用于传输现象模拟、无需转换为格子单位的有量纲格子玻尔兹曼方法

Ivan Talão Martins[a], *, Pablo Fariñas Alvariño[b] 和LubenCabezas-Gómez[a]

[a]圣保罗大学（*USP*）圣卡洛斯工程学院（*EESC*）机械工程系传热研究组，巴西圣卡洛斯 *13566-590*

[b]拉科鲁尼亚大学，费罗尔工业校区，费罗尔，*15403*，拉科鲁尼亚，西班牙

arXiv:2302.04120v1 [physics.flu-dyn] 8 Feb 2023

文章信息

关键词：有量纲格子玻尔兹曼方法 平均场两相格子玻尔兹曼方法 多相流 传热 格子玻尔兹曼方程

摘要

本文提出了一种适用范围广泛的有量纲格子玻尔兹曼方法（LBM），用于模拟流体流动和传热问题。该方法通过直接采用物理单位表示的变量，对离散格子玻尔兹曼方程（LBE）进行数值求解，无需使用任何特定的单位换算系统。这包括在离散物理域中，使用以物理单位表示的空间和时间间隔以及所有相关量，对 LBE 进行积分。针对单弛豫时间和多弛豫时间格式，分别采用 BGK（Bhatnagar-Gross-Krook）和 MRT（多弛豫时间）碰撞算子，提出了有量纲格子玻尔兹曼方法。本文模拟了若干涉及不同物理现象的简单测试问题，包括带源项的一维热扩散、具有振荡及恒定热通量的通道内二维强制对流（涵盖充分发展流和发展流）、液相中的两相静止气泡，以及具有极高密度比和黏度比的两相动态分层泊肃叶流。另有三个问题的解在附录B、C 和D中简要探讨，涉及一维对流扩散、等温通道流和自然对流。所有数值解均与解析解（如有）或有限差分解进行比较，结果吻合良好。还将所提方法与针对上述问题的传统格子玻尔兹曼方法进行了比较，二者具有相同的精度。除了能够直接采用物理单位模拟上述应用问题（这对于应用问题而言更为合理）之外，所提方法还可求解运行条件更为严苛的传输现象问题。其中包括采用 Allen-Cahn 相场模型模拟上述两个多相问题，其液相/气相密度比和气相/液相运动黏度比分别约为 43300 和470；这类参数在公开文献中十分常见。根据所得结果，预计所提方法可促进格子玻尔兹曼方法作为模拟工具在其适用的广泛传输现象领域中的应用。

术语表

缩略语

BC 边界条件 BGK Bhatnagar-Gross-Krook 传统 传统 有量纲 有量纲 EoS 状态方程 FD 有限差分 FDM 有限差分法 LBE 格子玻尔兹曼方程 LBM 格子玻尔兹曼方法 MRT 多弛豫时间 NSE 纳维–斯托克斯方程 Sat. 饱和**希腊字母符号**

$[\Lambda]$ 碰撞矩阵α 热扩散率 $[m^2\ s^{-1}]\beta$ 用于 μ 计算的常数 $[N\ m^{-2}]\beta_{exp}$ 热膨胀系数 $[K^{-1}]\chi$ 解值（数值解或解析解）ΔP 气泡内外的压力差 $[Pa]\Delta T$ 温度变化 $[K]$

*通讯作者 ivanmartins@usp.br (I.T. Martins)；pablo.farinas@udc.es (P.F. Alvariño)；lubencg@sc.usp.br (L. Cabezas-Gómez) ORCID：0000-0003-3961-5638 (I.T. Martins)；0000-0002-9598-5249 (P.F. Alvariño)；0000-0002-9550-9453 (L. Cabezas-Gómez)

Δt 离散时间增量 $[s]$ Δx 离散空间间隔 $[m]$ Δx_{next2} 下一个离散化层级的下一级 $[m]$ Δx_{next} 下一个离散化层级 $[m]$ η 体积黏度 $[Pa\ s]$ γ 垂直于相界面的坐标 $[m]$ κ 用于 μ 计算的常数 $[N]$ λ 用于热通量热边界条件的常数 μ 化学势 $[N\ m^{-2}]$ ν 运动黏度 $[m^2\ s^{-1}]$ Ω 碰撞算子 $[kg\ m^{-3}s^{-1}]$ ω 弛豫频率 $[s^{-1}]$ ϕ 序参量 Ψ 总自由能 $[J]$ ψ 体积自由能（或势） $[J\ m^{-3}]$ ρ 密度 $[kg\ m^{-3}]$ σ 表面张力 $[N\ m^{-1}]$ τ 动量格子玻尔兹曼方程的弛豫时间 $[s]$ ζ 动力黏度 $[Pa\ s]$

A $[\mathbf{M}]$ 变换矩阵 $\dot{q}$ 产热项 $[K\ s^{-1}]$ $\dot{Q}'''$ 单位体积产热功率 $[W\ m^{-3}]$ $\hat{F}_i$ 动量格子玻尔兹曼方程的强迫项 $[kg\ s^{-1}m^{-3}]$ $\mathbf{c}$ 离散速度向量 $[m\ s^{-1}]$ $\mathbf{f^{eq}}$ 平衡分布函数向量 $\mathbf{F_b}$ 外体力 $[N\ m^{-3}]$ $\mathbf{F_m}$ 强迫项矩向量 $\mathbf{F_s}$ 表面张力 $[N\ m^{-3}]$ $\mathbf{F}$ 外力场 $[N\ m^{-3}]$ $\mathbf{f}$ 分布函数向量 $\mathbf{L}$ 计算域尺寸向量 $[m]$ $\mathbf{M}$ 构成变换矩阵各行的矩 $\mathbf{m}$ 分布函数矩向量 $\mathbf{n}$ 相界面法向量 $\mathbf{u}$ 速度 $[m\ s^{-1}]$ $\mathbf{x}$ 位置向量 $[m]$ h 平均传热系数 $[W\ m^{-1}K^{-1}]$

罗马符号

c 横截面积 $[m^2]$

Br 布林克曼数

C 转换因子

c 格子速度 $[m\ s^{-1}]$

c_p 定压比热容 $[J\ kg^{-1}K^{-1}]$

c_s 声速 $[m\ s^{-1}]$

d 直径 $[m]$

E_2 全局误差，由 L-2范数 $[\%]$ 给出

f_i 离散密度分布函数 $[kg\ m^{-3}]$

f_i^{eq} 离散平衡密度分布函数 $[kg\ m^{-3}]$

g_i 离散温度分布函数 $[K$ 或 $°C]$

H 计算域高度 $[m]$

h_i 用于界面跟踪的格子玻尔兹曼方程离散分布函数

I_e 电流 $[A]$

k 热导率 $[W\ m^{-1}K^{-1}]$

L 区域长度 $[m]$

L_e 流体动力学入口长度

L_h 振荡热流之间的间距

M 迁移率 $[m^2\ s^{-1}]$

Nu 努塞尔数

p 压力 $[Pa]$

P_{in} 气泡内部压力 $[Pa]$

P_{out} 气泡外压力 $[Pa]$

Per 周长 $[m]$

q'' 热通量 $[W\ m^{-2}]$

q''' 体积热源 $[W\ m^{-3}]$

q_s'' 通道壁面平均热通量 $[W\ m^{-2}]$

R 半径 $[m]$

Ra 瑞利数

Re 雷诺数

res 电阻率 $[\Omega m]$

S 源项 $[kg\ m^{-3}s^{-1}]$

s_i z^{eq} 计算项

T 温度 $[K$ 或 $°C]$

t 时间 $[s]$

T_∞ 远离熔断器处的空气平均温度 $[°C]$

u x方向上的速度 $[m\ s^{-1}]$

V 体积 $[m^3]$

W 界面宽度 $[m]$

w 权重函数x， y 笛卡尔坐标 $[m]x_c$， y_c 气泡中心坐标 $[m]z_i$ 离散压力分布函数 $[Pa]$**下标/上标**

$*$ 碰撞后变量ϵ 指变换矩阵的能量平方矩i 与 i 相反的速度方向ϕ 指界面跟踪格子玻尔兹曼方程ρ 指变换矩阵的零阶矩b 指边界节点$b-1$ 边界节点之后的下一个节点$const$ 指恒定热流通道$conv$ 指传统格子玻尔兹曼方法dim 指有量纲格子玻尔兹曼方法e 指变换矩阵的能量矩f_i 指密度分布函数FDM 有限差分法的值g 指气相g_i 指温度分布函数h_i 指 h_i 分布函数

i， j 离散速度方向ini 初始状态变量J_x 指变换矩阵的 x 质量通量矩J_y 指变换矩阵的 y 质量通量矩l 指液相LBM 格子玻尔兹曼方法的值m 平均量num 指数值解p_{xx}， p_{xy} 指变换矩阵的应力张量矩q_x 指变换矩阵的 x 能量通量矩q_y 指变换矩阵的 y 能量通量矩ref 参考量T 指热格子玻尔兹曼方法t 指时间维度tan 向量的切向部分var 指振荡热流通道w 边界壁面处的变量z， z_i 指 z_i 分布函数 BGK 指BGK碰撞算子 MRT 指MRT碰撞算子

1. 引言

如今，格子玻尔兹曼方法（LBM）已被广泛用于模拟各种传输现象，例如流体流动和传热 [1], 多孔介质中的流动 [2–4], 纳米流体传热 [5–8],液-液或液-气系统中的多相流 [9–12], 热多相系统中的相变现象，包括液-气相变或固-液相变 [13–18], 以及许多其他现象。考虑到石油、能源、核能、电子和制冷等行业，这些传输现象对于多种工程应用都具有重要意义。

LBM被视为一种介观方法，其本质是在相空间和时间上对离散玻尔兹曼输运方程进行数值求解，该方程称为格子玻尔兹曼方程（LBE）。LBE最初由 [19], 提出，用于求解离散计算域中的粒子分布函数值，并通过其统计矩 [19–21]计算所需的宏观量，例如密度、速度、浓度、温度等。因此，LBM通过对介观物理现象进行考虑，并对LBE进行数值求解，能够恢复宏观守恒定律，正如 [22]中使用Chapman-Enskog分析 [23]所证明的那样。

传统上，为方便起见，求解格子玻尔兹曼方法时通常采用所谓的格子单位或格子尺度，并将空间和时间增量设为单位值。这些格子单位与描述待求解物理问题的相应物理量相关联，而这些物理量是在宏观尺度下定义的。针对特定问题，建立物理单位与格子单位之间关系的主要方法有两种：基于 Buckingham Π 定理的量纲分析法（最初由 [24]提出）以及尺度变换法（或在采用热力学状态方程（状态方程）时使用的对应态原理） [25, 26]。 Π 定理通常用于

根据输入变量和参数的单位推导无量纲群 Π，适用于已知控制方程缺失的情况[27]。当控制方程已知时，通过无量纲化过程进行尺度分析，可以得到具有代表性的无量纲数，即以问题变量的特定参考值表示的方程系数 [27]。这些参考值必须是已知且恒定的 [26]。

已有多项研究探讨并提出了格子玻尔兹曼方法中的不同单位换算方法，例如以下研究 [20, 25, 26, 28–30]。总体而言，一些研究利用 Buckingham Π 定理将物理尺度与格子尺度联系起来 [28]，以解决与多相流模拟相关的各种问题。另一些作者 [29] 仅采用尺度分析，找出主要无量纲数，并模拟熔化和凝固过程。正如 [26], 所指出的，其他研究可以同时运用 BuckinghamΠ 定理和尺度分析，在单位换算过程中考虑比热容、黏度、热扩散率等没有参考状态的性质。近期一项研究 [25]提出使用普朗克单位作为参考，分别实现物理单位与格子单位之间的换算。该方法成功用于模拟考虑热源的管束强制对流，但需要在单位换算过程中执行更多步骤。

[26] 提出了一种通用流程，用于模拟各种流体流动和传热测试问题，包括采用伪势模型模拟二维静止液滴。该流程基于使用物理尺度和格子尺度的相同基本参考参数来执行转换过程。该方法在确保解的稳定性的同时，也提供了一定的灵活性。最近， [30]提出了一种采用伪势方法模拟液-汽相变的转换策略。作者提出根据与流体性质相关的表面张力和状态方程参数确定基本单位的转换关系，从而推导出其他物理量的转换关系。作者模拟了单个气泡成核过程，恢复了流体的潜热以及以物理单位表示的正确过热温度。

然而，采用上述任何一种流程，都需要在开始使用格子玻尔兹曼方法模拟问题之前执行多个前期计算步骤，同时还需要进行更多计算，以便对模拟输出数据进行后处理。这些流程还需要进行仔细分析，并且会取决于所求解问题的具体情况，因而具有一定的复杂性。事实上， [31],模拟了存在胶体颗粒的二元流体混合物，并指出格子玻尔兹曼方法无法完全解决复杂流体典型流动中产生的长度、能量和时间尺度层级问题。因此，需要决定要解决哪些物理问题、哪些问题可以暂不解决，尤其是在一个或两个流体相中存在胶体颗粒时。随后，选择最相关的无量纲数对于正确模拟宏观问题而言非常重要。

本文提出了一种求解格子玻尔兹曼方法的流程，可直接使用物理单位下的变量，无需采用任何特定的单位换算方法。该流程应用于求解四类实际问题：含热源的一维热传导；恒定和振荡热通量条件下充分发展及发展中的二维通道流动所涉及的对流传热；液体包围气泡的静态两相流问题（包括空气-水系统和饱和液汽水系统）；以及与静态问题采用相同两相系统的分层泊肃叶动态流动。对于这些多相问题，采用基于守恒Allen-Cahn方程、用于界面追踪的相场格子玻尔兹曼方法。

此外，附录中还给出了另外三个经典问题的解：B、C 和D。所有格子玻尔兹曼方法的解均在适用时与解析解进行比较，在必要时与有限差分法进行比较，或与文献中的基准解进行比较；比较对象既包括本文提出的格子玻尔兹曼方法，也包括采用格子单位求解的传统版本。考虑到所得结果的精度，可以认为本文的主要创新在于提出了以物理单位运行的有量纲格子玻尔兹曼方法；据我们所知，公开文献中尚未见此方法，它可使格子玻尔兹曼方法的实现更加简单且更具实用性。

本文分为以下几个部分。在第2 节中介绍了用于模拟所分析问题的所有格子玻尔兹曼模型。本文提出的有量纲格子玻尔兹曼方法模型见第3节，论文结果见第4节。最后，本文的结论见第5节。

2. 数学建模

本节介绍了用于第 4 节所述数值模拟的格子玻尔兹曼方法。

2.1. 用于流体流动的格子玻尔兹曼方法

格子玻尔兹曼方法基于对相空间中玻尔兹曼输运方程的离散化，相空间由速度空间、物理空间和时间构成 [20]。考虑时间上的二阶离散化，一般的格子玻尔兹曼方程可由式 1 给出，该方程描述了离散分布函数 f_i 沿空间和时间的演化，对应每个离散速度方向 i。

$$f_i(\mathbf{x}+\mathbf{c_i}\Delta t, t+\Delta t) - f_i(\mathbf{x},t) = \Delta t\left[\Omega_i(\mathbf{x},t) + S_{f_i}(\mathbf{x},t)\right] . \tag{1}$$

在式 1中， S_{f_i} 表示源项；在流体运动模拟中，它与外力的存在有关。 Δt 和 Δx 分别为离散时间和空间间隔，而 $\mathbf{c_i}$ 则是每个i方向上的离散粒子速度，其取值取决于所选的速度格式。通常，速度格式定义为 DdQq，具体如下： [32], 其中 d 表示模拟的空间维度（一维、二维或三维），而q 表示所考虑的离散速度数量。

变量 Ω_i 在式 1 中表示碰撞算子，它考虑了粒子碰撞的影响，并可采用多种形式建模。能够模拟纳维-斯托克斯方程（NSE）的最简单碰撞算子是 Bhatnagar-Gross-Krook（BGK）算子 [33], ，定义如下： $\Omega_i^{BGK} = -(f_i - f_i^{eq})/\tau$其中， τ表示弛豫时间，而 f_i^{eq} 是平衡分布函数，表示系统处于平衡态时的状态。现在考虑 BGK 算子，格子玻尔兹曼方程（LBE）可改写为式 2所示。

$$f_i(\mathbf{x}+\mathbf{c_i}\Delta t, t+\Delta t) - f_i(\mathbf{x},t) = -\frac{\Delta t}{\tau}\left[f_i(\mathbf{x},t) - f_i^{eq}(\mathbf{x},t)\right] + S_{f_i}(\mathbf{x},t)\Delta t . \tag{2}$$

平衡分布函数 f_i^{eq} 由式 3 给出，适用于一般情况 [20, 34]。在该方程中， ρ表示流体密度， c_s 是格子声速，而 w_i 是各速度方向对应的权重 i。后两个变量的取值也取决于所选的速度方案。

$$f_i^{eq}(\mathbf{x},t) = w_i\rho\left[1 + \frac{\mathbf{c}_i\cdot\mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i\cdot\mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}\cdot\mathbf{u}}{2c_s^2}\right] . \tag{3}$$

