《微尺度两相流》

格子Boltzmann方法
Lattice Boltzmann Method

王跃社

动力工程多相流国家重点实验室

2014.5.19-5.22

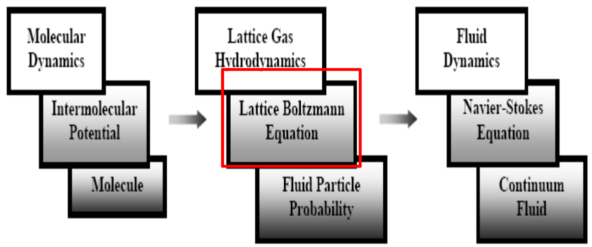
内容介绍

1.1 计算流体动力学基本方法

- 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**、**实验技术**相并列的三大重要科学研究的手段
- 所谓的计算流体动力学，就是利用数值方法联立求解一组非线性质量、能量、动量和组分**微分方程组**（如Euler方程、Navier-Stokes方程等）以及它们的相应变形，以求得流体**流动**、**传热**、**传质**等现象的细节，揭示物理规律。

1.1 计算流体动力学基本方法

- 流体流动及过程中的特性可以从三个层面加以描述：
  - 宏观（流体动力学）层面（**Macroscopic**）；
  - 微观（分子动力学）层面（**Microscopic**）；
  - 介观（格子气流体力学）层面（**Mesoscopic**）。



1.1 计算流体动力学基本方法

- 宏观层面上，流体被假设为连续介质。流体运动满足质量守恒、能量守恒以及能量守恒定律，并由诸如**Euler**方程、**Navier-Stokes**方程组描述。现在大多数的场模拟方法均属于宏观方法
- 有限差分法（**finite-difference method**）；
- 有限容积法（**finite-volume method**）；
- 有限元法（**finite-element method**）；
- 边界元法（**boundary element method**）；
- 谱方法（**spectral method**）

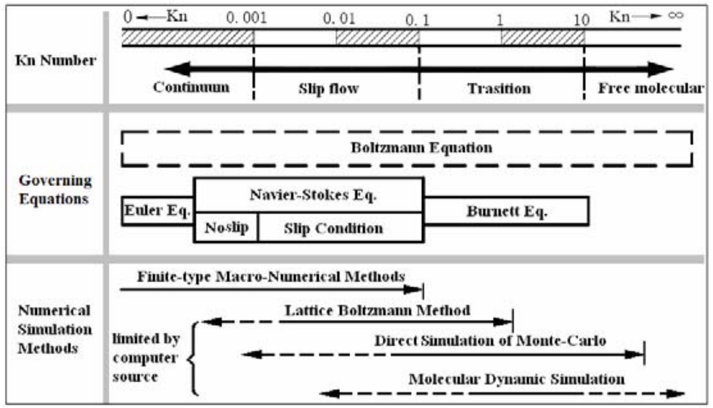
1.1 计算流体动力学基本方法

- 微观宏观层面上，流体不再被假设为连续介质。流体有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。
- 通过模拟每个分子的运动，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基本规律；
- 分子动力学模拟（**Molecular Dynamic Simulation**）就是利用分子的动力学行为遵循经典运动方程的特点，研究气体和液体的状态方程的方法；
- 分子动力学模拟中，计算程序较复杂、计算量大、对内存要求高。

1.1 计算流体动力学基本方法

- 介观层面上，流体同样不再被假设为连续介质。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大，但在宏观上又无限小，其质量比起有限容积中的控制容积质量要小得多。
- 由于单个分子的运动细节并不影响流体的宏观特性，因而可以通过构造一定物理规律的演化机制，让这些粒子进行演化计算，从而获得与物理规律相符的数值结果；
- 常用的介观模拟方法有：
  - 格子气自动机（**Lattice Gas Automata**）
  - 直接蒙特卡罗法（**Direct Monte Carlo Method**）
  - 格子Boltzmann法（**Lattice Boltzmann Method**）

1.1 计算流体动力学基本方法

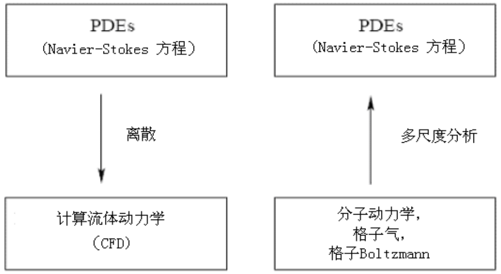


Application range of different level numerical methods for gases

1.1 计算流体动力学基本方法

三种方法的区别与联系

宏观连续模型------“自上而下”；
微观分子模型和介观格子模型------ “自下而上”。



1.1 计算流体动力学基本方法

三种方法的区别与联系

- 对于同一个流体体系而言，宏观、介观和微观三类模型的是同一物理规律的不同刻画形式，在一定的条件下三者是等价的。
- 基于统计力学和统计物理的理论，我们可以从微观分子模型统计得到介观格子模型的演化规律；
- 基于格子气动机理论和BGK近似，我们可以从宏观连续模型推导出介观格子模型；
- 基于Chapman-Enskog展开以及Taylor级数展开，我们可以将微观和介观的Boltzmann方程回归到宏观的Euler方程或Navier-Stokes方程组。

1.1 计算流体动力学基本方法

介观方法：*原则上适用范围很广*

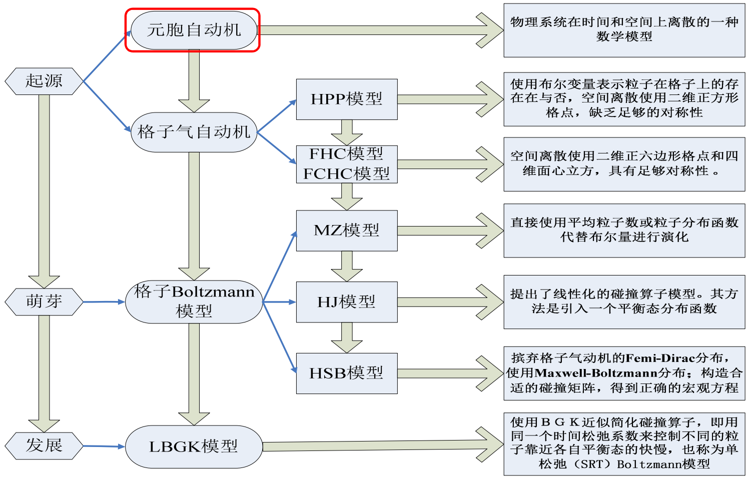
- 用于模拟小尺度的非连续流体；
- 时间尺度和空间尺度大于分子动力学的尺度，常用来模拟微米和毫米尺度的流动问题；
- 由于它的微观特性，它可以方便地描述不同相之间的相互作用，是研究两相流及多相流系统和复杂边界问题的有效途径；
- 模型简单而物理图像清晰，易于理解和编程；
- 计算效率高、边界条件容易实现；
- 具有完全并行性。

1.1 计算流体动力学基本方法

介观格子模型

- *与微观模型相比*，二者都是从微观的角度考察流体分子的运动信息，不同之处是微观模型反映的是每个分子的个体行为，而介观模型描述的是分子的统计学行为；
- *与宏观模型相比*，二者刻画的对象都是微观分子的统计量，都不关心分子个体对体系的影响，不同之处在于介观模型没有连续性假设的限制。

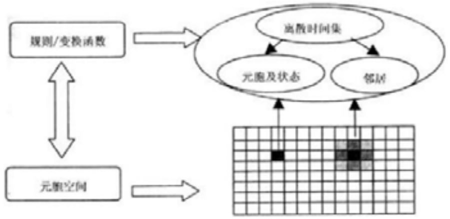
1.2 格子Boltzmann方法起源与发展



元胞自动机 Cellular Automaton（CA）

□ **元胞自动机基本组成**

- 元胞、元胞空间、邻居及规则四部分组成。另外，还应包括状态和时间
- 可以视为一个元胞空间和定义域该空间的变换函数组成

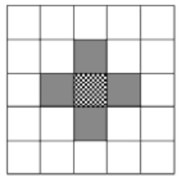


元胞自动机 Cellular Automaton（CA）

□ **元胞自动机是一个一维/二维矩形世界**
- John Conway's Game of Life(生命游戏)
- Schelling's Segregation Model(分形模型)
- Per Bak's Sand Pile Model(沙堆模型)

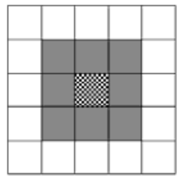
- 每个方格居住着一个活着的（黑色）或死了的（白色）细胞
- 一个细胞在下一个时刻生死取决于相邻八个方格中活着的或死了的细胞的数量
- 如果相邻方格活着的细胞数量过多，这个细胞会因为资源匮乏而在下一个时刻死去；
- 相反，如果周围活细胞过少，这个细胞会因太孤单而死去。

□ **元胞自动机的邻居模式**



冯诺曼邻居模式

Von Neumann Neighborhood



摩尔邻居模式

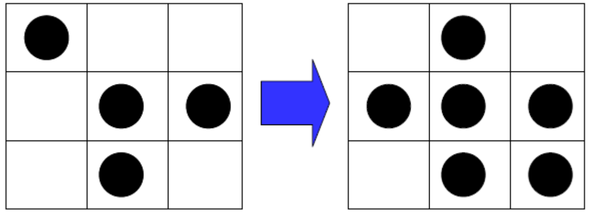
Moore Neighborhood

□ 生命游戏的演化规则（The “Rules of Life”）

- 如果一个活着 (黑色) 细胞周围有少于两个活着的细胞，那么这个细胞将会死（变白）-孤独而死
- 如果一个活着 (黑色) 细胞周围有三个以上活着的细胞，那么这个细胞将会死（变白）-拥挤而死
- 如果一个活着 (黑色) 细胞周围要么有两个要么有三个活着的细胞，那么这个细胞将继续活着（保持黑色）-幸福活着
- 如果一个死 (白色) 细胞周围正好有三个活着的细胞，那么这个细胞将变活（变黑）-复制生命 其他情况下，仍旧保持死细胞

If an alive (black) cell has fewer than 2 alive neighbors, it dies (turns white) -- **loneliness**
If an alive cell has more than 3 alive neighbors, it dies – **overcrowding**
If an alive cell has either 2 or 3 alive neighbors, it goes on living (stays black) -- **happiness**
If a dead cell has exactly 3 alive neighbors, it comes alive -- **reproduction**. Otherwise it stays dead.

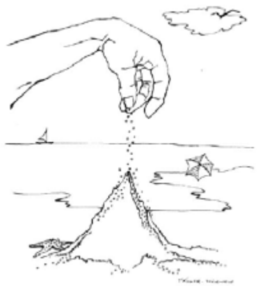
□ 生命游戏的例子（Example）



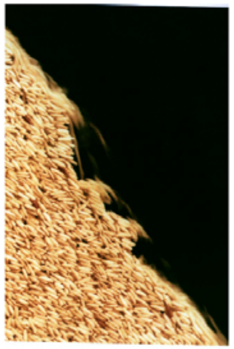
元胞自动机被广泛用于细胞生长、分形结构以及城市交通流等复杂问题

∴ 元胞自动机是一个空间上和时间上离散的数学模型

沙堆的模拟

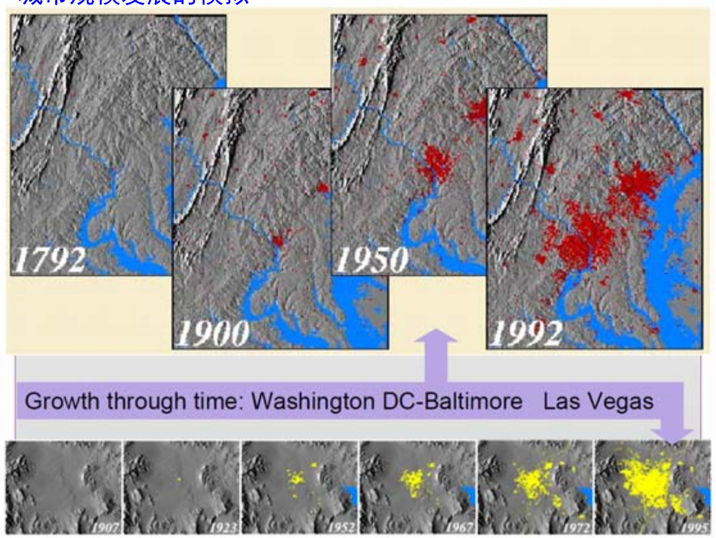


Per Bak’s Sand Pile

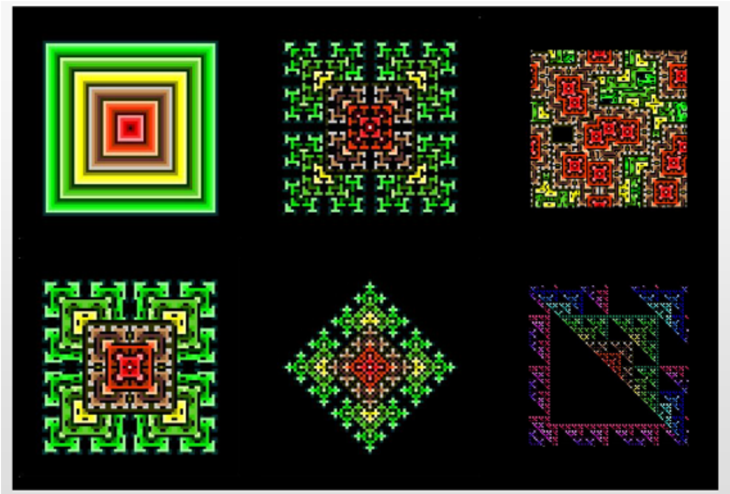


Power-law distributed avalanches in a rice pile

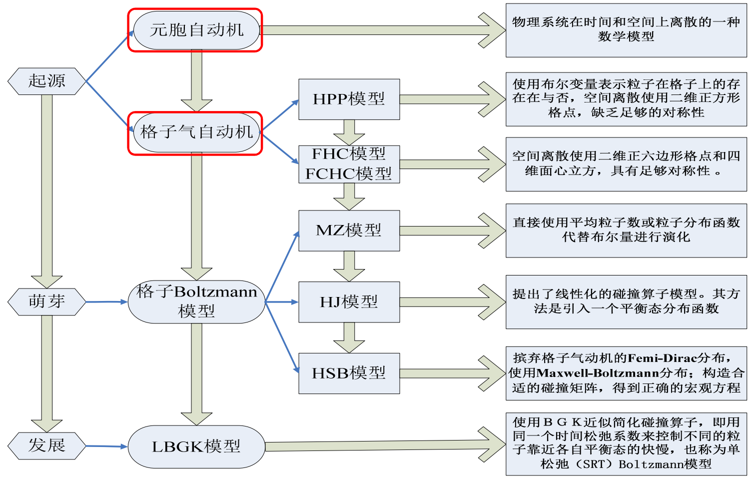
城市规模发展的模拟



分形图案的模拟



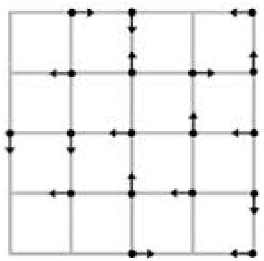
1.2 格子Boltzmann方法起源与发展



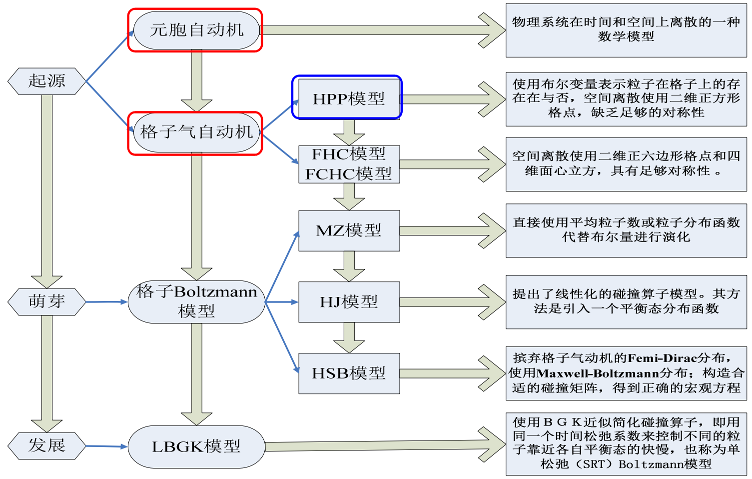
格子气自动机 Lattice Gas Automaton（LGA）

格子气自动机的原理

- 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
- 由于离子的演化只涉及到相邻节点，因而格子气自动机可以方便地采用区域分裂方法做并行计算
- 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，可适用于多孔介质等复杂几何区域的模拟
- 由于采用1或0来描述格线上粒子的有无，也即进行布尔（Bool）运算，因此格子气自动机可以无条件稳定



