

# 格子 Boltzmann 模型的改进与流体力学方程<sup>1)</sup>

冯士德<sup>\*,\*\*</sup> 赵 颖<sup>\*</sup> 邵宪林<sup>\*\*,\*\*\*</sup> 季仲贞<sup>\*</sup>

<sup>\*</sup>(中国科学院大气物理研究所大气科学和地球流体力学数值模拟国家重点实验室, 北京 100029)

<sup>\*\*</sup>(南京理工大学机械工程学院, 南京 210094)

<sup>\*\*\*</sup>(华北计算技术研究所, 北京 100083)

**摘要** 流体的流动可以看成是分子以上水平的粒子基本运动组合而成, 任何一个粒子系统的 Hamiltonian 都是由动能和势能这两部分所组成. 借助于 Hamiltonian 建立了微观粒子和宏观流体之间的能量守恒准则, 发展了一个适合于热流场数值模拟的格子 Boltzmann 模型. 从该模型可以还原出宏观的流体力学方程, 所得动量方程的黏性输运项除了具有 Navier-Stokes 黏性力的特征外还与非非常的、非线性的动量通量和非非常的内能相关. 用该模型对 Benard 热对流进行了数值模拟, 很好地再现了 Benard cell, 并且克服了热格子 Boltzmann 模型数值稳定性差的不足.

**关键词** Boltzmann 方程, Hamiltonian, 分布函数, 流体力学方程, Benard 热对流

## 引 言

格子 Boltzmann 模型 LBE(Lattice Boltzmann Equation) 是在格子气体模型 LGA<sup>[1]</sup> (Lattice Gas Automaton Model) 基础上发展而来的一种数值流体力学方法. LBE 模型是以统计物理和 Cellular Automata<sup>[2]</sup> 原理为基础, 从流体是由大量的微观粒子所构成的这一事实出发, 认为流体的宏观性质是这些大量微观粒子热运动的平均效果, 并且宏观物理量可用这些微观粒子所组成的粒子微团的速度矩来定义. 在满足质量守恒、动量守恒和能量守恒准则的条件下, 借助于数学的方法, 粒子微团的碰撞和运动可以进行数学模型化. 由于 LBE 模型是用粒子微团及其运动速度来描述空间离散点上的宏观流体的物理变量的, 所以它从微观角度更清楚地揭示了流体宏观特性的物理本质. 发展初期的 LBE 模型仅仅满足质量和动量守恒的准则<sup>[3~5]</sup>, 即在决定当地平衡分布函数时并没有直接和流体的内能  $E$  之间建立起能量守恒的关系, 所以在应用上受到了一定的限制. 但这些模型有非常好的数值稳定性, 因此在各种等温流场的数值计算中都得到了广泛的应用<sup>[6~8]</sup>. 1993 年 McNamara 等<sup>[9,10]</sup> 将流体的内能引入到模型当中去, 发展并建立了热格子 LBE 模型, 但该模型用于热流场的数值模拟不论是数值稳定性还是数值结果都不是很理想<sup>[11]</sup>. 虽然这一模型严格地满足质量守恒、动量守恒和能量守恒的准则, 但流体的内能只允许在很小的范围内变化; 如果流体的内能超出这一范围, 流体的密度就会出现小于零的负值现象, 而且数值结果也不收敛. 针对上述两种模型所存在的不足, 本文将粒子系统的 Hamiltonian 引入到 LBE 模型中, 进一步发展了一个适合于热流场数值计算的格子 Boltzmann 模型. 这一模型保持了 LBE 模型数值稳定、精度好的优点, 并且由其推导出的动量方程与 Navier-Stokes

2001-03-27 收到第一稿, 2002-01-21 收到修改稿.

1) 国家自然科学基金和国家重点实验室基金资助项目 (40023001, 49823002, G1999032801, 40175026, 8-1502).

方程相比, 在黏性应力项中增加了内能和动量应力两项影响因素. 这两项不仅是非定常和非线性的, 而且对于非等温流场, 在场雷诺数  $Re$  不是很低的条件下, 从定性的角度分析它们对流场稳定性的影响是不能忽略的. 最后我们利用该模型对典型的二维 Benard 热对流进行数值模拟, 实验结果表明该格子 Boltzmann 模型适合于一般热流场的数值模拟.

