《格子Boltzmann方法的原理及应用》

第一章 导论

1.1 流体运动的数学模型和数值方法

流体系统模型按尺度分类

	微观	介观	宏观
假设	—	—	连续性假设.
对象	分子	分子的速度分布函数	流体微团
演化方程	牛顿第二定律	Boltzmann方程	Navier-Stokes方程
范畴	动力学	动理学	
数值方法	跳蛙格式/预估-校正方法	直接解Boltzmann方程 模拟物理过程	CFD
注	1. 格子Boltzmann方程方法属于介观方法中的第二类数值方法 2. 介观模型的数值方法有确定型方法和随机型方法，前者主要误差为模型精度，后者的为统计误差 3、介观模型的优势：1)可以模拟非连续流动；2)可以处理的时空尺度比微观模型大.		

Boltzmann方程：

1° 若用分布函数描述离散系统：$f_N(\vec{q}_1,\vec{p}_1,\cdots,\vec{q}_N,\vec{p}_N)$，其中$\vec{p}_i,\vec{q}_i$为广义坐标和广义动量. 则$f_N$的演化方程为Liouville方程：

$$\frac{\partial f_N}{\partial t}-\sum_{j=1}^{3n}\left[\frac{\partial H_N}{\partial q_j}\frac{\partial f_N}{\partial p_j}-\frac{\partial H_N}{\partial p_j}\frac{\partial f_N}{\partial q_j}\right]=0$$

2° 对f_N在相空间中部分积分后的新分布函数F_s满足的与Liouville方程等价的方程组为BBGKY方程链、

3° 对BBGKY方程链作一些假设，得出Boltzmann方程.

Boltzmann方程为

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

它是单粒子速度分布函数的演化方程：$f(\vec{x},\vec{\xi},t)=NF_1(\vec{q}_1,\vec{p}_1,t)$.
其中Ω为碰撞引起的变化.

注：1°在小 knudsen 数的条件下，可以从 Boltzmann方程推出 Navier-Stokes方程.

1.2 格子Boltzmann方法

格子Boltzmann方程

1° $f_i(\vec{x}+\vec{c}_i\delta_t, t+\delta_t) - f_i(\vec{x},t) = \Omega_i(\vec{x},t)$

其中 $\vec{x}$是离散网格 $\mathcal{L}$ 上的一个位置；

$\{\vec{c}_i \mid i=1,2,\cdots,b\}$是流体粒子的离散速度集合；

δt是离散时间步长；$f_i(\vec{x},t)$是速度分布函数，表示在时间t时，粒子处于 $\vec{x}$ 格子上，以速度 $\vec{c}_i$ 运动的概率；

Ω_i是碰撞算子，表示分子碰撞对速度分布函数的影响.

2° 格子Boltzmann方程的含义是，分子碰撞是流体粒子速度分布函数变化的原因。具体地说，如果在t时刻处于 $\vec{x}$ 格子处，以 $\vec{c}_i$ 速度运动的粒子数，与下一时刻 $t+\delta t$ 时，处于 $\vec{x}+\vec{c}_i\delta t$ 格子处，以 $\vec{c}_i$ 速度运动的粒子数不一样，那么影响源自分子碰撞.

3° 格子Boltzmann的解释：

1) LGA (Lattice Gas Automata，格子气自动机) 演化方程的统计平均；

2) 连续 Boltzmann 方程的一个~~特殊~~离散格式.

4° 目前碰撞算子 Ω_i 一般采用线性化碰撞算子：

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

其中$(k_{ij})_{b\times b}$为碰撞矩阵，$f_i^{(eq)}$是平衡态分布函数。

~~格子Boltzmann~~

格子Boltzmann方法的优点：

1°可以描述非连续流动问题

2° 描述复杂流动现象直观、方便.

3°容易编程，局部计算，并行性好。

第二章 气体动理学理论 Gas Kinetic Theory

气体动理学理论是从气体分子的微观机制研究其宏观特性的理论。

2.1 基本概念

分子模型：

- 力函数模型：硬球分子模型、逆幂律模型（相互作用指数 $S=5$ 时称为 Maxwell 模型）、Lennard - Jones 模型.
- 特征尺度：分子尺寸 σ，分子平均距离 δ，分子平均自由程 λ.

