



# 格子 Boltzmann 方法的工程热物理应用

何雅玲, 李庆, 王勇, 唐桂华

西安交通大学能源与动力工程学院, 动力工程多相流国家重点实验室, 西安 710049

E-mail: [yalinghe@mail.xjtu.edu.cn](mailto:yalinghe@mail.xjtu.edu.cn)

2009-07-09 收稿, 2009-08-31 接受

国家自然科学基金重点资助项目(批准号: 50736005, U0934005)

**摘要** 格子 Boltzmann 方法在过去的 20 年里已经发展成为一种有效的数值模拟方法, 它是介于微观分子动力学方法和基于连续介质假设的宏观方法之间的一种介观方法. 该方法与传统的流体模拟方法不同, 它基于分子动理论, 通过跟踪粒子分布函数的输运而后对分布函数求矩来获得宏观平均特性. 基于本课题成员的一些工作, 本文对格子 Boltzmann 方法在工程热物理领域中研究进展做了简要回顾, 包括: (1) 格子 Boltzmann 方法的发展简介; (2) 沿着 Boltzmann 方程——Maxwell 分布——Boltzmann-BGK 方程——格子 Boltzmann-BGK 方程这一主线对格子 Boltzmann 方法的基础理论和基本模型做了简要介绍; (3) 在格子 Boltzmann 方法的模型发展方面, 介绍了用于理想气体可压缩流动与传热的耦合双分布函数模型和用于非平衡态气体流动模拟的格子 Boltzmann 模型. 在格子 Boltzmann 方法的边界处理方面, 介绍了反弹与镜面漫反射格式及质量修正格式. 在格子 Boltzmann 方法的计算格式方面, 介绍了显式-隐式有限差分格式, 该格式能够有效地提高计算效率; (4) 在格子 Boltzmann 方法的应用方面, 着重对其在交变流动、可压缩流动、多孔介质流动、微尺度气体流动及热声中的应用做了详细介绍; 最后指出了格子 Boltzmann 方法在工程热物理领域中需要进一步研究的内容.

**关键词**

格子 Boltzmann 方法  
数值模拟  
工程热物理

在过去的 20 年里, 格子 Boltzmann 方法受到国内外众多学者的关注, 在理论和应用研究等方面都取得了迅速发展. 格子 Boltzmann 方法基于分子动理论, 具有清晰的物理背景. 该方法在宏观上是离散方法, 微观上是连续方法, 因而被称为介观模拟方法. 与传统模拟方法相比, 格子 Boltzmann 方法的动理论特性使得它在模拟许多复杂流动的时候更有效, 如多孔介质流动、悬浮流、多相流、多组分流等. 格子 Boltzmann 方法具有天生的并行特性, 以及边界处理简单、程序易于实施等优点.

历史上, 格子 Boltzmann 方法是由格子气自动机发展而来. 格子气自动机一直为多种缺陷所困扰: (1) 不满足伽利略不变性; (2) 流体状态方程与宏观流

速有关; (3) 由于采用布尔运算, 因而局部量往往存在数值噪音; (4) 碰撞算子具有指数复杂性.

最早的格子 Boltzmann 模型是由 McNamara 和 Zanetti 在 1988 年提出的<sup>[1]</sup>, 主要动机是为了克服格子气自动机中的噪声, 其中的布尔场由分布函数代替, 平衡态分布采用 Fermi-Dirac 分布函数. 1989 年 Higuera 和 Jimenez 做出了一个重要简化, 即提出使用线性化的碰撞算子<sup>[2,3]</sup>. 20 世纪 90 年代初期, Chen 等人<sup>[4]</sup>、Qian 等人<sup>[5]</sup>分别独立地提出将 BGK 碰撞算子引入到格子 Boltzmann 方法中, 格子 BGK 模型的提出使得计算更加有效.

早期的格子 BGK 模型在等温不可压缩流动时存在可压缩效应, 为了消除和降低由可压缩效应引起

**引用格式:** 何雅玲, 李庆, 王勇, 等. 格子 Boltzmann 方法的工程热物理应用. 科学通报, 2009, 54: 2638~2656

He Y L, Li Q, Wang Y, et al. Lattice Boltzmann method and its applications in engineering thermophysics. Chinese Sci Bull, 2009, 54, doi: 10.1007/s11434-009-0681-6

的误差,许多学者提出了多种等温不可压模型<sup>[6~9]</sup>.近些年,格子 Boltzmann 方法在解决不可压缩热流动<sup>[10~16]</sup>、可压缩流动<sup>[17~28]</sup>、微尺度流动<sup>[29~38]</sup>等方面,也陆续取得了一定成功.

边界处理在格子 Boltzmann 方法中扮演着一个很重要的角色.通常说来,在格子 Boltzmann 方法中,进行边界处理就是要在未知的分布函数和已知的分布函数之间找到一种合适的关系.经历了 20 年的发展,已逐渐发展出适合不同边界条件、不同模型的边界处理格式.这些边界处理格式可划分为启发式格式、动力学格式、外推格式以及其他复杂边界处理格式等 4 类.不同的边界处理格式对数值模拟的精度、稳定性以及计算效率产生很大的影响.

网格划分方面,最初的格子 Boltzmann 方法是基于正六边形或正四边形的均匀对称网格.由于均匀网格在计算效率、计算精度等方面的不足,从而促使了各种非均匀网格、多块以及多重网格、无网格等多种技术的出现.另外,还发展了有限容积格子 Boltzmann 方法、有限差分格子 Boltzmann 方法等,充分利用传统计算流体力学方法在处理非均匀网格上的一些成熟的优势,这些网格技术可以在一定程度上提高格子 Boltzmann 方法的计算精度、计算效率以及对不规则计算区域的适应性等;与此同时,也使得相关理论以及求解过程变得复杂.总的说来,这些网格技术延展了格子 Boltzmann 方法的应用范围.

在世界范围内,格子 Boltzmann 方法已经受到越来越多的学术团体和个人关注,逐年所发表的相关论文已近似指数增长.在其发展历史上,陆续出现了一系列颇有价值的综述性文献和相关书籍.1992 年,Benzi 等人首次对格子 Boltzmann 方法的基本理论与应用做了简要回顾<sup>[39]</sup>.随后,Qian 等<sup>[40]</sup>、Chen 和 Doolen<sup>[41]</sup>、Nourgaliev 等<sup>[42]</sup>分别于 1995 年、1998 年和 2003 年再次对格子 Boltzmann 方法做了回顾.最近几年,还有关于格子 Boltzmann 方法在粒子悬浮<sup>[43]</sup>、纳/微米流体<sup>[44]</sup>领域的专门综述文献.在国际上,目前已有多本相关著作问世,详见文献<sup>[45~48]</sup>.目前,格子 Boltzmann 方法领域已有两个专门的国际会议: *Discrete Simulation of Fluid Dynamics* 以及 *International Conference for Mesoscopic Methods in Engineering and Science*, 并发展出专门的商业软件 PowerFlow, 其应用结果也有在 *Science* 上发表<sup>[49]</sup>.

由于格子 Boltzmann 方法应用的扩大,它在国内

也受到日益的重视.从 20 世纪 80 年代后期,朱照宣<sup>[50]</sup>、胡守信<sup>[51]</sup>及钱跃竑等人<sup>[52]</sup>在《力学与实践》杂志上介绍了格子气方法以来,上海大学、华中科技大学、西安交通大学、南京理工大学、清华大学、武汉大学、东南大学、吉林大学、广西师范大学、南京航空航天大学、浙江师范大学和北京应用物理与计算数学研究所等单位,都陆续在不同的方向开展了卓有成效的研究工作.我国华中科技大学郭照立、郑楚光等人为推动格子 Boltzmann 方法的发展先后出版了两本相关著作<sup>[53,54]</sup>.最近,本课题组出版了《格子 Boltzmann 方法的理论及应用》一书<sup>[55]</sup>,对格子 Boltzmann 方法的基本概念、模型推导、边界处理、网格划分、数值实施等做了简要介绍.

最近几年,我们将格子 Boltzmann 方法应用于工程热物理一些问题的研究中,在其理论与应用方面都取得了一点进展和体会.本文给出了格子 Boltzmann 方法的理论基础以及基本模型并简要介绍了数值实施流程的基础上,分别介绍了我们的一些研究工作:介绍了相关的理论进展,包括模型、边界处理格式以及计算格式的发展;给出了格子 Boltzmann 方法在工程热物理领域的一些应用.

## 1 格子 Boltzmann 方法的理论基础及基本模型

### 1.1 气体动理论

在气体动理论中,流体由大量的分子组成,每个分子的微观运动都遵守牛顿力学规律.由于分子数的巨大,直接求解这样一个系统是不现实的.从另一个方面来考虑,我们不必知道每个分子的具体微观运动状态,而是只要知道这些系统的统计描述即可,然后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.气体动理论的一个基本假设就是流体统计描述的全部信息均包含在一个单粒子分布函数  $f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t)$  中其中  $\mathbf{r}(x, y, z)$  是空间位置矢量、 $\boldsymbol{\xi}(\xi_x, \xi_y, \xi_z)$  是分子速度矢量,  $t$  是时间.  $f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t)d\boldsymbol{\xi}$  表示  $t$  时刻,速度在  $\boldsymbol{\xi}$  与  $\boldsymbol{\xi}+d\boldsymbol{\xi}$  间的分子数.考虑外力时,可设  $m\mathbf{a}$  为作用在每个分子上的外力,其中  $m$  为分子的质量.根据  $f$  的定义有

$$n = \int f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (1)$$

$n$  即为  $t$  时刻,  $\mathbf{r}$  处单位体积内的分子数,亦称数密度.

任一分子,如在时间间隔  $dt$  中无碰撞,则分子的位置矢量将由  $\mathbf{r}$  变为  $\mathbf{r}+d\mathbf{r}$ , 而它的速度将由  $\boldsymbol{\xi}$  变为

$\xi + a dt$ . 因此, 如果在  $dt$  间隔内无碰撞, 到  $t + dt$  时, 原来  $t$  时刻在  $d\mathbf{r}d\xi$  中的气体分子  $f(\mathbf{r}, \xi, t)d\mathbf{r}d\xi$  将全部既不增加也不减少地转移到  $\mathbf{r} + d\mathbf{r}, \xi + a dt$  的  $d\mathbf{r}d\xi$  中, 于是有

$$f(\mathbf{r} + d\mathbf{r}, \xi + a dt, t + dt)d\mathbf{r}d\xi = f(\mathbf{r}, \xi, t)d\mathbf{r}d\xi. \quad (2)$$

对(2)式左端作 Taylor 展开, 然后两边同除  $dt$ , 并令  $dt \rightarrow 0$ , 则有:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \xi} = 0, \quad (3)$$

即

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{运动}} = -\xi \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \mathbf{a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \xi}, \quad (4)$$

$(\partial f / \partial t)_{\text{运动}}$  为由于分子运动引起的  $f(\mathbf{r}, \xi, t)$  的增加. 除此之外, (2)式右边还应考虑由于分子碰撞产生的分子数的变化量  $(\partial f / \partial t)_{\text{碰撞}} d\mathbf{r}d\xi dt$ , 所以

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right) = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{运动碰撞}} + \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right), \quad (5)$$

或

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \xi} = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{碰撞}}, \quad (6)$$

在刚球模型二球碰撞的假设下, 通过一系列复杂的推导可得到如下碰撞项<sup>[56]</sup>:

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{碰撞}} = \iint (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) d\Omega d\xi_1, \quad (7)$$

其中各种参数如图 1 所示. 最后可得分布函数  $f$  的控制方程, 即 Boltzmann 方程

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \xi} = \iint (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) d\Omega d\xi_1. \quad (8)$$

Boltzmann 方程右端项称为碰撞积分或碰撞项, 这一积分的存在给 Boltzmann 方程的求解带来了极大的困难. 因此, 人们便提出了许多近似解法, 如碰撞项线形化、Hilbert 扰动法、Chapman-Enskog 展开等.

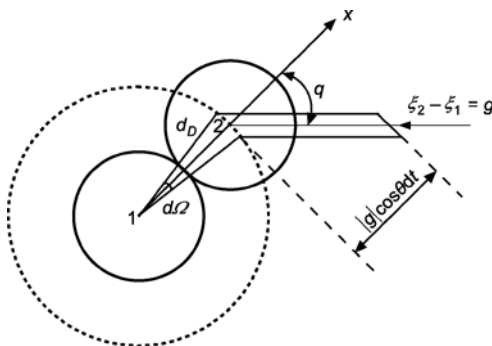


图 1 粒子碰撞示意图

一般情况下, 要获得 Boltzmann 方程的解析解是不可能的, 不过单组分单原子气体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. 这一分布是 Maxwell 在 Boltzmann 方程建立以前, 于 1860 年得到的. 对  $D$  维空间有, Maxwell 分布可表示为

$$f^{\text{eq}} = \frac{n}{(2\pi R_g T)^{D/2}} \exp \left( -\frac{(\xi - u)^2}{2 R_g T} \right), \quad (9)$$

Maxwell 分布是气体动理论中的最基本的物理定律, 它规定了气体在静止平衡态时速度的最可几速度分布.