## 1 格子 Boltzmann 模型

格子 Boltzmann 模型和普通数值流体力学方法一样, 首先用格子将流场离散, 并规定粒子微团沿格子线移动且在格子点上碰撞. 粒子微团的移动和碰撞在全流场计算领域内都是分别同步进行的, 因而这种方法非常适合于并行计算.

粒子微团随时间演变控制方程是 Boltzmann 方程. Boltzmann 方程虽然能比较真实地描述微观粒子微团的分布变化规律, 但却是一个很复杂的微分积分方程, 直接求解是非常困难的. 目前, 广泛采用的是线性 BGK(Bhatnagar, Gross and Krook) 方程<sup>[12]</sup>. 在浮力场中, BGK 方程可以写成

$$f_{ki}(r_\alpha + c_{ki\alpha}\delta t, t + \delta t) - f_{ki}(r_\alpha, t) = F_{ki\alpha} - \Omega_{ki} \quad (1)$$

其中

$$\begin{aligned} \Omega_{ki} &= \frac{1}{\tau} [f_{ki}(r_\alpha, t) - f_{ki}^{\text{eq}}(r_\alpha, t)] \\ F_{ki\alpha} &= \begin{cases} 0, & i = 0, \quad \alpha \perp \mathbf{k} \\ \delta t g \eta \frac{f_{ki}}{c_{ki\alpha}}, & \end{cases} \\ i &= 0, 1, 2, \dots, b; \quad k = 1, 2, 3, \dots, n \end{aligned}$$

这里  $f_{ki}$  是粒子速度分布函数,  $k$  代表流体种类,  $i$  是粒子运动方向,  $b$  和  $n$  是因模型而异的正整数,  $\mathbf{k}$  是单位垂直矢量,  $f_{ki}^{\text{eq}}$  是当地粒子平衡速度分布函数,  $\Omega_{ki}$  是碰撞算子,  $F_{ki\alpha}$  代表浮力效应,  $g$  是重力加速度,  $c_{ki\alpha}$  是粒子速度, 对于 D2Q7 模型,  $c_{ki\alpha}$  在所有方向上都有一个相同的模,  $|c_{ki\alpha}| = c_k = \text{const}$ ,  $c_{k0\alpha} = 0$ ,  $\alpha$  代表坐标指数,  $\eta$  是浮力强度系数,  $\delta t$  是离散时间步长,  $\tau$  是松弛时间系数. 粒子速度分布函数  $f_{ki}$  定义为: 在位置  $r_\alpha$ , 时刻  $t$  和粒子运动速度为  $c_{ki\alpha}$  的微团内所包含的粒子数量. 微观粒子微团和宏观流体质量密度和动量密度应该满足如下准则<sup>[9]</sup>:

$$\text{质量准则} \quad \rho = \sum_k \sum_i f_{ki} \quad (2)$$

$$\text{动量准则} \quad \rho u_\alpha = \sum_k \sum_i f_{ki} c_{ki\alpha} \quad (3)$$

这里  $\rho$  和  $u_\alpha$  分别是流体的密度和速度. 为了能够模拟非等温流场, 在微观粒子和宏观流体间必须建立起能量守恒的关系. 为此, 考虑一个粒子 Hamiltonian 系统. 一个粒子系统的 Hamiltonian 可定义为<sup>[13]</sup>

$$h_k = K_k + U_k \quad (4)$$

这里,  $h_k$  是一个不因碰撞等因素而改变的常量,  $K_k$  和  $U_k$  分别是粒子的动能和势能. 根据定

义式 (4) 就可以很容易地给出微观粒子和宏观流体间的能量守恒准则

$$\frac{1}{2}\rho u^2 + \rho E = \sum_k \sum_i f_{ki} h_k \quad (5)$$

这里  $E$  是单位质量流体的内能. 为了能正确获得动量方程, 动量通量还应满足

$$P\delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta = \sum_k \sum_i f_{ki}^{\text{eq}} c_{ki\alpha} c_{ki\beta} \quad (6)$$

其中

$$\delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1, & \alpha = \beta \\ 0, & \alpha \neq \beta \end{cases}$$

这里  $P$  是压力. 当系统偏离平衡状态不是很远时, 可利用 Chapman-Enskog 展开法将粒子速度分布函数在当地平衡速度分布的邻域内渐近展开<sup>[14]</sup>, 可得

$$f_{ki} = f_{ki}^{\text{eq}} + f_{ki}^{\text{neq}} \quad (7)$$

$$f_{ki}^{\text{neq}} = f_{ki}^{(1)} + f_{ki}^{(2)} + \cdots + f_{ki}^{(n)} \quad (8)$$