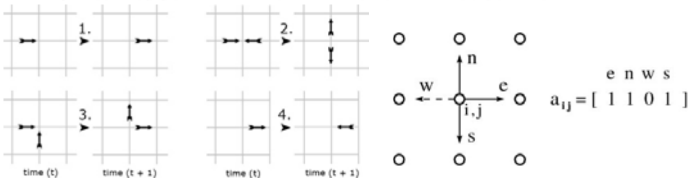
1.2 格子Boltzmann方法起源与发展



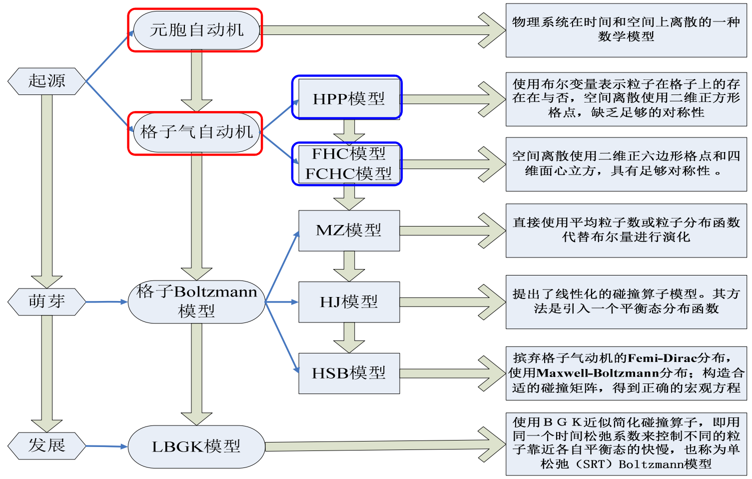
◘格子气自动机 Lattice Gas Automaton（LGA）

◘ HPP模型

- 20世纪70年代，为研究流体输运特性，法国的Hardy、Pomeau和Pazzis提出的第一个完全离散模型。根据作者的名字缩写，该模型命名为HPP模型。
- 在该模型中，除了流体被离散成一系列粒子外，时间以及空间也被离散到一个二维正方形格子上。这是历史上第一个格子气自动机。
- 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，导致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



1.2 格子Boltzmann方法起源与发展

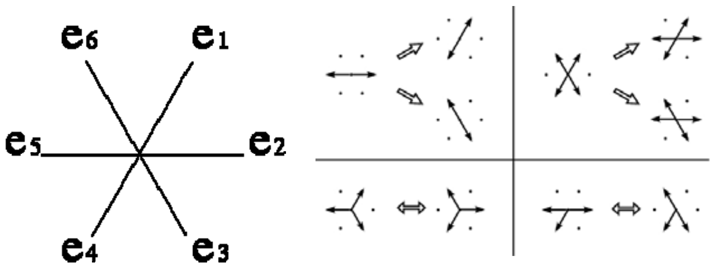


◘格子气自动机 Lattice Gas Automaton（LGA）

◘ FHP模型

- 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。同年，有人提出四维面心立方（face-centered-hyper-cubic，FCHC）模型以及在三位空间的投影

- FHP模型和FCHC模型成功克服了HPP模型对称性不足的缺点，能分别恢复二维和三维的不可压缩Navier-Stokes方程

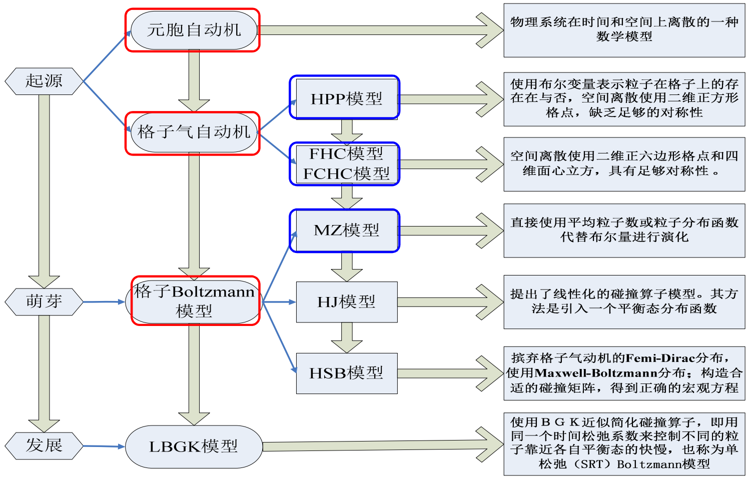


◘格子气自动机 Lattice Gas Automaton（LGA）

◘ 格子气自动机的缺点

- 由格子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
- 流体状态方程不仅仅依赖与密度和温度，还与宏观流速有关
- 由于采用了Bool运算，因而局部量往往存在数值噪声，需要对时间和空间上做平均，这样就只增加了计算量
- 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

1.2 格子Boltzmann方法起源与发展

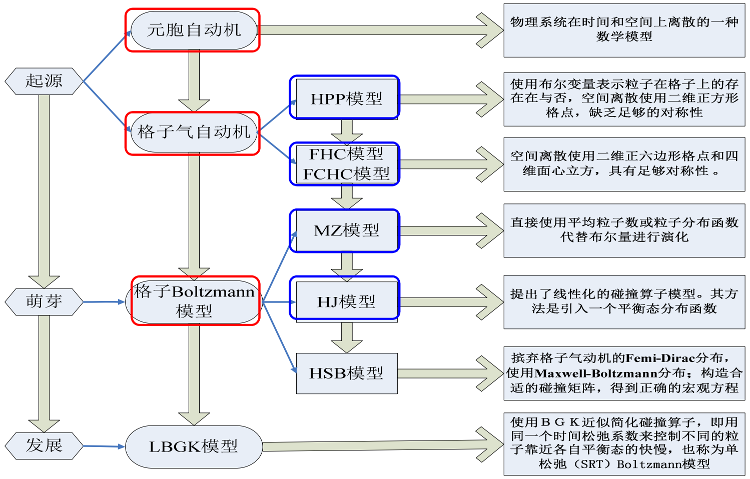


格子Boltzmann模型 Lattice Boltzmann Method（LBM）

MZ模型

- 1988年，McNamara和Zanetti提出把格子气自动机中的Bool运算变成实数运算，格子点上的粒子数不用整数0或1来表征，而用实数f来表示系综平均后的局部粒子分布函数（Local particle distribution function），用Boltamann方程代替格子自动机的演化方程，并将该模型用于流体的数值计算
- 最早的格子Boltzmann模型，开启了格子Boltzmann方法的历史大门
- 该模型消除了系统的大部分噪声；碰撞模型直观明了，完全忽略了粒子间的相互影响
- 当粒子数增多时，碰撞算子的选择会变得非常困难，其指数复杂性依然存在。该模型又称为多粒子碰撞模型（Multi-particle Collision Model）

1.2 格子Boltzmann方法起源与发展

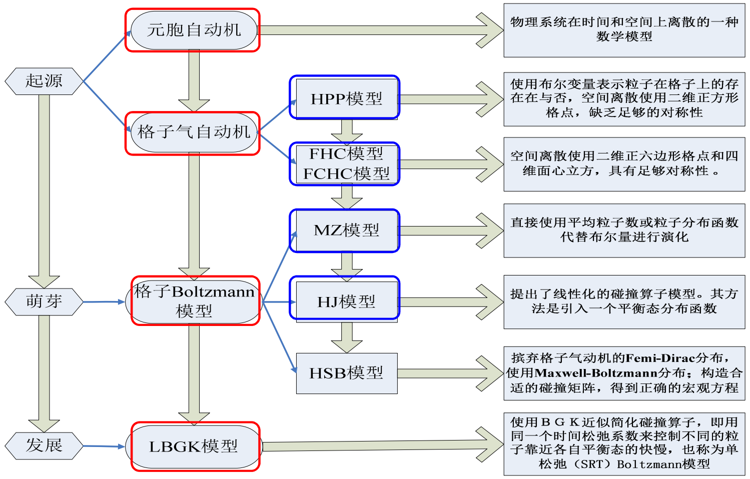


格子Boltzmann模型 Lattice Boltzmann Method（LBM）

HJ模型

- 1989年，Higuera和Jimenez提出一个简化模型：通过引入平衡态分布函数f^{eq}，将碰撞算子线性化由一个矩阵来代替，矩阵中各个元素的值满足质量守恒和动量守恒
- 该模型不需要碰撞规则，并忽略各个粒子间的碰撞细节，相对于多粒子碰撞模型，容易构造。该模型又被称为矩阵模型
- 当粒子种类增多时，矩阵变大，矩阵元素的定义及碰撞演算变得复杂
- 该模型消除了统计噪声，克服了碰撞算子指数复杂性，但由于依然使用了Fermi-Dirac平衡态分布函数，格子气自动机的其他缺点依然存在

1.2 格子Boltzmann方法起源与发展



格子Boltzmann模型 Lattice Boltzmann Method（LBM）

LBGK模型

- Chen等（1991年）、Qian等（1992年）先后提出了单松弛法（Single relaxation time，SRT），用同一个时间松弛系数来控制不同粒子靠近各自平衡态的快慢，进一步简化了碰撞算子
- Chen、Qian等提出的方法之所以被称为格子BGK（LBGK）模型，是因为这种方法源自1954年Bhatnagar、Gross和Krook为了简化Boltzmann输运方程中的碰撞积分相而提出的碰撞间隔理论（BGK为3人名字的首字母）。该方法的本质就是用SRT过程代替碰撞项
- 当粒子种类增多时，碰撞算子本身发生变化不会变得复杂
- 该模型彻底摒弃了Fermi-Dirac平衡态分布函数。对于气体的平衡态方程，取Maxwell-Boltzmann分布

1.2 格子Boltzmann方法起源与发展

- LBM 快速发展 —— LBGK模型的发展

模型的发展
- 等温可压缩模型
- 多相流动模型
- 传质模型
- 等温不可压缩模型
- 多组分流动模型
- 传热模型

边界处理
- 启发式格式
- 外推格式
- 动力学格式
- 复杂边界处理格式

网格技术
- 均匀网格
- 非均匀网格
- 多重网格
- 多块网格

多尺度研究
- 微尺度流动换热模拟
- 多孔介质流动

1.2 格子Boltzmann方法起源与发展

- LBM 相关研究

参考书籍

内容介绍

2. LBM基本理论

- **连续介质假设适应于当研究对象的尺度比粒子结构尺度大很多的情况**
  - 飞机在空气中的飞行、轮船在水中的形式、血液在动脉中的流动
- **在研究高空稀薄气体中物体的运动、血液在微血管中的流动时，因流体分子的平均自由程与长度尺度相比为同阶量，这是不能视气体和学液为连续介质**
- **尽管使用Navier-Stockes方程组描述流体的运动比较的方便，但是在模型某些情况下，求解这组偏微分方程是非常困难的或根本不可能**

连续介质假设不能适用或宏观方程难以描述的系统

介观的气体动理论（Gas Kinetic Theory）

作为气体动理论基本方程的连续Boltzmann方程求解很难

微观的分子动力学

跟踪多个粒子运动，计算量和存储量大

格子气自动机是一种简化的分子动力学模型

格子气自动机中的整数运算变成实数运算，格子点上的粒子数不用0或1来表征，而用实数表示的局部粒子分布函数

标志着格子Boltzmann方法的诞生！！！

2. LBM基本理论

- **格子方法的提出是基于这样一个事实：流体的宏观运动是流体分子微观热运动的统计平均结果，宏观行为对每个分子的运动细节不敏感。流体分子的相互作用的差别反映在Navier-Stokes方程组的输运系数上。可以构造微观或介观的模型，使之在遵循基本守恒方程的前提下尽可能地简洁。**
- **格子Boltzmann方法诞生时并没有跟连续Bolzmann方程建立联系，但是通过分析格子Boltzmann方程与Boltzmann方程的内在联系，可以发现格子Boltzmann方程可以看做是简化的Boltzmann方程的一个特殊离散形式**

格子Boltzmann方法的基础理论

From

气体动理论： Boltzmann方程 → Maxwell分布 → Boltzmann-BGK方程

→ 格子Boltzmann-BGK方程

2.1 从连续 Boltzmann方程到 LBGK方程

- ***Boltzmann 方程***

- **19世纪中期，气体动理论的主要奠基人是Clausius（克劳修斯）、Maxwell（麦克斯维）和Boltzmann（玻尔兹曼）。上述三人引进了统计概念将宏观理论和微观基础联系了起来。**
  - Clausius第一次正确证明了玻意耳定理，引入自由程概念
  - Maxwell得到分子运动速度分布律，建立了气体输运过程理论
  - Boltzmann提出了H理论（H theorem），在速度分布律中引入重力场，建立输运方程的数学理论
- **1902年，Gibbs（吉布斯）把Boltzmann和Maxwell所创立的统计方法发展成为系统的系综理论（ensemble theory），使原来仅适用于气体的理论，推广至气体、液体和固体普遍使用的统计力学（Statistical Mechanics）**
- **1926年，为了将统计力学应用于热辐射问题，建立了量子力学（quantum mechanics），在量子力学基础上建立的统计理论称为量子统计力学。自此，统计物理学已经具有比较完善的理论体系。**

2.1 从连续 Boltzmann方程到 LBGK方程

➢ ***Boltzmann 方程***

- 在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，因此只要算出大量粒子的个别运动，就可以确定系统的宏观参数，这正是分子动力学模拟的基本出发点
- 另一方面，可以不去确定每个分子的运动状态，而是求出每一个分子处在某一状态下的概率，通过统计方法得出系统的宏观参数，这是Boltzmann方程的基本思想。Boltzmann方程是统计力学中用以描述非平衡态分布函数演化规律的方程。

2.1 从连续 Boltzmann方程到 LBGK方程

➢ ***Boltzmann 方程***

在统计力学中，用来描述微观层次下粒子分布函数 *f* 时空变化的守恒方程，由Lugwig Boltzmann于1872年提出。

The Boltzmann equation is used to study how a gas or fluid transports physical quantities such as heat and momentum, and thus to derive transport properties such as viscosity, and thermal conductivity.