由于 Boltzmann 方程与流体力学基本方程之间有着密切的联系, 因而可以通过数值求解 Boltzmann 方程来模拟流体的宏观运动. 求解 Boltzmann 方程最主要的难点在于碰撞项, 它是分布函数的非线性项, 另外它还与具体分子作用力有关. 因而, 比较自然的想法是考虑能否用简单的形式代替碰撞项, BGK 近似就是在这一背景下产生的.

BGK 近似是由 Bhatnagar, Gross 和 Krook 在 1954 年提出的<sup>[57]</sup>. 他们指出以一个简单的算子  $\Omega_f$  代替 Boltzmann 方程中的碰撞项  $J(f_1)$ ,  $\Omega_f$  应具有以下 2 个性质<sup>[56]</sup>:

- 1) 对碰撞不变量  $\phi = \left( m, m\xi, \frac{1}{2} m\xi^2 \right)$ ,  $\Omega_f$  应满足

$$\int \phi \Omega_f d\xi = 0, \quad (10)$$

- 2) 根据 Boltzmann H 定理有

$$\int (1 + \ln f) J(f_1) d\xi \leq 0, \quad (11)$$

不等式中的等号只有当  $f$  为平衡态分布  $f^{\text{eq}}$  时才成立, (11)式反映的是气体有趋于平衡态的性质. 用算子  $\Omega_f$  代替 Boltzmann 方程中的碰撞项  $J(f_1)$ , 因而要求

$$\int (1 + \ln f) \Omega_f d\xi \leq 0. \quad (12)$$

最简单的算子  $\Omega_f$  可以这样得到: 认为碰撞的效应是改变  $f$  使其趋于 Maxwell 平衡态分布  $f^{\text{eq}}$ . 设改变率的大小和  $f^{\text{eq}}$  与  $f$  的差值成正比, 比例系数为  $\nu$ .  $\nu$  是一个与分子速度  $\xi$  无关的常数, 于是可引入

$$\Omega_f = \nu [f^{\text{eq}}(\mathbf{r}, \xi) - f(\mathbf{r}, \xi, t)], \quad (13)$$

这样, Boltzmann 方程就化为

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \xi} = \nu (f^{\text{eq}} - f), \quad (14)$$

方程(14)称为 Boltzmann-BGK 方程.

BGK 近似使得 Boltzmann 方程线性化, 大大简化了方程的求解. 如果引入碰撞时间为

$$\tau_0 = \frac{1}{\nu}, \quad (15)$$

$\tau_0$  是两次碰撞的平均时间间隔, 也称松弛时间. 根据(14)和(15)式, 描述粒子分布函数变化的 Boltzmann-BGK 方程可写作

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f = -\frac{1}{\tau_0} (f - f^{\text{eq}}). \quad (16)$$

对分布函数  $f$  乘以粒子的质量, 则(16)式的分布函数表示粒子的密度分布而非数量分布, 如不特别指出, 下文的  $f$  均表示粒子的密度分布, 相应的 Maxwell 平衡态分布  $f^{\text{eq}}$  变为

$$f^{\text{eq}} = \frac{\rho}{(2\pi R_g T)^{D/2}} \exp\left(-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2R_g T}\right). \quad (17)$$

## 1.2 基本格子 Boltzmann 模型

格子 Boltzmann-BGK 方程是 Boltzmann-BGK 方程的一种特殊的离散形式. 这一离散包括速度离散、时间离散和空间离散.

首先要在速度空间对 Boltzmann-BGK 方程进行离散. 在相空间将粒子的速度  $\boldsymbol{\xi}$  简化为有限维的速度空间  $\{\mathbf{e}_0, \mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_N\}$ ,  $N$  表示速度的种类数. 同时, 连续的分布函数  $f$  也相应地被离散为  $\{f_0, f_1, \dots, f_N\}$ , 其中  $f_\alpha = f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{e}_\alpha, t)$ ,  $\alpha = 0, 1, \dots, N$ . 于是可得速度离散的 Boltzmann-BGK 方程为

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla f_\alpha = -\frac{1}{\tau_0} (f_\alpha - f_\alpha^{\text{eq}}) + F_\alpha, \quad (18)$$

其中  $f_\alpha^{\text{eq}}$  为离散速度空间的局部平衡态分布函数,  $F_\alpha$  为离散速度空间的外力项, 它是外力项  $\mathbf{a} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f$  在离散速度空间的投影, 即  $F_\alpha = (\mathbf{a} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f)_\alpha$ . 当流速较低时, 局部平衡态分布函数  $f_\alpha^{\text{eq}}$  可以表示为

$$\begin{aligned} f_\alpha^{\text{eq}} &= \rho (2\pi R_g T)^{-D/2} \exp\left[-\frac{(\mathbf{e}_\alpha - \mathbf{u})^2}{2R_g T}\right] \\ &= \rho \omega_\alpha \left[1 + \frac{\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}}{R_g T} + \frac{(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{2R_g^2 T^2} - \frac{u^2}{2R_g T}\right] + O(u^3), \end{aligned} \quad (19)$$

其中  $\omega_\alpha = (2\pi R_g T)^{-D/2} \exp(-\mathbf{e}_\alpha^2 / 2R_g T)$ .

数值求解方程(18), 还必须对其在时间和空间上进行离散, 从而得到完全离散化的 Boltzmann-BGK

方程. 对方程(18)沿特征线积分有<sup>[58]</sup>

$$\begin{aligned} & f_\alpha(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\alpha \delta_t, t + \delta_t) - f_\alpha(\mathbf{r}, t) \\ &= \int_0^{\delta_t} [\Omega_{f_\alpha}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\alpha t', t + t') + F_\alpha(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\alpha t', t + t')] dt', \end{aligned} \quad (20)$$

其中  $\delta_t$  为时间步长,  $\Omega_{f_\alpha} = (f_\alpha^{\text{eq}} - f_\alpha) / \tau_0$ . 对上式右端积分采用一阶精度的矩形法进行逼近, 可得

$$\begin{aligned} & f_\alpha(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\alpha \delta_t, t + \delta_t) - f_\alpha(\mathbf{r}, t) \\ &= -\frac{1}{\tau} [f_\alpha(\mathbf{r}, t) - f_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)] + \delta_t F_\alpha(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (21)$$

这正是含外力项的格子 Boltzmann-BGK 方程, 其中  $\tau = \tau_0 / \delta_t$  为无量纲弛豫时间. 由于沿特征线进行积分, 方程(21)具有 Lagrange 特征, 使模型能够基本达到二阶数值计算精度. 此外, 时间和空间的离散并不是独立的, 而是由粒子的离散速度联系起来的, 例如  $\delta_x = c \delta_t$  ( $c = \sqrt{3R_g T_0}$ ). 这一特性为我们在物理空间将粒子运动分为迁移和碰撞两个相对过程提供了条件, 即粒子在两个时间步之间由一个节点恰好运动到对应的相邻节点, 并在该节点上与其他粒子碰撞, 这使格子 Boltzmann 方法具备了很好的并行特性和较强复杂边界的处理能力.

一个完整的格子 Boltzmann 模型通常由 3 部分组成<sup>[45]</sup>: 格子, 即离散速度模型; 平衡态分布函数; 分布函数的演化方程. 1992 年, Qian 等人提出的 DdQm( $d$  维空间,  $m$  个离散速度)系列模型是格子 Boltzmann 方法的基本模型<sup>[5]</sup>. D2Q9 模型的速度配置如下:

$$\mathbf{e}_\alpha = \begin{cases} (0, 0) & \alpha = 0, \\ c(\cos[(\alpha-1)\pi/2], \sin[(\alpha-1)\pi/2]) & \alpha = 1, 2, 3, 4, \\ \sqrt{2}c(\cos[(\alpha-5)\pi/4], \sin[(\alpha-5)\pi/4]) & \alpha = 5, 6, 7, 8, \end{cases} \quad (22)$$

其中  $c = \delta_x / \delta_t$ ,  $\delta_x$  和  $\delta_t$  分别为网格步长和时间步长, 且通常  $x$  和  $y$  方向的网格步长相同, 即  $\delta_x = \delta_y$ .

(19)式中的权系数  $\omega_\alpha$  是粒子速度的函数, 对于不同速度的粒子具有不同的值. He 和 Luo 把平衡态分布函数的各阶矩看作 Gauss 型积分<sup>[58]</sup>. Qian 等人的 DdQm 系列模型采用如下形式的平衡态分布函数

$$f_\alpha^{\text{eq}} = \rho w_\alpha \left[1 + \frac{\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{u^2}{2c_s^2}\right], \quad (23)$$

其中  $w_0 = 4/9$ ,  $w_1 = 1/9$ ,  $w_2 = 1/36$ ,  $c_s^2 = c^2/3$ .

### 1.3 计算步骤

采用格子 Boltzmann 方法求解物理问题时的基本过程如图 2 所示. 对于一个特定的物理问题, 首先进行辅助步骤:

( ) 基于各种简化假设, 进行物理建模, 确定出计算区域、初始条件以及边界条件等, 并根据物理问题的不同, 选择相应的格子 Boltzmann 模型;

( ) 进行网格划分;

( ) 根据不同格子 Boltzmann 模型, 选择控制方程, 并对其进行离散. 如采用标准格子 Boltzmann 方法对等温不可压缩流动进行模拟, 则离散后的控制方程为 LBGK 方程.

前面这 3 步是在数值模拟之前就进行的. 随后进入数值模拟阶段:

( ) 根据物理问题, 给定所有节点上的宏观参量

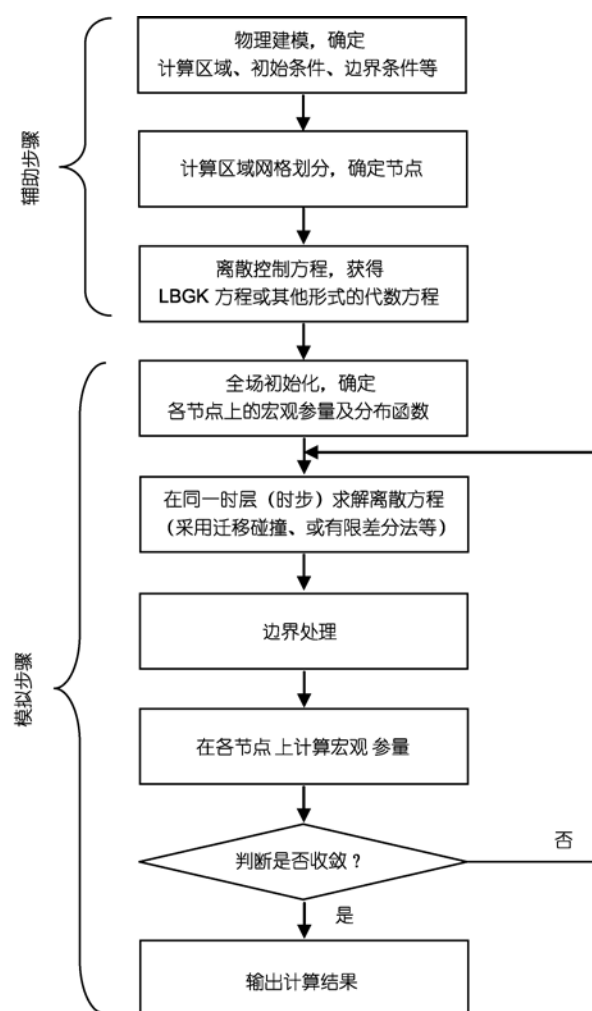


图 2 格子 Boltzmann 方法模拟求解的基本流程

(密度、速度、温度、黏性系数、导热系数等), 并由此计算出所有节点上各个方向的平衡态分布函数, 以此作为计算的初场;

( ) 求解离散后的控制方程, 例如, 采用迁移碰撞规则求解 LBGK 方程;

( ) 根据边界条件, 在相应边界节点上实施边界处理格式;

( ) 基于不同格子 Boltzmann 模型的宏观量的定义法则, 计算各节点上的宏观参量;

( ) 判断计算是否收敛;

( ) 若计算收敛, 则输出计算结果; 否则返回第 4 步, 继续求解, 直到收敛为止.

