

混合算法中的耦合判据*

兰旭东†

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)
(2009 年 1 月 15 日收到, 2009 年 2 月 16 日收到修改稿)

混合算法是研究跨尺度流动问题的重要手段之一. 分界面位置以及分界面两侧的信息传递是混合算法需要解决的两个主要问题. 分析推导了现有耦合判据之间的关系, 给出耦合判据的统一形式及参数的选取范围.

关键词: 混合算法, 耦合判据

PACC: 5190

1. 引言

在微/纳机电系统(MEMS/NEMS)内及其周围的气体流动往往由连续区和稀薄区组成^[1,2], 属于跨流区流动. 基于连续性假设的方法相对成熟, 并且已经广泛应用于连续区流动的计算^[2]. 由于连续介质假设的限制, 连续性方法无法预测过渡区的流动^[3], 此时必须采用基于动力学理论的方法, 如直接模拟 Monte Carlo(DSMC)法^[4]. 然而, DSMC 法也因计算量大而几乎无法模拟连续区的流动. 因此, 对于 MEMS/NEMS 内的跨区流动问题, 人们很自然地想到采用基于连续性假设方法和基于动力学理论方法的混合算法.

在过去十多年里, 很多学者研究和开发了混合算法^[5], 如弱耦合法^[6,7]、搭接耦合法和无搭接耦合法^[8,9]. 为了进一步研究耦合技术, Hash 和 Hassan^[10,11]提出 Marshak 条件, 即把分界面两边的半通量之和作为通过分界面的全通量. 混合算法的进一步发展, 出现了适应性耦合方案, Roveda 等^[12,13]通过一种适应性离散速度 Euler 解法和 DSMC 法在适应性界面上进行耦合, Garcia 等^[14]提出适应性网格和算法改进方案等. 在所有的耦合方法中, 需要解决的两个主要问题是粒子区和连续区分界面的确定以及分界面两侧的信息传递. 通常采用耦合判据来确定分解面的位置.

用于区分流场中的连续区和粒子区的参数称为

连续性破坏参数, 即耦合判据. 原则上, 耦合判据可以从 Boltzmann 方程和 Navier-Stokes 方程之间的关系导出. 在准平衡条件下, Navier-Stokes 方程近似于 Boltzmann 方程, 因此用于得到 Navier-Stokes 方程的任何近似都可用于获得耦合判据, 例如使用 Chapman-Enskog 理论^[15]推导 Navier-Stokes 方程. 一般而言, 耦合判据的选取对耦合结果的准确度有直接的关系. 当然, 对于某些简单的流动也可以人为指定分界面位置, 然而在绝大多数的情况下则很难事先判定分界面位置. 因此, 选取合适的耦合判据及其临界值就显得非常重要.

2. 耦合判据

现有的耦合判据有局部 Knudsen 数 Kn_L ^[16], P 参数^[17], $\|\phi\|$ 参数^[8]以及 B 参数^[18], 下面逐一给出.

2.1. 局部 Knudsen 数 Kn_L

最直观、应用最广的耦合判据是局部 Knudsen 数^[16]

$$Kn_{L,Q} = \frac{\lambda}{Q} \left| \frac{\partial Q}{\partial l} \right|, \quad (1)$$

其中, λ 为分子平均自由程, Q 代表宏观物理量, 可以是密度 ρ 、速度 v 或温度 T 等. 在实际应用中, 往往取最大值^[19], 即

$$Kn_L = \max(Kn_{L,\rho}, Kn_{L,v}, Kn_{L,T}). \quad (2)$$

* 国防基础科研计划 批准号: A1420060204 资助的课题.

† E-mail: lanxudong@tsinghua.org.cn

2.2. P 参数

Bird^[4]给出气体膨胀过程中平动和转动能量平衡态失效的准则参数 P , 许多学者以 P 参数作为判断连续性假设失效的依据. 对于非稳态流动, Macrossan^[20, 21]还证明了 P 参数等效于 Kn_L ,

$$P = \frac{U}{\rho\nu} \left| \frac{d\rho}{ds} \right|. \quad (3)$$

2.3. B 参数

通过研究气体分子的分布规律, Garcia 等^[14]提出用 B 参数作为耦合判据,

$$B = \max\{|\tau_{ij}^*|, |q_i^*|\}. \quad (4)$$

这里

$$\tau_{ij}^* = \frac{\mu}{p} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right), \quad (5)$$

$$q_i^* = -\frac{\kappa}{p} \left(\frac{2m}{k_B T} \right)^{1/2} \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad (6)$$

分别是归一化的应力张量和热流通量, 其中 P 为压力, $\kappa = 15R\mu/4$, $R = k_B/m$.

