

一种滑移区气体流动的格子 Boltzmann 曲边界处理新格式

顾娟 黄荣宗 刘振宇 吴慧英

A new curved boundary treatment in lattice Boltzmann method for micro gas flow in the slip regime

Gu Juan Huang Rong-Zong Liu Zhen-Yu Wu Hui-Ying

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 66, 114701 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.114701

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.114701>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I11>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

分叉微通道内液滴动力学行为的格子 Boltzmann 方法模拟

Lattice Boltzmann simulation of droplet dynamics in a bifurcating micro-channel

物理学报.2016, 65(20): 204701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.204701>

液滴撞击液膜过程的格子 Boltzmann 方法模拟

Lattice Boltzmann simulation of the droplet impact onto liquid film

物理学报.2016, 65(8): 084702 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.084702>

过渡区微尺度流动的有效黏性多松弛系数格子 Boltzmann 模拟

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

物理学报.2016, 65(1): 014703 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.014703>

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>

一种滑移区气体流动的格子 Boltzmann 曲边界处理新格式*

顾娟 黄荣宗 刘振宇 吴慧英†

(上海交通大学机械与动力工程学院, 上海 200240)

(2016年12月18日收到; 2017年4月5日收到修改稿)

针对滑移区复杂气-固边界存在速度滑移现象, 提出了一种基于格子 Boltzmann 方法的非平衡态外推与有限差分相结合的曲边界处理新格式. 该格式具有可考虑实际物理边界与网格线偏移量的优势, 较传统 half-way DBB (diffusive bounce-back) 格式更能准确反映实际边界情况, 同时还可获取壁面处气体宏观量及其法向梯度等信息. 采用本文所提曲边界处理格式模拟分析了滑移区气体平直/倾斜微通道 Poiseuille 流、微圆柱绕流和同心微圆柱面旋转 Couette 流问题. 研究表明, 采用曲边界处理新格式所得结果与理论值以及文献结果符合良好, 适用于滑移区气体流动的复杂边界处理, 且比 half-way DBB 格式具有更高的精度, 较修正 DBB 格式具有更好的适应性.

关键词: 曲边界, 格子 Boltzmann 方法, 滑移区, 微气体流动

PACS: 47.11.Qr, 47.15.Rq, 02.60.Cb

DOI: 10.7498/aps.66.114701

1 引言

随着微机电系统 (micro-electro-mechanical system, MEMS) 技术在生物医疗、信息通讯及国防军工等诸多领域的逐步应用, 微尺度条件下新的物理现象引起了越来越多学者的重视^[1,2]. 其中对于微尺度气体流动^[3,4]问题, 因气体分子平均自由程 λ 与特征尺寸 H 两者数量级相当, 气体稀薄效应已不可忽略. 气体稀薄程度可用 Knudsen 数表示, Knudsen 数 (Kn) 的定义为 $Kn = \lambda/H$. 滑移区 ($0.001 \leq Kn \leq 0.1$) 气体在气-固边界处将出现明显的速度滑移现象, 基于连续介质假定的 Navier-Stokes 方程需结合滑移边界条件方可描述该问题. 有别于传统计算流体动力学方法, 格子 Boltzmann (LB) 方法不受连续介质假定限制, 具有微观粒子特性和介观物理背景, 成为研究微尺度气体流动问题的理想数值方法^[5-7].

目前, 针对常规尺度曲边界处理的研究已有较多文献报道^[8-22], 其中非平衡外推格式^[8]已被证明可有效处理复杂曲边界问题^[13,20], 前人也对 Ladd^[10]提出的考虑边界速度的 half-way 反弹格式进行了修正以推广到曲面边界条件. Yin 和 Zhang^[15]基于 Ladd^[10]的 half-way 反弹格式将虚拟节点 (实际物理边界附近流体格点与固体格点连线的中点) 处速度取代原格式中的壁面速度, 提高了模拟复杂边界问题的精度. 在此基础上, 史冬岩等^[16]对离流体格点较近的虚拟节点速度进行修正, 进一步提高了计算精度. 尽管以上方法在常规尺度曲边界处理中表现出较好的优越性, 但由于其不能反映因微尺度气体-壁面相互作用引起的边界速度滑移, 无法适用于微尺度滑移区流动问题中复杂曲边界的处理. Szalmas^[23]采用贴体曲坐标下 SRB (specular-reflection-bounceback) 格式有效地模拟了微尺度复杂气-固边界速度滑移问题, 但贴体网格需要求解 Jacobi 变换矩阵, 增加了编程

* 国家自然科学基金 (批准号: 51536005, 51521004) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: whysrj@sjtu.edu.cn

复杂度. 另一类处理曲边界的方法是采用笛卡尔网格系统, 不需要进行网格变换, 方便处理各种复杂物理边界, 但问题在于网格边界与物理边界不重合, 因此边界条件的处理尤为重要^[24]. 针对这个问题, Guo等^[25]采用 half-way DBB 格式处理同心微圆柱面旋转 Couette 流, 但该方法仅当虚拟节点与固体壁面重合时, 才能体现其计算精度优势. Suga^[26]将插值格式分别引入到 BB (bounce-back) 格式和 DS (diffusescattering) 格式中组合为 IDBB (interpolation diffusive bounce-back) 格式以处理微尺度流动问题, 但其组合系数的选取仍参考传统 half-way DBB 格式. Tao 和 Guo^[24]在 DBB 格式中引入实际物理边界与网格线偏移量这一参数, 并应用其对模型松弛时间 τ_q 和参数 r 进行修正, 将适用于平直边界的 DBB 格式推广至滑移曲边界情况. 当偏移量为半个格子时, 该格式则还原为 half-way DBB 格式, 但为保证参数 τ_q 和 r 取值的合理性, 增加了滑移边界条件中气体-壁面相互作用参数取值的难度. Yang 等^[27]提出一种考虑速度滑移的浸入边界格子 Boltzmann 方法, 并用其模拟微气体挤压膜阻尼效应引起的空腔内刚性物体振动, 但仅验证了该方法在不考虑稀薄效应情况下的准确度. 目前针对滑移区曲边界的速度滑移问题, 精度高、适用性广的方法鲜有研究报道.

