

过渡区微尺度流动的有效黏性多松弛系数格子 Boltzmann 模拟

王佐 刘雁 张家忠

Simulation of micro flow in the transition regime using effective-viscosity-based multi-relaxation-time lattice Boltzmann model

Wang Zuo Liu Yan Zhang Jia-Zhong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 014703 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.014703

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.014703>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I1>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

多孔介质内溶解与沉淀过程的格子 Boltzmann 方法模拟

[Lattice Boltzmann simulation of dissolution and precipitation in porous media](#)

物理学报.2015, 64(15): 154701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.154701>

微尺度振荡 Couette 流的格子 Boltzmann 模拟

[Lattice Boltzmann modeling of microscale oscillating Couette flow](#)

物理学报.2014, 63(21): 214703 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.214703>

任意复杂流-固边界的格子 Boltzmann 处理方法

[A novel lattice Boltzmann method for dealing with arbitrarily complex fluid-solid boundaries](#)

物理学报.2014, 63(7): 074703 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.074703>

疏水表面滑移流动及减阻特性的格子 Boltzmann 方法模拟

[Lattice Boltzmann simulation of slip flow and drag reduction characteristics of hydrophobic surfaces](#)

物理学报.2014, 63(5): 054701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.054701>

热对流条件下颗粒沉降的格子 Boltzmann 方法模拟

[Lattice Boltzmann simulation of the sedimentation of particles with thermal convection](#)

物理学报.2013, 62(8): 084703 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.084703>

过渡区微尺度流动的有效黏性多松弛系数格子 Boltzmann 模拟*

王佐¹⁾ 刘雁²⁾ 张家忠^{1)†}

1)(西安交通大学能源与动力工程学院, 西安 710049)

2)(西北工业大学机电学院, 西安 710072)

(2015年5月26日收到; 2015年9月2日收到修改稿)

为提高采用二维九速离散速度模型的格子 Boltzmann 方法 (LBM) 模拟微尺度流动中非线性现象的精度和效率, 引入 Dongari 等提出的有效平均分子自由程对黏性进行修正 (Dongari N, Zhang Y H, Reese J M 2011 *J. Fluids Eng.* **133** 071101); 并针对以往研究微尺度流动时采用边界处理格式含有离散误差的问题, 采用多松弛系数格子 Boltzmann 方法结合二阶滑移边界条件, 对微尺度 Couette 流动和周期性 Poiseuille 流动进行模拟, 并将速度分布以及质量流量等模拟结果与直接模拟蒙特卡罗方法模拟数据、线性 Boltzmann 方程的数值解以及现有的 LBM 模型模拟结果进行对比. 结果表明, 相对于现有的 LBM 模型, 引入新的修正函数所建立的有效黏性多松弛系数 LBM 模型有效提高了 LBM 模拟过渡区的微尺度流动中的非线性现象的能力.

关键词: 微尺度流动, 过渡区, 多松弛系数格子 Boltzmann 方法, 有效黏性

PACS: 47.11.Qr, 02.60.Cb, 47.45.-n

DOI: 10.7498/aps.65.014703

1 引言

随着微机电系统 (MEMS) 的蓬勃发展, 对于微尺度流动的研究越来越受到重视^[1]. 由于系统尺度的缩小, 微尺度流动将出现与宏观流动不同的特征, 例如边界上的速度滑移和温度跳跃, 并且在边界附近区域应力和应变的非线性关系不能再忽略. 微尺度流动中的特征数定义为 $Kn = \lambda/L$, 其中 λ 为平均分子自由程, L 为系统特征尺度. 一般情况下, 可根据 Kn 的大小将流动区域划分为连续区 ($Kn < 0.001$)、滑移区 ($0.001 < Kn < 0.1$)、过渡区 ($0.1 < Kn < 10$) 和自由区 ($Kn > 10$). 一般认为, 基于连续性假设的 Navier-Stokes (NS) 方程适用于连续区, 采用滑移边界条件的 NS 方程可描述滑移区的流动; 然而在过渡区和自由区, 连续性假设不再成立, 不能采用 NS 方程进行模拟^[2], 一

般采用直接分子模拟 (MD) 或者直接模拟蒙特卡罗 (DSMC) 方法, 然而这两种方法都需模拟大量分子的运动, 需要耗费大量的时间和计算资源, 尤其对于低速流动的计算收敛速度慢且统计噪声明显^[3]. 近年来兴起的格子 Boltzmann 方法 (LBM) 因其介观粒子背景, 可以用相对较少的粒子实现微尺度流动的模拟, 并且算法实现简单, 粒子演化的局部性使得计算的并行性好, 这些特征使 LBM 在许多领域获得成功应用^[4-8], 并且也逐渐发展成为研究微尺度流动的一种有效方法.

从 2002 年以来, 国内外众多学者开始将 LBM 应用于微尺度流动的研究中, 并取得了一系列成果. 其中关注的一个重要问题是边界滑移速度的准确实现. Succi^[9] 首次提出一种将直接反弹和镜面反射相结合的边界处理格式, 并采用单松弛系数格子 Boltzmann 模型 (SRT-LBM) 捕捉到边界上的速

* 国家自然科学基金 (批准号: 51305355)、国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2012CB026002) 和国家科技支撑计划 (批准号: 2013BAF01B02) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: jzzhang@mail.xjtu.edu.cn