## 2 相关理论方面的发展

虽然格子 Boltzmann 方法存在多种优点, 但在我们尝试将其应用于工程热物理领域的一些问题求解时, 却发现了一些不足. 如缺乏合适的可压缩模型、热边界处理条件、计算效率低等. 为此, 我们首先在格子 Boltzmann 方法的模型、边界处理以及计算格式等方面开展了一些工作, 提出了可压缩模型、用于微尺度流动、热流动和充分发展流动的边界处理格式以及高效的隐式显示有限差分方法. 以下, 对这些工作做一简要介绍.

### 2.1 模型的发展

( ) 可压缩模型. 与不可压缩流动相比, 流体可压缩性的存在, 使流体运动将变得更加复杂. 在某些情况下, 可能产生物理量的间断面, 这些间断面通常称为激波, 流体质点经过激波时, 熵、密度、压强、温度和速度等都将产生一个急剧(跳跃)的变化, 从而对数值模拟提出很高要求.

从 1998 年 He 等人提出双分布函数格子 Boltzmann 方法以来<sup>[15]</sup>, 双分布函数模型由于其良好的数值稳定性和普朗特数的可调性得到了广泛的应用, 而 2007 年郭照立等提出的总能分布函数模型则使得双分布函数格子 Boltzmann 方法更加完善<sup>[16]</sup>. 鉴于不少可压缩模型在调节比热容比和普朗特数上所存在的困难或不足, 同时考虑到双分布函数方法的优点, 有必要发展能满足完全气体状态方程、用于可压缩流动的双分布函数格子 Boltzmann 模型.

相对于不可压缩模型来说, 要构造可压缩的双分布函数模型需考虑如下几个问题:

1) 保证格子张量至六阶都是各向同性的;

2) 保证完全气体的气体状态方程:  $p = \rho R_g T$ . 在基于 D2Q9 格子的双分布函数模型中,  $p = \rho c^2/3$ , 其中格子速度  $c$  通常为常数, 于是压强  $p$  只与密度有关, 因此模型通常是解耦的;

3) 采用双分布比采用单分布多了一个确定平衡态能量分布函数的过程, 这势必增加建模和编程的工作量. 如果能找到一种合理的关系式, 将平衡态能量分布函数和平衡态密度分布函数联系起来, 则可以方便不少.

从上述问题出发, 我们在文献[24]中, 通过将双分布函数模型和多速度模型结合起来, 提出了满足完全气体状态方程、用于可压缩流动的耦合双分布函数格子 Boltzmann 模型. 模型采用的动理论方程如下:

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + (\mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla) f_\alpha = -\frac{1}{\tau_f} (f_\alpha - f_\alpha^{\text{eq}}), \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial h_\alpha}{\partial t} + (\mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla) h_\alpha = & -\frac{1}{\tau_h} (h_\alpha - h_\alpha^{\text{eq}}) \\ & + \frac{1}{\tau_{hf}} (\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{u}) (f_\alpha - f_\alpha^{\text{eq}}), \end{aligned} \quad (25)$$

其中  $\tau_{hf} = (\tau_f - \tau_h)/(\tau_f \tau_h)$ . 为满足六阶格子张量是各向同性的, 采用 D2Q12 或 D2Q13 格子, 平衡态密度分布函数  $f_\alpha^{\text{eq}}$  的确定过程详见文献[24]. 待  $f_\alpha^{\text{eq}}$  确定之后, 平衡态总能分布函数  $h_\alpha^{\text{eq}}$  计算如下:

$$h_\alpha^{\text{eq}} = [E + (\mathbf{e}_\alpha - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u}] f_\alpha^{\text{eq}} + \varpi_\alpha \frac{p}{\tilde{c}^2} R_g T, \quad (26)$$

其中  $E = (bR_g T + u^2)/2$  为总能,  $b$  用来调节比热容比  $\gamma = (b+2)/b$ ,  $\tilde{c} = \sqrt{R_g T_c}$ ,  $T_c$  为特征温度. 耦合双分布函数的耦合性可作如下理解: 总能分布函数的演化方程中存在的密度分布函数项, 以及平衡态能量分布函数中存在的密度和速度项体现了流场对温度场的影响; 而温度场对流场的影响则是通过气体状态方程  $p = p(\rho, T)$  发生的, 由于平衡态密度分布函数中含有温度或压强项, 于是温度场可以通过气体状态方程影响平衡态密度分布函数, 从而反作用于流场. 从调节比热容比和普朗特数来看, 耦合双分布函数模型在模拟黏性可压缩流动中, 较之传统单分布函数多速度模型有很大的优势. 同时, 通过采用圆函数分布代替 Maxwell 分布作为连续密度分布函数, 可以很好地解决耦合双分布函数格子 Boltzmann 模型模拟高马赫数可压缩流动的问题, 详见文献[24].

( ) 微尺度非平衡态气体模型. 最近几年, 格子 Boltzmann 方法在模拟非平衡态气体流动中的应用得到越来越多的关注<sup>[29~38]</sup>. 由于标准格子 Boltzmann 模型无法正确描述 Knudsen 层内的非线性现象, 为了能够更加准确描述超越 Navier-Stokes 层次的稀薄气体动力学特性, 一些高阶格子 Boltzmann 模型应运而生. 不过目前存在的高阶格子 Boltzmann 模型还不能准确捕捉 Knudsen 层的流动特性, 从而出现了一些相应的修正方法. 包括正规化方法, 还有提出的快速松弛模型来考虑高阶动量项的影响<sup>[59]</sup>, 以及通过耦合 Knudsen 层修正的标准格子 Boltzmann 模型及高阶格子 Boltzmann 模型.

由于分子与壁面的碰撞, 导致气体分子平均自由程在壁面附近降低. 耦合 Knudsen 层修正方法目前主要有两类, 一类是壁面函数方法<sup>[60]</sup>, 另外一类是局部分子平均自由程分布方法<sup>[61]</sup>. 下面分别介绍这两种方法.

#### 1) 壁面函数方法<sup>[60]</sup>

壁面附近的分子平均自由程  $\lambda_e$  可以近似表示为

$$\lambda_e = \frac{\lambda}{1 + 0.7e^{-Cy/\lambda}}, \quad (27)$$

$\lambda_e$  是等效分子平均自由程,  $C$  是一个常数. Knudsen 层外面, 方程(27)中的等效分子平均自由程将趋于中间流场的分子平均自由程  $\lambda$ . 在壁面,  $\lambda_e$  将是  $\lambda$  的一点七分之一. 随着  $Kn$  数增加, Knudsen 层将会发生重叠, 发生重叠的情况的 Knudsen 层影响可以表示如下:

$$\lambda_e = \frac{\lambda}{1 + 0.7(e^{-Cy/\lambda} + e^{-C(L-y)/\lambda})}, \quad (28)$$

其中  $L$  为平板高度. 使用耦合壁面函数方法以后, 能够在较宽的 Knudsen 数范围以内, 正确捕捉 Knudsen 层内的非线性特性.

#### 2) 局部分子平均自由程分布方法<sup>[61]</sup>

壁面函数方法虽然在捕捉 Knudsen 层内的非线性现象方面有很大的突破, 但是壁面函数对不同的几何形状欠缺一定的灵活性, 对复杂壁面构造壁面函数并不方便. 因而, 唐桂华等人又考虑一种局部分子平均自由程分布方法<sup>[61]</sup>, 通过求解某一考虑分子与壁面碰撞的相关函数, 从而获得在壁面影响下的局部分子平均自由程分布. 显然, 壁面几何条件不同, 局部分子平均自由程分布将会有差异. 文献[61]中的 Couette 流动与 Poiseuille 流动模拟结果表明, 这类模型在模拟精度上也有提高.

## 2.2 边界处理的发展

边界处理在格子 Boltzmann 方法中起着重要作用,是格子 Boltzmann 方法实施中非常关键的一项内容,它会对数值计算的精度、计算的稳定性以及计算效率产生很大的影响.在格子 Boltzmann 方法中,描述介观粒子演化的是密度分布函数或其他类型的分布函数(如压力、热力学能、总能分布函数等).

根据边界处理格式的特性对其进行分类,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<sup>[55]</sup>.

启发式格式主要根据边界上诸如周期性、对称性、充分发展等宏观物理特性,通过微观粒子的运动规则直接确定边界节点上的未知分布函数.启发式格式主要包括:周期性边界处理格式,对称边界处理格式,充分发展边界处理格式,以及用于固体壁面处理的反弹格式<sup>[46,62,63]</sup>、镜面反射格式、完全漫反射格式<sup>[64]</sup>、一般漫反射格式等<sup>[31,32]</sup>.

动力学格式主要利用边界上宏观物理量的定义,直接求解边界节点上未知分布函数的方程组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<sup>[65~67]</sup>、非平衡反弹格式<sup>[68]</sup>、反滑移格式<sup>[69~72]</sup>和质量修正格式等<sup>[73]</sup>.

启发式格式和动力学格式可以处理一些特定的边界条件,但局限性较大:一方面,上述格式依赖使用的格子 Boltzmann 模型;另一方面,使用过程中往往会需要对边界处的一些物理性质作假设,因而很难推广到更一般的边界处理上.由于格子 Boltzmann-BGK 方程是速度离散的 Boltzmann-BGK 方程的一种特殊差分形式,因此,可以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 Boltzmann 方法边界处理格式.基于此,不少学者先后提出了多种外推格式.外推格式主要包括:Chen 格式<sup>[74]</sup>、非平衡外推格式等<sup>[75~77]</sup>.

对于物理边界形状复杂或边界运动的问题,边界节点并不完全与空间离散格点相重合.为了计算简单,目前多采用插值格式进行处理.插值格式包括 Filippova 与 Hänel 格式<sup>[78]</sup>及其改进形式<sup>[79,80]</sup>、Bouzidi 格式<sup>[81]</sup>、Lallemand 与 Luo 格式<sup>[82]</sup>、Guo 格式等<sup>[83]</sup>.最近几年,还出现了浸润边界<sup>[84~86]</sup>等其他复杂边界处理格式.

针对工程热物理领域中的应用需要,本课题组先后提出了多种边界处理格式.具体地,提出了适用

于微尺度下的一般漫反射格式<sup>[32]</sup>,适用于充分发展出口边界的质量修正格式,以及用于温度边界的非平衡态外推格式.以下,基于 D2Q9 模型,简要介绍反弹与镜面反射混合格式及质量修正格式.对于多速模型、双分布函数模型等,可采用类似思路构造针对不同离散速度或不同分布函数的相应边界处理格式.

( ) 反弹与镜面反射混合格式.在某些特殊场合,如微通道中的气体流动,既不能用简单的反弹格式处理,也不能用镜面反射格式来描述气体与固体壁面之间的相互作用及动量交换.因此,部分学者认为将反弹和镜面反射结合起来,应该能比较准确地实现真实的气体与固体之间的相互作用<sup>[31,62]</sup>.这样处理的另外一个理由来自稀薄气体动力学研究先驱 Knudsen 在分子层面所做的实验<sup>[87]</sup>.在这个实验中,他让所有分子以一个固定的入射角射向墙面,可是分子在碰撞到墙面后,却任意地朝四面八方散开.如果把把这个现象应用于格子 Boltzmann 方法中,则意味着弹回和镜面反射各占一半.因此,需要定义一个弹回比例系数  $r_b$  ( $0 \leq r_b \leq 1$ ),来表示粒子在与壁面作用时沿原路弹回所占的比例<sup>[31,62]</sup>,则  $r_b=1$  时,表示纯反弹处理; $r_b=0$  时,则表示纯镜面反射处理; $r_b=0.5$  时,则为理想的漫反射.显然, $r_b$  越小,则壁面滑移速度越大;对于任意  $r_b$ ,壁面法向方向的速度分量都为零.

如图 3,对于微通道的下壁面,  $(i, 1)$  为边界节点,

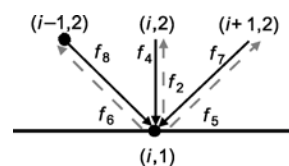


图3 反弹格式示意图

$(i-1, 2)$ ,  $(i, 2)$  和  $(i+1, 2)$  为流体节点.则边界上未知的分布函数可由如下式子获得

$$\begin{cases} f_2(i, 1) = f_4(i, 1), \\ f_5(i, 1) = r_b f_7(i, 1) + (1 - r_b) f_8(i, 1), \\ f_6(i, 1) = r_b f_8(i, 1) + (1 - r_b) f_7(i, 1). \end{cases} \quad (29)$$

( ) 质量修正格式.对于充分发展流动而言,如果边界条件不能使流体在整个流动区域内满足质量守恒要求,则数值结果的精度就会降低,而且数值计算的收敛速度以及稳定性都会受到影响.因而,如果在处理充分发展边界条件时,采取一定的方法,使得流体在整个流动区域内的总体质量守恒要求得到

满足,那么数值结果的精度以及计算过程的收敛状况都会有较大程度的提高.基于此思路,我们提出了格子 Boltzmann 方法处理充分发展流动的质量修正格式<sup>[73]</sup>.质量修正格式属于动力学格式.

