arXiv:2601.03806v1 [cond-mat.soft] 7 Jan 2026

幽灵模态滤波涨落格子玻尔兹曼方法

M. Lauricella*Istituto per le Applicazioni del Calcolo CNR, via dei Taurini 19, 00185 Rome, Italy*

A. Montessori*Department of Civil, Computer Science and Aeronautical Technologies Engineering, Roma Tre University, Via Vito Volterra, Rome, 00146, Italy*

A. Tiribocchi*Istituto per le Applicazioni del Calcolo CNR, via dei Taurini 19, 00185 Rome, Italy andINFN "Tor Vergata" Via della Ricerca Scientifica 1, 00133 Rome, Italy*

S. Succi*Center for Life Nano Science@La Sapienza, Istituto Italiano di Tecnologia, 00161 Roma, ItalyDepartment of Physics, Harvard University, Cambridge, MA, 02138, USA andIstituto per le Applicazioni del Calcolo CNR, via dei Taurini 19, 00185 Rome, Italy*（日期：2026年1月8日）

涨落格子玻尔兹曼求解器广泛用于模拟软物质系统中的介观流体行为，包括胶体悬浮液和稀聚合物溶液。尽管这类方法十分实用，但当非流体动力学模态干扰系统动力学时，尤其是在单弛豫时间方案中，其精度和稳定性可能会下降。本文针对 D3Q27格子提出了一种幽灵模态过滤涨落格子玻尔兹曼方法（GMF-FLBM），通过选择性地消除幽灵确定性成分的传播，同时保留必要的随机强迫而构建。我们表明，在广泛的弛豫时间范围内，GMF-FLBM 恢复的平衡态涨落振幅与完全正则化高阶形式具有相当的精度，而对传统 BGK碰撞框架仅需进行少量调整。

谨以此文献给备受尊敬的同事、计算机模拟领域的先驱 *Kurt Kremer*，并衷心祝愿他未来多年继续取得巨大成功。

I. 引言

在过去几十年中，格子玻尔兹曼方法（LBM）作为一种稳健且灵活的框架，在利用动力学表述处理纳维–斯托克斯方程方面发挥了重要作用 [1–4]。特别是，LBM被广泛应用于各种领域，例如多孔介质中的流动 [5–7], 、由非理想相互作用驱动的相变或相分离 [8–14], 、电流体动力学现象 [15–19],、含颗粒流动 [20–24], 、聚合物动力学 [25–29],、化学反应性流体 [30, 31], 以及各种形式的活性物质 [32–35], , 等等。然而，尽管传统LBM在模拟确定性流体动力学方面取得了广泛成功，其框架仍基于这样一个假设：热涨落可以被安全地忽略 [3]。

在宏观尺度下，忽略热涨落通常是合理的；但当接近介观或纳米尺度时，这种做法便会失效，因为随机涨落——成为流体响应的关键组成部分 [36]。在这些条件下，以热力学一致的方式引入噪声已不再是可选项，而是准确捕捉正确物理规律的关键。

稀聚合物溶液是一个典型例子，在这类体系中，流体动力学涨落会强烈影响链动力学、弛豫谱，甚至影响溶液中聚合反应的扩散控制的反应遭遇。D¨unweg和Kremer的模拟表明，涨落溶剂中的聚合物会表现出Zimm型动力学，这种动力学直接源于热噪声与长程流体动力学相互作用之间的相互影响 [37]。后续的多尺度发展，包括MD–LB混合方法和自适应分辨率方案，进一步揭示了涨落介导反应性聚合物系统中的构象采样和输运的机制[28, 38]。

在过去二十年里，涨落格子玻尔兹曼方法（FLBM）已成为在纳米尺度上模拟此类现象最灵活的工具之一；在这一尺度下，流体动力学场与非流体动力学的动理学自由度之间存在复杂的相互作用 [39–42]。早期的涨落格子玻尔兹曼公式，尤其是 Ladd 及其同事为胶体悬浮液提出的公式 [24, 43, 44], , 仅在流体动力学子空间中注入噪声。虽然这能产生正确的长波长行为，却会系统性地低估中、高波数下的涨落。后来，Adhikari 等人 [36] 对这一问题作了阐明，并

* marco.lauricella@cnr.it；通讯作者

D¨unweg 等人 [45, 46], 指出，在 MRT/Hermite 正交基底下表示时，若要严格满足涨落耗散定理（FDT），就必须对所有非守恒模态（包括幽灵模态）施加随机强迫。

尽管这一过程在形式上是一致的，但粒子分布中存在幽灵矩，可能会在中、高波数处产生残余伪影，尤其是在格子各向异性与随机强迫相互作用时。当涨落格子玻尔兹曼模型与单松弛时间 BGK 涨落格子玻尔兹曼方法（BGK-FLBM）结合使用时，这些效应会更加明显。在标准 BGK-FLBM 格式中，这些伪分量会随时间累积并传播，影响稳定性和涨落的谱分布，即使是在 D3Q27 [47] 这样的全厄米格子中也是如此。

最初为抑制非热格子玻尔兹曼模型中的格子伪影而提出的正则化策略 [48–51] ，为约束这些模态提供了一种自然途径。然而，将其整合到涨落格子玻尔兹曼公式中的研究直到近期才开始 [47]。在正则化涨落格子玻尔兹曼模型（Reg-FLBM）的框架下，Lauricella 等人 [47] 表明，在 D3Q27 格式中使用完整的厄米展开来重构平衡态和非平衡分布函数，并结合厄米空间中的逐模松弛，可显著改善对涨落耗散定理的遵循，尤其是在低马赫数（Ma ≤ 0.1）和弱可压缩流中。

在这一框架中，本文的核心观察是：将平衡态分布在厄米展开的二阶处截断，同时对所有幽灵模态采用单位弛豫率，就相当于实施了有效的幽灵模滤波器。事实上，在这种双弛豫设置下，幽灵模态不应保留前一时间步的任何确定性记忆。它们的作用纯粹是统计性的，应仅限于承载适当的热噪声。这一观察促成了对 Reg-FLBM 中涨落正则化方案的一项简单修改：进行厄米投影后，可完全抑制幽灵模态，仅以符合涨落耗散定理的随机振幅取而代之。

由此得到幽灵模滤波涨落格子玻尔兹曼方法（ GMF-FLBM），在保留流体动力学的同时，将非流体动力学部分精简至最基本的统计内容。这使流体动力学涨落谱更加清晰，并减少厄米层级之间的模态耦合。

本文提出的 GMF-FLBM 方法保留了正则化格子玻尔兹曼框架的所有优势：正交厄米矩、低阶（流体力学）项与高阶（非流体力学）项之间的清晰分离，以及比 BGK 算子更稳健的碰撞算子。同时，GMF-FLBM 避免了幽灵模分布函数传播所产生的伪影，能够提供正确的涨落流体力学统计特性，即使平衡分布在厄米展开中截断至二阶也是如此。

