

不同形状微管道中的气体流动¹⁾

蒋建政²⁾ 沈 青 樊 菁

(中国科学院力学研究所高温气体动力学重点实验室, 北京 100080)

摘要 不同形状微尺度管道(圆形、六边形、半圆形、不同宽高比的矩形)中的气体流动特性是微机电系统设计最为关心的问题之一. 文中利用信息保存(IP)方法和直接模拟 Monte Carlo(DSMC)方法进行研究, 给出两种方法的计算结果相互符合, 并与其它研究者的 BGK 模型方程计算结果进行了比较. 对于微尺度管道中关心的低 Mach 数流动, IP 方法的统计收敛效率明显优于 DSMC 方法. 通过拟合 IP 和 DSMC 结果, 给出了圆形、六边形、半圆形、不同宽高比的矩形截面情况下无量纲质量流率与等效 Knudsen 数的关系.

关键词 微管道, 稀薄气体效应, IP 方法, DSMC 方法

中图分类号: V211.25 文献标识码: A 文章编号: 0459-1879(2007)02-0145-08

引 言

各种形状微管道中的气体流动特性是微机电系统设计 and 优化中重要的问题之一. 由于气体分子平均自由程与微管道特征长度之比即 Knudsen 数 (Kn) 的增大, 稀薄气体效应变得重要, 经典的 Navier-Stokes 方程和无滑移边界条件不再准确. 稀薄气体动力学是解决这类问题的恰当途径, 特别是结合高性能计算机技术发展起来的直接模拟 Monte Carlo (DSMC) 方法^[1,2], 有力地促进了实际条件下稀薄气体非平衡流动的研究.

本文关心不同形状(矩形、六边形、半圆形、圆形)微尺度管道中的稀薄气体流动特性. 假设流向压力分布是线性的, 对应于经典的 Poiseuille 流动条件. 尽管微槽道气体流动的实验结果和理论分析^[3~5]均表明流向压力分布是非线性的, 但常压力梯度假设下的微管道的流动作为基本问题, 便于各种理论和计算方法的比较; 另外微管道局部压力分布总是近似线性的, 因此常压力梯度解也反映了微管道局部流动的真实特征.

不少研究者基于 Boltzmann 模型方程如 BGK 方程或线性化 Boltzmann 方程描述了不同形状管道中稀薄气体流动, Hasegawa & Sone^[6], Aoki^[7] 和 Sharipov^[8] 分别用 BGK 方程模拟了矩形和其它形状截面的管道流动, Ohwada 等^[9] 用线性化 Boltz-

mann 方程计算了平面 Poiseuille 流动, 这方面的系统介绍可参见 Sharipov 的综述文章^[10].

DSMC 方法是 G.A. Bird^[1] 发明的一种追踪分子运动和碰撞过程的统计模拟方法, 它广泛应用于各种稀薄气体流动, 特别是在航天领域高速问题研究中取得了很大成功. 作为一种粒子模拟算法, 热运动随机性引起的统计涨落在 DSMC 中是不可避免的, 对于高速问题如激波结构和再入现象, 统计噪声小于宏观物理量, 这个问题不是很突出, 但是在微尺度流动关心的低 Mach 数情况下, 统计涨落变得很严重^[11]. 为了解决这个问题, 樊菁和沈青提出了信息保存 (IP) 方法^[12,13]. IP 方法的关键是直接利用 DSMC 分子运动算法, 输送模拟分子所代表的大量真实分子的平均物理信息, 然后通过平均物理信息的统计平均获得宏观流场分布以及物面压力、剪切力等. 这样既保证了正确的稀薄气体输运速率, 又避免了 DSMC 本身的统计涨落. IP 方法已有许多成功应用的例子^[12~22]. 关于 DSMC 方法, Bird 在 1994 年的专著中有详细介绍; IP 实现细节也已很好地总结在新近出版的几本专著中^[2,23,24], 有兴趣者可以参阅.