本文提出了一种综合 Guo 等^[8]非平衡态外推及 Le 等^[17]有限差分格式的曲边界处理格式, 该格式考虑了实际物理边界与网格线的偏移量, 较 half-way DBB 格式更能准确地描述实际物理边界的情况. 由于不涉及参数取值合理性问题, 本文所提格式较修正 DBB 格式更能适应气体-壁面相互作用参数的选取, 同时还可获得壁面处气体宏观量及其法向梯度等信息. 基于本文所提格式对滑移区气体平直/倾斜微通道 Poiseuille 流、微圆柱绕流和同心微圆柱面旋转 Couette 流问题进行 LB 数值模拟研究, 将模拟结果与解析解及已有文献结果进行对比讨论, 以分析本文所提格式的准确度与适用性.

2 LB 模型与曲边界格式

2.1 微流动的 LB 基本模型

LB 模型通过格点上微观粒子分布函数的演化过程来描述流体的流动. 本文采用单松弛 (LBGK) 模型^[28], 其演化方程为

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)] + \delta_t F_i(\mathbf{x}, t), \quad (1)$$

其中, \mathbf{c}_i 为粒子在 i 方向的速度, δ_t 为时间步长, $f_i(\mathbf{x}, t)$ 为 t 时刻 \mathbf{x} 位置处以速度 \mathbf{c}_i 运动的粒子的分布函数, τ 为无量纲松弛时间. $f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)$ 为 i 方向粒子的平衡态分布函数,

$$f_i^{\text{eq}} = \omega_i \rho \left[1 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right]; \quad (2)$$

$F_i(\mathbf{x}, t)$ 为离散外力项^[29]

$$F_i = \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \times \omega_i \left[\frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{G}}{c_s^2} + \frac{\mathbf{u} \mathbf{G} : (\mathbf{c}_i \mathbf{c}_i - c_s^2 \mathbf{I})}{c_s^4} \right]; \quad (3)$$

式中, ω_i 为权系数, c_s 为格子声速, \mathbf{G} 为外力. 宏观物理量密度 ρ 和速度 \mathbf{u} 的计算式为

$$\rho = \sum_i f_i, \quad \rho \mathbf{u} = \sum_i \mathbf{c}_i f_i + \frac{\delta_t}{2} \mathbf{G}. \quad (4)$$

对于二维问题, 本文选用二维九速 (D2Q9) 模型, 相应的离散速度为

$$\mathbf{c}_i = \begin{cases} c(0, 0)^T, & i = 0, \\ c(\cos[(i-1)\pi/2], \sin[(i-1)\pi/2])^T, & i = 1, 2, 3, 4, \\ \sqrt{2}c(\cos[(2i-1)\pi/4], \sin[(2i-1)\pi/4])^T, & i = 5, 6, 7, 8, \end{cases} \quad (5)$$

其中, 粒子迁移速率 $c = \delta_x / \delta_t$ (δ_x 为格子步长), 格子声速 $c_s = c / \sqrt{3}$. 权系数 $\omega_0 = 4/9$, $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega_4 = 1/9$, $\omega_5 = \omega_6 = \omega_7 = \omega_8 = 1/36$. 通过 Chapman-Enskog 分析可知, 模型对应的流体压力 $P = \rho c_s^2$, 流体的运动黏度 $\nu = c_s^2(\tau - 0.5)\delta_t$.

对于微尺度气体流动问题, 需在模型中引入 Knudsen 数的影响. 由动理学理论可知, 气体分子平均自由程 λ 与动力黏度 μ 、压力 P 、温度 T 的关系式为 $\lambda = \mu / P \sqrt{\pi RT / 2}$ ^[3-7, 23-27], 结合 Knudsen 数的定义式 $Kn = \lambda / H$ 及 LB 模型中运动黏度 ν 与无量纲松弛时间 τ 的关系式 $\nu = c_s^2(\tau - 0.5)\delta_t$, 可得模型中无量纲松弛时间与 Knudsen 数的关系式为

$$\tau = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{6}{\pi} \frac{KnH}{\delta_x}}. \quad (6)$$

2.2 微尺度流动的曲边界处理

对于微尺度气体流动问题, 壁面处滑移边界条件的处理至关重要. 本文在Guo等[8]的非平衡态外推格式的基础上, 提出了一种复杂曲边界上壁面滑移速度的边界处理格式. 如图1所示的曲边界, \mathbf{x}_f 为流体格点, \mathbf{x}_s 为固体内部格点, \mathbf{x}_{int} 为固体边界格点. 流体格点 \mathbf{x}_f 处*i*方向的未知分布函数 $f_i(\mathbf{x}_f, t + \delta_t)$ 由固体格点 \mathbf{x}_s 处的分布函数 $f_i(\mathbf{x}_s, t)$ 演化得到, 而 $f_i(\mathbf{x}_s, t)$ 采用Guo等[8]的非平衡态外推格式重构得到. 为此, 首先将固体格点处的分布函数分解为平衡态和非平衡态两部分, 即

$$f_i(\mathbf{x}_s, t) = f_i^{eq}(\mathbf{x}_s, t) + f_i^{neq}(\mathbf{x}_s, t). \quad (7)$$

方程(7)的平衡态部分 $f_i^{eq}(\mathbf{x}_s, t)$ 可近似为

$$f_i^{eq}(\mathbf{x}_s, t) \approx \omega_i \rho(\mathbf{x}_f, t) \left[1 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}_s}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}_s)^2}{2c_s^4} - \frac{u_s^2}{2c_s^2} \right], \quad (8)$$

式中 \mathbf{u}_s 可由 $\mathbf{u}(\mathbf{x}_{int})$, $\mathbf{u}(\mathbf{x}_f)$ 及 $\mathbf{u}(\mathbf{x}_{ff})$ 外推确定

$$\mathbf{u}_s = \begin{cases} \mathbf{u}_{s1}, & q \geq 0.75, \\ q\mathbf{u}_{s1} + (1-q)\mathbf{u}_{s2}, & q < 0.75, \end{cases} \quad (9)$$