这里  $f_{ki}^{(0)} = f_{ki}^{\text{eq}}, f_{ki}^{(n)} = O(\varepsilon^{(n)})$ . 对展开式各项的微分满足<sup>[1,2]</sup>

$$\partial^{(n)} f_{ki}^{(n)} = O(\varepsilon^{(n+1)}) \quad (9)$$

非平衡分布  $f_{ki}^{\text{neq}}$  对密度、动量、能量没有贡献<sup>[1]</sup>, 即

$$\sum_k \sum_i \Omega_{ki} = 0 \quad (10)$$

$$\sum_k \sum_i \Omega_{ki} c_{ki\alpha} = 0 \quad (11)$$

$$\sum_k \sum_i \Omega_{ki} h_k = 0 \quad (12)$$

当粒子平衡速度分布函数采用如下的 Maxwell 型分布

$$f_{ki}^{\text{eq}} = A_i \rho_k^* \exp[B_k(\xi_{ki\alpha} - v_\alpha)^2] \quad (13)$$

其中  $\rho_k^*$  是流体密度,  $v_\alpha$  是流体速度,  $\xi_{ki\alpha}$  是粒子速度. 利用参考粒子速度  $c_0$  和流体参考密度  $\rho_\infty$ , 可将平衡分布  $f_{ki}^{\text{eq}}$  写成如下的无量纲形式

$$f_{ki}^{\text{eq}} = A_i \rho_k \exp[B_k(c_{ki\alpha} - u_\alpha)^2] \quad (14)$$

其中

$$c_{ki\alpha} = \xi_{ki\alpha}/c_0, \quad u_\alpha = v_\alpha/c_0, \quad \rho_k = \rho_k^*/\rho_\infty$$

这里  $A_i$  和  $B_k$  是由上述守恒准则决定的常数, 将平衡分布函数 (14) 在  $u_\alpha = 0$  处展开并精确到三阶可得

$$f_{ki}^{\text{eq}} = W_i \rho_k \left( 1 - 2B_k c_{ki\alpha} u_\alpha + 2B_k^2 c_{ki\alpha} c_{ki\beta} u_\alpha u_\beta + B_k u^2 - 2B_k^2 c_{ki\alpha} u_\alpha u^2 - \frac{4}{3} B_k^3 c_{ki\alpha} c_{ki\beta} c_{ki\chi} u_\alpha u_\beta u_\chi \right) \quad (15)$$

其中

$$W_i = A_i \exp(B_k c_k^2)$$

根据定义的守恒准则和 Chapman-Enskog 展开式以及离散流场所采用的格子种类, 可相应地解得系数  $W_i$  和  $B_k$ . 这里只给出了二维六角形离散格子所对应的系数

$$W_0 = \frac{2}{D+2}, \quad W_i = \frac{D}{b(D+2)}, \quad B_k = -\frac{D+2}{4h_k},$$

$$h_k = \frac{c_k^2}{2}, \quad P = \frac{2}{D} \rho E = \frac{2}{D+2} \sum \rho_k h_k$$

这里  $D$  是空间维数,  $b$  是格子方向线数,  $W_0$  和  $W_i$  分别是静止粒子的权和运动粒子的权. 文献 [15] 认为一般 LBE 模型中的  $\rho u^2 + 2\rho E = \sum_k \sum_i f_{ki} c_k^2$  是不完全相等的, 它仅仅利用了粒子的动能等于相应宏观流体的总能量, 并没有包含粒子的势能部分. 但是根据本文对平衡分布函数的求解结果  $h_k = c_k^2/2$  说明, 文献 [15] 的观点是不正确的.  $c_k^2/2$  不仅仅代表了粒子的动能部分同时也包含了势能部分, 是粒子系统所具有的总能量.

## 2 流体力学方程

流体的宏观性质是大量微观粒子热运动的平均效果, 这也是格子 Boltzmann 模型的出发点. 流体的动力学和热力学特性是由流体力学方程描述的. 为了能够正确地模拟宏观流体力学现象, 必须从格子 Boltzmann 模型出发推导出宏观的流体力学方程.

