

文章编号: 1000-582X(2012)09-106-08

## 二维方腔内热表面张力流的格子 Boltzmann 方法模拟

梁功有, 曾 忠, 姚丽萍, 张良奇, 邱周华, 梅 欢

(重庆大学 资源及环境科学学院 工程力学系, 重庆 400044)

**摘 要:** 热表面张力驱动的对流是微重力下浮区法晶体生长中熔体最重要的物质与热输运方式。采用单松弛双分布函数格子 Boltzmann 模型, 自主开发了相应的格子 Boltzmann 方法的串行和 MPI 并程序包, 并应用该程序包对开口方腔内流体的二维热表面张力对流进行了数值模拟研究。其中串程序包合并碰撞-迁移过程和引入临时数组以连续读入分布函数, 相比分开碰撞-迁移过程, 计算性能提高了二倍; 在此基础上, 采用单向计算区域分区和非阻塞通信模式, 实现了 MPI 版格子 Boltzmann 并程序包开发。对比基于传统有限体积法 CFD 程序计算结果表明, 串行和 MPI 并行版格子 Boltzmann 程序包计算结果精确可靠; 并程序包具有较好的性能。

**关键词:** 格子 Boltzmann 方法; 并行计算; 热表面张力流; 消息传递

**中图分类号:** O357.1

**文献标志码:** A

### Simulation of thermocapillary flow in a two dimensional cavity with lattice Boltzmann method

LIANG Gongyou, ZENG Zhong, YAO Liping, ZHANG Liangqi, QIU Zhouhua, MEI Huan

(Department of Engineering Mechanics, College of Resource and Environment Science, Chongqing University, Chongqing 400044, China)

**Abstract:** Thermocapillary flow driven by an unbalanced surface tension plays the most important role for mass and heat transport in floating zone melt crystal growth under microgravity. The authors develop both a serial and a parallel codes with lattice Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) model using two distribution functions, and numerically study the thermocapillary flow in a two dimensional square cavity with a single free surface under microgravity condition. The serial code is developed by combining collision and propagation step, using a temporary array to continuously read distribution functions, and its performance is improved two times faster than the code with separating the collision and propagation step. The MPI parallel code is proposed utilizing one dimensional partitioning and non-blocking communication. The accurate and reliable results are achieved with both the serial and parallel codes by comparing with CFD results simulated by the finite volume method; the MPI parallel code has high performance.

**Key words:** lattice Boltzmann method; MPI parallel computing; thermocapillary flow; message passing

晶体材料是电子、光电子等产业的基础。随着电子和光电子工业的迅速发展, 对质量更高、价格更

低、直径更大的单一晶体的需求促进了晶体材料的更广阔和更深入的研究和发展。熔体生长晶体方法

收稿日期: 2012-04-03

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10872222); 重庆市科委自然科学基金资助项目(2009BB4207)

作者简介: 梁功有(1983-), 男, 重庆大学博士研究生, 主要研究方向为流体力学、高性能科学计算。

曾忠(联系人), 男, 重庆大学教授, 博士生导师, (E-mail) zeng@cqu.edu.cn。

是目前制备大单晶最常用的方法之一。大量的实验结果表明,重力是影响熔体晶体生长的一个重要因素,重力引起的不稳定浮力流是晶体的微观不均匀性的主要原因之一。微重力环境(为地球表面重力的  $10^{-6}$  倍)的晶体生长中,重力驱动的浮力对流几乎消失,表面张力驱动的对流占主导地位,晶体的完整性、杂质分布的宏观均匀性和微观均匀性都得到明显改善。因此,研究这种表面张力驱动的对流对生长高质量晶体和物理流体的理论研究都具有重要意义。

采用传统的有限差分、有限体积方法对微重力下的热表面张力流已经进行了较为深入的研究<sup>[1-4]</sup>。格子 Boltzmann 方法(LBM)是一种基于动理学理论的介观模拟方法。以其介观背景、边界条件实施简单、程序易于实现等优势,受到国内外众多学者的关注;在多组分多相流、悬浮流、微尺度流动与换热,以及多孔介质内的流动与传热等相关领域得到了较成功的应用<sup>[5-11]</sup>。在忽略粘性热耗散和可压缩功下,可采用双分布函数格子 Boltzmann 模型进行研究。该类模型使用密度和温度两类分布函数,分别模拟速度场和温度场,具有格子结构简单,数值稳定好等特点。Du 等<sup>[12]</sup>的研究结果表明 LBM 可以为研究该问题提供另一种手段。Peng 等<sup>[13]</sup>基于泰勒级数展开和最小二乘 LBM 对 Czochralski 法晶体生长中的轴对称流动进行了研究,Weinstein 等<sup>[14]</sup>对 Czochralski 法晶体生长中的小面进行了三维计算。三维对流及外加磁场作用下的对流计算非常有意义和挑战性,但目前 LBM 在该领域的报道甚少。相比传统 CFD 方法,LBM 在瞬态问题上具有很大计算优势,且更容易与其它复杂物理过程进行耦合处理。因此,利用 LBM 进一步对晶体生长中的流体动力学问题进行深入研究具有重要意义。