1844 – 1906

2.1 从连续 Boltzmann方程到 LBGK方程

➢ ***Boltzmann 方程***

- 推导Boltzmann方程的三个基本假设：

• 只考虑二体碰撞，忽略三个或更多粒子的同时碰撞的情况；
• 分子混沌假设，即发生碰撞的两个粒子在碰撞前速度不相关；
• 外力不影响局部碰撞时的动力学行为。

- 为简单起见，只讨论单组分气体

• 设速度分布函数为f，f是空间位置矢量r（x,y,z）、分子速度矢量ξ（ξ_x,ξ_y,ξ_z）及时间t的函数
• t时刻，r处单位体积内的分子数，亦即数密度n为：

$$n=\int f(r,\xi,t)d\xi$$

2.1 从连续 Boltzmann方程到 LBGK方程

➢ ***Boltzmann 方程***

- 任一分子，如在时间间隔dt内无碰撞，则在$drd\xi$内的数密度既不增加也不减少，于是有：

$$f(r+dr,\xi+at,t+dt)dtd\xi=f(r,\xi,t)dtd\xi$$

- 对上式左端作Taylor展开，然后两边同除dt，并令dt–0，则有：

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\boldsymbol{\xi}\cdot\frac{\partial f}{\partial r}+\mathbf{a}\cdot\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\xi}}=0 \Rightarrow \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{运动}=-\boldsymbol{\xi}\cdot\frac{\partial f}{\partial r}-\mathbf{a}\cdot\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\xi}}$$

$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{运动}$ 为分子运动引起的$f(d, t, \xi)$的增加

2.1 从连续 Boltzmann方程到 LBGK方程

➢ ***Boltzmann 方程***

- 除此之外，上式右端还应考虑由于分子碰撞产生的分子数的变化量： $(\partial f/\partial t)_{碰撞}\, dr d\xi dt$， 即：

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

或

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\xi\cdot\frac{\partial f}{\partial r}+\mathbf{a}\cdot\frac{\partial f}{\partial \xi}=\boxed{\Omega(f)} \longrightarrow \text{碰撞项}$$

2.1 从连续 Boltzmann方程到 LBGK方程

➢ ***Boltzmann 方程***

- **Boltzmann方程是一个积分-微分方程，用来描述单个粒子分布函数 在物理-动量空间（相空间）的演变：**

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\xi\cdot\frac{\partial f}{\partial r}+\mathbf{a}\cdot\frac{\partial f}{\partial \xi}=\boxed{\Omega(f)} \longrightarrow \text{碰撞项}$$

f ⟶ 粒子分布函数**(particle distribution function)**

ξ ⟶ 粒子的速度矢量

$\mathbf{a}$ ⟶ 由外力**F**引起的加速度

2.1 从连续 Boltzmann方程到 LBGK方程

➢ ***Boltzmann 方程***

- 碰撞模型：一个是刚球模型，另一个是力心点模型

➢ 刚球模型：假定分子都是弹性刚球，碰撞时分子大小和形状都不变，并且球面光滑，碰撞时相互作用力在两个球心的连线上，不影响切向的速度

➢ 力心点模型：假定分子都是质点，分子间作用力是有心力，并且是分子距离的函数

2.1 从连续 Boltzmann方程到 LBGK方程

➢ ***Boltzmann 方程***

- 基于刚性碰撞模型的碰撞积分 项

碰撞粒子
的中心距

$$\Omega(f)=\iint\left(f f_1'-f f_1\right) d_D^2 |g| \cos\boxed{\theta}\boxed{d\Omega}\, d\xi_1$$

计算碰撞固体角和
粒子相对速度 的
碰撞截面

固体角

➢ **碰撞积分项给Boltzmann方程的求解带来极大的困难。人们提出了许多近似解：碰撞项线性化、Hilbert扰动法、Chapman-Enskog展开等**

2.1 从连续 Boltzmann方程到 LBGK方程

➢ Maxwell分布

- Boltzmann方程的解析解一般情况下很难得到，但在单组分单原在不受外力作用的情况下，可以得到Boltzmann方程的一个解，即单组分单原子气体的平衡态分布--Maxwell分布

$$f = n\frac{1}{(2\pi R_g T)^{3/2}}\exp\left[-\frac{(\xi-u)}{2R_g T}\right]$$

- ➢ Maxwell分布式气体动理论中的最重要的物理定律，它规定了气体在静止平衡态时速度的最可能速度分布
- ➢ 分子束技术可以足够精度低测量出分子速度的Maxwell分布，并证明了分布的正确性
- ➢ Maxwell分布对双原子与多原子气体的平均速度也是正确的

2.1 从连续 Boltzmann方程到 LBGK方程

➢ Boltzmann — BGK 方程

- 直接得到Boltzmann方程的分析解和数学解几乎是不可能的。
- Bhatnagar，Gross 和Krook（1954）提出碰撞项的简化模型，称为BGK假设：
- ➢ 假设分子之间的碰撞会促使分布函数 f 向其平衡态接近，碰撞引起的变化量与 f 偏离平衡态的程度成正比。
- ➢ 简化后的Boltzmann－BGK方程为：

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\boldsymbol{\xi}\cdot\frac{\partial f}{\partial r}+\mathbf{a}\cdot\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\xi}}=-\frac{f-f^{eq}}{\tau}$$

$f(r,\mathrm{e},t)$ 密度分布函数，表示在t时刻r位置微观速度是e的粒子的密度分布

2.1 从连续 Boltzmann方程到 LBGK方程

➢ Boltzmann — BGK 方程

f^{eq} 是平衡分布函数（Maxwell-Boltzmann分布函数）

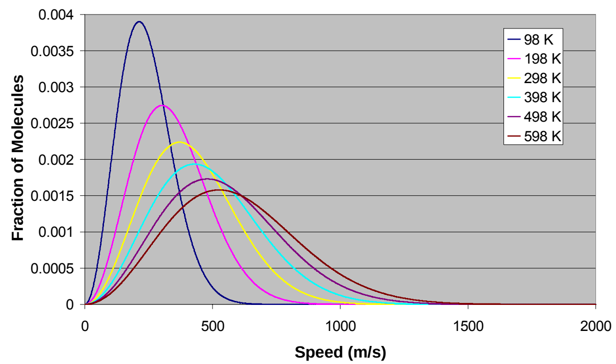
$$f^{eq}=\frac{\rho}{(2\pi RT_0)^{D/2}}\exp\left[-\frac{(\xi-u)^2}{2RT}\right]$$

D, R, T, ρ, u

空间尺寸、气体常数、宏观温度、密度、流体速度

2.1 从连续 Boltzmann方程到 LBGK方程

➢ Boltzmann — BGK 方程



Maxwell-Boltzmann Distribution

2.1. 从连续 Boltzmann方程到 LBGK方程

➢ ***Boltzmann — BGK 方程***

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\boldsymbol{\xi}\cdot\frac{\partial f}{\partial r}+\mathbf{a}\cdot\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\xi}}=-\frac{f-f^{eq}}{\tau}$$

- 格子Boltzmann方程是Boltzmann-BGK方程的一种特殊的离散形式
- 格子Boltzmann方程三要素：
  - ➢ 时间和相空间离散的演化方程
  - ➢ 满足质量守恒和动量守恒条件
  - ➢ 恰当的平衡态分布函数 ⟹ 导出正确的宏观N-S方程

2.1 从连续 Boltzmann方程到 LBGK方程

➢ ***LBGK 方程***

(1) 平衡态分布函数的近似

$$f^{eq}(\mathbf{u})=\frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}}\exp\left[-\frac{(\boldsymbol{\xi}-\mathbf{u})^2}{2RT}\right]$$ （**Maxwell-Boltzmann**分布）

Taylor 展开
$$f^{eq}(\mathbf{u})=f^{eq}(0)+\mathbf{u}f'^{eq}(0)+\frac{\mathbf{u}^2}{2}f''^{eq}(0)+O(\mathbf{u}^3)$$
$$=\frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}}\exp\left(-\frac{\boldsymbol{\xi}^2}{2RT}\right)\left[1+\frac{(\boldsymbol{\xi}\cdot\mathbf{u})}{RT}+\frac{(\boldsymbol{\xi}\cdot\mathbf{u})^2}{2(RT)^2}-\frac{\mathbf{u}^2}{2RT}\right]+O(\mathbf{u}^3)$$
$$=\frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}}\exp\left(-\frac{\boldsymbol{\xi}^2}{2RT}\right)\left[1+\frac{(\boldsymbol{\xi}\cdot\mathbf{u})}{RT}+\frac{(\boldsymbol{\xi}\cdot\mathbf{u})^2}{2(RT)^2}-\frac{\mathbf{u}^2}{2RT}\right]$$

2.1 从连续 Boltzmann方程到 LBGK方程

➢ ***LBGK 方程***

(2) 时间和空间上离散

基于以上离散：

$$f(r+e\delta t,e,t+\delta t)-f(r,e,t)=-\frac{1}{\tau}\left[f(r,e,t)-f^{eq}(r,e,t)\right]$$

⇓

LBGK 方程

$$f_i(r+e_i\delta t,t+\delta t)-f_i(r,t)=-\frac{1}{\tau}\left[f_i(r,t)-f_i^{eq}(r,t)\right]$$

平衡态分布函数可以表示成如下形式

$$f_i^{eq}=W_i f^{eq}(r,e,t)=w_i\rho\left[1+\frac{3(e_i\cdot u)}{c^2}+\frac{9(e_i\cdot u)^2}{2c^4}-\frac{3u^2}{2c^2}\right]$$

2.1 从连续 Boltzmann方程到 LBGK方程

➢ ***Boltzmann — BGK 方程***

（**3)** 宏观变量是分布函数的速度矩

密度 $$\rho=\int f d\xi=\int f^{eq}d\xi$$

动量 $$\rho\mathbf{u}=\int \xi f d\xi=\int \xi f^{eq}d\xi$$

内能 $$\rho\varepsilon=\frac{1}{2}\int(\xi-u)^2 f d\xi=\frac{1}{2}\int(\xi-u)^2 f^{eq}d\xi$$

内容介绍

- LBM简介
- LBM基本理论
- LBM基本模型
- LBM边界处理方法
- LBM应用实例

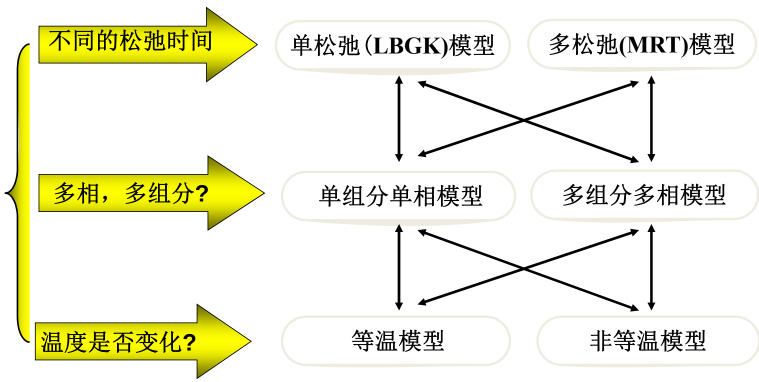
2. LBM基本模型

- 一个完整的格子Boltzmann模型通常由三部分组成：
  - 格子，即离散速度模型（discrete velocity model, DVM）
  - 平衡态分布函数
  - 分布函数的演化方程（evolution equation）
- 构造格子Boltzmann模型的关键是选择合适的平衡态分布函数，而平衡态分布函数的具体形式又与离散速度模型的构造有关。
- 离散速度的对称性决定了相应的格子Boltzmann模型能否还原到所要求解的宏观方程。

格子Boltzmann模型的建立可理解为如下一个过程：首先，为恢复相应的宏观方程，平衡态分布函数应满足一定的约束条件，推导出这些约束条件是建模的第一步；接下来要选择合适的离散速度模型，并依照这一离散速度模型通过约束条件所导出的方程确定平衡态分布函数的形式

2. LBM基本模型

根据不同的划分规则，**LBM** 的模型包括：

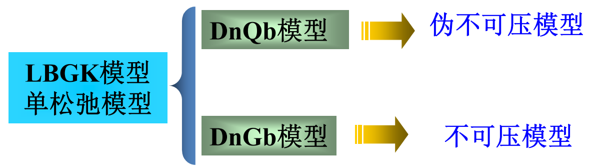


3.1 LBGK模型

格子 Boltzmann-BGK（LBGK）模型的演化方程：

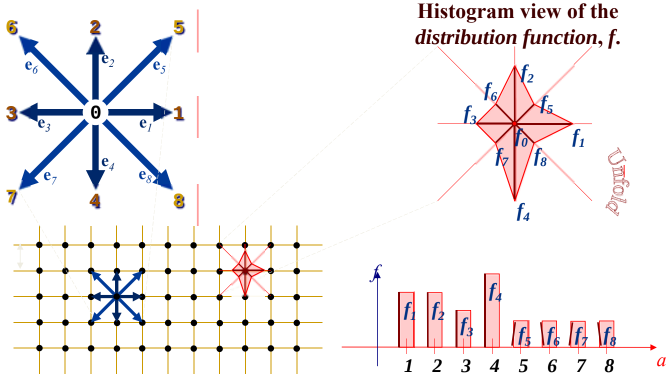
$$f_i\left(r+\mathbf{e}_i\delta t, t+\delta t\right)-f_i\left(\mathbf{x},t\right)=-\frac{1}{\tau}\left[f_i\left(r,t\right)-f_i^{eq}\left(r,t\right)\right]$$

代表性的模型： Qian 等人1992年提出的 DnQb 模型和 Guo 等人2006年提出的 DnGb 模型。 （n为空间维数，b是离散速度数）



3.1 LBGK模型

➢*DnQb模型*

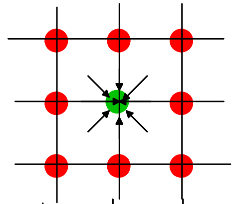


3.1 LBGK模型

➢*DnQb模型*

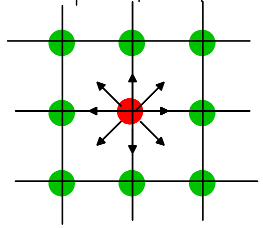
碰撞过程：

$$\tilde{f}_i(\mathbf{x},t) = f_i(\mathbf{x},t) - \frac{1}{\tau}\left[f_i(\mathbf{x},t) - f_i^{eq}(\mathbf{x},t)\right]$$