度滑移现象;之后文献[10, 11]提出了基于Maxwell离散漫反射的边界处理格式. Guo等[12–14]进一步证明了上述两种边界处理格式是等价的,并且都存在离散数值误差;并提出了针对SRT-LBM和多松弛系数格子Boltzmann模型(MRT-LBM)的参数选取方法和边界处理格式,指出SRT-LBM中参数选取与计算网格有关,而采用MRT-LBM能有效地解决这一问题,因而相对于SRT-LBM, MRT-LBM更适用于微尺度流动的模拟. 另一个关注的重要问题是Knudsen边界层的捕捉. 所谓Knudsen边界层是指当气体流经固体壁面时,固体壁面的存在使得壁面附近的平均分子自由程变小,产生一个厚度约为分子平均自由程量级的边界层,即为Knudsen边界层. 在Knudsen边界层内应力和应变呈现出非线性关系. 随着 Kn 数的增大,Knudsen边界层对整体流动的影响越来越大,为准确反映 Kn 数较大时微尺度流动中的非平衡和非线性现象,必须考虑Knudsen边界层的作用. 解决该问题的一个方法是构造高阶离散速度LBM模型[15–20],但是相对于目前应用最广泛的二维九速(D2Q9)模型,高阶矩的引入造成模型的构造复杂,例如碰撞迁移过程并不一定发生在节点上,需对演化过程重新构造[18];且存储量和计算量相应加大,这在一定程度上丧失了LBM的固有优势. 并且一些学者研究指出,高阶离散速度模型并不一定会取得更好的计算结果[19,20]. 另一个方法是采用有效黏性系数[13,14,21–24],将Knudsen边界层内固体壁面对平均分子自由程的影响以经验或者解析表达式的形式表现出来,进而通过平均分子自由程和黏性的关系建立有效黏性系数表达式. 相对于高阶模型方法,有效黏性系数方法更能保持现有LBM模型简单易行和高效的优势,因而得到了广泛关注.

Zhang等[21]首次将有效黏性系数概念引入到LBM模型中,并根据已有的DSMC模拟结果提出了一个基于壁面函数的经验性有效黏性修正函数,数值模拟结果表明,通过引入有效黏性系数,能极大地提高D2Q9离散速度模型LBM模拟微尺度流动的精度;然而Zhang等[21]的修正函数的改进效果有限,且其模型中采用漫反射边界处理格式,计算结果含有离散数值误差. Kim等[22]和田智威等[23]分别对Zhang等[21]提出的有效黏性修正函数LBM模型中的经验常数进行了改进,然而模型中仍存在改进效果有限和边界离散数值误差等问题. Guo等[13,24]基于Stops[25]提出的有效平均分

子自由程模型推导出了指数型有效黏性系数,并采用消除离散数值误差的LBM模型对微尺度流动进行数值模拟,结果表明,采用指数型修正函数的LBM模型可以取得更好的修正效果. 然而,由于新的模型中含有需要在整个计算区域进行迭代更新的不定积分项 $E_i(x) = \int_1^\infty t^{-1} e^{-xt} dt$ (其中 x 为粒子距固体壁面的距离),每次迭代需要进行大量的计算,这些缺点使得模型难以实际应用. 另外,虽然还有多种采用不同的有效黏性系数近似表达式的LBM模型[26–30],并在一定条件下可以获得较好的结果,但这些LBM模型中将有效黏性在流场中平均化处理[26–28]或者用经验性常数进行近似处理[29,30],难以准确反映微尺度流动中一些非线性现象. 在保持LBM算法实现简单、效率高特性的前提下,采用标准D2Q9离散速度的有效黏性LBM模型仍有待改善.

基于流场壁面函数的有效黏性系数有望能够反映微尺度流动中的非线性和非平衡现象,现有的基于流场壁面函数的各种不同的有效黏性系数LBM模型均不同程度地提高了D2Q9离散速度LBM模拟微尺度流动的能力. 然而,在过渡区,随着 Kn 数的增大,Knudsen边界层的厚度急剧增加,尤其是几何形状复杂的情况下甚至有可能覆盖整个流动区域,这给构造合适的有效平均分子自由程带来很大困难. 现有的D2Q9离散速度的LBM模型甚至对简单的微尺度Couette流动中边界附近的非线性现象都不能较为准确地模拟[13,21]. 虽然在Zhang等[21]所提出的有效黏性LBM模型给出了比较接近DSMC模拟数据的结果,但其采用标准SRT-LBM模型和漫反射边界条件,正如Guo等[12,13]和Luo[31]的分析,对于D2Q9离散速度LBM模型,无论采用碰撞反弹和镜面反射相结合或者漫反射边界条件时,边界上都存在数值离散误差,必须采用一定的方式才能消除边界上的离散误差. 将有效黏性系数与微尺度MRT-LBM模型结合,无疑可以取得更加可靠的结果.

最近,Dongari等[32]采用分子动力学方法对微通道内部分子概率分布的分析,提出了一个有效平均分子自由程的幂率函数模型,并采用二阶滑移边界条件的NS方程对微尺度流动进行了模拟. 结果表明,相对于前人所提出的修正函数,幂率函数形式的有效平均分子自由程模型能有效地提高对微尺度壁面附近非线性现象的准确性. 由于Dongari等[32]所提出的有效平均分子自由程能

较好地反映高 Kn 时 Knudsen 层内部的平均分子自由程变化, 且不含计算量大的不定积分项. 本文将 Dongari 等 [32] 所提出的有效平均分子自由程引入 MRT-LBM 模型, 对微尺度滑移区的流动进行模拟, 以期提高 LBM 模拟滑移区流动非线性现象的能力.

2 基本模型

2.1 MRT-LBM

LBM 通过描述具有离散速度的流体粒子分布函数的变化来反映流体粒子的运动过程. MRT-LBM 的离散方程可描述如下:

$$f_i(x + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i(x, t) = \Omega_i(f) + \delta_t F_i, \quad (1)$$

其中, $f_i(x, t)$ 为节点 x 在 t 时刻的密度分布函数, $\mathbf{e}_i$ 为离散速度方向矢量, δ_t 为时间步长, $\Omega_i(f)$ 为碰撞算子, F_i 为外力项.