对于本文所采用的二维 $D2Q9$ 速度方案， $c_s = c/\sqrt{3}$ 及其相应的速度集（$\mathbf{c_i}$， $\bar{w}_i$） [32] 定义如式 4 和 5所示。变量 c 用于文中所有给出的关系式，表示格子速度，定义为 $c = \Delta x/\Delta t$。

$$\mathbf{c_i} = c\begin{cases}(0,0), & i=0,\\ (1,0),(0,1),(-1,0),(0,-1), & i=1,...,4,\\ (1,1),(-1,1),(-1,-1),(1,-1), & i=5,...,8.\end{cases} \tag{4}$$

$$w_i = \begin{cases}4/9, & i=0,\\ 1/9, & i=1,...,4,\\ 1/36 & i=5,...,8.\end{cases} \tag{5}$$

值得指出的是，通过 Chapman-Enskog分析 [23], 可以以足够高的精度恢复纳维–斯托克斯方程，从而建立格子玻尔兹曼方程与纳维–斯托克斯方程之间的联系。该联系通过弛豫时间 τ 与流体的运动黏度 ν之间的关系表示，具体表达式如下：

$$\nu = (\tau - 0.5\Delta t)c_s^2 . \tag{6}$$

当计算域中存在外力作用时，可以通过在格子玻尔兹曼方程中加入源项来考虑其影响，见式S_{f_i}。 1。文献中有多种对源项建模的方案，但本文

选择了 [35], 提出的方案，据 [36]，这是最常用的方案。该方案避免了因时间离散化伪影而在连续性方程和动量方程中出现不需要的导数，而其他方案可能会出现这种情况 [20]。因此，对于给定的外力场 $\mathbf{F}$ ，其源项可由式7给出，其中 $\hat{F}_i$为强迫项。需要注意的是， $\mathbf{F}$ 的量纲为单位体积力（$N\ m^{-3}$）。

$$S_{f_i} = \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau}\right)\hat{F}_i = \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau}\right) w_i \left[\frac{\mathbf{c_i} - \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c_i}\cdot\mathbf{u})\mathbf{c_i}}{c_s^4}\right]\cdot\mathbf{F} \tag{7}$$

然而，对于一些更复杂的流动问题，BGK碰撞算子可能不足以保证良好的精度或稳定性。考虑到这一点，由 [37], 引入格子玻尔兹曼方程的多弛豫时间（MRT）碰撞算子可用于提高该方法的稳定性，尤其是在涉及较低 τ 值时 [20]。该算子的原理是在分布函数矩空间中执行碰撞步骤。该碰撞算子通常可定义为 $\Omega_i^{MRT} = -\left[\mathbf{M}^{-1}\mathbf{\Lambda}\mathbf{M}\right]_{ij}(f_j - f_j^{eq})$，其中 $[\mathbf{M}]$ 为变换矩阵， $[\mathbf{\Lambda}]$ 为碰撞矩阵。

变换矩阵用于计算分布函数的矩 $\mathbf{m}$ ，例如 $\mathbf{m} = [\mathbf{M}]\mathbf{f}$。同样，平衡矩可表示为 $\mathbf{m^{eq}} = [\mathbf{M}]\mathbf{f^{eq}}$。对于 $D2Q9$ 速度模型，无量纲变换矩阵可由式 8 [38]给出。在该矩阵中，每一行对应分布函数的一个矩，其中 e 为能量（二阶矩）， ϵ 为能量平方（四阶矩），J_x 和 J_y 为质量通量（一阶矩）， q_x 和q_y 为能量通量（三阶矩），而 p_{xx} 和p_{xy} 为应力张量的分量（二阶矩)。

$$[\mathbf{M}] = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_\rho \\ \mathbf{M}_e \\ \mathbf{M}_\epsilon \\ \mathbf{M}_{J_x} \\ \mathbf{M}_{q_x} \\ \mathbf{M}_{J_y} \\ \mathbf{M}_{q_y} \\ \mathbf{M}_{p_{xx}} \\ \mathbf{M}_{p_{xy}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \tag{8}$$

尽管由 Ω_i^{MRT} 表示，通常会完全在矩空间中执行 MRT碰撞步骤。随后可以通过 $\mathbf{f}^* = [\mathbf{M}]^{-1}\mathbf{m}^*$ 恢复碰撞后分布函数 f_i^*，并将其用于执行迁移过程：$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i\Delta t, t + \Delta t) = f_i^*(\mathbf{x}, t)$。

该 [35] 力项方案也可以适配多松弛时间算子 [39, 40]。在这种情况下，^矩空间中的碰撞过程可由式9表示，其中 $\mathbf{F_m} = [\mathbf{M}]\mathbf{F}$ 为强迫项的矩。

$$\mathbf{m}^* = \mathbf{m} - \Delta t[\mathbf{\Lambda}]\left(\mathbf{m} - \mathbf{m^{eq}}\right) + \Delta t\left(1 - \frac{\Delta t}{2}[\mathbf{\Lambda}]\right)\mathbf{F_m} \tag{9}$$

碰撞矩阵可定义为对角矩阵 $[\mathbf{\Lambda}] = \mathrm{diag}(\omega_0, ..., \omega_{q-1})$，其主对角线由弛豫频率 ω_i组成，每个频率对应分布函数的一个矩。在该矩阵中，与守恒矩相关的频率为零，因为它们不受碰撞过程的影响 [38]。

因此，对于 $D2Q9$ 速度方案，碰撞矩阵可定义为 $[\mathbf{\Lambda}] = \mathrm{diag}(0, \omega_e, \omega_\epsilon, 0, \omega_q, 0, \omega_q, \omega_\nu, \omega_\nu)$[20]。最后两个频率与流体的运动黏度相关，定义为 $\omega_\nu = 1/\tau$。此外，与能量相关的弛豫频率可通过 $\eta = (\omega_e^{-1} - 0.5\Delta t)c_s^2$[34] 与流体的体积黏度相关联。在采用输运方程的二阶方法时，其他频率的取值不会对输运系数产生显著影响，但建议取值在 1 到 2 之间 [38]。然而，这些作者还建议，三阶弛豫参数可与二阶参数建立如下关系 $\omega_q = 3(2 - \omega_\nu)/(3 - \omega_\nu)$。

通过取分布函数的零阶矩和一阶矩，可以获得所关注的宏观量f_i [21]。考虑力项方案时，对于 BGK 和多松弛时间碰撞算子，这些矩分别可通过公式 10 和11计算。

$$\rho(\mathbf{x},t)=\sum_{i=0}^{q-1} f_i(\mathbf{x},t) \tag{10}$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x},t)\rho(\mathbf{x},t)=\sum_{i=0}^{q-1}\mathbf{c_i}f_i(\mathbf{x},t)+\frac{\Delta t}{2}\mathbf{F}(\mathbf{x},t) \tag{11}$$

在本文开展的模拟中，采用逐链路格式来制定边界条件。在该格式中，边界位于格子链路上，与计算域物理边界的位置相距 $0.5\Delta x$ [20]。

流体流动模拟采用了五种主要边界条件（边界条件），即：给定速度的入口、大气压力下的出口、周期性边界、固定无滑移壁面和对称边界。对于入口和固定壁面，均采用反弹格式 [41, 42], ，可表示为方程 12。在该方程中，i 表示 i的反方向， $\mathbf{u_w}$ 而 ρ_w 分别表示边界速度和密度，且$\mathbf{x_b}$ 表示边界节点的位置。在固定壁面的情况下，边界条件可简化为 $f_{\bar{i}}(\mathbf{x_b},t+\Delta t)=f_i^*(\mathbf{x_b},t)$。

$$f_{\bar{i}}(\mathbf{x_b},t+\Delta t)=f_i^*(\mathbf{x_b},t)-2w_i\rho_w\frac{\mathbf{c_i}\cdot\mathbf{u_w}}{c_s^2} \tag{12}$$

对于流体出口，采用反弹回弹格式 [43], ，其表达式见式 13。为通过该边界条件固定大气压，假设 ρ_w 值等于大气压下的流体密度（通常取处于平衡态的流体平均密度），并通过外推法计算速度：$\mathbf{u_w}\approx\mathbf{u}(\mathbf{x_b})+0.5[\mathbf{u}(\mathbf{x_b})-\mathbf{u}(\mathbf{x_{b-1}})]$。在这种情况下， $\mathbf{x_{b-1}}$ 表示边界法向上计算域内的下一个节点 [20]。

$$f_{\bar{i}}(\mathbf{x_b},t+\Delta t)=-f_i^*(\mathbf{x_b},t)+2w_i\rho_w\left[1+\frac{(\mathbf{c_i}\cdot\mathbf{u_w})^2}{2c_s^4}-\frac{\mathbf{u_w}\cdot\mathbf{u_w}}{2c_s^2}\right] \tag{13}$$

对称边界使用式 14 [20]施加。在该关系中， j 是粒子分布的索引，其切向速度与 i相同，但法向速度与 $(c_{j,tan};c_{j,n})=(c_{i,tan};-c_{i,n})$相反。例如，考虑采用 $D2Q9$ 速度格式时将顶部边界设为对称边界，存在三个未知分布函数：f_4、 f_7 和 f_8。因此， f_6 的切向速度与 f_7 相同（其中 $\mathbf{c_6}=c(-1,1)$ 和 $\mathbf{c_7}=c(-1,-1)$），但法向速度相反，因此 $f_7(\mathbf{x_b}+\mathbf{c_{7,tan}}\Delta t,t+\Delta t)=f_6^*(\mathbf{x_b},t)$。由于 f_7 切向速度为 $c_{7,\ tan}=-c$，最终关系为 $f_7(\mathbf{x_b}-(\Delta x,0),t+\Delta t)=f_6^*(\mathbf{x_b},t)$。同样的过程也适用于其他函数。

$$f_j(\mathbf{x_b}+\mathbf{c_{j,tan}}\Delta t,t+\Delta t)=f_i^*(\mathbf{x_b},t) \tag{14}$$

最后，对于周期性边界，一侧流出的分布函数就是到达对侧边界的未知函数。因此，该边界条件可表示为 $f_i(\mathbf{x_b},t+\Delta t)=f_i^*(\mathbf{x_b}+\mathbf{L}-\mathbf{c_i}\Delta t,t)$，其中 $\mathbf{L}$为边界法向上的计算域尺寸。

2.2. 热格子玻尔兹曼方法

由于具有通用性，LBM 也可用于模拟传热问题。文献中提出了多种处理传热问题的方法 [34]。本研究采用的是双分布函数模型。

在该模型中，还定义了一个用于 g_i 温度场 T [34, 44]的分布函数。因此，动量的演化由式2模拟，而温度场的演化则由适用于 BGK 算子 [45]的式 15 计算。

$$g_i(\mathbf{x}+\mathbf{c_i}\Delta t, t+\Delta t) - g_i(\mathbf{x},t) = -\frac{\Delta t}{\tau_T}\left[g_i(\mathbf{x},t) - g_i^{eq}(\mathbf{x},t)\right] + S_{g_i}(\mathbf{x},t)\Delta t \tag{15}$$

通过Chapman-Enskog分析，可以恢复能量守恒方程，前提是热格子玻尔兹曼方程的弛豫时间 τ_T与流体的热扩散率 α满足以下关系：$\alpha = (\tau_T - 0.5\Delta t)c_s^2$。该关系体现了格子玻尔兹曼方程与能量守恒方程之间的联系。

在这种情况下，源项与体积热源有关，而不是与外力有关，并且可以通过公式 16 [20, 46]以类似方式进行构造。需要注意的是， $\dot{q}$ 的单位为 $[K\ s^{-1}]$，因为其定义为$\dot{q} = q'''/(\rho c_p)$，其中 q''' 是以（$W\ m^{-3}$）为单位的体积热源，而c_p 表示物质或材料在（$J\ kg^{-1}K^{-1}$）中的定压比热容。

$$S_{g_i} = \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau}\right) w_i \dot{q} \tag{16}$$

平衡分布函数， g_i^{eq}，在式 15 中定义，与温度相关，可由式 17 给出。

$$g_i^{eq} = w_i T\left(1 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2}\right) \tag{17}$$

需要指出的是，在前述关系中，采用了平衡分布函数 [20] 的线性速度相关形式。不过，如有需要，也可以采用二阶形式，其表达式为：$g_i^{eq} = w_i T\left[1 + \frac{\mathbf{c}_i\cdot\mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i\cdot)^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{uu}\cdot}{2c_s^2}\right]\mathbf{u}$。本研究进行的模拟仅采用了一阶平衡分布函数（式 17），这已足以获得所需结果。

宏观温度可由分布函数 g_i 的零阶矩求得。然而，与流场不同，在存在体积热源时，计算温度还需要添加一个额外项，如式 18 [47] 所示。

$$T(\mathbf{x},t) = \sum_{i=0}^{q-1} g_i(\mathbf{x},t) + \frac{\Delta t}{2}\dot{q} \tag{18}$$

热格子玻尔兹曼方法也采用了 MRT 碰撞算子。在这种情况下，考虑到 $D2Q9$ 速度集，碰撞矩阵也可以采用对角形式。本文将使用与 [48] 中相同的松弛参数： $[\mathbf{\Lambda}_T] = \mathrm{diag}(0,1,1,\omega_T,1,\omega_T,1,1,1)$，其中 $\omega_T = 1/\tau_T$。变换矩阵与用于流体流动模拟的变换矩阵相同。

在采用热格子玻尔兹曼方法进行传热模拟时，考虑了五种边界条件：给定温度的入口、施加给定热通量的固定壁面、给定温度的固定壁面、出口和对称边界。

对于固定温度的入口，采用了反弹回弹格式 [49–51]。该边界条件由式 19 给出，其中 g_i^*为碰撞后分布函数， i 是 i 的反方向， $\mathbf{x_b}$ 表示边界节点的坐标，下标 w 表示边界壁面处的变量值。

$$g_{\bar{i}}(\mathbf{x_b}, t+\Delta t) = -g_i^*(\mathbf{x_b},t) + 2w_i T_w\left[1 + \frac{(\mathbf{c_i}\cdot\mathbf{u_w})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u_w}\cdot\mathbf{u_w}}{2c_s^2}\right] \tag{19}$$

同样的边界条件也可用于处理具有指定温度的固定壁面 [20]。在这种情况下，边界速度 $\mathbf{u_w}$ 被设为零，并且边界条件简化为 $g_i(\mathbf{x_b}, t+\Delta t) = -g_i^*(\mathbf{x_b},t) + 2\bar{w}_i T_w$。

采用 针对 提出的方案修正版，使用带半程边界的 速度集，根据 给出的方案对固定壁面诺伊曼边界条件（给定热通量）进行建模。该边界条件可由公式 20给出，其中 λ_i 为常数， q'' 为垂直于边界的热通量（单位为 $[W\ m^{-2}]$）。根据作者的说法， λ_i 有许多可能的取值，因此本文将其选为 $\lambda_i = 2w_i/c_s^2$，得到$\lambda_{1,2,3,4} = 4/6$和 $\lambda_{5,6,7,8} = 1/6$。

$$g_{\bar{i}}(\mathbf{x_b}, t+\Delta t) = g_i^*(\mathbf{x_b}, t) + \lambda_i \left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)\left(\frac{q''}{\rho c_p}\right) \tag{20}$$

对称边界条件与流体矩分布函数所用的边界条件相同，如第2.1节所述。

对于出口，采用了一阶外推格式： $g_i(\mathbf{x_b}, t+\Delta t) = g_i(\mathbf{x_{b-1}}, t+\Delta t)$。需要指出的是，使用一阶格式而非二阶格式，是因为前者比后者更稳定[54]。

2.3. 两相系统的格子玻尔兹曼方法

文献中提出了多种模型，用于通过格子玻尔兹曼方法模拟多相和多组分系统 [9–11, 13, 28, 34, 55]。本文简要介绍 [56] 模型，随后采用新提出的有量纲方法模拟两相系统。该多相模型基于两个分布函数的演化： h_i 和 z_i，分别用于捕捉界面运动和压力场。

作者基于守恒Allen-Cahn方程进行界面跟踪，建立了一个类似于 [57] 和 [4], 提出的模型，该方程由式 21 [58]给出。在该方程中， ϕ 是序参量，用于识别各相所占据的区域，其中 $\phi = 1$表示液相区域， $\phi = 0$ 表示气相区域。 W是界面宽度（该模型考虑了不同相之间的弥散界面）， M 表示迁移率，而 $\mathbf{n}$ 是界面的法向，可按 $\mathbf{n} = \nabla\phi/|\nabla\phi|$计算。

$$\partial_t\phi + \nabla\cdot(\phi\mathbf{u}) = \nabla\cdot\left[M\left(\nabla\phi - \frac{4\phi(1-\phi)}{W}\mathbf{n}\right)\right] \tag{21}$$

用于描述模拟中 h_i （界面运动）演化的格子玻尔兹曼方程由式22给出，其中采用BGK碰撞算子。源项 S_{h_i} 的定义使得通过Chapman-Enskog分析可以恢复式21 。因此，该项由式23给出。

$$h_i(\mathbf{x}+\mathbf{c_i}\Delta t, t+\Delta t) - h_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau_\phi}\left[h_i(\mathbf{x}, t) - h_i^{eq}(\mathbf{x}, t)\right] + S_{h_i}(\mathbf{x}, t)\Delta t \tag{22}$$

$$S_{h_i} = \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau_\phi}\right) w_i \frac{\mathbf{c_i}\cdot\left[\partial_t(\phi\mathbf{u}) + c_s^2\frac{4\phi(1-\phi)}{W}\mathbf{n}\right]}{c_s^2} \tag{23}$$

