

Theory and Applications
of Lattice Boltzmann Method

格子Boltzmann方法的 原理及应用

郭照立 郑楚光 © 著



科学出版社
www.sciencep.com

格子 Boltzmann 方法的原理及应用

Theory and Applications of Lattice Boltzmann Method

郭照立 郑楚光 著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

格子 Boltzmann 方法是最近十几年来国际上发展起来的一种流体系统建模和模拟新方法,其思路与传统的流体模拟方法完全不同,具有许多常规方法所不具有的优势。它所提出的思维方式和建模手段,为流体力学的研究带来了新的思路,开创了流体描述和模拟的一个崭新领域。本书试图对格子 Boltzmann 方法的基本原理、常用模型、发展状况进行较为系统的描述,并结合作者近年的研究工作,介绍该方法的边界处理方法、作用力描述及非标准模型等基本问题,以及在传热传质、多相(多组分)流动、多孔介质流动和微尺度流动等方面的应用进展,以便读者了解格子 Boltzmann 方法的全貌。

本书可供数学、物理、力学、能源、材料、化工等领域从事流体力学工作的研究人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

格子 Boltzmann 方法的原理及应用/郭照立,郑楚光著. —北京:科学出版社, 2008

ISBN 978-7-03-023589-3

I. 格… II. ①郭… ②郑… III. 数值模拟 IV. O242.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2008) 第 193146 号

责任编辑:童安齐/责任校对:柏连海

责任印制:吕春珉/封面设计:耕者设计工作室

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

中国科学院印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2009 年 1 月第 一 版 开本: B5(720×1000)

2009 年 1 月第一次印刷 印张: 16 1/4

印数: 1—2 000 字数: 315 000

定价: 40.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈环伟〉)

版权所有, 侵权必究

举报电话: 010-64030229; 010-64034315; 13501151303

前 言

已故著名学者田长霖先生曾在一份重要文献 (*Microscale Thermophysical Engineering*, 1997, 1: 71~84) 中指出:“尽管许多物理现象和工程问题是在宏观或‘人’的尺度上体现出来的,但其根源仍然始于分子尺度。建立跨越多个时空尺度的物理模型有一定的困难,格子 Boltzmann 方法可望能够为此提供有效的手段 (Many physical phenomena and engineering problems may have their origins at molecular scales, although they need to interface with the macroscopic or ‘human’ scales. The difficulty arises in bridging the results of these models across the span of length and time scales. The lattice Boltzmann method attempts to bridge this gap).”

这里所说的格子 Boltzmann 方法 (LBM),是近十几年来国际上发展起来的一种流体系统建模和模拟新方法。该方法介于流体的微观分子动力学模型和宏观连续模型之间的介观模型,兼具二者的优点。这种方法的思路与传统的流体模拟方法完全不同,具有许多常规方法无法比拟的独特优势,甚至在某些方面是传统方法不能替代的。它所提出的思维方式和建模手段,为流体力学的研究带来了新思路,开创了流体描述和模拟的一个崭新领域。因此,自提出之日起该方法就受到众多学者的关注。目前,LBM 的研究已从纯粹的理论领域迈向工程实际应用,形成了一个国际研究热点,每年不但有多个系列的专门国际会议召开,而且已经出现了专业商用软件。

当前国际上 LBM 的研究涵盖了多个学科领域。例如,由于具有明显的计算优势,LBM 已被广泛用于工程传热传质问题和湍流的直接数值模拟;由于其介观背景使得流体内部的相互作用在 LBM 中可以方便地描述,因而在多组分、多相流、界面动力学、化学反应与燃烧等微观相互作用明显的流体系统方面得到了成功的应用;由于其清晰的粒子运动图像,使得处理流体与固体的相互作用非常直观,因而在渗流、气固两相流以及流-固耦合方面得到广泛应用;由于不受连续介质假设的限制,因而在微尺度流动与传热等连续方法不适用的问题研究中备受瞩目。这些研究展示了 LBM 的良好应用前景。

国内在该领域的研究相对起步较晚,在我国的发展还不够深入和普遍。同时,由于涉及数学、物理、力学等学科领域,国内系统介绍这一方法的相关著作尚不多见。本书围绕该领域的一些背景知识、基本原理、常用模型和应用状况进行了较为系统的阐述,并融合了我们自己的研究体会。

我们的研究过程,一直得到许多专家和同行的帮助和鼓励。陶文铨院士、宣益

民教授、方海平教授、雍稳安教授、何雅玲教授、L.-S. Luo 教授、Y. H. Qian 教授、K. Xu 教授、T. S. Zhao 教授和其他学者对我们的研究方向提出了非常有价值的建议，在此对他们表示诚挚的感谢。作者也特别感谢与我们长期合作的华中科技大学施保昌教授，以及曾与作者进行不少有益讨论的许友生教授、许爱国博士、唐桂华博士、石泳博士、柴振华博士等，与他们的交流极大促进了我们的研究工作。本书作者的研究工作和写作还得到了国家自然科学基金 (50606012)、“973” 计划 (项目编号: 2006CB705800) 和新世纪优秀人才支持计划 (项目编号: NCET-07-0323) 的支持，并得益于煤燃烧国家重点实验室的良好工作环境和同事们的支持和鼓励。

在本书写作过程中，作者参考了大量的相关文献，但囿于学识视野和水平，在选材和撰写过程中难免有疏漏和不当之处，诚望读者批评指正。

作 者

2008 年 8 月

目 录

前言

第一章 导论	1
§1.1 流体运动的数学模型和数值方法	1
§1.1.1 流体模型	1
§1.1.2 数值方法	7
§1.1.3 各类模型和方法的适用范围	8
§1.2 格子 Boltzmann 方法	9
§1.2.1 格子 Boltzmann 方法的基本结构	9
§1.2.2 格子 Boltzmann 方法的发展历史和研究现状	10
§1.2.3 国内发展状况	14
第二章 气体动理学理论	16
§2.1 基本概念	16
§2.1.1 气体的分子模型	16
§2.1.2 速度分布函数	17
§2.2 Boltzmann 方程	18
§2.3 Boltzmann H 定理	20
§2.4 BGK 模型	21
§2.5 宏观流体动力学方程	23
§2.5.1 一般形式	23
§2.5.2 Chapman-Enskog 分析	24
§2.5.3 输运系数	27
第三章 格子 Boltzmann 方法的基本原理和模型	29
§3.1 格子气自动机	29
§3.1.1 基本思想	29
§3.1.2 HPP 模型	30
§3.1.3 FHP 模型	31
§3.1.4 LGA 的宏观动力学	33
§3.2 从格子气自动机到格子 Boltzmann 方程	35
§3.2.1 基于 LGA 的格子 Boltzmann 方法	35

§3.2.2 独立于 LGA 的 LBE	37
§3.3 从连续 Boltzmann 方程到格子 Boltzmann 方程	38
§3.3.1 Taylor 展开法	38
§3.3.2 Hermite 展开法	39
§3.4 单松弛 (LBGK) 模型	42
§3.4.1 基本模型	42
§3.4.2 宏观方程	43
§3.5 多松弛 (MRT) 模型	46
§3.5.1 基本原理	46
§3.5.2 基本模型	48
§3.5.3 宏观方程	53
§3.6 LBE 的程序结构	56
第四章 格子 Boltzmann 方法的初始和边界条件	57
§4.1 初始条件	57
§4.1.1 非平衡态校正方法	57
§4.1.2 迭代方法	59
§4.2 平直边界条件	61
§4.2.1 启发式格式	61
§4.2.2 动力学格式	63
§4.2.3 外推格式	65
§4.3 曲面边界条件	68
§4.3.1 反弹格式	68
§4.3.2 虚拟平衡态格式	68
§4.3.3 插值格式	70
§4.3.4 非平衡态外推格式	72
§4.4 压力边界条件	73
§4.5 小结	74
第五章 格子 Boltzmann 方法的作用力模型	76
§5.1 LBGK 的作用力模型	76
§5.1.1 平衡态分布的压力校正方法	76
§5.1.2 平衡态分布的速度校正方法	77
§5.1.3 在演化方程中增加作用力项	78
§5.2 作用力模型的理论分析和比较	81
§5.2.1 作用力模型的统一形式	81
§5.2.2 宏观方程	82