本文结构安排如下。第二节介绍 D3Q27 格子上幽灵模滤波格子玻尔兹曼方法的构建。第三节给出平衡态和非平衡态测试，以评估该方法的准确性。第四节总结主要发现，并展望可能的应用。

II. 方法

在离散速度相空间中，分布函数遵循涨落格子玻尔兹曼方程演化：

$$f_i(x_\alpha + c_{i\alpha}\Delta t, t+\Delta t) = f_i^{\mathrm{eq}}(x_\alpha, t) + (1-\omega)\, f_i^{\mathrm{neq}}(x_\alpha, t) + w_i \sum_{k=4}^{26} b_k^{-1} e_{ki} \varphi_k r_k, \tag{1}$$

其中 $f_i^{\mathrm{neq}} = (f_i - f_{\text{平衡态}\, i})$， f_i表示与方向 i相关的单粒子分布（或粒子分布），其位置为 x_α 、时间为 t；该分布遵循 D3Q27 格式，而 w_i 为表 I 中列出的格子权重，r_k 为标准正态随机变量， φ_k 表示噪声振幅。具体而言，噪声振幅按如下方式确定： [45, 46, 52]

$$\varphi_k = \sqrt{\frac{\rho\, k_B T\, \omega(2-\omega)\, b_k}{c_s^2}}, \tag{2}$$

该振幅的选取依据涨落耗散定理，以确保热力学一致性，其中 $k_B T$ 用于调节非守恒模态的涨落方差。符号 b_k 表示归一化因子，而 e_{ki} 是专为 D3Q27 格子构造的正交完备厄米基组向量 [53] ，见表 II。

参数 $\omega = 1/\tau$ 为弛豫频率；为简便起见，此处将其视为标准 BGK模型中的单一标量弛豫时间。它通过 $\nu = c_s^2(\tau - 0.5)$设定运动黏度，其中 $c_s^2 = 1/3$ 以格子单位表示。平衡分布 f_i^{eq} 由 Maxwell–Boltzmann 分布 [2, 3]的离散速度展开得到。

守恒矩（流体力学量）通过对分布函数进行零阶矩和一阶矩计算得到

$$\rho = \sum_i f_i(x_\alpha, t), \tag{3}$$

$$\rho u_\alpha = \sum_i f_i(x_\alpha, t) c_{i\alpha}, \tag{4}$$

其中 $\mathbf{u}$ 是流体速度。

表 I. D3Q27 格子中的离散速度和权重。

i	速度 (c_{ix}, c_{iy}, c_{iz})	$\|\mathbf{c}_i\|^2$	w_i
0	(0, 0, 0)	0	8/27
1–6	$(\pm1, 0, 0)$, $(0, \pm1, 0)$, $(0, 0, \pm1)$	1	2/27
7–18	$(\pm1, \pm1, 0)$, $(\pm1, 0, \pm1)$, $(0, \pm1, \pm1)$	2	1/54
19–26	$(\pm1, \pm1, \pm1)$	3	1/216

全 Hermite D3Q27 表示使分布函数的两部分都能够写在离散 Hermite 基上:

$$f_i^{\mathrm{eq}} = w_i \sum_k \frac{\mu_k}{c_s^{2n_k}\, n_k!}\, \mathcal{H}^{(n_k)}_{i,\alpha_1\ldots\alpha_n} a^{(n_k)}_{\mathrm{eq},\alpha_1\ldots\alpha_{n_k}}, \tag{5}$$

$$f_i^{\mathrm{neq}} = w_i \sum_k \frac{\mu_k}{c_s^{2n_k}\, n_k!}\, \mathcal{H}^{(n_k)}_{i,\alpha_1\ldots\alpha_{n_k}} a^{(n_k)}_{\mathrm{neq},\alpha_1\ldots\alpha_{n_k}}, \tag{6}$$

其中，$\mathcal{H}^{(n_k)}{}_i$ 表示表 II 中给出的 n_k 阶离散 Hermite 张量，Hermite 多项式的指标 $\alpha_1\ldots\alpha_n$ 遍历空间方向 x，y，z；而 μ_k 表示 Hermite 多项式的重数，即通过对其指标进行排列所生成的不同张量的数量。因此，归一化因子 b_k 与正交的完整 Hermite 基底之间通过关系 $b_k = (n_k! \cdot c_s^{2n_k})/\mu_k$相联系，详见参考文献 [47]。

在方程 (5) 和 (6) 中，符号 $a^{(n_k)}{}_{\mathrm{eq}\,\alpha_1\ldots\alpha_{n_k}}$ 和 $a^{(n_k)}{}_{\mathrm{neq}\,\alpha_1\ldots\alpha_{n_k}}$ 表示相应的 Hermite 系数:

$$a^{(n_k)}_{\mathrm{eq},\alpha_1\ldots\alpha_{n_k}} = \sum_i f_i^{\mathrm{eq}}\, H^{(n_k)}_{i,\alpha_1\ldots\alpha_{n_k}}, \tag{7}$$

$$a^{(n_k)}_{\mathrm{neq},\alpha_1\ldots\alpha_{n_k}} = \sum_i f_i^{\mathrm{neq}}\, H^{(n_k)}_{i,\alpha_1\ldots\alpha_{n_k}}, \tag{8}$$

因此，通过投影 $f_{\mathrm{eq}\,i}$和 f_i^{neq}，即可获得直至格子所支持的最高阶的全部 Hermite 系数。

正则化过程的一个关键点是，非平衡部分 f_i^{neq} 不会直接用作 $(f_i - f_i^{\mathrm{eq}})$。相反，它是通过将分布投影到表 II 所列的厄米基底上重构得到的。此外，重构步骤将流体动力学模态与高阶幽灵模态清晰地区分开来，从而能够直接控制在重构平衡态和非平衡粒子分布项时所保留的最高厄米阶数。