式中的时间导数23 可通过显式欧拉格式计算： $\partial_t(\phi\mathbf{u}) \approx [\phi(t)\mathbf{u}(t) - \phi(t-\Delta t)\mathbf{u}(t-\Delta t)]/\Delta t$ [59]。此外， τ_ϕ 是界面追踪格子玻尔兹曼方程的弛豫时间，可与迁移率建立如下关系： $M = (\tau_\phi - 0.5\Delta t)c_s^2$。平衡分布函数通过对式24进行一阶展开计算。

$$h_i^{eq} = \phi w_i\left(1 + \frac{\mathbf{c}_i\cdot\mathbf{u}}{c_s^2}\right) \tag{24}$$

与传统格子玻尔兹曼方法类似，宏观量通过分布函数的各阶矩获得。因此，序参量由 h_i 的零阶矩计算得到，采用公式 25，而宏观密度

和运动黏度可表示为 ϕ 的线性函数，例如 $\rho = \rho_g + \phi(\rho_l - \rho_g)$ 和 $\nu = \nu_g + \phi(\nu_l - \nu_g)$。在这些关系式中，下标 g 表示气体性质，下标 l表示液体性质。

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^{q-1} h_i(\mathbf{x}, t) \tag{25}$$

对于压力演化，为了建立格子玻尔兹曼方程，作者进行了类似于 [60], 所提出的不可压缩变换，从而得到了 BGK 碰撞算子的方程 26 。然而，值得指出的是，也可以使用多松弛时间算子对 z_i 分布函数执行碰撞过程，方法是将方程 9应用于这些函数的矩。对于 $D2Q9$，碰撞矩阵可以取为$[\mathbf{\Lambda}] = \text{diag}$ $(1, 1, 1, 1, 3(2 - 1/\tau)/(3 - 1/\tau), 1, 1, 1/\tau, 1/\tau)$。

$$z_i(\mathbf{x} + \mathbf{c_i}\Delta t, t + \Delta t) - z_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau}\left[z_i(\mathbf{x}, t) - z_i^{eq}(\mathbf{x}, t)\right] + S_{z_i}(\mathbf{x}, t)\Delta t \tag{26}$$

为了计算平衡分布函数，作者提出了方程 27 ，以满足无散条件。在该方程中， s_i 表示根据方程 28 [61, 62]计算得到的项。此外，在方程 27 p 中，定义为总压力。

$$z_i^{eq} = \begin{cases} \frac{p}{c_s^2}(w_i - 1) + \rho s_i(\mathbf{u}), \text{ if } i = 0 \\ \frac{p}{c_s^2} w_i + \rho s_i(\mathbf{u}), \text{ if } i \neq 0 \end{cases} \tag{27}$$

$$s_i(\mathbf{u}) = w_i\left(\frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2c_s^2}\right) \tag{28}$$

为恢复由式 29 (ζ 表示动力黏度)，弛豫时间再次与运动黏度相关，关系为 $\nu = (\tau - 0.5\Delta t)c_s^2$。在这种情况下，采用两种体力。 $\mathbf{F_b}$ 定义为作用于计算域的体力，而 $\mathbf{F_s}$ 是与表面张力相关的力。文献中有多种计算后一种力的形式。然而，本文将采用与化学势相关的势形式 μ，其表达式为： $\mathbf{F_s} = \mu\nabla\phi$ [63, 64]。因此，压力演化格子玻尔兹曼方程的强迫项定义为式 30 [59]。

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\zeta(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T)] + \mathbf{F_s} + \mathbf{F_b} \tag{29}$$

$$S_{z_i} = \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau}\right)\hat{F}_i^z = \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau}\right) w_i\left[\frac{\mathbf{c_i} \cdot (\mathbf{F_s} + \mathbf{F_b})}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{u}\nabla\rho) : (\mathbf{c_i}\mathbf{c_i})}{c_s^2}\right] \tag{30}$$

现在，与流体压力和动量相关的宏观量分别由以下方程给出：31 和 32。需要特别指出的是，在这些方程中，压力取决于速度。因此，必须先通过方程 32计算速度，然后再确定压力。

$$p(\mathbf{x}, t) = \frac{c_s^2}{(1 - w_0)}\left[\sum_{i=1}^{q-1} z_i(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta t}{2}\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla\rho + \rho s_0(\mathbf{u})\right] \tag{31}$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^{q-1} \mathbf{c_i} z_i(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta t}{2}(\mathbf{F_s} + \mathbf{F_b}) \tag{32}$$

化学势 μ的知识对于使用所述格子玻尔兹曼方法进行模拟非常重要。该热力学性质可以由两相系统 Ψ 的自由能 [65]计算得到。自由能是密度的函数，并且已知 ρ 与 ϕ 之间呈线性关系，因此化学势可表示为：$\mu = \partial_\phi \Psi(\phi)$。系统的总自由能可由方程 33计算，其中 $\psi(\phi)$ 表示体积自由能（或势），而 κ 是与表面张力强度相关的常数 [66]。

$$\Psi = \int_V \psi(\phi) + \frac{\kappa}{2}|\nabla\phi|^2 dV \tag{33}$$

在接近临界点的区域，可以对流体状态方程（EoS）进行一些简化 [67],，从而得到以下表达式：$\psi(\phi) \approx \beta\phi^2(1-\phi)^2$，其中 β 为常数。尽管这一关系是针对最接近临界点的区域推导得出的，但基于平均场理论的多相格子玻尔兹曼模型 [68–71]已广泛采用这一简化。

因此，考虑到 $\mu = \partial_\phi \Psi(\phi) = \partial_\phi \psi - \kappa\nabla^2\phi$ [72]，可以根据式34计算化学势。常数 κ 和 β 均与流体的界面厚度（W）和表面张力（σ）有关，具体为 $\kappa = \frac{3}{2}\sigma W$ 和 $\beta = \frac{12\sigma}{W}$。

$$\mu = \partial_\phi \psi - \kappa\nabla^2\phi = 4\beta\phi(\phi-1)(\phi-0.5) - \kappa\nabla^2\phi \tag{34}$$

此外，两个相之间平面界面的平衡态可由式35描述，其中 $\gamma(\mathbf{x})$为垂直于界面的坐标。为避免不稳定性，在模拟开始时，宏观密度和 ϕ 均采用这一平衡剖面进行初始化。

$$\phi(\mathbf{x}) = 0.5 + 0.5\tanh\left(\frac{2\gamma(\mathbf{x})}{W}\right) \tag{35}$$

在前述方程中，例如式 34，显然需要计算 ϕ的二阶导数。根据 ρ 与 ϕ之间的线性关系，密度梯度可改写为 $\nabla\rho = (\rho_l - \rho_g)\nabla\phi$。因此，可以通过对 ϕ求一阶导数来计算密度梯度。根据 [56], , 可使用式 ϕ所示的二阶各向同性中心格式计算空间梯度和拉普拉斯算子：36 和 37。

$$\nabla\phi(\mathbf{x}) = \sum_{i\neq 0} \frac{w_i \mathbf{c_i}\phi(\mathbf{x} + \mathbf{c_i}\Delta t)}{c_s^2 \Delta t} \tag{36}$$

$$\nabla^2\phi(\mathbf{x}) = \sum_{i\neq 0} \frac{2w_i\left[\phi(\mathbf{x} + \mathbf{c_i}\Delta t) - \phi(\mathbf{x})\right]}{c_s^2 \Delta t^2} \tag{37}$$

关于界面法向量，需要特别指出的是，在数值代码中必须谨慎计算该向量。其定义为 $\mathbf{n} = \nabla\phi/|\nabla\phi|$, 因此存在一些节点使得 $|\nabla\phi| = 0$，进而除以该项可能得到极大的数值。因此，仅在$|\nabla\phi| \neq 0$时才进行上述除法，否则 $\mathbf{n} = \mathbf{0}$。

3. 有量纲格子玻尔兹曼方法

在格子玻尔兹曼方法中，通常使用无量纲格子单位而非物理单位来表示变量 [20, 21, 54]。这需要使用无量纲数来表示所有物理参数。有量纲化过程通常涉及选择参考单位尺度，这些尺度由独立的转换因子定义，同时还需运用相似定律，以获得所涉及的所有物理量的无量纲值 [20]。文献中提出了多种方法来执行这一有量纲化过程，并将特定系统的物理性质映射到格子尺度

，反之亦然。其中一些方法由 [25, 26, 29, 30]提出。这些研究展现了这一单位换算过程的复杂性，而在模拟多相和多组分问题时，这种复杂性更高。

为了区分本文提出的格子玻尔兹曼方法与基于无量纲化过程的传统格子玻尔兹曼方法，本文将前者称为“有量纲格子玻尔兹曼方法”，后者称为“传统格子玻尔兹曼方法”。采用传统格子玻尔兹曼方法完成的数值模拟使用了第2节所介绍的模型。定义独立转换因子的步骤与 [20]提出的方法类似。由于长度、时间和质量是基本量，首先选择与它们对应的转换因子（C_t、 C_x和 C_m）来进行无量纲化过程。然后，利用这些转换因子，可以得到一些无量纲变量（以˜表示），如下： $\tilde{t} = t/C_t$、 $\tilde{x} = x/C_x$、 $\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u}/C_u$ 和 $\tilde{\rho} = \rho/C_\rho$，其中 $C_\rho = C_m/C_x^3$ 和 $C_u = C_x/C_t$。采用相同的步骤确定压力、表面张力等其他量的转换因子，这些因子根据各变量的物理单位定义。然而，对温度进行无量纲化时，通常会设定一个参考温度 T_{ref}，使得˜ $T = (T - T_{ref})/C_T$。

此外，值得强调的是， C_t、 C_x 和 C_m 的取值通常设置为使无量纲密度、离散空间和离散时间间隔变为 $\Delta\tilde{t} = \Delta\tilde{x} = \tilde{\rho} = 1.0$，其中 $\Delta\tilde{t} = \Delta t/C_t$ 和$\Delta\tilde{x} = \Delta x/C_x$。为获得这些单位值，必须将三个相互独立的转换因子定义为 $C_t = \Delta t$、$C_x = \Delta x$ 和 $C_m = \rho C_x^3$。需要注意的是，使用传统格子玻尔兹曼方法时，必须先将力和热生成项转换为无量纲量，然后才能将其用于源项计算（动量格子玻尔兹曼方程的式7 和11 ，热格子玻尔兹曼方法的式16 和18，以及多相格子玻尔兹曼方法的式23、30和32）。本文采用常见的均匀正方形格子，该格子在所有坐标方向上具有相同的空间离散间隔（例如，对于二维情况， $\Delta y = \Delta x$）。

因此，本文提出了“有量纲格子玻尔兹曼方法”，即以有量纲形式应用格子玻尔兹曼方法。换言之，无量纲化过程被省略， Δx、 Δt、$c = \Delta x/\Delta t$ 以及所有宏观变量（密度、速度、温度、黏度等）均保留为物理单位，优先采用国际单位制。这种方法完全避免了通常所需的单位转换过程：将输入数据的物理单位映射为格子单位，以格子单位进行数值模拟，再将输出数据从格子空间映射回物理空间。因此，无须选择或采用任何转换参数，整个模拟（包括数据输入和输出）均以物理单位进行。

本文的模拟采用了 BGK 和多松弛时间碰撞算子。对于 BGK 算子，所提出的有量纲格子玻尔兹曼方法沿用第 2 节所述的所有关系式，同时将所有数值保留为物理单位（Δt， Δx， c，以及其他所有数值）。然而，对于多松弛时间碰撞算子，必须使用正确的物理单位将变换矩阵和碰撞矩阵映射到物理尺度，因为它们最初是以格子单位定义的无量纲形式。

对变换矩阵进行量纲化 $[\mathbf{M}]$时，应将每一行乘以相应矩的正确物理量纲进行修正。具体而言，将各行乘以 c^n，其中 n 由与各行相关的矩阶给出。因此，对于 $[\mathbf{M}]_{dim}$ 速度集 $D2Q9$ ，其量纲形式由式38给出。矩阵 $[\mathbf{M}]_{dim}^{-1}$ 可以自然地获得，只需对量纲化变换矩阵求逆，详见附录A。

$$[\mathbf{M}]_{dim} = \begin{pmatrix} c^0 \cdot \mathbf{M}_\rho \\ c^2 \cdot \mathbf{M}_e \\ c^4 \cdot \mathbf{M}_\epsilon \\ c^1 \cdot \mathbf{M}_{J_x} \\ c^3 \cdot \mathbf{M}_{q_x} \\ c^1 \cdot \mathbf{M}_{J_y} \\ c^3 \cdot \mathbf{M}_{q_y} \\ c^2 \cdot \mathbf{M}_{p_{xx}} \\ c^2 \cdot \mathbf{M}_{p_{xy}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -4c^2 & -c^2 & -c^2 & -c^2 & -c^2 & 2c^2 & 2c^2 & 2c^2 & 2c^2 \\ 4c^4 & -2c^4 & -2c^4 & -2c^4 & -2c^4 & c^4 & c^4 & c^4 & c^4 \\ 0 & c & 0 & -c & 0 & c & -c & -c & c \\ 0 & -2c^3 & 0 & 2c^3 & 0 & c^3 & -c^3 & -c^3 & c^3 \\ 0 & 0 & c & 0 & -c & c & c & -c & -c \\ 0 & 0 & -2c^3 & 0 & 2c^3 & c^3 & c^3 & -c^3 & -c^3 \\ 0 & c^2 & -c^2 & c^2 & -c^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c^2 & -c^2 & c^2 & -c^2 \end{pmatrix} \tag{38}$$

除之前的更改外，与弛豫时间没有直接关系的松弛率也必须

碰撞矩阵的量纲化 $[\mathbf{\Lambda}]_{dim}$。因此，再次考虑 $D2Q9$ 速度方案，量纲动量格子玻尔兹曼方程的量纲碰撞矩阵可按照第2.1节中的说明给出，但ω_q的关系必须重新定义为 $\omega_q = (3/\Delta t)(2/\Delta t - \omega_\nu)/(3/\Delta t - \omega_\nu)$，并且任意值（$\omega_\epsilon$）应在 $1/\Delta t$和 $2/\Delta t$之间变化，而不是在1 和2之间。

现在，对于有量纲热格子玻尔兹曼方法，有量纲碰撞矩阵可定义为 $[\mathbf{\Lambda}_T]_{dim} = \text{diag}(0, 1/\Delta t, 1/\Delta t, \omega_T$ 仍为 $\omega_T = 1/\tau_T$。类似地，对于有量纲多相格子玻尔兹曼方法的动量方程，应应用以下关系：$[\mathbf{\Lambda}]_{dim} = \text{diag}(1/\Delta t, 1/\Delta t, 1/\Delta t, 1/\Delta t, \omega_{q2}, 1/\Delta t、\ 1/\Delta t、\ 1/\tau、\ 1/\tau)$，其中 $\omega_{q2} = (3/\Delta t)(2/\Delta t - \omega_\nu)/(3/\Delta t - \omega_\nu)$。

总体而言，所提出的有量纲格子玻尔兹曼方法仅对传统格子玻尔兹曼方法作了相当简单的修改，但其影响却十分重大。该方法可以直接以物理单位求解应用中的传输现象问题，无需在物理尺度与格子尺度之间进行困难且有时繁琐的单位换算。这使得数值解可以直接使用自然物理单位下的输入变量来设定，并且只需改变 Δx和 Δt 值，即可控制数值解的收敛性、稳定性和精度。

需要指出的是，有量纲格子玻尔兹曼方法可能具有与标准格子玻尔兹曼方法相同的稳定性、精度和数值阶数，但其使用起来更加简单直接。本文不讨论这些问题，而是通过获得多个物理问题的高精度解，展示所提方法的应用及其有效性。

4. 结果

本节展示了采用所提出的有量纲格子玻尔兹曼方法对下文各小节所讨论的四个主要问题进行模拟所得的结果。我们将这些结果与传统格子玻尔兹曼方法所得结果进行比较，以验证所提出的格子玻尔兹曼方法是否正确。此外，为评估该方法的性能和精度，我们还将所得的格子玻尔兹曼方法解与现有的解析解或有限差分解进行比较。

格子玻尔兹曼方法与参考解之间的比较采用以下全局误差进行 L_2相对误差范数 [73, 74] 由式39定义。对于有限差分解，通过开展收敛性研究来保证参考解的质量。为此，规定两个模拟之间的全局误差必须小于或等于 0.01%：一个模拟的网格尺寸为 Δx，另一个为 $\Delta x_{next} = \Delta x/2$ （参考解），即 $E_2 \leq 0.01\%$。

$$E_2(\%) = 100\sqrt{\frac{\sum_{\mathbf{x}}(\chi_{ref} - \chi_{num})^2}{\sum_{\mathbf{x}} \chi_{ref}^2}} \tag{39}$$

格子玻尔兹曼方法本质上是一种瞬态数值方法。因此，为了检查数值解是否达到稳态，采用式40给出的条件。在此关系中，χ表示问题的主要变量（例如泊肃叶流中的速度，或强制对流问题中的温度），需要对其进行检查；而$\tilde{t} + 1000$ 表示在 $\tilde{t}$之后 1000 个时间步长时的时刻。

$$\max\left[\chi(\mathbf{x}, \tilde{t} + 1000) - \chi(\mathbf{x}, \tilde{t})\right] \leq 10^{-8} \tag{40}$$