§5.2.3 各类作用力模型的偏差分析·····	84
§5.2.4 算例·····	87
§5.3 MRT-LBE 的作用力模型·····	90
§5.4 小结·····	91
第六章 非标准格子 Boltzmann 模型 ·····	92
§6.1 基于标准演化方程的方法·····	92
§6.1.1 插值补充 LBE 方法·····	92
§6.1.2 局部网格加细方法·····	94
§6.1.3 区域分解方法·····	98
§6.2 离散速度 Boltzmann 方程·····	100
§6.3 有限差分 LBE·····	101
§6.3.1 Runge-Kutta-LBE·····	101
§6.3.2 半隐格式 LBE·····	102
§6.3.3 基于半隐格式的显式 LBE·····	103
§6.4 有限体积 LBE·····	107
§6.5 有限元 LBE·····	109
§6.5.1 特征 Galerkin 方法·····	110
§6.5.2 最小二乘有限元方法·····	111
§6.6 小结·····	112
第七章 热流体动力学的格子 Boltzmann 方法 ·····	114
§7.1 概述·····	114
§7.2 格子与离散速度一致的多速 LBE 模型·····	115
§7.2.1 低阶模型·····	115
§7.2.2 高阶 MS-LBGK 模型·····	119
§7.3 基于 Boltzmann 方程的多速 LBE 模型·····	122
§7.3.1 平衡态分布函数的 Hermite 展开·····	122
§7.3.2 依赖局部流动速度和温度的离散速度·····	123
§7.3.3 依赖局部温度的离散速度·····	124
§7.3.4 时空无关的离散速度·····	125
§7.4 非空间填充型的多速 LBE 模型·····	129
§7.5 Prandtl 数可调的多速 LBE 模型·····	132
§7.6 无黏性热耗散和压缩功的双分布函数 LBE 模型·····	135
§7.6.1 多组分 DDF-LBE 模型·····	135
§7.6.2 非理想气体的 DDF-LBE 模型·····	137
§7.6.3 不可压流动的 DDF-LBE 模型·····	137

§7.7 含黏性热耗散和压缩功的双分布函数 LBE 模型 —— 内能形式	140
§7.7.1 内能分布函数及演化方程	141
§7.7.2 格子 Boltzmann 方程	142
§7.7.3 若干简化模型	143
§7.8 含黏性热耗散和压缩功的双分布函数 LBE 模型 —— 总能形式	145
§7.8.1 总能分布函数及其演化方程	145
§7.8.2 离散速度模型	148
§7.8.3 格子 Boltzmann 方程	152
§7.9 混合 LBE 模型	154
§7.10 小结	155
第八章 多相和多组分流体的格子 Boltzmann 方法	156
§8.1 概述	156
§8.2 颜色 LBE 模型	157
§8.2.1 不混溶流体的 LBE 模型	157
§8.2.2 可混溶流体的 LBE 模型	159
§8.3 伪势 LBE 模型	160
§8.3.1 基本模型	160
§8.3.2 改进模型	162
§8.3.3 作用力的离散格式	164
§8.4 自由能 LBE 模型	166
§8.4.1 单组分非理想流体模型	166
§8.4.2 两组分非理想流体模型	167
§8.4.3 自由能模型的伽利略不变性	169
§8.5 基于动理学理论的 LBE 模型	171
§8.5.1 单组分多相流体的 LBE 模型	171
§8.5.2 多组分单相流体的 LBE 模型	179
§8.5.3 多组分非理想气体的 LBE 模型	186
§8.6 流固两相流的 LBE 方法	192
§8.6.1 基于有限体积颗粒的 LBE 方法	192
§8.6.2 基于点源颗粒的 LBE 方法	197
§8.7 小结	200
第九章 多孔介质流动的格子 Boltzmann 方法	201
§9.1 概述	201
§9.2 孔隙尺度 LBE 方法	203
§9.2.1 多孔介质的生成方法	203

§9.2.2	数据结构	204
§9.2.3	应用	206
§9.2.4	孔隙尺度方法的限制	208
§9.3	REV 尺度 LBE 方法	208
§9.3.1	基于 Brinkman 模型的 LBE 方法	208
§9.3.2	基于通用渗流模型的 LBE 模型	210
§9.3.3	数值验证	212
§9.4	小结	216
第十章	微尺度流动的格子 Boltzmann 方法	217
§10.1	概述	217
§10.2	微流动 LBE 方法的两个基本问题	218
§10.2.1	松弛时间与 Knudsen 数的关系	218
§10.2.2	边界条件	220
§10.3	滑移区 LBE 方法	223
§10.3.1	边界条件导致的滑移速度	223
§10.3.2	边界条件中的离散效应及校正方法	226
§10.3.3	数值验证	227
§10.3.4	MRT-LBE 模型	228
§10.4	过渡区 LBE 方法	230
§10.4.1	Knudsen 层	230
§10.4.2	包含 Knudsen 层效应的 LBE 模型	231
§10.5	小结	236
参考文献		237

第一章 导 论

流体 (如空气和水) 是自然界中最为常见的物质。流体内部分子间的相互作用力较弱, 即使受到非常小的外力也会发生变形。流体力学是研究流体运动规律的一门学科, 其范围非常广泛。虽然经过多年的发展流体力学取得了丰硕的成果, 但不可否认该领域还面临着巨大的挑战: 一方面, 由于流体运动的复杂性, 即使在经典流体力学领域也还有不少没有解决的问题; 另一方面, 随着现代科学技术的发展, 流体力学不断与其他学科交叉, 产生了许多传统方法难以描述或根本不适用的新问题, 如微米纳米尺度和跨尺度流动等。但正是这些挑战促使人们对流体力学开展更深入的研究, 人们对流动现象的理解和认识也在不断深化。目前, 流体力学仍然是最为活跃的学科之一。

§1.1 流体运动的数学模型和数值方法

§1.1.1 流体模型

众所周知, 流体在物理上是由大量粒子 (约 10^{23} 的量级) 构成的离散系统, 每个分子作无规则的热运动, 并且通过频繁的碰撞相互交换动量和能量。因此, 流体的微观结构和运动在时间和空间上都非常复杂, 具有不均匀性、离散性和随机性。另一方面, 与微观运动的不均匀性、离散性和随机性相反, 流体的宏观运动一般总是呈现出均匀性、连续性和确定性, 流体的宏观运动和其他性质是流体分子微观运动的平均结果。因此可以预见, 基于不同的观察尺度, 描述流体运动的数学模型也会有很大的差别。

总体上, 流体系统的描述方法依据不同尺度可以分为微观分子模型、介观动理学模型和宏观连续模型。微观分子模型将流体视为一个由大量分子构成的多体系统, 着眼于每个流体分子的动力学行为, 通过对每个分子运动的刻画并采用统计方法来描述流体的整体运动情况; 宏观连续模型则将流体视为一个连续体, 着眼于流体微团, 用一组偏微分方程直接描述流体的宏观运动; 介观动理学模型着眼于流体分子的速度分布函数, 通过研究它的时空演化过程并根据宏观物理量与分布函数之间的关系来获得宏观流动信息。动理学模型介于微观模型和宏观模型之间: 它与微观模型的共同之处是二者都从微观角度考察流体分子的运动信息, 不同之处在于微观模型反映的是每个分子的个体行为, 而动理学模型描述的是分子的统计行

为；它与宏观模型的共同之处在于二者刻画的对象（分布函数和流体微团或质点）都是微观分子的统计量，都不关心分子个体对描述对象的影响，不同之处在于动理学模型没有连续性假设，而宏观模型则必须以这一假设为前提条件。

§1.1.1.1 宏观连续模型

通常情况下，流体可以看作是充满整个流场的连续介质，从而可以在流场中的每一空间点上定义流体的密度、速度、温度和压力等，并建立一系列的偏微分方程来描述流体的运动。连续介质假设是流体力学的一个基本假设，是对流体结构的一种近似处理。这一假设在日常生活和工程中遇到的大多数情况下是合理的。

衡量连续介质假设是否合理的一个特征参数是 Knudsen 数，它定义为分子平均自由程和流动的宏观特征长度之比，即

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (1.1.1)$$

其中 λ 和 L 分别为分子平均自由程和流动的特征长度。 λ 可以理解为分子在两次连续碰撞之间飞行距离的平均值。对于分子为刚性球体的理想气体， λ 与流体的温度 T 和压力 p 有关，即

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\pi n d^2} = \frac{k_B T}{\sqrt{2}\pi p d^2}$$

其中 n 为分子数密度， d 为分子直径， k_B 为 Boltzmann 常数。宏观特征长度 L 通常取为流场或物体的尺寸，如空腔流中腔体的高度或宽度，圆柱绕流中圆柱的直径等。有时特征长度也用某个宏观物理量的梯度定义，如 $L = \rho/|\nabla\rho|$ 。只有当 Knudsen 数较小时流体才可看作是连续的，否则流体的微观结构和分子运动对宏观流动有显著影响，连续模型不再适用。

在连续介质假设的基础上，流体运动遵循质量、动量和能量守恒定律，数学上由一组偏微分方程描述，即

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1.1.2a)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (1.1.2b)$$

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} e) = \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u} - \nabla \cdot \mathbf{q} \quad (1.1.2c)$$