2.4. $\|\phi\|$ 参数

Tiwari^[8]通过研究气体局部热平衡而给出如下参数作为耦合判据:

$$\|\phi\| = \frac{1}{\rho RT} \left[\frac{2}{5} \frac{|q|^2}{RT} + \frac{1}{2} \|\tau\|_E^2 \right]^{1/2}, \quad (7)$$

其中, $\|\tau\|_E^2$ 是应力向量矩阵的 Euclid 范数.

$\|\phi\|$ 越小越接近热平衡态.

如果不考虑切应力的影响^[8], 则

$$\|\phi\| = \sqrt{\frac{2}{5}} \frac{|q|}{(\rho RT)^{3/2}}. \quad (8)$$

3. 各耦合判据间的关系

尽管 P 参数和 Kn_L 分别在模拟射流和超高速可压缩流中得到广泛应用. 然而对于一般性的流动, 这些耦合判据的正确性值得探讨. 即使某个耦合判据适合于一些特定流动, 其临界值也很难决定. 有的学者将连续解和动力学结果之差大于 5% 作为耦合判据, 或者仅仅简单地取一个较小数值作为耦合判据的临界值. 因此, 如何选取耦合判据及其临界值对于流动的模拟非常关键.

从各耦合判据的表达式不难发现, 它们彼此间存在一定联系.

3.1. P 参数与 Kn_L 之间的关系

(3) 式可写成

$$\begin{aligned} P &= \frac{\sqrt{\pi s}}{2} \frac{\lambda}{\rho} \left| \frac{d\rho}{ds} \right| \\ &= \frac{\sqrt{\pi s}}{2} Kn_{L,\phi}. \end{aligned} \quad (9)$$

将 $s = c_0/\sqrt{2RT}$, 分子平均自由程 $\lambda = 2\mu/(\rho c_0)$ 及压力 $p = \rho RT$ 代入(9)式, 可得

$$\begin{aligned} P &= \frac{\sqrt{\pi s}}{2} \frac{\lambda}{\rho} \left| \frac{d\rho}{ds} \right| \\ &= \frac{\mu}{\lambda p} \sqrt{\frac{\pi RT}{2}} Kn_{L,\phi}. \end{aligned} \quad (10)$$

3.2. B 参数与 Kn_L 之间的关系

分别对(5)和(6)式进行如下处理:

$$\begin{aligned} |q_i^*| &= \frac{\kappa}{p} \left(\frac{2m}{k_B T} \right)^{1/2} \left| \frac{\partial T}{\partial x_i} \right| \\ &= \frac{15}{4} \frac{\mu}{\lambda p} (2RT)^{1/2} Kn_{L,T,i}, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} |\tau_{ij}^*| &= \frac{\mu}{p} \left| \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right| \\ &\leq \frac{2}{3} \frac{\mu}{p} \left| \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right| + 2 \frac{\mu}{p} \left| \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right| \\ &= \frac{2}{3\lambda} \frac{\mu}{p} \left| \left(u \frac{\lambda}{u} \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\lambda}{v} \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right| \\ &+ \frac{2}{\lambda} \frac{\mu}{p} \left| \left(u \frac{\lambda}{u} \frac{\partial u}{\partial y} + v \frac{\lambda}{v} \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right| \\ &\leq \frac{2}{3\lambda} \frac{\mu}{p} \left(u \frac{\lambda}{u} \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right| + v \frac{\lambda}{v} \left| \frac{\partial v}{\partial y} \right| \right) \\ &+ \frac{2}{\lambda} \frac{\mu}{p} \left(u \frac{\lambda}{u} \left| \frac{\partial u}{\partial y} \right| + v \frac{\lambda}{v} \left| \frac{\partial v}{\partial x} \right| \right) \\ &\leq \frac{16\mu u_{\max}}{3\lambda p} Kn_{L,\max}, \end{aligned} \quad (12)$$

其中,

$$\begin{aligned} Kn_{L,\max} &= \max \left(\frac{\lambda}{u} \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right|, \frac{\lambda}{u} \left| \frac{\partial u}{\partial y} \right|, \frac{\lambda}{v} \left| \frac{\partial v}{\partial x} \right|, \frac{\lambda}{v} \left| \frac{\partial v}{\partial y} \right| \right), \\ u_{\max} &= \max(u, v). \end{aligned}$$