迁移过程：

$$f_i(\mathbf{x}+\mathbf{e}_i\delta t, t+\delta t) = \tilde{f}_i(\mathbf{x},t)$$



3.1 LBGK模型

➢*DnQb模型*

平衡态分布函数:

$$f_i^{eq}(\mathbf{x}) = w_i\rho(\mathbf{x})\left[1+\frac{\mathbf{e}_i\cdot\mathbf{u}}{c_s^2}+\frac{(\mathbf{e}_i\cdot\mathbf{u})^2}{2c_s^4}-\frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2}\right]$$

其中，w_i 为权系数，$c_s=\sqrt{RT}$ 为格子声速。

这两个参数是决定 LBGK 模型的关键参数，其取值依赖于选用的格子类型。

通过采用恰当的动量空间离散方法，宏观变量的积分计算形式可以转化为简单的代数形式：

密度 $$\rho = \sum_i f_i = \sum_i f_i^{eq}$$

速度 $$\rho u = \sum_i \xi_i f_i = \sum_i \xi_i f_i^{eq}$$

内能 $$\rho\varepsilon = \frac{1}{2}\sum_i (\xi_i - u)^2 f_i = \frac{1}{2}\sum_i (\xi_i - u)^2 f_i^{eq}$$

若上述的近似计算成立，需要满足两个守恒原则：

$$f_i \equiv f_i(\mathbf{x},t) \equiv W_i f(\mathbf{x},e_i,t)$$

$$f_i^{eq} \equiv f_i^{eq}(\mathbf{x},t) \equiv W_i f^{eq}(\mathbf{x},e_i,t)$$

W_i 为权重系数；
e_i 为离散速度；

以上近似过程可以统一写成如下形式：

$$\int \boxed{\psi(\xi)} f^{eq}(\mathbf{x},\xi,t) = \sum_i W_i \psi(\xi_i) f^{eq}(\mathbf{x},\xi,t)$$

矩方程的函数

上面的积分含有由高斯积分公式计算的一般形式：

$$I = \int \exp\left(-\frac{\xi^2}{2RT}\right)\psi(\xi)d\xi = \sum_i W_i \exp\left(-\frac{\xi_i^2}{2RT}\right)\psi(\xi_i)$$

以**D2Q9**为例，对于形如 $e^{-\varsigma^2}$ 的函数，可以采用**Gauss-Hermite**求积公式进行数值求解，其代数精度为**2N-1**。求解公式的阶数和矩方程函数有关。对于二阶的 $\psi(\xi)$，需要采用三阶**Gauss-Hermite**求积公式。

$$I_m = \sum_{j=1}^{3} \omega_j \zeta_j^m$$

积分点 $\xi_1 = -\sqrt{3/2}, \xi_2 = 0, \xi_3 = \sqrt{3/2}$

权系数 $\omega_1 = \sqrt{\pi}/6, \omega_2 = 2\sqrt{\pi}/3, \omega_3 = \sqrt{\pi}/6$

则：

$$I = \frac{\rho}{\pi}\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\omega_i\omega_j\psi(\varsigma_{i,j})\left[1+\frac{(\boldsymbol{\xi}\cdot\mathbf{u})}{RT}+\frac{(\boldsymbol{\xi}\cdot\mathbf{u})^2}{2(RT)^2}-\frac{\mathbf{u}^2}{2RT}\right]$$

$\varsigma_{i,j} = (\sqrt{2RT})(\varsigma_i,\varsigma_j)^T$ 为积分点确定的矢量。$\varsigma_{i,j}$ 和 $\omega_i\omega_j$ 有九种组合。

等温情况：

$c = \sqrt{3RT} \Rightarrow c_s = 1/\sqrt{3}$ （$c_s^2 = c^2/3 = RT$）

$$I = \frac{\rho}{\pi}\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\omega_i\omega_j\psi(\varsigma_{i,j})\left[1+\frac{(\boldsymbol{\xi}\cdot\mathbf{u})}{RT}+\frac{(\boldsymbol{\xi}\cdot\mathbf{u})^2}{2(RT)^2}-\frac{\mathbf{u}^2}{2RT}\right]$$

权系数：

$$\omega_i = \frac{\omega_2\omega_2}{\pi} = \frac{4}{9} \qquad i=0$$

$$\omega_i = \frac{\omega_1\omega_2}{\pi},\frac{\omega_2\omega_1}{\pi},\frac{\omega_3\omega_2}{\pi},\frac{\omega_2\omega_3}{\pi} = \frac{1}{9} \qquad i=1,2,3,4$$

$$\omega_i = \frac{\omega_1\omega_3}{\pi},\frac{\omega_3\omega_1}{\pi},\frac{\omega_1\omega_1}{\pi},\frac{\omega_3\omega_3}{\pi} = \frac{1}{36} \qquad i=5,6,7,8$$

矢量 $\varsigma_{i,j}$ 的分量可以为**0**或者 $\sqrt{2RT}\cdot\left(\pm\sqrt{3/2}\right) = \pm\sqrt{3\mathrm{RT}} = \mathrm{c}$

离散速度集合：

$$\mathbf{e}_i = \begin{cases} (0,0) & i=0 \\ (\cos\theta_i,\sin\theta_i)c, \quad \theta_i = (i-1)\pi/2 & i=1,2,3,4 \\ \sqrt{2}(\cos\theta_i,\sin\theta_i)c, \quad \theta_i = (i-5)\pi/2+\pi/4 & i=5,6,7,8 \end{cases}$$

相比于以上从理论上给出的严密推导，也可采用更为灵活的待定系数法。其基于**1**）粒子速度的各向同性；**2**）平衡态分布函数与宏观变量的对应关系；通过代数关系式获得格子**Boltzmmann**模型中平衡态分布函数的权函数。

3.1 LBGK模型

➢***DnQb模型***

D1Q3:

$$\mathbf{e}=c[0,1,-1],\ c_s=\frac{c}{\sqrt{3}},\ w_i=\begin{cases}2/3, & e_i^2=0\\ 1/6, & e_i^2=c^2\end{cases}$$

格子速度 $c=\dfrac{\delta x}{\delta t}$

D1Q5:

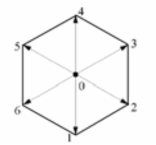
$$\mathbf{e}=c[0,\pm1,\pm2],\ c_s=c,\ w_i=\begin{cases}1/2, & e_i^2=0\\ 1/6, & e_i^2=c^2\\ 1/12, & e_i^2=4c^2\end{cases}$$

3.1 LBGK模型

➢***DnQb模型***

D2Q7:

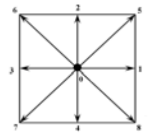
$$\mathbf{e}_i=\begin{cases}(0,0) & \mathrm{i}=0\\ c(\cos\theta_i,\sin\theta_i),\ \theta_i=(i-1)\pi/3,\ i=1,2,\cdots 6\end{cases}$$



$$c_s=\frac{c}{2},\quad w_i=\begin{cases}2/3, & e_i^2=0\\ 1/12, & e_i^2=c^2\end{cases}$$

D2Q9:

$$\mathbf{e}_i=\begin{cases}(0,0), & i=0\\ c(\cos\theta_i,\sin\theta_i),\ \theta_i=(i-1)\pi/2, & i=1\sim 4\\ \sqrt{2}c(\cos\theta_i,\sin\theta_i),\ \theta_i=(i-5)\pi/2+\pi/4, & i=5\sim 8\end{cases}$$



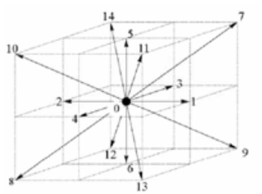
$$c_s=\frac{c}{\sqrt{3}},\quad w_i=\begin{cases}4/9, & e_i^2=0\\ 1/9, & e_i^2=c^2\\ 1/36, & e_i^2=2c^2\end{cases}$$

3.1 LBGK模型

➢***DnQb模型***

D3Q15:

$$\mathbf{e}=c\begin{bmatrix}0&1&-1&0&0&0&0&1&-1&1&-1&1&-1&-1&1\\ 0&0&0&1&-1&0&0&1&-1&1&-1&-1&1&1&-1\\ 0&0&0&0&0&1&-1&1&-1&-1&1&1&-1&1&-1\end{bmatrix}$$



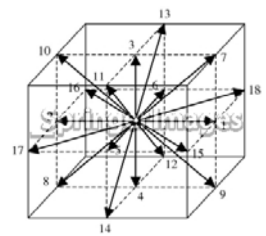
$$c_s=\frac{c}{\sqrt{3}},\quad w_i=\begin{cases}2/9, & e_i^2=0\\ 1/9, & e_i^2=c^2\\ 1/72, & e_i^2=3c^2\end{cases}$$

3.1 LBGK模型

➢***DnQb模型***

D3Q19:

$$\mathbf{e}=c\begin{bmatrix}0&1&-1&0&0&0&0&1&-1&-1&1&1&-1&-1&1&0&0&0&0\\ 0&0&0&1&-1&0&0&1&1&-1&-1&0&0&0&0&1&-1&-1&1\\ 0&0&0&0&0&1&-1&0&0&0&0&1&1&-1&-1&1&1&-1&-1\end{bmatrix}$$

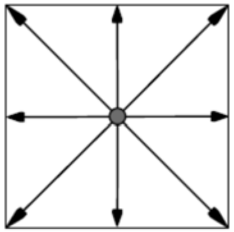


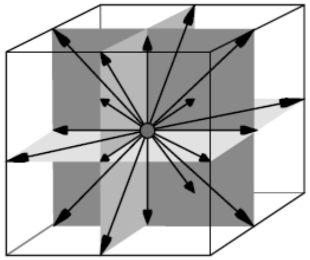
$$c_s=\frac{c}{\sqrt{3}},\quad w_i=\begin{cases}1/3, & e_i^2=0\\ 1/18, & e_i^2=c^2\\ 1/36, & e_i^2=2c^2\end{cases}$$

3.1 LBGK模型

➢ ***DnQb模型***

D2Q9:　　最常用　　D3Q19:





3.1 LBGK模型

➢ ***DnQb模型***

通过和 **Chapman-Enskog** 展开方法类似的多尺度分析方法，对演化方程进行处理，可以得到 **LBGK** 模型对应的宏观方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\nabla\cdot\left(\rho\mathbf{u}\right)=0$$

$$\frac{\partial \rho\mathbf{u}}{\partial t}+\nabla\cdot\left(\rho\mathbf{u}\mathbf{u}\right)=-\nabla p+\nabla\cdot\left(\rho\nu\left(\rho\mathbf{u}\right)+\left(\nabla\mathbf{u}\right)^{T}\right)$$

如果流体的密度变化不大，即ρ≈ ρ_0, 上式就是标准的不可压**N-S**方程。

Note：

在推导过程中，假设 Mach 数充分小，因次 LBGK 模型的上述结果仅限于低 Mach 数流动（*Ma*≤0.3）。

3.1 LBGK模型

➢ ***DnQb模型***

实际上，**LBGK** 方法是求解不可压 **N-S** 方程的一种人工压缩方法。

对于宏观物理量，可由以下方程得到

密度： $\rho=\sum_i f_i$

速度： $\mathbf{u}=\sum_i f_i\mathbf{e}_i\Big/\rho$

压力： $p=c_s^2\rho$

运动粘度： $\nu=c_s^2\left(\tau-0.5\right)\delta t$

3.2 MRT模型

多松弛模型和单松弛模型的主要区别在于它的碰撞过程包含多个松弛时间（**Multiple-Relaxation-Time**）。

$$f_i\left(\mathbf{x}+\mathbf{e}_i\delta t,t+\delta t\right)-f_i\left(\mathbf{x},t\right)=\underbrace{-\Lambda_{ij}}_{\text{碰撞矩阵}}\left[f_j\left(\mathbf{x},t\right)-f_j^{eq}\left(\mathbf{x},t\right)\right]\quad(13.2.1)$$

优点：

- **MRT** 模型含有更多的可调参数，剪切黏性和体黏性都是可调的；
- **MRT** 可以克服普通 **LBGK** 模型的明显不足，如不受因单松弛参数影响而保证**Prandtl**数固定不变的限制；
- **MRT**模型有更好的稳定性，并且在粘性较高时可减小人工压缩性的影响。

缺点：

- 公式复杂，计算量较大。

3.2 MRT模型

上式描述了离散速度分布函数 $f(\mathbf{x},t)=\left(f_1(\mathbf{x},t), f_2(\mathbf{x},t),\cdots, f_b(\mathbf{x},t)\right)^{\mathrm{T}}$ 在速度空间 R^b的时空演化过程。

定义b个矩，$m_k=\mathbf{f}\cdot\phi_k$， $k=1,2,\cdots,b$

其中，$\phi_k=(\phi_1, \phi_2,\cdots, \phi_b)$ 是粒子速度 $c_i(i=1,2,\cdots,b)$ 的多项式函数，且线性无关。

通过 b 个 b 维基向量 ϕ_k，可以建立速度空间 R^b和矩空间 $M\equiv\{m_i:i=1,2,\cdots,b\}$ 之间的关系，即

$$\mathbf{m}=\mathrm{M}\cdot\mathbf{f},\quad \mathbf{f}=\mathbf{M}^{-1}\cdot\mathbf{m}$$

其中，$\mathbf{M}$是由$\{\phi_k:k=1,2,\cdots,b\}$确定的变换矩阵， 即，

$$\mathbf{M}=[\phi_1,\phi_2,\cdots,\phi_b]^{\mathrm{T}}$$

3.2 MRT模型

演化过程，仍然分为碰撞和迁移两步：

关键问题：
确定碰撞矩阵

碰撞： $f_i'(\mathbf{x},t)=f_i(\mathbf{x},t)-\Lambda_{ij}\left[f_j(\mathbf{x},t)-f_j^{eq}(\mathbf{x},t)\right]$

迁移： $f_i(\mathbf{x}+\mathbf{e}_i\delta t, t+\delta t)=f_i'(\mathbf{x},t)$

因为碰撞步只涉及局部计算，写成矢量形式

$$\mathbf{f}'=\mathbf{f}-\Lambda\left[\mathbf{f}-\mathbf{f}^{eq}\right]$$

上式两端乘以变换矩阵M，得

$$\mathbf{m}'=\mathbf{m}-\mathbf{S}\left[\mathbf{m}-\mathbf{m}^{eq}\right]$$

其中，$\mathbf{m}^{eq}=\mathbf{M}\mathbf{f}^{eq}$ 为矩空间的平衡态函数

$$\mathbf{S}=\mathbf{M}\Lambda\Lambda^{-1}=diag(s_1,s_2,\cdots,s_b)$$

3.2 MRT模型

以标准D2Q9模型为例：

变换矩阵：

$$M=\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

对应的矩为 $\mathbf{m}=\left(\rho,e,\varepsilon,j_x,q_x,j_y,q_y,p_{xx},p_{xy}\right)^{\mathrm{T}}$