在这一框架中，滤波步骤通过将厄米展开限制在希望保留的模态子集上来实现。实际上，仅保留二阶以内的厄米张量，即对应于流体动力学扇区的部分，我们得到一种幽灵滤波涨落格子玻尔兹曼方案，其中所有更高阶的幽灵贡献都被从构造上移除，仅保留流体动力学张量。在碰撞算子中，这对应于以 $\omega = 1$弛豫非平衡幽灵模态，因为碰撞后的项会将非平衡贡献乘以（$1-\omega$）。作用于幽灵扇区（k 索引 10–26）的噪声，记为 φ_k^g，因此涉及单位弛豫

$$\varphi_k^g = \sqrt{\frac{\rho\, k_B T\; b_k}{c_s^2}}, \tag{9}$$

而非平衡流体动力学模态（k 指标 4–9）则根据式 (2) 继续以物理弛豫率 ω 弛豫。

最后，幽灵模滤波的涨落格子玻尔兹曼方程为:

$$\begin{aligned} f_i(x_\alpha + c_{i\alpha}\Delta t, t+\Delta t) = {} & f_i^{\mathrm{eq}}(x_\alpha, t) + (1-\omega)\, f_i^{\mathrm{neq}}(x_\alpha, t) \\ & + w_i \sum_{k=4}^{9} b_k^{-1} e_{ki}\, \varphi_k r_k \\ & + w_i \sum_{k=10}^{26} b_k^{-1} e_{ki}\, \varphi_k^g r_k, \end{aligned} \tag{10}$$

其中，平衡态项 f_i^{eq} 和非平衡项 f_i^{neq} 均根据式 (5) 和 (6)，采用厄米展开的二阶近似计算如下:

$$f_i^{\mathrm{eq}} = w_i \rho \left(1 + \frac{c_{i\alpha}u_\alpha}{c_s^2} + \frac{(c_{i\alpha}c_{i\beta} - c_s^2\delta_{\alpha\beta})u_\alpha u_\beta}{2c_s^4}\right) \tag{11}$$

$$f_i^{\mathrm{neq}} = w_i \frac{(c_{i\alpha}c_{i\beta} - c_s^2\delta_{\alpha\beta})\, a^{(2)}_{\mathrm{neq},\alpha\beta}}{2c_s^4}. \tag{12}$$

此处，重复出现的希腊字母下标表示求和（爱因斯坦求和约定），二阶 Hermite 系数，$a^{(2)}{}_{\text{非平衡态}\ \alpha\beta}$，根据方程 (8) 计算，即:

$$a^{(2)}_{\mathrm{neq},\alpha\beta} = \sum_i (f_i - f_i^{\mathrm{eq}})\,(c_{i,\alpha}c_{i,\beta} - c_s^2\delta_{\alpha\beta}). \tag{13}$$

值得注意的是，该公式具有线程安全性，因为平衡态项和非平衡项的计算仅依赖于局部流体动力学场，而粒子分布的更新则作为单独的写操作执行。这样，图形处理器设备上的每个线程只读取宏观量，并写入其自身的格子位置，从而避免与非局部访问粒子分布向量 [54, 55] 相关的竞争条件。

III. 结果

幽灵模态滤波涨落格子玻尔兹曼方法（GMF-FLBM）已在多图形处理器*accLB* 代码 [56]中实现。因此，我们在包含 256^3 个节点的立方格子上进行了一系列模拟，以评估三种不同模型的实现。质量、长度，

表 II. D3Q27格子的离散 Hermite 基的紧凑表示 [47, 53]。符号 e_{ki} 表示阶数为 n_k 的厄米多项式 $H^{(n)}_{\cdots}$的相应基函数，而 μ_k 和 b_k 分别表示重数和归一化因子。具有相同 n_k、μ_k 和 b_k 值的厄米多项式归为一组，其中 k 从 0 到 26 变化，表示第 k个基向量。基函数 e_{ki} 的分量记为 α、β、γ等，对应于每个符号 $\mathcal{H}^{(n_k)}{}_{\alpha_1\ldots\alpha_n}$下标中写出的笛卡尔指标。笛卡尔下标 x、y和 z 表示特定分量（不使用爱因斯坦求和约定）。

k	厄米符号 $\mathcal{H}^{(n_k)}{}_{\alpha_1\ldots\alpha_n}$	e_{ki}	n_k	μ_k	b_k
0	$H^{(0)}$	1	0	1	1
1–3	$H^{(1)}_x$、$H^{(1)}_y$、$H^{(1)}_z$	$c_{i\alpha}$	1	1	1/3
4–6	$H^{(2)}_{xx}$、$H^{(2)}_{yy}$、$H^{(2)}_{zz}$	$c_{i\alpha}c_{i\beta}-c_s^2\delta_{\alpha\beta}$	2	1	2/9
7–9	$H^{(2)}_{xy}$、$H^{(2)}_{xz}$、$H^{(2)}_{yz}$	$c_{i\alpha}c_{i\beta}-c_s^2\delta_{\alpha\beta}$	2	2	1/9
10–15	$H^{(3)}_{x^2y}$, $H^{(3)}_{x^2z}$, $H^{(3)}_{y^2x}$, $H^{(3)}_{z^2x}$, $H^{(3)}_{y^2z}$, $H^{(3)}_{z^2y}$	$c_{i\alpha}^2c_{i\beta}-c_s^2c_{i\beta}$	3	3	2/27
16	$H^{(3)}_{xyz}$	$c_{i\alpha}c_{i\beta}c_{i\gamma}$	3	6	1/27
17–19	$H^{(4)\,2}_{x^2y}$, $H^{(4)\,2}_{x^2z}$, $H^{(4)}_{y^2z^2}$	$c_{i\alpha}^2c_{i\beta}^2-c_s^2(c_{i\alpha}^2+c_{i\beta}^2)+c_s^4$	4	6	4/81
20–22	$H^{(4)}_{xyz^2}$, $H^{(4)\,2}_{xzy}$, $H^{(4)}_{yzx^2}$	$c_{i\alpha}c_{i\beta}c_{i\gamma}^2-c_s^2c_{i\alpha}c_{i\beta}$	4	12	2/81
23–25	$H^{(5)}_{x^2yz^2}$, $H^{(5)}_{x^2zy^2}$, $H^{(5)}_{y^2xz^2}$	$c_{i\alpha}^2c_{i\beta}c_{i\gamma}^2-c_s^2(c_{i\alpha}^2c_{i\beta}+c_{i\beta}c_{i\gamma}^2)+c_s^4c_{i\beta}$	5	30	4/243
26	$H^{(6)}_{x^2y^2z^2}$	$c_{i\alpha}^2c_{i\beta}^2c_{i\gamma}^2-c_s^2(c_{i\alpha}^2c_{i\beta}^2+c_{i\alpha}^2c_{i\gamma}^2+c_{i\beta}^2c_{i\gamma}^2)+c_s^4(c_{i\alpha}^2+c_{i\beta}^2+c_{i\gamma}^2)-c_s^6$	6	90	8/729

