

验证模拟过渡领域微槽道流动的 LBM 方法[●]

田东波 沈青 谢翀 樊菁

(中国科学院力学研究所 LHD, 100080)

摘要 本文首先用 LBM 以及 DSMC 方法模拟了不同 Knudsen 数、不同进出口压力比下的微槽道流动，并将模拟结果与 Nie 等人的结果进行了对比。在对比分析的基础上，得出目前的 LBM 方法模型不适合于模拟过渡领域里的问题。

关键词 LBM 方法 DSMC 方法 过渡领域 微槽道

1 引言

近年来，由于 LBM(lattice Boltzmann method)方法具有模型简单、运算速度快、可并行计算等优点，因此作为一种流体数值计算方法越来越受到了人们的关注。LBM 方法在许多领域中有着应用，但是多集中在解决连续介质和滑移领域中的问题。近来关于 LBM 方法在过渡领域问题中的应用，已经有模型建立起来。用 LBM 方法来模拟过渡领域里的问题不仅能拓展这种方法的应用领域，同时也为这一领域的数值计算提供了一种新的模拟工具，但是由于 LBM 方法在低频、长波的假设下只可以得到 Navier-Stokes 方程，因此对于这种方法解决过渡领域里的问题适用性需要作进一步的验证。

DSMC(direct simulation Monte Carlo)方法是解决过渡领域中问题的有力工具，这种方法基于分子动理论，直接从流动的物理模拟出发，理论上可以回归到 Boltzmann 方程，并且已经在细观和宏观上得到了实验验证，因此将这种方法作为一种标准来检验 LBM 方法是可靠的。

本文从数值计算的角度，利用 LBM 方法^[1]、DSMC 方法^[2]以及 IP(information preserve)方法^{[3][4][5]}对微槽道流动在不同 Knudsen 数、不同进出口压力比下进行了模拟，并将模拟结果与文献[1]中结果进行了对比，表明现有的 LBM 方法模型对于过渡领域问题是不适用的。

2 LBM 模型介绍

模拟微槽道流动 LBM 方法模型^[1] BGK 型的演化公式为

$$f_i(x + c_i \delta t, t + \delta t) - f_i(x, t) = -\frac{f_i - f_i^{\text{eq}}}{\tau}, \quad (1)$$

式中 i 为模型的速度方向数 ($i=0, \dots, 8$)， f_i 为分布函数， f_i^{eq} 为平衡态分布函数， τ 为松弛因子， x 为空间坐标， c_i 为分子的运动速度， t 为时间， δt 为时间步长。将式中的 τ 以 τ' 代替，

$$\tau' = \frac{1}{2} + \frac{1}{\rho} \left(\tau - \frac{1}{2} \right), \quad (2)$$

● 国家自然科学基金(19889209, 90205024)资助。

保证了动力黏性系数 $\mu = \rho v$ 为常值, ρ 为密度, v 为运动黏性系数。

引进平均自由程

$$\lambda = a(\tau - 0.5)\rho, \quad (3)$$

这里 a 为一常数。从而有

$$Kn = \frac{a(\tau - 0.5)}{\rho h}, \quad (4)$$

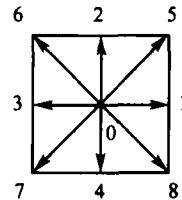
式中, h 为特征尺度, 通过与实验中的质量流率结果比较定出 $a = 0.388$ 。

这里的平衡态分布为

$$f_i^{\text{eq}} = t_4 \rho \left[1 + \frac{c_{ia} u_a}{c_s^2} + \frac{(c_{ia} c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{ab})}{2 c_s^4} u_a u_\beta \right], \quad (5)$$