对于 D2Q9 离散速度模型, 离散速度 $\mathbf{e}_i$ 为

$$\mathbf{e}_i = \begin{cases} (0, 0), & i = 0, \\ c \left(\cos(i-1)\frac{\pi}{2}, \sin(i-1)\frac{\pi}{2} \right), & i = 1, 2, 3, 4, \\ \sqrt{2}c \left(\cos(2i-1)\frac{\pi}{2}, \sin(2i-1)\frac{\pi}{2} \right), & i = 5, 6, 7, 8. \end{cases} \quad (2)$$

碰撞算子 $\Omega_i(f)$ 定义如下:

$$\Omega_i(f) = -(\mathbf{M}^{-1} \mathbf{S} \mathbf{M})_{ij} (f_j - f_j^{\text{eq}}), \quad (3)$$

其中, $\mathbf{S} = \text{diag}(\tau_\rho, \tau_e, \tau_\varepsilon, \tau_j, \tau_q, \tau_j, \tau_q, \tau_s, \tau_s)^{-1}$ 为松弛系数矩阵; f_i^{eq} 为平衡态分布函数; $\mathbf{M}$ 为转换矩阵 [33]:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

通过转换矩阵可将粒子密度分布函数 f_i 投影到速度矩空间. 对于 D2Q9 离散速度模型, 矩空间分布

函数及其平衡态分布函数的计算如下:

$$\begin{aligned} \mathbf{m} &= \mathbf{M} \mathbf{f} = (\rho, e, \varepsilon, j_x, q_x, j_y, q_y, p_{xx}, p_{xy})^T, \\ \mathbf{m}^{\text{eq}} &= \mathbf{M} \mathbf{f}^{\text{eq}} \\ &= (\rho, e^{\text{eq}}, \varepsilon^{\text{eq}}, j_x^{\text{eq}}, q_x^{\text{eq}}, j_y^{\text{eq}}, q_y^{\text{eq}}, p_{xx}^{\text{eq}}, p_{xy}^{\text{eq}})^T \\ &= \rho(1, -2 + 3\mathbf{u}^2, \rho - 3\mathbf{u}^2, u, -v, u, \\ &\quad -v, u^2 - v^2, uv)^T, \end{aligned} \quad (5)$$

其中,

$$\mathbf{f} = (f_0, f_1, \dots, f_8)^T,$$

$$\mathbf{f}^{\text{eq}} = (f_0^{\text{eq}}, f_1^{\text{eq}}, \dots, f_8^{\text{eq}})^T,$$

ρ 为宏观密度, u 为宏观速度.

MRT-LBM 模型中分布函数的演化与 SRT-LBM 模型类似, 同样可分为碰撞和迁移两步, 其中碰撞在矩空间进行:

碰撞:

$$\tilde{\mathbf{m}} = \mathbf{m} - \mathbf{S}(\mathbf{m} - \mathbf{m}^{\text{eq}}) + \delta_t \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{S}}{2} \right) \bar{\mathbf{F}}, \quad (6)$$

迁移:

$$f_i(x + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = \tilde{f}_i(x, t), \quad (7)$$

式中, $\mathbf{I}$ 为单位矩阵; 碰撞后的分布函数 $\tilde{\mathbf{f}} = \mathbf{M}^{-1} \tilde{\mathbf{m}}$, $\tilde{\mathbf{m}}$ 表示碰撞后的矩空间分布函数; $\bar{\mathbf{F}}$ 为外力项, $\bar{F}_0 = 0$, $\bar{F}_1 = 6\mathbf{u} \cdot \mathbf{G}$, $\bar{F}_2 = -6\mathbf{u} \cdot \mathbf{G}$, $\bar{F}_3 = G_x$, $\bar{F}_4 = -G_x$, $\bar{F}_5 = G_y$, $\bar{F}_6 = -G_y$, $\bar{F}_7 = 2(uG_x - vG_y)$, $\bar{F}_8 = uG_x + vG_y$, 其中 $\mathbf{G} = (G_x, G_y)$ 为外力.

获得密度分布函数后, 宏观量密度 ρ 、速度 u 和黏性系数 μ 为

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_i f_i, \quad \rho u = \sum_i e_i f_i, \\ \mu &= \rho c_s^2 \left(\tau_s - \frac{1}{2} \right) \delta_t, \end{aligned} \quad (8)$$

其中, $c_s = \sqrt{RT} = c/\sqrt{3}$ 为格子声速, R 和 T 分别为气体常数和温度.

在微尺度 LBM 模型中松弛系数 τ_s 的计算如下:

$$\tau_s = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{6}{\pi}} L Kn_e \quad (9)$$

其中, L 为流动特征尺度, Kn_e 为有效 Knudsen 数, 体现壁面附近 Knudsen 边界层对分子自由程或者黏性的影响. 显然, 对于 MRT-LBM 模型, 当所有松弛系数都取为同一参数时, 即 $s_i = 1/\tau_s \forall i$, MRT-LBM 模型将退化为 SRT-LBM 模型.

2.2 边界格式

在微尺度LBM模型中, 应用最广泛的两种边界条件为直接反弹和镜面反射相结合的格式以及基于Maxwell漫反射假设的漫反射格式. 本文采用第一种边界处理格式, 以下边界为例, 边界上未知分布函数计算如下^[13]:

$$\begin{aligned} f_2 &= \tilde{f}_4 + 2r\rho\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{u}_w/c_s^2, \\ f_5 &= r\tilde{f}_7 + (1-r)\tilde{f}_8 + 2r\rho\mathbf{e}_5 \cdot \mathbf{u}_w/c_s^2, \\ f_6 &= r\tilde{f}_8 + (1-r)\tilde{f}_7 + 2r\rho\mathbf{e}_6 \cdot \mathbf{u}_w/c_s^2, \end{aligned} \quad (10)$$

其中, $0 \leq r \leq 1$ 为反弹比例系数, $\tilde{f}_i$ 为碰撞后的密度分布函数, $\mathbf{u}_w$ 为固体壁面运动速度. 为消除采用直接反弹和镜面反射相结合的边界条件时边界上的离散误差, 进而实现二阶滑移边界条件, 反弹系数 r 和松弛系数 τ_q 的选取如下^[13,24]:

$$r = \left(1 + A_1 \sqrt{\pi/6} + \frac{\tau'_s(0)\delta_x}{8\tilde{\tau}_s^2(0)} \right), \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \tau_q &= \frac{1}{2} + \frac{3 + 4\pi\tilde{\tau}_s^2(0)A_2}{16\tilde{\tau}_s(0)} \\ &\quad + \frac{\tau'_s(0)\delta_x(12 + 30\tilde{\tau}_s(0)\sqrt{\pi/6}A_1)}{16\tilde{\tau}_s^2(0)}, \end{aligned} \quad (12)$$

式中, $\tilde{\tau}_s = \tau_s - 0.5$; $\tau'_s = d\tau_s/dy$; A_1 和 A_2 为NS方程中二阶滑移边界条件中对应的系数,

$$A_1 = 1 - 0.1817\sigma, \quad A_2 = \frac{1}{\pi} + \frac{A_1^2}{2},$$

其中 σ 为切向动量系数, 一般取为1.