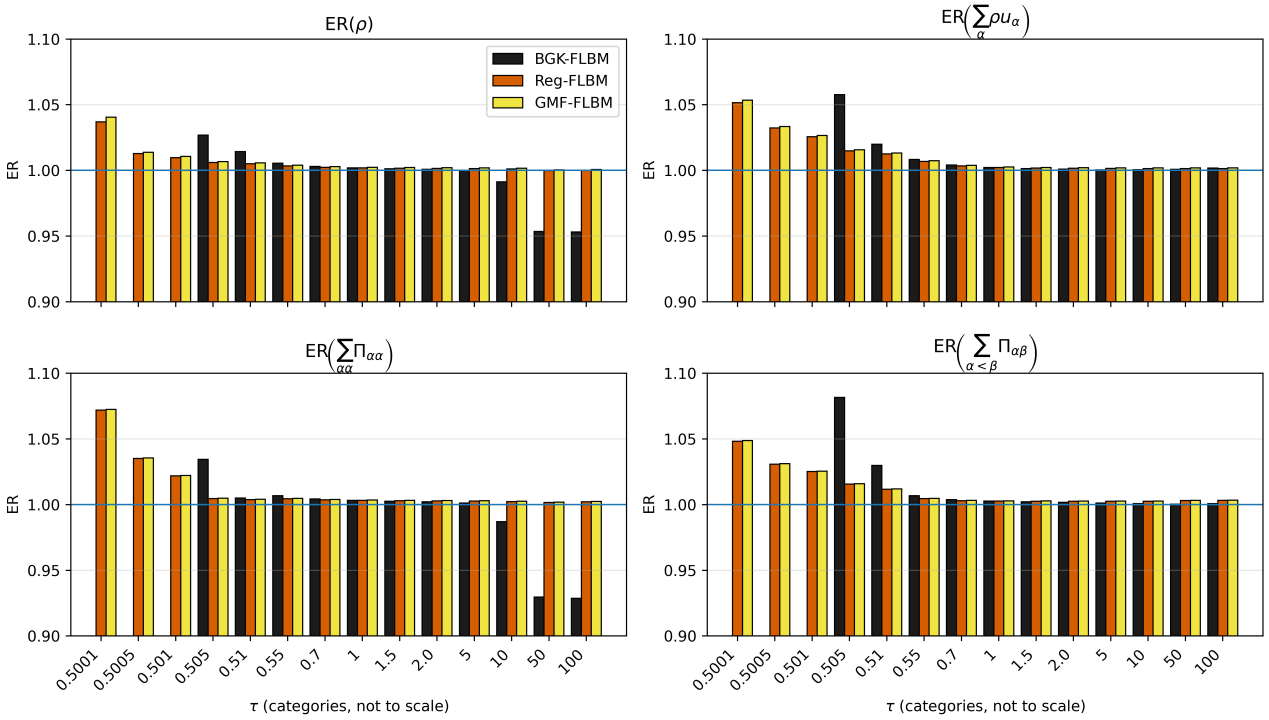

图1. 四种流体动力学观测量的平衡比（ER）随弛豫时间 τ 的变化。各面板从左上到右下依次显示 ER(ρ)、ER$\left(\sum_\alpha \rho u_\alpha\right)$、ER$\left(\sum_{\alpha\alpha}\Pi_{\alpha\alpha}\right)$和 $\left(\sum_{\alpha<\beta}\Pi_{\alpha\beta}\right)$。对于每个选定的 τ（以离散类别显示，并非按比例绘制），柱状图对比了 BGK-FLBM、Reg-FLBM 和 GMF-FLBM；水平线表示目标值 ER $=1$。缺失的 BGK-FLBM 柱状图对应于因这些 τ 值下 BGK 碰撞算子的数值不稳定性而无法完成的运行。

和时间单位的选取使得单位格子上的密度满足$\rho = 1$；同时，通过调整流体动力学弛豫时间$\tau = 1/\omega$，将运动黏度从 0.5001（零黏度极限状态）调整至 100（适用于浓缩聚合物溶液等高黏度流体）。

这些黏度涵盖了从过松弛（$1 < \omega < 2$）到强欠松弛（$0 < \omega < 1$）的整个范围，涉及不同的流体动力学状态，因此为在截然不同的松弛条件下检验涨落模型提供了严格测试。