速度分布函数：$f(\vec{x},\vec{\xi},t)$

时刻 t 时，位于以 $\vec{x}$ 为中心的微元 $d\vec{x}$ 内，速度在 $(\vec{\xi},\vec{\xi}+d\vec{\xi})$ 间的分子数为 $f\,d\vec{x}\,d\vec{\xi}$.

注意，这里只考虑分子的平动、不考虑转动.

微观物理量：

1° 分子数密度 $n=\frac{dN}{d\vec{x}}=\int f\,d\vec{\xi}$

2° 总动量 $\rho\vec{u}=\frac{d\vec{J}}{d\vec{x}}=m\int\vec{\xi}f\,d\vec{\xi}$

3° 总能 $\rho E=\rho e+\frac{1}{2}\rho u^2=\frac{dE}{d\vec{x}}=m\int\frac{\xi^2}{2}f\,d\vec{\xi}$

（m：分子质量；$\rho=mn$，质量密度；e：单位体积的内能）

宏观统计量：

1° 微观变量 ψ 的宏观平均值：$\langle\psi\rangle=\frac{1}{n}\int f\psi\,d\vec{\xi}$，

$n\langle\psi\rangle$ 称为 f 的矩.

2° 微观变量 ψ 的通量：$n\mathcal{F}_\psi=n\langle\vec{C}\psi\rangle$

其中 $\vec{C}=\vec{\xi}-\vec{u}$.

动量通量 $\vec{P}=m\int f\vec{C}\vec{C}\,d\vec{\xi}$

热通量 $\vec{Q}=m\int f\vec{C}\frac{C^2}{2}\,d\vec{\xi}$

2.2 Boltzmann 方程.

推导：1° 可以按照统计力学的办法，从气体分子的微观运动，经一系列的简化、假设导出。
严格

2° 一种启发式推导

控制单元 $dV=[\vec{x},\vec{x}+d\vec{x}]$

外力 $\vec{F}=m\vec{a}$

初始分子数 $dN=f(\vec{x},\vec{\xi},t)\,d\vec{x}\,d\vec{\xi}$

~~无碰撞时，下时刻分子数~~

初始相空间微元 $S=[\vec{x},\vec{x}+d\vec{x}]\times[\vec{\xi},\vec{\xi}+d\vec{\xi}]$

下一时刻参量：$\vec{x}'=\vec{x}+\vec{\xi}dt$，$\vec{\xi}'=\vec{\xi}+\vec{a}dt$

下一时刻相空间微元 $S'=[\vec{x}',\vec{x}'+d\vec{x}]\times[\vec{\xi}',\vec{\xi}'+d\vec{\xi}]$

若时间δt内，分子间无碰撞，则集合S与S'中分子数相同：

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

或记为 $\nabla f\cdot(d\vec{x},d\vec{\xi},dt)=0$

即 $\frac{\partial f}{\partial t}dt+(\nabla_x f)\cdot(\vec{\xi}dt)+(\nabla_\xi f)\cdot(\vec{a}dt)=0$

即 $\frac{\partial f}{\partial t}+\vec{\xi}\cdot\nabla_x f+\vec{a}\cdot\nabla_\xi f=0$

若分子间发生了碰撞，设进入S'的净分子数为$\Omega\,d\vec{x}\,d\vec{\xi}\,dt$，其中$\Omega(f)$为碰撞算子，则质量守恒关系为

$$f(\vec{x}',\vec{\xi}',t+dt)\,d\vec{\xi}\,d\vec{x}-f(\vec{x},\vec{\xi},t)\,d\vec{\xi}\,d\vec{x}=\Omega\,d\vec{x}\,d\vec{\xi}\,dt$$

化简得，

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

这就是Boltzmann方程，它是一个微分-积分方程

碰撞算子：$\Omega(f)$

稀薄气体中的分子碰撞主要是二体碰撞，这时碰撞算子表示为（没有证明）

$$\Omega(f(\vec{\xi}))=\int[f'f_1'-ff_1]\,B(\theta,|\vec{V}|)\,d\theta\,d\varepsilon\,d\vec{\xi}_1$$