对于有量纲格子玻尔兹曼方法问题的求解，首先为 Δx 和 Δt 任意设定值。由于其稳定性准则与传统格子玻尔兹曼方法相同，因此需要谨慎选择 τ 的数值，该数值不得过于接近 $\Delta t/2$。随后，如果模拟不稳定，则有必要重新调整 Δx 和 Δt，以达到所需的稳定性。对于一些更复杂的情况，可以使用多松弛时间算子代替 BGK 算子来实现模拟的稳定性。如果结果不理想，可以进行网格加密，以获得更高的精度。由于有量纲格子玻尔兹曼方法不执行无量纲化过程，因此可以直接且更简单地调整 Δx 和 Δt，这与有限差分或有限元法等传统数值方法类似。

用于流体模拟的所有热力学和传输性质均使用免费的 Coolprop Python 库 [75] 计算。

4.1. 一维热扩散

第一个问题涉及确定用于防止电力电子模块因大电流而熔断的熔断器的轴向温度分布。此问题取自 [76], 问题 3.8-1，此处讨论该问题，是因为它是一个关于一维热传导的有趣工程问题。

熔断器是一根长度为 $L = 0.08m$、直径为 $d = 0.0015m$ 的熔断丝（无绝缘层）。熔断丝表面以对流方式向温度为 $T_\infty = 20^oC$ 的空气散热，传热系数为 $h = 5W\ m^{-2}K^{-1}$。熔断器由铝合金制成，其具有以下特性，并假定这些特性与温度无关：$\rho = 2700kg\ m^{-3}$、$k = 150W\ m^{-1}K^{-1}$、$c_p = 900J\ kg^{-1}K^{-1}$，以及电阻率为 $res = 1 \cdot 10^{-7}\Omega\ m$。

初始时，熔断器处于均匀温度 $T_{ini} = T_\infty = 20^oC$。在时间 $t = 0$ 时，熔断器通入电流 $I_e = 100A$，从而在熔断器材料内部产生均匀的体积热源。熔断器的两端（$x = 0$ 和 $x = L$）保持在恒定温度 $T_w = 20^oC$。要求确定熔断器轴向温度随时间的变化，并忽略由于熔断丝直径较小而引起的径向和角向温度变化。

熔断器中能量守恒的控制方程由式 41 给出。该方程的推导基于以下假设：电流通过所产生的热源建模为 $q''' = (16I_c^2 res)/(\pi^2 d^4)$，而单位熔断器体积的对流总散热量为 $\dot{Q}'''_{conv} = (\pi d L)h(T - T_\infty)/(0.25\pi d^2 L) = 4h(T - T_\infty)/d$。

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{q'''}{\rho c_p} - \frac{4\overline{h}(T - T_\infty)}{\rho c_p d} \tag{41}$$

该问题分别求解了瞬态解和稳态解。采用两种格子玻尔兹曼模型进行的数值模拟均使用 BGK碰撞算子和 $D1Q3$ 速度格式，格子速度为 $\mathbf{c_0} = 0$、$\mathbf{c_1} = c$ 和 $\mathbf{c_2} = -c$，相应的权重为 $w_0 = 4/6$、$w_1 = 1/6$ 和 $w_2 = 1/6$。声速保持为 $c_s = c/\sqrt{3}$ [32]。所有模拟采用的离散时间和空间间隔分别为 $\Delta x = 4 \cdot 10^{-4}m$和 $\Delta t = 2.5 \cdot 10^{-4}s$。通过 $\dot{q} = q'''/(\rho c_p) - 4h(T - T_\infty)/(\rho c_p d)$，将体积热源与对流散热相加，计算出格子玻尔兹曼方法所需的单一源项。为避免格子玻尔兹曼方法中的隐式性，对流散热根据前一时刻确定的温度进行计算。对于边界条件，采用式 19 实现了 $x = 0$ 和 $x = L$ 处的固定温度。

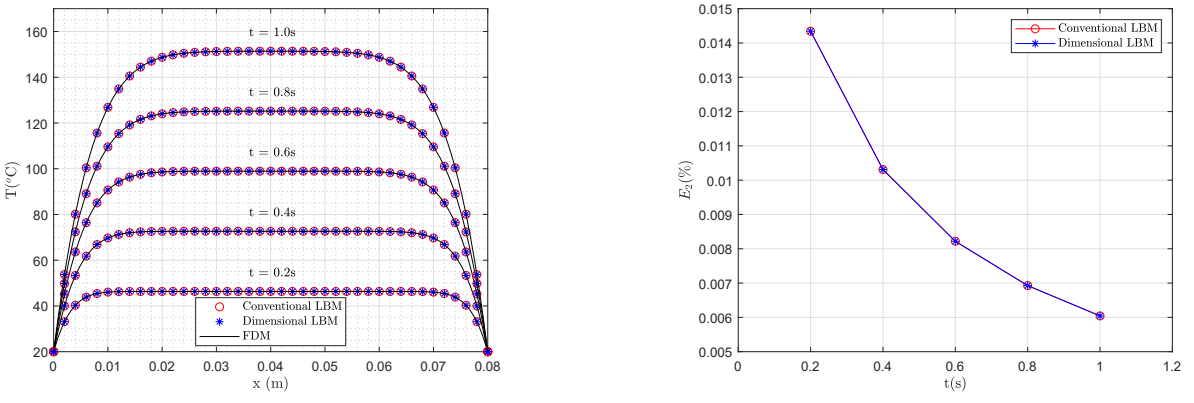
将瞬态格子玻尔兹曼方法解与采用有限差分法得到的数值解进行了比较；求解方程时采用时间前向、空间中心有限差分格式。41，其中 $\Delta x_{FDM} = 4.0 \cdot 10^{-4}m$且 $\Delta t_{FDM} = 2.5 \cdot 10^{-4}s$，满足 $E_2 \leq 0.01\%$。将稳态格子玻尔兹曼方法结果与方程给出的解析解进行比较。42，其中 $m = \sqrt{(hPer)/(kA_c)}$，而 Per 和 A_c 分别为熔丝周长和横截面积。

$$T(x) = \left(T_w - T_\infty - \frac{\dot{q}'''A_c}{\overline{h}Per}\right)\left[\left(1 + \frac{e^{mL} - 1}{e^{-mx} - e^{mx}}\right)e^{mx} + \left(\frac{1 - e^{mL}}{e^{-mx} - e^{mx}}\right)e^{-mx}\right] + T_\infty + \frac{\dot{q}'''A_c}{\overline{h}Per} \tag{42}$$

图中展示了常规格子玻尔兹曼方法、有量纲格子玻尔兹曼方法和有限差分法在不同时刻的瞬态解，以及各格子玻尔兹曼方法解与有限差分解之间的全局误差。1a 和图1b。瞬态解呈现出正确的物理行为：熔丝温度随时间升高，且如预期所示，熔丝中部的温度最高。随着系统趋于稳态，相对误差随时间减小，且所有情况下的相对误差都很小。两种格子玻尔兹曼模型所得结果几乎相同。

采用格子玻尔兹曼模型得到的稳态解以及由公式 42 给出的解析解，如图 2 所示。稳态解呈现出正确的温度分布，温度在熔丝长度的中点达到最大值。展示此温度分布是为了比较格子玻尔兹曼方法与解析解，因为熔丝合金将在约 500^oC 时熔化。对于稳态解，常规格子玻尔兹曼方法与有量纲格子玻尔兹曼方法的全局相对误差相同，均为 $E_2^{dim} = E_2^{conv} = 0.0029\%$。

在本例中发现，有量纲格子玻尔兹曼方法与传统格子玻尔兹曼方法得出的结果相同，且相对于参考解具有同样高的精度。这一事实表明，所提出的有量纲格子玻尔兹曼方法可以安全使用，并且无需进行无量纲化过程，也不会改变该方法所得的结果。



(a) (b)

图 1： (a) 采用有限差分格式、传统格子玻尔兹曼方法和有量纲格子玻尔兹曼方法获得的熔断器轴向温度随时间步长的变化。(b) 传统格子玻尔兹曼方法和有量纲格子玻尔兹曼方法的全局误差随时间的变化，并与有限差分解进行比较。

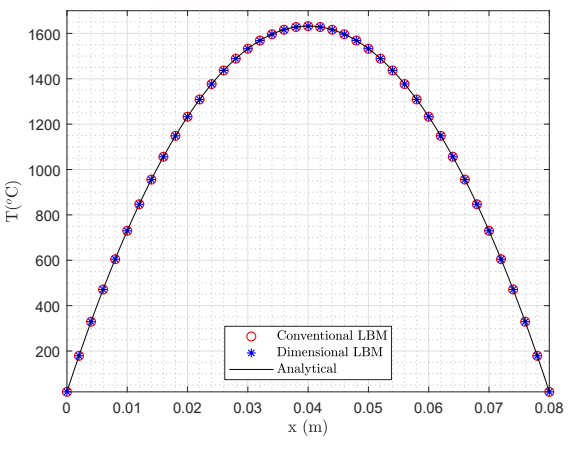


图 2： 数值解和解析解对应的稳态轴向保险丝温度分布。

4.2. 加热通道

第二个问题涉及对二维通道中强制对流的模拟。该通道位于两块平行板之间，板面承受热通量。此案例的灵感也来源于 [76], 问题 5-11；之所以在此讨论，是因为这是一个有趣的工程问题，其应用包括换热器、用于电子冷却的微通道以及微流体。此外，该问题还涉及强制对流模拟，其中采用格子玻尔兹曼方法，利用第 2.1 节和第 2.2 节所介绍的模型，分别模拟流体流动和能量守恒。

本问题将考虑两块平行板之间强制对流的三种不同情形。第一种情形是在通道入口处模拟热力学和流体动力学均充分发展的流动，随后在上下边界施加交变热通量。第二种情形是在两侧壁面均施加恒定热通量，流动处于热力学和流体动力学发展阶段。最后一种情形是在发展流中对壁面施加交变热通量。将分析这三种情形的模拟结果，以获得稳态解。

通道的几何形状为 $H : L = 0.0005m : 0.010m$，其中 H 和 L 分别表示通道高度和长度。流体为水，其特性由平均值处确定的恒定性质表征

ρ	996.279 $kg\ m^{-3}$
ν	8.382e-7 $m^2\ s^{-1}$
k	0.611 $W\ m^{-1}K^{-1}$
c_p	4180.333 $J\ kg^{-1}K^{-1}\cdot m^{-3}$
α	1.467e-7 $m^2\ s^{-1}$

表1
水在 301K 和 1 atm 下的热力学和传输性质，根据 [75], 计算得出，用于模拟加热通道中的强制对流。

温度 301K ，并汇总于表1。在此情况下，采用以下边界条件：底壁和顶壁施加热通量（诺伊曼边界条件），左侧边界采用恒温入口边界条件，右壁则采用大气压流出边界条件。

实现格子玻尔兹曼方法边界条件时，考虑了以下问题。对于流体流动，入口和静止壁面均采用式13 。出口边界条件采用式13 ，以模拟通道与大气压相通的情况。在温度场模拟中，底壁施加的热通量通过式20 实现，而入口壁面边界条件则采用式19。出口采用一阶外推格式，具体说明见第2.2节。由于通道几何形状相对于其高度对称（两侧壁面均施加热通量），因此仅模拟计算域的一半（$H/2$），并对计算域顶壁（位于通道中心）施加对称边界条件，具体说明见第 y节。关于结果分析，将解镜像以表示完整通道。

在所有格子玻尔兹曼方法模拟（采用两种模型）中，均使用了 $D2Q9$ 速度格式；流体流动采用 BGK 碰撞算子，温度场模拟则采用多松弛时间算子。由于发展流模拟涉及稳定性和精度问题，因此采用多松弛时间算子求解能量守恒方程。

对于第一种情况，假设水进入时在热力学和流体动力学上均已充分发展。入口处的速度分布由方程 43 描述，其中 $u_m = 0.2m\,s^{-1}$ 为流体的平均速度。入口区域的温度分布由方程 44 描述，其中 $T_{in} = 300K$ 为入口处的平均温度。 y 轴表示沿通道高度的方向，从底板延伸至顶板，范围为 $0 \leq y \leq H$。 x 轴指向通道长度方向，范围为 $0 \leq x \leq L$，从通道入口延伸至出口。

$$u(y) = 6u_m\left(\frac{y}{H} - \frac{y^2}{H^2}\right) \tag{43}$$

$$T(y) = T_{in} + \frac{q_s'' H}{k}\left[-\left(\frac{y}{H}\right)^4 + 2\left(\frac{y}{H}\right)^3 - \frac{y}{H} + 0.243\right] \tag{44}$$

假设两块板均受到由方程给出的周期性热通量。 45平均热通量保持为 $q_s'' = 40000W\ m^{-2}$，其变化幅度约为 $\Delta q_s'' = 40000W\ m^{-2}$，并在宽度为 $L_h = 1mm$的区间之间交替变化。热通量定义中的函数信号（sign）在参数为正时返回 $+1$ ，参数为负时返回 -1。

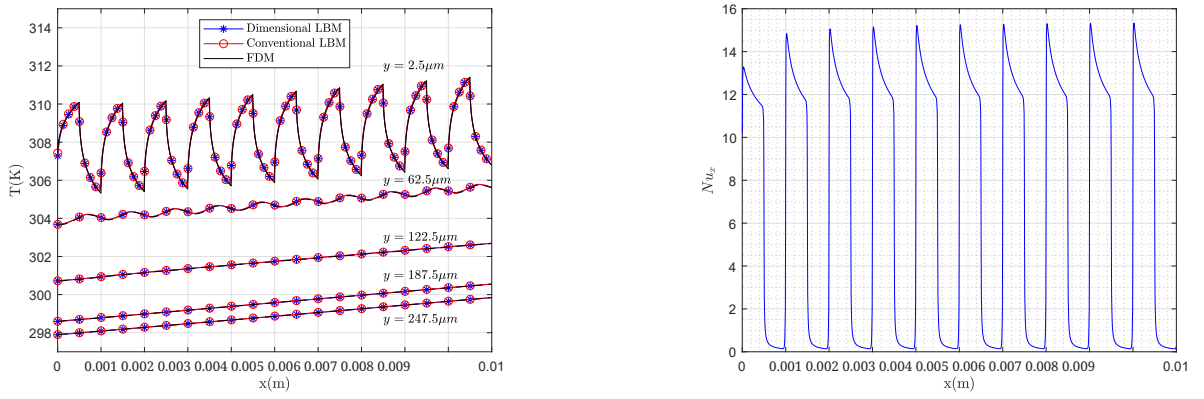
$$q''(x) = q_s'' + \Delta q_s'' \text{sign}\left[\sin\left(\frac{2\pi x}{L_h}\right)\right] \tag{45}$$

根据问题条件，描述所研究第一种情况中能量守恒的宏观方程可由式46给出。随后，为评估格子玻尔兹曼模型的性能，再次使用有限差分格式求解该方程，作为参考解。该有限差分解采用 [76], 中所述的过程，考虑 $\Delta x_{FDM} = \Delta y_{FDM} = 1.25 \cdot 10^{-6}m$ 完整通道，且未应用对称边界条件。

$$u\frac{\partial T}{\partial x} = \alpha\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right) \tag{46}$$

所得数值解如图3所示。对于两种格子玻尔兹曼模型，所采用的空间网格间距为$\Delta x = 5.0 \cdot 10^{-6} m$，时间步长为 $\Delta t = 2.0 \cdot 10^{-6} s$。格子玻尔兹曼方法的解对应于式46的瞬态版本。图3a 所示结果表明，格子玻尔兹曼方法结果之间，以及格子玻尔兹曼方法与有限差分结果之间，均具有非常好的一致性。以有限差分解为参考，测得两种格子玻尔兹曼模型的全局误差分别为 $E_2^{dim} = 0.010\%$和 $E_2^{conv} = 0.012\%$，表明其与预期解高度一致，且有量纲格子玻尔兹曼方法的误差略小。总体而言，水温沿着流动方向通过通道时逐渐升高，并在热流源附近的高度方向上呈现振荡。

图 3b展示了局部努塞尔数的变化， Nu 其随 x 变化，对应有量纲格子玻尔兹曼方法。 Nu 随 x呈周期性变化，且变化趋势相同，因为流动已充分发展。在这种情况下，平均努塞尔数等于 $Nu = 6.67$。



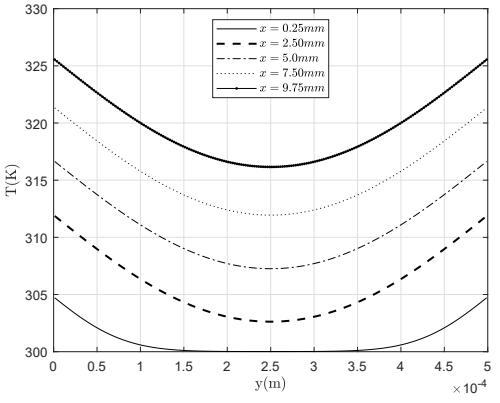
(a) (b)

图 3： 采用有限差分法、传统格子玻尔兹曼方法和有量纲格子玻尔兹曼方法得到的沿通道 x方向的温度变化，图中展示了多个 y 值。（b）有量纲格子玻尔兹曼方法模拟中通道壁处的局部努塞尔数。