标准 LBM 采用均匀网格。随着  $Re$  数的增大,靠近壁面处的边界层非常薄,就需要划分较密的网格,从而导致计算量大大增加。对此可以采用非标准 LBM<sup>[15-17]</sup>,在边界层内划分较密网格,但这牺牲了标准 LBM 物理清晰、编程简单等特点<sup>[11]</sup>。文献<sup>[12]</sup>中研究的是低  $Pr$  数下的流动,可以采用较少的格子数进行研究,当  $Pr$  数和  $Re$  数较大,由于必须划分较密的网格,尤其是三维流动,采用单个 CPU 进行计算太慢。LBM 有天然的并行性,因此,开发并行计算程序,提高计算速度,对该问题及今后的研究,具有重要意义。

在开发串行程序时,合并碰撞-迁移过程,并引入临时数组以连续读入分布函数;采用单向计算区

域分区和非阻塞通信模式,实现了 MPI 并程序。最后应用串行和并行程序对  $Pr$  为 1,不同  $Re$  数下的情况进行了数值模拟,并和基于传统有限体积法的 CFD 模拟结果进行了对比。

## 1 物理模型与边界条件

如图 1 所示,在微重力环境中,方腔顶部为绝热自由表面,其余三边为无滑移壁面,其中左边固定为高温  $T_h$ ,右边固定为低温  $T_c$ ,下边绝热。自由表面上各点的表面张力为  $\sigma = \sigma_0 - \sigma_k(T - T_0)$  ( $\sigma_k$  是表面张力系数,  $\sigma_0$  是温度为  $T_0$  时的表面张力,这里取  $T_0$  为  $T_c$ )。由于自由表面上各点温度不同,从而形成热表面张力梯度,其驱动腔体内流体的对流运动。忽略自由表面的变形,在不可压缩,忽略热耗散能和可压缩功的假设下,以  $H$ 、 $\sigma_k \Delta T / \mu$ 、 $\rho (\sigma_k \Delta T / \mu)^2$ 、 $\mu H / (\sigma_k \Delta T)$  为特征长度、速度、压力、时间,无量纲化的温度  $T = (T^* - T_c) / \Delta T$ ,可得无量纲化的控制方程及边界条件<sup>[18]</sup>。

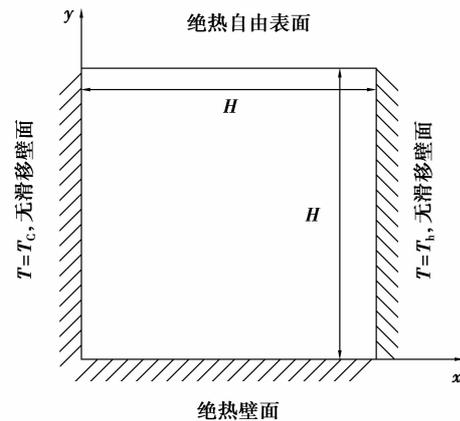


图 1 物理模型

连续性方程:  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ 。动量方程:  $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u}$ 。能量方程:  $\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T = \frac{1}{Ma} \nabla^2 T$ 。

$y=1, 0 < x < 1$  时,  $v=0, \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial T}{\partial x}, \frac{\partial T}{\partial y} = 0$ 。

$y=0, 0 < x < 1$  时,  $u=v=0, \frac{\partial T}{\partial y} = 0$ 。

$0 \leq y \leq 1, x=0$  时,  $u=v=0, T=1$ 。

$0 \leq y \leq 1, x=1$  时,  $u=v=0, T=0$ 。

其中:  $Re = \frac{\sigma_k H \Delta T}{\mu \nu}$ ,  $Pr = \frac{\nu}{\kappa}$ ,  $Ma = Re Pr =$

$\frac{\sigma_k H \Delta T}{\kappa \mu}$ ,  $\rho, \mathbf{u}, p, \nu, \mu = \rho \nu$  分别为密度、速度、压力、运动学粘性系数及动力学粘性系数,  $\Delta T = T_h - T_c$ 。

## 2 双分布函数格子 Boltzmann 模型

格子 Boltzmann 模型的演化方程<sup>[12,19-20]</sup>:

$$f_{\alpha}(\mathbf{x} + c\mathbf{e}_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t) - f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_1}[f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) - f_{\alpha}^{(eq)}(\mathbf{x}, t)], \alpha = 0-8, \quad (1)$$

$$g_{\alpha}(\mathbf{x} + c\mathbf{e}_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t) - g_{\alpha}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_2}[g_{\alpha}(\mathbf{x}, t) - g_{\alpha}^{(eq)}(\mathbf{x}, t)], \alpha = 1-4. \quad (2)$$