其中, $\mathbf{u}_{s1} = [\mathbf{u}(\mathbf{x}_{int}) + (q-1)\mathbf{u}(\mathbf{x}_f)]/q$, $\mathbf{u}_{s2} = [2\mathbf{u}(\mathbf{x}_{int}) + (q-1)\mathbf{u}(\mathbf{x}_{ff})]/(1+q)$, $q = |\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_{int}|/|\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_s|$. 方程(7)中的非平衡态部分 $f_i^{neq}(\mathbf{x}_s, t)$ 亦由外推方式确定,

$$f_i^{neq}(\mathbf{x}_s, t) = \begin{cases} f_i^{neq}(\mathbf{x}_f, t), & q \geq 0.75, \\ qf_i^{neq}(\mathbf{x}_f, t) + (1-q)f_i^{neq}(\mathbf{x}_{ff}, t), & q < 0.75. \end{cases} \quad (10)$$

需要指出的是, 对于微尺度气体流动问题, 壁面处气体速度 \mathbf{u}_g (即 $\mathbf{u}(\mathbf{x}_{int})$)不等于固体壁面速度 \mathbf{u}_w , 需进一步考虑滑移速度 \mathbf{u}_{slip} 的影响. 本文采用微尺度一阶滑移曲边界条件[30],

$$\mathbf{u}_{slip} = \mathbf{u}_g - \mathbf{u}_w = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \lambda \left(\frac{\partial(\mathbf{u}_\tau)}{\partial n} - \frac{\mathbf{u}_\tau}{r} \right) \Big|_w, \quad (11)$$

其中, \mathbf{u}_τ 为气体在壁面处的切向速度矢量, r 为半径, σ_v 为动量协调系数. 对于平直边界($r \rightarrow \infty$)也适用, 此时(11)式括号内第二项为0, 与微尺度经典的Maxwell-Smoluchowski一阶滑移直边界条

件[1]表达式一致. 对于完全漫反射固体壁面, 有 $\sigma_v = 1$ [3-7,23-27]. 针对复杂曲边界, 本文采用Le等[17]提出求解壁面法向温度梯度的有限差分格式求解壁面处流体速度的法向梯度. 如图1所示, 沿壁面法向 \mathbf{n} 在流体内部选取两个虚拟点 \mathbf{x}' 和 \mathbf{x}'' , 满足 $|\mathbf{x}'' - \mathbf{x}'| = |\mathbf{x}' - \mathbf{x}_{int}| = \delta$. 为保证紧邻 \mathbf{x}' (\mathbf{x}'')的四个网格点 $\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \mathbf{x}'_3$ 和 \mathbf{x}'_4 ($\mathbf{x}''_1, \mathbf{x}''_2, \mathbf{x}''_3$ 和 \mathbf{x}''_4)均为流体格点, 本文取 $\delta = 1.5\delta_x$. 对于虚拟点 \mathbf{x}' 处的流体宏观速度, 通过其紧邻的流体网格点采用双线性插值法确定, 即有

$$\mathbf{u}' \approx [A_1\mathbf{u}(\mathbf{x}'_3) + A_2\mathbf{u}(\mathbf{x}'_4) + A_3\mathbf{u}(\mathbf{x}'_1) + A_4\mathbf{u}(\mathbf{x}'_2)]/\delta_x^2, \quad (12)$$

其中 A_1, A_2, A_3 和 A_4 分别为 \mathbf{x}' 所在网格内四块子区域的面积(如图1所示). 采用相同方法可求得虚拟点 \mathbf{x}'' 处的流体宏观速度 \mathbf{u}'' . 由虚拟点 \mathbf{x}' 和 \mathbf{x}'' 处的流体宏观速度, 结合(11)式, 可求得壁面处气体速度为

$$\mathbf{u}_g = \mathbf{u}_w + \left(\frac{\lambda(2 - \sigma_v)}{\sigma_v + \lambda(2 - \sigma_v)(1.5/\delta - 1/R)} \times \left(\frac{(4\mathbf{u}' - \mathbf{u}'' - 3\mathbf{u}_w)}{2\delta} - \frac{\mathbf{u}_w}{R} \right) \cdot \boldsymbol{\tau} \right) \boldsymbol{\tau}, \quad (13)$$

其中第二项即为微尺度壁面处气体滑移速度, R 为固壁的曲率半径.

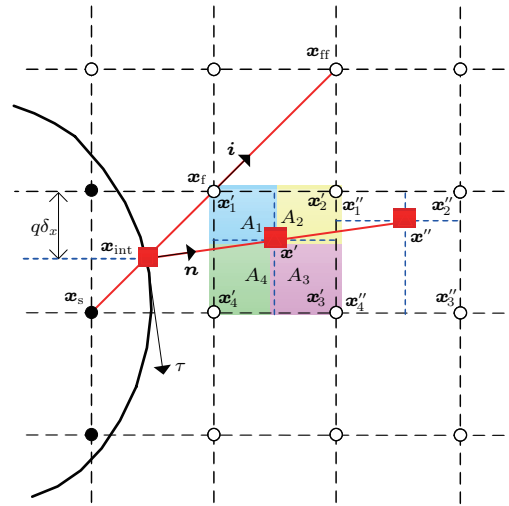


图1 曲边界示意图

Fig. 1. Schematic illustration of the curved boundary.

3 结果与讨论

为验证本文提出的滑移区曲边界滑移速度边界处理格式的适用性, 本节依次模拟研究平直/倾

斜微通道 Poiseuille 流、微圆柱绕流和同心微圆柱面旋转 Couette 流问题.

3.1 平直微通道 Poiseuille 流

微尺度 Poiseuille 流在 MEMS 中广泛存在且有解析解, 可用于验证滑移边界处理方法的准确度. 本文模拟了网格线与平直微通道壁面偏移量 $q\delta_x$ ($q = 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$) 不同情况下的滑移区外力驱动 Poiseuille 流. 微通道内气体受到沿流动方向恒定外力 $G_x = 10^{-4}$ 的驱动, 进出口采用周期性边界条件, 固体边界上的滑移速度边界条件 ((11) 式) 采用本文提出的边界处理格式处理. 计算过程中, 计算网格取为 $N_x \times N_y = 4 \times 32$. 对于该微尺度 Poiseuille 流, 沿截面方向速度分布的解析解为

$$u(y) = \frac{G_x H^2}{2\mu} \left[\frac{y}{H} - \left(\frac{y}{H} \right)^2 + \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} Kn \right], \quad (14)$$

其中 H 为微通道的宽度.