其中， ρ 、 $\mathbf{u}$ 、 T 和 e 分别为流体的密度、速度、温度和单位质量的内能， $\boldsymbol{\sigma}$ 为应力张量， $\mathbf{q}$ 为由热传导和热辐射引起的热通量。

上述方程不封闭。为了得到完整的方程，需要补充应力张量与变形率张量之间、热流矢量和温度梯度之间的关系，以及联系热力学性质的状态方程。对牛顿流体，应力张量与变形率张量呈线性关系，可以写为 $\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}$ ，其中 $\mathbf{I}$ 为二阶单

位张量, p 为静压力; $\boldsymbol{\tau} = 2\mu\mathbf{S} + \lambda(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I}$ 为黏性应力张量, 其中 μ 称为动力黏性系数, λ 为第二黏性系数, $\mathbf{S}$ 为变形速度张量, 定义为

$$S_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right)$$

在 Stokes 假设下, 两类黏性系数有如下关系: $\lambda + (2/3)\mu = 0$ 。黏性应力张量也可以写为 $\boldsymbol{\tau} = 2\mu \overset{\circ}{\mathbf{S}} + \zeta(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I}$, 其中张量上部的符号“ $\circ$ ”表示其去迹部分, 即 $\overset{\circ}{\mathbf{S}} = \mathbf{S} - \frac{1}{D} \text{Trac}(\mathbf{S})\mathbf{I}$, $\text{Trac}(\mathbf{S}) = \sum_i S_{ii}$, ζ 称为体黏性系数。显然 Stokes 假设等价于 $\zeta = 0$ 。与动力学黏性系数 μ 有关的一个参数是运动黏性系数 ν , 定义为 $\nu = \mu/\rho$ 。对温度不太高的流动, 可以忽略辐射传热, 热通量与温度梯度成正比, 即 $\mathbf{q} = -k\nabla T$ 。压力 p 一般与密度 ρ 和温度 T 有关, 它们之间的关系称为状态方程, 可以写为 $p = f(\rho, T)$ 。理想气体的状态方程为 $p = \rho RT$, 其中 R 是气体常数。

采用上述假设后, 通用方程组 (1.1.2) 称为 Navier-Stokes 方程或 Navier-Stokes-Fourier 方程, 其中质量方程又称为连续 (性) 方程。针对不同的问题, 该方程组还可以进行简化。例如, 当流体的黏性可以忽略时, 流体称为理想流体, 所得的方程称为 Euler 方程, 这是研究空气动力学的常用模型。对 Euler 方程沿流线积分可以得到 Bernoulli 方程, 并进而得到速度和压力的关系。当流体质点的密度在运动过程中不发生变化时, 流体称为不可压的。与流体的可压缩性相关的一个无量纲数是 Mach 数, 定义为流速与当地音速之比, 即 $Ma = u_0/c_s$ 。如果 $Ma \leq 1$, 流动称为亚音速流; 否则称为超音速流, 这时往往会有激波现象发生。当 $Ma > 5$ 时, 流体的可压缩性可以导致很高的温度, 使流体的化学性质发生变化。这种流动称为高超音速流。通常, 当 $Ma < 0.3$ 时, 流体认为是不可压缩的; 否则必须视为可压缩流体。但是, 低 Mach 数是流体近似不可压的必要而非充分条件。在某些情况下, 即使流动的 Mach 数很低, 流体仍然必须视为可压缩的。例如, 当系统的温度变化非常大时, 流体的密度也会有显著的变化, 从而使不可压近似即使在低 Mach 数条件下也不成立。另外一种情况是微器件中的流动, 如细长管道内的流体流动。此时压力沿管道有较大的变化, 可以导致较大的密度变化, 从而流体必须视为可压缩的。

流体的连续模型是目前发展最为成熟、应用最为广泛的方法。由于不是本书重点, 这里不详细展开, 感兴趣的读者可以参考国内外流体力学方面的著作。

§1.1.1.2 分子动力学模型

连续模型不考虑流体的微观分子结构, 直接对流动的宏观物理量进行描述。但是, 物理上流体是由流体分子构成的, 流体的宏观运动是微观分子热运动的平均结果。因此, 如果能够知道流体分子的微观运动, 理论上就可以通过统计平均得到流体的宏观物理量。这就是分子动力学模型的基本思想。分子动力学模型着眼于流体

的微观分子的运动, 研究流体分子的空间位置和速度等的时间演化, 并利用统计方法从分子的这些微观信息获得宏观流动的特征量^[1]。

在分子动力学模型中, 通常认为分子的运动遵循经典的运动方程, 即牛顿第二定律

$$m\ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_i \quad (1.1.3)$$

其中 $\mathbf{r}_i$ 为分子 i 在时刻 t 的空间位置, $\mathbf{F}_i$ 为作用在该分子上的总力, m 为分子的质量。在分子动力学模型中, 分子之间的相互作用力通常用某种相互作用势 $\phi(r)$ 表示, 即

$$\mathbf{f}_{ij} = -\nabla\phi(|\mathbf{r}_{ij}|)$$

其中 $\mathbf{r}_{ij}$ 为分子 i 和分子 j 之间的距离。因此, 作用在分子 i 上的总作用力可以表示为

$$\mathbf{F}_i = \sum_{j=1}^N \mathbf{f}_{ij} + \mathbf{G}_i$$

这里 N 为系统中总的分子数, $\mathbf{G}_i$ 为作用在分子 i 上的其他外力, 如重力或电磁力等。相互作用势的选取对分子动力学模型至关重要。Lennard-Jones 势是应用最为广泛的作用势, 体现了分子间相互作用的基本规律。其形式为

$$\phi(r) = 4\epsilon \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^2 - 1 \right] \quad (1.1.4)$$

其中 σ 是表征分子相互作用范围的量。

通过求解分子动力学方程 (1.1.3), 可以得到每个分子在每一时刻的空间位置和速度, 并据此可以测出系统的宏观变量 (如压力、温度、速度)、流体的传输参数和其他统计量。例如, 系统处于平衡态时的温度定义为

$$T = \frac{m}{3Nk_B} \left\langle \sum_{i=1}^N |\mathbf{v}_i|^2 \right\rangle \quad (1.1.5)$$

这里符号 “ $\langle \cdot \rangle$ ” 表示对微观量的平均, $\mathbf{v}_i = \dot{\mathbf{r}}_i$ 是分子 i 的速度。压力可根据维里展开得到^[2]

$$pV = Nk_B T + \frac{1}{3} \left\langle \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F}_i \right\rangle \quad (1.1.6)$$

对黏性系数、扩散系数、热传导系数等输运参数, 可以根据线性响应理论给出^[2]。对每一种输运系数 ζ , 该理论给出有两种表达关系式, 即 Einstein 关系式和基于积分响应自相关函数的 Green-Kubo 关系式为

$$\begin{aligned} \chi &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{a}{2t} \langle [\zeta_X(t) - \zeta_X(0)]^2 \rangle \quad (\text{Einstein}) \\ &= a \int_0^\infty \dot{\zeta}_X(t') \dot{\zeta}_X(0) dt' \quad (\text{Green-Kubo}) \end{aligned}$$

其中 $\zeta_\chi(t)$ 是与 χ 对应的某个微观函数, a 为一个常数。例如, 扩散系数 D 的两种统计关系式为

$$\begin{aligned} D &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{6Nt} \left\langle \sum_{i=1}^N [\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)]^2 \right\rangle \\ &= \frac{1}{3N} \int_0^\infty \left\langle \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i(t) \cdot \mathbf{v}_i(0) \right\rangle dt \end{aligned}$$

剪切黏性系数为

$$\begin{aligned} \mu &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{6k_B T V t} \left\langle \sum_{x < y} \left[\sum_{i=1}^N m \{r_{ix}(t)v_{iy}(t) - r_{ix}(0)v_{iy}(0)\} \right]^2 \right\rangle \\ &= \frac{V}{3k_B T} \int_0^\infty \left\langle \sum_{x < y} P_{xy}(t) P_{xy}(0) \right\rangle dt \end{aligned}$$

其中 P_{xy} 为压力张量, 定义为

$$P_{xy} = \frac{1}{V} \left[\sum_{i=1}^N m v_{ix} v_{iy} - \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N r_{ijx} f_{ijy} \right]$$

热传导系数为

$$\begin{aligned} \kappa &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{6k_B T^2 V t} \left\langle \sum_x \left[\sum_{i=1}^N m \{r_{ix}(t)e_i(t) - r_{ix}(0)e_i(0)\} \right]^2 \right\rangle \\ &= \frac{V}{3k_B T^2} \int_0^\infty \langle \mathbf{Q}(t) \cdot \mathbf{Q}(0) \rangle dt \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} e_i &= \frac{1}{2} m v_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij} \\ \mathbf{Q} &= \frac{1}{V} \left[\sum_{i=1}^N e_i \mathbf{v}_i + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \mathbf{r}_{ij} (\mathbf{f}_{ij} \cdot \mathbf{v}_j) \right] \end{aligned}$$