式中:  $f_{\alpha}$ 、 $g_{\alpha}$  分别为点  $(\mathbf{x}, t)$  处沿  $\mathbf{e}_{\alpha}$  方向的粒子密度分布函数和温度分布函数。方程(1)可以分为碰撞和迁移两步(方程(2)可以做同样处理)。

$$\text{碰撞: } \tilde{f}_{\alpha}(\mathbf{x}, t) = \left(1 - \frac{1}{\tau_1}\right) f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{\tau_1} f_{\alpha}^{(eq)}(\mathbf{x}, t), \alpha = 0-8. \quad (3)$$

$$\text{迁移: } f_{\alpha}(\mathbf{x} + c\mathbf{e}_{\alpha}\Delta t, t + \Delta t) = \tilde{f}_{\alpha}(\mathbf{x}, t), \alpha = 0-8. \quad (4)$$

式中:  $c = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ ,

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

输运系数:

$$\frac{1}{Re} = \frac{1}{3}c^2 \left(\tau_1 - \frac{1}{2}\right)\Delta t, \frac{1}{Ma} = \frac{1}{2}c^2 \left(\tau_2 - \frac{1}{2}\right)\Delta t.$$

平衡态分布函数:

$$f_{\alpha}^{(eq)}(\mathbf{x}, t) = -\lambda_{\alpha}p + \omega_{\alpha} \left( \frac{3}{c}(\mathbf{e}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2c^2}(\mathbf{e}_{\alpha} \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2c^2}|\mathbf{u}|^2 \right), \alpha = 0-8, \quad (5)$$

$$g_{\alpha}^{(eq)}(\mathbf{x}, t) = \frac{T}{4} \left[ 1 + \frac{2}{c}(\mathbf{e}_{\alpha} \cdot \mathbf{u}) \right], \alpha = 1-4. \quad (6)$$

式中:

$$\omega_{\alpha} = \begin{cases} 4/9, \alpha = 0 \\ 1/9, \alpha = 1-4 \\ 1/36, \alpha = 5-8 \end{cases}, \lambda_{\alpha} = \begin{cases} -5/(3c^2), \alpha = 0 \\ 1/(3c^2), \alpha = 1-4 \\ 1/(12c^2), \alpha = 5-8 \end{cases}.$$

宏观速度、压力、温度为:  $\mathbf{u} = c \sum_{\alpha=1}^8 \mathbf{e}_{\alpha} f_{\alpha}$ ,  $p =$

$$\frac{3c^2}{5} \sum_{\alpha=1}^{kp} f_{\alpha} - \frac{2}{5} |\mathbf{u}|^2, T = \sum_{\alpha=1}^4 g_{\alpha}.$$

采用非平衡外推方法<sup>[21]</sup>处理边界。在自由表面上采用一阶向后差分方法求  $x$  向速度分量  $u$ 。

## 3 串程序序设计

Wellein 等<sup>[22]</sup>详细的比较了碰撞优化与迁移优化,指出碰撞优化可导致性能的明显下降;即便采用

分块技术,性能也不如采用迁移优化方式。因此笔者采用迁移优化方式,即定义数组  $f(0:i_m, 0:j_m, 0:8)$  存储  $t$  时刻的分布函数,这里  $i_m$ 、 $j_m$  分别为  $x$ 、 $y$  方向的格子数。通常可以这样设计程序<sup>[8,11,23]</sup>:

- 1) 初始化  $f$ ;
- 2) 迁移计算,结果存储在临时数组中;
- 3) 计算压力、速度;
- 4) 计算平衡态分布函数;
- 5) 进行碰撞处理后结果保存在  $f$  中;

反复迭代 2) 到 5), 直到收敛。

Wilke 等<sup>[24-25]</sup>提出了网格压缩与合并技术,使需要的内存将近减半。但是 Körner 等<sup>[26]</sup>指出,由于需要按方向迁移,缓存反复利用是否得到改善并不清楚;Wellein 等<sup>[22]</sup>指出,在不采用反弹边界条件时,该方法在采用其他高级边界条件时将会非常复杂。Pohl 等<sup>[25]</sup>推广了分块的思想,指出采用多路分块,可以提高程序性能,可该方法也难以引入其他高级边界条件处理方法<sup>[22]</sup>。Wellein 等<sup>[22]</sup>提出合并碰撞-迁移,使程序性能得到很大提高。笔者借鉴前人的研究成果,如下设计程序:

对于二维等温流动问题,定义数组  $h(0:i_m, 0:j_m, 0:8, 0:1)$  存储密度分布函数。设  $\text{old} = \text{Mod}(\text{niter}, 2)$ ,  $\text{new} = \text{Mod}(\text{niter} + 1, 2)$ ,  $\text{niter}$  是循环次数,初值为 0,每迭代一次值增加 1。

- 1) 初始化  $h(0:i_m, 0:j_m, 0:8, 0)$ ;
- 2)  $\text{old} = \text{Mod}(\text{niter}, 2)$ ,  $\text{new} = \text{Mod}(\text{niter} + 1, 2)$ ;

3) 流场内部点读入  $h(0:i_m, 0:j_m, 0:8, \text{old})$ , 计算压力、速度,平衡态分布函数,进行碰撞、迁移后结果保存在  $h(0:i_m, 0:j_m, 0:8, \text{new})$  中;