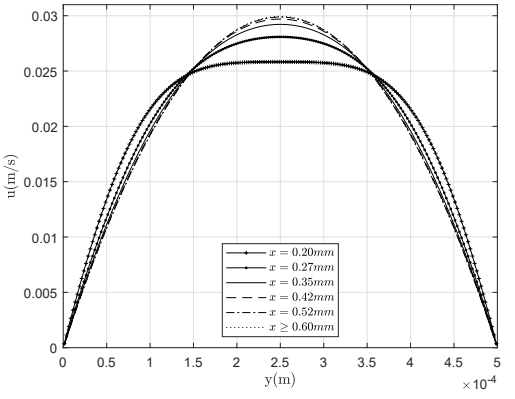
接下来考虑第二种情况：恒定热通量下通道中的充分发展水流。现在，水以均匀速度进入通道，入口温度为 $u_m = 0.02m\ s^{-1}$ 和 $T_{in} = 300K$，二者分别对应速度和温度，并假定流体性质相同。水流经通道时，两块板均承受为 $q'' = 40000W\ m^{-2}$ 的均匀热通量。由于流动处于发展过程中，为了获得收敛解，所使用的离散时间和空间间隔减小为 $\Delta x = 2.50 \cdot 10^{-6} m$ 和 $\Delta t = 6.25 \cdot 10^{-7} s$。

图中展示了有量纲格子玻尔兹曼方法得到的通道沿线若干横截面处的温度和速度分布。4可以看出，经过一定的通道长度后，速度分布不再变化，这是因为流动已充分发展。在低雷诺数下，平行板间流动的入口速度分布均匀时，流体动力学入口长度可计算为 $L_e = D_h(0.3125 + 0.011 Re_D)$[77]。在此情形下，通道雷诺数为 $Re_D = 23.86$时，预测的流体动力学入口长度为$L_e = 0.57mm$，而根据格子玻尔兹曼方法结果测得的长度为 $L_e \approx 0.60mm$。该模拟结果与所分析解析关系的预期结果一致。需要注意的是，这些关系也只是理论估算。此外，已知充分发展后的速度分布必须符合式43给出的解析关系。将 $x = 0.60mm$ 处的速度分布与解析速度分布进行比较后发现，无论采用常规格子玻尔兹曼方法还是有量纲格子玻尔兹曼方法，全局误差均约为 $E_2 = 0.1575\%$ 。

同样，当某个 x 值时，温度 y方向上的温度分布不再改变其形状，而是随着通道受热仅在幅值上继续增加，但保持相同的 ΔT 在 y。根据这一观察结果，并分析图5b所示的局部努塞尔数值可知，在某个 x 值（约为 $2.5mm$）之后，局部努塞尔数值不再发生变化，因此可以得出结论：通道长度足以使速度分布和热分布均达到充分发展。因此，可将充分发展状态下的局部努塞尔数值与文献中的预期值进行比较。对于恒定且相等热通量条件下两块平行板之间的充分发展流，努塞尔数为 $Nu = 8.24$ [78]。有量纲格子玻尔兹曼方法得到的结果为 $Nu_{LBM} = 8.15$，与理论值高度吻合，相对误差为1，02%。通道壁面上的局部努塞尔数变化如图5b所示。在最后一种情况下，充分发展前的通道流受到由方程45给出的交变热通量作用，以便

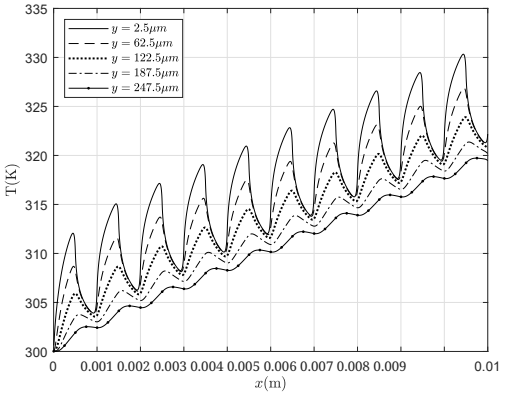


(a)

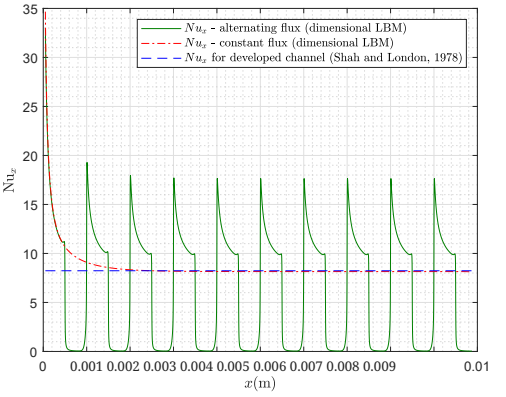


(b)

图 4： 发展流沿通道长度方向多个横截面处的温度 (a) 和速度 (b) y-分布。



(a)



(b)

图 5： (a) 振荡热通量作用下发展流在多个 x-方向上的温度分布，其中 y-取不同值。(b) 考虑恒定和振荡热通量时发展流的局部努塞尔数，以及根据 [78] 得到的充分发展流局部努塞尔数。

比较这种边界条件变化对局部努塞尔数的影响。所采用的空间和时间间隔与前一次模拟相同（$\Delta x = 2.50 \cdot 10^{-6} m$ 和 $\Delta t = 6.25 \cdot 10^{-7} s$）。该情况下得到的稳态温度分布如图5a所示。随着流动逐渐发展，可以观察到壁面交变热通量对温度分布的影响更大。如图5b所示，受到交变热通量作用的充分发展前通道流，其努塞尔数达到的局部数值高于恒定热通量条件下的通道流。然而，各情况下计算得到的平均努塞尔数分别为 $Nu_{const} = 8.92$ （恒定热通量）和 $Nu_{var} = 6.43$ （交变热通量），后者由于壁面热通量的间歇性而低于前者。

图中展示了整个通道沿程的温度场。6 对于三种模拟工况，可以观察到若干明显差异。在图 6a中，通道入口处的流动已充分发展；由于振荡热通量作用下的加热过程，温度分布沿通道仅发生轻微变化。在这种情况下，靠近壁面的较暖流体区域略有增大，通道出口处的冷流体核心区有所减小。然而，只有在此工况下，核心流体的温度才几乎等于较低的输入温度值。另外两种情况分别对应恒定热通量和振荡热通量下的发展流，如图 6b和6c所示。在恒定热通量情况下，由于沿通道持续受到加热，出口平均温度最高。对于受振荡

热通量作用的发展流，温度场呈现出类似的分布模式，但由于热通量的间歇性，传递至通道中心的对流传热较少。

恒定热通量条件下的发展流获得了较高的平均努塞尔数（$\overline{Nu}$ =8.92），甚至高于充分发展流的理论值 $Nu = 8.24$，这是因为通道入口处流体动力学边界层和热边界层的发展所产生的影响。振荡热通量两种情况下的平均努塞尔数较低，充分发展流和发展流的数值分别为 $\overline{Nu} = 6.67$ 和 $\overline{Nu} = 6.43$。在这种情况下，入口处冷流的流动发展区域减少了壁面加热器传递的总热量。当前问题可模拟电子设备制冷通道中的传热过程。

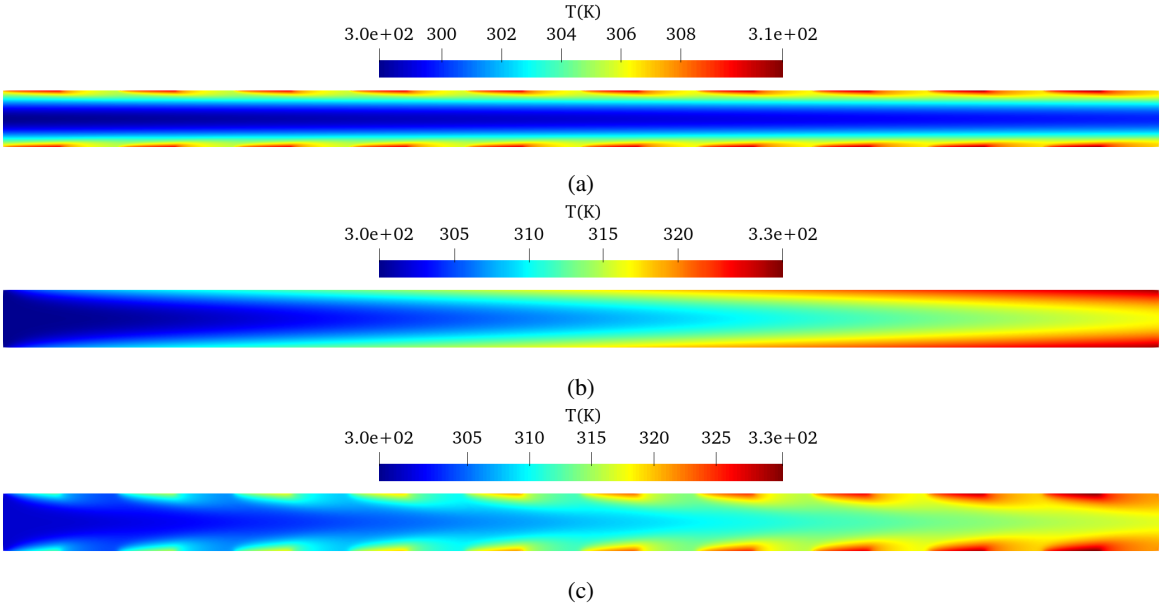


图 6： 通道内的温度场分布，分别对应模拟的第一种（a）、第二种（b）和第三种（c）情况。

此外，需要指出的是，本节所有模拟均忽略了黏性耗散。作出这一假设的依据是布林克曼数的数值较小，B_r（式 47）。由于所得最大值为 $B_r = 10^{-5}$，黏性应力导致的热耗散对这些情况的影响可以忽略不计，因此可放心地将其忽略。

$$B_r = \frac{\zeta u_m^2}{k(T_w - T_m)} \tag{47}$$

附录B、C 和D 展示了采用所提出的有量纲格子玻尔兹曼方法对其他经典问题进行模拟所得到的结果，包括一维对流扩散流、等温泊肃叶流，以及封闭腔体中的自然对流。对于前两种情况（附录B和C），所得结果与解析解进行了比较。然而，对于自然对流（附录D），数值解则与文献中的基准结果进行了比较 [79]。所有情况下，有量纲格子玻尔兹曼方法的结果也都与传统格子玻尔兹曼方法进行了比较。所有测试均显示全局误差非常小，证明所提出的格子玻尔兹曼方法在物理上合理且准确。因此，结合本节讨论的结果以及附录B、C 和D中的结果，可以认为，有量纲格子玻尔兹曼方法适用于模拟涉及热对流与扩散的应用问题。

4.3. 静态气泡

本节研究由单组分（液体和蒸汽饱和水系统）和双组分（气水系统）构成的两相流体系统。本文考虑一个理论上的静态问题，即模拟一个周围被液体包围的气泡

	空气和水 - 25°C，1个标准大气压	饱和水 - 100°C	饱和水 - 80°C	饱和水 - 25°C
$\rho_g(kg\ m^{-3})$	1.184	0.598	0.294	0.023
$\rho_l(kg\ m^{-3})$	997.048	958.349	971.766	997.003
ρ_l/ρ_g	842.1	1602.6	3305.3	43349.0
$\nu_g(10^{-7}m^2\ s^{-1})$	155.770	204.493	392.919	4204.120
$\nu_l(10^{-7}m^2\ s^{-1})$	8.927	2.938	3.643	8.927
ν_g/ν_l	17.4	69.6	107.9	470.9
$\zeta_g(10^{-5}Pa\ s)$	1.845	1.223	1.154	0.970
$\zeta_l(10^{-5}Pa\ s)$	89.006	28.158	35.404	89.004
ζ_l/ζ_g	48.2	23.0	30.7	91.8
$\sigma(N\ m^{-1})$	0.072	0.059	0.063	0.072

表2静态气泡模拟所涉及的四种流体系统的热力学和传输性质，取自 [75]。

并处于平衡状态。该问题是一个常见的基准测试，可用于评估传统格子玻尔兹曼方法和有量纲格子玻尔兹曼方法的性能。

该问题由一个半径为 R 的二维圆形气泡构成，气泡被液体包围，并初始化于正方形计算域的中心。所有边界均设为周期性边界，且为避免与尖锐界面相关的不稳定性，根据式 ϕ（以及密度 ρ）初始化各相之间的分布。随着时间推移，系统达到稳态，平衡密度分布必须与式 48 [64]所示的解析解相匹配。此外，界面处的压力变化（$\Delta P = P_{out} - P_{in}$）与液体表面张力 σ 之间的关系必须符合拉普拉斯定律，如式49所示。

$$\rho(x,y) = \frac{(\rho_l + \rho_g)}{2} - \frac{(\rho_l - \rho_g)}{2}\tanh\left\{\frac{2\left[\sqrt{(x-x_c)^2+(y-y_c)^2} - R\right]}{W}\right\} \tag{48}$$

$$\Delta P = \frac{\sigma}{R} \tag{49}$$

通过验证这两项性质，评估并比较格子玻尔兹曼方法在四种不同两相系统中的表现。第一种是温度为 25^oC 且压力为 $101.325kPa$ （1个标准大气压）的空气-水系统。其余三种系统由蒸汽气泡和处于平衡状态、未发生相变的饱和水液相构成，对应的饱和温度分别为： 100^oC、 80^oC 和 25^oC。各系统涉及的热力学和传输性质见表2。空气-水系统分别采用有量纲格子玻尔兹曼方法和传统格子玻尔兹曼方法进行模拟，以比较这两种解。其余三种两相系统仅采用有量纲格子玻尔兹曼方法进行模拟。

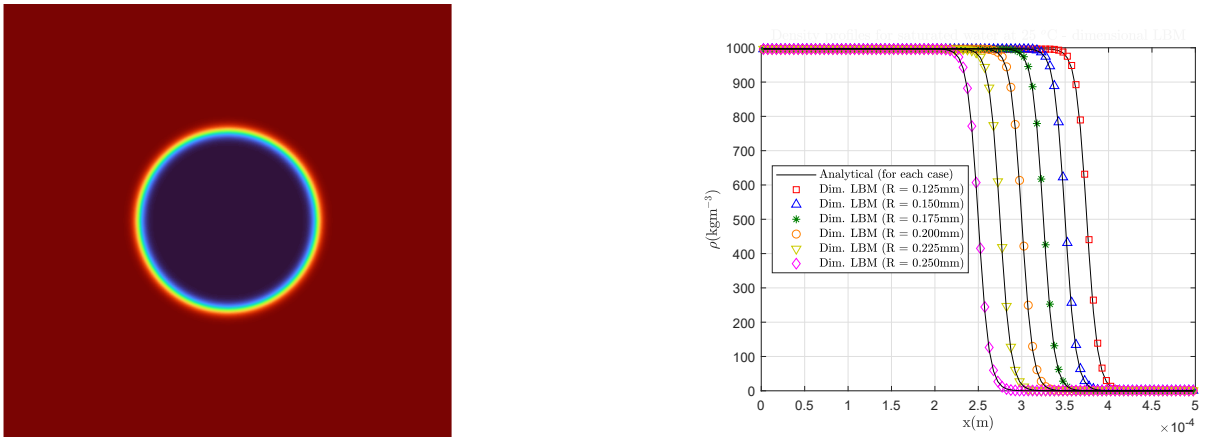
计算域的尺寸取为 $1mm : 1mm$，并对每个系统测试了六种不同的气泡半径： $0.250mm$， $0.225mm$， $0.20mm$， $0.175mm$， $0.150mm$ 和 $0.125mm$。界面宽度设为 $W = 25.0 \cdot 10^{-6}m$，迁移率取为 $M = 1.0 \cdot 10^{-5}m^2\ s^{-2}$，所有模拟采用的离散时间和空间间隔分别为 $\Delta x = 5.0 \cdot 10^{-6}m$ 和 $\Delta t = 1.0 \cdot 10^{-7}s$。对于空气-水系统，两种格子玻尔兹曼模型均采用 BGK碰撞算子；对于其他三个系统，为提高稳定性，两相动量方程采用多松弛时间算子，而非式26，界面追踪格子玻尔兹曼方程（式22）则采用 BGK 碰撞算子。

饱和水在 25^oC条件下、气泡半径为 $R = 0.20mm$时模拟域的密度分布如图7a所示；饱和水在 25°C 条件下，对六种测试气泡半径得到的密度随 x 变化的结果如图7b所示。表3 列出了四种两相系统中密度分布相对于解析解的全局误差。可以看出，所有情况下的误差都很小，表明两种格子玻尔兹曼模型均具有良好的精度。对于气水系统，有量纲格子玻尔兹曼方法与传统格子玻尔兹曼方法的误差相同，这表明对于该问题，有量纲格子玻尔兹曼方法并未改变格子玻尔兹曼方法的稳定性和精度。

R^{-1} (m^{-1})	空气-水 - 25°C，1个标准大气压 有量纲与常规格子玻尔兹曼方法 (%)	饱和水 - 100°C (%)	饱和水 - 80°C (%)	饱和水 - 25°C (%)
4000.0	0.253	0.253	0.253	0.253
4444.44	0.289	0.286	0.286	0.286
5000.0	0.316	0.316	0.316	0.316
5714.29	0.346	0.346	0.347	0.347
6666.67	0.391	0.392	0.392	0.392
8000.0	0.460	0.462	0.462	0.461