1 计算条件和物理模型

本文 Kn 数的变化范围介于 0.05 和 10 之间, 这里 $Kn = \lambda/L$, λ 是平均自由程, L 是微管道特

2005-08-03 收到第 1 稿, 2006-09-14 收到修改稿.

1) 国家自然科学基金资助项目 (90205024, 10425211, RFBR-NSFC-39004).

2) E-mail: jzjiang@imech.ac.cn

征尺度(图 1). 模拟气体是标准条件 (1atm, 273 K) 下的氩气, 密度 $\rho = 1.782 \text{ kg/m}^3$, 黏性系数 $\mu = 2.117 \times 10^{-5} \text{ Ns/m}^2$. 管壁温度与气体温度相同, 对于本文关心的低 Mach 数流动, 黏性耗散引起的温度变化很小, 可以近似看作等温过程.

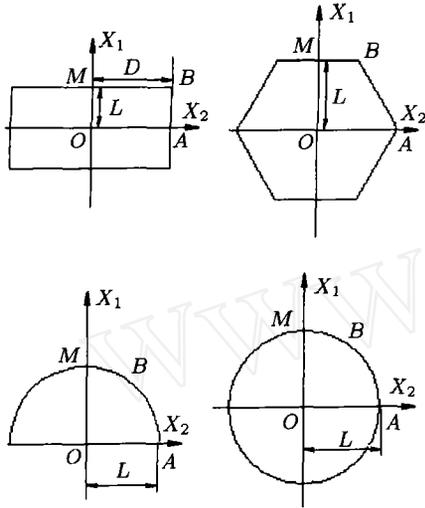


图 1 矩形、正六边形、半圆形和圆形管道示意图

Fig.1 Schematic diagrams of rectangular, regular hexagonal, semi-circular and circular pipes

对于我们采用的硬球分子相互作用模型

$$\lambda = \frac{16}{5\sqrt{\pi}} \times \frac{\mu}{\rho c} \quad (1)$$

其中 $c = \sqrt{2kT/m}$ 是分子热运动的最可几速度, k 是 Boltzmann 常数, m 是分子质量, T 是气体的温度. 由式 (1) 容易算出标准条件下氩气的分子平均自由程 $\lambda_{Ar} = 6.36 \times 10^{-8} \text{ m}$. 实际计算中, 根据 λ_{Ar} 和所选取的 Kn 即可反算出 L .

考虑如下线性流向压力分布

$$p = p_0(1 + \alpha X_3/L) \quad (2)$$

其中坐标 X_3 沿管道轴线方向, 原点取在截面中心 O , $p_0 = \rho RT$, 压力梯度 dp/dX_3 的大小由常数 α 决定.

一个计算时间步长 Δt 内, 分子由于压力梯度作用在 X_3 方向获得的平均速度增量^[12,13]