反复迭代 2) 到 3), 直到收敛。对于 3), 从  $h(i_m, j_m, 0:8, \text{old})$  中读取数据时,首先用一临时数组  $\text{flin}(0:8, 0:i_m)$  来存储  $x$  方向所有点的分布函数,这样等于从内存中是连续的读入数据;计算宏观速度、平衡态分布函数时充分利用  $\mathbf{e}$  中许多元素为 0 的特点及一些方向平衡态分布函数的特殊关系,如  $f_3^{(eq)} = f_1^{(eq)} - \frac{2}{3c}v$ ,  $f_4^{(eq)} = f_2^{(eq)} - \frac{2}{3c}u$  等,可以大大减小计算量;计算出压力、速度和温度后直接计算平衡态分布函数,进行碰撞迁移,其实是做到充分利用数据,减小反复读取数据的次数。

采用非平衡外推方法处理边界时,需要相邻点的平衡态分布函数。没有采用一个三维数组来存储每一点的平衡态分布函数,而是在处理边界时重新

计算相邻点的平衡态分布函数。

经过以上优化设计,程序的执行速度得到很大提高。以顶盖驱动流为例,取  $Re$  为 2 000,  $200 \times 200$ 、 $400 \times 400$  格子时  $\tau_1$  分别取 0.55、0.60,每迭代 5 000 次计算一次残差直到收敛。相比分开碰撞和迁移过程,性能分别提高了 2.38 和 2.36 倍。

## 4 并行程序设计

### 4.1 分区方法与数据传递

对于二维问题,可以按行、按列或两个方向同时划分计算区域。Fortran 中多维数组采用按列存储,因此可以采用按列划分,这时上下边需要进行数据交换。

采用双向划分时,可以减小传递的数据总量,此时除上下左右四条边需要进行数据交换外,四个角点上各有一个方向上的密度分布函数需要与对角进程进行数据交换。一方面可以记住相应的进程号,采用 8 个发送和 8 个接收函数直接进行数据交换。但这增加了启动时间,同时传递较小的数据,在 MPI 并行中是不可取的<sup>[28]</sup>。Carter 等<sup>[29]</sup>提出先沿水平方向,再进行竖直方向上的数据交换,从而只需要 4 个发送和 4 个接收函数就可以正确的完成数据交换。但 Pohl 等<sup>[27]</sup>指出,该方法要求连续地完成水平与竖直方向的通信会增加总的通信时间。Ni 等<sup>[30]</sup>指出,由于发送/接收的数据量很小,从而通信时间占程序总的执行时间的比重较小。基于以上分析,本文采用沿  $y$  向分区。

对于  $y$  方向,有  $j_m$  个格子时,计算点编号为  $0, 1, \dots, j_m$ ,有  $np_y$  个进程( $0, 1, \dots, np_y - 1$ ), $irank$  是进程编号。为了尽量满足负载均衡,每个进程求解区域起止值如下确定<sup>[28]</sup>:

$$iwork1 = (j_m + 1) / np_y; iwork2 = MOD(j_m + 1, np_y);$$

$$begin = irank * iwork1 + MIN(irank, iwork2);$$

$$end = begin + iwork1 - 1;$$

$$IF(iwork2 > irank), end = end + 1.$$

分区后,在上下边各加一虚拟层,便于碰撞迁移后各个进程间的数据交换。需要发送/接收的数据在内存中是不连续分布的,可以先拷贝到一个临时数组中后发送;接收进程先用一临时数组接收,再分配到相应位置。为了避免死锁现象,采用非阻塞通信函数  $MPI\_ISEND/MPI\_IRECV$ 。

### 4.2 并行 I/O

并行计算能够高速执行,就必然需要访问大量

数据。并行 I/O 可以允许多个处理器同时完成 I/O 操作,大幅提高性能<sup>[31-32]</sup>。本程序每隔一定迭代次数就采用独立文件指针聚合型输出函数  $MPI\_FILE\_WRITE\_ALL$  输出一次计算结果。

## 5 数值模拟

### 5.1 模拟结果

计算中  $Pr$  数为 1。 $Re$  数为 100、500 时,采用串行 LBM 程序计算,相应格子分别取  $200 \times 200$ 、 $400 \times 400$ ,  $\tau_1$  分别取 1.5、0.95;  $Re$  为 2 000、5 000 时采用  $1\ 000 \times 1\ 000$  的格子,  $\tau_1$  分别取 0.78、0.61, 8 个进程并行计算。

CFD 计算时,应用有限体积法进行数值离散,采用耦合速度和压力方法对离散的代数方程进行迭代求解。动量方程和能量方程的离散采用二阶迎风格式。求解区域采用结构化网格来离散,并在自由表面和壁面进行了网格的局部加密,划分  $200 \times 200$  的网格,最小步长为 0.001,如图 2 所示。限于篇幅,数值解与网格无关性的证明略去。

