



当代
杰出青年
科学文库

格子Boltzmann方法的 理论及应用

Lattice Boltzmann Method:
Theory and Applications

何雅玲 王勇 李庆 编著



科学出版社
www.sciencep.com

024
2009
4

当代杰出青年科学文库

格子 Boltzmann 方法的理论及应用

**Lattice Boltzmann Method:
Theory and Applications**

何雅玲 王 勇 李 庆 编著

国家杰出青年科学基金项目(No. 50425620)
国家自然科学基金重点项目(No. 50736005)

资助

科学出版社

北京

内 容 简 介

本书结合作者的部分研究成果,以及在相关科研实践中的体会和积累的经验,系统地介绍了格子 Boltzmann 方法的基本概念、模型推导、边界处理、网格划分、数值实施以及发展现状等,并配以具体算例及程序代码,以帮助读者快速掌握。

本书适用于高等院校和科研单位的研究生、工程技术人员和研究人员,可作为能源、机械、数学、物理及生物工程等大类专业的计算流体力学与计算传热学课程的教材或参考用书。

图书在版编目(CIP)数据

格子 Boltzmann 方法的理论及应用=Lattice Boltzmann Method: Theory and Applications/何雅玲,王勇,李庆编著. —北京:科学出版社,2008
(当代杰出青年科学文库)
ISBN 978-7-03-023272-4

I. 格… II. ①何…②王…③李… III. 数值模拟 IV. O242.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008)第 167854 号

责任编辑:刘宝莉 / 责任校对:陈玉凤
责任印制:刘士平 / 封面设计:陈 敬

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>

双青印刷厂印刷

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: 15 3/4

印数: 1—2 500 字数: 299 000

定价: 50.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈双青〉)

序

在我的案头上放着一卷由何雅玲教授负责编著的《格子 Boltzmann 方法的理论及应用》的书稿,这就使我不禁想起:十年前,冒着冬日的严寒,笔者和雅玲教授为了一篇我国学者关于格子气研究的较早的文献遍访某大城市而一无所获的情形。

我们的研究团队,在十余年前开始接触到关于格子气以及格子 Boltzmann 方法在流动与换热中应用的文献,从一开始我们就被这种方法的独特优点所吸引:从微观的动力学观点出发而可以获得宏观的流场与温度场的参数。这以后我们就从实践中学习、钻研这种方法,努力收集并阅读有关参考文献,本文一开始提到的情形就是一个例子。雅玲教授在指导研究生的过程中,对格子 Boltzmann 方法的基本的理论,例如 BGK 近似,Navier-Stokes 方程与 Boltzmann 方程的关系等都进行了认真的推演。正是有这样的一个过程,使得该书具备了一个十分有利于读者的特点:作者从基本理论出发,根据他们自己理解、掌握,直到有所发展、有所创新的经历来撰写,给该书增添了针对读者的困惑和难点而循循善诱、娓娓道来的亲切气氛,有利于学习者的理解和掌握。

雅玲教授是我国工程热物理领域的知名学者,在新型低温制冷机、新型换热器、电子器件冷却、新能源的利用等方面的研究,都取得了很好的成绩。据笔者所知,她研究格子 Boltzmann 方法的基本目的之一是想利用此法的优点来揭示新型低温制冷机的基本物理过程——交变流动与换热的基本规律。当将格子 Boltzmann 方法应用到这类新型低温制冷机工作过程的模拟时,因为可压缩交变流动的复杂性;她(他)们发现文献中现有的格子 Boltzmann 方法还存在很大的不足。正是从一开始该书作者带着问题来研究格子 Boltzmann 方法,而不是急于简单地应用现有程序去求解问题、发表文章,他们从最基本的知识理论开始钻研,步步深入,使得该书作者具备了坚实的理论功底,进而能够有所创新。近几年来雅玲教授和她所指导的研究生连续在国际著名期刊,如 *Physical Review E* 上发表文章,对将格子 Boltzmann 方法应用于可压缩与交变流动等方面提出了自己的数值方法与格式,有的论文是由国际期刊的主编在未经外审条件下就直接接受的,可见研究结果的学术水平已经得到国际刊物的确认。因为这本书稿不仅有关于格子 Boltzmann 方法基本思想的介绍,同时还融入了作者自己的科研成果,所以此书既是一本凝结了作者心血的专著,同时也可以作为有关教师和科研人员关于格子 Boltzmann 方法的有益的参考书。

