

Lattice Boltzmann Method

Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes

格子玻尔兹曼方法

——基础与工程应用（附计算机代码）

[加]穆罕默德·阿卜杜勒马吉德 (A.A. Mohamad) 著

杨大勇 译

王沫然 审校



中国工信出版集团



电子工业出版社
Publishing House of Electronics Industry
<http://www.phei.com.cn>

Lattice Boltzmann Method
Fundamentals and Engineering Applications
with Computer Codes

格子玻尔兹曼方法
——基础与工程应用（附计算机代码）

[加]穆罕默德·阿卜杜勒马吉德 (A.A. Mohamad) 著

杨大勇 译

王沫然 审校

电子工业出版社

Publishing House of Electronics Industry

北京·BEIJING

内 容 简 介

本书是格子玻尔兹曼方法 (LBM) 方面的一本入门教材。本书从 LBM 的基本原理和常用模型入手, 采用循序渐进的方式, 逐步介绍了 LBM 在扩散、对流-扩散、等温和非等温不可压缩流体流动, 以及复杂流动等典型问题中的实际应用。本书提供了全部实例完整的计算机代码 (FORTRAN 语言编写), 针对扩散和对流-扩散问题, 还给出了有限差分法和 LBM 的对比程序和研究结果。全书理论简单, 程序结构清晰, 实用性强, 便于读者学习、调试和应用。

本书适用于高等院校和科研单位的研究生、高年级本科生和工程技术人员, 可作为能源、机械、数学、物理、力学、材料等领域的计算流体力学与计算传热学的教材或参考用书。

Translation from the English language edition:

Lattice Boltzmann Method—Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes

By A.A. Mohamad

Copyright ©Springer-Verlag London Limited 2011

Springer-Verlag London Limited is a part of Springer Science+Business Media

All Rights Reserved

本书简体中文专有翻译出版版权由 Springer Science + Business Media 授予电子工业出版社。专有出版版权受法律保护。

版权贸易合同登记号 图字: 01-2015-2566

图书在版编目 (CIP) 数据

格子玻尔兹曼方法: 基础与工程应用: 附计算机代码 / (加) 阿卜杜勒马吉德 (Mohamad, A.A.) 著; 杨大勇译.—北京: 电子工业出版社, 2015.6

书名原文: Lattice boltzmann method: fundamentals and engineering applications with computer codes
ISBN 978-7-121-25929-6

I. ①格... II. ①阿... ②杨... III. ①流体力学 IV. ①O351.2

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2015) 第 083103 号

策划编辑: 薄 宇

责任编辑: 董亚峰

特约编辑: 刘广钦

印 刷: 北京季峰印刷有限公司

装 订: 北京季峰印刷有限公司

出版发行: 电子工业出版社

北京市海淀区万寿路 173 信箱 邮编: 100036

开 本: 720×1000 1/16 印张: 13.25 字数: 326.4 千字

版 次: 2015 年 6 月第 1 版

印 次: 2015 年 6 月第 1 次印刷

定 价: 49.00 元

凡所购买电子工业出版社图书有缺损问题, 请向购买书店调换。若书店售缺, 请与本社发行部联系, 联系及邮购电话: (010) 88254888。

质量投诉请发邮件至 zltts@phei.com.cn, 盗版侵权举报请发邮件至 dbqq@phei.com.cn。

服务热线: (010) 88258888。

Simplicity is Embedded in Complexity
简单寓于复杂之中

译者序

格子玻尔兹曼方法 (LBM) 是一种介于宏观连续模拟与微观分子动力学模拟之间的介观模拟方法, 自 1988 年问世以来, 因其物理背景清晰、易于并行计算、程序易于实现等诸多优点, 迅速发展成为计算流体力学方面的一种强有力的数值模拟方法。应用研究涵盖了流体力学、传热学、量子力学、数学、计算机技术等诸多领域, 特别是在许多传统模拟方法难以胜任的微/纳尺度流动、多相流、多孔介质流、燃烧问题、化学反应流、晶体生长等领域取得了开拓性的进展, 已经成为相关领域研究的国际热点之一, 受到越来越多的关注。