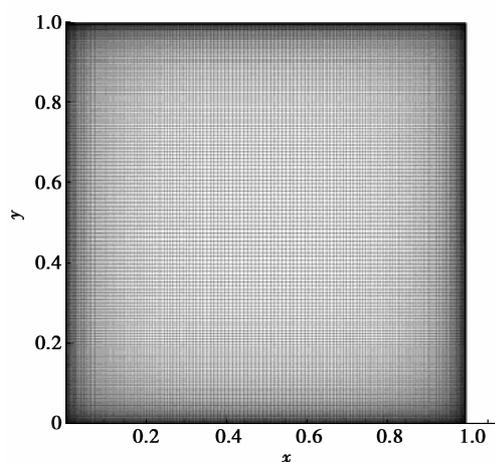


图2 CFD 计算采用的网格

图 3 是  $Re$  数为 500、5 000 时腔体内流线 LBM 结果与 CFD 结果对比。可见腔体内起主导作用的是绕中心的主涡,且随着  $Re$  数的增大,主涡中心位置向右下方偏移。

图 4 是  $Re$  数分别为 100、2 000 时腔体内等温线 LBM 结果与 CFD 结果的对比。 $Re$  数为 100 时,除了自由表面附近,等温线几乎是垂直的,因为此时对流作用较弱,热传导起主导作用;随着  $Re$  数的增大,对流作用越来越强,从而影响到底部区域温度场的变化。温度等值线逐渐变得弯曲,尤其在右顶点处形成很大的温度梯度。