图 2 (a) 和图 2 (b) 分别给出了当 $Kn = 0.0194$ 时, 采用本文格式和 half-way DBB 格式计算得到的截面无量纲速度分布与解析解的对比情况. 由图 2 可知, 本文格式得到的截面无量纲速度分布和解析解在不同 q 情况下均符合良好; 而 half-way DBB 格式得到的结果仅在 $q = 0.5$ 时才与解析解一致, 这是因为 half-way DBB 格式基于 half-way 反弹格式, 当偏移量为 $0.5\delta_x$ 时, half-way DBB 格式中的虚拟边界与实际物理边界重合, 固体边界可由虚拟边界准确刻画, 故此时计算精度最高. 但当偏移量发生改变时, half-way DBB 格式因默认偏移量为 $0.5\delta_x$, 故其模拟结果并未有相应改变, 仍对应 $q = 0.5$ 条件下的计算结果. 故对于偏移量不为 $0.5\delta_x$, half-way DBB 格式已不能再准确描述固体边界的实际情况.

为定量比较本文格式与 half-way DBB 格式的计算优势, 定义了如下误差量: 1) 最大相对误差,

$$R_{\max} = \max \left\{ \left| \frac{u(i, j) - u_{\text{exact}}(i, j)}{u_{\text{exact}}(i, j)} \right| \right\};$$

2) 相对误差,

$$E_2 = \sqrt{\frac{\sum_{ij} [u(i, j) - u_{\text{exact}}(i, j)]^2}{\sum_{ij} u_{\text{exact}}^2(i, j)}},$$

其中, (i, j) 为计算域上的网格点, $u(i, j)$ 为流体格点上的速度值, $u_{\text{exact}}(i, j)$ 为流体格点上的速度的

解析值. 表 1 给出了不同 q 条件下 ($Kn = 0.0194$), 本文格式与 half-way DBB 格式计算结果误差对比情况. 从表中可知, 如前所述 half-way DBB 格式仅在 $q = 0.5$ 时误差才达最小值, 本文格式在其余不同偏移量条件下较 half-way DBB 格式计算精度都有明显提高.

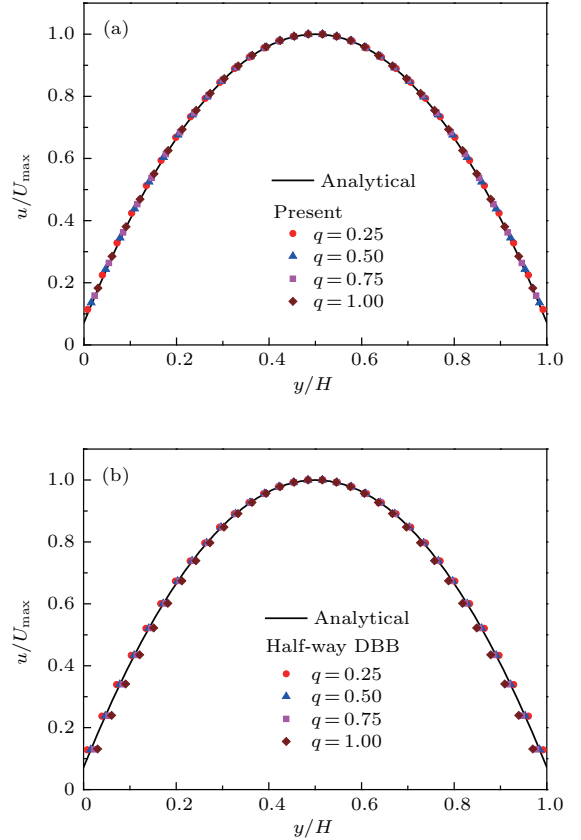


图 2 (网刊彩色) 不同 q 时平直微通道截面无量纲速度分布 ($Kn = 0.0194$) (a) 本文格式模拟结果; (b) half-way DBB 格式模拟结果

Fig. 2. (color online) Normalized velocity profiles of the aligned microchannel flow with different values of q ($Kn = 0.0194$): (a) The present scheme; (b) the half-way DBB scheme.

3.2 倾斜微通道 Poiseuille 流

为进一步验证本文提出的格式能有效处理滑移区复杂的几何边界, 对图 3 所示的倾斜微通道内外力驱动 Poiseuille 流进行了模拟. 微通道倾斜角度 θ 依次取为 $\arctan(0.46)$, $\arctan(1.20)$ 和 $\arctan(3.72)$, 计算网格取为 $N_x \times N_{AB} = 100 \times 100$, 对应的 y 方向格点数为 $N_y = N_{AB} + N_x \tan \theta$. 对于该倾斜微通道 Poiseuille 流, 截面速度分布解析解仍如 (14) 式所示, 其中 y 代表到微通道下壁面的垂直距离, H 为微通道的宽度.

表1 不同 q 条件下本文格式与 half-way DBB 格式计算误差对比 ($Kn = 0.0194$)

Table 1. Computational errors of the present scheme and the half-way DBB scheme with different values of q ($Kn = 0.0194$).

q	最大相对误差 R_{\max}		相对误差 E_2	
	本文格式	Half-way DBB 格式	本文格式	Half-way DBB 格式
0.25	0.1250	0.267	0.01920	0.0418
0.50	0.0529	0.000907	0.01040	2.02×10^{-7}
0.75	0.0179	0.164	0.00420	0.0393
1.00	0.0104	0.276	0.00280	0.0762

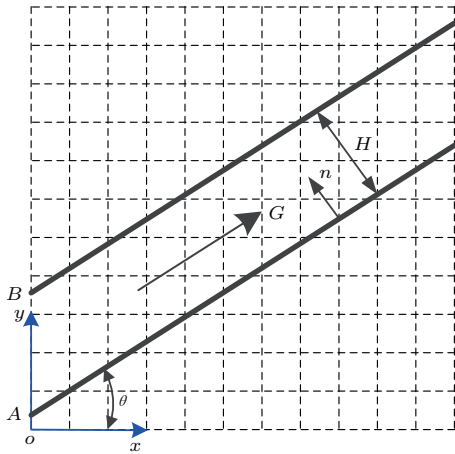


图3 倾斜微通道示意图

Fig. 3. Schematic illustration of the inclined microchannel.