矩空间的平衡态

$$\mathbf{m}^{eq}=\rho\left(1,-2+3u^2,\alpha+\beta u^2,u_x,-u_x,u_y,-u_y,u_x^2-u_y^2,u_xu_y\right)^{\mathrm{T}}$$

其中 α 和 β 为自由参数，当 α=1，且 β=－3，时，该平衡态函数和 LBGK 模型的平衡态分布函数一致。

3.2 MRT模型

模型的松弛参数为：

$$\mathbf{S}=\left(0,s_e,s_\varepsilon,0,s_q,0,s_q,s_v,s_v\right)$$

剪切黏性和体黏性系数分别为：

$$v=c_s^2\left(\frac{1}{s_v}-\frac{1}{2}\right)\delta t,\quad \varsigma=c_s^2\left(\frac{1}{s_e}-\frac{1}{2}\right)\delta t$$

其中： $c_s^2=\dfrac{1}{3}$

3.3 多相和多组分模型

- 颜色模型（Chromodynamics model）
- 伪势模型（SC model，pseudo-potential model)
- 自由能模型（Free energy model）
- 基于动理学理论的 LBM 模型

3.3.1 颜色模型

- Gunstensen 等人于1991年提出的第一个多组分多相模型。
- 基于 Rothman 和 keller 提出的 LGA 两相流模型。
- Grunau 等又将此模型推广到密度和粘性变化的两相流系统中。

特点：

- 用不同颜色区分不同相态的流体；
- 不同流体之间的相互作用通过引入颜色梯度来实现，并根据它来调整流体粒子的运动趋势，实现流体的分离或混和。

3.3.1 颜色模型

以两相流为例：

引入两个分布函数 f_{ri}和f_{bi}，分别表示红色相和蓝色相流体。混和流体的分布函数 $f_i = f_{ri} + f_{bi}$ 的演化方程为

$$f_i\left(\mathbf{x}+\mathbf{e}_i\delta t, t+\delta t\right) - f_i\left(\mathbf{x}, t\right) = \Omega_i^c + \Omega_i^p \qquad (3.3.1)$$

其中，Ω_i^c表示由流体粒子之间碰撞引起变化，可以用BGK模拟，而Ω_i^p表示界面张力引起的扰动。

每相和混和流体的宏观流动变量为

$$\rho_k = \sum_i f_{ki}, \quad \rho_k \mathbf{u}_k = \sum_i \mathbf{e}_i f_{ki}, \quad k = r, b$$

$$\rho = \rho_r + \rho_b, \quad \rho\mathbf{u} = \rho_r \mathbf{u}_r + \rho_b \mathbf{u}_b$$

3.3.1 颜色模型

引入描述两相差别的局部序参数（order parameter）

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \rho_r(\mathbf{x}, t) - \rho_b(\mathbf{x}, t)$$

并定义局部的颜色梯度 $\mathbf{G}(\mathbf{x}, t) = \sum_i \mathbf{e}_i \psi(\mathbf{x}, t)$

所以定义 Ω_i^p 为 $\Omega_i^p = A\left|\mathbf{G}\right|\cos(2\theta_i)$

其中：θ_i为$\mathbf{e}_i$与$\mathbf{G}$之间的夹角 A是控制表面张力σ 的参数，而 $\sigma \sim A\rho\lambda$

λ是碰撞算子 Ω_i^c 的与黏性系数相关的特征值。

显然，在单相区内颜色梯度为 0，因此 $\Omega_i^p = 0$，也就是说，表面张力引起的分布函数变化只在界面处起作用，这是符合物理事实的。

3.3.1 颜色模型

综上，**Gunstensen**等人的颜色模型可分为三步进行演化：

1. 单相碰撞：**a)** 计算混和分布函数 $f_i = f_{ri} + f_{bi}$；

b) 计算 $\rho, \mathbf{u}$ 和平衡态分布函数 f_i^{eq}；

c) 按照单相碰撞规则计算碰撞后分布函数 $f_i' = f_i + \Omega_i^c$。

2. 两相碰撞：**a)** 将表面张力扰动加入碰撞后分布函，$f_i'' = f_i' + \Omega_i^p$；

b) 对 f_i'' 重新标色，得到 f_{ri}''和f_{bi}'' 。

3. 迁移：

$$f_{ri}\left(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\mathbf{i}\delta t, t + \delta t\right) = f_{ri}''\left(\mathbf{x}, t\right)$$
$$f_{bi}\left(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\mathbf{i}\delta t, t + \delta t\right) = f_{bi}''\left(\mathbf{x}, t\right)$$

NOTE 上述模型演化过程中的碰撞对象是混和分布函数！

3.3.1 颜色模型

颜色模型的改进：

Grunau 等提出了改进的颜色模型，允许不同颜色的分布函数参与碰撞过程，其演化方程为：

$$f_{ri}\left(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\mathbf{i}\delta t, t + \delta t\right) - f_{ri}\left(\mathbf{x}, t\right) = \Omega_{ri} + \Omega_{ri}^{p} \qquad (3.3.2a)$$
$$f_{bi}\left(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\mathbf{i}\delta t, t + \delta t\right) - f_{bi}\left(\mathbf{x}, t\right) = \Omega_{bi} + \Omega_{bi}^{p} \qquad (3.3.2b)$$

其中 Ω_{ri}和Ω_{bi}分别为每一相的碰撞算子，采用 **BGK** 模型

$$\Omega_{ki} = -\frac{1}{\tau_k}\left[f_{ki} - f_{ki}^{eq}\right] \qquad k = r, b$$

其中平衡态分布依赖每相的密度ρ_k和混和速度$\mathbf{u}$。

3.3.1 颜色模型

Ω_{ki}^{p}仍然是表面张力引起的扰动，形式为

$$\Omega_{ki}^{\mathrm{p}} = \frac{A_k}{2}\left|\mathbf{G}\right|\left[\frac{\mathbf{e}_\mathbf{i}\cdot\mathbf{G}}{\mathbf{G}^2} - \theta_0\right]$$

其中 A_k 是与表面张力相关的参数，θ_0 是与模型相关的常数。

重新标色过程如下：

首先通过极大化 $-\left(\rho_r\mathbf{u}_\mathbf{r}\cdot\mathbf{G}\right)$，使红色流体的动量 $\rho_r\mathbf{u}_\mathbf{r}$ 与颜色梯度方向尽可能一致；之后，令蓝色流体的分布函数为$f_{bi} = f_i - f_{ri}$，其中 f_i 是重新标色前的混和分布函数。

3.3.1 颜色模型

局限性：

- 表面张力与界面走向相关（各向异性）；
- 在相界面处附近会产生非物理现象；
- “颜色能量”的极小化过程的计算量较大；
- 不容易考虑热动力学影响；

3.3.2 伪势模型

1993年和1994年，Shan 和 Chen 提出了一种能直接地刻画粒子之间相互作用的LBE模型，即利用一种伪势来反应这种相互作用。

单组分多相模型(SCMP)
(e.g. H_2O, liquid and vapor)

$$f_i(\mathbf{x}+\mathbf{e}_i\delta t, t+\delta t)-f_i(\mathbf{x},t)=-\frac{1}{\tau}\left[f_i(\mathbf{x},t)-f_i^{eq}(\mathbf{x},t)\right]$$

多相多组分模型(MCMP)
(e.g. H_2O and oil)

$$f_{k,i}(\mathbf{x}+\mathbf{e}_i\delta t, t+\delta t)-f_{k,i}(\mathbf{x},t)=-\frac{1}{\tau_k}\left[f_{k,i}(\mathbf{x},t)-f_{k,i}^{eq}(\mathbf{x},t)\right]$$

3.3.2 伪势模型

- ***MCMP模型***

$$f_{k,i}(\mathbf{x}+\mathbf{e}_i\delta t, t+\delta t)-f_{k,i}(\mathbf{x},t)=-\frac{1}{\tau_k}\left[f_{k,i}(\mathbf{x},t)-f_{k,i}^{eq}(\mathbf{x},t)\right]$$

其中，k 表示不同的组分。

伪势模型中假设流体粒子之间存在非局部的相互作用，相应的势函数为

$$V_{k\bar{k}}(\mathbf{x},\mathbf{x}')=G_{k\bar{k}}(|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|)\psi_k(\mathbf{x})\psi_{\bar{k}}(\mathbf{x}')$$

其中 $G_{k\bar{k}}$为Green函数，决定了组分k和$\bar{k}$之间相互作用的强度。

ψ_k 与组分的密度有关，表示组分 k 的有效密度。不同的表达方式，所得的状态方程不同。

3.3.2 伪势模型

- ***MCMP模型***

同样地，若只考虑临近格点的影响，例如，在 D2Q9 中

$$G(\mathbf{x},\mathbf{x}')=\begin{cases}G, & |\mathbf{x}-\mathbf{x}'|=c\\ G/4, & |\mathbf{x}-\mathbf{x}'|=\sqrt{2}c\\ 0, & otherwise\end{cases}$$

- 参数 $G_{k\bar{k}}$ 的绝对值决定了组分 k和$\bar{k}$之间相互作用的强度，
- 符号决定了两者之间是相互吸引还是相互排斥，即负值是吸引力而正值为排斥力。

根据相互作用势，可得到 k 类流体粒子受到的粒子间的作用力为

$$\mathbf{F}_f^k(x)=-\psi_k(\mathbf{x})\sum_{\bar{k}}G(\mathbf{x},\mathbf{x}')\sum_i\psi_{\bar{k}}(\mathbf{x}')\mathbf{e}_i$$

3.3.2 伪势模型

- ***MCMP模型***

同样的，通过改变平衡态速度 $\mathbf{u}^{eq}$来实现 $\mathbf{F}_f^k$ 的影响，即

$$\mathbf{u}_k^{eq}(\mathbf{x})=\mathbf{u}'(\mathbf{x})+\frac{\tau_k\delta t\mathbf{F}_f^k}{\rho_k}$$

$$\mathbf{u}'(\mathbf{x})=\mathbf{u}(\mathbf{x})=\sum_k\rho_k\mathbf{u}_k\Big/\rho \qquad \text{混合流体的速度}$$

$$\rho=\sum_k\rho_k \qquad \text{混合流体的密度}$$

随后，Shan 和 Doolen 对基本模型进行了改进，重新定义了 $\mathbf{u}'(\mathbf{x})$ 保证没有作用力时碰撞过程动量守恒，即

$$\mathbf{u}'(\mathbf{x})=\sum_k\frac{\rho_k\mathbf{u}_k}{\tau_k}\Big/\sum_k\frac{\rho_k}{\tau_k}$$

3.3.2 伪势模型

➢ ***MCMP模型***

在Shan-Doolen模型中，混合流体的速度为

$$\mathbf{u}(\mathbf{x})=\left(\sum_k \rho_k \mathbf{u}_k+\frac{\delta t}{2}\sum_k \mathbf{F}_k\right)\Big/\rho$$

宏观流体变量，可由下面方程确定

压力 $$p(\mathbf{x})=c_s^2\sum_k \rho_k(\mathbf{x})+\frac{3}{2}\sum_{\bar{k}} G\psi_k(\mathbf{x})\psi_{\bar{k}}(\mathbf{x})$$

黏度 $$\nu=\left(\sum_k x_k\tau_k-1/2\right)\Big/c_s^2$$

3.3.2 伪势模型

➢ ***MCMP模型----D2Q9 force implementation***

同样地，在D2Q9中

$$G_w^i(\mathbf{x},\mathbf{x}')=\begin{cases} G, & |\mathbf{x}-\mathbf{x}'|=c \\ G/4, & |\mathbf{x}-\mathbf{x}'|=\sqrt{2}c \\ 0, & otherwise \end{cases}$$

壁面吸附力 F_w^k 的影响，也通过改变平衡态速度 $\mathbf{u}^{eq}$来实现。

当有外力作用在流体上时，eg. 重力 F_g^k ，同样可以通过改变平衡态速度的方法来实现

$$\mathbf{u}_k^{eq}(\mathbf{x})=\mathbf{u}'(\mathbf{x})+\frac{\tau_k\delta t(\mathbf{F}_f^k+\mathbf{F}_w^k+\mathbf{F}_g^k)}{\rho_k}$$

3.3.2 伪势模型

➢ ***MCMP模型----D2Q9 Phase separation***

参数选择:

$\psi_1=\rho_1$

$\psi_2=\rho_2$

$G_{11}=G_{22}=0$

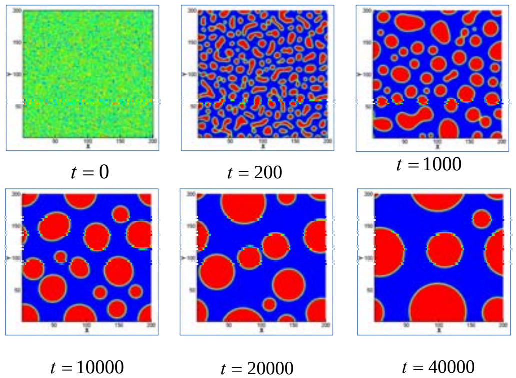
$G_{12}=G_{21}=0.3$

$\tau_1=\tau_2=1$

$\langle\rho_1\rangle=0.4$

$\langle\rho_2\rangle=0.6$

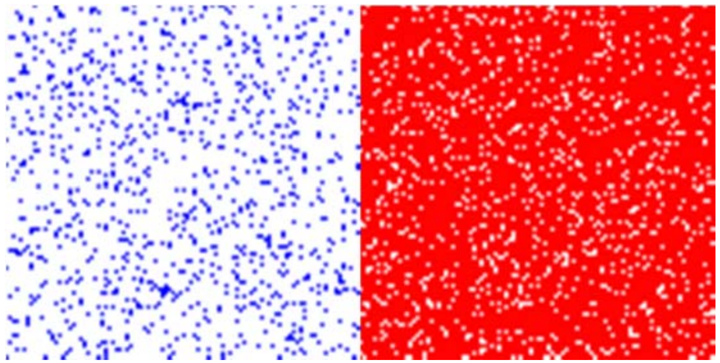
$\langle\rho\rangle=1$



不同时刻的两组分的分离过程

3.3.2 伪势模型

➢ ***MCMP模型----D2Q9 Phase separation***



3.3.2 伪势模型

➢ *MCMP模型----D2Q9 Young-Laplace Law*

$$\Delta p = p_i - p_o = k\gamma / R$$

模拟条件:

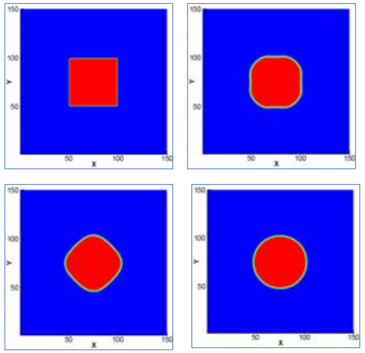
流体2被流体1环绕;

不考虑外力;

密度比和黏度比均为1;

