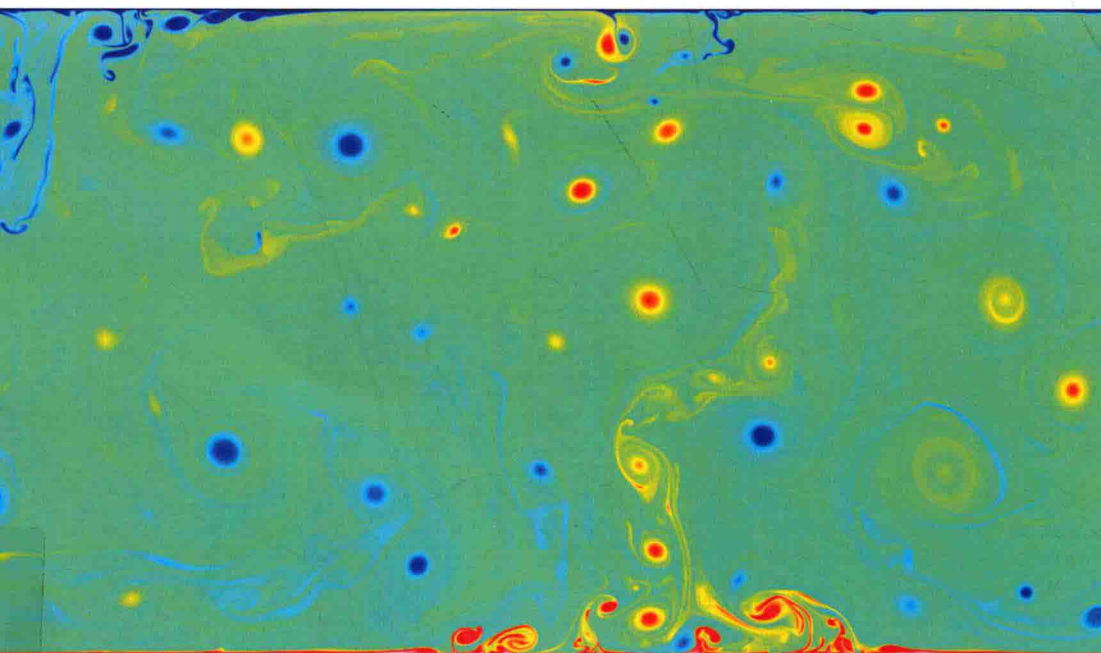


湍流热对流的 格子Boltzmann方法并行数值计算

TUANLIU REDUILIU DE GEZI BOLTZMANN FANGFA BINGXING SHUZHJ JISUAN

墙威 王勇 曹蕙 编著



中国地质大学出版社
ZHONGGUO DIZHI DAXUE CHUBANSHE

湍流热对流的

格子Boltzmann方法并行数值计算

TUANLIU REDULIU DE GEZI BOLTZMANN FANGFA BINGXING SHUZHJ JISUAN

墙威 王勇 曹蕙 编著



中国地质大学出版社
ZHONGGUO DIZHI DAXUE CHUBANSHE

图书在版编目(CIP)数据

湍流热对流的格子 Boltzmann 方法并行数值计算 / 墙威, 王勇, 曹蕙编著. — 武汉: 中国地质大学出版社, 2018.10

ISBN 978-7-5625-4429-6

- I. ①湍…
II. ①墙… ②王… ③曹…
III. ①湍流-热对流-数值模拟 ②湍流-热对流-数值计算
IV. ①O357.5

中国版本图书馆CIP数据数字(2018)第236789号

湍流热对流的格子 Boltzmann 方法并行数值计算 墙威 王勇 曹蕙 编著

责任编辑: 王凤林

责任校对: 徐蕾蕾

出版发行: 中国地质大学出版社 (武汉市洪山区鲁磨路388号) 邮政编码: 430074

电 话: (027) 67883511 传 真: 67883580 E-mail: cbb@cug.edu.cn

经 销: 全国新华书店 <http://cugp.cug.edu.cn>

开本: 787毫米×960毫米 1/16

字数: 182千字

版次: 2018年10月第1版

印张: 9.25

印刷: 武汉市华东印务有限公司

印次: 2018年10月第1次印刷

ISBN 978-7-5625-4429-6

定价: 32.00元

如有印装质量问题请与印刷厂联系调换

前 言

湍流热对流是自然界普遍存在的现象，也是流体力学中的经典问题。格子 Boltzmann 方法是近十几年发展起来的一种对流体系统进行建模和数值模拟的新方法。该方法从微观分子运动论出发，求解宏观流体力学方程，具有传统方法无法比拟的优势，特别适合大规模并行计算。目前计算机技术的迅速发展为通过数值计算研究湍流热对流提供了有效的手段。本书论述了采用格子 Boltzmann 方法对湍流热对流进行大规模并行数值计算的基本原理和方法，以及湍流热对流的统计描述，内容包括非平衡态统计力学初步、流体力学基本方程、格子 Boltzmann 方法的基本原理和实现方式、湍流热对流数值计算、大规模并行计算的程序设计。