2.3 有效黏性系数

根据分子动理论, 黏性 $\mu = 0.5\rho cl$, 其中, ρ 为密度, l 为平均分子自由程, $c = \sqrt{8RT/\pi}$ 为平均速度. 在微尺度流动中, 由于分子与固体壁面的碰撞, 壁面附近的平均分子自由程较之自由空间平均分子自由程短, 需要对壁面附近的平均分子自由程进行修正, 形成考虑壁面影响因素的有效平均分子自由程 l_e , 进而可得有效Knudsen数 $Kn_e = l_e/L$, 以及有效黏性 $\mu_e = 0.5\rho cl_e$, 进一步根据松弛系数和黏性以及 Kn 数的关系确定松弛系数.

最近, Dongari等^[32]采用分子动力学方法对两平板构成的二维微通道内的分子概率分布的分析, 认为微通道内的平均分子自由程的变化更符合幂率函数而非指数函数, 并提出了一个有效平均分子自由程的幂率函数模型:

$$l_e = l \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{r^-}{a} \right)^{1-n} \right. \right. \right.$$

$$\left. \left. + \left(1 + \frac{r^+}{a} \right)^{1-n} \right] \right\}, \quad (13)$$

其中, r^- 和 r^+ 分别表示分子沿运动方向距微通道两个壁面的距离, $n = 3$, 对于等温流动, $a = l$. 进一步, Dongari等^[32]给出了采用16个积分点的Simpson数值积分方法的有效平均分子自由程幂率函数的表达式:

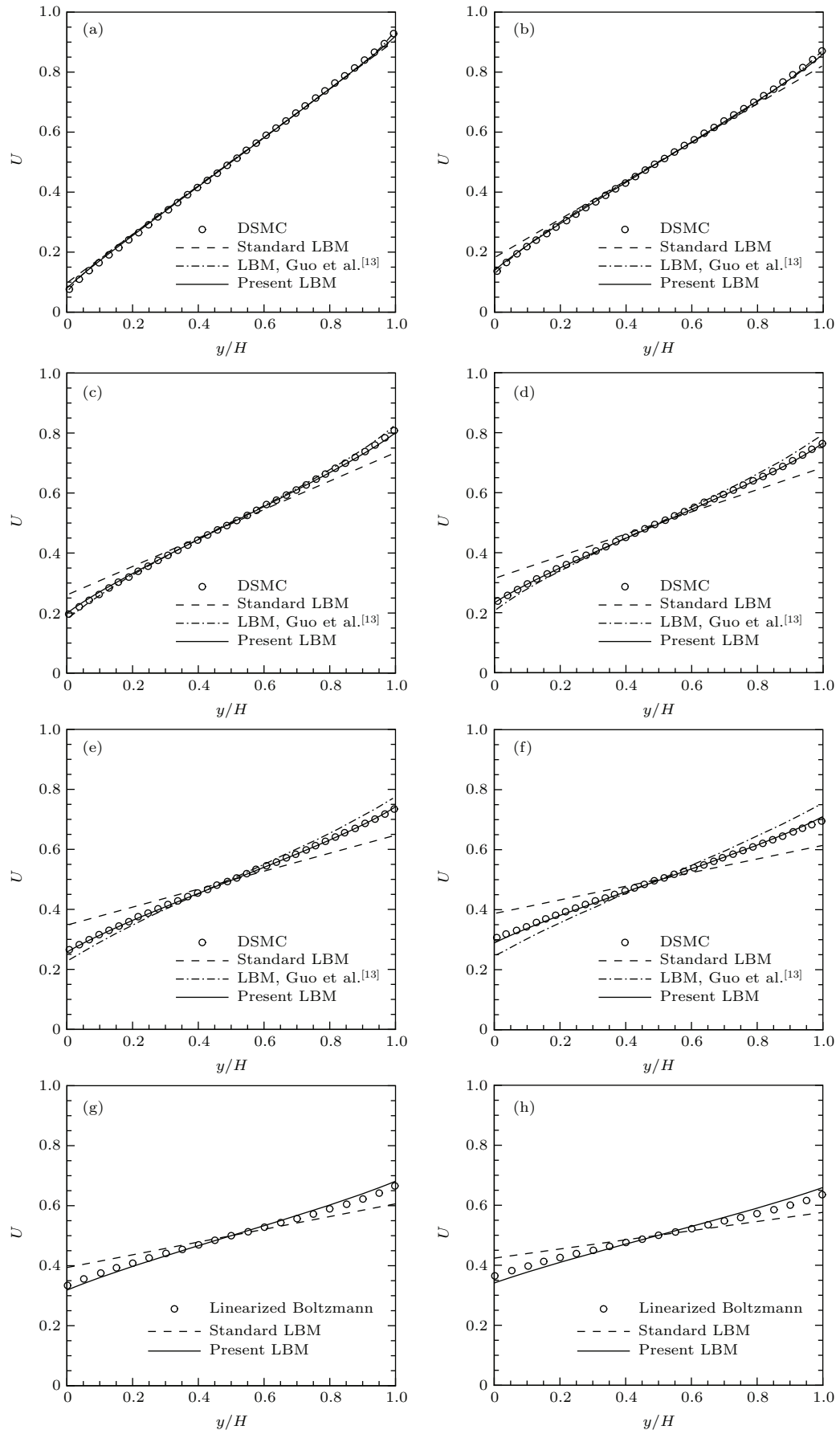
$$\begin{aligned} l_e &= l \left\{ 1 - \frac{1}{96} \left[\left(1 + \frac{y}{a} \right)^{1-n} + \left(1 + \frac{H-y}{a} \right)^{1-n} \right. \right. \\ &\quad + 4 \sum_{i=1}^8 \left(1 + \frac{y}{a \cos((2i-1)\pi/32)} \right)^{1-n} \\ &\quad + 4 \sum_{i=1}^8 \left(1 + \frac{H-y}{a \cos((2i-1)\pi/32)} \right)^{1-n} \\ &\quad + 2 \sum_{i=1}^7 \left(1 + \frac{y}{a \cos(i\pi/16)} \right)^{1-n} \\ &\quad \left. \left. + 2 \sum_{i=1}^7 \left(1 + \frac{H-y}{a \cos(i\pi/16)} \right)^{1-n} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (14)$$

其中, H 为二维微通道的宽度, y 为分子距二维微通道其中一个壁面的距离. 幂率函数形式的有效平均分子自由程不含复杂积分项, 相比于Guo等^[13]的模型更易应用. 本文采用Dongari等^[32]提出的有效平均分子自由程对LBM中的黏性和松弛系数进行修正.