其他特征量, 如径向分布函数 (radial distribution function), 也可类似得到。

§1.1.1.3 动理学模型

周知, 一个多体离散系统可以用 Hamilton 方程来描述。对由大量流体分子构成的流体系统, 也可以用 Hamilton 方程对所有流体分子运动进行描述。但是, 即使对一个体积很小的流体系统, 它所包含的分子数仍然是非常庞大的, 例如零摄氏

度时一个大气压的 1cm^3 的空气内大约包含有 2.7×10^{19} 个分子。用 Hamilton 方程描述这样的系统几乎是不可能的。

一种更粗粒度的描述方法是用分布函数 $f_N(\mathbf{q}_1, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{q}_N, \mathbf{p}_N)$ 来描述由 N 个粒子构成的离散系统, 这里 $\mathbf{q}_i$ 和 $\mathbf{p}_i$ 分别为第 i 个粒子的广义坐标和动量。显然, 分布函数 f_N 包含了所有动力学过程的全部统计信息。 f_N 遵循如下的 Liouville 方程

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} - \sum_{j=1}^{3N} \left[\frac{\partial H_N}{\partial \mathbf{q}_j} \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{p}_j} - \frac{\partial H_N}{\partial \mathbf{p}_j} \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{q}_j} \right] = 0 \quad (1.1.7)$$

其中 H 为系统的 Hamilton 量。

对 f_N 在相空间中进行部分积分可以定义一个新的分布函数

$$F_s(\mathbf{q}_1, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{q}_s, \mathbf{p}_s) \equiv V_s \int f_N(\mathbf{q}_1, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{q}_N, \mathbf{p}_N) d\mathbf{q}_{s+1} d\mathbf{p}_{s+1} \cdots d\mathbf{q}_N d\mathbf{p}_N,$$

其中 V_s 为归一化因子。可以证明, 一个关于 F_s ($1 \leq s \leq N$) 的耦合微分方程组与 Liouville 方程等价。该方程组称为 BBGKY (Boguljubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon) 方程链或层级方程。BBGKY 方程链必须在某处截断以获得近似解。

Boltzmann 方程就是在一些假设条件下从 BBGKY 方程链中得到的一个结果。它描述了单粒子分布函数 $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = NF_1(\mathbf{q}_1, \mathbf{p}_1, t)$ 的时空演化过程

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f = \Omega(f) \quad (1.1.8)$$

其中 $\mathbf{x}$ 为粒子的空间坐标, $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{p}_1/m$ 为粒子的速度, $\mathbf{a}$ 为外力引起的加速度, Ω 为碰撞引起的变化。流体的宏观物理量如密度 ρ 、速度 $\mathbf{u}$ 及内能 e 由分布函数的速度矩确定

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{x}, t) &= m \int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi} \\ \rho \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) &= m \int \boldsymbol{\xi} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi} \\ \rho e(\mathbf{x}, t) &= \frac{m}{2} \int C^2 f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi} \end{aligned}$$

其中 C 为热运动速度矢量 $\mathbf{C} = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}$ 的长度或模, 即 $C = \sqrt{\mathbf{C} \cdot \mathbf{C}}$ (本书约定, 对任一矢量 $\mathbf{V}$, 其长度用标量符号 V 表示)。

我们知道, 建立在连续介质假设基础上的 Navier-Stokes 方程是反映宏观流动的基本物理规律的一种模型。既然 Boltzmann 方程也是描述流体运动规律的理论, 它与 Navier-Stokes 方程在一定条件下应当是一致的。20 世纪 10~20 年代, Chapman 和 Enskog 等人采用扰动方法各自独立地证明了在小 Knudsen 数的条件下的确可以从 Boltzmann 方程得到 Navier-Stokes 方程。此外, 从 Boltzmann 方程还可以导

出其他类型的连续型模型, 如 Burnett 方程、Super-Burnett 方程、矩方程等 [3, 4]。这些事实表明, 动理学理论比宏观连续模型有更大的适用范围, 并且可以视为流体微观分子模型和宏观连续模型的桥梁。

§1.1.2 数值方法

无论微观分子动力学的牛顿方程, 还是介观动理学的 Boltzmann 方程, 或是宏观连续模型的 Navier-Stokes 方程, 都是很复杂的微分方程, 一般情况下都难以用分析的方法求得解析解。随着计算机硬件和软件技术的巨大发展, 数值模拟方法已经成为研究各类流动现象的重要手段, 并逐渐发展成为与实际实验和理论分析同等重要的一种基本工具。依据所采用的流体模型或设计的出发点, 流动的数值模拟方法也可以分为宏观方法、微观方法和介观方法。

§1.1.2.1 基于连续模型的数值方法

在连续介质假设基础上建立的流体运动方程在大多数情况下能够反映流动的物理规律。以这些非线性微分方程为出发点, 采用有限差分、有限体积、有限元或谱方法等数值格式对微分方程进行离散, 得到相应的代数方程组或常微分方程系统, 然后再用标准的数值方法求解。20 世纪 60 年代中期以来, 随着计算机技术的进步, 人们发展了多种数值方法来求这些偏微分方程, 并形成了流体力学的一个分支——计算流体力学 (Computational Fluid Dynamics, CFD)。这是目前流体计算的最成熟和最成功的方法, 已发展出多种商业软件。这类方法不但被用于流体力学的理论研究, 而且在工业技术部门也得到了广泛的应用。目前国内外都有许多 CFD 著作, 如文献 [5 ~ 7], 在此不赘述。

§1.1.2.2 分子动力学模拟

分子动力学模拟 (Molecular Dynamics Simulation) 是用数值方法求解分子运动方程 (1.1.3), 并确定每个分子在各时刻的速度和位置。对该二阶微分方程, 虽然原理上可以采用任何的常微分方程求解方法, 但是由于计算过程中需要求出每个分子的受力, 因此算法中要尽量避免使用多次计算作用力的算法, 如 Runge-Kutta 方法。此外, 分子动力学模拟中一般采用一个固定的小时间步长, 而不采用动态调整的时间步长。目前应用最为广泛的方法主要有两类, 即精度较低的蛙跳格式和精度较高的预估—校正方法 [1]。

由于分子动力学模拟方法是基于最基本的运动规律, 原则上可以用于模拟任意的流体系统, 而无需对输运参数和热力学行为作先验的假设。目前分子动力学模拟方法已经用于化学、生物学、物理学和材料科学等领域。虽然分子动力学模拟方法具有上述这些优点, 但要有效模拟一个流体系统, 所需的分子数目往往非常庞大。同时, 模拟过程中系统演化的步长必须很小, 并且在每一个时间步都需要根据

作用在每个分子上的作用力和前一时刻的位置来计算其新的位置和速度,对在前一时刻发生碰撞的任何分子,都要进行判别并计算其新轨道。这显然需要非常大的计算量和存储量,即使模拟一个小尺寸流体系统在很短时间内的分子演化过程,也需要花费很长的计算时间。

§1.1.2.3 介观方法

介观方法是近年受到广泛关注的一类流体模拟方法。现有介观方法大体上可以分为两类:其一是以动理学理论的 Boltzmann 方程为基础,通过数值求解分布函数的获得宏观流动信息;其二是构造新的介观流体模型,通过模拟系统的真实物理过程再现流动现象。前者如求解线性化 Boltzmann 方程的有限差分方法^[8]、基本解方法^[9]、离散坐标方法^[10],求解非线性 Boltzmann 方程的有限差分——Monte-Carlo (FDMC) 方法^[11]、气体动理学格式 (Gas-Kinetic-Scheme, GKS)^[12] 等。后者则不是直接求解 Boltzmann 方程,而是直接从流动的物理过程出发。其中最为著名的当属直接模拟 Monte-Carlo (Direct Simulation Monte-Carlo, DSMC) 方法^[13]。此外,还有较早的离散速度模型 (Discrete-Velocity Model, DVM)^[14],以及 20 世纪 70 年代中期以来发展起来的格子气自动机 (Lattice Gas Automata, LGA) 模型^[15~18]、80 年代末 90 年代初提出的格子 Boltzmann 方程 (Lattice Boltzmann Equation, LBE) 方法^[19, 20]、90 年代初期发展的耗散粒子动力学 (Dissipative Particle Dynamics, DPD) 方法^[21, 22] 等。这些方法中, FDMC、DSMC、LGA、DPD 等属于随机型方法,具有一定的统计误差;其他的几类方则属于确定型方法,误差主要来源于模型精度。