其中f,f_1为碰前速度分布函数，f',f_1'为碰后的；

$\vec{V}=\vec{\xi}_1-\vec{\xi}$，为相对速度；$\theta$为$\vec{\xi}'-\vec{\xi}$与$\vec{V}$间夹角；

ε是与$\vec{V}$垂直的角度变量；$B(\theta,|\vec{V}|)$是与分子间相互作用有关的非负函数。

注：1° 这里定义的碰撞算子满足质量、动量、能量守恒。

2° 满足$\int\Omega(f)\psi(\vec{\xi})d\vec{\xi}=0$的函数称为碰撞不变量，$\psi_i=1,\vec{\xi},\vec{\xi}^2$称为基本碰撞不变量。 3° $\Omega(f)$是一个非线性积分算子

2.3 Boltzmann H定理

(缺证明)

1° 分布函数的H函数： $H(t)=\int f\ln f \, d\vec{\xi} \, d\vec{x}$

其中f是Boltzmann方程的一个取值为正的值.

可以证明 $\frac{dH}{dt}\leq 0$，这就是Boltzmann H定理.

证明过程用到了Boltzmann方程，Gauss定理，孤立系统假设，碰撞算子的对称性质.

2° 平衡态：H不再变化时系统的状态 (缺证明)

处于平衡态的分布函数称为平衡态分布函数，记为 $f^{(eq)}$.

可以证明，$\ln f^{(eq)}$ 是碰撞不变量，于是.

$$\ln f^{(eq)} = A_0 + \vec{A}_1\cdot\vec{\xi} + A_2\frac{\xi^2}{2}$$

依据 $n=\int f^{(eq)} d\vec{\xi}$，$\vec{u}=\frac{1}{n}\int \vec{\xi} f^{(eq)} d\vec{\xi}$ 和

$$E=\frac{1}{n}\int \frac{\xi^2}{2} f^{(eq)} d\vec{\xi}$$

可以解出 $A_0,\vec{A}_1,A_2$.

最终，

$$f^{(eq)}=\frac{n}{(2\pi RT)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{(\vec{\xi}-\vec{u})^2}{2RT}}$$

平衡态分布函数称为Maxwell－Boltzmann分布.

2.4 BGK 模型

1° 简化的碰撞算子J(f)应当满足Boltzmann碰撞算子的基本特性.

(1) 质量、动量、能量守恒

$$\int \varphi_i J(f)\, d\vec{\xi}=0 \quad , \quad i=1,2,3,4,5$$

(2) 反映系统趋于平衡态的趋势.

$$\int \ln f \, J(f)\, d\vec{\xi}\leq 0$$

不懂

2° BGK 模型 (Bhatnagar－Gross－Krook) 是满足上述要求的最简模型.

$$J_{BGK}(f)=\frac{1}{\tau_c}\left[f^{(eq)}-f\right]$$

它表示碰撞导致系统趋于平衡态，且趋近速度与偏离量成正比. 其中，τ_c 称为松弛时间，$\nu_c=\frac{1}{\tau_c}$ 称为平均碰撞频率.

3° 形式化推导.

假设系统离平衡态不远，且 $f'\approx f^{(eq)'}$, $f_1'\approx f_1^{(eq)'}$, $f_1\approx f^{(eq)}$

可以证明，$f^{(eq)'}f_1^{(eq)'} = f^{(eq)}f_1^{(eq)}$　　不会证明

则 Boltzmann 碰撞算子

$$\Omega(f)\approx\int[f^{(eq)}-f]\,f_1^{(eq)}B(\theta,|\vec{V}|)\,d\theta\,d\varepsilon\,d\xi_1$$
$$=\nu_c[f^{(eq)}-f]$$

其中 $\frac{1}{\tau_c}=\int f_1^{(eq)}B(\theta,|\vec{V}|)\,d\theta\,d\varepsilon\,d\xi_1$

4° BGK模型的性质:

(1) 满足H定理

(2) 对应的宏观流动方程中 Prandtl 数恒为1，与原碰撞算子对应的 $Pr\approx\frac{2}{3}$ 差异很大.