第 1 章由多粒子系统的 Liouville 定理引入 Boltzmann 方程弛豫时间近似，在 Boltzmann 积分微分方程的基础上，论述了 H 定理和 Maxwell 速度分布律，这是格子 Boltzmann 方法的理论基础。

第 2 章在连续介质假设下，论述了流体力学的基本方程，包括连续性方程、动量方程、能量方程和本构方程，由此导出 Navier-Stokes 方程，这是流体力学中最重要方程之一。为了得到流体力学完备方程组，讨论了状态方程、内能与熵的表达式。对 Navier-Stokes 方程作系综平均得到湍流运动的 Reynolds 方程，Reynolds 方程可以描述湍流统计量的演化规律。采用格子 Boltzmann 方法计算流体的运动规律是一种直接数值模拟方法，并不需要 Reynolds 平均数值模拟，然而由于 Reynolds 方程建立了各种湍流统计量和流体运动之间的相互关系，为从统计的角度研究湍流提供了重要的理论依据。

第 3 章从格子气自动机出发介绍了格子 Boltzmann 方法的理论基础，论述了 Boltzmann 积分微分方程、Maxwell 输运方程，以及宏观流体的连续性方程、动量方程和能量方程之间的相互关系。格子 Boltzmann 方程可以通过两种途径导出：一种是将格子气自动机的粒子演化方程作系综平均，另一种是将连续的 Boltzmann 积分微分方程离散化。采用弛豫时间近似，将格子 Boltzmann 方程中的碰撞算子线性化，则可以得到 Boltzmann-BGK 方程，这是格子 Boltzmann 方法在实际应用中最常见的形式。利用 Chapman-Enskog 分析，由格子 Boltzmann 方程可以导出不同离散格子空间的 Navier-Stokes 方程。流体的宏观动力学行为不依赖于微观粒子的运动

细节，而仅取决于格子空间的对称性和碰撞算子满足的守恒定律，这是一个重要的结论，也是格子 Boltzmann 方法的理论基础。对于非等温流体，需要满足能量转换与守恒定律，He 等（1998）引入内能分布函数，提出了一种含黏性热耗散和可压缩功的双分布函数模型。当黏性热耗散和可压缩功可以忽略，温度可以看作是一个随流体运动的被动标量，满足对流扩散方程，速度场和温度场可以分别计算。Shan 等（1997）从一种模拟多组分流动和相变的多分布函数模型出发，将温度作为整个流体系统中的一个独立组分。在给定了初始条件和边界条件之后，流体力学基本方程组有唯一确定的解。格子 Boltzmann 方法对于处理流场的复杂边界条件具有特别的优点，常用的计算格式包括三种类型：启发式格式、动力学格式和外推格式。Guo 等（2002）提出的非平衡外推格式，具有整体二阶精度和很好的数值稳定性，已成为最常用的边界处理格式之一。格子 Boltzmann 方法不仅适用于规则网格，也适用于不规则网格和曲线坐标系，这主要通过插值的方式实现。对于不均匀流场各处，有时需要采用不同的空间分辨率，多块网格技术将整个流场划分为不同的计算区域，在空间梯度和时间变化率较大的区域采用较细的网格，而在其他区域采用较粗的网格，较好地解决了计算精度问题。

第 4 章讨论了湍流的统计方法，包括相关函数、谱分析和结构函数等，在 Kolmogorov 相似性假设的条件下，利用量纲分析可以得到湍动能谱的 $-5/3$ 次方标度律和脉动速度二阶结构函数的 $2/3$ 次方定律。在 Rayleigh-Bénard 对流中，最重要的控制参数是 Rayleigh 数和 Prandtl 数，最重要的响应参数是 Nusselt 数和 Reynolds 数，它们之间的标度关系受到温度和速度边界层、羽流等多种因素的影响，是湍流热对流研究的重要内容之一。在数值计算中讨论的问题包括：速度和温度边界层、湍流体区间对分辨率的要求，二维与三维数值计算对于 Nusselt 数和 Reynolds 数的差异，不同速度和温度边界条件对于计算结果的影响。

第 5 章论述了采用格子 Boltzmann 方法对湍流热对流进行大规模并行计算的必要性和可行性，讨论了并行程序的性能分析，以及并行算法的设计原则与实现技术。

附录中的算例提供了一个二维 Rayleigh-Bénard 对流的格子 Boltzmann 方法并行计算程序。代码采用标准 C 语言编写，面向分布式内存的并行编程环境 MPI，在 Open MPI v1.8.8 版本上完成调试运行。

本书采用 L^AT_EX 排版，书中的矢量一律采用分量的形式书写。对于矢量和张量运算，采用 Einstein 求和约定，如果在同一项中出现两个相同下标，就意味着对这个指标求和。变量、常量和无量纲数均采用流体力学中的常用命名方式。