将(10)和(11)式代入(4)式, 可得

$$\begin{aligned} B &= \max\{|\tau_{ij}^*|, |q_i^*|\} \\ &= \max \left\{ \frac{16\mu u_{\max}}{3\lambda p} Kn_{L,\max}, \frac{15\mu}{4\lambda p} (2RT)^{1/2} Kn_{L,T,i} \right\}. \end{aligned} \quad (13)$$

3.3. $\|\phi\|$ 参数与 Kn_L 之间的关系

根据 Fourier 导热定律

$$q = -\kappa \nabla T, \quad (14)$$

其中,

$$\begin{aligned} \kappa &= 15R\mu/4, \\ \mu &= 5\sqrt{mk_B T/\pi} (16d^2), \\ R &= k_B/m, \end{aligned} \quad (15)$$

代入(8)式可得 $\|\phi\|$ 参数与 Kn_L 之间的关系

$$\begin{aligned} \|\phi\| &= \sqrt{\frac{2}{5} \frac{k_B |\nabla T|}{\rho (RT)^2}} \\ &= \sqrt{\frac{2}{5} \frac{15\mu \sqrt{RT}}{4\lambda p}} Kn_{L,T}. \end{aligned} \quad (16)$$

3.4. 各耦合判据间的数值比较

上述分析表明,其他三种耦合判据均与 Kn_L 存在一定的线性关系。 Kn 数通常可定义为 $Kn = \lambda/L$, 其中 $\lambda = 1/(\sqrt{2}\pi n d^2)$, n 是数密度, d 是分子直径, L 是特征尺度。为了更直观地反映各耦合判据间的关系,本文以 N_2 气为例从数值上对各耦合判据的大小进行初步估算。其中, N_2 气分子直径 $d = 4.17 \times 10^{-10}$ m, 分子数密度 $n = 2.0 \times 10^{25}$, 相应于 N_2 气的普适气体常数 $R = 8314/28 \approx 297$, 黏性系数 $\mu = 1.656 \times 10^{-5}$ kg·m⁻¹·s⁻¹, 压力 $p = 1.0 \times 10^5$ Pa, 温度 $T = 300$ K, 系统最大速度 U_{\max} 取为 100.0 m/s, 特征尺寸 L 从 1.0×10^{-5} m 变化到 2×10^{-5} m。数值计算结果如图 1 所示。

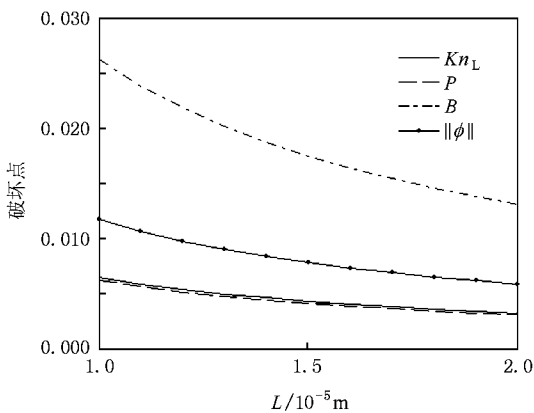


图 1 四种耦合判据的相对关系

从图 1 可知,对于相同的特征尺度, B 参数的值大于其他三种耦合判据的值, Kn_L 和 P 参数差别不大。因此,只要 B 参数取值足够小即可保证其他三种耦合判据成立。

4. 耦合判据的统一形式

耦合判据对于计算区域划分非常重要,耦合判据选取是否合适直接影响到混合算法计算结果的准确性及计算效率。然而现有的四种耦合判据无法直接给出一个可靠而统一的耦合判据的临界值,使得在使用混合算法模拟具体流动问题时需要对耦合判据进行可行性分析,这给计算带来一定的麻烦。

从上述分析可知,其他三种耦合判据(P 参数、 B 参数和 $\|\phi\|$ 参数)与 Kn_L 存在一定的线性关系。因此,总结上述分析可知,四种耦合判据可统一表示为如下形式:

$$\xi_b = A \frac{\mu \sqrt{RT}}{\lambda p} Kn_{L,\max}, \quad (17)$$

其中, A 是待定参数, μ 是黏性系数, R 是普适气体常数, T 是温度, λ 是分子平均自由程, p 是压力, $Kn_{L,\max}$ 是基于宏观量定义的局部 Knudsen 数最大值。称 ξ_b 为统一的耦合判据。