图4(a)和图4(b)分别给出了当 $Kn = 0.0194$ 时,采用本文格式和 half-way DBB 格式计算得到的截面无量纲速度分布与解析解对比情况.由图4可知,在不同倾斜角度情况下,本文格式的模拟结果和解析解始终符合良好,而 half-way DBB 格式的模拟结果在微通道壁面处将显著偏离理论值.这是因为 half-way DBB 格式实际物理边界与网格线偏移量恒为 $0.5\delta_x$,使得倾斜的微通道壁面成为阶梯状.

表2给出了不同倾斜角条件下 ($Kn = 0.0194$),本文格式与 half-way DBB 格式计算结果误差对比情况.从表2可知,本文格式较 half-way DBB 格式

表2 不同倾斜角条件下本文格式与 half-way DBB 格式计算误差对比 ($Kn = 0.0194$)

Table 2. Computational errors of the present scheme and the half-way DBB scheme with different inclined angles θ ($Kn = 0.0194$).

$\tan\theta$	最大相对误差 R_{\max}		相对误差 E_2	
	本文格式	Half-way DBB 格式	本文格式	Half-way DBB 格式
0.46	0.00804	0.364	0.002100	0.0354
1.20	0.00279	0.333	0.000514	0.0357
3.72	0.02650	0.345	0.000531	0.0401

在模拟不同倾斜角时最大相对误差及相对误差均明显降低.

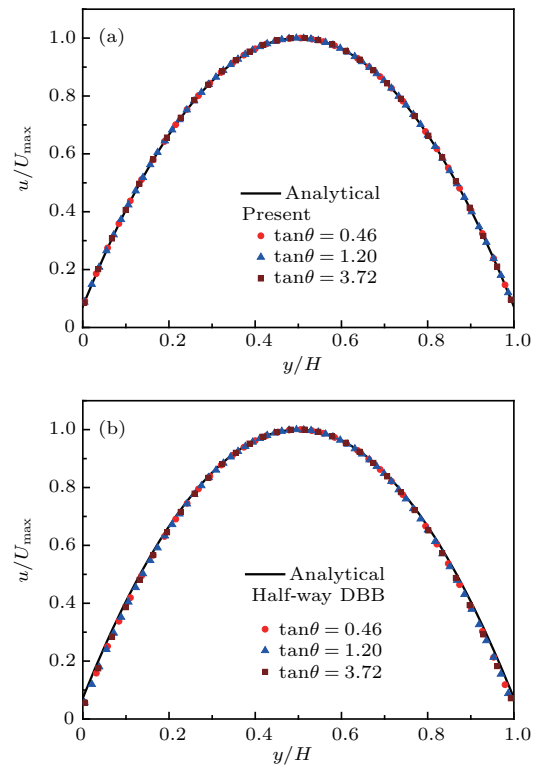


图4 (网刊彩色) 不同倾斜角 θ 时,倾斜微通道截面无量纲速度分布 ($Kn = 0.0194$) (a) 本文格式模拟结果; (b) half-way DBB 格式模拟结果

Fig. 4. (color online) Normalized velocity profiles of the inclined microchannel flow with different inclined angles θ ($Kn = 0.0194$): (a) The present scheme; (b) the half-way DBB scheme.

3.3 微圆柱气体绕流

圆柱绕流是流体力学中经典的复杂外流问题,常被用于检测曲边界的处理能力.本节对微圆柱气体绕流问题进行模拟,并将模拟结果与文献结果^[31]进行对比验证.对于微圆柱绕流问题,Reynolds数的定义为

$$Re = \frac{U_\infty D}{\nu}, \quad (15)$$

其中, U_∞ 为均匀来流速度, D 为微圆柱直径.在模拟过程中,计算区域选取为 $40D \times 20D$ (D 划分为30个格子),微圆柱放置在离进口及上下边界均为 $10D$ 的位置.计算区域边界条件设置如下:

$$\text{入口 } u = U_\infty, \quad v = 0;$$

$$\text{出口 } \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = 0;$$

$$\text{上下边界 } \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial v}{\partial y} = 0.$$

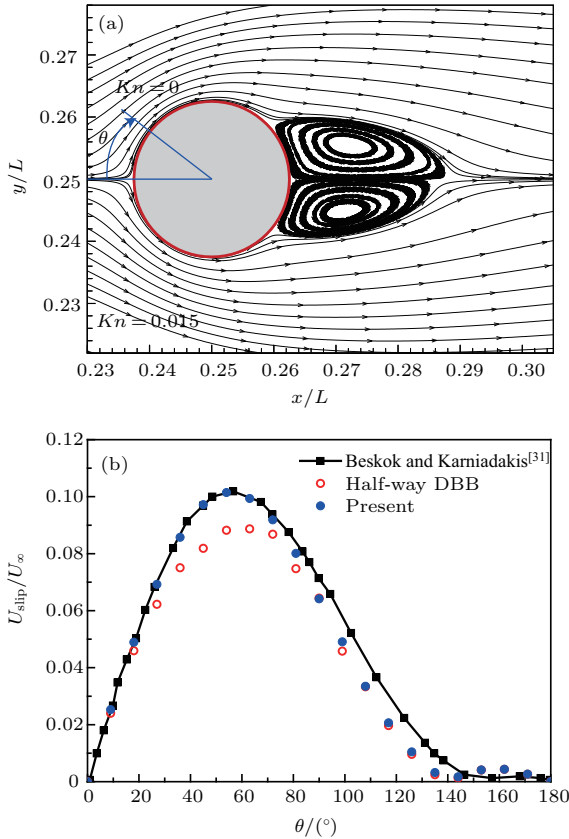


图5 (网刊彩色) 微圆柱绕流 ($Re = 20, Kn = 0.015$) (a) 微圆柱附近流线; (b) 微圆柱表面无量纲滑移速度分布
Fig. 5. (color online) Flow past a microcylinder ($Re = 20, Kn = 0.015$): (a) Streamlines around the microcylinder; (b) normalized slip velocity profiles on the surface of the microcylinder.