表3E_2 对于每个 R^{-1} 值，格子玻尔兹曼方法与密度分布解析解之间的结果。

需要指出的是，图7 和表3 中饱和水在 25°C 条件下的结果是在密度比和黏度比极高的情况下获得的，具体为：$\rho_l/\rho_g = 43349.0$，$\nu_g/\nu_l = 470.9$，以及 $\zeta_l/\zeta_g = 91.8$（见表2）。这些比值非常高，公开文献中尚未对其进行完整模拟，说明所提出的有量纲格子玻尔兹曼方法具有良好的精度和可靠性。



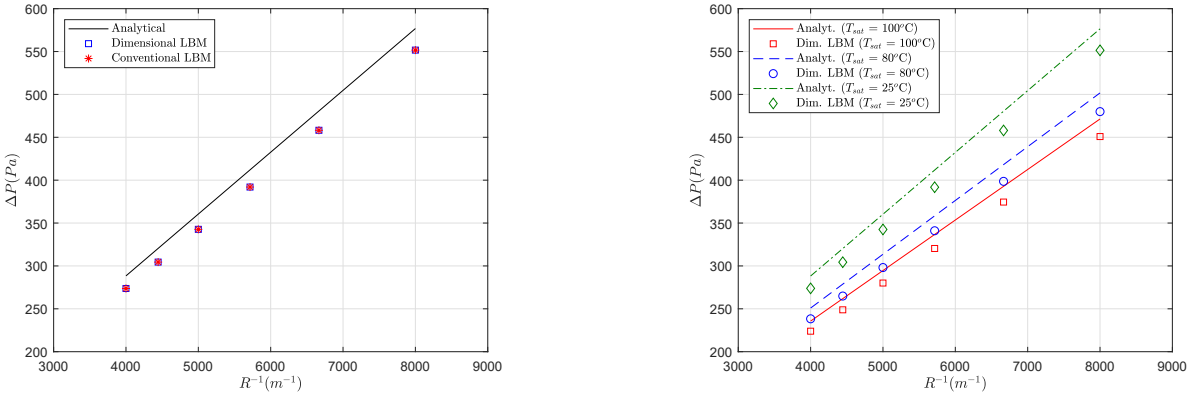
(a) (b)

图7： (a) 饱和水在 25^oC 时的密度分布示意图，其中气泡半径为 $R = 0.20mm$，蓝色区域（内部）为气体，红色区域（外部）为液体。(b) 饱和水在 25 °C 时，每个模拟的 R 值对应的横截面密度分布。（注：图中仅显示了横截面的一半，因为计算域是对称的）。

现在验证拉普拉斯定律，将气泡内部压力（P_{in}）计算为所有气体节点的平均值（其中 $\phi = 0.0$）。同样，外部压力（P_{out}）通过流体部分的平均值计算（节点满足 $\phi = 1.0$）。据此，图8展示了格子玻尔兹曼方法模拟结果及拉普拉斯定律的预期结果，而表4列出了每次模拟的相对误差。同样可以看到，在气水系统中，量纲格子玻尔兹曼方法模型与传统格子玻尔兹曼方法模型的误差相同，这符合预期。此外，尽管误差高于密度分布的误差，但 ΔP 的误差仍然相当小，表明所有模拟结果均有效，并凸显了本文所述多相格子玻尔兹曼方法模拟具有高密度比和黏度比的真实流体的能力。

关于使用传统格子玻尔兹曼方法进行模拟，有一点值得探讨，即所采用的无量纲变量和无量纲数的取值。通常，格子玻尔兹曼方法适用于一组无量纲数和物性比。在已进行的大多数液体中气泡的平衡稳态问题数值测试中，作者试图模拟密度比为 $\rho_l/\rho_g = 1000$ 的水-空气系统，但所采用的黏度比和表面张力与该系统的物理值并不完全相符。

在当前对 25°C下气水系统的模拟中，考虑到前文解释的无量纲化过程，使用了以下无量纲参数：$\tilde{\nu}_g = 1.682$，$\tilde{\nu}_l = 3.57 \cdot 10^{-3}$，$\tilde{\sigma} = 5.7648$，



(a) (b)

图 8： (a) 根据拉普拉斯定律以及常规和有量纲格子玻尔兹曼方法模拟得到的压力差随 R^{-1} 的变化：(a) 气水系统和 (b) 饱和水系统。

R^{-1} (m^{-1})	空气-水 - 25°C，1个标准大气压 有量纲与常规格子玻尔兹曼方法 (%)	饱和水 - 100°C (%)	饱和水 - 80°C (%)	饱和水 - 25°C (%)
4000.0	5.097	4.998	4.998	4.996
4444.44	4.981	4.976	4.976	4.965
5000.0	4.943	4.936	4.936	4.935
5714.29	4.857	4.853	4.849	4.850
6666.67	4.675	4.667	4.666	4.667
8000.0	4.357	4.349	4.349	4.351

表4 E_2 静态气泡问题中，格子玻尔兹曼模型模拟的压力差结果与拉普拉斯定律的比较。

$\tilde{\rho}_g = 1.184$，$\tilde{\rho}_l = 997.084$ 和 $M = 0.040$。可以看出，该问题中的无量纲表面张力值$\tilde{\sigma} = 5.7648$远高于常用值（约为 $0.0001 \leq \tilde{\sigma} \leq 0.2$ [56, 59, 80, 81]）。采用这一数值是为了保持 $\sigma = 0.072 N\ m^{-1}$的物理正确值。这表明，有必要使用考虑模拟系统真实物理性质的格子玻尔兹曼方法。这样便能从更贴近现实的角度研究该方法的局限性和优势。这正是提出并使用有量纲格子玻尔兹曼方法的主要目的。在这一格子玻尔兹曼方法模型中，会自动考虑真实的物理条件。其难点在于问题的模拟以及获得收敛解，这与任何复杂问题的数值模拟一样。

4.4. 分层泊肃叶流

在本节最后，我们通过一项动态多相测试，即分层泊肃叶流，来评估有量纲格子玻尔兹曼方法的性能。该问题涉及平行板通道中的流动，其中一个相占据通道下半部分，另一个相占据上半部分。随后，对流体施加一个恒定力场，使通道中的各组分或各相沿长度方向加速。当黏性力与力场达到平衡时，系统进入稳态，并可观察到沿 x方向的恒定速度分布。

研究该问题时，我们考虑稳态解，并假设动力黏度随通道高度位置变化 y。遵循格子玻尔兹曼方法中的弥散界面模型，可将纳维–斯托克斯方程简化，并用式50描述。动力黏度的分布形式由式51给出。为获得参考解，我们采用中心二阶有限差分法求解该问题，以便与格子玻尔兹曼方法给出的解进行比较。

需要指出的是，如果认为相之间存在尖锐界面，那么该问题有一个解析

	空气-水 - 25°C，1个标准大气压 both	饱和水 - 100°C	饱和水 - 80°C	饱和水 - 25°C
$E_2(\%)$	0.282	1.628	1.311	0.817

表 5分层泊肃叶两相系统各算例中，格子玻尔兹曼方法模拟与有限差分解之间的全局相对误差，E_2。

解 [57, 82]。不过，为了使格子玻尔兹曼模型与参考解之间的比较更加一致，本文优先采用了前文所述的有限差分格式，该格式允许考虑由式 51表示的弥散界面，这与多相格子玻尔兹曼模型中的假设一致。文献中的其他作者也采用了这一选择 [83, 84]。有限差分格式所用的空间间隔为 $\Delta y_{FDM} = 4.0 \cdot 10^{-8} m$，以满足有限差分解所设定的收敛准则。

$$\frac{d}{dy}\left[\zeta(y)\frac{du(y)}{dy}\right] + F_x = 0 \tag{50}$$

$$\zeta(y) = \frac{(\zeta_l + \zeta_g)}{2} - \frac{(\zeta_l - \zeta_g)}{2}\tanh\left(\frac{2y - H}{W}\right) \tag{51}$$

对第4.3 节中的四种两相系统进行模拟：气水系统采用两种格子玻尔兹曼模型，其余三种情况则采用传统格子玻尔兹曼方法，分别模拟不同温度下的饱和水（100°C、80°C 和 25°C）。通道高度取为 $H = 0.50mm$。由于稳态解不依赖通道长度，因此为缩短模拟时间，假设通道总长度为 $10\Delta x$。对于采用格子玻尔兹曼方法的问题，选用 $D2Q9$ 速度格式，界面跟踪方程采用 BKG 碰撞算子（式22），动量方程则采用多松弛时间方法。界面宽度和迁移率仍分别取为 $W = 25.0 \cdot 10^{-6} m$ 和 $M = 1.0 \cdot 10^{-5} m^2\ s^{-1}$。所有模拟的空间和时间离散间隔分别取为 $\Delta x = 1.25 \cdot 10^{-6} m$ 和 $\Delta t = 1.25 \cdot 10^{-7} s$。问题的驱动力取为 $F_x = u_c(\zeta_l + \zeta_g)/H^2$，其中 $u_c = 1.0 \cdot 10^{-4} m\ s^{-1}$ 为通道中心处的速度。

此外，与前文第 $\nu(\mathbf{x})$ 节中提到的、用于计算局部 $\phi(\mathbf{x})$的线性关系不同，2.3 现在运动黏度表示为 τ 关于 $\nu(\mathbf{x})$的函数 $\nu(\mathbf{x}) = \zeta(\mathbf{x})/\rho(\mathbf{x})$，其中$\zeta(\mathbf{x})$=$\phi(\mathbf{x})(\zeta_l - \zeta_g) + \zeta_g$。作出这一假设是为了改善界面处松弛参数过渡的结果，正如 [85]和 [83]所指出的。

采用格子玻尔兹曼方法（LBM）和有限差分方法得到的数值解见图9 ，LBM 结果与有限差分解之间相应的全局误差列于表5。再次，针对气水系统，两种 LBM 模型得到的误差相同，表明有量纲格子玻尔兹曼方法具有物理一致性。有量纲格子玻尔兹曼模型在另外三个饱和水系统算例中也表现出很高的精度。值得注意的是，最大的全局误差出现在温度为 100°C 的饱和水系统中，该系统的运动黏度最小（$\nu_l = 2.938 \cdot 10^{-7} m^2\ s^{-1}$）。这是因为较低的运动黏度会导致较低的 τ 值；小的不稳定性随之增长，可能造成精度损失，但尚不影响收敛。在这种近乎纯粹的剪切流情况下，黏度大小对模拟结果的影响大于密度比。事实上，对于水系统，温度为 25°C 的饱和水系统全局误差最小，尽管该算例的密度比最高，等于 $\rho_l/\rho_g = 43349.0$，这是一个很高的数值。

现在，为了说明量纲分析方法在进行数值模拟方面的优势，以四种测试系统中最不利的情况——25^0C 下的饱和水——为例，展示网格加密的简单分析。首先，考虑网格尺寸为 $\Delta x = 5.0 \cdot 10^{-6} m$ 且 $\Delta t = 1.0 \cdot 10^{-7} s$的网格。该网格尺寸得到的结果精度较差，全局误差为 $E_2 = 16.132\%$（见图 10）。随后，将网格尺寸减半，以尝试改善解。为了满足格子玻尔兹曼方法稳定性准则，还需要调整离散时间间隔，采用以下新的离散时间间隔： $\Delta x_{new} = 2.50 \cdot 10^{-6} m$ 和 $\Delta t_{new} = 0.25 \cdot 10^{-7} s$。该网格的全局误差降至约 $E_2 = 3.804\%$。此后，再次加密网格，采用 $\Delta x_{new2} = 1.25 \cdot 10^{-6} m$ 和 $\Delta t_{new2} = 0.125 \cdot 10^{-7} s$。对于这个更精细的网格，得到的误差最小，为 $E_2 = 1.628\%$，符合预期。

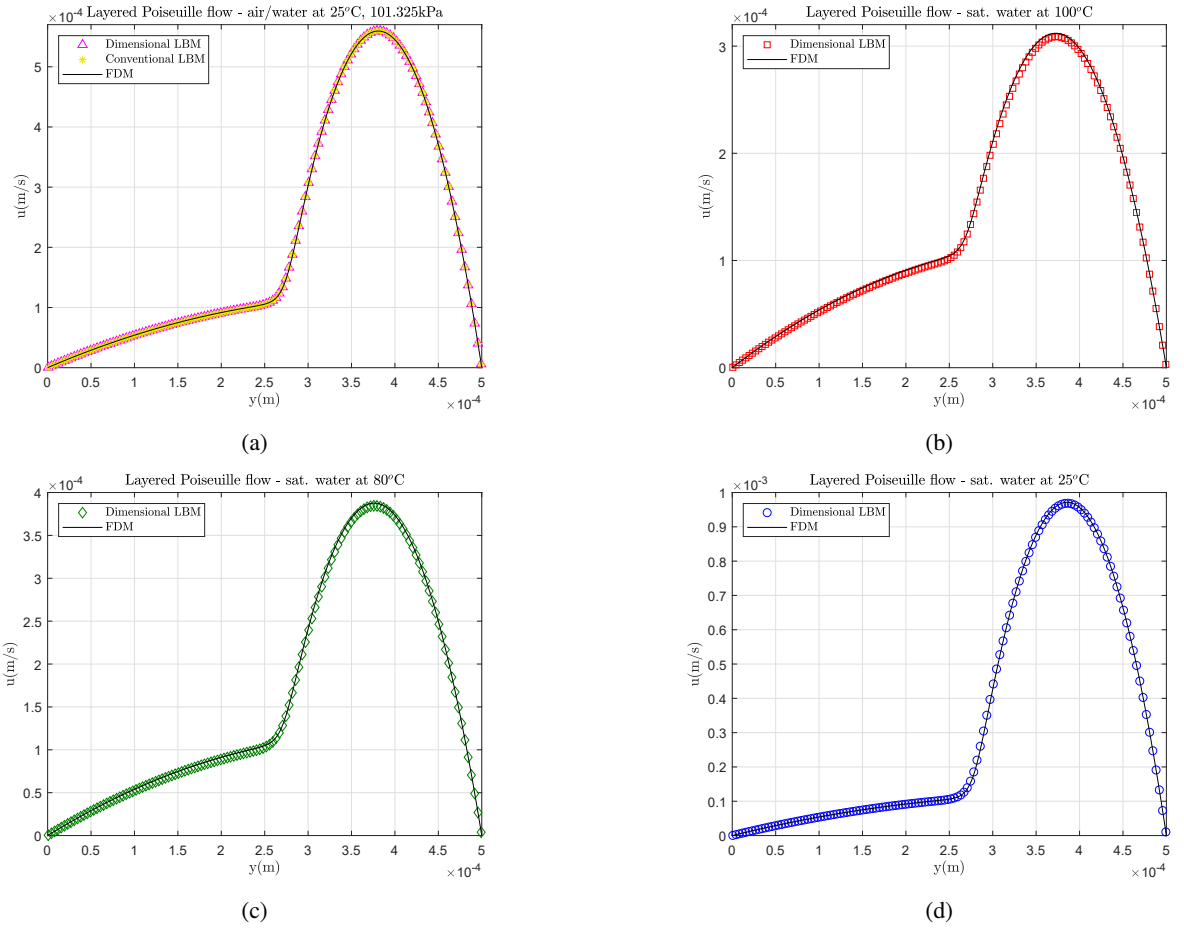


图 9：采用格子玻尔兹曼方法和有限差分法得到的分层泊肃叶流速度剖面：(a) 气水系统；(b) 100°C 下的饱和水；(c) 80°C 下的饱和水；(d) 25°C 下的饱和水。

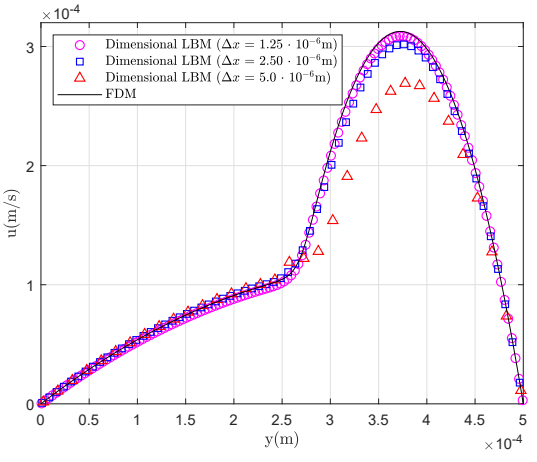


图 10：(a) 使用有量纲格子玻尔兹曼方法得到的 100°C 下饱和水系统分层泊肃叶流数值解，考虑了三种不同的空间网格。

考虑到模拟所需时间，以及表 5 中所示所有系统的全局误差均较小，因此未进一步细化网格。正如预期，所有模拟均采用了最精细的网格尺寸。从上述说明可以看出，所提出的有量纲格子玻尔兹曼方法完全避免了有量纲化过程，只需设定适当的空间和时间离散间隔。所得结果表明，所采用的多相格子玻尔兹曼方法也适用于处理动态两相问题，包括密度比和黏度比均非常高的真实流体。这类结果在公开文献中鲜有报道。