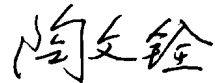
笔者从事传热与流动过程的数值模拟的学习、研究已经整整 30 年了。笔者的

深刻体会之一就是:数值模拟方法的学习与研究不能只停留在理解数值方法的思想,更重要的是应用该方法进行数值计算的实践。笔者高兴地看到,雅玲教授在这一点上与笔者很有共识:即不仅要理解、掌握数值方法的基本思想,而且一定要通过程序的编制学会如何在工程实际和理论研究中实现这种方法,并反思总结达到“明齐全而析其微”的境界。该书作者不仅在数值方法的介绍上颇具特色,而且书中还附有作者自己开发的用格子 Boltzmann 方法求解流场的程序,介绍了编程思想和方法。尽管这些程序还可能这样那样的改进,但是对初学者而言,有了这样一个范本,就会对数值方法有更深刻的理解和启迪,也给读者提供了进一步发展的一个基石。

2000 年笔者在由科学出版社出版的《计算传热学的近代进展》一书中用一节的篇幅向我国广大读者介绍了格子 Boltzmann 方法,并且引用了 20 世纪 80 年代后半期当格子气方法刚诞生时美国华盛顿邮报记者的热情报道。近十年来我国学者在格子 Boltzmann 方法的学习、研究方面表现出了极大的热情,迫切需要一本从基础入手,包含自己研究成果又有程序可以参照的著作。该书正是满足了这样的要求。笔者相信,该书的出版一定会对推动我国在应用与研究格子 Boltzmann 方法方面起到积极的作用。

“读书心细丝抽茧,炼句功深石补天”。在此也祝愿雅玲教授在以后的科研中,继续勤奋探索求新,争取有更多的佳作问世。

西安交通大学教授
中国科学院院士



2008 年 10 月于西安

前 言

格子 Boltzmann 方法(lattice Boltzmann method)诞生至今已有 20 年了,20 年间,在理论和应用研究等方面都取得了迅速发展,并逐渐成为在相关领域国际研究的热点之一,受到国内外众多学者的关注。

随着空间技术、航天技术、军事技术、生物技术等现代科学技术的高速发展,人们对流动与传热的机理需要越来越深入的了解,这些机理的揭示,单靠以宏观尺度为基础的实验研究和理论分析是无法胜任的,越来越多的工作需要从微观和跨尺度的介观的角度才能得以深入揭示。格子 Boltzmann 方法就是在这样的应用背景下,得以迅速发展和不断完善起来的。

与传统模拟方法不同,格子 Boltzmann 方法基于分子动理论,具有清晰的物理背景。该方法在宏观上是离散方法,在微观上是连续方法,因而被称为介观模拟方法。在许多传统模拟方法难以胜任的领域,如微尺度流动与换热、多孔介质、生物流体、磁流体、晶体生长等,格子 Boltzmann 方法都取得了成功的应用并揭示了多种复杂现象的机理,推动了相关学科的发展。因此,格子 Boltzmann 方法不仅仅是一种数值模拟方法,而且是一项重要的科学研究手段。此外,格子 Boltzmann 方法还具有天生的并行特性,以及边界条件处理简单、程序易于实施等优点。可以预计,随着计算机技术的进一步发展,以及计算方法的逐渐丰富,格子 Boltzmann 方法将会取得更多成果,并为科技发展发挥重要作用。

虽然格子 Boltzmann 方法在理论和应用等方面已经取得了很多可喜的成绩,但毕竟它还处于快速成长阶段,与有限容积法等其他数值方法相比,它的理论体系还不完善,而且在很多领域内的应用也仍处于探索阶段。格子 Boltzmann 方法的发展需要更多的关注。