由于介观方法以介观动理学模型为基础,既具有微观方法假设条件较少的特点,又具有宏观方法不关心分子运动细节的优势。因此,介观方法在处理具有多尺度、多物理的复杂流动问题中具有较大优势和潜力。近年国际上关于介观模型和数值方法的研究非常活跃,目前以介观方法为主题的国际会议就有两大系列:离散模拟流体动力学国际会议 (International Conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics, DSFD) 和工程与科学中的介观方法国际会议 (International Conference for Mesoscopic Methods in Engineering and Science, ICMMES)。在现有介观方法中,格子 Boltzmann 方法是近年最为人们关注的方法,在基础理论和实际应用方面都取得了很多成果,并且国际上已经开发了以其为基础的商业软件 (美国 Exa 公司的 PowerFlow 系列)。

§1.1.3 各类模型和方法的适用范围

对同一个流体系统而言,微观、介观和宏观三类流体模型是同一物理规律 (质量、动量和能量的守恒) 的不同刻画形式,因此在一定条件下它们是等价的。但是,

由于理论出发点的不同或问题的实际限制,三类模型各有自己的适用范围,相应的数值方法也有各自的适用条件。

通常情况下的流体都可以视为连续地充满整个流场,可采用宏观模型来描述其运动。在连续模型中,无论是液体还是气体,其控制方程是相同的,流体的不同特性表现在输运系数(黏性系数、热传导系数、扩散系数等)的差异。在这种情况下,可以使用各类基于宏观模型的 CFD 方法来模拟流动现象。但是,也有一些情况我们不能采用连续介质这一假设,例如高空非常稀薄的气体流动和微器件内的气体流动等,而只能采用微观分子模型或介观动理学模型。

对微观分子动力学模型而言,它的假设条件最少,因而原理上应用范围基本不受限制。但是,一个现实的问题是受现有计算条件的限制,目前还仅仅限于纳米尺寸的系统 and 纳秒时间内的演化过程,存在时间尺度和空间尺度上的局限性。近年国际上逐渐开始研究分子动力学和与其他连续方法相结合的跨尺度方法,试图拓展其应用范围,但这类方法仍存在尺度耦合问题。

介观层次的动理学模型没有连续性假设的要求,因而原理上可以用于宏观模型失效的小尺度流体系统。的确,实验和理论都已证明 Boltzmann 方程可以用于从自由分子流到宏观连续流的气体流动,但液体系统的动理学理论还远未成熟。基于介观理论或模型的数值方法也具有适用范围广的特点。一方面,由于没有连续介质假设,可以用于模拟非连续流动问题,如离散坐标方法和 DSMC 方法都已比较成功地用于 Knudsen 数较大的气体流动;另一方面,介观方法模拟的时间尺度和空间尺度一般都大于分子动力学方法的尺度,因此可以用于尺寸较大的系统在较长时间内的演变过程,如 GKS 和 LBE 方法已被用于模拟微米尺度和宏观尺度的流动问题。

总之,针对一个给定的流动对象,在选取流体模型和数值方法时,应该根据流动的物理规律和自身特点来选择,既要保证模型或方法的合理性,也要兼顾实际的计算成本。

§1.2 格子 Boltzmann 方法

§1.2.1 格子 Boltzmann 方法的基本结构

格子 Boltzmann 方程模型包含三个要素:流体粒子的离散速度集合、格子结构和演化方程。它描述了具有离散速度的流体粒子分布函数在一个固定格子上的运动过程

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \Omega_i(\mathbf{x}, t) \quad (1.2.1)$$

其中 $\mathbf{x} \in \mathcal{L}$ 是格子 $\mathcal{L}$ 上的一个格点, $\{\mathbf{c}_i : i = 1, 2, \dots, b\}$ 是流体粒子的离散速度集

合, δ_t 为离散时间步长, t 为当前时间步; f_i 是以速度 $\mathbf{c}_i$ 运动的速度分布函数, Ω_i 是碰撞算子, 表示分子间的碰撞对速度分布函数的影响。 $\mathcal{L}$ 一般是一个自封闭系统, 即如果 $\mathbf{x} \in \mathcal{L}$ 则 $\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta_t \in \mathcal{L}$, 所以格子 Boltzmann 方法中流体粒子总是在网格线上运动。流体的宏观物理量即密度 ρ 、速度 $\mathbf{u}$ 和内能 e (或温度 T) 由离散分布函数的速度矩得到

$$\rho = \sum_i f_i, \quad \rho \mathbf{u} = \sum_i \mathbf{c}_i f_i, \quad \rho e = \frac{\rho D R T}{2} = \frac{1}{2} \sum_i (\mathbf{c}_i - \mathbf{u})^2 f_i \quad (1.2.2)$$

其中 D 为空间维数。

演化方程 (1.2.1) 又称为格子 Boltzmann 方程 (Lattice Boltzmann Equation, LBE), 它可以看作是 LGA 演化方程的统计平均, 也可以看作是连续 Boltzmann 方程 (1.1.8) 的一个特殊离散格式。LBE 中的碰撞算子反映了微观流体粒子的相互作用, 因此对模型能否准确刻画流体系统的物理规律起着关键的作用。目前 LBE 一般采用线性化碰撞算子, 即

$$\Omega_i = \sum_j K_{ij} [f_j - f_j^{(eq)}] \quad (1.2.3)$$

其中 $\mathbf{K} = [K_{ij}]$ 是一个 $b \times b$ 的矩阵 (碰撞矩阵), $f_i^{(eq)}$ 是依赖宏观物理量的平衡态分布函数。因此, 碰撞矩阵和平衡态分布函数完全决定了碰撞算子的特性, 也决定了一个 LBE 模型刻画流动问题的能力和精度。当前的 LBE 模型主要是为求解小 Mach 数近似不可压 Navier-Stokes 方程设计的, 但也有学者在研究可用于大 Mach 数可压缩流动的 LBE 模型。

从方程 (1.2.1) 可以发现, 格子 Boltzmann 方法是一种不同于传统数值方法的流体计算和建模方法。从离散的网格来说, LBE 具有 Euler 方法的属性; 从离散的粒子观点来看, LBE 又具有 Lagrange 方法的特点。LBE 的这种特性使其具有如下的几个显著特点: 首先, 虽然 LBE 模型主要用于模拟宏观连续流动, 但它不是基于连续模型的 Navier-Stokes 方程, 而是基于介观模型, 本身没有连续介质条件的假设。因此, 只要设计恰当, 可以用于描述微尺度、稀薄流等非连续流动问题。其次, 格子 Boltzmann 方法的微观粒子背景使得它可以比较直观、方便地处理流体内部以及流体与周围环境的相互作用, 从而在多组分、多相态系统、界面动力学、渗流等复杂流动现象的描述方面, 比传统的数值方法更有优势。最后, 从计算的角度看, LBE 的演化过程物理清晰, 计算简单, 容易编程, 并且计算是局部的, 具有良好的并行性和可扩展性, 对大规模流动问题的计算具有很大优势。

§1.2.2 格子 Boltzmann 方法的发展历史和研究现状

由于格子 Boltzmann 方法具有许多独特的优势, 自提出之日起就受到流体力学、物理学、数学、计算机技术等领域的众多专家学者的注意, 在理论、模型和应

用各个方面都迅速发展。图 1.2.1 显示了 Web of Science 数据库收录的学术论文情况，从中可以看出研究成果几乎呈指数增长，反映了该领域的活跃程度。

格子 Boltzmann 方法的发展历史大致可以分为如下三个阶段。

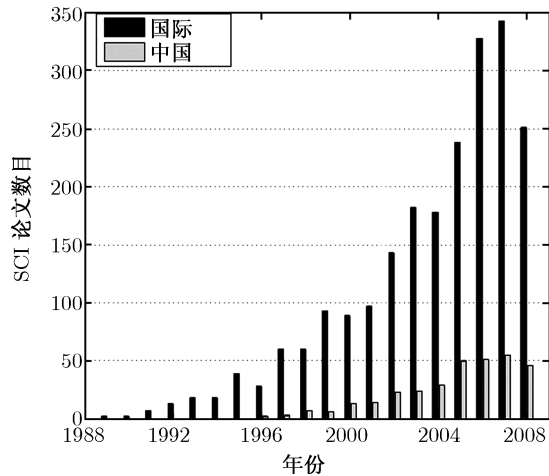


图 1.2.1 Web of Science 收录的与格子 Boltzmann 方法有关的论文
(2008 年数据为 1~8 月)

§1.2.2.1 1988~1992 年: 起始阶段

在这一时期，受格子气自动机的启发，国际上的几个研究小组提出了格子 Boltzmann 方法的基本框架，并研究了一些基本理论。LGA 是一种流体模型，它将流体视为驻留在一个规则格子上的大量假想粒子，粒子按照一定的规则在格子上进行碰撞和迁移，并通过统计平均得到宏观量 [23, 24]。虽然 LGA 方法具有物理清晰直观、计算稳定等优点，但也有一些不足，如含有统计噪声、不满足 Galileo 不变性，并且压力与速度相关等。此外，从计算的角度看计算具有指数复杂性等。这些缺点极大地限制了 LGA 方法的应用。