在 D2Q9 模型(图 1)中, $c_s = 1/\sqrt{3}$ 是声速, $t_0 = 4/9$, $t_1 = t_2 = t_3 = t_4 = 1/9$, $t_5 = t_6 = t_7 = t_8 = 1/36$ 。 α 和 β 表示在笛卡尔坐标系下的空间方向: u_a 为速度分量。密度 ρ 和流体速度 u 定义为

$$\rho = \sum_i f_i, \rho u = \sum_i c_i f_i. \quad (6)$$



(6) 图 1 D2Q9 模型

3 模拟的具体问题和流场网格划分、边界处理

为了便于对比和具有代表性, 本文中模拟了两平板间压力驱动的微槽道流动(图 2), 槽道长宽比 $L/h = 100$, $L = 100 \mu\text{m}$ 。槽道中的流动介质为氦气(He), 温度 $T = 273 \text{ K}$ 。槽道进出口的压力比为 P_i/P_e , 通过 Knudsen 数求出口压力 P_e 。

在模拟中, 流场的网格的划分以及边界的处理对于用 LBE 方法的模拟也很重要:

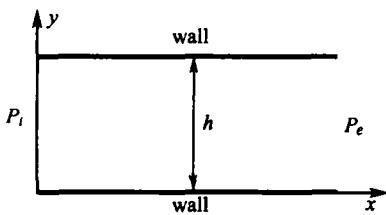


图 2 槽道几何形状

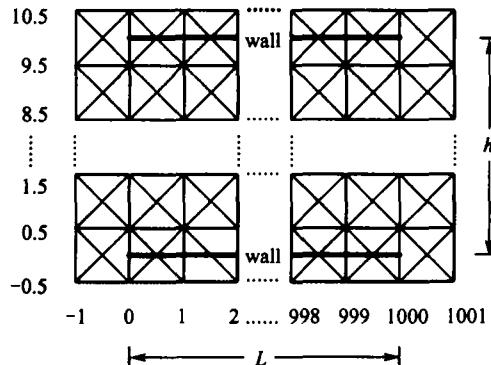
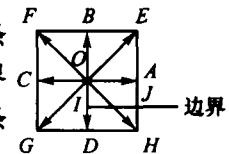


图 3 流场网格划分

1) 根据 D2Q9 模型将流场划分为 1000×10 个网格(图 3), 并将固边置于边界网格中间(图 3,4)。

2) 压力边界上采用外插方法^[6], 固边采用反弹(bounce-back)边界条件。图 4 中, 点 I, J 为固边边界点; A, E 为流体内部点; O, B 为压力边界点; F, C, G, D, H 为计算区域外网格点。在 G, C, F 点施加压力边界条件



$$f_{i-1} = 2f_i - f_{i+1}. \quad (7)$$

(7) 图 4 边界处理

在 D, H 点是反弹边界条件, 也就是按原路返回。

4 模拟结果以及对比分析

本文用 LBM, DSMC 以及 IP 方法分别在 Knudsen 数为 $0.0194 (P_i/P_e = 1.4)$, $0.194 (P_i/P_e = 2.0)$, $0.388 (P_i/P_e = 2.0)$ 时对微槽道流动进行了模拟, 并且将结果与文献[1]进行了对比。槽道出口处速度分布对比结果分别见图 6, 8, 10, 出口速度用出口处最大速度 U_{\max} 归一化。沿槽道轴向压力分布与线性压力分布的偏离 ($P - P_i$) 对比见图 5, 7, 9, 并用出口处压力 P_e 归一化。

当 Knudsen 数为 0.0194 时, 接近于连续介质, 这时 LBM 方法与其他方法的结果符合较好(图 5, 图 6), 尽管与其他几种方法在沿槽道轴向压力分布与线性压力分布的偏离上有差别, 但总体的趋势是符合的, 出口处轴向速度分布则符合很好。随着 Knudsen 数的增大到 0.194 时, 可以看到出口处轴向速度分布与其他方法相比已经出现差别(图 8), 只是还不十分明显, 但槽道轴向压力分布与线性压力分布的偏离与其他方法相比偏差较大(图 7), LBM 方法的结果在 $(P - P_i)/P_e = 0$ 附近摆动, 而其他方法的结果则为正值, 与其他方法偏离较大, 其中 IP 方法和 DSMC 方法的结果较为符合。当 Knudsen 数进一步增大到 0.388 时, 从图 9 可以看出, 此时的槽道轴向压力分布与线性压力分布的偏离相差更大, LBM 方法的结果此时已经为负值, 而其他方法仍为正值, 而速度分布剖面(图 10)也已出现较为明显的差异, LBM 方法边界的滑移速度此时已经完全偏离其他几种方法的结果, 而 IP 方法和 DSMC 方法仍然符合较好。