3 数值模拟结果与讨论

3.1 微尺度 Couette 流动

Couette流动在MEMS中有重要应用, 然而目前采用D2Q9离散速度模型的LBM对滑移区的Couette流动模拟结果尚不尽人意^[13,21]. 本文首先采用所提出的有效黏性MRT-LBM对滑移区的气体Couette流动进行模拟. Couette流动中上平板以 U_0 的速度水平移动, 下平板保持静止不动. 上下边界采用直接反弹和镜面反射相结合的边界方法进行处理, 左右边界为周期性边界条件. 经过网格无关性验证, 计算网格取为 $N_x \times N_y = 100 \times 41$, 无量纲速度为 u/U_0 , 计算结果与没有进行有效黏性修正的标准LBM, DSMC模拟结果^[13,21]、线性Boltzmann方程数值解^[34]以及Guo等^[13]的LBM模型模拟结果进行比较.



(Continued)

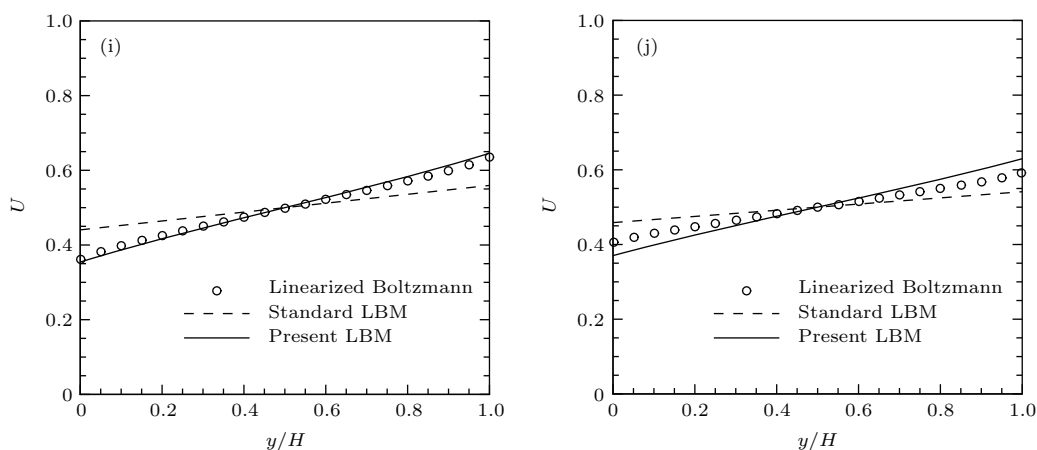


图1 微尺度 Couette 流动速度分布 (a) $Kn = 0.1$; (b) $Kn = 0.25$; (c) $Kn = 0.5$; (d) $Kn = 0.75$; (e) $Kn = 1.0$; (f) $Kn = 1.5$; (g) $Kn = 2.257$; (h) $Kn = 3.385$; (i) $Kn = 4.451$; (j) $Kn = 6.77$

Fig. 1. Velocity profiles of the micro Couette flow: (a) $Kn = 0.1$; (b) $Kn = 0.25$; (c) $Kn = 0.5$; (d) $Kn = 0.75$; (e) $Kn = 1.0$; (f) $Kn = 1.5$; (g) $Kn = 2.257$; (h) $Kn = 3.385$; (i) $Kn = 4.451$; (j) $Kn = 6.77$.

图1为 $Kn = 0.1, 0.25, 0.5, 0.75, 1.0, 1.5$ 以及 $Kn = 2.257, 3.385, 4.451, 6.77$ 时采用本文模型模拟的微尺度 Couette 流动无量纲速度分布与标准 LBM, DSMC 数据^[13,21]、线性 Boltzmann 方程数值解^[34]以及 Guo 等^[13]的 LBM 模型模拟结果的比较. 首先, 图1(a)–(f)给出了 $Kn = 0.1, 0.25, 0.5, 0.75, 1.0, 1.5$ 时本文模型与 DSMC 数据和 Guo 等^[13]的 LBM 模型模拟数据的比较结果. 可以看出, 在 Kn 较小时, 标准 LBM 与 DSMC 数据基本相符; 然而, 当 Kn 较大时, 标准 LBM 的计算结果给出的速度剖面分布是线性的, 且严重偏离了非线性的 DSMC 数据, 而进行了有效黏性修正的 LBM 预测结果要好于标准 LBM. 在 Kn 较小时, Knudsen 边界层对流动影响相对来说较小, 固体壁面附近非线性不明显, 修正作用也应该较弱, 正如图1(a)所示, $Kn = 0.1$ 通道截面中心及其附近速度分布为线性, 只在壁面附近由于 Knudsen 层的影响呈现出一定的非线性, 本文模型与 Guo 等^[13]的模型和标准 LBM 给出的结果基本重合, 只在壁面附近有较小差异. 随着 Kn 增大, 如图1(b)–(f)所示, Knudsen 层厚度变大, 对流动的影响也变大, 标准 LBM 预测结果与 DSMC 数据偏差越来越大, Guo 等^[13]的模型相对标准 LBM 有一定的改善, 然而在 $Kn > 0.5$ 时与 DSMC 数据偏差越来越大; 而本文模型在 $Kn < 1.5$ 范围内均给出了与 DSMC 数据一致的结果, 甚至在 $Kn = 1.5$ 时仍与 DSMC 数据符合得很好. 为进一步验证模型模拟高 Kn 数 Couette 流动的准确性, 图1(g)–(j)给出了 $Kn = 2.257$ – 6.77 时本文模型模拟结果与标准

LBM 以及 Sone 等^[34]的线性 Boltzmann 方程数值解的比较结果. 图1(g)–(i)所示 Kn 范围内本文模型的速度分布与线性 Boltzmann 方程数值解比较出现一定偏差, 但相对标准 LBM 改善较大, 总体仍与线性方程 Boltzmann 方程数值解比较接近. 而当 Kn 进一步增大时, 如图1(j)所示($Kn = 6.77$), 本文模型与线性 Boltzmann 方程数值解偏差变大, 与标准 LBM 相比几乎没有改善效果.