采用格子 Boltzmann 方法对湍流热对流进行大规模并行计算，目前相关的研究工作不多，本书在这方面作了初步的尝试。本书内容简练，具有一定的理论性和实用性，可供相关领域的读者参考。本书作者得到国家自

然科学基金 (No. 41172301) 和国家自然科学基金委员会 - 广东省政府联合基金 (第二期) 超级计算科学应用研究专项的资助。

由于作者水平有限, 不足之处, 敬请指正。

作 者

2018 年 7 月

目 录

§ 1 非平衡态统计力学初步	1
1.1 多粒子系统	1
1.2 Boltzmann 方程的弛豫时间近似	3
1.3 Boltzmann 积分微分方程	5
1.4 Boltzmann H 定理	8
1.5 Maxwell 速度分布率	9
§ 2 流体力学方程组	11
2.1 流体力学基本方程	11
2.2 Navier-Stokes 方程	17
2.3 流体力学完备方程组	20
2.4 湍流运动的 Reynolds 方程	25
§ 3 格子 Boltzmann 方法	34
3.1 格子气自动机	34
3.2 Maxwell 输运方程	39
3.3 格子 Boltzmann 方程	43
3.4 Chapman-Enskog 分析	48
3.5 热格子 Boltzmann 方法	54
3.6 流体力学的定解条件	58
3.7 插值格子与多块网格	64
§ 4 湍流热对流数值计算	70
4.1 湍流的统计方法	70
4.2 Rayleigh-Bénard 对流	78

4.3 数值计算精度	92
§ 5 并行计算的程序设计	100
5.1 并行计算初步	100
5.2 并行程序的性能分析	102
5.3 并行算法设计	104
参考文献	107
附 录	115

§ 1 非平衡态统计力学初步

1.1 多粒子系统

流体本质上是由大量微观粒子构成的多体离散系统, 可以用 Hamilton 方程来描述。对于具有 s 个自由度的力学系统, s 个广义坐标 q_i 和 s 个广义动量 p_i 构成 $2s$ 维相空间, 该力学系统的任意一个微观状态对应相空间的一个代表点

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (i = 1, 2, \dots, s) \quad (1.1.1)$$

$H(q_i, p_i, V)$ 为系统的 Hamilton 量, 它不仅取决于广义坐标 q_i 和广义动量 p_i , 还与系统的势能有关

$$H = \sum_{i=1}^s \left[\frac{p_i^2}{2m} + \varphi_e(q_i) \right] + \sum_{1 < i < j < s} \varphi_i(|q_i - q_j|) \quad (1.1.2)$$

式中: φ_e 为粒子在外场中的势能; φ_i 为粒子间相互作用的势能。

代表点随时间运动的曲线形成相轨道, 可以直接描述系统微观状态的变化。在保守力学系统中, Hamilton 量及其导数是广义坐标和广义动量的单值函数。相轨道的运动方向完全由 $\dot{q}_i$ 和 $\dot{p}_i$ 确定, 经过相空间中任一代表点只有一条相轨道。由于总能量在运动过程中保持不变, 相空间中的代表点只能在能量曲面 $H(q_i, p_i) = E$ 上运动, 能量 E 为一个常数, 从不同初态出发的相轨道互不相交。

假设大量完全相同的系统分别从各自的初态出发, 沿着正则方程 (1.1.1) 规定的轨道运动, 则这些系统的代表点在相空间形成一定的分布。在体积元 $d\omega = dq_1 \cdots dq_s dp_1 \cdots dp_s$ 中, 系统代表点的个数

$$dN = \rho(q_i, p_i, t) d\omega \quad (1.1.3)$$

式中: $\rho(q_i, p_i, t)$ 为代表点的密度。若系统所有的微观状态数为 N , 则

$$N = \int \rho(q_i, p_i, t) d\omega \quad (1.1.4)$$

多粒子系统的宏观状态与微观状态之间的联系符合统计规律。一个确定的宏观状态对应大量可能的微观状态, 任意一个微观状态出现的概率为 ρ/N , 其中 N 为归一化因子。

相空间中的代表点可以认为是 $2s$ 维空间中的流体, ρ 为流体的密度。在相空间中任取以控制面 S 为界的体积元 $d\omega$, 控制面的外法线方向为正方向, n_i 为外法线单位矢量。体积元 $d\omega$ 内代表点数量的变化有两个原因: 第一, 通过控制面 S 流出和流入体积元的代表点总和

$$\int_S (\rho \dot{q}_i + \rho \dot{p}_i) n_i dS \quad (1.1.5)$$

正号表示总体上代表点是流出控制面 S 之外的; 第二, 代表点密度分布的不定常性导致体积元 $d\omega$ 内的代表点数量减少, 减少的数量

$$- \int_{\omega} \frac{\partial \rho}{\partial t} d\omega \quad (1.1.6)$$

负号表示代表点数量的减少。考虑到相空间中的代表点数量守恒, 式 (1.1.5) 等于式 (1.1.6)

$$\int_S (\rho \dot{q}_i + \rho \dot{p}_i) n_i dS = - \int_{\omega} \frac{\partial \rho}{\partial t} d\omega \quad (1.1.7)$$