利用 Taylor 级数展开法将方程 (1) 左侧第一项关于时间  $\delta t$  分别展开到一阶和两阶, 可得

$$\delta t : \frac{\partial f_{ki}}{\partial t} + c_{ki\alpha} \frac{\partial f_{ki}}{\partial r_\alpha} = \frac{F_{ki\alpha}}{\delta t} - \frac{1}{\tau \delta t} [f_{ki} - f_{ki}^{\text{eq}}] \quad (16)$$

$$\delta t^2 : \frac{\partial f_{ki}}{\partial t} + c_{ki\alpha} \frac{\partial f_{ki}}{\partial r_\alpha} + \frac{\delta t}{2} c_{ki\alpha} c_{ki\beta} \frac{\partial^2 f_{ki}}{\partial r_\alpha \partial r_\beta} + \delta t c_{ki\alpha} \frac{\partial^2 f_{ik}}{\partial t \partial r_\alpha} + \frac{\delta t}{2} \frac{\partial^2 f_{ki}}{\partial t^2} =$$

$$\frac{F_{ki\alpha}}{\delta t} - \frac{1}{\tau \delta t} [f_{ki} - f_{ki}^{\text{eq}}] \quad (17)$$

将 Chapman-Enskog 展开式代入上式, 可获得

$$\varepsilon : \frac{\partial f_{ki}^{\text{eq}}}{\partial t} + c_{ki\alpha} \frac{\partial f_{ki}^{\text{eq}}}{\partial r_\alpha} = \frac{F_{ki\alpha}}{\delta t} - \frac{1}{\tau \delta t} f_{ki}^{\text{neq}} \quad (18)$$

$$\varepsilon^2 : \frac{\partial f_{ki}^{\text{eq}}}{\partial t} + c_{ki\alpha} \frac{\partial f_{ki}^{\text{eq}}}{\partial r_\alpha} + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \left(\frac{\partial f_{ki}^{\text{neq}}}{\partial t} + c_{ki\alpha} \frac{\partial f_{ki}^{\text{neq}}}{\partial r_\alpha}\right) = \frac{F_{ki\alpha}}{\delta t} - \frac{1}{\tau \delta t} f_{ki}^{\text{neq}} \quad (19)$$

对方程 (18) 求和并考虑到相应的关系准则, 可获得连续方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_\alpha)}{\partial r_\alpha} = 0 \quad (20)$$

根据 Chapman-Enskog 展开式, 方程 (18) 等号左侧的和及等号右侧的第二项都是一阶小量, 显然浮力效应  $F_{ki\alpha}$  也必须是一阶小量, 即浮力强度系数  $\eta$  是一个一阶小量. 这样就可以把  $\eta f_{ki}$  看作是粒子数密度的扰动量. 它可以表达成

$$\eta f_{ki} = f_{ki} - f_{0ki} \quad (21)$$

这里  $f_{0ki}$  是在静平衡状态下的粒子分布函数. 对上式求和, 可得

$$\eta \rho = \rho - \rho_0 \quad (22)$$

相应的  $\rho_0$  是在静平衡状态下的流体密度. 用粒子速度  $c_{ki\alpha}$  乘以方程 (19) 再对其求和, 可获得动量方程

$$\left. \begin{aligned} \rho \frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + \rho u_\beta \frac{\partial u_\alpha}{\partial r_\beta} &= -\frac{\partial P}{\partial r_\alpha} + \Delta \rho g \mathbf{k} + \frac{\partial F_\mu}{\partial r_\alpha} \\ \Delta \rho &= \eta \rho \\ F_\mu &= \nu \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial r_\beta} + \nu \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial r_\alpha} + \frac{2\rho\delta t}{D} \left( \tau - \frac{1}{2} \right) \frac{\partial E}{\partial t} \delta_{\alpha\beta} + \delta t \left( \tau - \frac{1}{2} \right) \frac{\partial \rho u_\alpha u_\beta}{\partial t} \\ \nu &= \frac{2E\delta t}{D} \left( \tau - \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

这里  $\nu$  是动黏性系数,  $\mathbf{k}$  是单位垂直矢量,  $F_\mu$  是黏性应力. 从 LBE 模型还原出的动量方程 (23) 和 Navier-Stokes 方程相比, 在黏性输运项上有明显的差异. 一是方程 (23) 黏性力扩散项和压缩项前的黏性系数相同并且黏性系数与内能成线性相关; 二是在黏性应力  $F_\mu$  中多了非定常的动量通量和非定常的内能项, 特别是动量通量项既是非定常的又是非线性的. 虽然最终这两项反应到黏性力中都是二阶小量, 而在一般的工程数值计算中又由于存在着离散误差和计算过程中的舍入误差, 它们的作用可能早已被这两类误差给淹没了. 但是在雷诺数和长时间尺度的条件下, 这两个非定常项对流场的稳定性还是有影响的.