3.2 微尺度周期性 Poiseuille 流动

为进一步验证本文模型的适用性, 本文对滑移区的周期性 Poiseuille 流动进行了模拟. 周期性 Poiseuille 流动中外力通过假定压力梯度实现, 沿流动方向的压力梯度取为 $G_x = -\partial p/\partial x = 10^{-4}$. 固体边界上采用直接反弹和镜面反射相结合的边界格式, 进出口采用周期性边界条件. 经过网格无关性验证, 计算网格取为 $N_x \times N_y = 100 \times 100$. x 方向无量纲速度 $U = u/\bar{u}$, 其中 $\bar{u} = 1/H \int_0^H u dy$, 其中 H 为微通道宽度. 计算结果与 Ohwaha 等^[35]的线性 Boltzmann 方程数值解以及 Guo 等^[13]的 LBM 模型模拟结果进行了比较.

图2为 $Kn = 0.1128, 0.2257, 0.4514, 1.1284$ 和 2.2568 时微通道 Poiseuille 流动主流方向的无量纲速度剖面图. 如图2(a)–(e)所示, $Kn = 0.1128$ 时, 即滑移区起点附近, NS 方程结合二阶滑移边界条件所得结果与线性 Boltzmann 方程数值解符合较好, 但当 $Kn = 0.2257$ 时, NS 方程所预测的滑移速度与线性 Boltzmann 方程数值解相差就已经很大,

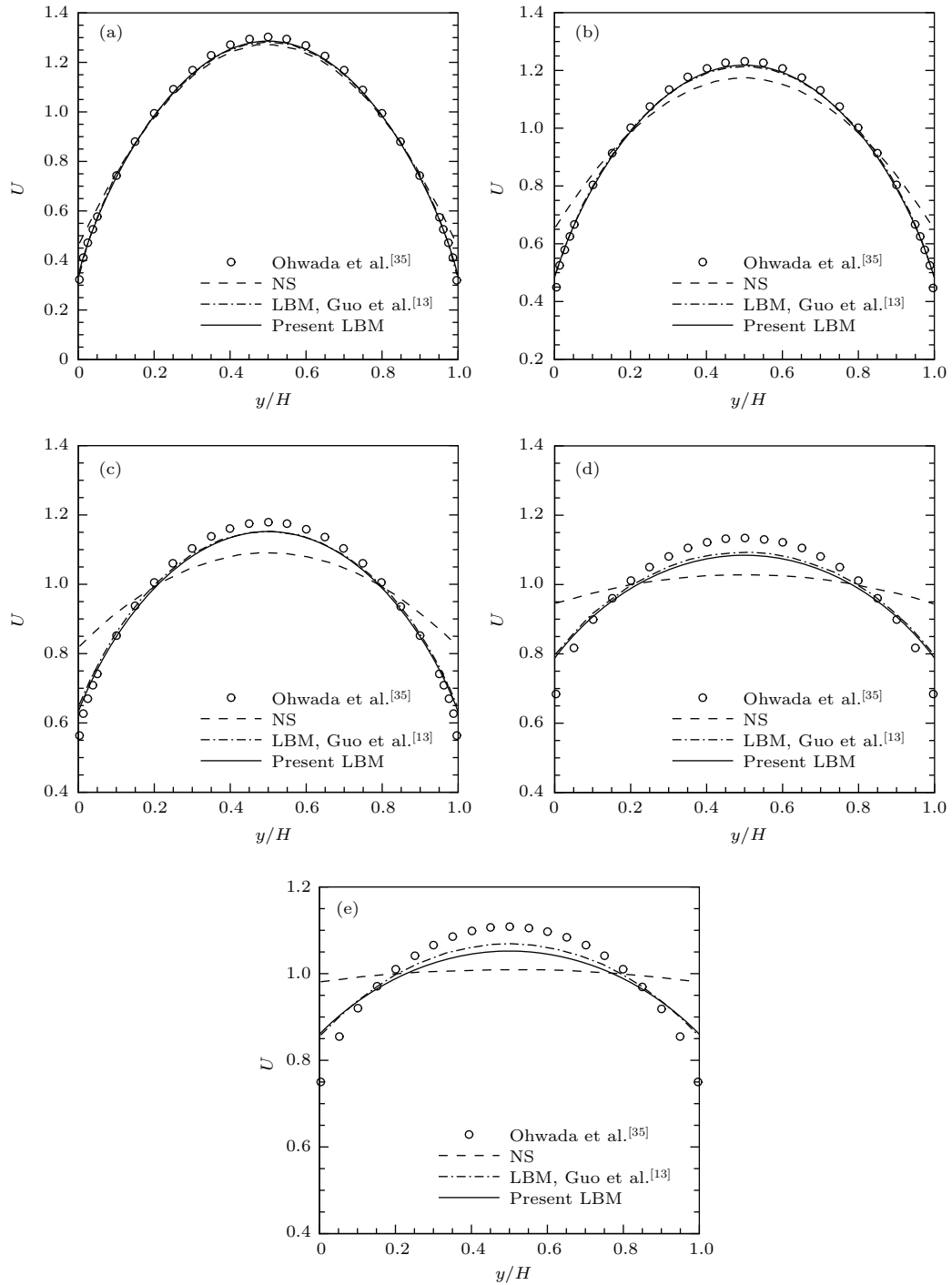


图2 周期性微通道Poiseuille流动速度分布 (a) $Kn = 0.1128$; (b) $Kn = 0.2257$; (c) $Kn = 0.4514$; (d) $Kn = 1.1284$; (e) $Kn = 2.2568$

Fig. 2. Velocity profiles of the micro periodic Poiseuille flow: (a) $Kn = 0.1128$; (b) $Kn = 0.2257$; (c) $Kn = 0.4514$; (d) $Kn = 1.1284$; (e) $Kn = 2.2568$.