$G_{12} = 0.34$

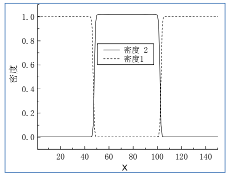
$G_{11} = G_{22} = 0$



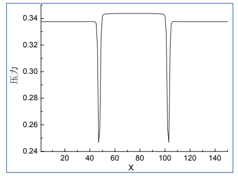
液滴在不同时刻的形状演变

3.3.2 伪势模型

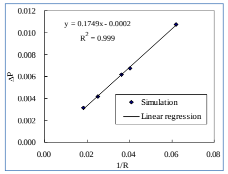
➢ *MCMP模型----D2Q9 Young-Laplace Law*



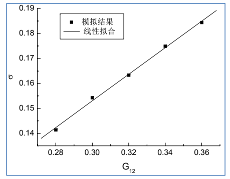
$y = 75$ 处两组分沿 x轴密度分布图



$y = 75$ 处两组分沿 x轴压力分布图



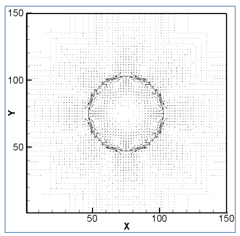
压力差与曲率的关系



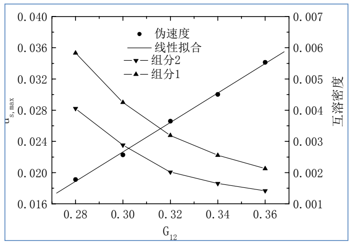
界面张力与相间力参数的关系

3.3.2 伪势模型

➢ *MCMP模型----D2Q9 Young-Laplace Law*



$G_{12} = 0.34$ 时，稳态时速度分布图



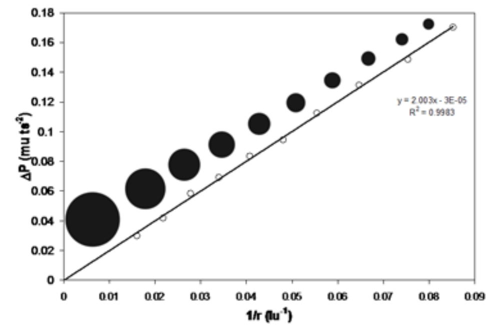
相间力参数对最大的伪速度和互溶密度的影响

相间力参数的取值实际上受两方面的约束:

伪速度越小越好，互溶密度越小越好!

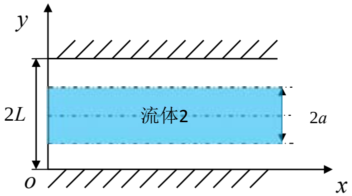
3.3.2 伪势模型

➢ *MCMP模型----D2Q9 Interfacial tension (as opposed to surface tension between a liquid and its own vapor)*



3.3.2 伪势模型

➢ ***MCMP模型----D2Q9 Poiseuille***



解析解

$a < |y - L| < L$ $\qquad u(y) = \frac{G}{2v_2}\left(L^2 - (y-L)^2\right)$

$0 < |y - L| < a$ $\qquad u(y) = \frac{G}{2v_2}\left(L^2 - a^2\right) + \frac{G}{2v_1}\left(a^2 - (y-L)^2\right)$

3.3.2 伪势模型

➢ ***MCMP模型----D2Q9 Poiseuille***

66×132个格子；

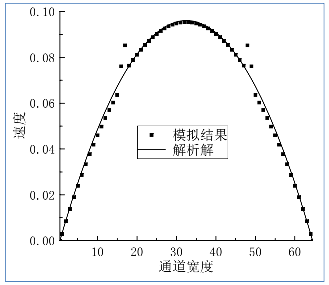
半步长反弹格式、周期边界；

恒定的体积力；

密度均为1；

运动黏度均为　0.16；

$G_{12} = 0.34$



数值解与解析解的比较

3.3.2 伪势模型

优点：

- 自动实现相分离，界面自动生成跟踪；
- 直接对微观相互作用力进行描述，能够反映多相/多组分流体动力学的物理本质，应用比较很广泛。

缺点：

- 当相互作用力中的有效密度函数取指数形式时，$\psi(\rho) = \psi_0 e^{-\rho_0/\rho}$ 该模型才与热力学相关理论一致。
- 无法模拟具有大密度比和大粘度比的流体系统。（有研究者指出改变有效密度的表达方式，可以模拟密度比为1000的情况，但 是大粘度比（M>10）的流体系统仍然无法模拟）。

3.3.3 自由能模型

颜色模型和伪势模型都是基于界面现象的唯象模型，含有一些人为的假设。1995年，Swift 等人直接从多相/多组分流体的自由能理论出发，构造了与热动力学理论一致的多相和多组分流体模型。

基本思想：根据自由能函数构造 LBE 的平衡态分布函数，通过引入一个非理想流体的热力学压力张量，使得系统的总能（包括动能、内能和表面能）守恒得以满足。

- 单组分非理想流体模型
- 两组分非理想流体模型

3.3.3 自由能模型

单组分非理想流体模型

根据 **van der Waals** 理论，对于包含相界面的单组分非理想流体系统，当处于局部平衡时，其自由能泛函为

$$\Psi(\mathbf{x})=\int\left[\psi(\rho(\mathbf{x}),T(\mathbf{x}))+W(\nabla\rho(\mathbf{x}))\right]\mathrm{dx}$$

其中，$\psi(\rho)$是体相区自由能密度函数，$W(\nabla\rho)$是与表面张力相关的由密度梯度诱导的自由能。一个常用的密度梯度自由能形式为

$$W=\frac{\kappa}{2}|\nabla\rho|^2$$

其中，κ 是与表面张力相关的一个参数。

3.3.3 自由能模型

单组分非理想流体模型

根据自由能泛函定义一个非局部压力

$$p(\mathbf{x})=\rho\frac{\delta\Psi}{\delta\rho}-\Psi=p_0-\kappa\rho\nabla^2\rho-\frac{\kappa}{2}|\nabla\rho|^2 \qquad (3.3.3)$$

其中，$p_0=\rho\psi'(\rho)-\psi(\rho)$ 是状态方程，δ 表示变分运算。

由此可得包含界面贡献的热力学压力张量

$$P'_{\alpha\beta}=P\delta_{\alpha\beta}+\kappa\frac{\partial\rho}{\partial x_\alpha}\frac{\partial\rho}{\partial x_\beta}$$

NOTE

这里的 P'不包含黏性应力部分 τ。

3.3.3 自由能模型

单组分非理想流体模型

为构造符合上述热力学理论的模型，**Swift** 等建议在 **LBGK** 模型中使用一个包含密度梯度的平衡态分布函数

$$f_i(\mathbf{x}+\mathbf{e}_i\delta t,t+\delta t)-f_i(\mathbf{x},t)=-\frac{1}{\tau}\left[f_i-f_i^{eq}(\rho,\mathbf{u},\nabla\rho)\right] \qquad (3.3.4)$$

其中 f_i^{eq} 满足条件

$$\sum_i f_i^{eq}=\rho,\quad \sum_i\mathbf{e}_i f_i^{eq}=\rho\mathbf{u},\quad \sum_i\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i f_i^{eq}=\mathrm{P}'+\rho\mathbf{u}\mathbf{u} \qquad (3.3.5)$$

为确定 f_i^{eq} 的具体形式，将其表示为 $\mathbf{u}$ 的多项式，例如对于 **FHP** 模型

$$f_i^{eq}=A+B(\mathbf{e}_i\cdot\mathbf{u})+Cu^2+D(\mathbf{e}_i\cdot\mathbf{u})^2+G:\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i,\qquad i\neq 0$$
$$f_0^{eq}=A_0+C_0u^2$$

3.3.3 自由能模型

单组分非理想流体模型

根据限定条件式（**3.3.5**），可以确定平衡态分布函数的参数

$$A_0=\rho-6A,\quad C_0=-\rho$$
$$A=\frac{1}{3}\left(p_0-\kappa\rho\nabla^2\rho\right),\quad B=\frac{\rho}{3},\quad C=-\frac{\rho}{6},\quad D=\frac{2\rho}{3}$$
$$G_{xx}=-G_{yy}=\frac{\kappa}{3}\left[\left(\frac{\partial\rho}{\partial x}\right)^2-\left(\frac{\partial\rho}{\partial y}\right)^2\right],\quad G_{xy}=\frac{2\kappa}{3}\frac{\partial\rho}{\partial x}\frac{\partial\rho}{\partial y}$$

流体宏观速度为 $\rho\mathbf{u}=\sum_i\mathbf{e}_i f_i$

3.3.3 自由能模型

单组分非理想流体模型

经过 **Chapmann-Enskog** 分析可得式（**3.3.4**）对应的宏观方程为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\mathbf{u})=0 \tag{3.3.6a}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho\mathbf{u}}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\mathbf{u}\mathbf{u})&=-\nabla p_0+\nu\nabla^2(\rho\mathbf{u})+\nabla\left[\lambda\nabla\cdot(\rho\mathbf{u})\right]\\&-\left(\tau-\frac{1}{2}\right)\frac{\partial p_0}{\partial\rho}\delta t\nabla\cdot\left[\mathbf{u}\nabla\rho+(\nabla\rho)\mathbf{u}\right]\end{aligned} \tag{3.3.6b}$$

其中 $\nu=\frac{1}{4}\left(\tau-\frac{1}{2}\right)\delta t,\quad \lambda=\left(\tau-\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{\partial p_0}{\partial\rho}\right)\delta t$

动量方程右端最后一项在单相区为**0**，此时方程为一般的 **N-S** 方程。但是在相界面附近，密度梯度大，该项不能忽略。

3.3.3 自由能模型

双组分非理想流体模型

使用两类分布函数（组分分布函数之和 f_i 及之差 g_i）来描述系统的整体演化，即

$$f_i(\mathbf{x}+\mathbf{e_i}\delta t,t+\delta t)-f_i(\mathbf{x},t)=-\frac{1}{\tau_v}\left[f_i-f_i^{eq}\right] \tag{3.3.7a}$$

$$g_i(\mathbf{x}+\mathbf{e_i}\delta t,t+\delta t)-g_i(\mathbf{x},t)=-\frac{1}{\tau_d}\left[g_i-g_i^{eq}\right] \tag{3.3.7b}$$

平衡态分布函数 f_i^{eq} 和 g_i^{eq} 都包含流体的非均匀特性。f_i^{eq} 仍然满足约束条件（**3.3.5**），但此时密度 ρ 和速度 $\mathbf{u}$ 都是混合流体的密度和速度。

3.3.3 自由能模型

双组分非理想流体模型

平衡态分布函数 g_i^{eq} 则满足以下条件

$$\sum_i g_i^{eq}=\phi,\quad \sum_i \mathbf{e}_i g_i^{eq}=\phi\mathbf{u},\quad \sum_i \mathbf{e}_i\mathbf{e}_i g_i^{eq}=\Gamma\Delta\mu\mathrm{I}+\phi\mathbf{u}\mathbf{u} \tag{3.3.8}$$

其中 $\varphi=\rho_r-\rho_b=\sum_i g_i$ ，$\Delta\mu$ 是两组分的化学势之差，Γ 是迁移系数。这里热力学压力张力 P' 和化学势差 $\Delta\mu$ 可以根据两组分流体的自由能泛函得到。考虑相互排斥的两组分流体，自由能泛函为

3.3.3 自由能模型

双组分非理想流体模型

考虑相互排斥的两组分流体，自由能泛函为

$$\Psi=\int\left[\psi(\rho,T,\varphi)+\frac{\kappa}{2}(\nabla\rho)^2+\frac{\kappa}{2}(\nabla\varphi)^2\right]$$

其中

$$\psi=\frac{G}{4}\rho\left(1-\frac{\varphi^2}{\rho^2}\right)-\rho RT+\frac{RT}{2}(\rho+\varphi)\ln\left(\frac{\rho+\varphi}{2}\right)+\frac{RT}{2}(\rho-\varphi)\ln\left(\frac{\rho-\varphi}{2}\right)$$

G 是表征相互作用强度的参数。当 $RT<G/2$ 时，两相会发生分离。

3.3.3 自由能模型

双组分非理想流体模型

根据这一自由能泛函，可得化学势差和热力学压力张力的张量表达式

$$\Delta\mu = -\frac{G}{2}\frac{\varphi}{\rho} + \frac{RT}{2}\ln\left(\frac{1+\varphi/\rho}{1-\varphi/\rho}\right) - \kappa\nabla^2\varphi$$

$$P'_{\alpha\beta} = p\delta_{\alpha\beta} + \kappa\frac{\partial\rho}{\partial x_\alpha}\frac{\partial\rho}{\partial x_\beta} + \kappa\frac{\partial\varphi}{\partial x_\alpha}\frac{\partial\varphi}{\partial x_\beta}$$

其中

$$p = \rho RT - \kappa\left(\rho\nabla^2\rho + \varphi\nabla^2\varphi\right) - \frac{\kappa}{2}\left(|\nabla\rho|^2 + |\nabla\varphi|^2\right)$$

3.3.3 自由能模型

双组分非理想流体模型

根据上述的化学势差和热力学压力张力的张量表达式，由限制条件（**3.3.8**）可得平衡态分布函数 f_i^{eq} 和 g_i^{eq} 的表达式。对 **FHP** 模型，f_i^{eq} 的展开系数为

$$A_0 = \rho - 6A,\quad C_0 = -\rho$$

$$A = \frac{1}{3}\left(p_0 - \kappa\rho\nabla^2\rho - \kappa\varphi\nabla^2\varphi\right),\quad B = \frac{\rho}{3},\quad C = -\frac{\rho}{6},\quad D = \frac{2\rho}{3}$$

$$G_{xx} = -G_{yy} = \frac{\kappa}{3}\left[\left(\frac{\partial\rho}{\partial x}\right)^2 - \left(\frac{\partial\rho}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)^2 - \left(\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right)^2\right]$$

$$G_{xy} = \frac{2\kappa}{3}\left[\frac{\partial\rho}{\partial x}\frac{\partial\rho}{\partial y} + \frac{\partial\varphi}{\partial x}\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right]$$

3.3.3 自由能模型

双组分非理想流体模型

相应的平衡态分布函数 g_i^{eq} 为

$$g_i^{eq} = H + K(\mathbf{e}_i\cdot\mathbf{u}) + Ju^2 + Q(\mathbf{e}_i\cdot\mathbf{u})^2,\qquad i\neq 0$$

$$g_0^{eq} = H_0 + J_0u^2$$

其中

$$H_0 = \varphi - 6H,\quad J_0 = -\varphi$$

$$H = \frac{1}{3}\Gamma\Delta\mu,\quad K = \frac{\varphi}{3},\quad J = -\frac{\varphi}{6},\quad Q = \frac{2\varphi}{3}$$

3.3.3 自由能模型

双组分非理想流体模型

基于上述平衡态分布函数，可得 **FHP** 模型对应的宏观方程为

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

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \nabla\cdot(\varphi\mathbf{u}) = \Gamma\theta\nabla^2\varphi - \theta\nabla\cdot\left[\frac{\varphi}{\rho}\nabla\cdot P'\right]$$

$$\frac{\partial\rho\mathbf{u}}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p_0 + \nu\nabla^2(\rho\mathbf{u}) + \nabla[\lambda\nabla\cdot(\rho\mathbf{u})]$$