在我国, LBM 相关领域的研究起步相对较晚, 却受到国内学者的广泛关注。特别是近年来, 越来越多的国内人员开始研究和应用 LBM, 我国学者在国际上发表的 LBM 相关论文已经占据国际论文的重要部分。

译者在参加国内一些相关学术会议时, 与不少同行及国内各大高等院校的研究生交流和探讨过程中, 发现一个几乎所有人都认同的问题, 那就是系统介绍 LBM 的低门槛、零基础的中文入门教材比较少。现有的相关书籍专业术语和理论推导深奥, 多数要求读者预先掌握大量的计算流体力学基础知识, 大篇幅复杂的偏微分方程让很多基础薄弱的读者望而却步。

本书作者穆罕默德·阿卜杜勒马吉德 (A. A. Mohamad) 教授是一位特别注重工程应用的专家, 主要从事计算流体力学与传热学、燃烧学、能源系统与环境等领域的研究, 具有丰富的工程经验和应用背景, 理解 LBM 初学者的需求。

本书的特点是尽量避免复杂的数学计算和物理理论, 将复杂问题简单化, 以一种浅显易懂的语言和循序渐进的方式介绍了 LBM 基础与工程应用。本书从粒子动力学理论到格子玻尔兹曼方程 (LBE), 再到对流-扩散方程, 衔接过渡自然; 从 LBE 到 BGKW

近似，再到 Chapman-Enskog 展开，作者应用一阶、二阶微积分方程，易于理解，使得数学和物理基础知识欠缺的读者也能够快速入门。

本书共有 8 章和一个附录，第 1、2 章介绍了 LBM 的理论基础和模型；第 3~6 章介绍了 LBM 在扩散、对流-扩散、等温和非等温不可压缩流体流动等领域的具体应用；第 7 章介绍了 LBM 的多松弛格式及应用；第 8 章概括介绍了 LBM 在复杂流动领域的应用情况。全书共有 15 个典型案例，如库埃特流、泊肃叶流、凸台流、障碍流、方腔流、Rayleigh-Benard 对流等。附录中提供了用 Fortran 语言编写的 15 个完整的程序，包括全书所有实例的程序代码及部分实例的有限差分法 (FDM) 代码。部分章节还提供了共计 16 个练习，方便读者进一步应用和提高。全书理论简单，程序结构清晰，实用性强，便于读者学习、调试和参考。

全书由南昌大学杨大勇翻译、整理和统稿，由清华大学王沫然审校，研究生肖水云、罗艳参与了部分程序调试和图片制作等工作，在此向她们表示感谢。电子工业出版社和 Springer 出版社为本译著的出版付出了巨大的努力，为我们提供了诸多指导与帮助，特此深表感谢，同时感谢薄宇老师出色的编辑工作。特别感谢本书原作者，穆罕默德·阿卜杜勒马吉德教授，在译者与作者的交流过程中，更是深刻地体会到其作为学术前辈对后辈的指导和帮助，本书的翻译过程也是一个很好的学习过程。本书的翻译工作得到了国家自然科学基金项目 (11302095) 的资助，在此表示感谢！