根据浮力原理, 当方程 (23) 中的浮力强度系数  $\eta$  大于零时, 流体趋向于上升, 相对应的上升的粒子数量趋向于增多; 相反当其小于零时, 流体趋向于下沉, 相对应的下降的粒子数量也趋向于增多. 对于热对流而言热流体是上升的, 而冷流体是下沉的.

用粒子的 Hamiltonian  $h_k$  乘以方程 (19) 再对其求和并考虑到相应的准则, 可获得能量方程

$$\left. \begin{aligned} \rho \frac{\partial E}{\partial t} + \rho u_\alpha \frac{\partial E}{\partial r_\alpha} - \delta t \left( \tau - \frac{1}{2} \right) \frac{\partial}{\partial r_\alpha} \left( \frac{2}{D} \rho E \frac{\partial E}{\partial r_\beta} + \rho u_\alpha \frac{\partial E}{\partial t} + \rho u_\alpha u_\beta \frac{\partial E}{\partial r_\beta} \right) &= 0 \\ \kappa &= \frac{2E\delta t}{D} \left( \tau - \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

这里  $\kappa$  是扩散系数.

### 3 数值试验

数值试验是一个典型的二维 Benard 热对流现象. 在热流场中由于温度的不同会引起密度的波动进而形成浮力. 浮力是流体运动的驱动力. 自然对流就是在浮力驱动下的一种热流体扩散现象. 在这里用红粒子  $f_{ri}$  代表热流体, 冷流体用蓝粒子  $f_{bi}$  代表. 当采用正方形格子离

散流场时, 其浮力对冷热粒子的作用效果可用图 1 来描述, 浮力强度系数  $\eta$  与 Grashof 数的关系可通过非压缩状态方程来确定

$$\eta\rho = \Delta\rho = \beta_e\rho_0\Delta T \quad (25)$$

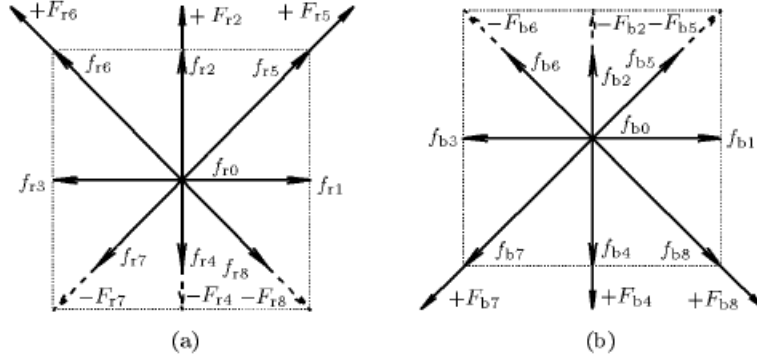


图 1 浮力对热粒子 (a) 和冷粒子 (b) 的作用效果

Fig.1 Effects of buoyant force in the vertical direction for the (a) hot and (b) cold particles

这里  $\beta_e$  是膨胀系数, 而 Grashof 数是

$$Gr = \frac{g\beta_e\Delta TL^3}{\nu^2} = \frac{g\eta\rho L^3}{\rho_0\nu^2} \quad (26)$$

取空间和时间的离散尺度分别为  $\delta r = L/N, \delta t = \delta r/c_k = L/Nc_k$ . 这里  $L$  为特征长度,  $N$  为离散的格子数量. 由动黏性系数  $\nu$  和时间的离散尺度  $\delta t$ , 可进一步地得到浮力效应  $F_{k_{i\alpha}}$  与 Grashof 数的关系为

$$F_{ri\alpha} = + \frac{Gr\rho_0c_r(\tau - 0.5)^2 f_{ri}}{9\rho N^3 c_{ri\alpha}} \quad (27)$$

$$F_{bi\alpha} = - \frac{Gr\rho_0c_b(\tau - 0.5)^2 f_{bi}}{9\rho N^3 c_{bi\alpha}} \quad (28)$$