近年来,国内越来越多的研究者开始对格子 Boltzmann 方法产生兴趣。在与不少同行交流时,我们深切感受到该领域迫切需要一本入门著作,能细致明了地展示格子 Boltzmann 方法的基本概念、基础理论以及发展现状,并适当配以具体算例帮助读者快速入门,本书就是为满足这些需求而编著的。书中不仅包含了我们在格子 Boltzmann 方法领域所取得的部分研究成果,以及在相关科研实践中积累的经验,而且还尽可能地全面介绍了格子 Boltzmann 方法的发展现状,并系统阐明该方法的流体力学与统计力学背景知识、模型推导、边界处理、数值实施等问题。我们认为,只有牢固掌握相关基础知识,并有着全局的视角,才能做出更多更出色的研究成果。

本书共分 8 章。第 2 章总结了从连续介质层次出发的流体力学基本方程, 这些方程是传统计算流体力学的基础, 也是格子 Boltzmann 方法所应恢复的宏观方程。第 3 章从介观的气体动理论出发, 系统地阐述了格子 Boltzmann 方法的基础理论。第 4、第 5 章分别对格子 Boltzmann 方法的不可压缩、可压缩模型进行了较详尽的介绍, 其中包含国际上的最新研究成果。在第 6 章, 从最基本的反弹处理和镜面反射处理, 到适用于运动边界和复杂曲线边界的处理格式, 都做了介绍。第 7 章介绍了格子 Boltzmann 方法的网格处理技术, 涉及均分网格、多块网格、多重网格、结构化网格、非结构化网格以及无网格等技术。第 8 章给出了格子 Boltzmann 方法的部分算例, 以及在工程热物理领域的部分应用。书末, 我们还附有读者学习过程中可能用到的数学基础; 格子单位与物理单位的转换; 并公布了一段作者自己编写的程序代码, 给出了关于格子 Boltzmann 方法研究的相关资料, 帮助初学者更快速地上手。

本书适用于各大专院校和科研单位的研究生、技术人员和研究人員, 可作为数学、物理、机械、能源和生物工程等大类专业的计算流体力学与计算传热学课程的教材或参考用书。对于那些对格子 Boltzmann 方法感兴趣而又尚未进入该领域的人员, 该书可作为入门的学习用书, 读者通过本书的学习, 能对格子 Boltzmann 方法有一基本的了解, 能完成基本的数值模拟, 从而为独立开展相应的研究工作打下较好的基础; 对于那些已经初步了解格子 Boltzmann 方法但又尚存疑惑的人员, 本书可以起到答疑解惑的作用; 对于已经掌握格子 Boltzmann 方法的研究人员来说, 本书也是一本有用的工具书。

在本书完稿之际, 作者衷心感谢自己的老师——中国科学院院士陶文铨教授, 是他指导我走进数值模拟这一令人兴奋和充满挑战的研究领域, 其为师为学, 无不使我受益终身, 感恩至深! 就本书而言, 自始至终也得到了陶老师的关心和支持, 他在百忙之中帮助审阅了全稿, 提出许多宝贵意见, 并欣然作序, 为本书增色很多, 再次感谢。

本人的研究工作一直得到国家自然科学基金委的大力支持, 先后得到国家杰出青年科学基金项目 (No. 50425620)、国家自然科学基金重点项目 (No. 50736005) 的资助。在此表示衷心地感谢!

尽管我们在编写过程中倾尽全力, 但是由于受学识所限, 书中难免存在不足之处。付梓之际, 不免忐忑。如果本书能起到抛砖引玉的作用, 作者将不胜欣慰! 诚恳欢迎读者提出宝贵意见, 以期共同进步!

志者思远, 笃行无疆。与各位读者共勉!

何雅玲

2008 年 10 月

于西安交通大学

Email: yalinghe@mail.xjtu.edu.cn

目 录

序

前言

第 1 章 绪论	1
1.1 计算流体力学与计算传热学	1
1.2 格子 Boltzmann 方法的发展	4
1.2.1 孕育	4
1.2.2 萌芽与成长	5
1.2.3 相关研究的综述与专著情况	7
1.2.4 格子 Boltzmann 方法的应用	8
1.3 本书目的和内容	10
1.3.1 本书目的	10
1.3.2 本书内容	10
参考文献	12
第 2 章 流体力学的基本方程	18
2.1 连续介质假设	18
2.2 雷诺输运方程	19
2.3 连续方程	21
2.4 动量方程	22
2.4.1 牛顿流体的本构方程	23
2.4.2 Navier-Stokes 方程	25
2.5 能量方程	26
2.5.1 总能方程	26
2.5.2 内能方程	28
2.6 小结	29
参考文献	30
第 3 章 格子 Boltzmann 方法的基础理论和基本模型	31
3.1 Boltzmann 方程	32
3.2 Boltzmann H 定理及 Maxwell 分布	36
3.2.1 H 定理	37
3.2.2 Maxwell 分布	38