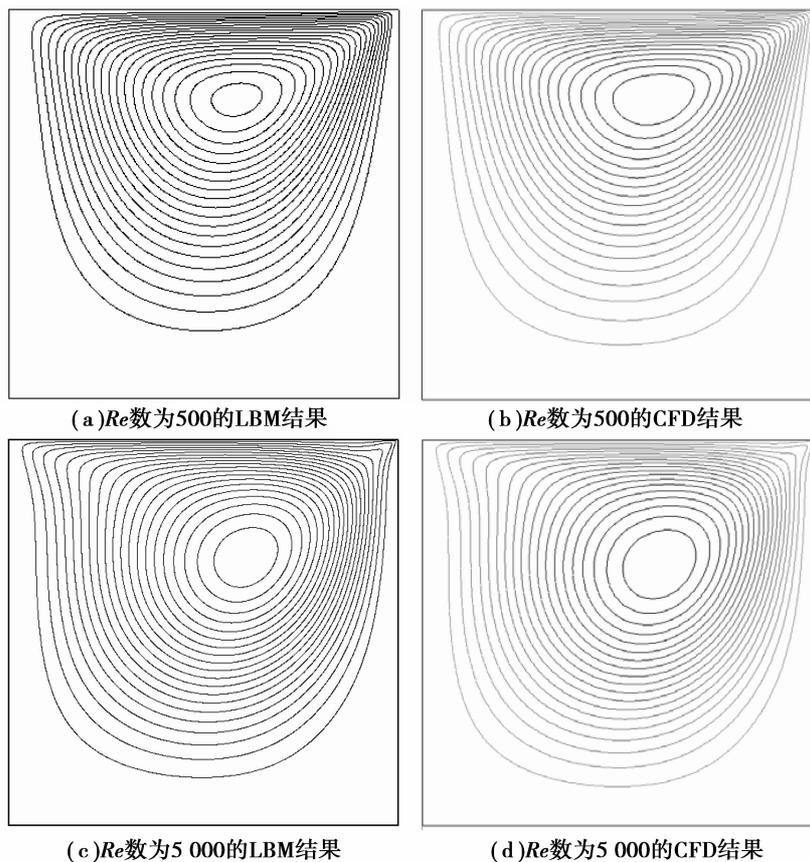


图 3 不同  $Re$  数为时腔体内流线的 LBM 和 CFD 结果对比

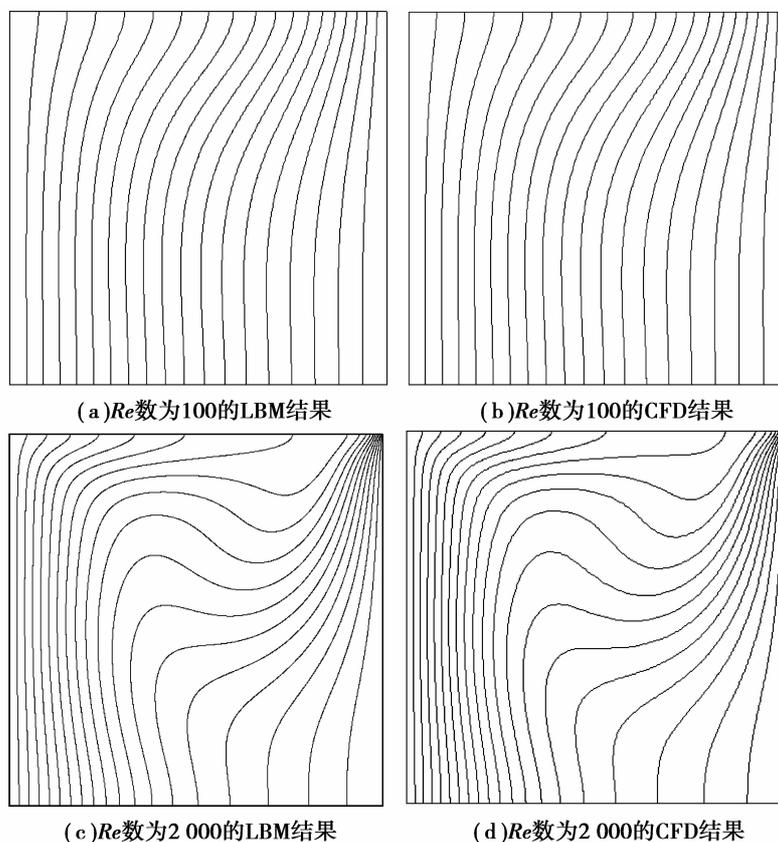


图 4 不同  $Re$  数时等温线的 LBM 和 CFD 结果对比

表1为方腔中心处不同 $Re$ 数下温度和 $x$ 向速度 $u$ 的对比。相对误差较小,进一步表明LBM所得结果的可靠性。

在熔体晶体生长中,对于自由表面附近流场变量的分布尤为关心。因此进一步对自由表面上 $x$ 向速度 $u$ 进行对比,如图5所示。在 $Re$ 数为500、2000时,两者非常吻合;随着 $Re$ 数的增加,右顶点处存在很大的温度梯度,就需要划分非常密的网格, $Re$ 数为5000时,尽管采用了 $1000 \times 1000$ 的格子,在 $x=0.992$ 处,LBM所得 $u$ 值比CFD所得 $u$ 值大0.012。

以上研究表明,热表面张力对流显著影响方腔内熔体的温度分布。在给定 $Pr$ 数下,随着 $Re$ 数的增大,热表面张力对流作用加强,自由表面靠近低温端固壁区域温度梯度明显增大,整体温度分布愈不均匀。理解热表面张力流动的特点和规律有助于了解微重力下浮区法晶体生长中其热表面张力引起的物质与热运输,从而为更进一步控制其生长晶体的质量奠定基础。

表1 不同 $Re$ 数下方腔中心处温线和 $x$ 向速度 $u$ 的对比

$Re$	比较	温度	$x$ 向速度 $u$
100	LBM	0.439 8	-2.118E-2
	CFD	0.443 7	-2.088E-2
	相对误差	0.87%	1.43%
500	LBM	0.345 9	-1.179E-2
	CFD	0.347 3	-1.154E-2
	相对误差	0.40%	2.16%
2000	LBM	0.351 2	-8.569E-3
	CFD	0.346 9	-8.821E-3
	相对误差	1.23%	2.85%
5000	LBM	0.421 8	-6.865E-3
	CFD	0.415 2	-7.052E-3
	相对误差	1.58%	2.65%

## 5.2 程序性能分析

为了测试程序性能,做如下测试:给定 $Pr$ 数为1, $Re$ 数为600时,采用 $600 \times 600$ 的格子; $Re$ 数为1000时,采用 $1000 \times 1000$ 的格子。 $\tau_1=1.0$ ,迭代一万步。加速比如图6所示,可见程序具有较好的性能。

$Re$ 数为1000时就以下2种模式进行了测试:1)通信时进行内部区域计算,完毕后进行上下两条边计算;2)通信完毕后进行计算。发现2种模式下计算时间几乎相当。因此,笔者采用了第2种模式。