浮力效应  $F_{k_{i\alpha}}$  的正负分别表示上升的热粒子  $f_{ri}$  和下沉的冷粒子  $f_{bi}$  的增多. 由压力表达式可得流体的内能  $E$  为

$$E = \frac{D}{D+2} \frac{\rho_r h_r + \rho_b h_b}{\rho} \quad (29)$$

下标 b 和 r 分别表示冷热流体. Prandtl 数为

$$Pr = \frac{\nu}{\kappa} = 1 \quad (30)$$

在边界和流场中计算的初始条件设定为:

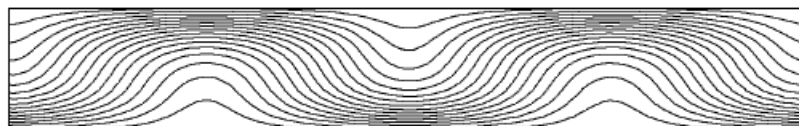
冷流体:  $\rho_b = 1.0, e_b = 0.33333$  相对应的冷粒子速度是  $c_b = 1.0$ .

热流体:  $\rho_r = 1.0, e_r = 1.33333$  相对应的热粒子速度是  $c_r = 2.0$ .

流体的初始速度:  $u_0 = 0.0$ . 取上下边界的高度作为特征长度  $L = 1$ , 上边界和下边界的长度为  $6L$ , 离散的格子数量  $N = 20$ .

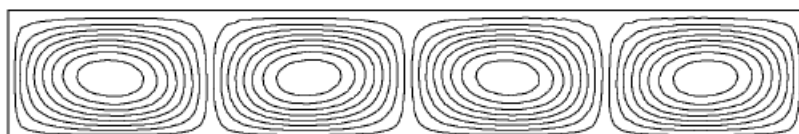
计算用的边界条件是: 在左右边界用周期边界条件, 在上下边界采用热通量边界条件<sup>[16,17]</sup>. 热通量边界条件设定为: 当冷粒子与热边界相撞时, 将有一部分冷粒子被加热而变成热粒子;

相反的当热粒子与冷边界相撞时, 将有一部分热粒子被冷却而变成冷粒子, 即考虑在冷热边界上有热量输出和输入 (文献 [17] 给出了热通量密度  $q$  与冷热粒子间转换系数的关系). 在这一数值计算里, 取下边作为热边界, 上边作为冷边界. 在热边界上反射的全部是热粒子, 冷边界上反射的全部是冷粒子. 图 2 和图 3 给出了在两种 Grashof 数条件下的数值结果.



(a) 等内能线,  $t = 100$

(a) Internal energy contour



(b) 流线,  $t = 100$

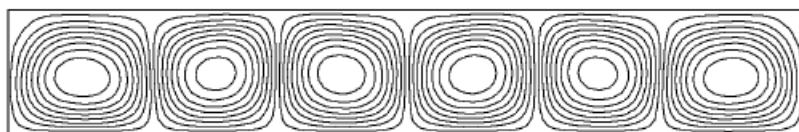
(b) Streamlines

图 2 两平板间 Benard 热对流的一个稳态解,  $\tau = 0.51$ ,  $Gr = 3000$ ,  $Pr = 1$   
Fig.2 Steady-state for dimensionless numbers,  $\tau = 0.51$ ,  $Gr = 3000$ ,  $Pr = 1$ ,  
where the heating is from the bottom



(a) 等内能线,  $t = 100$

(a) Internal energy contour



(b) 流线,  $t = 100$

(b) Streamlines

图 3 当  $\tau = 0.51$ ,  $Gr = 15\,000$ ,  $Pr = 1$  时的计算结果  
Fig.3 Steady-state for dimensionless number,  $Gr = 15\,000$ , and others are  
the same computing conditions as Fig.2

## 4 结 论

在原 LBE 模型的基础上, 利用粒子系统 Hamiltonian 原理, 发展了一个严格地满足质量、动量、能量守恒准则的格子 Boltzmann 模型. 在模型中建立起了粒子速度和粒子系统 Hamiltonian

之间的函数关系. 从该模型可以还原出流体力学方程. 所得的动量方程的黏性力项和 Navier-Stokes 方程相比, LBE 模型的黏性应力不但具有 Navier-Stokes 黏性应力的特征, 而且还与动量通量和内能有关. 对于这两项的作用有待于我们今后做进一步地研究. 根据在两个不同 Grashof 数条件下 Benard 热对流的数值试验, 其数值结果都很好地再现了 Benard cell. 数值实验说明了这一格子 Boltzmann 模型的适用性.