3.3	Maxwell 输运方程及宏观量守恒方程组	41
3.4	从 Boltzmann 方程到格子 Boltzmann 方程	44
3.4.1	BGK 近似	45
3.4.2	格子 Boltzmann 方程	47
3.5	格子 Boltzmann 方法的基本模型	48
3.5.1	D2Q9 模型平衡态分布函数的确定	49
3.5.2	Chapman-Enskog 展开及基本模型的宏观方程	52
3.6	小结	55
	参考文献	55
第 4 章	不可压格子 Boltzmann 模型	57
4.1	不可压等温格子 Boltzmann 模型	57
4.1.1	定常不可压模型	57
4.1.2	He-Luo 模型及 D2G9 模型	58
4.2	不可压热格子 Boltzmann 模型	61
4.2.1	被动标量模型	62
4.2.2	内能分布函数模型	63
4.2.3	基于 Boussinesq 假设的耦合双分布函数模型	72
4.2.4	总能分布函数模型	74
4.3	小结	79
	参考文献	79
第 5 章	可压缩完全气体流动的格子 Boltzmann 模型	81
5.1	多速度模型	82
5.1.1	Qian 及 Alexander 的先驱工作	82
5.1.2	Chen-Ohashi 模型	84
5.1.3	Watari-Tsutahara 模型	90
5.2	比热容比可调模型	91
5.2.1	多能级模型	91
5.2.2	Sun 模型、Shi 模型及 Kataoka-Tsutahara 模型	94
5.2.3	Qu-Shu 模型	97
5.3	耦合的双分布函数模型	103
5.3.1	基本理论	104
5.3.2	二维模型	110
5.3.3	三维模型	115
5.4	小结	119
	参考文献	119

第 6 章 格子 Boltzmann 方法的边界处理	122
6.1 启发式格式	123
6.1.1 周期性边界处理格式	123
6.1.2 对称边界处理格式	124
6.1.3 充分发展边界处理格式	125
6.1.4 反弹格式	125
6.1.5 镜面反射格式	126
6.1.6 反弹与镜面反射混合格式	127
6.2 动力学格式	127
6.2.1 Nobel 格式	127
6.2.2 非平衡态反弹格式	128
6.2.3 反滑移格式	129
6.2.4 质量修正格式	130
6.3 外推格式	131
6.3.1 Chen 格式	132
6.3.2 非平衡态外推格式	132
6.4 复杂边界处理格式	135
6.4.1 Filippova 与 Hänel 格式及其改进形式	136
6.4.2 Bouzidi 格式	137
6.4.3 Lallemand 与 Luo 格式	139
6.4.4 Guo 格式	140
6.5 小结	141
参考文献	141
第 7 章 格子 Boltzmann 方法的网格技术	144
7.1 标准格子 Boltzmann 方法	145
7.2 插值格子 Boltzmann 方法	146
7.2.1 直角坐标系下的插值	146
7.2.2 曲线坐标系下的插值	147
7.3 泰勒展开和最小二乘格子 Boltzmann 方法	149
7.3.1 泰勒级数展开	149
7.3.2 最小二乘法优化	153
7.3.3 讨论	154
7.4 有限差分格子 Boltzmann 方法	154
7.4.1 时间离散	156
7.4.2 空间离散	158