微圆柱表面则采用(11)式所示的一阶滑移曲边界条件.

图5(a)给出了 $Re = 20$ 时,考虑稀薄效应 ($Kn = 0.015$) 与不考虑稀薄效应 ($Kn = 0$) 情况下微圆柱附近流线分布的对比.从图中可以看出,考虑稀薄效应时回流区长度明显缩短,这是由于气体-壁面滑移速度使得壁面附近流体微团动能增加,逆压梯度减小,从而分离涡变小.图5(b)给出了 $Kn = 0.015, Re = 20$ 时,采用本文格式及 half-way DBB 格式模拟得到的微圆柱表面无量纲滑移速度分布同 Beskok 和 Karniadakis^[31] 采用谱元方法计算得到结果的对比.由图可知,本文格式得到的模拟结果与谱元方法计算结果更为接近,在分离点之前几乎完全一致,在分离点之后存在一定偏差;而 half-way DBB 格式得到的模拟结果整体偏小,最大滑移速度较文献^[31]的结果存在较大偏差.

3.4 同心微圆柱面 Couette 流

上述算例均为静止壁面上的滑移速度边界条件,为验证本文提出的格式亦能处理运动壁面上的滑移速度边界条件,本文模拟了同心微圆柱面旋转 Couette 流问题.如图6所示,内微圆柱的半径为 R_1 ($R_1 = 30\delta_x$),以恒定的角速度 ω 逆时针旋转;外微圆柱的半径为 R_2 ,保持为静止状态;内外微圆柱的半径比 $R_1 : R_2 = 3 : 5$,其表面均为完全漫反射表面 ($\sigma_{v1} = \sigma_{v2} = 1$).

对于同心微圆柱面旋转 Couette 流,圆柱坐标系下的 Navier-Stokes 方程可简化为^[23-26,30]

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left[r^2 \left(\frac{du_\theta}{dr} - \frac{u_\theta}{r} \right) \right] = 0, \quad (16)$$

其中 r 为半径, u_θ 为切向速度.内外圆柱壁面处的气体速度边界条件为

$$\begin{aligned} u_\theta|_{r=R_1} &= \omega R_1 + \lambda \frac{2 - \sigma_{v1}}{\sigma_{v1}} \left(\frac{du_\theta}{dr} - \frac{u_\theta}{r} \right) \Big|_{r=R_1}, \\ u_\theta|_{r=R_2} &= -\lambda \frac{2 - \sigma_{v2}}{\sigma_{v2}} \left(\frac{du_\theta}{dr} - \frac{u_\theta}{r} \right) \Big|_{r=R_2}. \end{aligned} \quad (17)$$

由此可得速度分布解析解为

$$u_\theta = \frac{\omega}{(A_1 - A_2)} \left(\frac{1}{r} - A_1 r \right) + \omega r, \quad (18)$$

其中系数 A_1, A_2 为

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{2 - \sigma_{v1}}{\sigma_{v1}} \frac{2\lambda}{R_1^3} + \frac{1}{R_1^2}, \\ A_2 &= -\frac{2 - \sigma_{v2}}{\sigma_{v2}} \frac{2\lambda}{R_2^3} + \frac{1}{R_2^2}. \end{aligned} \quad (19)$$

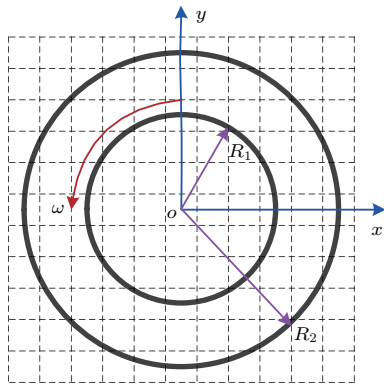


图6 同心微圆柱面 Couette 流示意图
Fig. 6. Schematic illustration of the concentric micro-cylinder Couette flow.

图7给出了 $Kn = 0.05$ 和 $Kn = 0.1$ 时, 采用本文提出的格式、half-way DBB 格式及 Tao 和 Guo^[24] 提出的修正 DBB 格式计算得到的径向方向无量纲速度分布与解析解对比. 由图7可知, 本文格式的模拟结果始终与解析解符合良好; 而 half-way DBB 格式和修正 DBB 格式模拟结果分别在微圆柱附近和外微圆柱附近存在较大偏差; 且 Kn 数越大, half-way DBB 格式和修正 DBB 格式在边界处的偏差越明显.

表3给出了不同 Kn 数条件下, 本文格式同 half-way DBB 格式和修正 DBB 格式计算结果误差对比情况. 从表中可知, 本文格式在模拟不同 Kn 数时最大相对误差及相对误差最小. 且由表3可知, 修正 DBB 格式在边界处最大相对误差较 half-way DBB 格式优势并不明显, 但由于在其余区域符合较好, 故在相对误差方面修正 DBB 格式比 half-way DBB 格式计算精度有所提高.

此外, 为检验新格式的收敛性能, 定义了流场的计算收敛判据:

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{\sum_{ij} [u^{(t+1)}(i, j) - u^{(t)}(i, j)]^2}{\sum_{ij} [u^{(t+1)}(i, j)]^2}}$$

表3 不同 Kn 数条件下本文格式与 half-way DBB 格式及修正 DBB 格式计算误差对比

Table 3. Computational errors of the present scheme, the half-way DBB scheme and the modified DBB scheme with different Kn numbers.