运用 Gauss 定理, 将式 (1.1.7) 左边的面积分化为体积分

$$\int_{\omega} \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \dot{q}_i)}{\partial q_i} + \frac{\partial(\rho \dot{p}_i)}{\partial p_i} \right] d\omega = 0 \quad (1.1.8)$$

由于相空间体积元 $d\omega$ 是任意的, 且被积函数连续, 于是得到代表点的连续性方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \dot{q}_i)}{\partial q_i} + \frac{\partial(\rho \dot{p}_i)}{\partial p_i} = 0 \quad (1.1.9)$$

考虑相空间中系统代表点密度 $\rho(q_i, p_i, t)$ 随时间 t 的变化。当时间由 t 变为 $t + dt$ 时, 在 q_i 、 p_i 处的代表点将运动到 $q_i + \dot{q}_i dt$ 、 $p_i + \dot{p}_i dt$, 代表点密度变化为

$$\rho(q_i + \dot{q}_i dt, p_i + \dot{p}_i dt, t + dt) = \rho + \frac{d\rho}{dt} dt \quad (1.1.10)$$

其中

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \dot{p}_i \quad (1.1.11)$$

将式 (1.1.9) 代入式 (1.1.11), 得

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} \right) \quad (1.1.12)$$

由 Hamilton 方程 (1.1.1) 可得

$$\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} = \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} = 0 \quad (1.1.13)$$

将式 (1.1.13) 代入式 (1.1.12), 得

$$\frac{d\rho}{dt} = 0 \quad (1.1.14)$$

式 (1.1.14) 即为 Liouville 定理, 它表明代表点在相空间中运动时, 其密度分布保持不变。等式左边对时间的全导数称为随体导数, 它表示在跟随代表点一起运动的时候, 求代表点密度的时间变化率。由式 (1.1.11) 和 Hamilton 方程 (1.1.1), 可以将 Liouville 定理表达为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \quad (1.1.15)$$

如果 ρ 仅是 Hamilton 量 (能量) 的函数, 而与 p_i 、 q_i 无关, 则

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (1.1.16)$$

可见系统沿相轨道运动过程中, 相空间代表点密度是一个常数。Liouville 定理完全是力学规律的结论, 没有引入任何统计假设, 它对于时间 t 是可逆的, 将 t 变换为 $-t$ 结论保持不变。

微观状态的概率密度与相空间代表点密度只相差归一化因子 N 。假设在能量 E 到 $E + dE$ 内一切相轨道上微观状态的概率密度都相等, 则得到等概率原理, 也称为微正则分布。等概率原理是平衡态统计物理的基本假设, 它的正确性由它的推论与实验相符得到证明^[1]。

系统的一个确定的宏观状态对应大量可能的微观状态, 所有微观状态的集合称为统计系综。相空间体积元 $d\omega$ 内的代表点数 $\rho d\omega$ 等于系综里微观状态处于 $d\omega$ 内的系统数。Liouville 定理可以表述为系综的概率密度在运动中保持不变, 力学量对微观状态的统计平均可以解释为对系综的平均。

需要说明的是, 对于矢量和张量运算, 本书采用 Einstein 求和约定, 如果在同一项中出现两个相同下标, 就意味着对这个指标求和, 求和号将不再写出, 该指标称为哑指标。

1.2 Boltzmann 方程的弛豫时间近似

当粒子的平均热波长 $\lambda_T \simeq h/(2\pi mkT)^{1/2}$ 远小于粒子间的平均距离 $\delta r \simeq n^{-1/3}$ 时, 粒子之间的量子统计关联可以忽略, 其中: h 为 Planck 常数; m 为粒子质量; k 为 Boltzmann 常数; T 为系统的温度; n 为粒子数密度。用坐标和动量描述粒子的微观运动状态

$$f(r_i, u_i, t) d^3r d^3u \quad (i = 1, 2, 3) \quad (1.2.1)$$

表示在 t 时刻, 粒子质心坐标位于 r_i 处的空间体元 d^3r 内, 速度在 u_i 处的速度体元 d^3u 内的平均分子数。考虑时间由 t 变为 $t + dt$ 时, 体元 $d^3r d^3u$

内的平均粒子数变化

$$[f(r_i, u_i, t + dt) - f(r_i, u_i, t)] d^3r d^3u = \frac{\partial f}{\partial t} dt d^3r d^3u \quad (1.2.2)$$

式 (1.2.2) 右边平均粒子数的变化有两个原因：第一，粒子的速度使其位置随时间改变，当存在外力作用时，粒子的加速度使其速度随时间改变，这两者都引起体元 $d^3r d^3u$ 内粒子数的变化；第二，粒子相互碰撞引起粒子速度改变，使体元 $d^3r d^3u$ 内粒子数发生变化。将式 (1.2.2) 中平均粒子数的变化分为运动项和碰撞项两部分：

$$\frac{\partial f}{\partial t} dt d^3r d^3u = \left[\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_d + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c \right] dt d^3r d^3u \quad (1.2.3)$$