7.4.3 讨论	160
7.5 有限容积格子 Boltzmann 方法	160
7.5.1 结构化网格	160
7.5.2 非结构化网格	161
7.6 有限元格子 Boltzmann 方法	163
7.7 多块网格	164
7.8 多重网格	168
7.9 小结	170
参考文献	170
第 8 章 格子 Boltzmann 方法的应用举例	174
8.1 封闭方腔自然对流	174
8.1.1 物理模型	174
8.1.2 模拟结果及分析	175
8.2 Rayleigh-Bénard 自然对流	179
8.2.1 物理模型	179
8.2.2 模拟结果及分析	180
8.3 交变流动与换热	182
8.3.1 物理模型	183
8.3.2 模拟结果及分析	183
8.4 激波模拟	187
8.4.1 Riemann 问题描述	188
8.4.2 Riemann 问题的物理模型及模拟结果	189
8.4.3 双马赫反射问题的物理模型与模拟结果	193
8.5 声波衰减模拟	194
8.5.1 物理模型	194
8.5.2 模拟结果及分析	195
8.6 谐振腔模拟	199
8.6.1 物理模型	199
8.6.2 模拟结果与分析	200
8.7 小结	204
参考文献	204
附录	207
附录 A 笛卡儿张量的基本知识	207
A.1 标量、矢量与张量	207
A.2 张量的表示法及爱因斯坦求和约定	207

A.3	克罗内克符号和置换符号	208
A.4	对称张量与反对称张量	209
A.5	二阶张量的代数运算	209
A.6	张量的微分和积分运算	210
附录 B	格子张量	212
B.1	正多边形格子张量的性质及基本粒子速度模型	212
B.2	常用离散速度模型及其张量计算	214
附录 C	单位转换	214
C.1	参考量与单位转换	214
C.2	举例	215
附录 D	顶盖驱动流的格子 Boltzmann 模拟	216
D.1	物理模型	216
D.2	程序变量表及源程序	216
D.3	数值结果	222
附录 E	三维耦合双分布函数模型的平衡态密度分布函数	224
附录 F	格子 Boltzmann 方法相关网络资源	226
F.1	国内外部分研究团体/个人	226
F.2	商业软件与免费程序代码	229
F.3	国际会议	230
F.4	相关论坛	230
附录 G	主题索引	230
参考文献		236

第 1 章 绪 论

从格子 Boltzmann 方法(lattice Boltzmann method)诞生至今已有 20 年,20 年间,其在理论和应用研究等方面都取得了迅速发展,并逐渐成为在相关领域研究的国际热点之一,受到国内外众多学者的关注。与传统模拟方法不同,格子 Boltzmann 方法基于分子动理论,具有清晰的物理背景。该方法在宏观上是离散方法,微观上是连续方法,因而被称为介观模拟方法。在许多传统模拟方法难以胜任的领域,如微尺度流动与换热、多孔介质、生物流体、磁流体、晶体生长等,格子 Boltzmann 方法都可以进行有效的模拟,因此它被用于多种复杂现象的机理研究,推动了相关学科的发展。可以说,格子 Boltzmann 方法不仅仅是一种数值模拟方法,而且是一项重要的科学研究手段。此外,格子 Boltzmann 方法还具有天生的并行特性,以及边界条件处理简单、程序易于实施等优点。可以预计,随着计算机技术的进一步发展,以及计算方法的逐渐丰富,格子 Boltzmann 方法将会取得更多成果,并为科技发展发挥更重要的作用。

作为一门多学科的交叉产物,格子 Boltzmann 方法涉及统计力学、流体力学、热力学、传热学以及计算数学等诸多学科。为了让读者了解并掌握这一方法,本书介绍了格子 Boltzmann 方法的流体力学、统计力学和数学基础,并对该方法在理论建模、边界实施、网格划分和实际应用等方面的基础理论以及最新进展都做了一定介绍。这些内容,包含了我们近年来从事相关研究实践所取得的成果和积累的经验,同时,也是对格子 Boltzmann 方法相关知识的一次梳理。希望通过本书,能促进同行交流,并进一步传播该方法。

在本章,考虑到格子 Boltzmann 方法作为一种新兴的数值模拟方法,属于计算流体力学与计算传热学的一个新的分支,作为基础知识的储备,我们首先简要介绍了计算流体力学与计算传热学,并引出格子 Boltzmann 方法。其次,简要回顾了格子 Boltzmann 方法的发展历程,并对其研究现状做了阐述。最后,给出本书各章节框架以及各章的主要内容。