所谓质量修正,就是通过计算进口和出口的质量流率,确定一个质量修正系数,以此系数修正出口速度,并用修正后的出口速度更新边界节点上的未知粒子分布函数.具体作法如下:

- 1) 计算进口截面上的质量流率  $\sum_j \rho(1, j) u_x(1, j) \delta_y$  和出口截面上的质量流率  $\sum_j \rho(N_x, j) u_x(N_x - 1, j) \delta_y$ ;
- 2) 进出口质量流率之商即为质量修正系数  $\varsigma$ ;
- 3) 按  $u_x(N_x, j) = \varsigma u_x(N_x - 1, j)$  修正流体在出口边界上的速度;
- 4) 以更新的  $u_x(N_x, j)$ , 重新计算出口边界上的未知粒子分布函数.

我们考核了二维平板通道、后掠台阶充分发展等流动,数值模拟结果表明,该格式数值稳定性较好,计算结果受松弛时间的影响很小,在松弛时间较大或较小的情况下,仍能获得比较稳定和精确的数值结果;即使在稀疏网格下,也能获得精度较高的结果;且计算时间较少,操作简单.

### 2.3 计算格式的发展

格子 Boltzmann 方法在带来种种优点的同时,也带来了它的一些固有的缺点,如计算量大、网格划分必须是对称均匀(正六边形、正方形)、计算精度不可调等,从而使格子 Boltzmann 方法在很多方面的应用受到限制.因而,相关网格技术也是国内外同行的一大研究热点,并出现了插值格子 Boltzmann 方法、泰勒展开和最小二乘格子 Boltzmann 方法、有限差分格子 Boltzmann 方法、有限容积格子 Boltzmann 方法和有限元格子 Boltzmann 方法等.在采用标准各种 Boltzmann 方法进行流动与传热问题的研究时,我们发现已有计算格式的计算效率非常有限.为了拓宽格子 Boltzmann 方法在工程热物理领域的应用,我们在有限差分格子 Boltzmann 方法方面做了一些工作,

简介如下.

由于格子 Boltzmann-BGK 方程本身可以看作是速度离散的 Boltzmann-BGK 方程的一种特殊离散形式,因而,完全可以放弃迁移碰撞过程,直接采用传统的有限差分技术对速度离散的 Boltzmann-BGK 方程进行数值求解.参见方程(18),不考虑外力项,则剩余的各项中,等号左边第一项称为非稳态项,第二项为对流项,等号右边的项为碰撞项、松弛项或者源项.在有限差分格子 Boltzmann 方法中,非稳态项和对流项分别采用时间和空间离散格式来离散,即时间和空间导数分别用相应的差分表达式来近似代替.

在已有的文献中,Reider 和 Sterling 首次将有限差分方法应用于格子 Boltzmann 方法中<sup>[88]</sup>.随后,国内外学者开展了大量工作,但多数有限差分格子 Boltzmann 方法在时间上均采用显式递进<sup>[89~91]</sup>,保留了标准格子 Boltzmann 方法的演化特性,从而可以很方便地处理非稳态问题.另一方面,由于时间步长不能选取过大,因而计算效率较低,尤其对于刚性问题,数值模拟将变得非常困难.因而,类似有限差分方法,采用隐式处理来提高计算效率就显得非常必要.Tölke 等讨论了隐式离散和网格优化技术在有限差分格子 Boltzmann 方法中的应用,并采用隐式迭代求解了高雷诺数下的边界层问题,但其方法仅能应用于稳态问题的模拟<sup>[92]</sup>.

我们将前人的工作<sup>[93,94]</sup>引入到格子 Boltzmann 方程中提出了一种隐式—显式有限差分格子 Boltzmann 方法<sup>[25]</sup>.在这种方法中,时间离散采用隐式—显式 Runge-Kutta 格式,也即对碰撞项和对流项分别采用隐式和显式处理,而空间离散则可以任意选择差分格式.进一步,结合格子 Boltzmann 方法碰撞不变量的特性,隐式处理可以巧妙地消除掉,无需迭代.从而,整个方法同时保持了隐式求解快速,以及显式适合非稳态问题求解的双重优点.

首先考察时间离散.为了将  $t$  时层的分布函数  $f_\alpha^t$  递进到  $t + \delta_t$  时层的  $f_\alpha^{t+\delta_t}$ ,需要分多步来实现.概括起来,如下所示:

$$f_\alpha^{(J)} = \frac{f_\alpha^t - \delta_t \sum_{k=1}^{J-1} \tilde{m}_{jk} (\mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla f_\alpha^{(k)}) + \delta_t \sum_{k=1}^{J-1} m_{jk} \frac{f_\alpha^{\text{eq}(k)} - f_\alpha^{(k)}}{\tau^{(k)}} + \frac{\delta_t}{\tau^{(J)}} m_{JJ} f_\alpha^{\text{eq}(J)}}{1 + \frac{\delta_t}{\tau^{(J)}} m_{JJ}}, \quad (30)$$

$$f_\alpha^{t+\delta_t} = f_\alpha^t - \delta_t \sum_{j=1}^r \tilde{n}_j (\mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla f_\alpha^{(j)}) + \delta_t \sum_{j=1}^r n_j \frac{f_\alpha^{\text{eq}(j)} - f_\alpha^{(j)}}{\tau^{(j)}}, \quad (31)$$

其中,  $r$  代表一个时层所分的步骤,  $J(1 \leq J \leq r)$  为当前的步数;  $f_a^{(k)}$ 、 $f_a^{\text{eq}(k)}$  和  $\tau^{(k)}$  分别表示  $t$  时层第  $k$  步的分布函数、平衡态分布函数以及松弛时间; 矩阵  $\tilde{M} = [\tilde{m}_{jk}]$  (当  $k > J$  时,  $\tilde{m}_{jk} = 0$ ) 和  $M = [m_{jk}]$  (当  $k > J$  时,  $m_{jk} = 0$ ), 以及向量  $\tilde{n} = \{\tilde{n}_1, \dots, \tilde{n}_r\}^T$  和  $n = \{n_1, \dots, n_r\}^T$  则随着所采用的隐式-显式 Runge-Kutta 格式不同而不同<sup>[93,94]</sup>. 具体推导过程, 参见文献[25, 93, 94].

空间离散主要用于处理式(30)以及式(31)中的对流项  $e_a \cdot \nabla f_a$ . 空间离散格式的选取, 对计算精度有很重要的影响. 已有学者指出, 采用有限差分格子 Boltzmann 方法对诸如存在激波等复杂物理问题的求解, 需要采用高精度的空间离散格式<sup>[17,23,94]</sup>. 如文献[25]中, 我们分别采用了一阶迎风格式、二阶 TVD (total variation diminishing) 格式<sup>[95]</sup>和五阶 WENO (weighted essentially non oscillatory) 格式<sup>[96]</sup>.

以上隐式-显式有限差分格子 Boltzmann 方法虽然在每个时层增加了计算步骤, 但思路简单, 在程序稳定的前提下, 时间步长的选取非常灵活, 因而整体上计算效率可以大大提高. 此外, 隐式-显式求解的核心在于时间离散, 与空间离散并不相关, 因而这一思路可以移植到诸如有限容积格子 Boltzmann 方法中.

### 3 工程热物理领域一些问题的应用

如前所述, 与传统的宏观数值方法相比, 具有直观特性的格子 Boltzmann 方法的主要优点是物理图像清晰、边界条件容易处理以及并行性能好等. 因而自诞生之日起, 格子 Boltzmann 方法就得到了国内外学术界的广泛关注<sup>[97]</sup>. 事实上, 在 20 年的发展过程中, 格子 Boltzmann 方法的确已成为一个十分活跃和

极具发展前景的模拟手段, 并迅速在微/纳米尺度流<sup>[44]</sup>、多孔介质流<sup>[33,98]</sup>、多相多质流<sup>[99~105]</sup>、非牛顿流体<sup>[106~108]</sup>、粒子悬浮流<sup>[43]</sup>、湍流<sup>[49,109]</sup>、化学反应流<sup>[110]</sup>、燃烧问题<sup>[111]</sup>、磁流体<sup>[4,112,113]</sup>、晶体生长<sup>[114,115]</sup>等许多领域得到应用.

本课题组在开展格子 Boltzmann 方法相关理论研究的基础上, 还积极将其应用于诸如交变流动、激波模拟、多孔介质流动、热声模拟、微尺度流动等工程热物理领域中的一些问题. 以下对相关工作做一简要介绍.

#### 3.1 交变流动

管道内流动与换热问题, 如具有工程背景的脉动流、交变流等, 目前主要采用传统的计算流体力学或数值传热学方法进行研究, 而采用格子 Boltzmann 方法模拟的文献尚不多见. 其中, 脉动流的速度大小会随着时间呈周期性变化, 而流动方向始终保持不变; 交变流动则指的是流动速度和流动方向都会随时间周期性变化的一种复杂流动. 文献[116,117]对交变流动——Womersley 流进行了模拟, 以此作为对格子 Boltzmann 方法模型或边界条件模拟非稳态问题性能的考核. 但这些文章都只模拟了 Womersley 流的速度场, 并未对温度场进行研究.

我们采用格子 Boltzmann 方法对二维管道内不可压缩流体的这种交变流动进行了模拟<sup>[118]</sup>, 研究了其速度场、温度场的分布情况, 获得了速度和温度分布的环形效应, 以及速度反转等现象, 分析了压力交变频率和幅值对流动与换热的影响. 图 4 为管道中间截面上不同瞬时的速度分布. 当频率较高 (Womersley 数  $W = 10.854$ ) 时, 速度呈环形分布, 在管道的绝大部分区域速度分布相当平坦, 而在靠近壁面附近出现

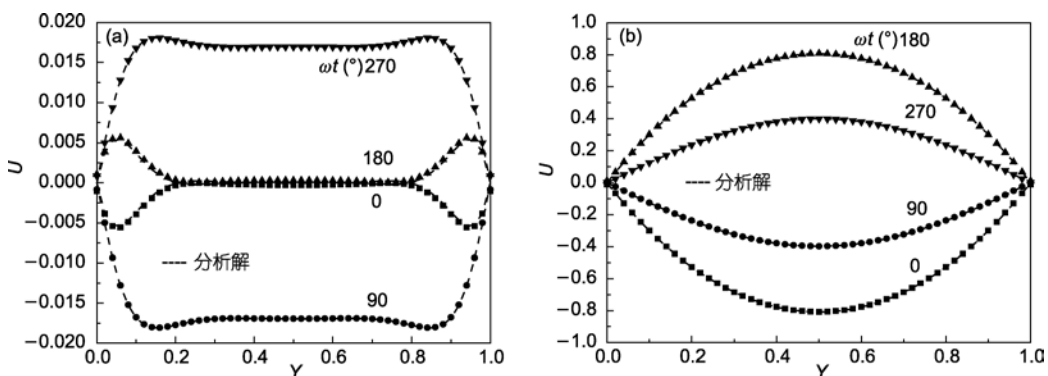


图 4 管道中间截面在不同频率下的瞬时无量纲速度分布( $x/L_x=0.5$ ,  $A=25$ )

(a)  $W = 10.854$ ; (b)  $W = 1.085$

了速度的峰值,且靠近壁面处速度变化非常大.部分时刻,还会出现速度反转效应,即壁面附近与通道中心区域的流动方向相反.当频率较低( $W=1.085$ )时,速度的瞬时分布近似于抛物线,管道中心速度总大于壁面附近速度.且周期越大,速度交变的幅度也越大.两种周期下模拟的结果与分析解<sup>[119]</sup>均吻合很好.图5为管道入口附近截面不同周期下的瞬时温度分布.由图可见,随着频率的降低,温度的波动越剧烈.且温度分布同样呈现环形分布.另外,我们还分别采用不可压缩以及可压缩模型对声学谐振管内的交变流动进行了模拟.这些工作扩充了格子Boltzmann方法的应用领域.

### 3.2 激波模拟

模拟激波,首先要考虑流体的可压缩性,其次要考虑到流动是超音速的.反映在格子 Boltzmann 方法中,则是我们首先要构造用于可压缩 Euler 或 Navier-Stokes 方程组的模型,接着应寻找能适合高马赫数流动的模型.在文献[24]中,我们采用笔者等所构造的用于高马赫数可压缩流动的耦合双分布函数模型对 Sod 问题和双马赫反射问题进行了数值模拟.