采用类似于式 (1.1.9) 的计算方法，可得由于运动引起粒子数变化的连续性方程

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_d + \frac{\partial(f \dot{r}_i)}{\partial r_i} + \frac{\partial(f \dot{u}_i)}{\partial u_i} = 0 \quad (1.2.4)$$

由于粒子的坐标 r_i 与速度 $u_i = \dot{r}_i$ 是相互独立的变数，得 $\partial u_i / \partial r_i = 0$ 。粒子的加速度 $a_i = \dot{u}_i$ 取决于外力场。例如，在重力场中，加速度与速度无关，得 $\partial a_i / \partial u_i = 0$ 。在电磁场中，Lorentz 力与速度有关，加速度可以表示为

$$a_i = \frac{e}{m} (E_i + \varepsilon_{ijk} u_j B_k) \quad (i, j, k = 1, 2, 3) \quad (1.2.5)$$

式中： e 为粒子所带的电荷量； E_i 为电场强度； B_k 为磁感应强度； ε_{ijk} 为张量运算的置换符号，容易验证， $\partial a_i / \partial u_i = 0$ 仍然成立。在上述条件下，由式 (1.2.4) 得

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_d = - \left(u_i \frac{\partial f_i}{\partial r_i} + a_i \frac{\partial f_i}{\partial u_i} \right) \quad (1.2.6)$$

负号表示粒子由于运动从体元 $d^3r d^3u$ 内流出。

假设体元 $d^3r d^3u$ 中的粒子处于非平衡态，碰撞的作用是使其恢复到平衡态，称为局域平衡。实际上，系统各处微观上趋向局域平衡的过程，导致了诸如扩散、热传导等宏观现象的发生，使系统整体趋向平衡。弛豫时间近似假设平均粒子数变化的碰撞项采用线性近似的形式

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c \simeq - \frac{f - f^{(0)}}{\tau} \quad (1.2.7)$$

式中： f 为非平衡态分布函数； $f^{(0)}$ 为平衡态分布函数； τ 为趋于局域平衡的弛豫时间。一般情况下， τ 是粒子速度的函数，进一步简化可以假设 τ 为常数，方程 (1.2.7) 的解为

$$f(t) - f^{(0)} = [f(0) - f^{(0)}] \exp \left(- \frac{t}{\tau} \right) \quad (1.2.8)$$

$f(0)$ 为体元 d^3rd^3u 中粒子的初始非平衡态分布, 经过时间 τ , $f(0)$ 相对于平衡态的偏离减少为 $1/e$ 。

将式 (1.2.6) 和式 (1.2.7) 代入式 (1.2.3), 得

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u_i \frac{\partial f_i}{\partial r_i} + a_i \frac{\partial f_i}{\partial u_i} = -\frac{f - f^{(0)}}{\tau} \quad (1.2.9)$$

式 (1.2.9) 即 Boltzmann 方程的弛豫时间近似, 对于定常态有 $\partial f / \partial t = 0$ 。

1.3 Boltzmann 积分微分方程

弛豫时间近似通过引入时间常数 τ , 对体元 d^3rd^3u 中由于碰撞引起的粒子数变化作线性化处理。在实际应用中, 通过分子的自由程和平均速率对 τ 进行估算。线性近似只适用于计算接近平衡态 $f^{(0)}$ 的非平衡态分布函数 f 。为了计算碰撞对于分布函数的影响, 需要对碰撞过程作进一步分析。

采用 Maxwell 和 Boltzmann 弹性刚球模型, 假设每个气体分子都是弹性刚球, 碰撞时球的大小和形状都不改变, 球面是光滑的, 接触面没有摩擦力, 不改变切面方向的相对速度, 相互作用力在两个球心的连线上。若气体是稀薄的, 3 个或以上分子同时碰在一起的概率很小, 仅需考虑二体碰撞。设两个分子的质量分别为 m_1 、 m_2 , 碰撞前的速度为 u_{1i} 、 u_{2i} , 碰撞后的速度为 u'_{1i} 、 u'_{2i} , 由动量守恒定律和能量守恒定律, 得

$$m_1 u_{1i} + m_2 u_{2i} = m_1 u'_{1i} + m_2 u'_{2i} \quad (i = 1, 2, 3) \quad (1.3.1)$$

$$\frac{1}{2} m_1 u_{1i}^2 + \frac{1}{2} m_2 u_{2i}^2 = \frac{1}{2} m_1 u_{1i}'^2 + \frac{1}{2} m_2 u_{2i}'^2 \quad (1.3.2)$$