1.1 计算流体力学与计算传热学

流体力学与传热学都是人类社会从实践活动中逐渐形成起来的科学学科之一。无论是我国古代大禹治水,还是古罗马人大规模供水管道系统的建设,都无不体现了古人对流体力学的认知水平。流体力学学科的形成可追溯到古希腊时期的

阿基米德时代^[1]。他创立了液体平衡理论,奠定了流体静力学的基础。另一方面,虽然人类从“钻木取火”的时代开始就在利用传热学的规律,但作为独立的学科,传热学形成较晚。一般认为,它产生于 18 世纪 30 年代的工业革命时期^[2]。1822 年,傅里叶发表著名论著“热的解析理论”^[3],成功地创建了导热理论,为从理论上和实验上正确理解和定量研究传热学问题奠定了基础。随后,对流换热理论也是随着工业革命的兴起而逐步成长起来的。

虽然历经数个世纪的发展,流体力学与传热学都已成为理论体系日趋完善的基础学科,但它们的发展却从未停止。计算流体力学(computational fluid dynamics)^[4,5]与计算传热学或数值传热学(numerical heat transfer)^[6,7]的出现,就是这两门基础学科发展史中的大事。

20 世纪,随着计算机技术的出现和发展,数值方法逐渐成为和理论分析、实验研究相并列的三大重要科学研究手段之一。通过数值方法,可以对许多原本无法或很难用理论分析求解的复杂问题进行模拟求解,扩大研究范围;同时,数值方法还可在一定程度上取代实验研究,从而节约实验成本,加快研究进度。数值方法在流体力学与传热学方面的应用,促使了计算流体力学与计算传热学的出现。所谓计算流体力学和计算传热学,就是运用数值方法联立求解一组非线性质量、动量、能量和组分微分方程(如 Euler 方程组、Navier-Stokes 方程组等)以及它们的相应变形,以便获得流体流动、传热、传质等现象的细节,揭示物理规律。在相关研究领域,计算流体力学与计算传热学的兴起促进了理论分析与实验研究的发展,三者相辅相成。尤其对诸如湍流等复杂问题的研究,三者更是缺一不可。同时,在工业应用中,计算流体力学与计算传热学已被大规模地应用于产品设计、生产以及销售等诸多环节,它们的出现推动了社会水平的进步,丰富了人类对世界的认知能力。反之,工业应用的新成果,如并行计算机、矢量计算机的出现,又推动计算流体力学与计算传热学的发展;工业应用中出现的新问题,也会促使它们的进一步发展完善。

从方法论的角度,对流体流动与换热的描述可以分别从宏观(macroscopic)、介观(mesosopic)和微观(microscopic)三个层次进行。相应地,已有的计算流体力学与计算传热学方法也可分为宏观方法、介观方法和微观方法三类。

在宏观层次上,流体被假设为连续的介质。流体运动满足质量守恒、动量守恒以及能量守恒,并由诸如 Euler 方程组、Navier-Stokes 方程组等描述。在数值计算中,则通过各种离散方法,将非线性偏微分的 Euler 方程组或 Navier-Stokes 方程组离散成各种代数方程组,再由计算机求解。现有的大多数场模拟方法都属于宏观方法,如有限差分法(finite-difference method)、有限容积法(finite-volume method)、有限元法(finite-element method)、有限分析法(finite-analytic method)、边界元法(boundary element method)和谱方法(spectral method)等。这些方法

(尤其是前面几种)发展较为成熟,不但可以用来研究物理问题的机理,还可用于发现一些新的物理现象,如槽道湍流中的倒马蹄涡就是通过直接模拟发现而后由实验予以证实的^[5,8,9]。同时,这些宏观方法在多种工业领域也得广泛应用,例如叶轮机械的型线设计、换热器的优化计算、建筑物室内流场与温度场的模拟、飞行器阻力的测算等。一些基于宏观方法的大型通用商业软件,如 PHOENICS、FLUENT、STAR-CD、CFX 等,也应运而生,并被应用于解决多种工程实际问题。