由于时间仓促和译者水平有限，书中难免有不妥和错误之处，恳请读者批评指正。

杨大勇

南昌大学

2015 年 3 月

前 言

计算方法已经成为一种研究和探索物理和化学现象本质，以及解决实际工程问题的强大技术。1956年，Turner 等人首次应用有限元方法（FEM）解决结构力学问题。20 世纪 60 年代末，FEM 成为一种解决由偏微分方程描述的固体力学、传热和流体动力学问题的强大技术。同时，有限差分法（FDM）也被广泛用于解决流体动力学问题。1980 年，有限体积法（FVM）由帝国理工学院开发，主要是为了解决流体动力学问题，此后，FVM 被广泛用于解决各类输运问题。实际上，FEM、FDM 和 FVM 均属于加权残值法（Weighted Residual Methods），唯一的区别是基函数和权函数的性质不同。1988 年，McNamara 和 Zaretti 引入玻尔兹曼方法（LBM），用于克服格子气自动机的缺点。从此，LBM 成为一种求解流体动力学问题的功能强大的替代方法。在传统的计算流体动力学（CFD）方法中，纳维-斯托克斯（NS）方程用于求解离散节点、单元或体积上的动量守恒方程，即将非线性偏微分方程转换成一组非线性代数方程，并通过反复迭代求解。在 LBM 中，流体由粒子群代替，粒子流沿着给定的方向（格子链）迁移并在格子结点处发生碰撞重整。LBM 可视为一种显式方法，碰撞和迁移过程都是局部的，易于编程，且具有良好的并行性。LBM 的另一个优点是它可以自然地处理复杂现象，例如，移动边界（多相流、凝固和溶解问题），而不需要解决传统计算流体动力学的界面追踪问题。

几年前，在拥有 FDM 和 FVM 的多年使用经验之后，笔者开始学习 LBM 方法。作为一个工程师，由于粒子动力学理论背景有限，经常会遇到一些难以理解的动力学专业术语。然而，LBM 方法简单性的优点吸引了笔者。可以预见，该方法在处理多相和多组分分流问题方面有广阔前景。LBM 方法与热力学问题的结合非常简单，而用传统的方法解 NS 方程是非常困难的。用传统 CFD 方法求解不可压缩流体，最耗时的过程就是求解压力项。每一步都需要求解拉普拉斯方程以满足连续方程，这个过程最耗费计算资源，

尤其是非稳态问题。由于 LBM 是一种显式方法，在 LBM 中不需要这个过程。当然，没有哪种方法是没有缺点的。

对于那些只有少量数学和物理背景知识但是想用这种强大方法的工程师和普通读者，笔者认为需要一本关于这方面的入门教材。本书是写给那些想用 LBM 模拟传热、传质和动量传递的工程师和科学家们的，尽力避免了复杂的理论和数学知识，而且，为了避免读者对复杂的符号产生困惑，用的都是数学中的一阶和二阶微积分符号。同时，本书从简单的一维问题开始逐步深入，使读者能更清晰地理解更复杂的问题。

笔者相信通过问题和应用示例的学习可以帮助读者更好地理解 LBM。由于工程专业的学生和一些理科生不具有动力学和统计学知识，本书在介绍 LBM 方法前，先介绍了动力学理论和统计学的基础，它是分子统计和微观分析的重要部分。本书采用循序渐进的方式，逐步加以介绍。为了帮助读者更好地理解本书内容，本书列出了许多参考文献和学习材料。本书主要介绍 LBM 方法，重点是它的实际应用，附有一些完整的例子及其计算机代码，读者自己应该能够得出书本所给出的结论。本书可作为高年级本科生的教材，也可作为研究生的课后参考用书。本书介绍的方法和材料，毫无疑问，能够在理解 LBM 方法和编程方面帮助读者建立自信。在许多情况下，将 FDM 与 LBM 进行比较，原因有两个：一是显示 FDM 与 LBM 的相同点和区别，二是比较两种方法的结果。由于 FDM 以泰勒级数展开为基础，多数学生在微积分课程中已有所接触，因此很好理解。

本书给出了所有例子完整的计算机代码，这些代码用 Fortran 语言编写，可以很容易地转换为其他的计算机语言。编写代码时以清晰简单为主，而非计算效率。本书结构安排如下：第 1 章介绍了动力学理论，旨在使读者熟悉动力学理论相关的概念。第 2 章系统地介绍了格子玻尔兹曼方程。第 3 章论述了热量、质量和动量扩散方程。第 4 章分别介绍了有无源项的对流-扩散方程。第 5 章通过实例讨论了等温不可压缩流体流动问题（无热、质传递）。第 6 章是第 5 章的补充，讨论了非等温不可压缩流体流动问题，包括耦合和非耦合，即自然和强制对流问题。第 7 章介绍了多松弛格式。第 8 章分若干主题概括介绍了处理复杂流动条件的方法，以及对每个主题的参考建议，比如多孔介质流、化学反应流、燃烧、相变和多相流等。