$$\Delta u = -\alpha RT \Delta t / L \quad (3)$$

另一方面, 当分子在运动过程中会不断与管道壁面碰撞, 对于通常的漫反射物面, 分子不断地将气体

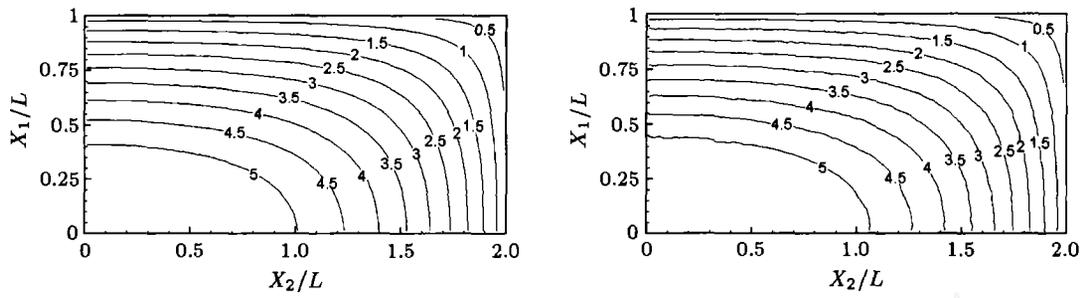
流向动量传递给物面. 当物面对气体分子的反作用力即剪应力与流向压力趋于平衡时, 流动达到定常状态^[12,13]. 这时 IP 和 DSMC 计算开始采样, 随着样本数的增加, 算术平均得到的宏观物理量的统计涨落逐渐减小. 为了便于 DSMC 计算, 我们采用了较大的 α 值 ($\alpha = -0.0237$), 它对应的 X_3 速度大约为 40 m/s . 这比许多实际 MEMS 器械中的气流速度大很多, 例如在微槽道实验中, 典型的入口处的气流速度大约是 0.2 m/s ^[3,4]. 这样小的气流速度, 甚至更小的气流速度, IP 方法都很容易处理^[12~22], 但 DSMC 方法的统计收敛过程将变得非常缓慢^[12,13]. 本文的目的之一是考察 IP 方法处理不同几何问题的能力, 因此我们尽可能选择适合 DSMC 方法的计算条件. 即使如此, 为减小统计涨落, DSMC 的样本数仍需达到 10^7 , 大约是 IP 样本数的 15 倍.

根据流动对称性, 计算区域只取管道截面第一象限部分. 宽高比 $\phi = D/L = 2$ 的矩形截面和六边形截面皆均分为 40×80 个矩形网格, 半圆形截面和圆形截面皆均分为 40×40 个正方形网格. 与六边形、半圆形和圆形壁面相交的网格仅有部分在计算区域内, 它们的面积和中心坐标由落在计算区域内部分精确计算确定. 对称边界 OM 和 OA (半圆形截面除外) 满足镜面反射条件, 外边界即管壁 (矩形和六边形截面的 MB 和 AB , 半圆形和圆形截面的弧 MBA , 以及半圆形截面的 OA) 采用完全漫反射条件.

2 质量流率和流场

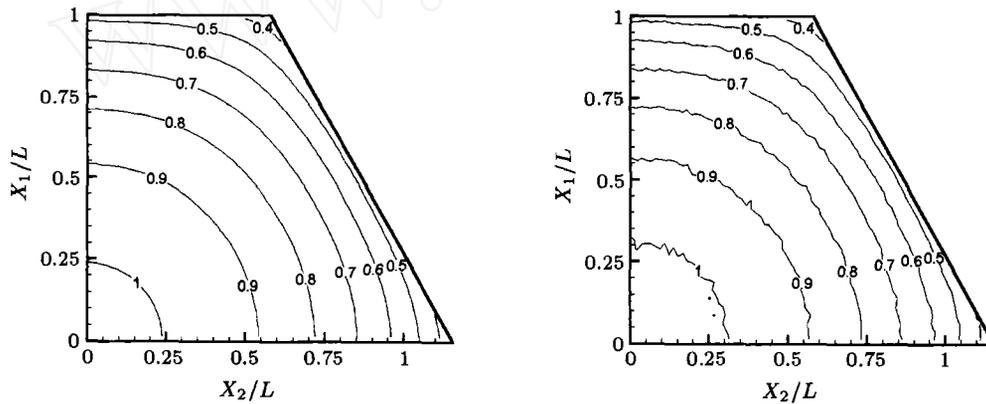
图 2 比较了 IP 方法和 DSMC 方法给出的不同 Kn 数下沿管道轴线方向速度分布的等值线; 为了细致比较, 图 3 给出了沿中垂线 OM 的 IP 和 DSMC 的流向速度分布, 其中速度的无量纲化因子 $u^* = -\alpha(2RT)^{1/2}$. 可以看到, IP 和 DSMC 结果不仅趋势一致, 细节也是相符的.