式 (1.3.1) 和式 (1.3.2) 共有 4 个方程, 而碰撞后的速度 u'_{1i} 和 u'_{2i} 共有 6 个变量, 这多余的 2 个自由度说明碰撞方向具有任意性。根据假设两个弹性刚球作对心碰撞, 以 n_i 表示两球相碰时第一个球心到第二个球心的单位矢量, 则碰撞时两球速度的改变为

$$u'_{1i} - u_{1i} = k_1 n_i, \quad u'_{2i} - u_{2i} = k_2 n_i \quad (1.3.3)$$

在三维空间中, 单位矢量具有 2 个自由度, 因此式 (1.3.3) 共有 4 个方程, 引入 2 个变数 k_1 和 k_2 , 结合式 (1.3.1) 和式 (1.3.2), 方程组具有唯一解。将式 (1.3.3) 中的 u'_{1i} 和 u'_{2i} 代入式 (1.3.1) 和式 (1.3.2), 解得

$$u'_{1i} = u_{1i} + \frac{2m_2}{m_1 + m_2} (u_{2j} - u_{1j}) n_j n_i \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (1.3.4)$$

$$u'_{2i} = u_{2i} - \frac{2m_1}{m_1 + m_2} (u_{2j} - u_{1j}) n_j n_i \quad (1.3.5)$$

将式 (1.3.4) 减去式 (1.3.5) 得

$$u'_{2i} - u'_{1i} = u_{2i} - u_{1i} - 2[(u_{2j} - u_{1j})n_j]n_i \quad (1.3.6)$$

将式 (1.3.6) 两边平方得

$$(u'_{2i} - u'_{1i})^2 = (u_{2i} - u_{1i})^2 \quad (1.3.7)$$

式 (1.3.7) 表明碰撞前后弹性刚球的相对速率保持不变。将式 (1.3.6) 与 n_i 作标量积得

$$(u'_{2i} - u'_{1i})n_i = -(u_{2i} - u_{1i})n_i \quad (1.3.8)$$

由式 (1.3.8) 可见, 碰撞前后的相对速度在 n_i 方向的分量大小相等, 方向相反。将式 (1.3.8) 代入式 (1.3.4) 和式 (1.3.5), 得

$$u_{1i} = u'_{1i} + \frac{2m_2}{m_1 + m_2}(u'_{2j} - u'_{1j})n_j n_i \quad (1.3.9)$$

$$u_{2i} = u'_{2i} - \frac{2m_1}{m_1 + m_2}(u'_{2j} - u'_{1j})n_j n_i \quad (1.3.10)$$

比较式 (1.3.4) 和式 (1.3.9)、式 (1.3.5) 和式 (1.3.10), 将 u_{1i} 与 u'_{1i} 、 u_{2i} 与 u'_{2i} 、 n_i 与 $-n_i$ 、 n_j 与 $-n_j$ 互换, 上述等式依然成立, 碰撞前后的刚球速度具有对称性。由此可见, 弹性刚球之间的碰撞是可逆的, 对于每一个 n_i 方向上的碰撞, 都存在一个 $-n_i$ 方向上的反碰撞。

如果两个分子发生碰撞, 它们必然位于以各自分子中心为球心的球面微元 $dS = d_{12}^2 d\Omega$ 上, $d_{12} = (d_1 + d_2)/2$ 为两个分子的中心距离, d_1 和 d_2 为两个刚球的直径, $d\Omega$ 为 dS 对应的立体角。考虑在时间间隔 dt 内发生的碰撞, 碰撞分子必须处在以 dS 为底面、 $(u_{2i} - u_{1i})n_i dt$ 为高的圆柱体内。由此可得, 在第一个分子的球面微元 dS 上发生碰撞的分子数为

$$f(r_i, u_{2i}, t) d_{12}^2 (u_{1i} - u_{2i}) n_i d\Omega dt d^3 u_2 \quad (1.3.11)$$

假设在碰撞过程中, 两个分子的速度分布是相互独立的, 那么在时间间隔 dt 内, 在体积元 $d^3 r$ 内, 速度间隔在 $d^3 u_1$ 内的分子与速度间隔在 $d^3 u_2$ 内的分子在以 n_i 为轴线的立体角 $d\Omega$ 内发生碰撞的次数为

$$f(r_i, u_{1i}, t) f(r_i, u_{2i}, t) d_{12}^2 (u_{1i} - u_{2i}) n_i d\Omega dt d^3 u_1 d^3 u_2 \quad (1.3.12)$$

式 (1.3.12) 称为元碰撞, 它使分子离开速度体元 $d^3 u_1 d^3 u_2$ 进入 $d^3 u'_1 d^3 u'_2$ 。考虑到碰撞的可逆性, 存在元反碰撞, 使分子离开速度体元 $d^3 u'_1 d^3 u'_2$ 进入 $d^3 u_1 d^3 u_2$, 元反碰撞发生的次数为

$$f(r_i, u'_{1i}, t) f(r_i, u'_{2i}, t) d_{12}^2 (u'_{1i} - u'_{2i}) n'_i d\Omega dt d^3 u'_1 d^3 u'_2 \quad (1.3.13)$$

根据碰撞前后刚球速度表达式的对称性, 则 $d^3 u_1 d^3 u_2 = d^3 u'_1 d^3 u'_2$, $(u_{1i} - u_{2i})n_i = (u'_{1i} - u'_{2i})n'_i$ 。将式 (1.3.12) 和式 (1.3.13) 对 $d^3 u_2$ 和 $d\Omega$ 积分, 两式