Sod 问题是著名的一维激波管非定常流动,它包含了接触间断、激波、膨胀扇区等典型的流动现象.它的初始条件为

$$\begin{cases} (\rho/\rho_0, u_x/u_0, p/p_0) = (1, 0, 1), & 0 < x/L_0 \leq 1/2, \\ (\rho/\rho_0, u_x/u_0, p/p_0) = (0.125, 0, 0.1), & 1/2 < x/L_0 < 1, \end{cases} \quad (32)$$

其中  $L_0$  为激波管的长度,  $\rho_0$ ,  $u_0 = \sqrt{R_g T_0}$ ,  $p_0 = \rho_0 R_g T_0$  和  $T_0$  分别为参考密度、参考速度、参考压强和参考温度.取  $t_0 = L_0/u_0$  为系统的特征时间.对含有激波的可压缩问题,为了捕捉激波或强间断,我们基于耦合

的双分布函数模型,采用了有限差分格子 Boltzmann 方法.

图6给出Sod问题的模拟结果.实线为精确解,实心圆点代表模拟结果.从图中可以看出,除温度分布有稍许瑕疵外,其他宏观量的计算结果几乎与精确解完全吻合.

双马赫反射问题是描述一强激波入射在与平面成 $30^\circ$ 角的斜坡上发生的变化,来流是马赫数为10的强激波,它通常用来考核模型或程序对二维强激波可压缩流动的适用性.为使试验问题尽可能简单,通常使入射激波倾斜,其物理模型如图7所示.模拟中,采用的时间离散格式为二阶显式-隐式Runge-Kutta格式,采用的空间离散格式为TVD格式<sup>[95]</sup>.图8给出了  $t = 860\delta_t$ 时刻的等密度线和等压强线,这一结果与相关文献的实验和数值结果吻合良好<sup>[19,120]</sup>.

### 3.3 多孔介质流动

多孔介质内的流动与换热是许多领域都涉及到的基础问题.多孔介质内的流动涉及3个尺度,即孔隙尺度、代表单元尺度和宏观区域尺度<sup>[53,121]</sup>.由于格子 Boltzmann 方法边界条件易于实施,在模拟具有复杂几何构型的问题时具有较大的优势,因而这个方向的发展非常迅速.目前,采用格子 Boltzmann 方法对多孔介质流进行模拟主要在孔隙尺度和代表单元尺度上进行.在孔隙尺度上,可以直接使用格子 Boltzmann 方法描述孔隙内的流体流动,多孔介质则当作固体壁面,流体与介质的相互作用使用边界处理格式来描述<sup>[33]</sup>.在代表单元尺度上,格子 Boltzmann 方法则不需要详细的多孔介质结构信息,而是直接对代表单元尺度上的平均流动进行模拟,介质对流动的影响

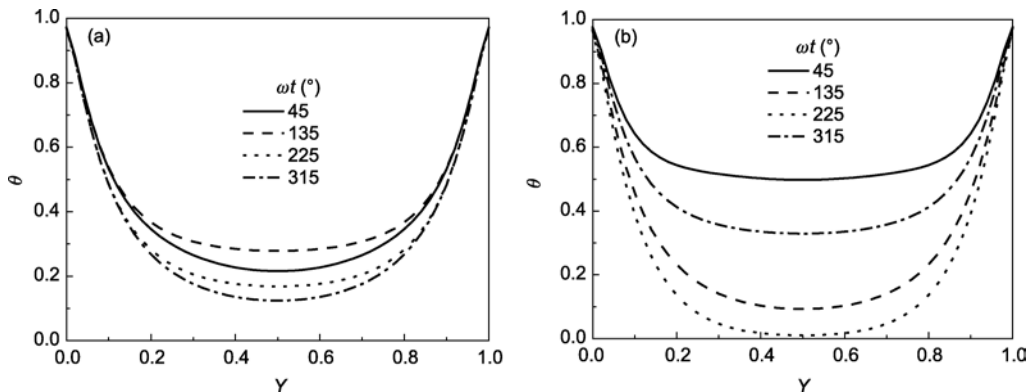


图5 管道入口附近截面在不同频率下的瞬时无量纲温度分布( $x/L_x=0.05$ ,  $A=100$ )

(a)  $W=3.432$ ; (b)  $W=1.085$

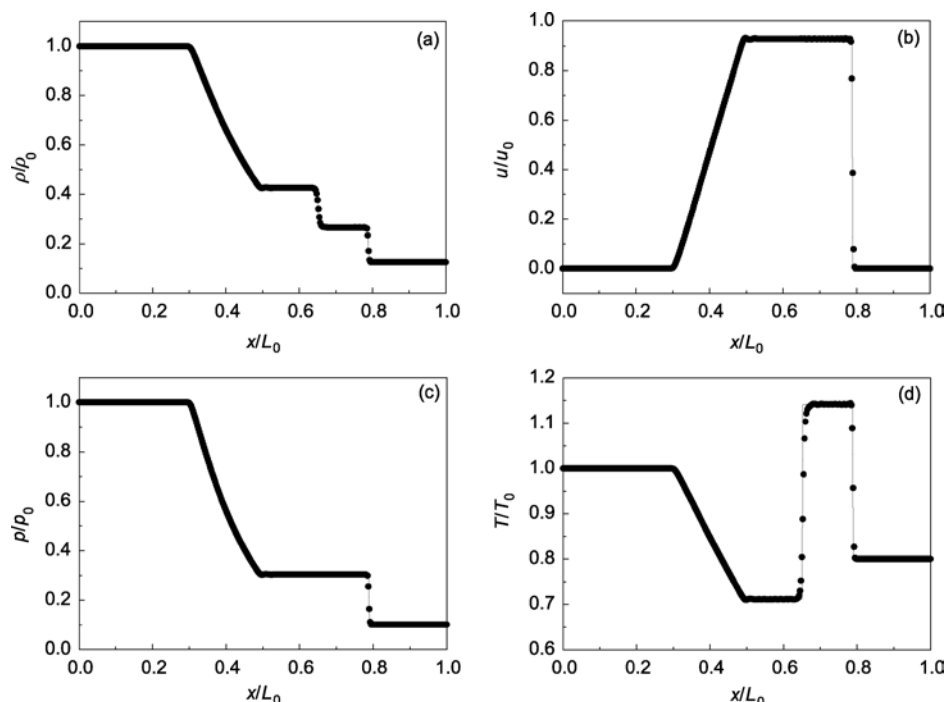


图 6 Sod 问题  $t = 0.1644t_0$  时刻数值解与理论解的对比

(a) 密度; (b) 速度; (c) 压强; (d) 温度

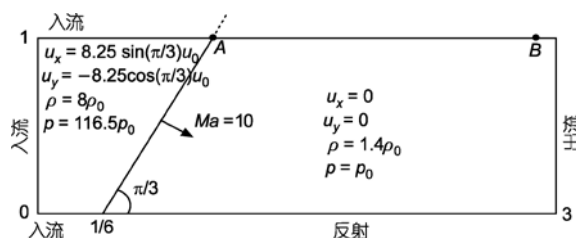


图 7 双马赫反射问题的物理模型

通过某些模型描述<sup>[98]</sup>.

我们计算了结构相对简单的多孔介质结构内的流动情况<sup>[33]</sup>, 结果表明 Knudsen 数对于气体渗透有很重要的影响(如图 9), 并且渗透率随着 Knudsen 数的增大而增大. 数值解与实验结果符合较好. 通过考虑可压缩性和稀薄性, 提出了一种基于 Ergun 和 Carman-Kozeny 方程的新的压降模型. 引入一阶

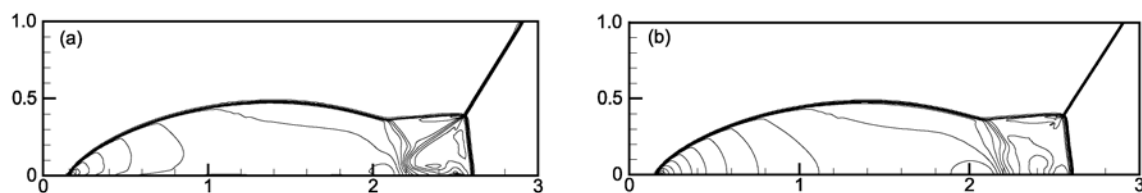


图 8 双马赫反射密度和压强等值线( $t = 860\delta_t$ )

(a) 密度; (b) 压强

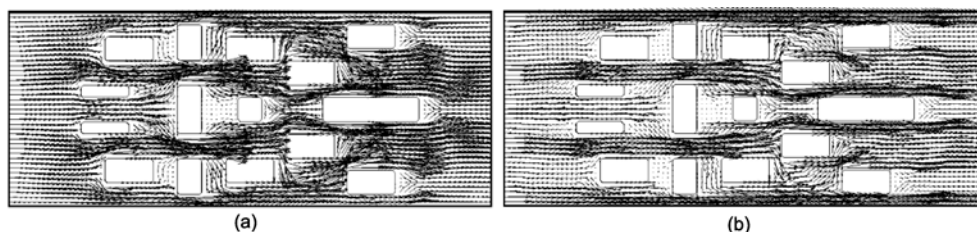


图 9 不同 Knudsen 数情况下多孔结构中的速度矢量分布

(a)  $Kn = 0.055$ ; (b)  $Kn = 0.16$

Knudsen 数修正后, Ergun 方程可适用中等程度的 Knudsen 数. 而对于高 Knudsen 数, 二阶 Knudsen 数的作用不可忽略. 低孔隙率时, 稀薄性对于气体的渗透作用的影响更为明显. 在处理微尺度多孔介质流动时, 基于宏观变量连续性假设的传统计算方法或者不再适用或者需要加以修正. 而此新模型在处理多孔介质内复杂气体流动现象时显示出较高的精度和效率.

### 3.4 热声模拟

热声热机中的物理过程可以看作低马赫数 ( $Ma \sim 10^{-2}$ ) 下的可压缩流动, 这类流动集多种复杂性 (低  $Ma$  流动 + 可压缩流动 + 交变流动 + 混合型(双曲型与椭圆型)) 于一身, 对其基本规律的探索, 不同于通常流体力学中遇到的低马赫数流动常用的处理方法. 鉴于格子 Boltzmann 方法的优势, 我们提出了采用格子 Boltzmann 方法开展热声研究的思路.

我们首先对平面声波衰减过程进行了模拟<sup>[122]</sup>, 证实了格子 Boltzmann 方法对声学问题模拟的能力. 随后, 基于前期的理论工作, 对热声谐振管<sup>[28,77]</sup>以及热声起振进行了模拟. 以下介绍关于热声谐振管的模拟结果.

谐振管是热声热机的关键部件, 它里面的问题是一个集热力学、传热学、流体力学与声学的交叉问题, 且由于激波的存在, 对这一问题进行理论分析非常困难. 一种行之有效的方法就是进行数值研究. 由于问题的复杂性, 目前对热声谐振管进行数值研究的文献仍然较少, 而且多数局限于求解一维波动方程. 我们在文献[28,77]中讨论了采用格子 Boltzmann 方法对谐振管进行模拟的可行性, 并分别采用不可

压缩的标准格子 Boltzmann 方法<sup>[77]</sup>以及可压缩的有限差分格子 Boltzmann 方法<sup>[28]</sup>对这一问题进行了研究. 由于谐振管内流动的本质是可压缩的, 采用不可压缩格子 Boltzmann 模型进行研究具有先天的不足; 随着格子 Boltzmann 方法理论的发展, 尤其一些可压缩模型的提出, 使得我们深入开展谐振管的研究工作成为可能. 此处介绍采用可压缩的有限差分格子 Boltzmann 方法对谐振管的模拟研究.

图10给出了谐振管 $x$ 方向上不同位置处的瞬时轴向速度、压力分布. 活塞频率仍然为一次谐振频率. 模拟可以清晰地捕捉到管内弱激波的传播. 图11给出了一次谐振频率时谐振管封闭段附近的压力信号的快速傅里叶变化结果. 由图可知, 压力信号主要集中在一次频率下, 但二次以及更高次成分仍然明显. 这些非线性效应的存在, 正是谐振管理论分析和数值研究的难点. 更多细节, 详见文献[28,77].

### 3.5 微尺度非平衡态气体模拟

微尺度非平衡态气体具有很多重要的应用场合, 下面以两个典型应用问题为例, 说明格子 Boltzmann 方法的应用.