表 1 比较了 IP 和 DSMC 的无量纲化质量流率与 BGK 模型方程的结果^[6,7], 这里无量纲化因子 $M_* = -\alpha p_0 S / (2RT)^{1/2}$, S 是管道截面积. 为了获得正确的黏性系数表达式, BGK 模型方程中的碰撞频率及其对应的 Kn 数要除以系数 1.27 ^[2]. 在文献^[6,7] 计算中, BGK 模型 Kn 数分别为 $0.1, 1$ 和 10 , 除以 1.27 后分别为 $0.0787, 0.787$ 和 7.87 , 也就是本文计算所取的 Kn 数. 对于稀薄气体流动, DSMC 结果可以做为标准, IP 方法与它的比较令人满意.



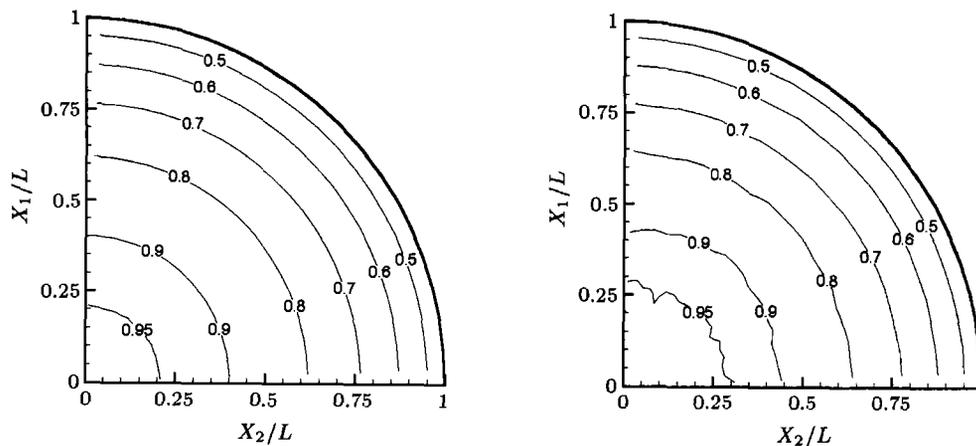
(a) 矩形 ($Kn = 0.0787, \phi = 2$)

(a) Rectangle ($Kn = 0.0787, \phi = 2$)



(b) 正六边形 ($Kn = 0.787$)

(b) Regular hexagon ($Kn = 0.787$)

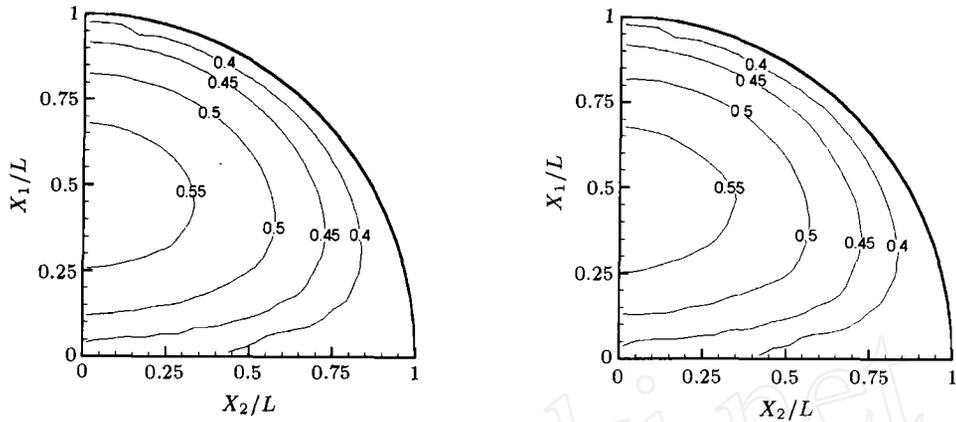


(c) 圆形 ($Kn = 0.787$)

(c) Circle ($Kn = 0.787$)

图 2 IP 和 DSMC 方法给出的无量纲化流向速度等值线 (u/u^*)。左：IP；右：DSMC

Fig.2 Normalized stream-wise velocity contours (u/u^*) obtained by IP and DSMC. Left: IP; right: DSMC