为了消除统计噪声，McNamara 和 Zanetti 在 1988 年首次提出在 LGA 中直接使用布尔变量的统计平均量粒子分布函数进行演化 [19]，即使用 LBE 代替 LGA 的演化方程进行计算。这就是最早的 LBE 模型。但是这一模型仍然采用 LGA 的碰撞方式，具有指数复杂性。Higuere 和 Jinenez 在 1989 年对上述模型作了进一步的简化，提出了线性化碰撞算子模型 [25]。该模型引入平衡态分布函数，并引入了碰撞矩阵对碰撞算子作线性化处理，使计算复杂性大大下降。但是这种方法的数值稳定性较差。Higuere 等人在 1989 年进一步提出了强化算子格子 Boltzmann 模型 [26]，平衡态分布函数和碰撞算子的选择不再依赖原有的 LGA 模型，而是根据所要描述的宏观方程确定，碰撞矩阵是一个对称的循环矩阵，且其元素仅仅与离散

速度的夹角有关。

1991~1992年,几个不同的研究小组分别独立提出了一种更简单的模型,即单松弛(Single Relaxation Time, SRT)或BGK(Bhatnagar-Gross-Krook)模型^[27~29]。在格子BGK(LBGK)模型中,碰撞过程用趋于某一平衡态的松弛过程代替,碰撞矩阵由一个称为松弛时间的参数确定。LBGK模型极大地简化了计算量,并且在一定条件下可以从该模型导出正确的Navier-Stokes方程,有效克服了LGA方法的不足。这类模型的提出使LBE的研究达到一个新的水平,也是目前应用最广泛的模型。几乎同时,法国学者提出了更一般性的多松弛时间模型^[30]。

§1.2.2.2 1993~1998年:基础理论的完善和应用模型的建立

在这一期间,LBE的特点和潜力激发了不同领域众多学者的极大热情,在基础理论、基本模型和工程应用方面都取得了长足进展。

首先,在基础理论方面,一些学者从不同角度证明了格子Boltzmann方程可以严格地从动理学中的连续Boltzmann方程通过适当的离散获得^[31~33]。这种观点不但建立了格子Boltzmann方程与经典动理学理论之间的联系,有助于更深刻地理解其内涵^[34],而且对构建新的模型提供了思路。这期间也有学者分析了LBE的稳定性问题^[35]。

在基本模型方面,Karlin等人提出了基于最大熵原理构造平衡态分布函数的熵LBE模型,对使用多项式形式平衡态的模型在稳定性方面有很大的改进^[36];针对包含传热的流动问题,人们建立了单松弛时间、两松弛时间、多松弛时间的单分布函数模型^[37~41],以及使用速度和温度两类分布函数的双分布函数模型^[42, 43];针对多组分系统和多相流系统,分别建立了颜色模型、伪势模型、动理学模型等^[44~53];针对流体-固体颗粒系统,建立了考虑颗粒大小、形状、平动、转动的基于流体与颗粒微观碰撞的LBE模型^[54~58];针对化学反应系统,建立了反应扩散问题和燃烧的模型^[59, 60];针对需要非标准规则网格的流动,构建了插值补充、局部网格加细、有限差分、有限体积等非标准LBE模型^[61~65]。此外,还建立了模拟磁流体、非牛顿流体、颗粒流、聚合物流动、血液流等格子Boltzmann模型等^[66~70]。

在应用方面,LBE也被作为一种有效的计算方法用于研究各种具体的流动问题。首先,针对实际应用中需要特别小心的边界条件问题,一些学者分析了常用的处理无滑移边界的反弹格式,发现其精度较低^[71~74]。进而一些学者提出了多种新的边界格式,如半步长反弹格式、动力学格式、插值或外推格式等^[55, 62, 75~81]。利用其计算优势,LBE方法也被用于湍流模拟。与传统的湍流模拟方法类似,使用LBE模拟湍流也有三类方式,即直接模拟方法、大涡模拟方法和湍流模式方法^[82~86]。基于处理复杂几何边界的优势,利用格子Boltzmann方法模拟复杂孔

隙介质内的微观渗流一直是一个重要应用领域。事实上,早在 1987 和 1988 年,就有学者将 LGA 方法应用于微观渗流的模拟^[87, 88]。Succi 等也在 1989 年首次应用强化算子模型验证了渗流的 Darcy 定律^[89]。LBGK 模型提出后,一些学者也将此模型应用于孔隙介质内的渗流流动^[90, 91],后来也有不同的研究小组提出了直接模拟宏观渗流的模型^[92~95]。在多相流和多组分流体中 LBE 也得到了比较成功的应用,如对 spinodal 分解、凝结、合并、两相渗流等过程的模拟^[96~100]。在其他方面如化学反应系统中的非线性现象、燃烧、浅水波等也有应用。

这一时期的研究主要集中于 LBE 的理论和应用中的基本问题和模型,应用研究比较少并且大多局限于比较简单的问题。

§1.2.2.3 1999 年至今: 快速发展及认识的深化

这一时期, LBE 方法无论在理论还是应用方面都受到越来越多的重视,发展十分迅速,并且人们对其本质有了新的认识。首先在 LBE 的一些基本问题上有所发展,例如 Guo 等人提出了处理外部或内部相互作用力的新方法^[101], Yong 和 Luo 证明了一些常用的 LBGK 模型不满足 H 定理^[102, 103]。同时,一些经典的 LBE 模型也在不断完善和发展。例如在多组分和多相流模型方面,相继发展了不可压模型、含有温度变化的热模型、三相(组分)模型等,以及提高模型性能(稳定性、密度比)的新方法^[104~111],并且对多相流模型的理论基础也进行了深入探讨^[112, 113]。以往的多相流 LBE 模型大都属于界面捕捉类型,最近 Lallemand 等人提出了基于界面跟踪方法的 LBE 模型^[114]。渗流模型方面,人们不但继续关注孔隙尺度的直接模拟,也开始提出可以用于大规模工程实际问题的宏观渗流 LBE 模型^[115~117]。热流动 LBE 模型也得到了进一步的发展,如考虑黏性热耗散的模型^[118, 119]和考虑辐射的模型^[120, 121]。此外,值得一提的是在基本模型方面 90 年代提出的多松弛时间模型重新受到人们的重视^[122]。

这一时期 LBE 也得到大量的应用,如对多种复杂湍流的直接模拟、大涡模拟和耦合湍流模式的模拟等^[123~125],并且以 LBE 为基础的商业软件(如美国 EXA 公司的 PowerFlow 系列,参见 <http://www.exa.com>) 的出现大大促进了这一方法在实际工程中的应用。在其他方面,如渗流、多相流、电动力学等领域的应用也日益增多^[126~130]。

除了这些传统的宏观尺度流动外,最近人们开始关注 LBE 在微尺度流动方面的应用。这一新的应用方向始于 2002 年的两篇论文^[131, 132]。由于 LBE 的介观特点,在模拟这类不连续的流动方面具有很大的潜力,因此吸引了越来越多学者的注意。近年来已有非常多的相关学术论文发表,并且仍在逐年上升。

§1.2.3 国内发展状况

LBE 方法在国际上的快速发展也逐渐引起国内学者注意,并开展了相应的研究工作。国内对 LBE 的研究可以分为三个阶段:① 1990~1995 年间的跟踪探索阶段。早在 20 世纪 80 年代末和 90 年代初,我国的武汉大学、吉林大学和华中科技大学就开始了格子气和 LBE 的研究。但这一阶段国内研究单位和人员都较少,工作偏重于方法的简单实现,原创性成果较少,国际影响不大。② 1996~2001 年间的深入研究阶段。这期间国内一些理论工作者开始进入 LBE 的研究,如华中科技大学煤燃烧国家重点实验室、复旦大学物理系、清华大学摩擦科学实验室等,都开展了各具特色的研究工作。这一阶段国内的工作已经比较深入,涉及了 LBE 的基本原理、模型和方法的研究,研究成果也开始在国际重要学术刊物上发表。③ 2002 至今的快速发展阶段。随着 LBE 自身的发展以及不同专业问题的需求,这一阶段国内越来越多的单位和学者开始进入 LBE 领域。根据中国期刊网发表的学术论文统计(图 1.2.2),相关论文每年都在不断增长,研究队伍也在迅速扩大。同时,我国学者在国际上发表的论文也逐年增多,国际交流日趋广泛,学术影响不断扩大。

