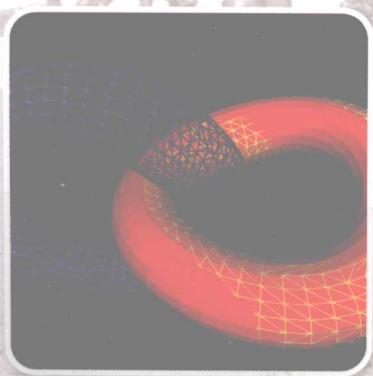


Theory and Applications  
of Lattice Boltzmann Method

# 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](http://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>

骏杰印刷厂印刷

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。该方法是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
<b>第四章</b>	<b>格子 Boltzmann 方法的初始和边界条件 .....</b>	<b>57</b>
§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
<b>第五章</b>	<b>格子 Boltzmann 方法的作用力模型 .....</b>	<b>76</b>
§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
<b>第六章 非标准格子 Boltzmann 模型</b>	<b>92</b>
§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
<b>第七章 热流体动力学的格子 Boltzmann 方法</b>	<b>114</b>
§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
<b>第八章 多相和多组分流体的格子 Boltzmann 方法</b>	<b>156</b>
§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
<b>第九章 多孔介质流动的格子 Boltzmann 方法</b>	<b>201</b>
§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
<b>第十章 微尺度流动的格子 Boltzmann 方法</b> ·····	<b>217</b>
§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
<b>参考文献</b> ·····	<b>237</b>

# 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  $\lambda$  和  $L$  分别为分子平均自由程和流动的特征长度。 $\lambda$  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， $\lambda$  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

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

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

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

其中， $\rho$ 、 $\mathbf{u}$ 、 $T$  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;  $\tau = 2\mu S + \lambda(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I}$  为黏性应力张量, 其中  $\mu$  称为动力黏性系数,  $\lambda$  为第二黏性系数,  $S$  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  $\tau = 2\mu \overset{\circ}{S} + \zeta(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I}$ , 其中张量上部的符号“ $\circ$ ”表示其去迹部分, 即  $\overset{\circ}{S} = S - \frac{1}{D} \text{Trac}(S)\mathbf{I}$ ,  $\text{Trac}(S) = \sum_i S_{ii}$ ,  $\zeta$  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  $\mu$  有关的一个参数是运动黏性系数  $\nu$ , 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  $\rho$  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<sup>[1]</sup>。

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

$$\phi(r) = 4\epsilon \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - 1 \right] \quad (1.1.4)$$

其中  $\sigma$  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<sup>[2]</sup>

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

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<sup>[2]</sup>。对每一种输运系数  $\zeta$ , 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

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

其中  $\zeta_x(t)$  是与  $\chi$  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

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

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  $1\text{cm}^3$  的空气内大约包含有  $2.7 \times 10^{19}$  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  $f_N(q_1, p_1, \dots, q_N, p_N)$  来描述由  $N$  个粒子构成的离散系统, 这里  $q_i$  和  $p_i$  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

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

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

$$F_s(q_1, p_1, \dots, q_s, p_s) \equiv V_s \int f_N(q_1, p_1, \dots, q_N, p_N) dq_{s+1} dp_{s+1} \dots dq_N dp_N,$$

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  $f(x, \xi, t) = N F_1(q_1, p_1, t)$  的时空演化过程

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

其中  $x$  为粒子的空间坐标,  $\xi = p_1/m$  为粒子的速度,  $a$  为外力引起的加速度,  $\Omega$  为碰撞引起的变化。流体的宏观物理量如密度  $\rho$ 、速度  $u$  及内能  $e$  由分布函数的速度矩确定

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

其中  $C$  为热运动速度矢量  $C = \xi - u$  的长度或模, 即  $C = \sqrt{C \cdot C}$  (本书约定, 对任一矢量  $V$ , 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,还是介观动力学的 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