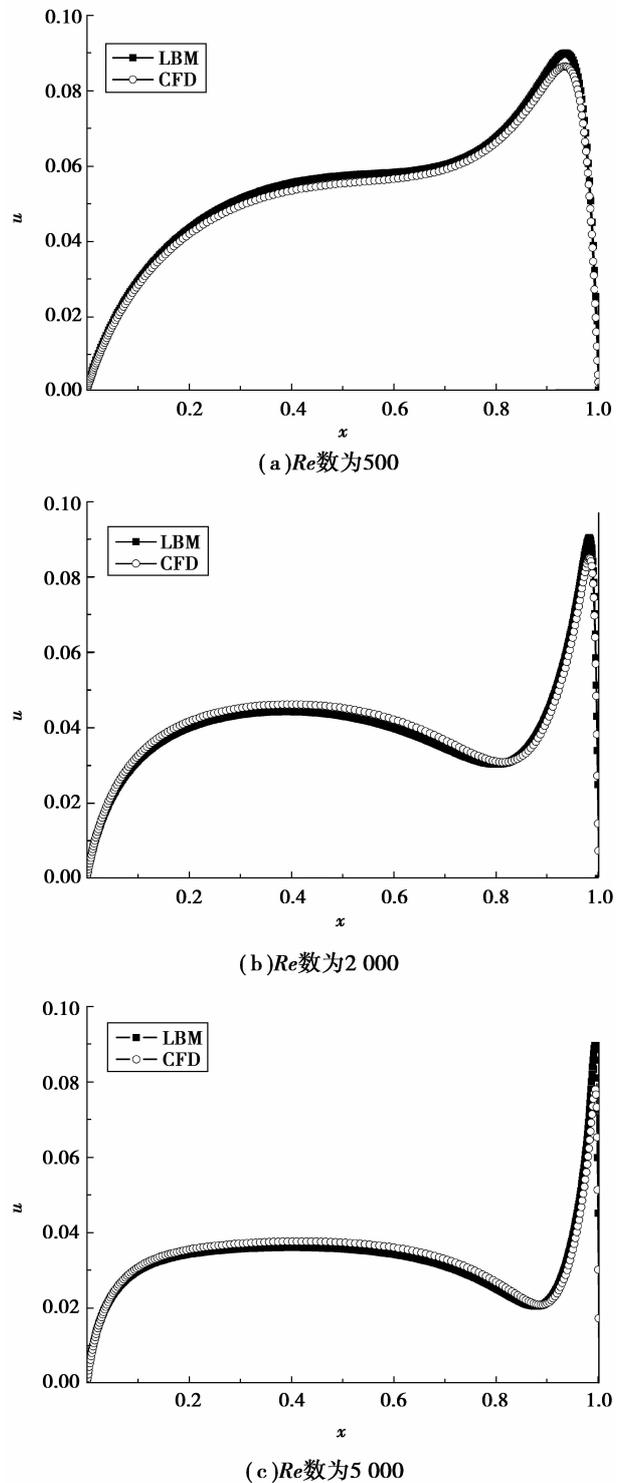


图5 不同 $Re$ 数时自由表面上 $x$ 向速度 $u$ 的对比

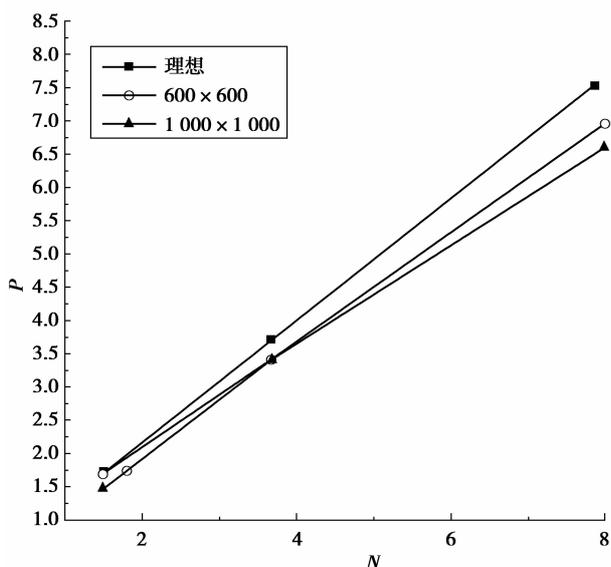


图 6 加速比分析

## 6 结 语

采用格子 Boltzmann 耦合双分布函数模型,通过合并碰撞-迁移过程以及引入临时数组以连续读入分布函数,使串行程序性能提高了 2 倍。在此基础上,采用单向分区,开发出 MPI 并程序包。测试表明程序具有较好的性能;通信同时进行内部区域计算和通信完毕后进行计算两种模式下计算时间几乎相当。利用串行和 MPI 并程序包模拟了  $Pr$  数为 1,不同  $Re$  数时,微重力环境下,二维开口方腔内热表面张力流,并和基于传统有限体积法的 CFD 模拟结果进行了对比。结果表面采用 LBM 所得结果是精确可靠的,可以较好的模拟这一问题。其亦同时表明,热表面张力对流显著影响方腔内熔体的温度分布,从而影响晶体生长的过程。