相减,可以得到在时间间隔 dt 内,在体元 $d^3r_1 d^3u_1$ 内,由于碰撞而增加的分子数

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c dt d^3r_1 d^3u_1 = dt d^3r_1 d^3u_1 \int (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) d^3u_2 d^2_{12}(u_{1i} - u_{2i}) n_i d\Omega \quad (1.3.14)$$

式 (1.3.14) 中 u_2 的积分限是所有可能的速度,但是立体角 Ω 的积分限是半空间,因为只有相向运动的分子才能够发生碰撞。为简单起见,在式 (1.3.14) 中记 $f_1 = f(r_i, u_{1i}, t)$, $f_2 = f(r_i, u_{2i}, t)$, $f'_1 = f(r_i, u'_{1i}, t)$, $f'_2 = f(r_i, u'_{2i}, t)$, 它们是同一分布函数取不同的速度变量。

采用式 (1.3.14) 取代式 (1.2.9) 右端的碰撞项,即得 Boltzmann 积分微分方程

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + u_{1i} \frac{\partial f_1}{\partial r_{1i}} + a_{1i} \frac{\partial f_1}{\partial u_{1i}} = \int (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) d^3u_2 d^2_{12}(u_{1i} - u_{2i}) n_i d\Omega \quad (1.3.15)$$

式 (1.3.15) 采用的是弹性刚球模型。更一般地,可以将 Boltzmann 积分微分方程表达为

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + u_{1i} \frac{\partial f_1}{\partial r_{1i}} + a_{1i} \frac{\partial f_1}{\partial u_{1i}} = \int (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) d^3u_2 \sigma(q, \theta) d\Omega \quad (1.3.16)$$

式中: $\sigma(q, \theta)$ 为两个分子的散射截面; $q = u_{1i} - u_{2i}$ 与 $q' = u'_{1i} - u'_{2i}$ 分别为两个分子在散射前后的相对速度,对于弹性散射 $|q'| = |q|$; θ 为 q 和 q' 的夹角。

在推导式 (1.3.15) 的过程中,针对的是稀薄气体,要求分子之间的作用力是短程力,分子之间的平均距离远大于相互作用的力程,这是式 (1.2.3) 中碰撞项和运动项可以分开的依据,也使得分子之间以二体碰撞为主,3 个及以上分子同时发生碰撞的概率非常小,可以被忽略。碰撞项的计算采用了刚球模型,不考虑分子的内部结构,外力不影响局部碰撞的动力学行为。在式 (1.3.12) 和式 (1.3.13) 中,将两分子碰撞时的联合概率分布函数写成各自分布函数的乘积,要求每个分子的速度分布服从统计独立,这称为 Boltzmann 分子混沌性假设,它是导致 Boltzmann 积分微分方程不可逆性的原因^[2]。

值得一提的是, N 粒子系统的分布函数 $f_N(q_i, p_i)$ 满足 Liouville 定理

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} = - \left(\frac{\partial f_N}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f_N}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \quad (1 \leq i \leq 3N) \quad (1.3.17)$$

Bogoliubou、Born、Green、Kirkwood 和 Yvon 从 Liouville 定理出发得到了更普遍意义上的 BBGKY 方程^[3]。在该理论框架下,可以进一步分析 Boltzmann 分子混沌性假设成立的条件。

1.4 Boltzmann H 定理

Boltzmann H 函数定义为泛函

$$H(t) = \int f(r_i, u_i, t) \ln f(r_i, u_i, t) d^3u d^3r \quad (i = 1, 2, 3) \quad (1.4.1)$$

$f(r_i, u_i, t)$ 是单粒子分布函数, 它是 Boltzmann 方程的解, 在全空间积分, H 随分布函数 f 变化。当 f 随 t 变化时, H 随 t 的变化率为

$$\frac{dH}{dt} = \int (1 + \ln f) \frac{\partial f}{\partial t} d^3r d^3u \quad (1.4.2)$$

将 Boltzmann 方程 (1.3.16) 代入式 (1.4.2), 更换下标以便和前面的公式保持一致

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} = & - \int (1 + \ln f_1) u_{1i} \frac{\partial f_1}{\partial r_{1i}} d^3r_1 d^3u_1 - \int (1 + \ln f_1) a_{1i} \frac{\partial f_1}{\partial u_{1i}} d^3r_1 d^3u_1 + \\ & \int (1 + \ln f_1) (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) d^3u_2 \sigma(q, \theta) d\Omega d^3r_1 d^3u_1 \end{aligned} \quad (1.4.3)$$

将式 (1.4.3) 等号右边第一项化为

$$\begin{aligned} - \int (1 + \ln f_1) u_{1i} \frac{\partial f_1}{\partial r_{1i}} d^3r_1 d^3u_1 &= - \int \frac{\partial (u_{1i} f_1 \ln f_1)}{\partial r_{1i}} d^3r_1 d^3u_1 \\ &= - \int_S f_1 \ln f_1 u_{1i} n_{1i} dS d^3u_1 \end{aligned} \quad (1.4.4)$$