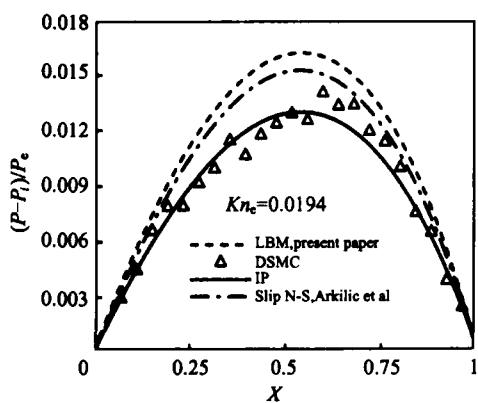


图 5 沿槽道轴向压力分布与线性压力分布的
偏离, LBM, DSMC and IP 方法模拟结果对比,
 $P_i/P_e = 1.4, Kn = 0.0194$

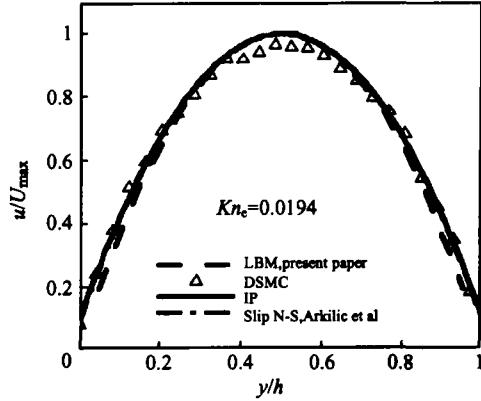


图 6 槽道出口处轴向速度分布,
LBM, DSMC and IP 模拟结果对比,
 $P_i/P_e = 1.4, Kn = 0.0194$

从模拟结果可以看出, 本文的 LBM 模拟结果与 Nie 等人^[1]的模拟结果是相符合的, 并且 LBM 方法只有在 Knudsen 数很小的时候才与其他方法符合较好, 一旦进入滑流领域就已经出现偏差, 尤为明显的是在过渡领域, 此时槽道轴向压力分布与线性压力分布于其他几种方法结果相比是完全背离的, 已经不能够正确反映出该流动基本特征。