随着 Kn 继续增大, NS方程给出的结果完全与线性Boltzmann方程数值解偏离. 而采用有效黏性系数的MRT-LBM模型给出了比较好的结果, 在 Kn 较小($Kn = 0.1128—0.4514$)时, 本文模型与Guo等^[13]的模型都给出了与线性Boltzmann方程数值解符合较好的结果, 而当 Kn 较大

($Kn = 1.1284—2.2568$)时, 两个修正模型的预测值与线性Boltzmann方程数值解出现较大差异, 但与NS方程的计算结果相比, 仍有很大的改善. 而且在周期性Poiseuille流动中, 本文模型和Guo等^[13]的模型给出了比较一致的结果, 只在 Kn 较大时微通道中心的速度分布略有差异. 但Guo等^[13]的模

型中包含不定积分项的运算, 计算耗费时间远大于本文模型, 尤其是对于计算网格数较多时这种缺陷更加明显.

图3进一步给出了根据本文模型计算所得的 Poiseuille 流动中无量纲质量流量随 Kn 的变化情况, 并将计算结果与 Cercignani 等^[36] 采用变分方法求解 Boltzmann 方程, Hadjiconstantinou^[37] 采用二阶滑移边界条件的 NS 方程和 Guo 等^[13] 的 LBM 模型获得的结果进行比较. 无量纲质量流量定义为

$$Q = \left(\int_0^H u dy \right) / (G_x H^2 \sqrt{RT/2/p}),$$

其中 H 为微通道宽度, p 为气体压力, R 为气体常数, T 为气体温度. 在微通道流动中一个重要的现象就是 Knudsen Minimum 现象, 即无量纲质量流量在 $Kn \approx 1$ 时达到最小, 这也是评价微尺度流动计算模型的重要标准之一. 如图3所示, 二阶滑移边界条件的 NS 方程在 $Kn > 0.3$ 后与 Cercignani 等^[36] 的解偏离. 在 $Kn < 1$ 时, 本文模型和 Guo 等^[13] 的模型给出的预测结果都与 Cercignani 等^[36] 给出的 Boltzmann 解非常接近; 而当 $Kn > 1$ 时, 本文模型略微高估了质量流量, 而 Guo 等^[13] 的模型略微低估了质量流量, 但两种模型都在 $Kn \approx 1$ 附近给出最小质量流量.

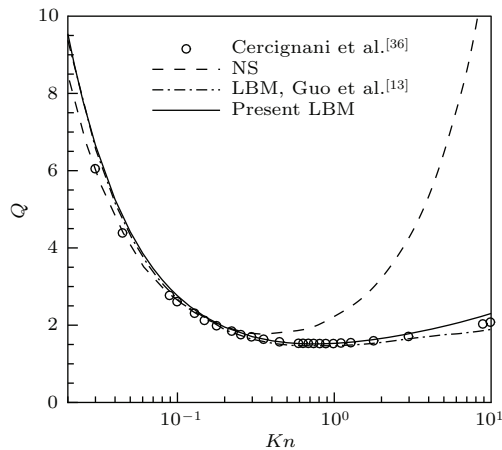


图3 周期性微尺度 Poiseuille 流动的无量纲质量流量

Fig. 3. Non-dimensional mass flow rate of gas flow in periodic Poiseuille flow.

4 结 论

针对现有 D2Q9 离散速度 LBM 模型模拟滑移区非平衡和非线性现象准确性和效率不足的问题,

本文将 Dongari 提出的有效平均分子自由程引入 MRT-LBM 模型中, 形成新的针对微尺度滑移区流动的 MRT-LBM 模型, 采用该模型对微尺度滑移区 Couette 流动和周期性 Poiseuille 流动进行了模拟, 并与现有模型进行了对比. 结果表明, 在微尺度滑移区 Couette 流动中, 本文模型预测的速度分布与现有模型相比有了很大改善, 并且与已有 DSMC 方法和线性 Boltzmann 方程数据符合得很好; 在周期性 Poiseuille 流动中, 本文模型至少给出了在准确性上与现有模型一致的结果, 且本文模型在计算效率上较前人工有了很大提高. 总之, 本文模型在计算结果准确性和效率上较现有模型都有了良好的改善, 提高了 D2Q9 离散速度 LBM 模型捕捉滑移区微尺度流动中的非线性现象的能力.

参考文献

- [1] Stone H A, Stroock A D, Ajdari A 2004 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **36** 381
- [2] Lockerby D, Reese J 2008 *J. Fluid Mech.* **604** 235
- [3] Agarwal R K, Yun K Y, Balakrishnan R 2001 *Phys. Fluids* **13** 3061
- [4] Aidun C K, Clausen J R 2010 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **42** 439
- [5] Xie H Q, Zeng Z, Zhang L Q, Liang G Y, Hiroshi M, Yoshiyuki K 2012 *Chin. Phys. B* **21** 124703
- [6] He Y B, Lin X Y, Dong X L 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 194701 (in Chinese) [何郁波, 林晓艳, 董晓亮 2013 物理学报 **62** 194701]
- [7] Ren S, Zhang J Z, Zhang Y M, Wei D 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 024702 (in Chinese) [任晟, 张家忠, 张亚苗, 卫丁 2014 物理学报 **63** 024702]
- [8] Li K, Zhong C W 2015 *Chin. Phys. B* **24** 050501
- [9] Succi S 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 064502
- [10] Ansumali S, Iliya V K 2002 *Phys. Rev. E* **66** 026311
- [11] Tang G H, Tao W Q, He Y L 2005 *Phys. Fluids* **17** 058101
- [12] Guo Z L, Shi B C, Zhao T S, Zheng C G 2007 *Phys. Rev. E* **76** 056704
- [13] Guo Z L, Zheng C G, Shi B C 2008 *Phys. Rev. E* **77** 036707
- [14] Guo Z L, Zheng C G 2008 *Int. J. Comput. Fluid Dyn.* **22** 465
- [15] Shan X, Yuan X F, Chen H 2006 *J. Fluid Mech.* **550** 413
- [16] Niu X D, Hyodo S A, Munekata T, Suga K 2007 *Phys. Rev. E* **76** 036711
- [17] Ansumali S, Karlin I V, Arcidiacono S, Abbas A, Prasianakis N I 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 124502
- [18] Meng J P, Zhang Y H, Hadjiconstantinou N G, Radtke G A, Shan X 2013 *J. Fluid Mech.* **718** 347
- [19] Meng J P, Zhang Y H 2011 *J. Comput. Phys.* **230** 835
- [20] Kim S H, Pitsch H, Boyd I D 2008 *J. Comput. Phys.* **227** 8655