在介观、微观层次,流体不再被假设为连续介质。为了叙述方便,我们先从微观讲起。基于微观层面,流体由大量的离散分子组成,分子的运动特性由分子间相互作用力以及外加作用力影响。任何体系的宏观热学特性和运动规律,在微观都表现为分子的不规则热运动。因而,一种很直接的想法就是通过模拟每一个分子的运动,再基于不同的法则进行统计平均,以获得流体流动与换热的宏观规律。1957年,Alder和Wainwright首先在硬球模型下,采用分子动力学研究气体和液体的状态方程^[10],从而开创了分子动力学模拟(molecular dynamics simulation)的先例。分子动力学模拟的技术步骤十分直观,它的计算对象为指定空间内的模型分子体系,按照时间演化规律进行计算,通过对结构空间内的分子体系采样,可以获得分子的详细轨道图景及系统的各种物理量分布^[11]。在分子动力学模拟中,分子的动力学行为通常假设遵循经典运动方程。经典意味着组成粒子的核心运动遵守经典力学定律。只有当我们处理到一些较轻的原子或分子的平动和转动时,或振动频率较大时,才需要考虑量子效应。分子动力学模拟程序较复杂,计算量大,对内存要求高,由于受到计算机速度和内存的限制,早期模拟的空间尺度和时间尺度都都很有限。20世纪80年代后期,随着计算机技术的飞速发展,计算机的运算速度越来越快,再加上多体势函数的提出和发展,分子动力学模拟可以更真实地模拟越来越复杂的物理问题,它已经成为理论研究中的一种不可缺少的重要工具,并在流体热力性质与输运性质^[12,13]、相界面及相变^[14~16]、微纳米流动^[17]等特殊问题的研究方面,取得了令人瞩目的成绩。

在介观层次,流体被离散成一系列的流体粒子(微团)。这些粒子比分子级别要大,但在宏观上又无限小,其质量比起有限容积法中的控制容积质量要小得多。考虑到单个分子的运动细节并不影响流体的宏观特性,因而我们可以通过构造符合一定物理规律的演化机制,让这些流体粒子进行演化计算,从而获得与物理规律相符的数值结果。常见的介观模拟方法有格子气自动机(lattice gas automata)、格子 Boltzmann 方法以及直接模拟蒙特卡罗方法(direct simulation Monte Carlo method)等。其中,源自格子气自动机的格子 Boltzmann 方法在最近 10 余年受到越来越多的关注^[18~21]。在格子 Boltzmann 方法中,除了流体被离散成流体粒子外,物理区域也被离散成一系列的格子,时间被离散成一系列的时步。描述流体粒子运动的方程称为 Boltzmann 方程或相应的离散形式。按照简化的动力学模型,

流体粒子被约束在有限的格线上运动,宏观层次的密度、速度等参数需要对这些粒子的相关特性值做平均获得。与宏观以及微观计算流体力学和计算传热学方法相比,格子 Boltzmann 方法具有物理意义清晰、边界条件处理简单、程序易于实施、并行性能好、模型健壮性高等特点。因而,它被认为是最具前途的数值模拟方法之一^[22]。

以上,我们介绍了计算流体力学与计算传热学中宏观、介观和微观三个层面上的数值模拟方法。需要指出的是,这三个层面并非完全割裂,而是相互关联的。例如,基于统计力学,我们可以从微观跨入介观;基于 Chapman-Enskog 展开^[23],我们则可以将介观的 Boltzmann 方程恢复到宏观 Euler 方程组或 Navier-Stokes 方程组等。本书仅涉及介观的格子 Boltzmann 方法。

下面首先对格子 Boltzmann 方法的发展史做一个简要回顾。

1.2 格子 Boltzmann 方法的发展

格子 Boltzmann 方法自诞生至今 20 年已取得了长足发展,被誉为现代流体力学的一场变革。

1.2.1 孕育

对格子 Boltzmann 方法发展史的了解,得先从格子气自动机说起。格子气自动机是更广泛的元胞自动机 (cellular automata) 在流体力学中的应用^[24]。元胞自动机是一个时间和空间离散的数学模型,根据若干简单的局域规则运行,通过计算机模拟这一演化过程来获得所需的解,曾被广泛用于研究诸如细胞生长、分形结构、城市交通流等复杂问题。20 世纪 60 年代, Broadwell 等人首先提出了离散速度模型,用以研究流体中的激波结构^[25]。但在他们的模型中,时间和空间仍然保持连续。