( ) 微尺度多孔介质内非平衡态气体传输特性模拟<sup>[33,34]</sup>. 下面采用文献[31]中所提出的格子 Boltzmann 模型, 壁面采用结合反弹与镜面反射边界条件, 分别对二维和三维多孔介质结构进行模拟. 三维多孔结构示意图如图12所示, 其渗透率模拟结果如图13所示, 显示了渗透气体不同, 导致 Knudsen 数不一样, 滑移程度不一样, 最终导致渗透率不一样. 图14表示在文献提出的关联式基础上, 综合考虑可压缩性以及气体稀薄性效应的修正, 可以获得很好

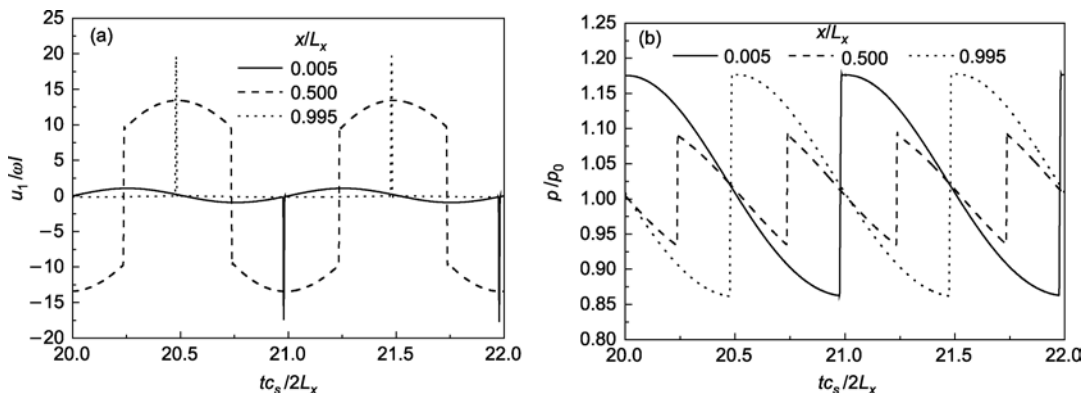


图 10 谐振管  $x$  方向上不同位置处的瞬时物理量分布

(a) 轴向速度分布; (b) 压力分布

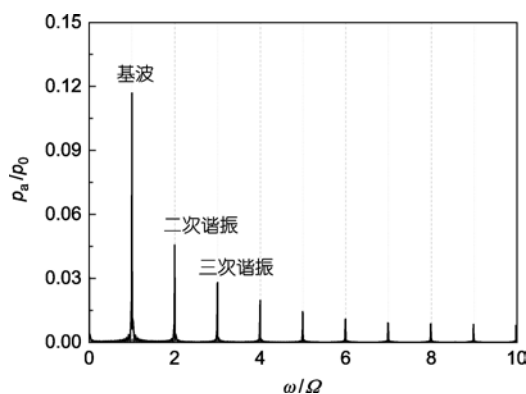


图 11 压力信号的快速傅里叶变化

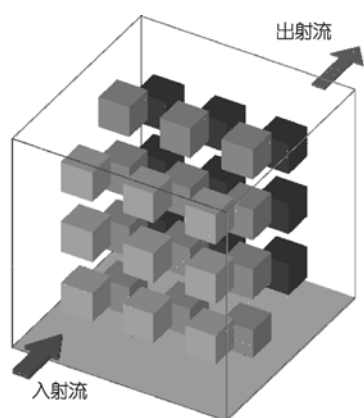


图 12 三维多孔结构示意图

的预测结果, 其中图上的  $K_g$  为多孔介质渗透率,  $\varepsilon$  为多孔介质孔隙率,  $D_p$  为特征尺度,  $L$  为模拟多孔介质长度.

( ) 微尺度非平衡态气体振荡流动模拟<sup>[38]</sup>. 非

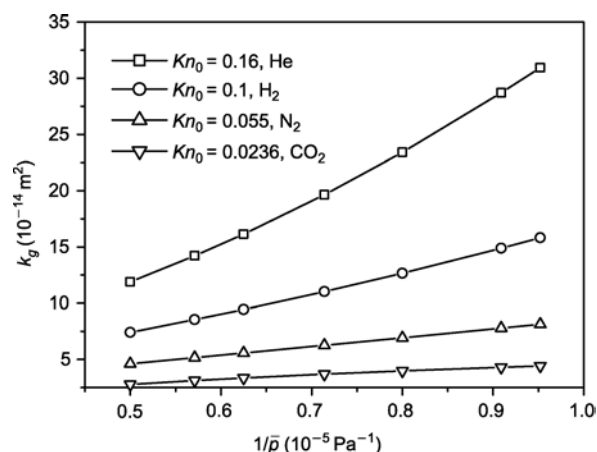


图 13 三维多孔结构格子 Boltzmann 方法模拟结果的渗透率分布

平衡态气体振荡流在很多微结构中有重要应用. 在这里通过耦合局部分子平均自由程的思想, 采用 D2Q13 模型对平板间的振荡 Couette 流动以及平板上半无限大空间的 Stokes 第二问题流动进行了模拟. 图 15 表示振荡流格子 Boltzmann 方法模拟结果与 DSMC 模拟结果比较, 符合很好. 图 16 表示振荡流速度在一个周期内的变化情况, 图 17 表示壁面上的最大切应力分布, 与 DSMC 结果符合较好. 图 18 表示耦合考虑振荡 Couette 流动与 Stokes 第二问题流动时的速度分布, 当  $Kn$  较小时, 平板两侧的速度分布一致, 但是当  $Kn$  较大时, 由于两侧的几何状况不同, 局部分子平均自由程并不相同, 导致平板上下两侧的速度分布的差异, 这在以前的研究文献中都忽略了. 其中图上的  $\beta = \sqrt{\omega L^2/\nu_0}$ ,  $\omega$  为上平板振荡频率,  $L$  为平板高度,

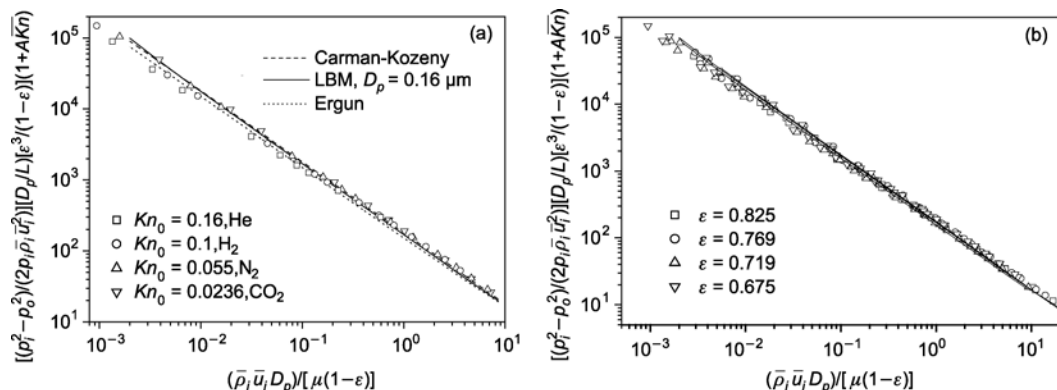


图 14 考虑可压缩性以及气体稀薄性的压力降

(a)  $\text{CO}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{H}_2$ , 及  $\text{He}$  在  $\varepsilon=0.675$  多孔结构中的压力降; (b)  $\text{CO}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{H}_2$ , 及  $\text{He}$  在 4 种多孔结构  $\varepsilon=0.825, 0.769, 0.719, 0.675$  的压力降, 实线表示  $Kn_0=0.001$  近似连续流

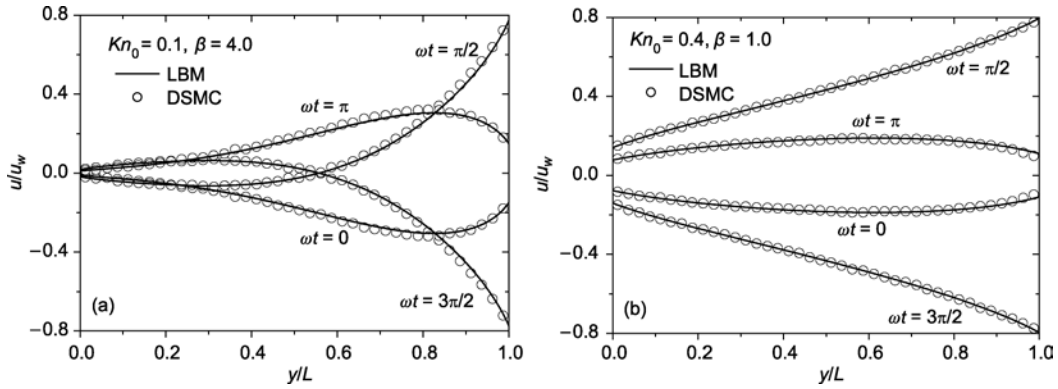


图 15 振荡 Couette 流动格子 Boltzmann 方法模拟结果与 DSMC 模拟结果比较

(a)  $Kn_0 = 0.1, \beta = 4$ ; (b)  $Kn_0 = 0.4, \beta = 1$

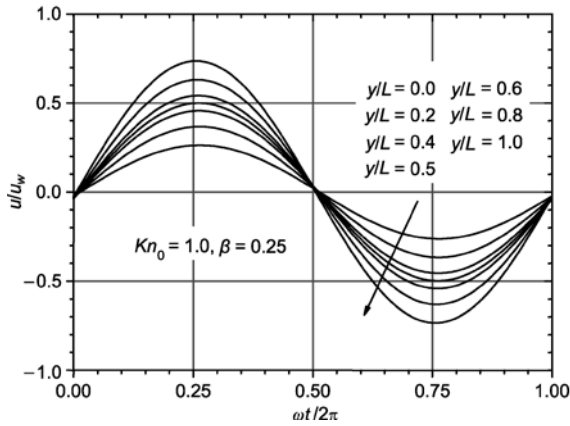


图 16 振荡 Couette 流动速度分布在一个周期内的振荡变化

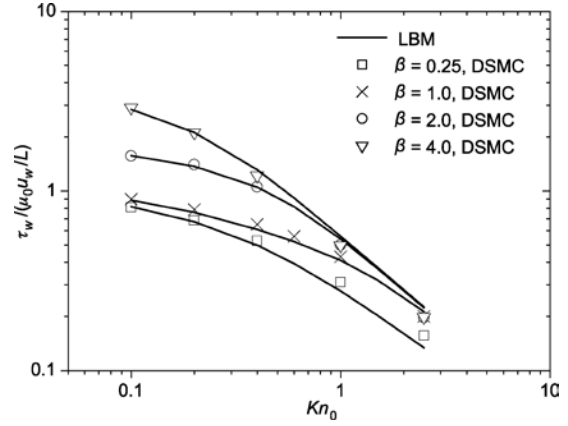


图 17 振荡 Couette 流动壁面最大切应力分布  
格子 Boltzmann 方法结果与 DSMC 结果比较

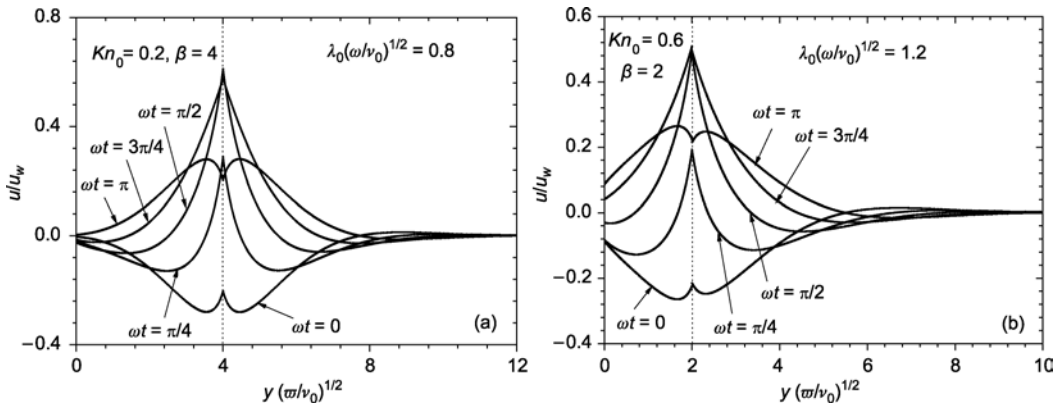


图 18 耦合振荡 Couette 流动与 Stokes 第二问题流动的格子 Boltzmann 方法模拟结果

(a)  $Kn_0 = 0.2, \beta = 4, \lambda_0 \sqrt{\omega/\nu_0} = 0.8$ ; (b)  $Kn_0 = 0.6, \beta = 2, \lambda_0 \sqrt{\omega/\nu_0} = 0.8$

$\nu_0$  为平衡态分布时的运动黏度。

#### 4 结论及展望

格子 Boltzmann 方法是最近 20 年来发展起来的

一种新兴的介观数值模拟方法。与传统方法相比，格子 Boltzmann 方法具有多种优点，因而受到国内外学者的广泛关注，并迅速在多孔介质流、多相多组分流、非牛顿流体、粒子悬浮流、湍流、化学反应流、

燃烧问题、磁流体、微/纳米尺度流等许多领域得到应用. 为了将其应用于工程热物理学科一些问题的研究, 最近几年, 本课题组成员在格子 Boltzmann 方法的理论与应用等方面开展了一点工作. 基于这些工作, 本文首先介绍了格子 Boltzmann 方法的统计力学基础, 最基础的 DdQm 系列模型, 以及数值实施时的编程思路. 随后, 对格子 Boltzmann 方法在工程热物理领域理论与应用方面的进展, 做了简要回顾, 具体来说:

在理论方面: ( ) 介绍了一种构造可压缩模型的方法, 基于这一思路, 提出了多个耦合双分布函数可压缩模型, 这是格子 Boltzmann 方法中首次同时实现可压缩, 以及比热比和普朗特数可调; ( ) 介绍了一种基于局部分子平均自由程分布、用于非平衡态气体流动的格子 Boltzmann 方法; ( ) 提出了适用于微尺度下的反弹与镜面反射格式, 适用于充分发展出口边界的质量修正格式, 以及适于热边界条件的非平衡态外推格式, 并对前两种格式做了介绍; ( ) 将隐式-显式 Runge-Kutta 格式引入到有限差分格子 Boltzmann 方法中, 结合碰撞不变量的特性, 隐式处理可以巧妙地消除掉, 无需迭代, 可以有效地提高计算速率.