式 (1.4.4) 的最后一步利用 Gauss 定理, 在封闭容器壁面积分。由于分子不能穿过器壁, f_1 在边界上为零, 所以该项积分为零。考虑到在重力场和电磁场中有 $\partial a_i / \partial u_i = 0$, 式 (1.4.3) 等号右边第二项为

$$- \int (1 + \ln f_1) a_{1i} \frac{\partial f_1}{\partial u_{1i}} d^3u_1 d^3r_1 = - \int \frac{\partial (a_{1i} f_1 \ln f_1)}{\partial u_{1i}} d^3u_1 d^3r_1 \quad (1.4.5)$$

当 u_{1i} 趋于无穷大时, f_1 趋于零, 式 (1.4.5) 积分为零。式 (1.4.3) 简化为

$$\frac{dH}{dt} = \int (1 + \ln f_1) (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) \sigma(q, \theta) d\Omega d^3r_1 d^3u_1 d^3u_2 \quad (1.4.6)$$

f_1 、 f_2 、 f'_1 、 f'_2 对应同一个分布函数取不同速度变量 u_{1i} 、 u_{2i} 、 u'_{1i} 、 u'_{2i} , 在式 (1.4.6) 中, 将 u_1 和 u_2 交换, 不改变积分的结果

$$\frac{dH}{dt} = \int (1 + \ln f_2) (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) \sigma(q, \theta) d\Omega d^3r_1 d^3u_1 d^3u_2 \quad (1.4.7)$$

将式 (1.4.6) 与式 (1.4.7) 式相加, 再除以 2, 得

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{2} \int [2 + \ln(f_1 f_2)] (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) \sigma(q, \theta) d\Omega d^3r_1 d^3u_1 d^3u_2 \quad (1.4.8)$$

类似地, 将式 (1.4.8) 中 u_1 和 u'_1 、 u_2 和 u'_2 交换, 得

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{2} \int [2 + \ln(f'_1 f'_2)] (f_1 f_2 - f'_1 f'_2) \sigma'(q, \theta) d\Omega d^3 r_1 d^3 u'_1 d^3 u'_2 \quad (1.4.9)$$

考虑到碰撞前后刚球速度的对称性, 即 $d^3 u_1 d^3 u_2 = d^3 u'_1 d^3 u'_2$, $\sigma'(q, \theta) = \sigma(q, \theta)$, 将式 (1.4.8) 与式 (1.4.9) 式相加, 再除以 2, 得

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{1}{4} \int (x - y)(e^x - e^y) \sigma(q, \theta) d\Omega d^3 r_1 d^3 u_1 d^3 u_2 \quad (1.4.10)$$

在式 (1.4.10) 中, 记 $x = \ln(f'_1 f'_2)$, $y = \ln(f_1 f_2)$, 因为 $(x - y)(e^x - e^y) \geq 0$, 所以得

$$\frac{dH}{dt} \leq 0 \quad (1.4.11)$$

式 (1.4.11) 称为 H 定理, 当且仅当 $f_1 f_2 = f'_1 f'_2$ 时取等号^[4]。

从上面的推导过程可以看到, 式 (1.4.3) 等号右边第一项和第二项为零, 说明在封闭系统中, 运动不改变 H 函数的值。等号右边第三项不为零, 说明分子之间的碰撞是 H 函数改变的原因。对于非平衡态, 系统的变化朝向 H 函数减小的方向进行, 直到 H 函数达到最小值, 不再发生变化, 此时系统处于平衡态。从 H 函数的定义式 (1.4.1) 可以看出, 它与“信息熵”有相同的形式, 表示分布函数所包含的信息量, $-H$ 即分布函数所对应系统的无序程度。可以证明, 在平衡状态下, H 函数的取值与热力学状态函数“熵”之间存在关系

$$S = -kH + C \quad (1.4.12)$$

式中: S 为平衡态系统的熵; C 是一个常数, $C = Nk[1 + 3\ln(m/h)]$, 其中 N 为系统的分子数; k 为 Boltzmann 常数; m 为分子质量; h 为 Planck 常数。需要说明的是, H 函数可以描述任何用分布函数表示的系统状态, 而“熵”只对热力学平衡态有意义^[5]。

1.5 Maxwell 速度分布率

当系统达到平衡状态时, 分布函数不随时间变化, 即 $\partial f / \partial t = 0$ 。由 H 定理可得, 分布函数一定满足

$$f_1 f_2 = f'_1 f'_2 \quad (1.5.1)$$

式 (1.5.1) 称为细致平衡条件, 它表明元碰撞和元反碰撞数相等。将上述条件代入 Boltzmann 积分微分方程 (1.3.16), 得

$$u_i \frac{\partial f_i}{\partial r_i} + a_i \frac{\partial f_i}{\partial u_i} = 0 \quad (i = 1, 2, 3) \quad (1.5.2)$$