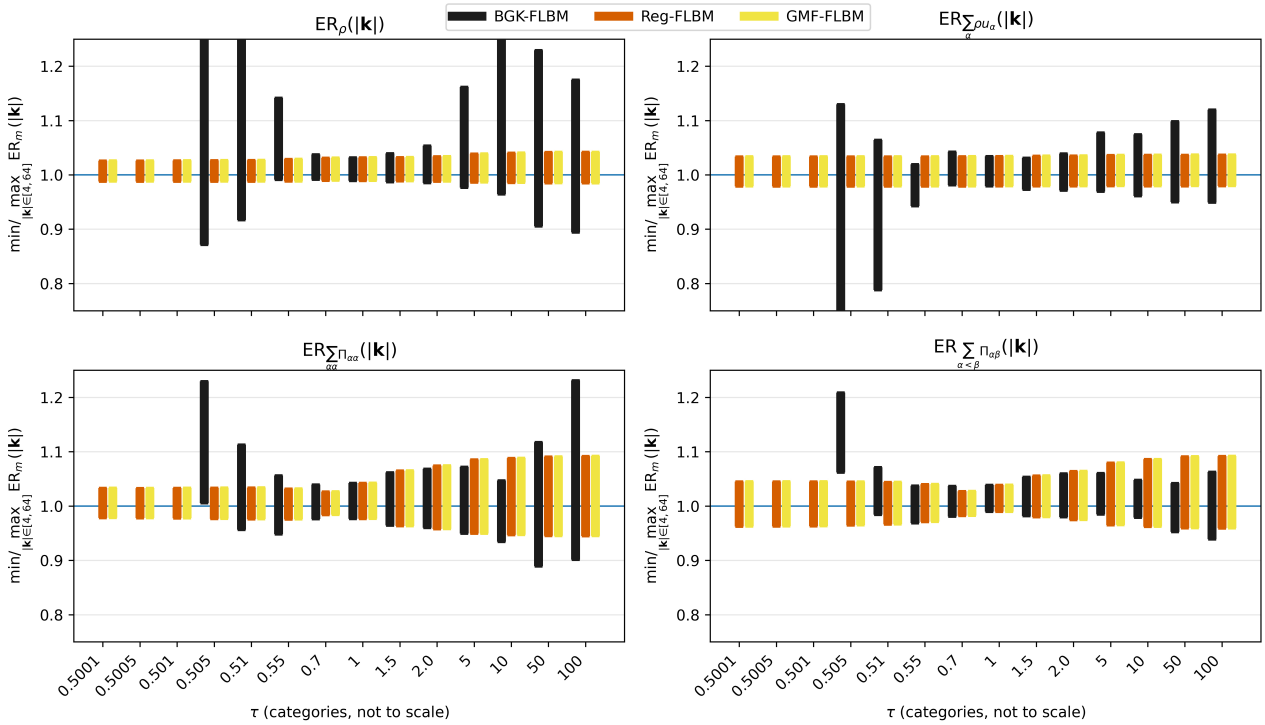

图 2. BGK-FLBM、Reg-FLBM 和 GMF-FLBM 的最小和最大谱平衡比。对于每个 τ和可观测量 $m \in \{\rho,\ \sum_\alpha \rho u_\alpha,\ \sum_\alpha \Pi_{\alpha\alpha},\ \sum_{\alpha<\beta} \Pi_{\alpha\beta}\}$，我们计算球平均谱 $S_m(|\mathbf{k}|)$，并构造 $\mathrm{ER}_m(|\mathbf{k}|) = S_m^{\mathrm{num}}(|\mathbf{k}|)/S_m^{\mathrm{th}}(|\mathbf{k}|)$。图中的竖线段（带水平端帽）表示 $\mathrm{ER}_m(|\mathbf{k}|)$ 在 $|\mathbf{k}| \in [4, 64]$ 范围内的最小值和最大值。水平线表示 $\mathrm{ER}_m = 1$；缺少 BGK-FLBM 线段表示相应的 τ 情况不可用。

每次运行均推进了 500,000 个时间步，并每隔 5,000 步存储ρ、动量场 $\rho\boldsymbol{u}$以及动量通量张量 $\Pi_{\alpha\beta}$ 的各个分量，因此每次模拟获得 100 个时间快照。所有模拟均在固定热能$k_BT = 1/3000$下进行，与早期研究 [36, 46] 保持一致。

为更好地突出 GMF-FLBM 的效率，我们在与先前工作 [47] 中报告的相同运行条件下，将其结果与采用标准 BGK 涨落格子玻尔兹曼格式（BGK-FLBM）和高阶正则化涨落格子玻尔兹曼模型（Reg-FLBM）得到的结果进行比较。具体而言，BGK-FLBM 使用具有单一弛豫频率的方程 (1)，而 Reg-FLBM 则基于方程 (10)，并结合表 II 所列 D3Q27 格式的完整高阶展开式［见方程 (5) 和 (6)］，该展开式涵盖平衡态 f_i^{eq} 和非平衡态 $f_{\mathrm{neq}\,i}$ 的完整厄米基组。

我们首先通过平衡比 （ER）量化涨落流体动力学场的热化质量。平衡比定义为模拟中测得的方差与统计力学给出的相应平衡预测值之比 [57]。这样，ER 便提供了一个直接指标，用于衡量数值方案再现热涨落的准确程度 [36]。我们

定义

$$\mathrm{ER}(m) = \frac{\langle (\delta m)^2 \rangle}{\langle (\delta m)^2 \rangle_{\mathrm{theory}}}, \tag{14}$$

其中 m是涨落模态（例如密度、动量或应力分量），$\delta m = m - \langle m \rangle$, $\langle (\delta m)^2 \rangle$是根据模拟计算出的方差，而$\langle (\delta m)^2 \rangle_{\mathrm{theory}}$ 是涨落耗散框架 [57]给出的平衡态值。因此，ER =1表示与平衡统计力学完全一致，而偏离1则表明平衡化不完善。

图1总结了四种流体动力学可观测量的平衡化比率：密度（ER(ρ)）、总动量（ER($\sum_\alpha \rho u_\alpha$)）、对角动量通量张量（ER($\sum_\alpha \Pi_{\alpha\alpha}$)）和非对角动量通量张量（ER($\sum_{\alpha<\beta} \Pi_{\alpha\beta}$)），涵盖了较宽的弛豫时间范围。对于正则化格式和幽灵模滤波格式，在所有考虑的 τ 下，ER值都接近1，仅在黏度最低时略有高估。特别是，Reg-FLBM和GMF-FLBM的结果几乎无法区分，并且两者在 $\tau \gtrsim 0.55$时就已迅速接近ER $\simeq 1$ 。

相比之下，BGK-FLBM表现出明显较差的稳健性。接近稳定性极限时，它明显偏离平衡态，这一点在与动量相关的量以及非对角

应力分量中尤为明显，偏差在$\tau = 0.505$附近达到峰值。在较大的弛豫时间下，BGK结果未能像另外两种模型那样达到相同的精度，并且在所报告的最高 τ值处系统性低估了密度和对角应力涨落。对于若干个 τ 值，BGK运行无法完成，因为碰撞步骤变得数值不稳定，因此相应的柱状条缺失。总体而言，该图突出表明，正则化和幽灵模滤波显著提高了涨落动力学的保真度与稳健性，使得在所考察的 τ范围内，涨落始终保持热化状态。

图1还揭示了一个额外的结论：在整个弛豫时间范围内，GMF-FLBM 与 Reg-FLBM 的结果高度一致。即使在 τ 取值最具挑战性的情况下（此时相对于 ER $= 1$ 的偏差最大），幽灵模滤波方案的误差也没有明显大于完全正则化的高阶格式。这是一个具有实际意义的结果：GMF-FLBM 在平衡态涨落方面达到了基本相同的精度，同时避免了显式计算厄米展开中的高阶项。换言之，幽灵模滤波降低了计算复杂度，却不会显著损失所再现热统计的精度。

为验证热噪声不仅在整体强度上得到再现，而且在各个模态上也得到再现，我们在傅里叶空间中分析涨落，其中每个波数都对应一个确定的波长。对于每个存储的构型，均使用归一化快速傅里叶变换对流体动力学场进行变换。随后，将傅里叶振幅按模长相同的壳层分组 $|\mathbf{k}|$，并对同一壳层内的所有波矢取平均（球平均），从而得到各向同性谱

$$S_m(|\mathbf{k}|) = \left\langle |\delta m(\mathbf{k})|^2 \right\rangle . \tag{15}$$

为量化各个波长下与平衡统计的一致性，我们引入谱平衡比

$$\mathrm{ER}_m(|\mathbf{k}|) = \frac{S_m^{\mathrm{num}}(|\mathbf{k}|)}{S_m^{\mathrm{th}}(|\mathbf{k}|)}, \tag{16}$$

其中，$S_m^{\mathrm{th}}(|\mathbf{k}|)$ 是同一模态的理论预测值。在这种表示中，小 $|\mathbf{k}|$ 处偏离 1 表明长波长涨落的热化不够理想，而大$|\mathbf{k}|$ 处的差异则意味着短波长上的误差。因此，ER$_m$(|k|) 为模拟盒所支持的波长范围内的涨落统计提供了一种严格的、分尺度检验。

为了更清楚地呈现整个弛豫时间范围内依赖于模型的偏差，我们引入一种基于极值的补充性概述。图 2 给出了每个 τ 对各向同性平均谱中提取出的谱平衡比的最小值和最大值，即 ER$_m$(|k|) 的极值