作者非常欢迎来自读者的任何意见，E-mail: mohamad@ucalgary.ca。

致 谢

不管我们身在何处，总有人在帮助我们。在我们身后，有许多看不见的手在给予我们精神或身体上的帮助，使得我们能够在人生舞台上有很好的表现。写书也不例外，我从那些和我一起工作过的同事和我教过的学生身上学到了很多。然而，如果没有一个良好的、宽松的工作环境，我们将一事无成，特别是对于写书这种需要花费大量时间在书本、论文及计算机上且不能分心的工作来说。

周围人的微笑给予我很多鼓励。仅举几例：和 Succi 博士一起工作和交流是一次很好的经历，他对 LBM 理论的见解相当深刻；一些访问教授阅读了本书在当地出版的第一稿，发现了少量错别字；特别要感谢沙特阿拉伯 Um-Alkura 大学的 Satti 教授，以及巴西的 Jose Rabi 教授。此外，和我以前的学生 Kuzmin 博士的大量讨论也是卓有成效的，Kuzmin 博士对 LBM 理论抱有极大的热情。

反侵权盗版声明

电子工业出版社依法对本作品享有专有出版权。任何未经权利人书面许可，复制、销售或通过信息网络传播本作品的行为；歪曲、篡改、剽窃本作品的行为，均违反《中华人民共和国著作权法》，其行为人应承担相应的民事责任和行政责任，构成犯罪的，将被依法追究刑事责任。

为了维护市场秩序，保护权利人的合法权益，我社将依法查处和打击侵权盗版的单位和个人。欢迎社会各界人士积极举报侵权盗版行为，本社将奖励举报有功人员，并保证举报人的信息不被泄露。

举报电话：(010) 88254396；(010) 88258888

传 真：(010) 88254397

E-mail: dbqq@phei.com.cn

通信地址：北京市万寿路 173 信箱

电子工业出版社总编办公室

邮 编：100036

目 录

第 1 章 引言与粒子动力学	1
1.1 引言	2
1.2 动力学理论	4
1.2.1 粒子动力学	4
1.2.2 压力和温度	5
1.3 分布函数	7
第 2 章 玻尔兹曼方程	15
2.1 玻尔兹曼输运方程	16
2.2 BGKW 近似	19
2.3 格子排列	20
2.3.1 一维模型	20
2.3.2 二维模型	21
2.3.3 三维模型	22
2.4 平衡分布函数	23
第 3 章 扩散方程	25
3.1 扩散方程简介	26
3.2 有限差分近似法	27
3.3 格子玻尔兹曼方法	29

3.4	平衡分布函数.....	31
3.5	Chapman-Enskog 展开.....	32
3.5.1	归一化和尺度.....	35
3.5.2	恒温无限大板中的热扩散.....	36
3.5.3	Chapman-Enskog 展开的边界条件.....	37
3.5.4	恒热流密度例子.....	38
3.6	源或汇.....	39
3.7	轴对称扩散.....	40
3.8	二维扩散方程.....	41
3.8.1	D2Q4.....	41
3.8.2	D2Q5.....	42
3.9	边界条件.....	42
3.9.1	给定边界函数值.....	43
3.9.2	绝热边界条件.....	43
3.9.3	恒热流密度边界条件.....	43
3.10	二维平板中的热扩散.....	44
3.10.1	D2Q9.....	45
3.10.2	第一类边界条件.....	47
3.10.3	恒热流密度边界条件.....	48
3.11	问题.....	48
第 4 章	对流-扩散问题.....	50
4.1	对流.....	51
4.2	对流-扩散方程.....	52
4.2.1	有限差分法.....	52
4.2.2	格子玻尔兹曼方法.....	53
4.3	平衡分布函数.....	55
4.4	Chapman-Enskog 展开.....	56
4.5	二维格子玻尔兹曼方法.....	61