在应用方面: ( ) 采用格子 Boltzmann 方法模拟了交变流动与换热问题, 研究了其速度场、温度场的

分布情况, 获得了速度和温度分布的环形效应, 以及速度反转等现象, 分析了压力交变频率和幅值对流动与换热的影响; ( ) 采用所提出的可压缩模型, 对一维激波管非定常流动和来流马赫数为 10 的二维双马赫反射问题进行了模拟, 较好地描述了接触间断、激波、膨胀扇区等流动现象; ( ) 采用所提出的压降模型, 计算了多孔介质结构内的流动情况, 模型显示出很高的精确度和效率, 模拟结果表明 Knudsen 数对于气体渗透有很重要的影响, 并且渗透率随着 Knudsen 数的增大而增大; ( ) 对多种声学问题进行了模拟, 研究了热声谐振管内弱激波的传播过程, 结果表明格子 Boltzmann 方法可以很好地描述热声中的非线性问题; ( ) 介绍了用格子 Boltzmann 模型模拟了多孔介质内的非平衡态气体传输特性以及非平衡态气体振荡流动.

经过国内外众多学者的努力, 格子 Boltzmann 方法的理论正逐渐发展, 但距离最终的学科体系完善还有一个相当长的过程. 目前, 格子 Boltzmann 方法仅用于一些较简单的物理模型的模拟. 对于工程热物理领域的其他复杂问题, 采用格子 Boltzmann 方法模拟还有较大的困难. 此外, 格子 Boltzmann 方法的工业应用也鲜见报道. 如何将其应用于复杂系统以及更广泛的工业实际应用中, 是今后可能的发展方向.

致谢 作者特别感谢陶文铨院士对本文工作所给予的支持.

## 参考文献

- McNamara G R, Zanetti G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice automata. *Phys Rev Lett*, 1988, 61: 2332—2335[doi]
- Higuera F J, Jimenez J. Boltzmann approach to lattice gas simulation. *Eurphys Lett*, 1989, 9: 663—668[doi]
- Higuera F J, Succi S, Benzi R. Lattice gas dynamics with enhanced collisions. *Eurphys Lett*, 1989, 9: 345—349[doi]
- Chen S, Chen H D, Martinez D, et al. Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics. *Phys Rev Lett*, 1991, 67: 3776—3779[doi]
- Qian Y H, d'Humieres D, Lallemand P. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation. *Eurphys Lett*, 1992, 17: 479—484[doi]
- Zou Q, Hou S, Chen S, et al. An improved incompressible lattice Boltzmann model for time-independent flows. *J Stat Phys*, 1995, 81: 35—48[doi]
- Lin Z, Fang H, Tao R. Improved lattice Boltzmann model for incompressible two-dimensional steady flows. *Phys Rev*, 1996, 54: 6323—6330
- Chen Y, Ohashi H. Lattice-BGK methods for simulating incompressible fluid flows. *Int J Mod Phys C*, 1997, 8: 793—803[doi]
- Guo Z L, Shi B C, Wang N C. Lattice BGK model for incompressible Navier-Stokes equation. *J Comput Phys*, 2000, 165: 288—306[doi]
- Bartoloni A, Battista C, Cabasino S, et al. LBE simulations of Rayleigh-Bénard convection on the APE100 parallel processor. *Int J*

- Mod Phys C, 1993, 4: 993—1006[[doi](#)]
- 11 McNamara G, Alder B. Analysis of the lattice Boltzmann thermodynamics. Physica A, 1993, 194: 218—228[[doi](#)]
  - 12 Chen Y, Ohashi H, Akiyama M. Thermal lattice Bhatnagar-Gross-Krook model without nonlinear deviations in macrodynamic equations. Phys Rev E, 1994, 50: 2776—2783[[doi](#)]
  - 13 McNamara G, Alder B. A hydrodynamically correct thermal lattice Boltzmann model. J Stat Phys, 1997, 87: 1111—1121[[doi](#)]
  - 14 He X Y, Chen S Y, Doolen G D. A novel thermal model for the lattice Boltzmann method in incompressible limit. J Comput Phys, 1998, 146: 282—300[[doi](#)]
  - 15 Guo Z, Zheng C, Shi B. Thermal lattice Boltzmann equation for low Mach number flows: Decoupling model. Phys Rev E, 2007, 75: 036704[[doi](#)]
  - 16 Li Q, He Y L, Tang G H, et al. Lattice-Boltzmann model for axisymmetric thermal flows. Phys Rev E, 2009, In Press
  - 17 Yan G, Chen Y, Hu S. Simple lattice Boltzmann model for simulating flows with shock wave. Phys Rev E, 1999, 59: 454—459[[doi](#)]
  - 18 Sun C. Adaptive lattice Boltzmann model for compressible flows: Viscous and conductive properties. Phys Rev E, 2000, 61: 2645—2652[[doi](#)]
  - 19 Sun C H. Simulations of compressible flows with strong shocks by adaptive lattice Boltzmann model. J Comput Phys, 2000, 161: 70—84[[doi](#)]
  - 20 Shi W P, Shyy W, Mei R W. Finite-difference-based lattice Boltzmann method for inviscid compressible flows. Numer Heat Transfer: Part B, 2001, 40: 1—21
  - 21 Kataoka T, Tsutahara M. Lattice Boltzmann method for the compressible Euler equations. Phys Rev E, 2004, 69: 056702[[doi](#)]
  - 22 Kataoka T, Tsutahara M. Lattice Boltzmann model for the compressible Navier-Stokes equations with flexible specific-heat ratio. Phys Rev E, 2004, 69: 035701[[doi](#)]
  - 23 Qu K, Shu C, Chew Y T. Alternative method to construct equilibrium distribution functions in lattice-Boltzmann method simulation of inviscid compressible flows at high Mach number. Phys Rev E, 2007, 75: 036706[[doi](#)]
  - 24 Li Q, He Y L, Wang Y, et al. Coupled double-distribution-function lattice Boltzmann method for the compressible Navier-Stokes equations. Phys Rev E, 2007, 76: 056705[[doi](#)]
  - 25 Wang Y, He Y L, Zhao T S, et al. Implicit-explicit finite-difference lattice boltzmann method for compressible flows. Int J Mod Phys C, 2007, 18: 1961—1983[[doi](#)]
  - 26 Li Q, He Y L, Gao Y J. Implementation of finite-difference lattice Boltzmann method on general body-fitted curvilinear coordinates. Int J Mod Phys C, 2008, 19: 1581—1595[[doi](#)]
  - 27 Li Q, He Y L, Wang Y, et al. Three-dimensional non-free-parameter lattice-Boltzmann model and its application to inviscid compressible flows. Phys Lett A, 2009, 373: 2101—2108[[doi](#)]
  - 28 Wang Y, He Y L, Huang J, et al. Implicit-explicit finite-difference lattice Boltzmann method with viscid compressible model for gas oscillating patterns in a resonator. Int J Numer Methods Fluids, 2009, 59: 853—872[[doi](#)]
  - 29 Lim C Y, Shu C, Niu X D, et al. Application of lattice Boltzmann method to simulate microchannel flows. Phys Fluids, 2002, 14: 2299—2308[[doi](#)]
  - 30 Nie X B, Doolen G D, Chen S Y. Lattice-Boltzmann Simulations of Fluid Flows in MEMS. New Mexico: Kluwer Academic/Plenum Publisher, 2002. 279—289
  - 31 Tang G H, Tao W Q, He Y L. Lattice Boltzmann method for simulating gas flow in microchannels. Int J Mod Phys C, 2004, 15: 335—347[[doi](#)]
  - 32 Tang G, Tao W, He Y. Lattice Boltzmann method for gaseous microflows using kinetic theory boundary conditions. Phys Fluids, 2005, 17: 058101[[doi](#)]
  - 33 Tang G H, Tao W Q, He Y L. Gas slippage effect on microscale porous flow using the lattice Boltzmann method. Phys Rev E, 2005, 72: 056301[[doi](#)]
  - 34 Tang G H, Tao W Q, He Y L. Three-dimensional lattice Boltzmann model for gaseous flow in rectangular microducts and microscale porous media. J Appl Phys, 2005, 97: 104918[[doi](#)]
  - 35 Guo Z L, Zhao T S, Shi Y. Physical symmetry, spatial accuracy, and relaxation time of the lattice Boltzmann equation for microgas flows. J Appl Phys, 2006, 99: 8
  - 36 Guo Z L, Shi B C, Zheng C G. An extended Navier-Stokes formulation for gas flows in the Knudsen layer near a wall. Euorphys Lett, 2007, 80: 6
  - 37 Guo Z L, Zheng C G, Shi B C. Lattice Boltzmann equation with multiple effective relaxation times for gaseous microscale flow. Phys