在区间 $|\mathbf{k}| \in [4, 64]$ 内所有已解析波数壳层上的结果。图中以四个面板分别展示 BGK-FLBM、Reg-FLBM 和 GMF-FLBM 在模式 $m = \rho$、$m = \sum_\alpha \rho u_\alpha$、$m = \sum_\alpha \Pi_{\alpha\alpha}$ 和 $m = \sum_{\alpha<\beta} \Pi_{\alpha\beta}$ 下的结果。这种表示方式将完整的谱信息浓缩为相对于平衡目标的最大低估和高估幅度，从而能够直接比较三种方法在 τ 变化时的稳健性。

图 2 突显了文献中已有报道的 BGK-FLBM 对弛豫时间的高度敏感性 [47, 58, 59]。在接近$\tau \to 1/2^+$的过度弛豫区间，以及在 τ 极大（欠弛豫）时，BGK公式明显偏离平衡目标，且 ER$_m$(|k|) 在已解析的波数壳层上呈现宽幅极值。这些偏差反映了单弛豫时间碰撞在黏度极低和极高时众所周知的数值脆弱性 [60, 61], ，并导致无法可靠地逐尺度重建涨落谱。相比之下，在此处展示的整个 τ 范围内，GMF-FLBM 与完全正则化的 Reg-FLBM 高度吻合：对于所有四种可观测量，最小值–最大值带均紧密围绕 ER$_m = 1$ ，表明幽灵模滤波器保留涨落幅度的精度基本与完整的厄米正则化相当，同时所需的碰撞处理明显更简单。

接下来我们关注最严格的情形，即 $\tau = 0.5001$，此时碰撞步骤处于最大过度弛豫状态，动力学对非流体污染最为敏感。因此，对于上述定义的四个可观测量，我们考察在已解析壳层 $|\mathbf{k}| \in [4, 64]$ 上，式（16）中定义的谱平衡比的完整波数依赖性。这种按尺度解析的视角补充了最小值–最大值概览，并展示了 Reg-FLBM 与 GMF-FLBM 在不同波长下的比较结果，范围涵盖从盒子所支持的最长模态到分析中包含的最短模态。

在图 3 中，我们报告了在要求最苛刻的弛豫时间 $\tau = 0.5001$ 下，平衡比 ER$_m$(|k|) 随波数模长 $|\mathbf{k}|$ 的变化。在整个窗口 $|\mathbf{k}| \in [4, 64]$ 内，GMF-FLBM 曲线基本与 Reg-FLBM 曲线重合：偏离 1 的微小变化出现在相同的波数处，且幅度几乎相同。这表明，即使在最大过度弛豫区间内，幽灵模滤波也能以与完整厄米正则化相当的精度保留随波长变化的涨落内容。重要的是，这一比较隔离了碰撞算子的影响，因为两次运行采用了相同的随机强迫实现（相同的随机数序列）。因此，曲线之间的残余差异只能源于不同的碰撞处理方法，而非统计采样噪声。