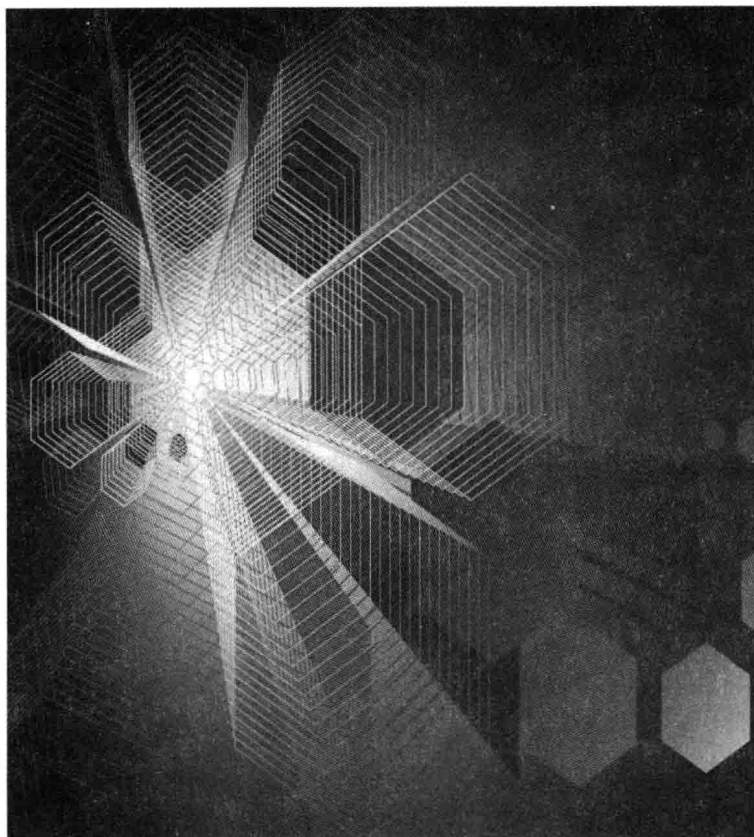
4.5.1	D2Q4	61
4.5.2	D2Q9	63
4.6	问题.....	65
4.6.1	多孔介质中的燃烧.....	65
4.6.2	加热板冷却.....	66
4.6.3	带有源项的耦合方程.....	66
第 5 章	等温不可压缩流体流动	68
5.1	Navier-Stokes 方程.....	69
5.2	格子玻尔兹曼.....	70
5.3	边界条件.....	74
5.3.1	反弹格式.....	75
5.3.2	已知速度边界条件.....	77
5.3.3	平衡和非平衡分布函数.....	80
5.3.4	开放边界条件.....	80
5.3.5	周期性边界条件.....	81
5.3.6	对称条件.....	82
5.4	计算机算法.....	82
5.5	例子.....	83
5.5.1	方腔流.....	83
5.5.2	二维通道发展流.....	84
5.5.3	障碍绕流.....	87
5.6	涡量-流函数法.....	93
5.7	六边形格子.....	94
5.8	问题.....	94
第 6 章	非等温不可压缩流体流动	96
6.1	Navier-Stokes 方程和能量方程.....	97
6.2	强制对流.....	98