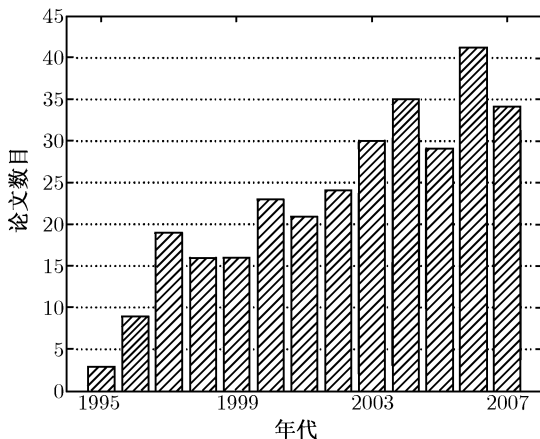


图 1.2.2 中国期刊网收录的与格子 Boltzmann 方法有关的论文

应当指出的是,在 LBE 的发展过程中,华人学者做出了杰出的贡献。许多基本概念、基本模型和理论都是华人科学家提出和完成的。在国内, LBE 的研究开展得也比较早,几乎与国际同步,并取得了很多有价值的成果。早在 20 世纪 80 年代末和 90 年代初,国内就开始对格子气自动机进行研究^[133, 134],并于 2002 年出版了 LBE 的专著^[135]。1999 年,海内外的华人学者在北京举办了基于格子的方法的研讨会,促进了国内研究的发展。格子 Boltzmann 方法的主要国际会议之一 DSFD 于 2002 年在我国上海召开了第十一届会议,另一个主要国际会议 ICMMES 于 2005 年在香港召开了第二届会议,并将于 2009 年在我国召开第六届会议。2005

年，国家自然科学基金委员会召开了“格子 Boltzmann 方法在工程热物理领域的应用”学术研讨会。这些学术活动极大地推动了国内在这方面的研究工作，国内学者的国际影响也日益增大。

最后应当指出的是，作为一个新兴的交叉学科，LBE 仍处于不断的发展之中。虽然近年来在基本理论、基本模型和应用等各方面都有所发展，但仍有一些基本问题有待解决。为对这一方法有一个更全面的认识，建议读者参考几篇不同时期的综述性论文^[136~140]。

第二章 气体动理学理论

气体动理学理论 (Gas Kinetic Theory) 是从气体分子的微观机制研究其宏观特性的理论。如通过考察气体分子之间的相互作用, 获得气体的黏性系数、热传导系数和扩散系数等宏观物性; 通过考察分子的运动过程获得流体的压力、动量、能量等宏观物理量的演变规律。因此, 动理学理论是联系气体微观模型和宏观模型的桥梁, 通过它我们可以建立气体的宏观运动与微观分子运动之间的联系, 也有利于我们深刻地认识各类丰富多彩的宏观流动现象的微观本质。本章我们将对这一理论的基础知识做一简要介绍。

§2.1 基本概念

§2.1.1 气体的分子模型

气体动理学理论的基础是分子模型, 即认为气体是由大量分子 (10^{23} 量级) 构成的, 并且分子总是不停地做随机运动。气体分子可以是不包含内部结构的单原子分子, 也可以是由多个原子构成的包含内部结构和自由度的分子。任意两个分子之间的相互作用可以用一个与距离有关的势函数刻画, 如最简单的硬球分子模型认为两个分子只有在接触时才发生作用, 分子间的势函数为

$$\phi(r) = \begin{cases} \infty, & r \leq \sigma \\ 0, & r > \sigma \end{cases} \quad (2.1.1)$$

其中 r 是分子之间的距离, σ 是分子直径。

在动理学理论中描述分子之间相互作用的另外一种常用模型是逆幂律模型, 分子之间的相互作用势函数为

$$\phi(r) = \frac{\varkappa}{s-1} \left(\frac{1}{r} \right)^{s-1} \quad (2.1.2)$$

其中 $s \geq 1$ 是相互作用指数, $\varkappa$ 是相互作用强度。特别地, $s = 5$ 时称为 Maxwell 分子模型。Maxwell 分子是一种假想的分子模型, 后面我们将看到 Maxwell 分子之间的碰撞特性在数学上容易处理。当 $s = \infty$ 时, 逆幂律分子模型退化为硬球模型。

硬球模型和逆幂律模型只能反映分子之间的排斥作用。另外一种更具有一般性的分子相互作用模型是 Lennard-Jones 模型

$$\phi(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2.1.3)$$

其中 ϵ 是表征分子之间相互作用强度的参数, 具有能量的量纲; σ 这里不是分子直径, 而是表征分子相互作用范围的一个参数。Lennard-Jones 势表现了分子距离较大时相互吸引、较近时相互排斥的特性。

流体的分子模型中有两个基本的特征尺度。一个是分子本身的尺寸 σ , 另一个是分子之间的平均距离 $\delta = n^{-1}$ (n 是分子数密度)。气体与液体及固体的一个主要区别是, 气体分子之间的平均距离远大于分子本身的尺寸, 因此分子之间的相互作用一般较弱, 除非两个分子的距离变得非常接近 (此时我们可以认为它们发生了“碰撞”)。由于气体的密度比较小, 通常可以认为只有二体碰撞发生, 而多个分子之间的碰撞可以忽略。

除了分子大小和分子平均距离外, 气体系统还有另外一个重要的特征尺寸——分子平均自由程 λ 。我们知道在气体中一个分子发生碰撞后, 会自由飞行一段距离, 然后发生下一次碰撞。分子在两次连续碰撞之间的飞行距离称为该分子的自由程, 其平均值即分子平均自由程。 λ 是刻画气体微观特性的一个重要特征量, 它与气体的分子特性有关。如对硬球分子, λ 与气体数密度 n 和分子直径 σ 有关

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}n\pi\sigma^2} \quad (2.1.4)$$

对硬球分子, 可以证明其动力黏性 $\mu^{[3]}$ 为

$$\mu = 1.016 \times \frac{5}{16\sigma^2} \sqrt{\frac{mk_B T}{\pi}} \quad (2.1.5)$$

因此, 平均自由程和黏性之间的关系近似为

$$\lambda = \frac{\mu}{p} \sqrt{\frac{\pi RT}{2}} \quad (2.1.6)$$

Cercignani 将这一结果进行推广^[9], 认为对一般的气体系统其平均自由程也可根据黏性、压力和温度确定。

§2.1.2 速度分布函数

对由巨量分子数 ($\sim 10^{23}$) 构成的气体体系, 像分子动力学那样根据分子之间的作用力跟踪每个分子的运动对大多数系统是不现实的。应用统计力学方法研究这些离散分子的统计特性, 如一个小体积单元和小时间间隔内的平均分子数、平均速度、平均能量及其他相关物理量, 则是必须且可行的有效方法, 这也是气体动理学理论的出发点。

气体动理学理论的一个最基本和最重要的概念是分子 (或粒子) 速度分布函数 $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$, 其定义为: 在时刻 t , 以 $\mathbf{x}$ 为中心的空间微元 $d\mathbf{x}$ 内, 速度在 $\boldsymbol{\xi}$ 和 $\boldsymbol{\xi} + d\boldsymbol{\xi}$ 之间的分子数为 $f d\mathbf{x} d\boldsymbol{\xi}$ 。应当指出的是, 这里我们针对的是不包含内部自由度的简单分子, 即只考虑分子的平动而忽略其转动。根据分布函数的定义, 容易知道微元 $d\mathbf{x}$ 内的分子数为 $dN = \left[\int f d\boldsymbol{\xi} \right] d\mathbf{x}$, 所以分子数密度 $n(\mathbf{x}, t)$ 为

$$n = \frac{dN}{d\mathbf{x}} = \int f d\boldsymbol{\xi}$$

类似地, 该微元内这些分子携带的动量和动能为 $d\mathbf{J} = \left[\int f m \boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\xi} \right] d\mathbf{x}$ 及 $dE = \left[\int f \frac{m \boldsymbol{\xi}^2}{2} d\boldsymbol{\xi} \right] d\mathbf{x}$ (m 为分子质量), 因此总动量和总能为

$$\rho \mathbf{u} = \frac{d\mathbf{J}}{d\mathbf{x}} = m \int \boldsymbol{\xi} f d\boldsymbol{\xi}$$

$$\rho E = \rho e + \frac{1}{2} \rho u^2 = \frac{dE}{d\mathbf{x}} = m \int \frac{\boldsymbol{\xi}^2}{2} f d\boldsymbol{\xi}$$