20 世纪 70 年代,为了研究流体的输运性质,法国的 Hardy、Pomeau 和 Pazzis 提出了第一个完全离散模型^[26,27]。在该模型中,除了流体被离散成一系列粒子以外,时间以及空间也被离散到一个二维正方形格子上。根据作者的名称缩写,该模型命名为 **HPP 模型**。这是历史上的第一个格子气自动机模型。由于正方形格子缺乏足够的对称性,HPP 模型中的应力张量不能满足各向同性,且存在伪随机守恒量。这就导致了 HPP 模型既不能恢复 Navier-Stokes 方程的非线性项,也不能恢复耗散项。因而,在很长一段时间内,HPP 模型并未引起研究者的重视。

1986 年,法国的 Frisch、Pomeau 和美国的 Hasslacher 提出具有足够对称性的二维正六边形格子气自动机模型,命名为 **FHP 模型**^[28]。同年,法国的 d'Humières、Lallemand 和 Frisch 提出四维面心立方 (face-centered-hyper-cubic,

FCHC)模型以及其在三维空间的投影^[29]。FHP模型和FCHC模型都成功克服了HPP模型对称性不足的缺点,能分别恢复到二维和三维的不可压缩 Navier-Stokes 方程。

在格子气自动机中,流体粒子存在于离散的格子节点上,并沿着格线迁移。所有粒子按照一定的碰撞规则同步地相互碰撞与迁移。由于粒子的演化只涉及相邻节点,因而格子气自动机可以方便地采用区域分裂方法做并行运算。在固体边界上,格子气自动机只需要让边界节点上的粒子做反弹或反射处理,边界处理简单,可适于多孔介质等复杂几何区域的模拟。而且,由于采用1或0来描述格线上粒子的有无,也即进行布尔(Boolean)运算,因此格子气自动机可以无条件稳定。然而这种方法也存在一些缺点:①由格子气自动机演化方程推导出来的动量方程不满足伽利略(Galilei)不变性;②流体状态方程不仅仅依赖于密度和温度,还与宏观流速有关;③由于采用 Boolean 运算,因而局部量往往存在数值噪音,需要对时间和空间做平均,这样就增加了计算量;④碰撞算子具有指数复杂性,对计算量和存储量也有较大要求。

能否寻找一种方法,在保留格子气自动机诸多优点的同时克服上述不足,这一需求促使了格子 Boltzmann 方法的诞生。因而,我们将这一段格子气自动机的发展过程称作格子 Boltzmann 方法的孕育期。

1.2.2 萌芽与成长

自1988年第一篇关于格子 Boltzmann 方法的论文出现至今,格子 Boltzmann 方法从萌芽逐渐成长壮大,并成为目前一大国际研究热点,受到越来越多学者的关注。

将格子 Boltzmann 方法应用到各种物理问题求解时,往往涉及模型选择、边界处理、网格划分等一系列工作。其中尤以模型为重中之重。格子 Boltzmann 方法能取得成功,作者认为,一个很关键的因素在于:它将传统方法求解非线性偏微分方程组(如 Euler 方程组、Navier-Stokes 方程组等)的困难,在模型建立时一次性完成;从而在数值模拟中,只需要处理简单的线性方程或方程组,这些方程可能是格子 Boltzmann 方程、或偏微分 Boltzmann 方程的其他离散形式,与宏观方法相比,无论是方程个数还是方程形式都得到了大大的简化。

首先对格子 Boltzmann 模型的发展,做一个简要回顾。

1988年,McNamara 和 Zanetti 提出把格子气自动机中的 Boolean 运算变成实数运算,格子点上的粒子数不是用整数0或1来表征,而是用实数 f 来表示系综平均后的局部粒子分布函数(local particle distribution function),用 Boltzmann 方程代替格子气自动机的演化方程,并将该模型用于流体的数值计算^[30]。这是最早的格子 Boltzmann 模型,从此开启了格子 Boltzmann 方法的历史大门。

与格子气相比,McNamara 和 Zanetti 的格子 Boltzmann 模型消除了系统的大