**致谢** 本文得到了日本神户大学计算物理研究室教授鸟原道久的指导.

### 参 考 文 献

- 1 Frisch U, d'Humières D, Hasslacher B, et al. Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions, *Complex Systems*, 1987, 1: 649~707
- 2 Wolfram S. Cellular automaton fluids 1: Basic theory. *J Stat Phys*, 1986, 45: 471~526
- 3 McNamara G, Zanetti G. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automation. *Phys Rev Letts*, 1988, 61: 2332~2335
- 4 Qian YH, Orszag SA. Lattice BGK models for the Navier-Stokes equation: Nonlinear deviation in compressible regimes. *Europhys Lett*, 1993, 21: 255~259
- 5 Chen S, Wang Z, Shan X, et al. Lattice Boltzmann computational fluid dynamics in three dimensions. *J Stat Phys*, 1992, 68: 379~400
- 6 Shan X, Chen H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Phys Rev E*, 1993, 47: 1815~1819
- 7 Chen S, Chen H, Martinez D, et al. Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics. *Phys Rev Letts*, 1991, 67: 3776~3779
- 8 Rothman DH, Zaleski S. Lattice-Gas Cellular Automata. United Kingdom: Cambridge University Press, 1996
- 9 McNamara G, Alder B. Analysis of the lattice Boltzmann treatment of hydrodynamics. *Physica A*, 1993, 194: 218~228
- 10 Alexander FJ, Chen S, Sterling D. Lattice Boltzmann thermohydrodynamics. *Phys Rev*, 1993, 47: 2249~2252
- 11 Shan X. Simulation of Rayleigh-Bénard convection using a lattice Boltzmann method. *Phys Rev E*, 1997, 47: 2780~2787
- 12 Bhatnagar PL, Gross EP, Krook M. A model for collision processes in Gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Phys Rev*, 1954, 94: 511~526
- 13 Balescu R. Statistical Dynamics. London: Imperial College Press, 1997
- 14 Chapman S, Cowling TG. The Mathematical Theory of Non-Uniform. Cambridge University Press, 1970
- 15 Takada N. Simulations of complex hydrodynamic phenomena by the lattice Boltzmann methods. [Ph D Thesis]. Japan: Kobe University, 1998
- 16 Tsutahara M, Feng S. Simulation of the stratified flows using the two-component lattice Boltzmann method. *Comput Phys Commun*, 2000, 129: 131~137
- 17 Feng S, Ren R, Ji Zh. Heat flux boundary conditions for a lattice Boltzmann equation model. *China Phys Lett*, 2002, 19: 79~82

## SOME PROGRESS IN THE LATTICE BOLTZMANN MODEL AND HYDRODYNAMIC EQUATIONS<sup>1)</sup>

Feng Shide<sup>\*,\*\*</sup> Zhao Ying<sup>\*</sup> Gao Xianlin<sup>\*\*,\*\*\*</sup> Ji Zhongzhen<sup>\*</sup>

*\*(State Key Laboratory of Numerical Modelling for Atmospheric Sciences and Geophysical Fluid Dynamics,  
Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029, China)*

*\*\* (School of Mechanical Engineering, Nanjing University of Science & Technology, Nanjing 210094, China)*

*\*\*\* (Northchina Institute of Computing Technology, Ministry of Information Industry, Beijing 100083, China)*

**Abstract** The flow of fluid can be considered as the combination of the basic movement of particles greater than molecule level. The Hamiltonian of any particle system is composed of kinetic energy and potential energy. By means of Hamiltonian, an energy conservation criteria is established between micro and macro particles, and a lattice Boltzmann model suitable for the simulation of hot fluid field is developed. From this model, a macro fluid dynamics equation can be recovered. The obtained viscosity transportation term of momentum equation not only has the characteristics of Navier-Stokes viscosity force, but also is related with the non-steady and nonlinear momentum flux as well as the non-steady internal energy. Numerical simulation of Benard convection shows that the result is very good to reproduce the Benard cells, and overcomes the defect of instability of thermal lattice Boltzmann model.

**Key words** Boltzmann equation, Hamiltonian, distribution function, hydrodynamic equations, Benard convection

---

Received 27 March 2001, revised 21 January 2002.

1) The project supported by the National Natural Science Foundation of China and the State Key Laboratory Foundation of China (40023001, 49823002, G1999032801, 40175026, 8-1502).