### 参考文献:

- [1] Zebib A, Homsy G, Meiburg E. High marangoni number convection in a square cavity[J]. *Physics of Fluids*, 1985, 28(12): 3467-3476.
- [2] Zeng Z, Mizuseki H, Sshimamura K, et al. Usefulness of experiments with model fluid for thermocapillary convection-effect of Prandtl number on two-dimensional thermocapillary convection [J]. *Journal of Crystal Growth*, 2002, 234(1): 272-278.
- [3] Lai C L. Multiple-scale analysis of oscillatory thermocapillary convection of high Prandtl number fluids in a rectangular cavity[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2004, 47(5): 1069-1078.
- [4] 陈朝波. 微重力环境下液桥对流及其磁场控制的数值模拟研究[D]. 重庆: 重庆大学, 2008.
- [5] Aidun C, Clausen J. Lattice Boltzmann method for complex flows[J]. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 2010, 42 (1): 439-472.
- [6] Zhao K, Li Q, Xuan Y M. Investigation on the three-dimensional multiphase conjugate conduction problem inside porous wick with the lattice Boltzmann method[J]. *Science in China Series E-Technological Sciences*, 2009, 52(10): 2973-2980.
- [7] Chen S Y, Doolen G D. Lattice Boltzmann method for fluid flows[J]. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 1998, 30(1): 329-364.
- [8] 赵凯, 宣益民, 李强. 基于格子 Boltzmann 方法的复杂多孔介质内双扩散效应的对流传热传质机理研究[J]. *科学通报*, 2010, 55(1): 94-102.  
ZHAO Kai, XUAN Yimin, LI Qiang. Investigation on the mechanism of convective heat and mass transfer with double diffusive effect inside a complex porous medium using lattice Boltzmann method[J]. *Chinese Science Bulletin*, 2010, 55(1): 94-102.
- [9] Succi S. The lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond[M]. Oxford: Oxford University Press, 2001.
- [10] 何雅玲, 王勇, 李庆. 格子 Boltzmann 方法的理论及应用[M]. 北京: 科学出版社, 2009.
- [11] 郭照立, 郑楚光. 格子 Boltzmann 方法的原理及应用[M]. 北京: 科学出版社, 2009.
- [12] Du R, Shi B. The lattice Boltzmann method for the thermocapillary flow in a cavity under microgravity condition [J]. *Computers & Mathematics with Applications*, 2008, 55(7): 1433-1440.
- [13] Peng Y, Shu C, Chew Y T, et al. Numerical investigation of flows in Czochralski crystal growth by an axisymmetric lattice Boltzmann method[J]. *Journal of Computational Physics*, 2003, 186(1): 295-307.
- [14] Weinstein O, Miller W. Three-dimensional calculations of facets during Czochralski crystal growth[J]. *Journal of Crystal Growth*. 2010, 312(7): 989-996.
- [15] He X, Doolen G. Lattice Boltzmann method on curvilinear coordinates system; flow around a circular cylinder[J]. *Journal of Computational Physics*, 1997, 134(2): 306-315.
- [16] Shu C, Chew Y, Niu X. Least-squares-based lattice Boltzmann method; a meshless approach for simulation of flows with complex geometry[J]. *Physical Review*

- E, 2001, 64(4): 045701(1-4).
- [17] Yu D, Mei R, Shyy W. A multi-block lattice Boltzmann method for viscous fluid flows [J]. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2002, 39(2): 99-120.
- [18] Zeng Z. Dynamical properties in crystal growth under microgravity [D]. Sendai: Institute for Materials Research, Tohoku University, 2000.
- [19] Guo Z L, Shi B C, Zheng C G. A coupled lattice BGK model for the Boussinesq equations [J]. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2002, 39(4): 325-342.
- [20] Shi B C, He N Z, Wang N C. A unified thermal Lattice BGK model for Boussinesq equations [J]. *Progress in Computational Fluid Dynamics*, 2005, 5(1): 50-64.
- [21] Guo Z L, Zheng C G, Shi B C. Non-equilibrium extrapolation method for velocity and pressure boundary conditions in the lattice Boltzmann method [J]. *Chinese Physics*, 2002, 11(4): 366-374.
- [22] Wellein G, Zeiser T, Hager G, et al. On the single processor performance of simple lattice Boltzmann kernels [J]. *Computers & Fluids*, 2006, 35(8/9): 910-919.
- [23] Nourgaliev R R, Dinh T N, Theofanous T G, et al. The lattice Boltzmann equation method: theoretical interpretation, numerics and implications [J]. *International Journal of Multiphase Flow*, 2003, 29(1): 117-169.
- [24] Wilke J, Pohl T, Kowarschik M, et al. Cache performance optimizations for parallel lattice Boltzmann codes [J]. *Lecture Notes in Computer Science*, 2003, 2790(2003): 441-450.
- [25] Pohl T, Kowarschik M, Wilke J, et al. Optimization and profiling of the cache performance of parallel lattice Boltzmann codes [J]. *Parallel Processing Letters*, 2003, 13(4): 549-560.
- [26] Körner C, Pohl T, Rüde U, Thürey N, et al. Parallel lattice boltzmann methods for CFD applications [J]. *Numerical Solution of Partial Differential Equations on Parallel Computers*, 2006, 51: 439-466.
- [27] Pohl T. High performance simulation of free surface flows using the lattice boltzmann method [D]. German: System Simulation Group, University of Erlangen-Nuremberg, 2008.
- [28] Aoyama Y, Nakano J. *Rs/6000 sp: practical MPI programming* [M]. [S.l.]: IBM, 1999.
- [29] Carter J, Min S, Olikier L, et al. Magnetohydrodynamic turbulence simulations on the Earth Simulator using the lattice Boltzmann method [R]. [S.l.]: Lawrence Berkeley National Laboratory, 2005.
- [30] Ni J, Zhang J, Lin C L, et al. Parallelization of a lattice Boltzmann method for lid-driven cavity flow [R/OL]. Iowa: The University of Iowa City, 2003 [2012-03-21]. [http://homepage.cs.uiowa.edu/~jni/projects/lbm/para\\_2dcaveflowSC2003e.pdf](http://homepage.cs.uiowa.edu/~jni/projects/lbm/para_2dcaveflowSC2003e.pdf)
- [31] 张林波, 迟学斌, 莫则尧, 等. 并行计算导论 [M]. 北京: 清华大学出版社, 2006.
- [32] Dongarra J, Foster I, Fox G, et al. 并行计算综论 [M]. 莫则尧, 陈军, 曹小林, 译. 北京: 电子工业出版社, 2005.