5. 结论

本文介绍了一种格子玻尔兹曼方法的新实现方法，该方法将所有变量均以物理单位表示，而非像通常做法那样进行物理单位与格子空间之间的换算。为验证并分析所提出的格子玻尔兹曼方法的适用性，本文求解了若干常见工程问题，包括：含热生成的一维热传导；在恒定热通量和振荡热通量条件下，二维通道内的强制对流，涵盖充分发展流和发展中流动；液相中的二维多相静止气泡；以及二维多相分层泊肃叶流，后两者均考虑了密度比和黏度比非常高的真实流体。另有三个问题的解——一维对流扩散方程、等温通道流和自然对流——简要介绍于附录B、C和D中。所有数值结果均在解析解可用时与之比较，否则则与有限差分格式所得结果比较。在所有情况下，模拟结果均表现出很高的精度。主要结论如下。

I. 所获得的结果证实，有量纲格子玻尔兹曼方法可安全地用于模拟许多常见的传输现象，包括单相流体流动和传热过程，以及流体动力学静态和动态两相两组分流。所提出的方法得到了精确的结果，与采用传统格子玻尔兹曼方法模拟相同问题所得的结果非常相似。该方法可以轻松扩展到三维，也可采用其他碰撞算子。

II. 鉴于上述结果，有必要特别指出，本研究还成功模拟了真实流体的静态和动态两相问题，其密度比和黏度比均较高，分别超过 $\rho_l/\rho_g = 43300$和 $\nu_g/\nu_l = 470$，且精度良好。据作者所知，这些是相场多相格子玻尔兹曼领域的新成果，展现了第 2.3 节所述基于 Allen-Cahn方程的格子玻尔兹曼方法模型的强大能力，也体现了本文提出的有量纲方法所带来的便利。

III. 使用所提出的有量纲格子玻尔兹曼方法，可以直接采用物理单位对实际传输现象问题开展数值模拟，并获得与传统格子玻尔兹曼方法同等精度的结果。事实上，无量纲化过程会使格子玻尔兹曼方法在模拟实际问题时更加繁琐，并需要额外的实施步骤。因此，所提出的方法有望扩大格子玻尔兹曼方法作为模拟工具的应用范围，使其能够用于更广泛的问题。

本文成功采用有量纲格子玻尔兹曼方法求解了各种单相流体和传热问题，以及使用相场格子玻尔兹曼方法开展的两项流体动力学两相测试。然而，在公开文献中还存在若干其他格子玻尔兹曼模型，主要用于模拟多相多组分流动，本文未对此进行讨论。未来将开展进一步研究，以便将所提出的方法应用于其中一些模型，尤其是能够模拟发生相变的液气流动的方法，主要考虑通道和微通道中的两相流、空腔和通道中的沸腾等问题。

致谢

作者感谢圣保罗研究基金会（FAPESP，资助编号 2019/21022- 9 和 2016/09509-1）以及巴西国家科学技术发展委员会（CNPq，项目编号 305941/2020- 8）提供的支持。

A. 逆变换矩阵

速度方案的变换矩阵的逆矩阵 $D2Q9$ 可由式 A.1给出，适用于无量纲情形；而对于有量纲格子玻尔兹曼方法，则可由式 A.2给出。

$$[\mathbf{M}]^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{9} & \frac{-1}{9} & \frac{1}{9} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{9} & \frac{-1}{36} & \frac{-1}{18} & \frac{1}{6} & \frac{-1}{6} & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{9} & \frac{-1}{36} & \frac{-1}{18} & 0 & 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{-1}{4} & 0 \\ \frac{1}{9} & \frac{-1}{36} & \frac{-1}{18} & \frac{-1}{6} & \frac{1}{6} & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{9} & \frac{-1}{36} & \frac{-1}{18} & 0 & 0 & \frac{-1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{-1}{4} & 0 \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{18} & \frac{1}{36} & \frac{1}{6} & \frac{1}{12} & \frac{1}{6} & \frac{1}{12} & 0 & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{18} & \frac{1}{36} & \frac{-1}{6} & \frac{-1}{12} & \frac{1}{6} & \frac{1}{12} & 0 & \frac{-1}{4} \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{18} & \frac{1}{36} & \frac{-1}{6} & \frac{-1}{12} & \frac{-1}{6} & \frac{-1}{12} & 0 & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{18} & \frac{1}{36} & \frac{1}{6} & \frac{1}{12} & \frac{-1}{6} & \frac{-1}{12} & 0 & \frac{-1}{4} \end{pmatrix} \tag{A.1}$$

$$[\mathbf{M}]^{-1}_{dim} = \begin{pmatrix} \frac{1}{9} & \frac{-1}{9c^2} & \frac{1}{9c^4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{9} & \frac{-1}{36c^2} & \frac{-1}{18c^4} & \frac{1}{6c} & \frac{-1}{6c^3} & 0 & 0 & \frac{1}{4c^2} & 0 \\ \frac{1}{9} & \frac{-1}{36c^2} & \frac{-1}{18c^4} & 0 & 0 & \frac{1}{6c} & \frac{1}{6c^3} & \frac{-1}{4c^2} & 0 \\ \frac{1}{9} & \frac{-1}{36c^2} & \frac{-1}{18c^4} & \frac{-1}{6c} & \frac{1}{6c^3} & 0 & 0 & \frac{1}{4c^2} & 0 \\ \frac{1}{9} & \frac{-1}{36c^2} & \frac{-1}{18c^4} & 0 & 0 & \frac{-1}{6c} & \frac{1}{6c^3} & \frac{-1}{4c^2} & 0 \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{18c^2} & \frac{1}{36c^4} & \frac{1}{6c} & \frac{1}{12c^3} & \frac{1}{6c} & \frac{1}{12c^3} & 0 & \frac{1}{4c^2} \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{18c^2} & \frac{1}{36c^4} & \frac{-1}{6c} & \frac{-1}{12c^3} & \frac{1}{6c} & \frac{1}{12c^3} & 0 & \frac{-1}{4c^2} \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{18c^2} & \frac{1}{36c^4} & \frac{-1}{6c} & \frac{-1}{12c^3} & \frac{-1}{6c} & \frac{-1}{12c^3} & 0 & \frac{1}{4c^2} \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{18c^2} & \frac{1}{36c^4} & \frac{1}{6c} & \frac{1}{12c^3} & \frac{-1}{6c} & \frac{-1}{12c^3} & 0 & \frac{-1}{4c^2} \end{pmatrix} \tag{A.2}$$

B. 一维对流扩散方程

本例求解一维区域内的对流扩散方程。设空气的平均温度为 $335.50K$，其性质如下： $\rho = 1.052kg\ m^{-3}$、$c_p = 1008.174J\ kg^{-1}K^{-1}$ 和$k = 0.029W\ m^{-1}K^{-1}$。初始时，计算域处于 $T_{ini} = 298.0K$，随后右边界突然被设定为温度 $T_L = 373.0K$，而另一端保持在 $T_0 = 298.0K$。计算域长度为 $L = 1.0m$，空气以恒定速度 $u = 0.001m\ s^{-1}$流动。

表示该物理问题的宏观方程由方程 B.1 给出，而稳态条件下对应的解析解由方程 B.2给出。

$$u\frac{\partial T}{\partial x} = \alpha\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \tag{B.1}$$

$$T(x) = T_0 + (T_L - T_0)\left[\frac{\exp\left(\frac{\rho c_p u x}{k} - 1\right)}{\exp\left(\frac{\rho c_p u L}{k} - 1\right)}\right] \tag{B.2}$$

对于这个特定问题，鉴于湿节点格式在处理一维情形下的边界条件时较为简单，因此边界采用了湿节点格式，而非逐链路格式。后者用于其余所有

论文中进行的模拟。随后，采用 $D1Q3$ 速度格式，根据式 B.3实现了边界条件。所采用的碰撞算子为传统的 BGK 算子，如式 15所示。

$$\begin{cases} g_1(0,t+\Delta t) = T_0 - g_0(0,t+\Delta t) - g_2(0,t+\Delta t), \text{ for } x = 0.0; \\ g_2(L,t+\Delta t) = T_L - g_0(L,t+\Delta t) - g_1(L,t+\Delta t), \text{ for } x = L; \end{cases} \tag{B.3}$$

格子玻尔兹曼模型是在考虑 $\Delta x = 0.0125m$ 和 $\Delta t = 0.10s$的情况下求解的。格子玻尔兹曼方法的数值解和解析解均显示在图B.1中。将这些解进行比较后发现，相对于理论解，两种格子玻尔兹曼模型的全局误差均为$E_2 = 0.030\%$ 。

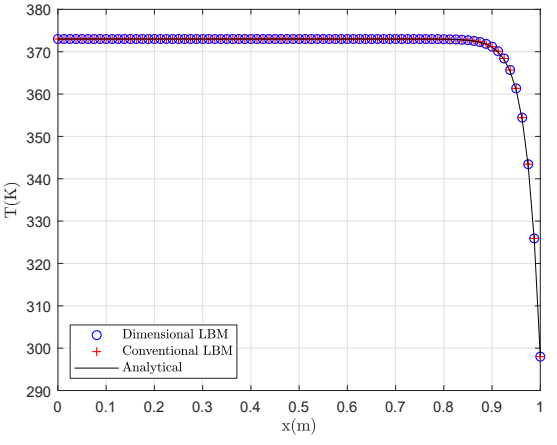


图 B.1 ：一维对流扩散问题的稳态温度分布 .

所给出的结果验证了有量纲格子玻尔兹曼方法的正确性。

C. 等温通道流

格子玻尔兹曼模型还用于模拟两块平行板之间的等温泊肃叶流。假设两板之间的距离为 $H = 0.50mm$，且由于解析解不依赖于通道长度（由式 43给出），因此将长度设为 10 个计算网格（$10\Delta x$），并采用 $D2Q9$ 速度格式，其中 $\Delta x = 5.0 \cdot 10^{-6}m$ 且 $\Delta t = 1.0 \cdot 10^{-7}s$。

假设通道的平均速度为 $u_m = 0.20m\ s^{-1}$，且沿 x 方向的驱动力为$F_x = 12u_m\zeta/H^2$。流体为水，平均温度为 $301K$，其物性参数见表 1。结果如图 C.1所示。与解析解相比，发现两种格子玻尔兹曼模型的全局误差均为 $E_2^{dim} = E_2^{conv} = 0.011\%$，精度非常高。

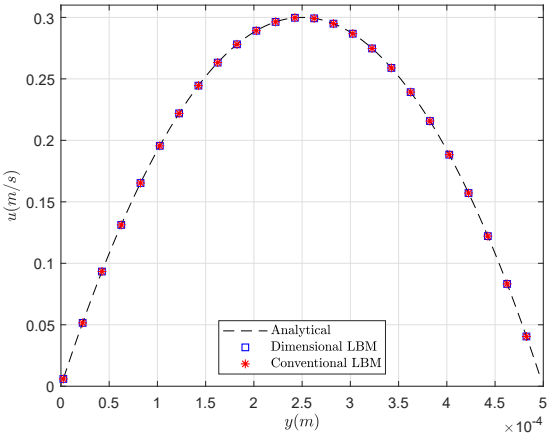


图 C.1：采用有量纲和传统格子玻尔兹曼方法模拟得到的两平行板间等温泊肃叶流稳态速度剖面，以及解析解。

D. 方形封闭腔体中的自然对流

本附录研究长度为 $L = 0.0130m$ 的方形腔体内的自然对流，腔体中初始为空气，温度为 $T_{ini} = 293.85K$。计算域左壁保持在较高的恒定温度 T_h =373.15K，右壁则保持在初始温度 $T_c = 293.85K$。顶部和底部壁面设为绝热。空气物性参数按参考温度 $T_{ref} = 333.50K$计算： ρ =1.059$kg\ m^{-3}$、$c_p = 1008.045J\ kg^{-1}K^{-1}$、 $k = 0.029W\ m^{-1}K^{-1}$、 $\alpha = 2.702 \cdot 10^{-5}m^2\ s$、 $\nu = 1.90 \cdot 10^{-5}m^2\ s$和 $\beta_{exp} = 3.004 \cdot 10^{-3}K^{-1}$ （热膨胀系数）。

壁面间的温差会因冷热流体之间的密度差而产生质量通量。为了在模拟中考虑这一效应而不改变流体的密度，假设存在一个由式D.1 [86–88]给出的浮力。这就是所谓的布辛涅斯克近似。在该方程中，ρ 为参考密度，在参考温度 T_{ref}下计算得到； $\mathbf{g} = (0, -9.81)m\ s^{-2}$ 为重力加速度。

$$\mathbf{F_b}(\mathbf{x}, t) = -\overline{\rho}\beta_{exp}\left[T(\mathbf{x}, t) - T_{ref}\right]\mathbf{g} \tag{D.1}$$

采用了 $D2Q9$ 速度集，动量格子玻尔兹曼方程采用 BGK 碰撞算子，热格子玻尔兹曼方程采用多松弛时间方法。对于静止壁面，动量分布函数采用反弹边界条件（式12）。此外，定温边界条件（左壁和右壁）采用反反弹规则（式19），顶部和底部壁面则建模为热绝缘，仅应用反弹规则（式20），使热通量为零（$q'' = 0$）。

该问题可用瑞利数（式 D.2）来表征。对于第一种情况，瑞利数取为 $Ra = 10^4$；对于第二种情况，则取为 $Ra = 10^6$。在最后这项测试中，为了获得 $Ra = 10^6$，同时保持流体的平均温度不变，方形腔体的新尺寸取为 $L = 0.60m$，并将壁面温度改为 $T_h = 373.85K$ 和 $T_c = 293.15K$，同时保持 $T_{ref} = 333.50K$不变。因此，两项测试中的空气属性均保持恒定且不变。

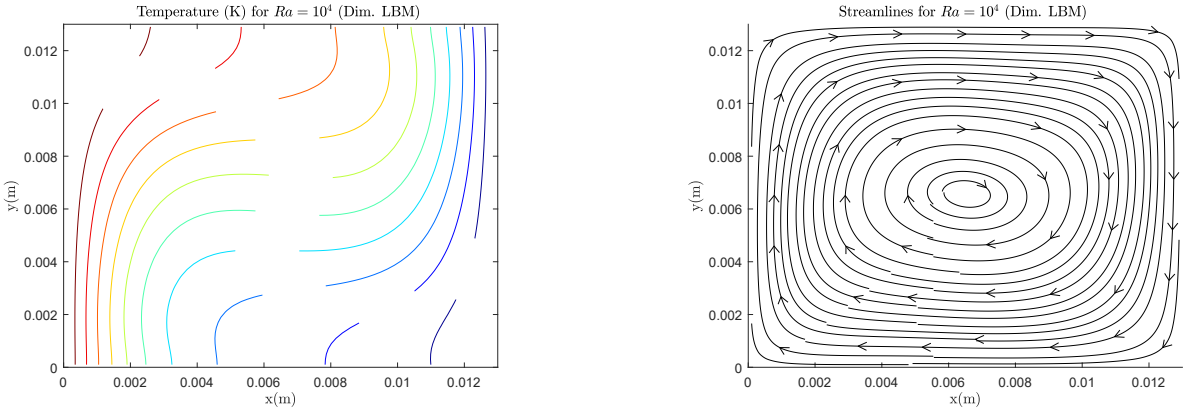
$$Ra = \frac{|\mathbf{g}|\beta_{exp}L^3(T_h - T_c)}{\nu\alpha} \tag{D.2}$$

对于这两种情况，离散空间和时间间隔分别取为 $\Delta x = 2.0 \cdot 10^{-4}m$和 $\Delta t = 2.0 \cdot 10^{-4}s$。温度等值线和流线的稳态结果如图 D.1 和 D.2所示。为了评估有量纲格子玻尔兹曼方法，将其解与传统格子玻尔兹曼方法的结果进行比较，并且二者

数值解通过与文献中给出的基准解进行比较来验证 [79]。所有这些解均列于表D.1中。所展示的两种格子玻尔兹曼模型与预期基准值吻合良好，全局误差极小， E_2。

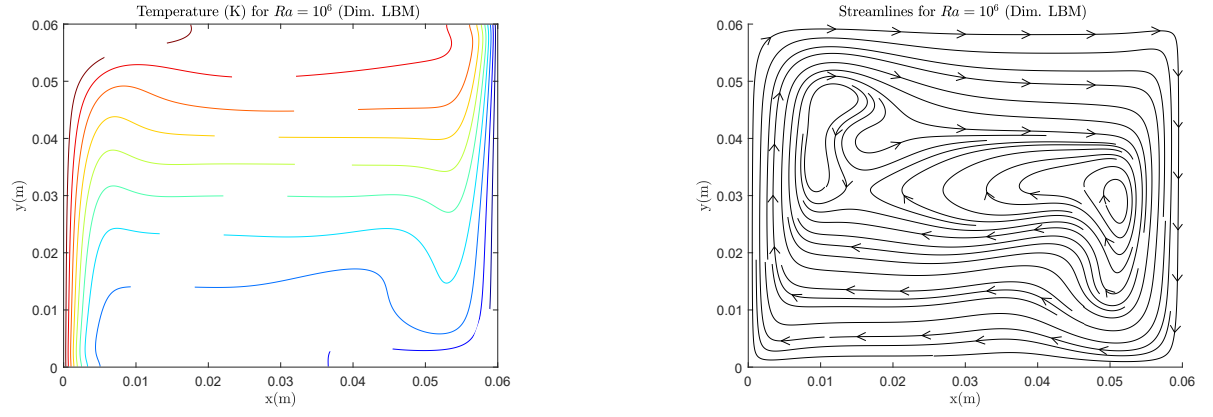
	$Ra = 10^4$		$Ra = 10^6$	
	$\overline{Nu}$	误差（%）	$\overline{Nu}$	误差（%）
基准解 [79]	2.243	-	8.800	-
有量纲格子玻尔兹曼方法	2.242	0.045	8.805	0.057
常规格子玻尔兹曼方法	2.242	0.045	8.794	0.068

表 D.1由两种格子玻尔兹曼模型模拟结果及基准解计算得到的平均努塞尔数 [79]。



(a) (b)

图 D.1：模拟 使用有量纲格子玻尔兹曼方法得到的 $Ra = 10^4$ 温度等值线（a）和流线（b） .