- Rev E, 2008, 77: 12
- 38 Tang G H, Gu X J, Barber R W, et al. Lattice Boltzmann simulation of nonequilibrium effects in oscillatory gas flow. *Phys Rev E*, 2008, 78: 026706[[doi](#)]
- 39 Benzi R, Succi S, Vergassola M. The lattice Boltzmann equation: Theory and applications. *Phys Rep*, 1992, 222: 145—197[[doi](#)]
- 40 Qian Y H, Succi S, Orszag S A. Recent advances in lattice Boltzmann computing. *Annu Rev Comput Phys*, 1995, 3: 195—242
- 41 Chen S, Doolen G D. Lattice Boltzmann method for fluid flows. *Annu Rev Fluid Mech*, 1998, 30: 329—364[[doi](#)]
- 42 Nourgaliev R R, Dinh T N, Theofanous T G, et al. The lattice Boltzmann equation method: Theoretical interpretation, numerics and implications. *Int J Multiphase Flow*, 2003, 29: 117—169[[doi](#)]
- 43 Ladd A J C, Verberg R. Lattice-Boltzmann simulations of particle-fluid suspensions. *J Stat Phys*, 2001, 104: 1191—1251[[doi](#)]
- 44 Raabe D. Overview of the lattice Boltzmann method for nano- and microscale fluid dynamics in materials science and engineering. *Model Simul Mater Sci*, 2004, 12: 13—46[[doi](#)]
- 45 Wolf-Gladrow D A. *Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models: An Introduction*. Berlin: Springer, 2000
- 46 Succi S. *Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*. Oxford: Clarendon Press, 2001
- 47 Sukop M C, D T Thorne J. *Lattice Boltzmann Modeling: An introduction for Geoscientists and Engineers*. Berlin: Springer, 2005
- 48 Tsutahara M, Takada N, Kataoka T. *Lattice Gas and Lattice Boltzmann Methods: New Methods of Computational Fluid Dynamics*. Tokyo: Corona Publishing Co. Ltd, 1999
- 49 Chen H D, Kandasamy S, Orszag S, et al. Extended Boltzmann kinetic equation for turbulent flows. *Science*, 2003, 301: 633—636[[doi](#)]
- 50 朱照宣. 点格自动机. *力学与实践*, 1987, 9: 1—6
- 51 胡守信. 线性点格自动机. *力学与实践*, 1988, 10: 34—37
- 52 钱跃斌, d'Humières D, Pomeau Y, 等. 格子气流体力学及其最新进展. *力学与实践*, 1990, 12: 7—16
- 53 郭照立, 郑楚光, 李青, 等. *流体力学的格子 Boltzmann 方法*. 武汉: 湖北科学技术出版社, 2002
- 54 郭照立, 郑楚光. *格子 Boltzmann 方法的原理及应用*. 北京: 科学出版社, 2009
- 55 何雅玲, 王勇, 李庆. *格子 Boltzmann 方法的理论及应用*. 北京: 科学出版社, 2009
- 56 应纯同. *气体输运理论及应用*. 北京: 清华大学出版社, 1990
- 57 Bhatnagar P L, Gross E P, Krook M. A model for collision processes in gases. I. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Phys Rev*, 1954, 94: 511—525[[doi](#)]
- 58 He X Y, Luo L S. Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *Phys Rev E*, 1997, 56: 6811—6817[[doi](#)]
- 59 Szalmas L. Knudsen layer theory for high-order lattice Boltzmann models. *Euophys Lett*, 2007, 80: 24003[[doi](#)]
- 60 Zhang Y H, Gu X J, Barber R W, et al. Capturing Knudsen layer phenomena using a lattice Boltzmann model. *Phys Rev E*, 2006, 74: 7
- 61 Tang G H, Zhang Y H, Gu X J, et al. Lattice Boltzmann modelling Knudsen layer effect in non-equilibrium flows. *Euophys Lett*, 2008, 83: 40008[[doi](#)]
- 62 Cornubert R. A Knudsen layer theory lattice gases. *Physica D*, 1991, 47: 241—259[[doi](#)]
- 63 Ziegler D P. Boundary conditions for lattice Boltzmann simulations. *J Stat Phys*, 1993, 71: 1171—1177[[doi](#)]
- 64 Ansumali S, Karlin I. Kinetic boundary conditions in the lattice Boltzmann method. *Phys Rev E*, 2002, 66: 026311 [[doi](#)]
- 65 Noble D R, Chen S Y, Georgiadis J G. A consistent hydrodynamic boundary condition for the lattice Boltzmann method. *Phys Fluids*, 1995, 7: 203—209[[doi](#)]
- 66 Noble D R, Georgiadis J G, Buckius R O. Direct assessment of lattice Boltzmann hydrodynamics and boundary conditions for recirculating flows. *J Stat Phys*, 1995, 81: 17—33[[doi](#)]
- 67 Maier R S, Bernard R S, Grunau D W. Boundary conditions for the lattice Boltzmann method. *Phys Fluids*, 1996, 8: 1788—1801[[doi](#)]
- 68 Zou Q S, He X Y. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. *Phys Fluids*, 1997, 9: 1591—1598[[doi](#)]
- 69 Inamuro T, Yoshino M, Ogino F. A non-slip boundary condition for lattice Boltzmann simulations. *Phys Fluids*, 1995, 7: 2928—2930[[doi](#)]
- 70 He X Y, Chen S Y, Doolen G D. A novel thermal model for the lattice Boltzmann method in incompressible limit. *J Comput Phys*, 1998, 146: 282—300[[doi](#)]

- 71 D’Orazio A, Succi S, Arrighetti C. Lattice Boltzmann simulation of open flows with heat transfer. *Phys Fluids*, 2003, 15: 2778—2781[[doi](#)]
- 72 D’Orazio A, Succi S. Simulating two-dimensional thermal channel flows by means of a lattice Boltzmann method with new boundary conditions. *Future Generat Comput Syst*, 2004, 20: 935—944[[doi](#)]
- 73 Tong C Q, He Y L, Tang G H, et al. Mass modified outlet boundary for a fully developed flow in the lattice Boltzmann equation. *Int J Mod Phys C*, 2007, 18: 1209—1221[[doi](#)]
- 74 Chen S Y, Martinez D, Mei R W. On boundary conditions in lattice Boltzmann methods. *Phys Fluids*, 1996, 8: 2257—2536[[doi](#)]
- 75 Guo Z L, Zheng C G, Shi B C. Non-equilibrium extrapolation method for velocity and boundary conditions in the lattice Boltzmann method. *Chin Phys*, 2002, 11: 0366—0374[[doi](#)]
- 76 Tang G H, Tao W Q, He Y L. Thermal boundary condition for the thermal lattice Boltzmann equation. *Phys Rev E*, 2005, 72: 016703[[doi](#)]
- 77 Wang Y, He Y L, Li Q, et al. Numerical simulations of gas resonant oscillations in a closed tube using lattice Boltzmann method. *Int J Heat Mass Transfer*, 2008, 51: 3082—3090[[doi](#)]
- 78 Filippova O, Hanel D. Grid refinement for lattice-BGK models. *J Comput Phys*, 1998, 147: 219—228[[doi](#)]
- 79 Mei R W, Luo L S, Shyy W. An accurate curved boundary treatment in the lattice boltzmann method. *J Comput Phys*, 1999, 155: 307—333[[doi](#)]
- 80 Mei R W, Shyy W, Yu D Z, et al. Lattice Boltzmann method for 3-D flows with curved boundary. *J Comput Phys*, 2000, 161: 680—699[[doi](#)]
- 81 Bouzidi M, Firdaouss M, Lallemand P J. Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries. *Phys Fluids*, 2001, 13: 3452—3459[[doi](#)]
- 82 Lallemand P, Luo L S. Lattice Boltzmann method for moving boundaries. *J Comput Phys*, 2003, 184: 406—421[[doi](#)]
- 83 Guo Z L, Zheng C G, Shi B C. An extrapolation method for boundary conditions in lattice Boltzmann method. *Phys Fluids*, 2002, 2007—2010
- 84 Feng Z G, Michaelides E E. The immersed boundary-lattice Boltzmann method for solving fluid – particles interaction problems. *J Comput Phys*, 2004, 195: 602—628[[doi](#)]
- 85 Feng Z G, Michaelides E E. Proteus: A direct forcing method in the simulations of particulate flows. *J Comput Phys*, 2005, 202: 20—51[[doi](#)]
- 86 Niu X D, Shu C, Chew Y T, et al. A momentum exchange-based immersed boundary-lattice Boltzmann method for simulating incompressible viscous flows. *Phys Lett A*, 2006, 354: 173—182[[doi](#)]
- 87 Knudsen M. *The Kinetic Theory of Gases*. London: Methuen Monographs, 1934
- 88 Reider M, Sterling J. Accuracy of discrete-velocity BGK models for the simulation of the incompressible Navier-Stokes equations. *Comput Fluids*, 1995, 24: 459[[doi](#)]
- 89 Cao N, Chen S, Martinez D. Physical symmetry and lattice symmetry in the lattice Boltzmann method. *Phys Rev E*, 1997, 55: 21—24[[doi](#)]
- 90 Mei R W, Shyy W. On the finite difference-based lattice Boltzmann method in curvilinear coordinates. *J Comput Phys*, 1998, 143: 426—448[[doi](#)]
- 91 Guo Z L, Zhao T S. Explicit finite-difference lattice Boltzmann method for curvilinear coordinates. *Phys Rev E*, 2003, 67: 066709[[doi](#)]
- 92 Tolke J, Krafczyk M, Schulz M, et al. Implicit discretization and nonuniform mesh refinement approaches for FD discretizations of LBGK models. *Int J Modern Phys C*, 1998, 9: 1143—1157[[doi](#)]
- 93 Pieraccini S, Puppo G. Implicit-explicit schemes for BGK kinetic equations. *J Sci Comput*, 2007, 32: 1—28[[doi](#)]
- 94 Pareschi L, Russo G. Implicit-explicit Runge-Kutta schemes and applications to hyperbolic systems with relaxation. *J Sci Comput*, 2005, 25: 129—155
- 95 Zhang H X. Non-oscillatory and non-free-parameter dissipation difference scheme. *Acta Aerodynamica Sinica*, 1988, 6: 143—165
- 96 Jiang G S, Shu C W. Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes. *J Comput Phys*, 1996, 126: 202—228[[doi](#)]
- 97 Tien C L, Majumdar A, Carey V P, et al. Molecular and microscale transport phenomena: A report on the 2nd US Japan Joint Seminar, Santa Barbara, California, 7-10 August, 1996. *Microscale Thermophysical Engineering*, 1997, 1: 71—84
- 98 Guo Z L, Zhao T S. Lattice Boltzmann model for incompressible flows through porous media. *Phys Rev E*, 2002, 66: 036304—036301[[doi](#)]

- 99 Gunstensen A, Rothman D, Zaleski S, et al. Lattice Boltzmann model of immiscible fluids. *Phys Rev E*, 1991, 43: 4320—4327
- 100 Grunau D, Chen S, Eggert K. A lattice Boltzmann model for multiphase fluid-flows. *Phys Fluids*, 1993, 5: 2557—2562[[doi](#)]
- 101 Swift M, Orlandini E, Osborn W, et al. Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems. *Phys Rev E*, 1996, 54: 5041—5052[[doi](#)]
- 102 He X, Chen S, Zhang R. A lattice Boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of Rayleigh-Taylor instability. *J Comput Phys*, 1999, 152: 642—663[[doi](#)]
- 103 Luo L. Theory of the lattice Boltzmann method: Lattice Boltzmann models for nonideal gases. *Phys Rev E*, 2000, 62: 4982[[doi](#)]
- 104 Inamuro T, Ogata T, Tajima S, et al. A lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences. *J Comput Phys*, 2004, 198: 628—644[[doi](#)]
- 105 李维仲, 李爽. 用格子 Boltzmann 方法模拟液滴合并过程. *热科学与技术*, 2007, 6: 379—393
- 106 Rakotomalala N, Salin D, Watzky P. Simulations of viscous flows of complex fluids with a Bhatnagar, Gross, and Krook lattice gas. *Phys Fluids*, 1996, 8: 3200—3202[[doi](#)]
- 107 Bock E S. Lattice Boltzmann simulation of the flow of non-Newtonian fluids in porous media. *Int J Mod Phys B*, 2003, 17: 99—102[[doi](#)]
- 108 Gabbanelli S, Drazer G, Koplik J. Lattice Boltzmann method for non-Newtonian (power-law) fluids. *Phys Rev E*, 2005, 72: 046312[[doi](#)]
- 109 Strumolo G, Viswanathan B. New directions in computational aerodynamics. *Physics World*, 1997, 10: 45—49
- 110 Chen S, Dawson S P, Doolen G D, et al. Lattice methods and their applications to reacting systems. *Comput Chem Eng*, 1995, 19: 617—646[[doi](#)]
- 111 Yu H, Luo L S, Girimaji S S. Scalar mixing and chemical reaction simulations using lattice Boltzmann method. *Int J Comput Eng Sci*, 2002, 3: 73—87[[doi](#)]
- 112 宣益民, 叶萌, 李强. 磁流体结构的 Lattice-Boltzmann 方法模拟. *工程热物理学报*, 2005, 26: 301—303
- 113 宣益民, 李强, 叶萌. 磁流体流动与传热的格子 Boltzmann 模拟. *工程热物理学报*, 2006, 27: 1020—1022
- 114 Miller W, Succi S, Mansutti D. A lattice Boltzmann model for anisotropic liquid/solid phase transition. *Phys Rev Lett*, 2001, 86: 8357—8381
- 115 Miller W, Succi S. A lattice Boltzmann model for anisotropic crystal growth from melt. *J Stat Phys*, 2002, 107: 173—186[[doi](#)]
- 116 胡心膂, 郭照立, 郑楚光. 格子 Boltzmann 模型的边界条件分析. *水动力学研究与进展 A*, 2003, 18: 127—134
- 117 He X Y, Luo L S. Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier-Stokes equation. *J Stat Phys*, 1997, 88: 927—944[[doi](#)]
- 118 Wang Y, He Y, Tang G, et al. Simulation of two-dimensional oscillating flow using the lattice Boltzmann method. *Int J Mod Phys C*, 2006, 17: 615—630[[doi](#)]
- 119 Currie I G. *Fundamental Mechanics of Fluids*. New York: Marcel Dekker, 2003
- 120 Woodward P, Colella P. The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks. *J Comput Phys*, 1984, 54: 115—173
- 121 代琳娜. 格子 Boltzmann 方法及其在金属泡沫内传热与两相流模拟中的应用. 博士学位论文. 西安: 西安交通大学, 2008
- 122 王勇, 何雅玲, 刘迎文, 等. 声波衰减的格子-Boltzmann 方法模拟. *西安交通大学学报*, 2007, 41: 5—8