其中 ν 和 λ 由式（**3.3.4**）给出（τ用f_i 演化方程中的松弛时间 τ_ν 代替）。方程中的输运系数是 $\theta = (\tau_d - 1/2)\delta t$。$\tau_d$是 g_i 演化方程中的松弛时间。

3.3.3 自由能模型

局限性：

- 当界面附近存在较大密度梯度时，不满足伽利略不变性，会 导致一些非物理现象。例如，在一个匀速运动的流场内，一个最初是圆形的液滴或气泡会随着时间的推移变成椭圆形。

--------**Swift** 等人，采用两个可调参数来改变平衡态分布函数的二阶距，可以部分克服这一局限性。

--------**Inamuro** 等人基于渐进分析方法，建立了一个满足伽利略不变性的 **D2Q9** 自由能模型。

--------**Kalarakis** 等人在 **Swift** 等人提出的7速模型基础上，通过修正平衡态分布函数系数，得到满足伽利略不变性的自由能模型。

3.3.3 自由能模型

局限性：

- 无法模拟具有大密度比的流体系统

--------**Inamuro** 等人提出了改进的方法，可以模拟流体密度为**1000**的流体系统。主要思想是采用近似 **C-H(Cahn-Hilliard)** 方程的扩散方程来追踪相界面。

--------**Zheng** 等人基于自由能模型也提出了改进方法，可以模拟大密度比的流体系统。他们采用近似的 **C-H** 方程去追踪和定义界面，在界面的定义上没有人工的剪切。这在物理背景比其他方法更接近朗道的平均场理论。

3.3.4 基于动力学的LBM模型

简单流体的**LBE**模型可以从 **Boltzmann** 方程得到。同样，从多相或多组分流体的介观动理学出发，也可得到相应的 **LBE** 模型。

- 单组分多相流体的**LBE**模型
  - 基于 **Enskog** 方程的 **Luo** 模型
  - 基于有效作用力的 **He-Shan-Doolen** 模型
  - 不可压多相流体的 **He-Chen-Zhang** 模型
- 多组分单相流体的**LBE**模型
  - 基于 **Sirovich** 理论的两组分 **LBE** 模型
  - 基于 **Hamel** 理论的两组分 **LBE** 模型
  - 基于拟平衡态理论的多组分 **LBE** 模型
- 多组分非理想气体的**LBE**模型 ⟶ 基于**Enskog**理论的两组分多相**LBE**模型

3.4 LBM热模型

现存 **LBM** 热模型（**Thermal LBM, TLBM**）可以分为三类：

- *多速（**Multi-speed, MS**）模型*
- *双分布（**Double-Distribution Function, DDF**）模型*
- *混合（**Hybrid**）模型*

内容介绍

- LBM简介
- LBM基本理论
- LBM基本模型
- LBM边界处理方法
- LBM应用实例

4. LBM边界处理

- 采用BGK碰撞算子的离散Boltzmann-BGK方程

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + e_i \cdot \nabla f_i = -\frac{1}{\tau_0}\left(f_i - f^{eq}\right)$$

采用有限差分法或有限容积法等求解

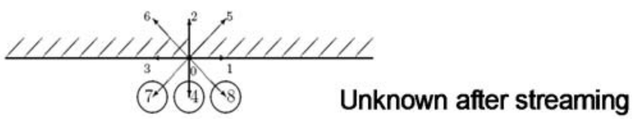
- 相应的格子 **Boltzmann**方程：

$$f_i\left(r + \mathbf{e}_i \delta t, t + \delta t\right) - f_i\left(r, t\right) = -\frac{1}{\tau}\left[f_i\left(r, t\right) - f_i^{eq}\left(r, t\right)\right]$$

采用采用碰撞规则演化代数形式求解

必须知道边界条件！！！

4. LBM边界处理



- 每个时步之后，内部流场节点上的分布函数均已经获得，但是边界节点上的部分分布函数是未知的。
- 需要根据已知的宏观边界条件确定出边界节点上相应的分布函数的取值。称为格子Boltzmann方法的边界处理方法，所设计出来的计算格式称为边界处理格式。
- 根据边界处理格式的特性，对边界处理的方式进行分类，主要分为启发式格式、动力学格式、外推格式以及其他复杂边界处理格式。

4.1 启发式格式

- 原理：

根据边界上诸如周期性、对称性、充分发展等宏观物理学特性，通过微观粒子的的运动规则直接确定边界节点上的未知分布函数。

- 优点：

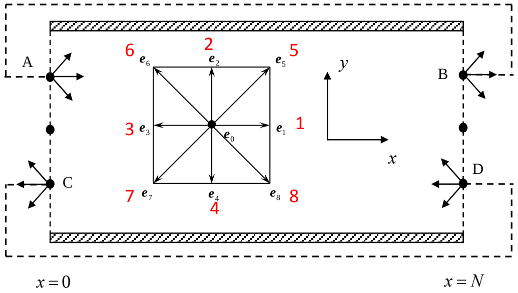
不需要较复杂的数学推导和公式求解

- 类型：

周期性边界、对称边界、充分发展以及用于固壁边界的反弹格式、镜面反弹格式、反弹与镜面反弹混合格式等

4.1.1 周期性边界处理格式

流场在空间呈现周期性变化或在某个方向无穷大



- 周期格式可以表示为：

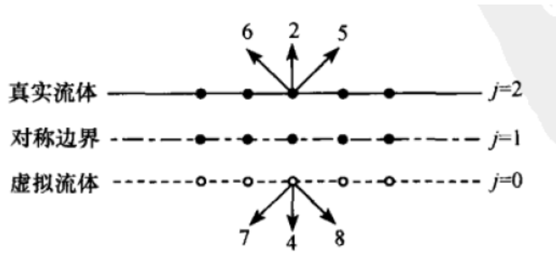
$$f_{1,5,8}(x_0, t+\delta t) = \tilde{f}_{1,5,8}(x_N, t)$$

$$f_{3,6,7}(x_N, t+\delta t) = \tilde{f}_{3,6,7}(x_0, t)$$

4.1.2 对称边界处理格式

- 由于对称性问题，为了节省计算资源，可以取物理模型的一半作为模拟的区域并在对称轴上采取对称边界处理

$$f_{2,5,6}(i,0) = f_{4,8,7}(i,2)$$



4.1.3 充分发展边界处理格式

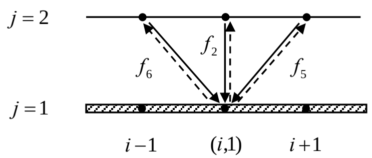
- 当流体在通道内流动达到充分发展后，密度与速度等物理量在主流方向上不再发生变化，即它们的空间导数为**0**
- 其处理格式可以表示为：

$$f(x_N, j) = f(x_N - 1, j)$$

- 这是格子**Boltzmann**方法中处理充分发展边界最简单和最常用的方法

反弹格式

- 处理静止无滑移壁面的一种常用格式，包括标准反弹格式、半步长反弹格式及修正反弹格式
- 标准反弹格式：对于静止固体边界，常用的处理方法就是对边界上的粒子进行弹回处理，即假设粒子与壁面碰撞后沿粒子原方向的反方向逆转



$$f_{2,5,6}(i,1) = f_{4,7,8}(i,1)$$

4.2 动力学格式

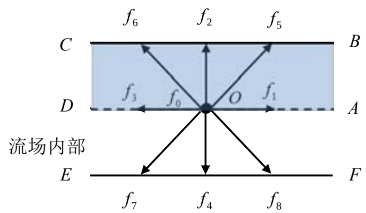
- 动力学格式主要利用边界上宏观物理量的定义，直接求解边界点上未知分布函数的方程组

$$\sum_a f_a(x) = \rho_w, \sum_a e_a f_a(x) = \rho_w u$$

- 以获得边界节点上待定的分布函数，动力学格式主要包括。
  - **Nobel**格式
  - 非平衡反弹格式
  - 反滑移格式
  - 质量修正格式

非平衡态反弹格式

- **1997**年，**Zou**与**He**给出了另外一种补充条件：假设分布函数的非平衡部分在垂直于边界的方向上仍然满足反弹格式
- 速度边界/压力边界



对于速度边界条件：

已知量：

$$u_x, u_y, f_0, f_1, f_3, f_2, f_5, f_6$$

未知量：

$$\rho_w, f_4, f_7, f_8$$

非平衡态反弹格式

- 四个未知量，需要四个方程
- The macroscopic density formula is one equation:

$$\rho = \sum_a f_a$$

$$\Downarrow$$

$$\rho = f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8$$

非平衡态反弹格式

- The macroscopic velocity formula gives two equations:

$$\mathbf{u}_0 = \frac{1}{\rho} \sum_a f_a \mathbf{e}_a$$

Components of $\mathbf{e}_a$ are all unit vectors

- x-direction: Assuming $\mathbf{u}_x = 0$

$$0 = f_1 - f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8$$

- y-direction:

$$\rho v_0 = f_2 - f_4 + f_5 + f_6 - f_7 - f_8$$

非平衡态反弹格式

- 假设分布函数的非平衡部分在垂直于边界的方向上仍然满足反弹格式

$$f_2 - f_2^{eq} = f_4 - f_4^{eq}$$

第四个方程，方程封闭，联立求解

4.3 外推格式

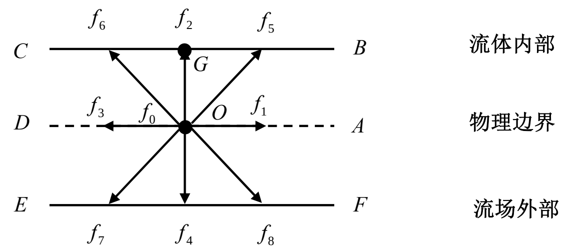
- 启发式格式和动力学格式的局限性
  - 依赖使用的格子**Boltzmann**模型， 通用性差；
  - 需要对边界处的一些物理性质（如速度、密度、压力等）作假设，因而很难推广到更一般的边界处理上。
  - 对一些非常规边界（包含梯度信息的边界）存在误差
- 借鉴传统计算流体力学方法中的边界处理方法来构造格子**Bolzman**方法边界处理格式；
  - 外推格式
  - 非平衡外推格式

非平衡外推格式

- 受外推方法和非平衡态反弹方法的启发，吸收两种方法的优点，**2002**年**Guo**等人提出了一种新的边界处理方法，即非平衡态外推方法。
- 其基本思想是，将边界节点上的分布函数分解为平衡态和非平衡态两部分，并根据具体的边界条件定义新的平衡态分布来近似平衡态部分，而非平衡态部分则使用非平衡态外推（一阶精度）确定，所得的分布函数的整体逼近精度为二阶精度。

$$f_i(O,t) = f_i^{(eq)}(O,t) + f_i^{(neq)}(O,t)$$

非平衡外推格式



流场内部节点： ***G*** 边界节点： ***O***

$$f_i(O,t) = f_i^{(eq)}(O,t) + f_i^{(neq)}(O,t)$$

非平衡外推格式

- 对于速度边界：u已知，密度未知

$$f_i^{eq}(O,t)=f_i^{eq}(\rho(G,t),\mathbf{u})$$

- 对于非平衡态部分，用邻近的流体格子节点G出的非平衡态部分近似得到，即

$$f_i^{neq}(O,t)=f_i^{neq}(G,t)=f_i(G,t)-f_i^{eq}(G,t)$$

$$f_i(O,t)=f_i^{eq}(\rho(G,t),\mathbf{u})+f_i(G,t)-f_i^{eq}(G,t)$$

非平衡外推格式

- 空间精度是二阶的，时间精度也是二阶的，这与格子Boltzmann方法的整体精度是一致的。
- 由于低阶外推格式的数值稳定性一般要优于高阶外推格式的数值稳定性，所以非平衡态外推格式的数值稳定性要好于根据线性外推得到的分布函数外推格式的数值稳定性。
- 同时，与外推格式一样，非平衡态外推格式也具有适用范围广、计算简单，容易实现的优点。

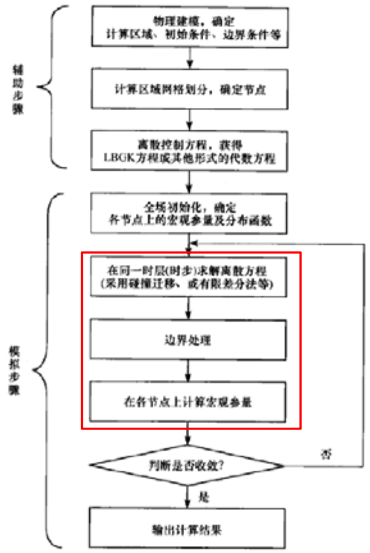
4.4 复杂边界处理格式

- 当所要处理的物理区域并不具有规则的几何形状时
  - 适体网格
  - 非结构化网格
  - 在结构化的直角正交网格，并在适当的位置采用阶梯逼近或者差值处理，以保证满足物理边界上的条件。
  - 阶梯逼近可与诸如反弹格式等前面提到的多种边界处理格式配合使用，实施简单，但是计算精度较低，常用的处理复杂边界处理格式为Filippova与Hanel格式、Bouzidi格式、Lallemand与Luo格式、Guo格式等

内容介绍

- LBM简介
- LBM基本理论
- LBM基本模型
- LBM边界处理方法
- LBM应用实例

计算流程



对于无外力作用的单松弛（LBGK）模型

$$\underbrace{f_\alpha\left(\mathbf{x}+\mathbf{e}_\alpha\Delta t, t+1\right)=f_\alpha\left(\mathbf{x},t\right)}_{\text{Streaming}}-\underbrace{\frac{\left[f_\alpha\left(\mathbf{x},t\right)-f_\alpha^{eq}\left(\mathbf{x},t\right)\right]}{\tau}}_{\text{Collision (i.e., relaxation towards local equilibrium)}}$$

✓ 碰撞-迁移结构

1）初始化分布函数 $f_\alpha(\mathbf{x},t)$

2）在时刻t执行碰撞（Collision）

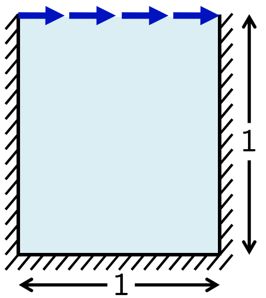
3）执行迁移（Streaming）

4）边界处理

5）计算宏观量 $\rho=\sum_{\alpha=0}^{\alpha_{\max}} f_\alpha \quad \rho\vec{u}=\sum_{\alpha=0}^{\alpha_{\max}} f_\alpha \vec{e}_\alpha$