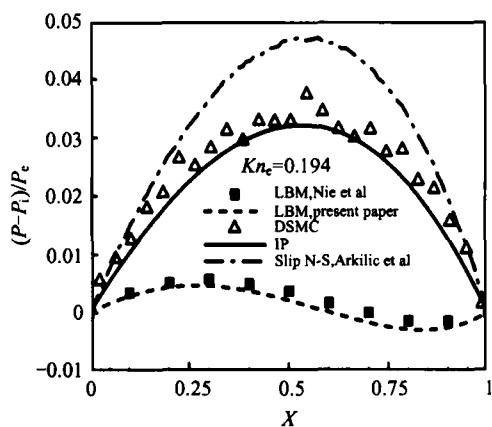


图 7 沿槽道轴向压力分布与线性压力分布的偏离, LBM, DSMC and IP 方法模拟结果对比,
 $P_i/P_e=2.0, Kn=0.194$

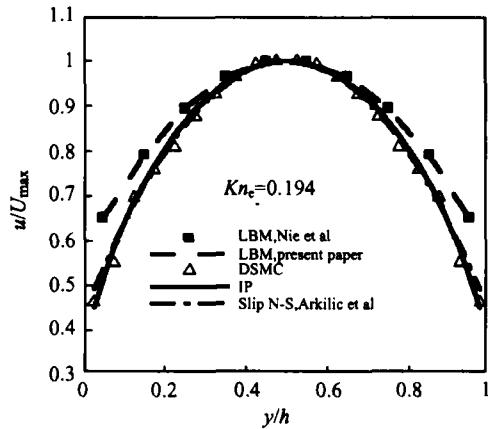


图 8 槽道出口处轴向速度分布,
LBM, DSMC and IP 模拟结果对比,
 $P_i/P_e=2.0, Kn=0.194$

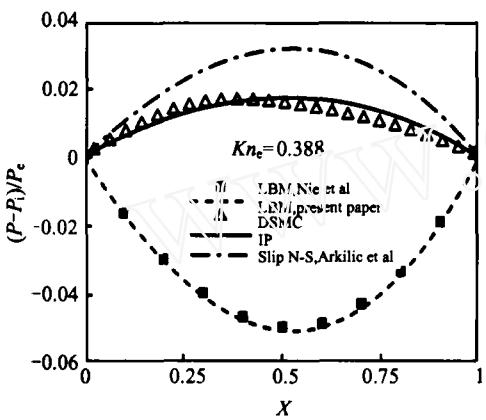


图 9 沿槽道轴向压力分布与线性压力分布的偏离, LBM, DSMC and IP 方法模拟结果对比,
 $P_i/P_e=2.0, Kn=0.388$

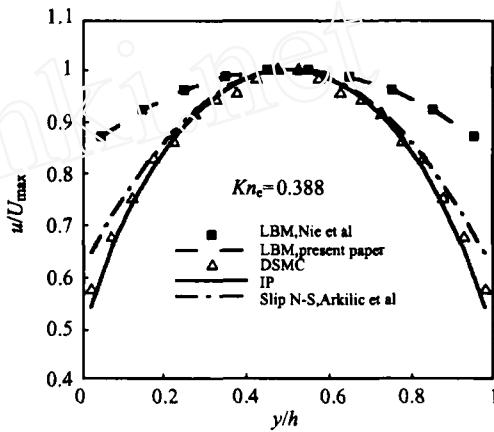


图 10 槽道出口处轴向速度分布,
LBM, DSMC and IP 模拟结果对比,
 $P_i/P_e=2.0, Kn=0.388$

5 结论

通过用 LBM 方法、DSMC 方法模拟不同 Knudsen 数、不同进出口压力比的微槽道流动,从结果对比分析可以得出以下结论:

- 1) 这种 LBE 模型在小 Knudsen 数下可以得到较好的模拟结果,但是在过渡领域其结果出现了较大的偏移,因此不适合于模拟过渡领域里的问题。
 - 2) 对于在大 Knudsen 数下, LBM 方法结果中槽道轴向压力分布与线性压力分布的偏离出现了负值的情况,而其他方法在本文所模拟的 Knudsen 数下并未出现负值。
- 综上所述, LBM 方法作为一种模拟工具从连续介质领域进入过渡领域,面临着建立有效

模型的困难,同时也需要进一步的实验验证。

参 考 文 献

- 1 X B Nie, G D Doolen & S Y Chen. Lattice-Boltzmann simulation of fluid flows in MEMS. *J. Statist. Phys.*, 2002, Vol. 107: 279~289
- 2 G A Bird. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Clarendon Press. Oxford. 1994
- 3 J Fan, C Shen. Statistical simulation of low-speed unidirectional flows in transitional regime, in *Rarefied Gas Dynamics* edited by R Brun et al, 1999, Vol. 2: pp. 245
- 4 J Fan, C Shen, Statistical Simulation of Low-Speed Rarefied Gas Flows. *J. Comput. Phys.*, 2001, 167: 399~412
- 5 C Xie, J Fan & C Shen. Rarefied Gas Flows in Micro-channels. presented at 23rd International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, 21 – 25 July 2002. Whistler, to appear
- 6 S Y Chen, D Martinez & R W Mei. On boundary conditions in lattice Boltzmann methods. *Phys. Fluids*, 1996, 8(9): 2527