6.3	热方腔流.....	98
6.4	热通道中的强制对流.....	100
6.5	流固耦合传热.....	101
6.6	自然对流.....	102
6.7	多孔介质中的流动与传热.....	106
第 7 章	多松弛格式.....	107
7.1	多松弛方法 (MRT)	108
7.2	问题.....	110
7.3	双松弛时间 (TRT)	111
第 8 章	复杂流动	112
附录 A	计算机代码	114
A.1	扩散问题 (第 3 章)	115
A.1.1	The LBM Code (D1Q2).....	115
A.1.2	The FDM Code (1-D)	116
A.1.3	The LBM Code (D2Q4).....	117
A.1.4	The FDM Code (2-D)	120
A.1.5	The LBM Code (D2Q9).....	123
A.2	对流-扩散问题 (第 4 章)	127
A.2.1	The LBM Code (D1Q2).....	127
A.2.2	The FDM Code (1-D)	129
A.2.3	The LBM Code (D2Q4).....	130
A.2.4	The FDM Code (2-D)	133
A.2.5	The LBM Code (D2Q9).....	136
A.3	等温不可压缩流体流动 (第 5 章)	141
A.4	非等温不可压缩流体流动 (第 6 章)	148
A.4.1	The LBM Code for a heated lid-driven cavity.....	148

A.4.2	The LBM Code for a forced convection	157
A.4.3	The LBM Code for a natural convection	167
A.5	多松弛格式 (第 7 章)	176
参考文献	186
索引	191

1

引言与粒子动力学



1.1 引言

输运方程（热量、质量和动量）的模拟方法主要有两种：连续法和离散法。在连续方法中，常微分或偏微分方程可以通过无穷小控制体积中的能量、质量和动量守恒实现。由于许多因素（如非线性、复杂边界条件、复杂几何等）使得控制方程的求解非常困难，因此需要采用有限差分、有限体积和有限元等方法，将给定边界条件和初始条件的微分方程转化为一系列的代数方程。代数方程可通过反复迭代求解直到确定收敛。详细的过程如下：先定义控制方程（主要是偏微分方程），然后根据所采用的方法将整个域离散为体积、网格或单元。每个体积、网格或单元包含数量巨大的粒子（数量级为 10^{16} ）。

在宏观尺度上，所有粒子的速度、压力、温度由节点值，或者整个有限体积的平均值，或简单地认为由一个节点到另一个节点的线性或非线性变化来表示。物性参数，如黏度、热导系数、热容等，除逆问题之外，一般都是已知的输入参数。对于逆问题，可能有一个或更多的热物性是未知的。

在微观尺度上，可将介质视为由大量粒子（原子、分子）组成，粒子间相互碰撞。因此，需要定义粒子间（分子间）作用力和求解牛顿第二定律（动量守恒）的常微分方程。在每一时间步，需要确定每个粒子的位置和速度，即粒子的轨迹。这个尺度没有温度、压力的定义，也没有热物性，如黏度、热导系数、热容等概念。温度和压力分别与粒子动能（质量、速度）和粒子与边界的碰撞频率有关，这种方法称为分子动力学模拟。为了得到宏观解，需要求解大量的方程。例如， 10^3cm 的空间内含 3×10^{22} 个分子， 1mol 水中含超过 6.0×10^{23} 个分子。形象化一点，如果假设这些分子的直径为 1mm （笔尖大的一点），把这些点一个挨一个地排在一起，这些点所覆盖的面积为 $6.0 \times 10^{11}\text{km}^2$ ，而地球总面积约为 $5.1 \times 10^9\text{km}^2$ ，美国的面积为 $9.63 \times 10^6\text{km}^2$ ，非洲的面积为 $1.22 \times 10^6\text{km}^2$ 。这意味着，如果分子直径为 1mm ， 16g 水中所含的分子数就可以覆盖整个地球表面。合理估计，一个人以每秒数 6 个点的速度，这已经是很快的速度了，至少需要 3×10^{15} 年去完成这个项目。

问题是，我们真的有必要知道每个分子或原子的行为吗？

在分子动力学模拟中，需要确定每个粒子的位置 (x, y, z) 和速度 (c_x, c_y, c_z) 分别表示 x, y, z 方向的速度分量)。同时，模拟的时间步长应比粒子碰撞时间短，数量级为 10^{-12}s 。