 正方形格子中两种基本的粒子速度模型

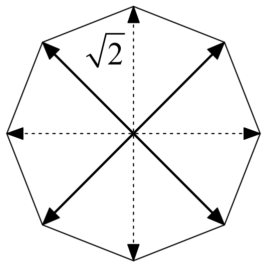

图 2 正八边形

表 2 两种基本模型的张量计算

模型	$\boldsymbol{e}_\alpha$	M	$E_{ij}^{(2)}$	$E_{ijkl}^{(4)}$	$E_{ijklpq}^{(6)}$
(a)	cyc: (±1, 0)	4	$2\delta_{ij}$	$2\delta_{ijkl}$	$2\delta_{ijklpq}$
(b)	(±1, ±1)	8	$4\delta_{ij}$	$4\Delta_{ijkl}^{(4)}-8\delta_{ijkl}$	$4\Delta_{ijklpq}^{(6)}/3-16\delta_{ijklpq}$

注：cyc 表示循环排列，即(±1, 0)，(0, ±1)。

1.2 常用离散速度模型及其张量计算

我们整理了常用的离散速度模型以及其张量计算，详见表 3。

表 3 常用离散速度模型的速度配置及其相应的张量

离散速度模型	速度配置	$E_{ij}^{(2)}$	$E_{ijkl}^{(4)}$	$E_{ijklpq}^{(6)}$
D2Q9	(0, 0)	0	0	0
	cyc: (±1, 0)	$2\delta_{ij}$	$2\delta_{ijkl}$	$2\delta_{ijklpq}$
	(±1, ±1)	$4\delta_{ij}$	$4\Delta_{ijkl}^{(4)}-8\delta_{ijkl}$	$4\Delta_{ijklpq}^{(6)}/3-16\delta_{ijklpq}$
D3Q15	(0, 0, 0)	0	0	0
	cyc: (±1, 0, 0)	$2\delta_{ij}$	$2\delta_{ijkl}$	$2\delta_{ijklpq}$
	(±1, ±1, ±1)	$8\delta_{ij}$	$8\Delta_{ijkl}^{(4)}-16\delta_{ijkl}$	$8\left(\Delta_{ijklpq}^{(6)}-2\Delta_{ijklpq}^{(4,2)}+16\delta_{ijklpq}\right)$
D3Q19	(0, 0, 0)	0	0	0

cyc: (±1, 0, 0)	$2\delta_{ij}$	$2\delta_{ijkl}$	$2\delta_{ijklpq}$
cyc: (±1，±1, 0)	$8\delta_{ij}$	$4\Delta_{ijkl}^{(4)} - 4\delta_{ijkl}$	$4\left(\Delta_{ijklpq}^{(4,2)} - 13\delta_{ijklpq}\right)$

表中，δ_{ijklpq}、$\Delta_{ijklpq}^{(4,2)}$ 均为非对称张量，且有

$$\begin{aligned}\Delta_{ijklpq}^{(4,2)} = {} & \delta_{ij}\delta_{klpq} + \delta_{ik}\delta_{jlpq} + \delta_{il}\delta_{jkpq} + \delta_{ip}\delta_{jklq} + \delta_{iq}\delta_{jklp} + \delta_{jk}\delta_{ilpq} + \delta_{jl}\delta_{ikpq} + \delta_{jp}\delta_{iklq} \\ & + \delta_{jq}\delta_{iklp} + \delta_{kl}\delta_{ijpq} + \delta_{kp}\delta_{ijlq} + \delta_{kq}\delta_{ijlp} + \delta_{lp}\delta_{ijkq} + \delta_{lq}\delta_{ijkp} + \delta_{pq}\delta_{ijkl}\end{aligned} \tag{10}$$