其中 $\rho = mn$ 为质量密度, e 为单位体积的内能。

我们还可以根据 f 得到不同微观物理量对应的宏观统计量。事实上, f/n 是从微元内的 $n d\mathbf{x}$ 个分子中随机选取一个速度位于 $\boldsymbol{\xi} - \frac{d\boldsymbol{\xi}}{2}$ 和 $\boldsymbol{\xi} + \frac{d\boldsymbol{\xi}}{2}$ 之间的分子的概率, 因此与分子相关的微观变量 ψ 对应的宏观平均值是

$$\langle \psi \rangle = \frac{1}{n} \int f \psi d\boldsymbol{\xi}$$

$n\langle \psi \rangle$ 有时也称为 f 的矩。特别地, $n\langle \boldsymbol{\xi}^k \rangle$ 称为 f 的 k 阶速度矩。与 ψ 相对应的通量则定义为

$$n\mathcal{F}_\psi = n\langle C\psi \rangle$$

其中 $\mathbf{C} = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}$ 。例如, 宏观流动常用到的动量通量和热通量分别表示为

$$\mathbf{P} = m \int f \mathbf{C} \mathbf{C} d\boldsymbol{\xi}, \quad \mathbf{Q} = m \int f \frac{C^2}{2} \mathbf{C} d\boldsymbol{\xi}$$

§2.2 Boltzmann 方程

Boltzmann 方程是描述粒子速度分布函数 f 时空变化的守恒方程。如第一章介绍, Boltzmann 方程可以按照统计力学方法, 从气体分子的微观运动经一系列的简化、假设严格导出。这里我们介绍一种不太严格但更直观的推导方法。我们

考察气体系统中控制单元 $dV = [\mathbf{x}, \mathbf{x} + d\mathbf{x}]$ 内的气体分子, 并假设气体分子受到一个外力 $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$ 的作用。在时刻 t , 速度位于 $[\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi} + d\boldsymbol{\xi}]$ 的分子数为 $dN = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)d\boldsymbol{\xi}dV$ 。经历一个短时间 dt 后, 如果分子之间没有碰撞, 则这些分子的位置变为 $\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}dt$, 速度变为 $\boldsymbol{\xi}' = \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}dt$ 。这两个时刻对应相空间微元 $S = [\mathbf{x}, \mathbf{x} + d\mathbf{x}] \times [\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi} + d\boldsymbol{\xi}]$ 和 $S' = [\mathbf{x}', \mathbf{x}' + d\mathbf{x}] \times [\boldsymbol{\xi}', \boldsymbol{\xi}' + d\boldsymbol{\xi}]$ 内的分子数相同, 即

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}dt, \boldsymbol{\xi} + \mathbf{a}dt, t + dt)d\boldsymbol{\xi}d\mathbf{x}V - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)d\boldsymbol{\xi}d\mathbf{x} = 0$$

或

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f = 0$$

如果分子之间发生碰撞, 分子的运动速度和路径会发生改变。 t 时刻位于集合 S 内的一些分子会因为碰撞在时刻 $t + dt$ 不再位于集合 S' 内; 相应地, 一些原先不在 S 内的分子会因为碰撞进入 S' 内。进入 S' 的净分子数正比于 $d\mathbf{x}d\boldsymbol{\xi}dt$, 可以表示为 $\Omega d\mathbf{x}d\boldsymbol{\xi}dt$, $\Omega(f)$ 是表示碰撞对影响的碰撞算子。这种情况下, 速度分布函数的演变方程为

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f = \Omega(f) \quad (2.2.1)$$

这就是 Boltzmann 方程。

对稀薄气体, 我们可以认为分子之间的碰撞主要为二体碰撞。此时, 碰撞算子可以用一个积分表示, 即

$$\Omega(f(\boldsymbol{\xi})) = \int [f'f'_1 - ff_1] B(\theta, |\mathbf{V}|) d\theta d\epsilon d\boldsymbol{\xi}_1 \quad (2.2.2)$$

其中 $f = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ 和 $f_1 = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_1, t)$ 表示碰撞前的速度分布函数, 带上标 “ r ” 的分布函数表示碰撞后的量, 即 $f' = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}', t)$, $f'_1 = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}'_1, t)$ 。 $\mathbf{V} = \boldsymbol{\xi}_1 - \boldsymbol{\xi}$ 为两分子碰撞前的相对速度, Θ 为速度矢量 $\boldsymbol{\xi}' - \boldsymbol{\xi}$ 与 $\mathbf{V}$ 之间的夹角; 积分变量 ϵ 是与 $\mathbf{V}$ 垂直的平面内的角度变量; $B(\theta, |\mathbf{V}|)$ 是与分子间相互作用有关的一个非负函数。例如, 对于直径为 σ 的硬球分子气体, $B(\theta, |\mathbf{V}|) = 4\sigma^2 |\mathbf{V}| \sin \theta \cos \theta$; 而对 Maxwell 分子, $B(\theta, |\mathbf{V}|) = B(\theta)$, 即与分子碰撞的相对速度无关, 这将极大简化 Boltzmann 方程的有关理论, 因此在气体动理学研究中 Maxwell 分子是一种重要的分子模型。

碰撞算子 (2.2.2) 从统计角度描述了分子之间的微观相互作用, 因此具有一些能够反映分子碰撞基本物理规律的特殊性质。例如, 可以证明 $\Omega(f)$ 具有如下的对称性质

$$\begin{aligned} \int \Omega(f)\psi(\boldsymbol{\xi})d\boldsymbol{\xi} &= \frac{1}{4} \int [\psi(\boldsymbol{\xi}) + \psi(\boldsymbol{\xi}_1) - \psi(\boldsymbol{\xi}') - \psi(\boldsymbol{\xi}'_1)] \\ &\quad \times [f'f'_1 - ff_1] B(\theta, |\mathbf{V}|) d\theta d\epsilon d\boldsymbol{\xi}_1 d\boldsymbol{\xi} \end{aligned} \quad (2.2.3)$$

其中 $\psi(\boldsymbol{\xi})$ 为任意函数。对于弹性碰撞, 碰撞过程中分子的质量、动量和能量守恒, 从而可以得到碰撞前后分子速度的关系

$$\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\xi}_1 = \boldsymbol{\xi}' + \boldsymbol{\xi}'_1, \quad |\boldsymbol{\xi}|^2 + |\boldsymbol{\xi}_1|^2 = |\boldsymbol{\xi}'|^2 + |\boldsymbol{\xi}'_1|^2$$

因此, 如果令 $\psi = 1, \boldsymbol{\xi}, |\boldsymbol{\xi}|^2$, 则从式 (2.2.3) 可知

$$\int \Omega(f) \psi(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} = 0$$

即碰撞算子满足质量、动量和能量守恒。更一般地, 满足上式的任一函数 $\psi(\boldsymbol{\xi})$ 称为**碰撞不变量**(Collision Invariant) 或**总和不变量**(Summational Invariant)。 $\varphi_i = 1, \boldsymbol{\xi}$ 及 $\xi^2/2$ 则称为**基本碰撞不变量**。可以证明, 任一碰撞不变量 $\psi(\boldsymbol{\xi})$ 总可以表示为 5 个基本碰撞不变量的线性组合^[4]。

§2.3 Boltzmann H 定理

Boltzmann 方程是一个复杂的积分-微分方程, 一般情况下分布函数 f 难以直接求出。但是, 该方程描述的微观演化过程的一些物理特征可以从方程本身获得。Boltzmann H 定理就是这样一个描述系统总体演化趋势的重要结论。

首先定义分布函数的 H 函数

$$H(t) = \int f \ln f d\boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{x}$$

其中 f 是 Boltzmann 方程的任一取值为正的解, 积分范围是整个系统和速度空间。假设系统不受外力, 对 H 关于时间求导可得

$$\frac{dH}{dt} = \int (1 + \ln f) \frac{\partial f}{\partial t} d\boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{x}$$

将 Boltzmann 方程代入上式得到

$$\frac{dH}{dt} = - \int \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla (\ln f) d\boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{x} + \int \Omega(f) (1 + \ln f) d\boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{x} \quad (2.3.1)$$

根据 Gauss 定理, 右端第一项可以表示为面积分形式

$$- \oint \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{n} f \ln f d\boldsymbol{\xi} dS$$

其中 $\boldsymbol{n}$ 为系统边界的外法向单位矢量。如果系统是孤立系统, 该边界积分为 0。另外, 根据碰撞算子的对称性质, 式 (2.3.1) 右端第二项可以表示为

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4} \int [\ln f + \ln f_1 - \ln f' - \ln f'_1] [f' f'_1 - f f_1] B(\theta, |\mathbf{V}|) d\theta d\epsilon d\boldsymbol{\xi}_1 d\boldsymbol{\xi} \\ &= \frac{1}{4} \int [\ln f f_1 - \ln f' f'_1] [f' f'_1 - f f_1] B(\theta, |\mathbf{V}|) d\theta d\epsilon d\boldsymbol{\xi}_1 d\boldsymbol{\xi} \end{aligned} \quad (2.3.2)$$