重要的是，GMF-FLBM 模型无需 Reg-FLBM 所要求的完整高阶 Hermite 重构，也能获得类似的结果。从实现角度来看，GMF-FLBM 与

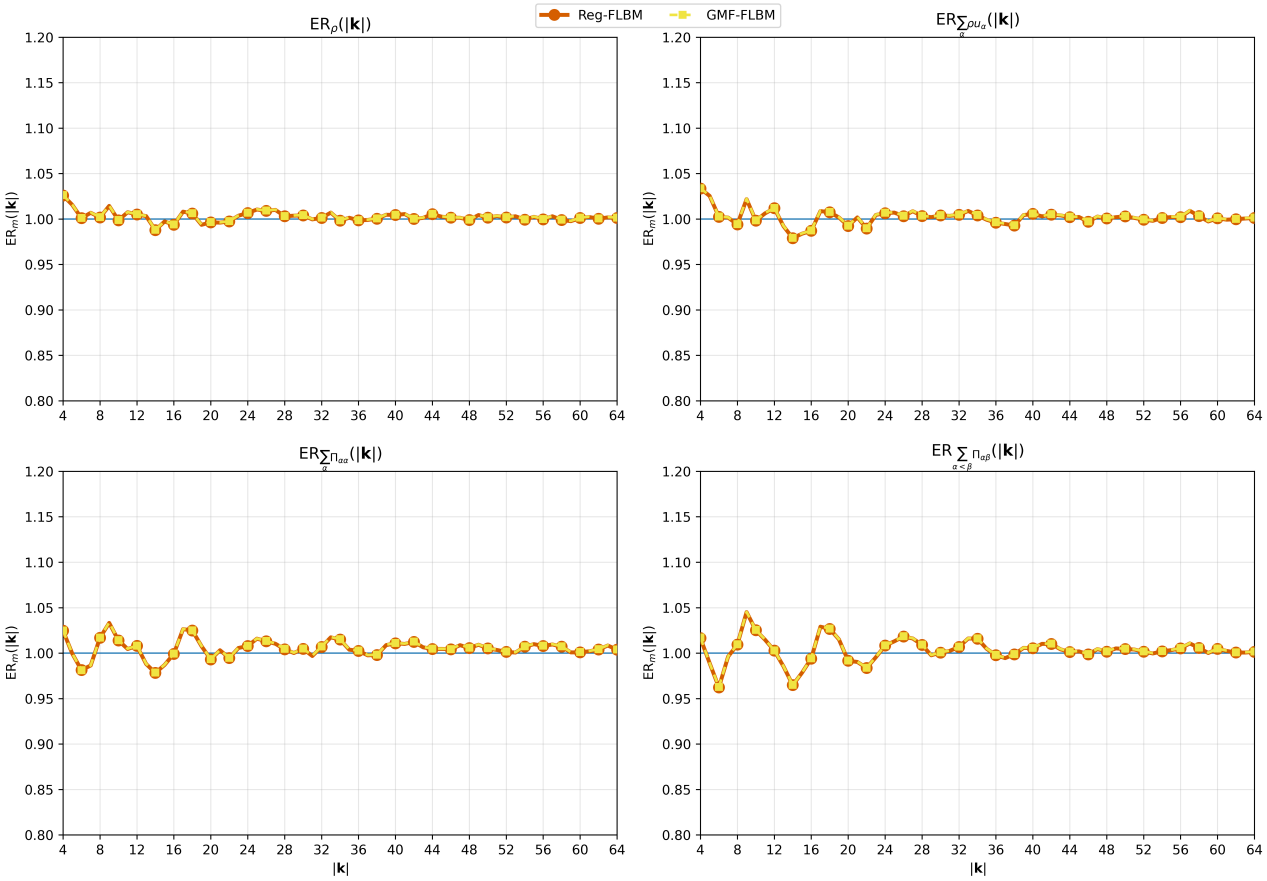

图 3. $\tau = 0.5001$ 处的尺度分辨谱平衡比。图中显示了 $|\mathbf{k}| \in [4, 64]$ 和 $m \in \{\rho,\ \sum_\alpha \rho u_\alpha,\ \sum_\alpha \Pi_{\alpha\alpha},\ \sum_{\alpha<\beta} \Pi_{\alpha\beta}\}$ 条件下的 $\mathrm{ER}_m(|\mathbf{k}|) = S_m^{\mathrm{num}}(|\mathbf{k}|)/S_m^{\mathrm{th}}(|\mathbf{k}|)$，用于比较 Reg-FLBM 和 GMF-FLBM。两条曲线在所有波长范围内重合；剩余差异仅反映碰撞算子的影响（噪声实现相同）。线条表示 $\mathrm{ER}_m = 1$。

BGK 更新的区别仅在于将 f_i^{neq} 项替换为上文引入的滤波表达式，同时保持碰撞步骤的整体结构不变。尽管只增加了极少的复杂性，幽灵模滤波仍能消除伪非流体力学成分的主要来源，从而弥补 BGK-FLBM 在再现平衡态统计涨落方面的主要不足，使其达到与 Reg-FLBM 相当的质量。

IV. 结论与展望

在这项工作中，我们针对 D3Q27格子提出了一种幽灵模滤波涨落格子玻尔兹曼方法（GMF-FLBM）。这一方法的提出源于这样的观察：一旦幽灵模态被赋予单位弛豫，它们就不应保留确定性记忆，而应简化为仅发挥最基本的统计作用。所得方案保留了流体动力学扇区，同时抑制非流体动力学成分的传播，并以符合涨落耗散定理的随机贡献取而代之。

数值测试表明，与标准单弛豫时间 BGK-FLBM 方法相比，幽灵模滤波显著增强了涨落格子玻尔兹曼方法的稳健性；在很宽的弛豫时间范围内——涵盖强过弛豫和强欠弛豫区间——均是如此。尤其是，对于 GMF-FLBM，密度、动量和应力组合的平衡比始终接近 1，与完全正则化的高阶 Reg-FLBM 所得结果几乎无法区分；而 BGK-FLBM 对 τ 表现出显著敏感性，在最极端的情况下甚至可能变得不稳定。傅里叶空间中的尺度分辨分析证实，这种一致性并非仅限于积分方差。事实上，即使在最严苛的情形 $\tau = 0.5001$ 下，对于所有受考察的流体动力学观测量，谱平衡比的最大偏差仍集中在狭窄范围内，并围绕预期的涨落幅度。

从实际应用角度来看，GMF-FLBM 无需完整的高阶埃尔米特重构，就能达到 Reg-FLBM 级别的涨落保真度；而且，它只需对标准

BGK更新进行最小幅度的修改，将非平衡贡献替换为其滤波表达式即可实现。因此，幽灵模滤波是在准确性与复杂性之间颇具吸引力的折中方案。

展望未来，GMF-FLBM框架尤其适用于这类软物质应用：涨落溶剂在相差悬殊的时间尺度和黏度尺度下，仍须保持准确性与数值稳定性。高分子物理是一个自然的应用领域，包括稀溶液和半稀溶液、高分子输运或高分子–胶体悬浮液。在这些体系中，人们可能希望将溶剂黏度从较低值（对应快速流体动力学响应）逐步提高到代表浓溶液的高黏度条件，同时保留布朗动力学和涨落驱动现象所需的正确热背景。在此背景下，GMF-FLBM兼具按尺度分辨的涨落精度和安全线程碰撞步骤，因此可作为聚合物体系大规模模拟的有力构建模块，也适用于GPU加速研究；在这些研究中，数值稳定性和实现的简洁性至关重要。

数据可用性

支持本研究发现的数据可在合理请求后向通讯作者索取。

致谢

M.L.和A.M.感谢意大利政府通过PRIN（Progetti di Rilevante Interesse Nazionale）资助（MOBIOS），项目编号：2022N4ZNH3 -CUP：F53C24001000006提供的资金支持，并感谢CINECA通过ISCRA B项目MIPLAST（HP10BZY7BK）提供的计算支持。M.L.和A. T.感谢意大利国家数学物理组（GNFM-INdAM）的支持。M.L.、A.T.和S.S.感谢欧洲研究委员会通过ERCPoC资助（编号101187935）（LBFAST）提供的支持。

[1] A. Tiribocchi、M. Durve、M. Lauricella、A. Montessori、J.-M. Tucny和S. Succi，《Physics Reports》**1105**，1（2025年）。[2] S. Succi，*The lattice Boltzmann equation: for complex states of flowing matter* 2018（牛津大学出版社）。[3] T. Kr¨uger、H. Kusumaatmaja、A. Kuzmin、O. Shardt、G. Silva和E. M. Viggen，施普林格国际出版公司**10**，4（2017年）。[4] M. C. Sukop和D. T. Thorne Jr，*Lattice Boltzmann modeling: an introduction for geoscientists and engineers*（施普林格，2006年）。[5] E. S. Boek和M. Venturoli，《Co mputers & Mathematics with Applications》**59**，2305（2010年）。[6] Z. Guo和T. Zhao，《物理评论E》**66**，036304（2002年）。[7] A. Cali、S. Succi、A. Cancelliere、R. Benzi和M. Gramignani，《Physical Review A》**45**，5771（1992年）。[8] A. Montessori、L. A. Hegele和M. Lauricella，《AIAA Journal》**63**，1005（2025年）。[9] D. Zhang、Y. Li、Y. Wang和C. Shu，《流体物理学》**36**（2024年）。[10] A. Tiribocchi、A. Montessori、S. Aime、M. Milani、M. Lauricella、S. Succi和D. Weitz，《流体物理学》**32**（2020年）。[11] D. Chiappini、M. Sbragaglia、X. Xue和G. Falcucci，《物理评论E》**99**，053305（2019年）。[12] A. Montessori、M. Lauricella和S. Succi，《Philosophical Transactions of the Royal Society A》**377**，20180149（2019年）。[13] H. Liu、A. J. Valocchi和Q. Kang，《物理评论E——统计、非线性与软物质物理》**85**，046309（2012年）。[14] X. Shan和H. Chen，《物理评论E》**47**，1815（1993年）。[15] F. Xiong、L. Wang、J. Huang和K. Luo，《Journal of Scientific Computing》**103**，1（2025年）。[16] X. Liu, Z. Chai, B. Shi 和 X. Yuan，《Physica D: Non-linear Phenomena》**468**，134294（2024年）。[17] L. Wang, Z. Wei, T. Li, Z. Chai 和 B. Shi，应用数学建模**95**，361（2021年）。[18] M. Lauricella, S. Melchionna, A. Montessori, D. Pisig- nano, G. Pontrelli 和 S. Succi，《物理评论E》**97**，033308（2018年）。[19] A. Kupershtokh 和 D. Medvedev，《Journal of electro- statics》**64**，581（2006年）。[20] F. Guglietta, F. Pelusi, M. Sega, O. Aouane 和 J. Hart- ing，《流体力学杂志》**971**，A13（2023年）。[21] L. Yang, M. Sega, S. Leimbach, S. Kolb, J. Karl 和 J. Harting，《工业与工程化学研究》**61**，1863（2022年）。[22] F. Bonaccorso, A. Montessori, A. Tiribocchi, G. Amati, M. Bernaschi, M. Lauricella 和 S. Succi，《计算机物理通讯》**256**，107455（2020年）。[23] J. Harting, S. Frijters, M. Ramaioli, M. Robinson, D. E. Wolf 和 S. Luding，《欧洲物理杂志专题》**223**，2253（2014年）。[24] A. J. Ladd 和 R. Verberg，《统计物理学杂志》**104**，1191（2001年）。[25] M. Monteferrante, A. Montessori, S. Succi, D. Pisignano 和 M. Lauricella，《流体物理学》**33**（2021年）。[26] O. Malaspinas, N. Fi´etier 和 M. Deville，《Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics》**165**，1637（2010年）。[27] O. Berk Usta, A. J. Ladd 和 J. E. Butler，《化学物理学杂志》**122**（2005年）。[28] P. Ahlrichs 和 B. D¨unweg，《化学物理学杂志》**111**，8225（1999年）。[29] P. Ahlrichs 和 B. D¨unweg，《现代物理学国际期刊C辑》**9**，1429（1998年）。[30] N. Sawant, B. Dorschner 和 I. V. Karlin，《Philosoph- ical Transactions of the Royal Society A》**379**，20200402（2021年）。