(a) (b)

图 D.2：模拟 使用有量纲格子玻尔兹曼方法得到的 $Ra = 10^6$ 温度等值线（a）和流线（b） .

参考文献

[1] Shiyi Chen 和 Gary D. Doolen。流体流动的格子玻尔兹曼方法。《流体力学年度评论》，30(1):329–364，1998。[2] Qinjun Kang、Dongxiao Zhang 和 Shiyi Chen。多尺度多孔介质流动的统一格子玻尔兹曼方法。《物理评论E》，66：056307，2002年11月。[3] Qing Liu、Ya-Ling He、Qing Li 和 Wen-Quan Tao。用于多孔介质对流传热的多松弛时间格子玻尔兹曼模型。《国际传热与传质期刊》，73:761–775，2014。[4] Lingquan Wang、Zhong Zeng、Liangqi Zhang、Haiqiong Xie、Gongyou Liang 和 Yiyu Lu。多孔介质中热流的格子玻尔兹曼模型。《应用热工程》，108:66–75，2016。ISSN 1359-4311。[5] Y Xuan 和 Z Yao。纳米流体的格子玻尔兹曼模型。《传热与传质》，41:199–205，2005。[6] M. Sheikholeslami、M. Gorji-Bandpy 和 D.D. Ganji。采用纳米流体的磁流体动力学自然对流传热的格子玻尔兹曼方法。《粉末技术》，254:82–93，2014。[7] Fanchen Wu 和 Zhonghao Rao。利用格子玻尔兹曼方法研究纳米流体电池热管理中的自然对流。《应用热工程》，115:659–669，2017。ISSN 1359-4311。[8] Hamidreza Khoshtarash、Majid Siavashi、Milad Ramezanpour 和 Martin J. Blunt。考虑布朗运动的开孔金属泡沫中两相纳米流体流动与传热的孔隙尺度分析。《应用热工程》，221:119847，2023。ISSN 1359-4311。[9] D H Rothman 和 J M Keller。不相溶元胞自动机流体。《统计物理学杂志》，52:1119–1127，1988。[10] Xiaowen Shan 和 Hudong Chen。模拟多相多组分流动的格子玻尔兹曼模型。《物理评论E》，47：1815–1819，1993年3月。[11] Michael R. Swift、E. Orlandini、W. R. Osborn 和 J. M. Yeomans。液气和二元流体系统的格子玻尔兹曼模拟。《物理评论E》，54:5041–5052，1996年11月。[12] Y.Y. Yan、Y.Q. Zu 和 Bo Dong。LBM：用于单相与多相流介观尺度建模的有效工具。《应用热工程》，31(5):649–655，2011。ISSN 1359-4311。MNF 2009 特刊。[13] Xiaowen Shan 和 Hudong Chen。通过格子玻尔兹曼方程模拟非理想气体和液气相变。《物理评论E》，49:2941–2948，1994年4月。[14] G. de Fabritiis、A. Mancini、D. Mansutti 和 S. Succi。液固相变的介观模型。《国际现代物理学杂志C》，09(08):1405–1415，1998。[15] W. Miller、S. Succi 和 D. Mansutti。各向异性液固相变的格子玻尔兹曼模型。《物理评论快报》，86:3578–3581，2001年4月。[16] Hesameddin Safari、Mohammad Hassan Rahimian 和 Manfred Krafczyk。用于两相流体流动中热相变数值模拟的扩展格子玻尔兹曼方法。《物理评论E》，88:013304，2013。[17] Alfredo Jaramillo、Vinícius Pessoa Mapelli 和 Luben Cabezas-Gómez。沸腾传热的伪势格子玻尔兹曼方法：一种网格加密过程。《应用热工程》，213:118705，2022。ISSN 1359-4311。[18] W.X. Li、Q. Li、Y. Yu 和 Kai H. Luo。具有分布式润湿性改性区域的结构化表面强化核态沸腾：格子玻尔兹曼研究。《应用热工程》，194:117130，2021。ISSN 1359-4311。[19] G McNamara 和 G Zanetti。利用玻尔兹曼方程模拟格子气自动机。《物理评论快报》，61:2332–2335，1988。[20] T. Krüger、H. Kusumaatmaja、A. Kuzmin、O. Shardt、G. Silva 和 E. Viggen。《格子玻尔兹曼方法：原理与实践》。施普林格国际出版社，2017。[21] Sauro S ucci。《流动物质复杂状态的格子玻尔兹曼方程》。牛津大学出版社，2018。[22] Dieter A. Wolf-Gladrow。《格子气元胞自动机与格子玻尔兹曼模型：导论》。施普林格出版社柏林、海德堡分社，2000。[23] S Chapman 和 T G Cowling。《非均匀气体的数学理论》，第2版。剑桥大学出版社，1952。[24] Edgar Buckingham。关于物理相似系统：量纲方程应用示例。《物理评论》，4(4):345–376，1914。[25] Ju'an Huang、Cheng Bao、Zeyi Jiang 和 Xinxin Zhang。格子玻尔兹曼方法中单位换算系统的一般方法及其在管束对流传热中的应用。《国际传热与传质期刊》，135:873–884，2019。[26] Saleh S Baakeem、Saleh A Bawazeer 和 Abdulmajeed A Mohamad。格子玻尔兹曼方法中单位换算的新方法。《应用科学》，11:6386，2021。[27] Joseph Bakarji、Jared Callaham、Steven L Brunton 和 J Nathan Kutz。基于 Buckingham π 的量纲一致性学习。《自然·计算科学》，页码1–11，2022。[28] Haibo Huang、Michael C Sukop 和 Xi-Yun Lu。《多相格子玻尔兹曼方法：理论与应用》。John Wiley & Sons, Ltd，2015。[29] Yan Su 和 Jane H Davidson。一种用于熔化与凝固传热的新型介观尺度、时间步长可调的无量纲格子玻尔兹曼方法。《国际传热与传质期刊》，92:1106–1119，2016。[30] Si-Cheng Wang、Zi-Xiang Tong、Ya-Ling He 和 Xiang Liu。液-汽相变模拟中伪势格子玻尔兹曼方法的单位换算。《流体物理学》，34:103305，2022。[31] M E Cates、J C Desplat、P Stansell、A J Wagner、K Stratford、R Adhikari 和 I Pagonabarraga。二元流体混合物格子玻尔兹曼模拟中的物理与计算尺度问题。《皇家学会哲学汇刊A辑》，363:1917–1935，2005。[32] Y H Qian、D D'Humieres 和 P Lalleman。纳维–斯托克斯方程的格子BGK模型。《欧洲物理学快报》，17(6):479–484，1992。[33] P. L. Bhatnagar、E. P. Gross 和 M. Krook。气体碰撞过程模型。I. 带电与中性单组分系统中的小振幅过程。《物理评论》，94(3):511–525，1954年5月。ISSN 0031-899X。[34] Zhaoli Guo 和 Chang Shu。《格子玻尔兹曼方法及其在工程中的应用》。世界科学出版公司，2013。[35] Z Guo、C Zheng 和 B Shi。格子玻尔兹曼方法中外力项的离散格子效应。《物理评论E》，65:046308，2002。[36] Saleh A Bawazeer、Saleh S Baakeem 和 A A Mohamad。格子玻尔兹曼方法外力格式的批判性综述：1993–2019。《工程计算方法档案》，28:4405–4423，2021。[37] F. J. Higuera 和 Javier Jiménez。格子气模拟的玻尔兹曼方法。《欧洲物理学快报》，9(7):663，1989。

[38] Pierre Lallemand 和 Li-Shi Luo。格子玻尔兹曼方法理论：色散、耗散、各向同性、伽利略不变性与稳定性。《物理评论E》，61:65463，2000。[39] A Kuzmin。采用格子玻尔兹曼格式的多相模拟。博士论文，卡尔加里大学，2010。[40] A Kuzmin、Z L Guo 和 A A Mohamad。在格子玻尔兹曼格式的多松弛时间框架中同时引入质量项和力项。《皇家学会哲学学报》，369:2219–2227，2011。[41] Anthony J C Ladd。通过离散玻尔兹曼方程进行颗粒悬浮液数值模拟。第1部分：理论基础。《流体力学杂志》，271:285–309，1994。[42] Anthony J C Ladd 和 R Verberg。颗粒-流体悬浮液的格子玻尔兹曼模拟。《统计物理学杂志》，104(5-6):1191–1251，2001。[43] Irina Ginzburg。格子玻尔兹曼模型的通用边界条件及其在平流和各向异性色散方程中的应用。《水资源进展》，28:1196–1216，2005。[44] Takaji Inamuro、Masato Yoshino 和 Kosuke Suzuki。《格子玻尔兹曼方法导论：复杂边界流与移动边界流的数值方法》。世界科学出版公司，2022。[45] Q Chen、X B Zhang 和 J F Zhang。热格子玻尔兹曼模型中诺伊曼边界条件的数值模拟。《国际现代物理学杂志C》，25(8):1450027，2014。[46] Xiaoyi He、Shiyi Chen 和 Gary D Doolen。不可压缩极限下格子玻尔兹曼方法的新型热模型。《计算物理学杂志》，146(1):282–300，1998。[47] Takeshi Seta。基于隐式温度修正的浸入边界-热格子玻尔兹曼方法及其在自然对流模拟中的应用。《物理评论E》，87:063304，2013。[48] Ivan Talão Martins 和 Luben C. Gómez。采用新离散化策略的格子玻尔兹曼方法微通道共轭传热建模。《强化传热杂志》，29(3):79–102，2022。ISSN 1065-5131。[49] Ting Zhang、Baochang Shi、Zhaoli Guo、Zhenhua Chai 和 Jianhua Lu。格子玻尔兹曼方法中浓度边界条件的通用反弹格式。《物理评论E》，85:016701，2012。[50] Like Li、Renwei Mei 和 James F Klausner。热格子玻尔兹曼方程方法的边界条件。《计算物理学杂志》，237:366–395，2013。[51] Linlin Fei 和 Kai Hong Luo。带热源及一般热边界条件的不可压缩热流级联格子玻尔兹曼方法。《计算机与流体》，165，165:89–95，2018。[52] Like Li、Renwei Mei 和 James F Klausner。对流-扩散方程的格子玻尔兹曼模型：D2Q5 与 D2Q9。《国际传热与传质期刊》，108:41–62，2017。[53] H Yoshida 和 M Nagaoka。对流与各向异性扩散方程的多松弛时间格子玻尔兹曼模型。《计算物理学杂志》，229:7774–7795，2010。[54] A A Mohamad。《格子玻尔兹曼方法：基础、工程应用与计算机代码》。施普林格出版社伦敦有限公司，Springer Nature 旗下，2019。[55] Q. Li、K.H. Luo、Q.J. Kang、Y.L. He、Q. Chen 和 Q. Liu。多相流与相变传热的格子玻尔兹曼方法。《能源与燃烧科学进展》，52:62–105，2016。ISSN 0360-1285。[56] Hong Liang、Jiangrong Xu、Jiangxing Chen、Huili Wang、Zhenhua Chai 和 Baochang Shi。基于相场的格子玻尔兹曼大密度比两相流建模。《物理评论E》，98:033301，2018。[57] Feng Ren、Baowei Song、Michael C Sukop 和 Haibao Hu。基于守恒Allen-Cahn方程的改进二元流格子玻尔兹曼建模。《物理评论E》，94:023311，2016。[58] P H Chiu 和 Y T Lin。求解不可压缩两相流的守恒相场方法。《计算物理学杂志》，230:185–204，2011。[59] Hong Liang、Haihu Liu、Zhenhua Chai 和 Baochang Shi。高密度比二元流体接触线运动的格子玻尔兹曼方法。《物理评论E》，99:063306，2019。[60] Xiaoyi He、Shiyi Chen 和 Raoyang Zhang。不可压缩多相流的格子玻尔兹曼格式及其在瑞利–泰勒不稳定性模拟中的应用。《计算物理学杂志》，152:642–663，1999。[61] H Liang、B C Shi、Z L Guo 和 Z H Chai。基于相场的不可压缩多相流多松弛时间格子玻尔兹曼模型。《物理评论E》，89:053320，2014。[62] H Liang、B C Shi 和 Z H Chai。三相不可压缩流的格子玻尔兹曼建模。《物理评论E》，93:013308，2016。[63] David Jacqmin。利用相场建模计算两相纳维–斯托克斯流。《计算物理学杂志》，155 127，1999 96：–。[64] Y Q Zu 和 S He。具有密度和黏度差异的不可压缩二元流体系统的基于相场的格子玻尔兹曼模型。《物理评论E》，87:043301，2013。[65] L E Reichl。《现代统计物理学教程》，第2版。John Wiley & Sons, Inc.，1998。[66] D Jamet、O Lebaigue、N Coutris 和 J M Delhaye。用于带相变液-汽流直接数值模拟的二阶梯度方法。《计算物理学杂志》，169:624–651，2001。[67] J S Rowlinson 和 B Widom。《毛细现象分子理论》。Dover Publications, Inc.，1982。[68] H W Zheng、C Shu 和 Y T Chew。大密度比多相流的格子玻尔兹曼模型。《计算物理学杂志》，218:353–371，2006。[69] Taehun Lee 和 Lin Liu。干燥表面上微米尺度液滴撞击的格子玻尔兹曼模拟。《计算物理学杂志》，229：8045–8063，2010。[70] Abbas Fakhari 和 Mohammad H Rahimian。格子玻尔兹曼方程方法的相场建模。《物理评论E》，81：036707，2010。[71] Abbas Fakhari、Martin Geierb 和 Taehun Lee。一种具有动态网格加密的不相溶

两相流。《计算物理学杂志》，315:434–457，2016。[72] A J Bray。相序动力学理论。《物理学进展》，43(3):357–459，1994。[73] P. J. Roache。《计算科学与工程中的验证与确认，第*1*版》Hermosa出版社，新墨西哥州，1998。[74] J. H. Ferziger、M. Peric和A. Leonard。《流体动力学计算方法，第*50*卷，第*3*版》Springer出版社，纽约，2002。[75] Ian H. Bell、Jorrit Wronski、Sylvain Quoilin和Vincent Lemort。纯流体和拟纯流体热物性评估及开源热物性库Coolprop。《工业与工程化学研究》，53(6):2498–2508，2014。[76] Gregory Nellis和Sanford Klein。《传热》。剑桥大学出版社，2009。[77] B Atkinson、M P Brocklebank、C C H Card和J M Smith。低雷诺数发展中流动。《*AIChE*期刊》，15:548–553，1969。[78] R K Shah和A L London。《管道内层流强制对流》。Academic Press，1978。[79] G De Vahl Davis。方形腔体内空气的自然对流：基准数值解。《流体数值方法国际期刊》，3:249–264，1983。[80] Qiang He、Yongjian Li、Weifeng Huang、Yang Hu和Yuming Wang。基于相场的液-气-固流动格子玻尔兹曼模型。《物理评论*E*》，100:033314，2019。[81] Reza Haghani-Hassan-Abadi、Abbas Fakhari和Mohammad-Hassan Rahimian。基于新型守恒相场方法的相变建模。《计算物理学杂志》，432:110111，2021。[82] H Liang、B C Shi和Z H Chai。用于三维多相流的高效基于相场的多松弛时间格子玻尔兹曼模型。《计算机与数学及其应用》，73:1524–1538，2017。[83] Abbas Fakhari、Travis Mitchell、Christopher Leonardi和Diogo Bolster。提高高密度比不相溶流体相场格子玻尔兹曼模型的局部性。《物理评论*E*》，96:053301，2017。[84] Shengyuan Zhang、Jun Tang和Huiying Wu。适用于大密度比两相流的相场格子玻尔兹曼模型。《物理评论*E*》，105:015304，2022。[85] Y Q Zu和S He。用于具有密度和黏度差异的不可压缩二元流体系统的基于相场的格子玻尔兹曼模型。《物理评论*E*》，87:043301，2013。[86] Ahmed Mezrhab、Mohammed Amine Moussaoui、Mohammed Jami、Hassan Naji和M'hamed Bouzidi。用于模拟对流流动的双多松弛时间热格子玻尔兹曼方法。《物理学快报*A*》，374:3499–3507，2010。[87] A A Mohamad和A Kuzmin。格子玻尔兹曼方法中力项的批判性评估：自然对流问题。《国际传热与传质期刊》，53:990–996，2010。[88] Jia Wang、Donghai Wang、Pierre Lallemand和Li-Shi Luo。二维热对流流动的格子玻尔兹曼模拟。《计算机与数学及其应用》，65:262–286，2013。