Kn 数	最大相对误差 R_{max}			相对误差 E_2		
	本文格式	Half-way DBB 格式	修正 DBB 格式	本文格式	Half-way DBB 格式	修正 DBB 格式
0.05	0.0278	0.303	0.408	0.00591	0.0258	0.0190
0.10	0.0651	0.310	0.462	0.0230	0.0448	0.0350

其中, $u^{(t+1)}(i, j)$ 为当前时刻流体格点的速度值, $u^{(t)}(i, j)$ 为前一时刻流体格点的速度值. 图8给出了 $Kn = 0.05$ 时, 本文格式同 half-way DBB 格式和修正 DBB 格式收敛过程对比情况. 由图8可知, 三种边界处理格式的计算收敛时间相近. 基于上述计算精度及收敛性能分析比较, 本文提出的格式能更好地处理滑移区运动曲边界问题.

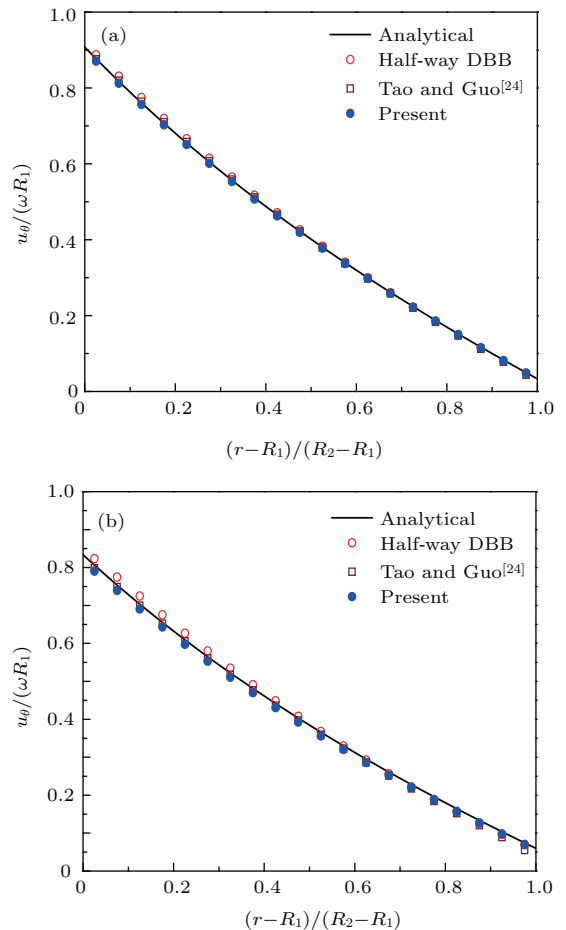


图7 (网刊彩色) 微圆柱间 Couette 流无量纲速度分布 (a) $Kn = 0.05$; (b) $Kn = 0.1$

Fig. 7. (color online) Normalized velocity profiles of the microcylinder Couette flow: (a) $Kn = 0.05$; (b) $Kn = 0.1$.

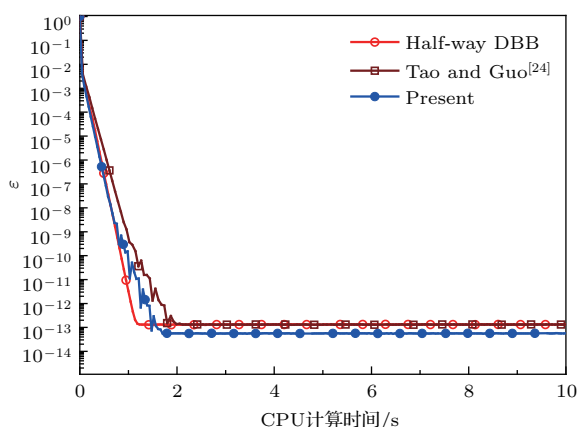


图8 (网刊彩色) 不同格式的收敛曲线 ($Kn = 0.05$)
 Fig. 8. (color online) Convergence profiles of different schemes ($Kn = 0.05$).

4 结 论

本文基于非平衡态外推格式处理曲边界与有限差分格式获取曲边界处宏观物理量及其法向梯度相结合的思想, 提出了一种适用于滑移区复杂气-固边界的格子 Boltzmann 曲边界处理格式. 该格式在处理复杂边界时考虑了实际物理边界与格线偏移量的影响, 较 half-way DBB 格式具有更高的准确度; 且该格式对气体-壁面相互作用参数选取无任何限定, 相较修正 DBB 格式有更好的适应性. 基于该格式对滑移区气体平直/倾斜微通道内 Poiseuille 流、微圆柱绕流和同心微圆柱面旋转 Couette 流问题进行计算分析, 得到以下结论:

1) 本文所提边界处理格式能够准确模拟网格线与实际物理边界不重合的平直以及倾斜微通道外力驱动 Poiseuille 流; 而 half-way DBB 格式仅在特定偏移量条件下才能准确模拟平直微通道内 Poiseuille 流, 且在模拟倾斜微通道内 Poiseuille 流时在壁面附近较理论值存在明显偏离;

2) 通过对微圆柱气体绕流计算分析, 发现考虑稀薄效应时回流区长度明显缩短; 本文所提格式得到的微圆柱表面无量纲滑移速度与文献报道结果更为接近, 而 half-way DBB 格式得到的结果整体偏小, 且最大滑移速度存在较大偏差;

3) 在模拟滑移区同心微圆柱面 Couette 流时, 本文格式预测的径向方向无量纲速度分布与解析解符合良好, 模拟精度较 half-way DBB 格式及修正 DBB 格式有明显提高.

综上可知, 本文提出的曲边界处理格式具有处理滑移区复杂流固边界速度滑移问题的能力, 且较

half-way DBB 格式和修正 DBB 格式分别有更高的精度和更好的适应性. 此外, 本文提出的曲边界处理格式, 亦可推广处理微气体流动传热问题复杂流-固边界温度跳跃边界条件.