[31] C. Lin, K. H. Luo, L. Fei 和 S. Succi, 《科学报告》**7**, 14580（2017年）。[32] A. Tiribocchi, M. Durve, M. Lauricella, A. Montessori, D. Marenduzzo 和 S. Succi, 《自然·通讯》**14**, 1096（2023年）。[33] L. N. Carenza, G. Gonnella, D. Marenduzzo 和 G. Ne- gro, 《Physica A: Statistical Mechanics and its Applications》**559**, 125025（2020年）。[34] A. Doostmohammadi, M. F. Adamer, S. P. Thampi 和 J. M. Yeomans, 《自然·通讯》**7**, 10557（2016年）。[35] D. Marenduzzo, E. Orlandini, M. Cates 和 J. Yeomans, 《物理评论E——统计、非线性与软物质物理》**76**, 031921（2007年）。[36] R. Adhikari, K. Stratford, M. Cates 和 A. Wagner, 《欧洲物理快报》**71**, 473（2005年）。[37] B. D¨unweg 和 K. Kremer, 《化学物理学杂志》**99**, 6983（1993年）。[38] M. Praprotnik, L. D. Site 和 K. Kremer, 《Annu. Rev. Phys. Chem.》**59**, 545（2008年）。[39] X. Xue, L. Biferale, M. Sbragaglia 和 F. Toschi, 《欧洲物理学杂志E》**44**, 1（2021年）。[40] M. R. Parsa 和 A. J. Wagner, 《Physical Review Letters》**124**, 234501（2020年）。[41] D. Belardinelli, M. Sbragaglia, L. Biferale, M. Gross 和 F. Varnik, 《物理评论E》**91**, 023313（2015年）。[42] M. Gross, R. Adhikari, M. Cates 和 F. Varnik, 《Philo- sophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences》**369**, 2274（2011年）。[43] A. J. Ladd, 《流体力学杂志》**271**, 285（1994年）。[44] A. J. Ladd, 《Physical Review Letters》**70**, 1339（1993年）。[45] B. D¨unweg 和 A. J. Ladd, 载于 *Advanced computer simulation approaches for soft matter sciences III*（施普林格，2009年），第89–166页。[46] B. D¨unweg, U. D. Schiller 和 A. J. Ladd, 《物理评论E——统计、非线性与软物质物理》**76**, 036704（2007年）。[47] M. Lauricella、A. Montessori、A. Tiribocchi 和 S. Succi, 《化学物理学杂志》**163** (2025年)。[48] J. Jacob、O. Malaspinas 和 P. Sagaut, 《湍流杂志》**19**, 1051 (2018年)。[49] C. Coreixas、G. Wissocq、G. Puigt、J.-F. Boussuge 和 P. Sagaut, 《物理评论E》**96**, 033306 (2017)。[50] K. K. Mattila、P. C. Philippi 和 L. A. Hegele, 《流体物理学》**29** (2017年)。[51] J. Latt 和 B. Chopard, 《数学与计算机模拟》**72**, 165 (2006年)。[52] U. D. Schiller, *Thermal fluctuations and boundary conditions in the lattice Boltzmann method*，博士论文，美因茨约翰内斯·古腾堡大学（2008年）。[53] O. Malaspinas, arXiv 预印本 arXiv:1505.06900（2015年）。[54] A. Montessori、M. Lauricella、A. Tiribocchi、M. Durve、M. La Rocca、G. Amati、F. Bonaccorso 和 S. Succi, 《计算科学杂志》**74**, 102165 (2023年)。[55] A. Montessori、M. La Rocca、G. Amati、M. Lauricella、A. Tiribocchi 和 S. Succi, 《流体物理学》**36** (2024年)。[56] M. Lauricella、A. Mukherjee、L. Brandt、S. Succi、D. Izbassarov 和 A. Montessori, arXiv 预印本 arXiv:2505.01126（2025年）。[57] L. D. Landau 和 E. M. Lifshitz, *Fluid Mechanics: Volume 6* 6 1987，第[58] 卷（爱思唯尔，）。S. T. Ollila、C. Denniston、M. Karttunen 和 T. Ala-Nissila, 《化学物理学杂志》**134** (2011年)。[59] M. Bernaschi、S. Melchionna、S. Succi、M. Fyta、E. Kaxiras 和 J. K. Sircar, 《计算机物理学通讯》**180**, 1495 (2009年)。[60] D. d'Humi`eres, 《伦敦皇家学会哲学汇刊。A辑: 数学、物理与工程科学》**360**, 437 (2002年)。[61] P. Lallemand 和 L.-S. Luo, 《物理评论E》**61**, 6546 (2000年)。