5.1 Lid driven flow

Top boundary $(u,v)=(1,0)$



基本特征：

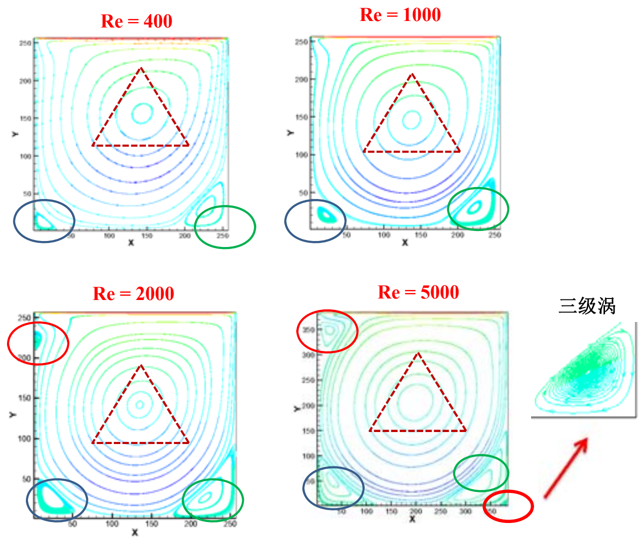
◆方腔的中央有一个一级大涡

◆左下角和右下角会分别出现一个二级涡， 当Re较大时，左上角也会出现一个二级涡

◆当Re超过一个临界值时，方腔的右下角还会出现一个三级涡

计算收敛判断依据 $Error=\frac{\sqrt{\sum_{i,j}[(u_x-u_x^{old})^2+(u_y-u_y^{old})^2]}}{\sqrt{\sum_{i,j}(u_x^2+u_y^2)}}\le\varepsilon$

流线图



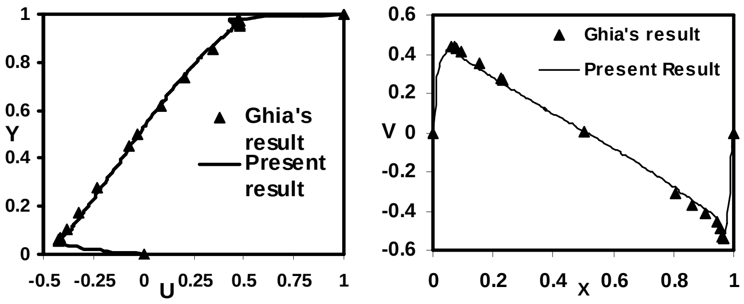
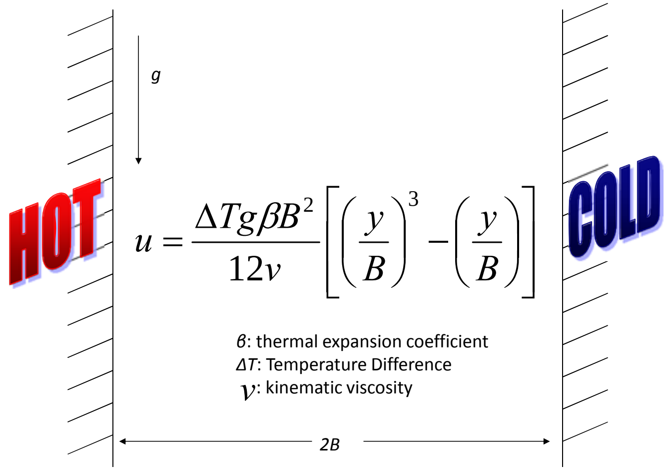


Fig.1 velocity profiles along vertical and horizontal central lines

5.2 Natural convection in cavity



$$u = \frac{\Delta T g \beta B^2}{12 v}\left[\left(\frac{y}{B}\right)^3 - \left(\frac{y}{B}\right)\right]$$

β: thermal expansion coefficient
ΔT: Temperature Difference
v: kinematic viscosity

Buoyancy: Boussinesq approximation

$$F = \rho g \beta \Delta T$$

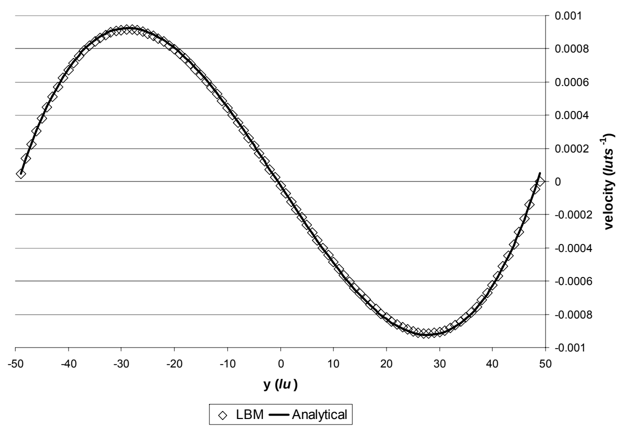
β : thermal expansion coefficient
ΔT: temperature difference
g = acceleration due to gravity

Rayleigh Number:

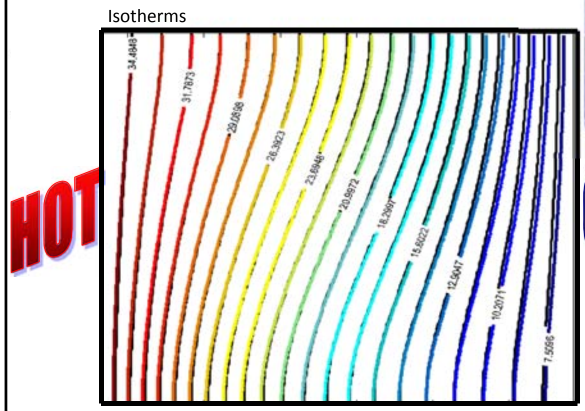
$$Ra = \frac{\beta g H \Delta T}{v D}$$

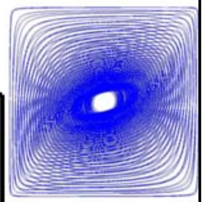
H : height of domain
ΔT : temperature difference
v : viscosity
D : thermal diffusivity

$$u = \frac{\Delta T g \beta B^2}{12 v}\left[\left(\frac{y}{B}\right)^3 - \left(\frac{y}{B}\right)\right]$$



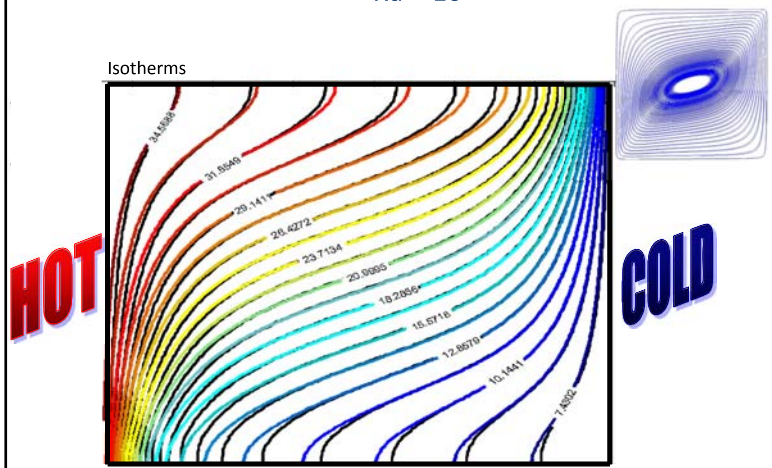
Ra = 10^5





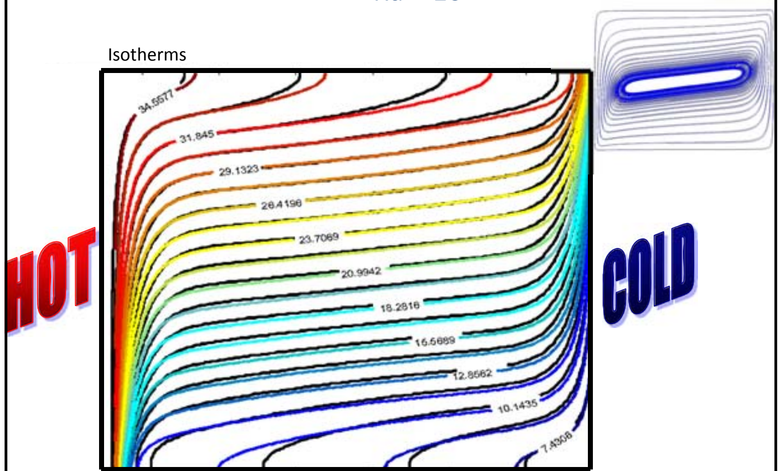
Guo, Z.; Zhao, T.S. (2005) Prog. Comp. Fluid Dynamics 5 (1/2) 110-117

Ra = 10^6



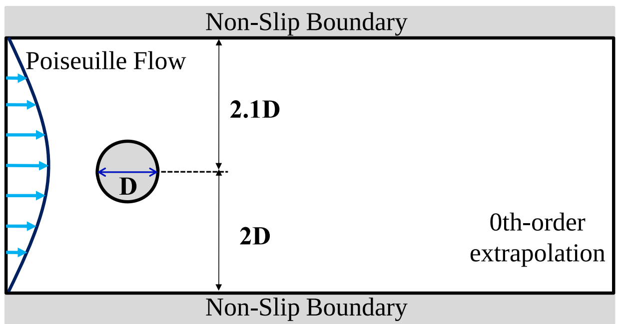
Guo, Z.; Zhao, T.S. (2005) Prog. Comp. Fluid Dynamics 5 (1/2) 110-117

Ra = 10^7



Guo, Z.; Zhao, T.S. (2005) Prog. Comp. Fluid Dynamics 5 (1/2) 110-117

5.3 The Flow Past a Cylinder

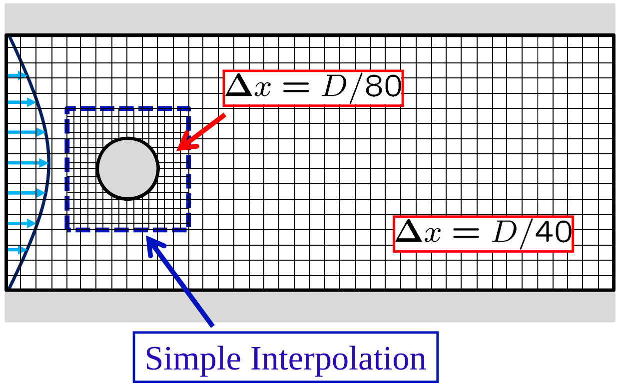


152

Adaptive Mesh Refinement

D: the diameter of the cylinder

(Re=100)



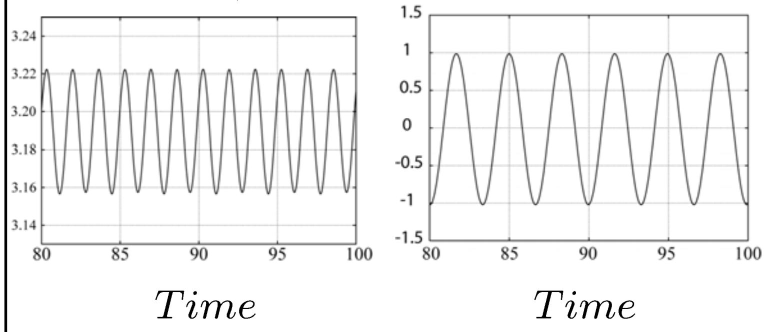
153

Re=100 (unsteady)

$(\Delta x = \frac{D}{80})$

$C_D = \frac{F_D}{U_\infty^2 D/2}$

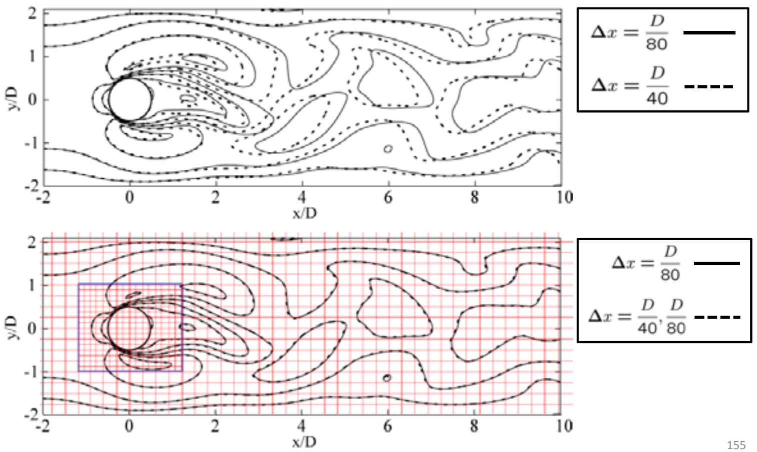
$C_L = \frac{F_L}{U_\infty^2 D/2}$



154

Velocity u

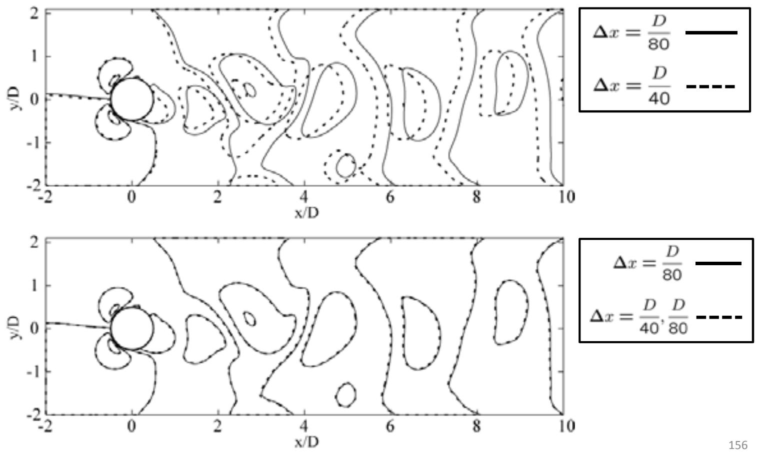
t=100



155

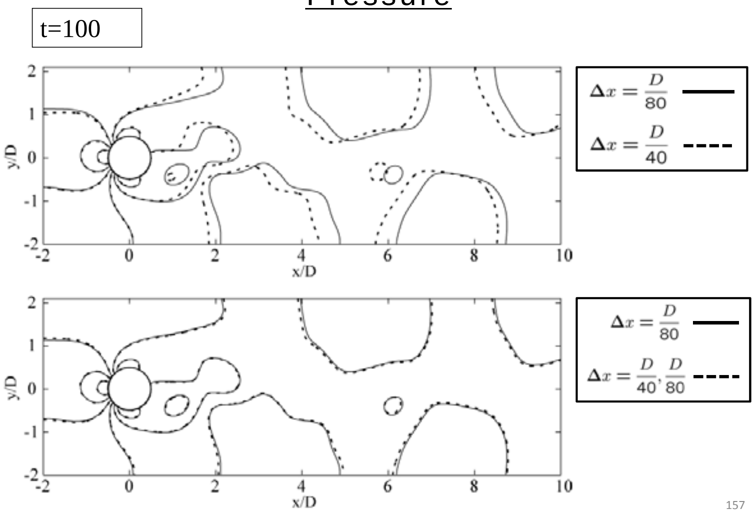
Velocity v

t=100



156

Pressure



157