参考文献

- [1] Gad-el-Hak M 1999 *ASME J. Fluids Eng.* **121** 5
- [2] Ho C M, Tai Y C 1998 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **30** 579
- [3] Zhang T T, Jia L, Wang Z C 2008 *Chin. Phys. Lett.* **25** 180
- [4] Sun X M, He F, Ding Y T 2003 *Chin. Phys. Lett.* **20** 2199
- [5] Liu C F, Ni Y S 2008 *Chin. Phys. B* **17** 4554
- [6] 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]
- [7] Wang Z, Liu Y, Zhang J Z 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 014703 (in Chinese) [王佐, 刘雁, 张家忠 2016 物理学报 **65** 014703]
- [8] Guo Z L, Zheng C G, Shi B C 2002 *Phys. Fluids* **14** 2007
- [9] Mei R W, Luo L S, Shyy W 1999 *J. Comput. Phys.* **155** 307
- [10] Ladd A J C 1994 *J. Fluid Mech.* **271** 285
- [11] Noble D R, Torczynski J R 1998 *Int. J. Mod. Phys. C* **9** 1189
- [12] Yu Z, Yang H, Fan L S 2011 *Chem. Eng. Sci.* **66** 3441
- [13] Lee C H, Huang Z H, Chiew Y M 2015 *Eng. Appl. Comp. Fluid* **9** 370
- [14] Guo K K, Li L K, Xiao G, AuYeung N A, Mei R W 2015 *Int. J. Heat Mass Tran.* **88** 306
- [15] Yin X W, Zhang J F 2012 *J. Comput. Phys.* **231** 4295
- [16] Shi D Y, Wang Z K, Zhang A M 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 074703 (in Chinese) [史冬岩, 王志凯, 张阿漫 2014 物理学报 **63** 074703]
- [17] Le G G, Oulaid O, Zhang J F 2015 *Phys. Rev. E* **91** 033306
- [18] Fu S C, Leung W W F, So R M C 2013 *Commun. Comput. Phys.* **14** 126
- [19] Gao D Y, Chen Z Q, Chen L H, Zhang D L 2017 *Int. J. Heat Mass Tran.* **105** 673
- [20] Izhm M, Fukui T, Morinishi K 2011 *J. Fluid Sci. Tech.* **6** 812
- [21] Nie D M, Lin J Z 2010 *Chin. Phys. Lett.* **27** 104701
- [22] Fang H P, Wan R Z, Fan L W 2000 *Chin. Phys.* **9** 515
- [23] Szalmas L 2007 *Int. J. Mod. Phys. C* **18** 15
- [24] Tao S, Guo Z L 2015 *Phys. Rev. E* **91** 043305
- [25] Guo Z L, Shi B C, Zheng C G 2011 *Comput. Math. Appl.* **61** 3519
- [26] Suga K 2013 *Fluid Dyn. Res.* **45** 034501
- [27] Yang W L, Li H X, Zhang T J, Elfadel I M 2015 *ASME 2015 13th International Conference on Nanochannels, Microchannels, and Minichannels* San Francisco, CA, USA, July 6-9, 2015 pV001T04A001
- [28] Buick J M, Greated C A 2000 *Phys. Rev. E* **61** 5307
- [29] Guo Z L, Zheng C G, Shi B C 2002 *Phys. Rev. E* **65** 046308

[30] Sun Y H, Barber R W, Emerson D R 2005 *Phys. Fluids* **17** 047102

[31] Beskok A, Karniadakis G E 1994 *J. Thermophys. Heat Tr.* **8** 647

A new curved boundary treatment in lattice Boltzmann method for micro gas flow in the slip regime*

Gu Juan Huang Rong-Zong Liu Zhen-Yu Wu Hui-Ying[†]

(School of Mechanical Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

(Received 18 December 2016; revised manuscript received 5 April 2017)

Abstract

A new curved boundary treatment in lattice Boltzmann method is developed for micro gas flow in the slip regime. The proposed treatment is a combination of the nonequilibrium extrapolation scheme for curved boundary with no-slip velocity condition and the counter-extrapolation method for the velocity and its normal gradient on the curved boundary. Taking into consideration the effect of the offset between the physical boundary and the closest grid line, the new treatment is proved to be more accurate than the traditional half-way diffusive bounce-back (DBB) scheme. The present treatment is also more applicable than the modified DBB scheme because the specific gas-wall interaction parameters need to be determined to ensure the validation of the modified DBB scheme.

The proposed boundary treatment is implemented to simulate the benchmark problems, which include a Poiseuille flow in the aligned/inclined micro-channel, a flow past a microcylinder and a microcylindrical Couette flow. The results and conclusions are summarized as follows.

1) The force-driven Poiseuille flow in an aligned microchannel is simulated separately with different values of wall-grid offset $q\delta_x$ ($q = 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$). With the consideration of the wall-grid offset, the numerical results with the new boundary treatment show good agreement with the analytical solutions. However, the results obtained by using the half-way DBB scheme only accord well with the analytical solutions under the condition of a fixed wall-grid offset ($q = 0.5$).

2) To demonstrate the capability of the present treatment in dealing with gas flow in a more complex geometry, the force-driven Poiseuille flow in a micro-channel is investigated separately with different inclined angles. The present numerical results fit well with the analytical solutions. However, the discrepancy between the results obtained with the half-way DBB scheme and the analytical solutions can be clearly observed near the inclined boundaries.

3) The gas flow past a microcylinder is simulated to prove that the present treatment can deal with the curved boundary. The slip velocity profile along the micro cylinder periphery obtained with the present treatment accords well with the available data in the published literature. However, the results obtained with the half-way DBB scheme show lower values than the results from the published work.

4) In the simulations of the microcylindrical Couette flow between two coaxial rotating cylinders for different Knudsen numbers the results obtained by using the present treatment show excellent agreement with the analytical solutions. However, the results obtained with the half-way DBB scheme and the modified DBB scheme deviate obviously from the analytical solutions near the inner and outer cylindrical walls, respectively.

In summary, the new boundary treatment proposed in this work is capable of dealing with the complex gas-solid boundary in the slip regime. The new treatment has a higher accuracy than the half-way DBB scheme and shows a better applicability than the modified DBB scheme.

Keywords: curved boundary, lattice Boltzmann method, slip regime, micro gas flow

PACS: 47.11.Qr, 47.15.Rq, 02.60.Cb

DOI: 10.7498/aps.66.114701

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51536005, 51521004).

† Corresponding author. E-mail: whysrj@sjtu.edu.cn