- [21] Zhang Y H, Gu X J, Barber R W, Emerson D R 2006 *Phys. Rev. E* **74** 046704
- [22] Kim S H, Pitsch H, Boyd I D 2008 *Phys. Rev. E* **77** 026704
- [23] Tian Z W, Zheng C G, Wang X M 2009 *Acta Mech. Sin.* **41** 828 (in Chinese) [田智威, 郑楚光, 王小明 2009 力学学报 **41** 828]
- [24] Tao S, Wang L, Guo Z L 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 214703 (in Chinese) [陶实, 王亮, 郭照立 2014 物理学报 **63** 214703]
- [25] Stops D W 1970 *J. Phys. D* **3** 685
- [26] Li Q, He Y L, Tang G H, Tao W Q 2011 *Microfluid. Nanofluid.* **10** 607
- [27] Homayoon A, Meghdadi Isfahani A H, Shirani E, Ashrafizadeha M 2011 *Int. Commun. Heat Mass Transfer* **38** 827
- [28] Liou T M, Lin C T 2014 *Microfluid. Nanofluid.* **16** 315
- [29] Guo Z L, Zhao T S, Shi Y 2006 *J. Appl. Phys.* **99** 074903
- [30] Xu Z M, Guo Z L 2013 *Int. Commun. Heat Mass Transfer* **14** 1058
- [31] Luo L S 2011 *Phys. Rev. E* **84** 048301
- [32] Dongari N, Zhang Y H, Reese J M 2011 *J. Fluids Eng.* **133** 071101
- [33] Lallemant P, Luo L S 2000 *Phys. Rev. E* **61** 6546
- [34] Sone Y, Takata S, Ohwada T 1990 *Eur. J. Mech. B: Fluids* **9** 273
- [35] Ohwada T, Sone Y, Aoki K 1989 *Phys. Fluids* **1** 1588
- [36] Cercignani C, Lampis M, Lorenzani S 2004 *Phys. Fluids* **16** 3426
- [37] Hadjiconstantinou N G 2003 *Phys. Fluids* **15** 2352

Simulation of micro flow in the transition regime using effective-viscosity-based multi-relaxation-time lattice Boltzmann model*

Wang Zuo¹⁾ Liu Yan²⁾ Zhang Jia-Zhong^{1)†}

1) (School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

2) (School of Mechanical Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

(Received 26 May 2015; revised manuscript received 2 September 2015)

Abstract

With the rapid development of micro-electro-mechanical systems (MEMS), microscale rarefied gas flows have received considerable attention in the past decades. Recently, the lattice Boltzmann method (LBM) emerges as a promising way to study the flow in MEMS for its kinetic nature and distinctive computational features. Various LBM models have been used to simulate the microscale and nanoscale flow, among which the two-dimensional and nine-velocities (D2Q9)-based LBM is most widely accepted due to its extremely simplicity and high efficiency. However, the D2Q9-based LBM encounters great difficulties in the transition regime due to the rarefaction effects on mean free path and gas viscosity. An effective way to improve the capability of the existing LBM model is to incorporate an effective viscosity into the relaxation time, which can improve the accuracy of LBM model while keeping the simplicity and efficiency of LBM. However, the existing D2Q9-based LBM models with effective viscosity cannot give satisfactory predictions of the none-equilibrium phenomenon at moderate or high Knudsen (Kn) number both in accuracy and efficiency. To solve the above problem, in this study, an effective mean free path function proposed by Dongari et al. (Dongari N, Zhang Y H, Reese J M 2011 *J. Fluids Eng.* **133** 071101) via modular dynamics mean is introduced into the D2Q9 multi-relaxation-time lattice Boltzmann model (MRT-LBM) to account for the effect of Knudsen layer in transition flow regime, and the viscosity in the MRT-LBM model is modified correspondingly. The combination of the bounce-back and specular reflection boundary condition is used to deal with the velocity slip, and the relaxation time and the reflection coefficient are properly set to eliminate the numerical artifact on the boundaries as the kinetic boundary condition is used. Micro Couette flow at $Kn = 0.1$ – 6.77 , and periodic Poiseuille flow at $Kn = 0.1128$ – 2.2568 , respectively, are numerically investigated by using the proposed MRT-LBM model, and the numerical results, including the non-dimensional velocity profile and the mass flow rate, are verified by the direct simulation Monte Carlo (DSMC) data, the linearized Boltzmann solutions and the existing LBM model. The calculation results demonstrate that in transition regime, with the increase of Knudsen number, the dimensionless slip velocity at the wall significantly increases. It is shown that the velocity profiles predicted by the present MRT-LBM model agree well with the DSMC data and linearized Boltzmann solutions up to $Kn = 4.5$ in Couette flow, which is much more accurate than that obtained from the existing LBM model. And the present LBM model gives at least the same order of accuracy in the prediction of velocity profile and mass flow rate as the existing LBM model in periodic Poiseuille flow. What is more, the Knudsen minimum phenomenon of flow in the microchannel is successfully captured at around $Kn = 1$. The results demonstrate that the proposed model can enhance the ability of LBM in capturing the non-equilibrium phenomenon in micro flow in the transition regime both in accuracy and efficiency.

Keywords: micro-scale flow, transition regime, multi-relaxation-time lattice Boltzmann model, effective viscosity

PACS: 47.11.Qr, 02.60.Cb, 47.45.-n

DOI: 10.7498/aps.65.014703

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51305355), the National Basic Research Program of China (Grant No. 2012CB026002), and the National Key Technology Research and Development Program of the Ministry of Science and Technology of China (Grant No. 2013BAF01B02).

† Corresponding author. E-mail: jzzhang@mail.xjtu.edu.cn