5° BGK模型的推广模型 — 椭圆统计模型 (ES, Ellipsoidal Statistical)

修改局部平衡态方程为各向异性的 Gauss 分布，而不是 M-B分布.

$$f^{(eq)}=\frac{n|\det A|^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{3}{2}}}e^{-C_iA_{ij}C_j}$$

其中 $A=\left[\frac{2RT}{Pr}\vec{I}+\frac{2(Pr-1)P}{\rho Pr}\right]^{-1}$

6° BGK模型的推广模型 — Gross-Jackson 格式

$$\Omega(f)\approx f^{(eq)}\mathcal{L}_N(\phi)$$

其中 $\mathcal{L}_N(\phi)=\sum_{i=1}^{N}(\lambda_i+\nu_N)a_i\psi_i-\nu_N\phi$

$f=f^{(eq)}[1+\phi]$　　$(|\phi|\ll 1)$

$\phi=\sum_i a_i\psi_i$

λ_i 是线性碰撞算子 $\mathcal{L}$ 的特征值, $\lambda_i=-\nu_N$ $(i>N)$

$$\mathcal{L}(\phi)=\int(\phi_1'+\phi'-\phi_1-\phi)B(\theta,|\vec{V}|)\,d\theta\,d\varepsilon\,d\xi_1$$

2.5 宏观流体动力学方程

1° 可以从 Boltzmann 方程推导出流体动力学方程.

将碰撞不变量 $\psi_i = m, m\xi, \frac{1}{2}m\xi^2$ 乘以 Boltzmann 方程两端并积分，可以证明

$$\begin{cases}\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\vec{u})=0\\ \frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\vec{u}\vec{u}+\vec{P})=\rho\vec{a}\\ \frac{\partial(\rho E)}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\vec{u}E+\vec{P}\cdot\vec{u}+\vec{Q})=\rho\vec{a}\cdot\vec{u}\end{cases}$$

也可以从Boltzmann方程中推导出本构方程，并能给出相关的输运系数。

2° Chapman - Enskog 分析.

(1) Hilbert 证明了：如果 f 可以按照一个小参数展开，则 f 在 $t>0$ 时的取值完全由 $t=0$ 时的5个矩 $(\rho, \vec{u}, T)$ 确定。

这表明，f 可由宏观流动状态给出.

(2) Hilbert 展开方法.

由量纲分析，将Boltzmann方程写为

$$\varepsilon\left(\frac{\partial f}{\partial t}+\vec{\xi}\cdot\nabla f+\vec{\alpha}\cdot\nabla_{\xi} f\right)=\Omega$$

其中 $\varepsilon \sim k_n$.

寻找解 $f(\vec{x},\vec{\xi},t;\varepsilon)=\sum_{n=0}^{\infty}\varepsilon^n f^{(n)}$.

若 $f(\vec{x},\vec{\xi},t;1)$ 收敛，则为原Boltzmann方程的解.

在 ε^0 阶，可导出 Euler 方程；但 Hilbert 方程对更高阶近似行不通.

(3) 通过 Chapman - Enskog 方法，也可以导出宏观流体动力学方程.

在对分布函数的高阶近似下，可以得到超越 Navier-Stokes 方程的高阶流体动力学方程.

本构方程为
$$\begin{cases}\vec{P}=p\vec{I}-2\varepsilon\mu\left(\vec{S}-\frac{1}{3}Tr(\vec{S})\vec{I}\right) & \text{(广义粘性定律)}\\ \vec{Q}=-\varepsilon K\nabla T & \text{(Fourier 热传导定律)}\end{cases}$$

$\vec{P}$：动量通量（应力），$\vec{Q}$：热通量，$\vec{S}$：应变率张量

输运系数为：粘性系数 $\mu=\frac{RT}{5}[\vec{B},\vec{B}]$

热传导系数 $K=-\frac{2R^2T}{3}[\vec{A},\vec{A}]$

其中记号 $[\,,\,]$ 是一个比较复杂的积分，参见 chapman 的推导.

3° 输运系数的多级近似

直接计算 $\vec{A},\vec{B}$ 较难，可将它们展开成 Sonnine 多项式级数，从而得到输运系数的多级近似.

$$\mu=\mu_1(1+b_1+b_2+\cdots),\quad K=k_1(1+a_1+a_2+\cdots)$$