格子 Boltzmann 方法解二维圆柱绕流

一小块浓缩铀

2022 年 12 月 13 日

1 LBM 方法概述

LBM 全称 Lattice Boltzmann Method，即格子玻尔兹曼方法，这是一种介观的（宏观和微观之间的）一种模拟方法，在宏观上是离散方法，微观上是连续方法。此方法边界条件容易处理，得到的物理图像清晰，并行性能好，已经在微尺度流、多孔介质流、湍流和燃烧问题等领域得到广泛应用。

1.1 Boltzman 方程

任何一个宏观体系中，每个分子的微观运动都遵守力学规律，因此只要计算出大量粒子的个别运动，就可以确定系统的宏观参数；另一方面，我们可以求出每个分子处在某一状态下的概率，通过统计的方法得出系统的宏观参数，这是 Boltzmann 方程的基本思想。

首先接受三个重要假设：

1. 分子相互碰撞时只考虑二体碰撞。
2. 粒子在碰撞之前速度不相关。
3. 外力不影响局部碰撞的动力学行为。

设速度分布函数 f 是空间位置矢量 $\vec{r}(x,y,z)$、分子速度矢量 $\vec{\xi}(\xi_x,\xi_y,\xi_z)$ 和时间 t 的函数。那么 $f(\vec{r},\vec{\xi},t)$ 表示 t 时刻，在 $\vec{r}$ 到 $\vec{r}+\mathrm{d}\vec{r}$ 间的体积元 $\mathrm{d}\vec{r}=\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$ 中，速度在 $\vec{\xi}$ 到 $\vec{\xi}+\mathrm{d}\vec{\xi}$ 的分子数。若设 t 时刻，$\vec{r}$ 处单位体积内的分子数，则

$$n=\int f(\vec{r},\vec{\xi},t)\,\mathrm{d}\vec{\xi} \tag{1.1}$$

若分子在时间间隔 $\mathrm{d}t$ 内无碰撞，则只有其位置和速度发生变化，分子的数目保持不变，即

$$f(\vec{r}+\mathrm{d}\vec{r},\vec{\xi}+\vec{a}\,\mathrm{d}t,t+\mathrm{d}t)\,\mathrm{d}\vec{r}\,\mathrm{d}\vec{\xi}=f(\vec{r},\vec{\xi},t)\,\mathrm{d}\vec{r}\,\mathrm{d}\vec{\xi} \tag{1.2}$$

对上式左端作 Taylor 展开，两边同时除以 $\mathrm{d}t$，并令 $\mathrm{d}t\to 0$，则

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\vec{\xi}\cdot\frac{\partial f}{\partial \vec{r}}+\vec{a}\cdot\frac{\partial f}{\partial \vec{\xi}}=0 \tag{1.3}$$

由于此时仅考虑了分子的一般运动，而没有考虑碰撞，因此可以写为

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{运动}}=-\vec{\xi}\cdot\frac{\partial f}{\partial \vec{r}}-\vec{a}\cdot\frac{\partial f}{\partial \vec{\xi}} \tag{1.4}$$

我们认为分子只存在一般运动和碰撞，因此

$$\frac{\partial f}{\partial t}=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{运动}}+\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{碰撞}} \tag{1.5}$$

联立1.4和1.5，并将碰撞项记为 Ω_f，则 **Boltzmann 方程**可表示为

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\vec{\xi}\cdot\frac{\partial f}{\partial \vec{r}}+\vec{a}\cdot\frac{\partial f}{\partial \vec{\xi}}=\Omega_f \tag{1.6}$$

关于碰撞项 Ω_f 的表示和求解比较复杂，下面给出 BGK 近似下的 Boltzmann 方程。

1.2 Boltzmann-BGK 方程

BGK 近似下，认为碰撞效应改变 f 使其趋于 Maxwell 平衡态分布 f^{eq}，设改变率的大小和 $f^{\mathrm{eq}}-f$ 成正比，引入

$$\Omega_f=\nu\left[f^{\mathrm{eq}}(\vec{r},\vec{\xi})-f(\vec{r},\vec{\xi},t)\right] \tag{1.7}$$

这样得到 Boltzmann-BGK 方程如下

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\vec{\xi}\cdot\frac{\partial f}{\partial \vec{r}}+\vec{a}\cdot\frac{\partial f}{\partial \vec{\xi}}=\nu\left(f^{\mathrm{eq}}-f\right) \tag{1.8}$$

事实上，ν 为碰撞频率，$\tau_0=1/\nu$ 为弛豫时间。

1.3 格子 Boltzmann 方法

要想对 Boltzmann-BGK 方程使用计算机程序求解，势必要对其进行离散化，格子 Boltzmann 方程即离散化的 Boltzmann-BGK 方程，即

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t}+\vec{e}_\alpha\cdot\nabla f_\alpha=-\frac{1}{\tau_0}\left(f_\alpha-f_\alpha^{\mathrm{eq}}\right)+\left(\vec{a}\cdot\nabla_\xi f\right)_\alpha \tag{1.9}$$

这种离散处理将流体视为大量离散的粒子，每个粒子都会安排在一个规定好的格子 Lattice 上，并按照格子的规则进行迁移，即碰撞和运动。此时，不仅空间是离散的，时间和速度也是离散的。

LBM 的基本模型是 **DdQm** 模型（d 维空间，m 个离散速度），D2Q9 是比较常用的一种，示意如下。

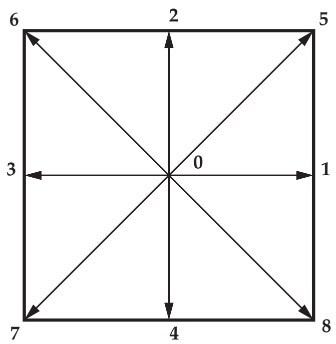

图 1: D2Q9 模型

平衡态分布函数

$$f_\alpha^{\mathrm{eq}}=\rho\omega_\alpha\left[1+\frac{\vec{e}_\alpha\cdot\vec{u}}{c_s^2}+\frac{(\vec{e}_\alpha\cdot\vec{u})^2}{2c_s^4}-\frac{u^2}{2c_s^2}\right] \tag{1.10}$$

其中，权重系数

$$\omega_\alpha=\begin{cases}4/9, & \vec{e}_alpha^2=0\\ 1/9, & \vec{e}_alpha^2=e^2\\ 1/36, & \vec{e}_alpha^2=2e^2\end{cases}$$

格子声速 c_s 为常数，离散速度 $\vec{e}_\alpha$ 满足

$$\vec{e}_\alpha=e\begin{bmatrix}0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1\\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1\end{bmatrix}$$

因此我们可以通过格子中某一点的宏观速度 $\vec{u}$ 和密度 ρ，求解出该点的平衡态分布函数 f_α^{eq}，这是重要的宏观参数转化为微观参数的重要步骤。