对于分子硬球模型, $\mu = 5\sqrt{mk_B T/\pi} (16d^2)$, 并将 $R = k_B/m$, $p = nk_B T$ 和 $\lambda = 1/(\sqrt{2}\pi n d^2)$ 一起代入(17)式,可得

$$\xi_b = A \frac{5\sqrt{2\pi}}{16} Kn_{L,\max}. \quad (18)$$

为了避免数值模拟过程中由于数值扰动导致的 $Kn_{L,\max}$ 过大而引起的计算发散,对于(18)式所示的简单形式,本文建议取 $A \leq \frac{1.6}{5\sqrt{2\pi}}$, 且 $Kn_{L,\max} \leq 0.1$ 作为统一耦合判据的临界参数。

统一的耦合判据 ξ_b 可以直接用于混合算法程序。对于具体的流动问题,只需选择合适的 A 值即可,无需对比几种耦合判据间的优劣。这可以降低混合算法程序的计算时间。

5. 结 论

总结了 P 参数、 B 参数和 $\|\phi\|$ 参数与 Kn_L 四种耦合判据。分析了各耦合判据间的关系,数值研究了四种耦合判据的相对大小关系,给出耦合判据的统一形式及参数的选取范围。

- [1] Sun Q , Boyd I D , Candler G V 2002 *J. Thermophys. Heat Transf.* **16** 171
- [2] Wang W L , Boyd I D 2003 *Phys. Fluids* **15** 91
- [3] Gad-el-Hak M 1999 *J. Fluid Eng.* **121** 4
- [4] Bird G A 1994 *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* (Oxford : Oxford Science Publications)
- [5] Sun Q H , Boyd I D , Candler G V 2004 *J. Comput. Phys.* **194** 256
- [6] Lumpkin F E , Stuart P C , Lebeau G J 1996 *Am. Inst. Aeron. Astron.* **96** 1877
- [7] Hash D B , Hassan H A 1996 *Am. Inst. Aeron. Astron.* **96** 0353
- [8] Wadsworth D C , Erwin D A 1992 *Am. Inst. Aeron. Astron.* **92** 2975
- [9] Wadsworth D C , Erwin D A 1990 *Am. Inst. Aeron. Astron.* **90** 1690
- [10] Hash D B , Hassan H A 1997 *Am. Inst. Aeron. Astron.* **97** 2507
- [11] Hash D B , Hassan H A 1996 *J. Thermophys. Heat Transf.* **10** 242
- [12] Roveda R , Goldstein D B , Varghese P L 2000 *J. Spacecraft Rockets* **37** 753
- [13] Roveda R , Goldstein D B , Varghese P L 1998 *J. Spacecraft Rockets* **35** 258
- [14] Garcia A L , Bell J B , Crutchfield W Y , Alder B J 1999 *J. Comput. Phys.* **154** 134
- [15] Chapman S , Cowling T G 1970 *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases* (Cambridge : Cambridge University Press) pp46—85
- [16] Bird G A 1970 *Am. Inst. Aeron. Astron.* **8** 1998
- [17] Boyd I D , Chen G , Candler G V P 1995 *Phys. Fluids* **7** 210
- [18] Tiwari S 1998 *J. Comput. Phys.* **144** 710
- [19] Schwartzenuber T E , Boyd I D 2005 , *Am. Inst. Aeron. Astron.* **105** 4829
- [20] Macrossan M N 2001 *J. Comput. Phys.* **173** 600
- [21] Macrossan M N 2003 *J. Comput. Phys.* **185** 612

Breakdown parameter in hybrid method^{*}

Lan Xu-Dong[†]

(Institute of Applied Physics and Computational Mathematics , Beijing 100094 , China)

(Received 15 January 2009 ; revised manuscript received 16 February 2009)

Abstract

The multiscale flow is a hot topic recently. The hybrid method by coupling different methods is the main approach to investigate multiscale flows. The two processes involved in hybrid method are determining interface position and transferring information through the interface. The paper discusses the existing breakdown parameters and proposes a unified form of the breakdown parameter.

Keywords : hybrid method , breakdown parameter

PACC : 5190

^{*} Project supported by the Basic Research Program for National Defense of China (Grant No. A1420060204).

[†] E-mail : lanxudong@tsinghua.org.cn