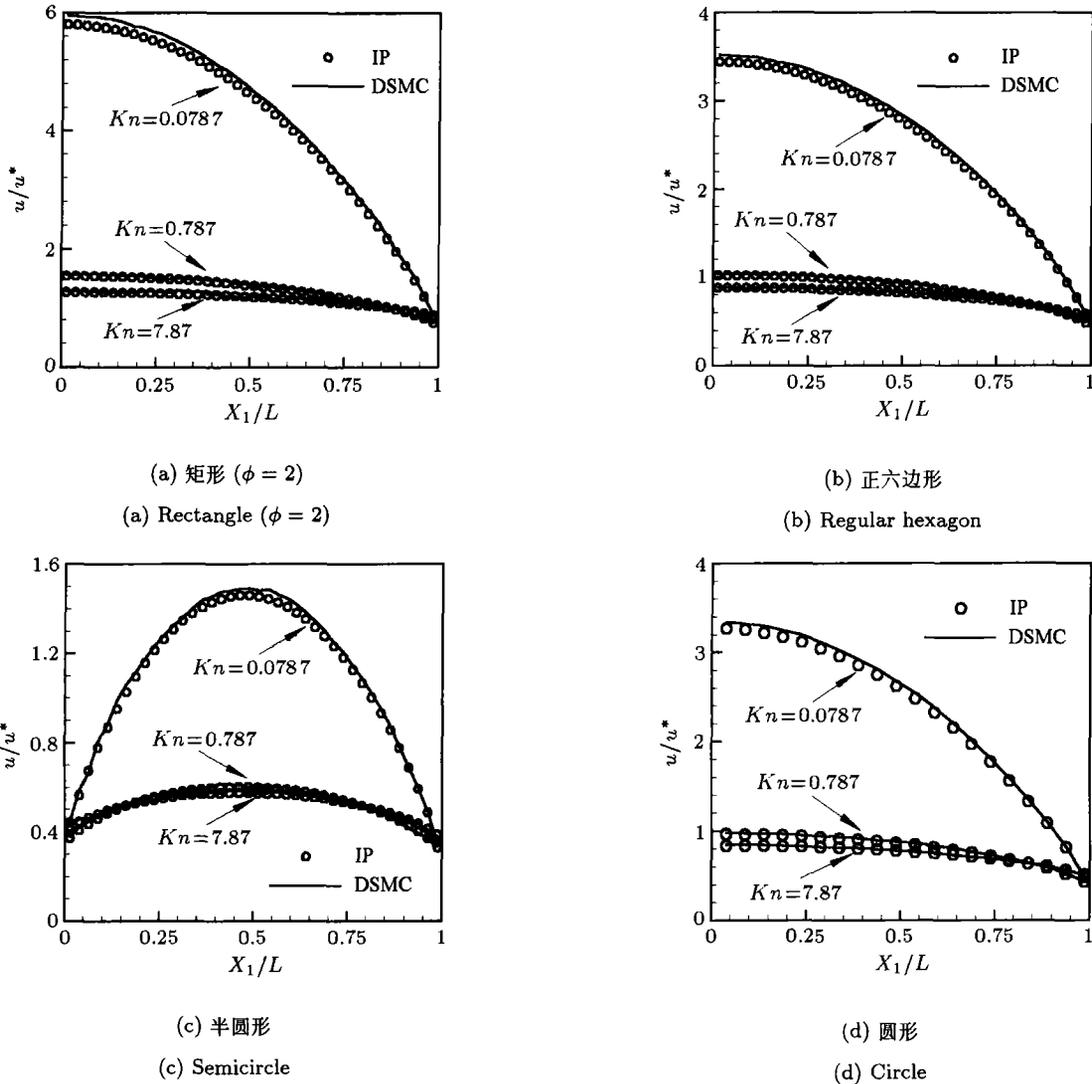


(d) 半圆形 ($Kn = 7.87$)

(d) Semicircle ($Kn = 7.87$)

图 2 IP 和 DSMC 方法给出的无量纲化流向速度等值线 (u/u^*). 左: IP; 右: DSMC (续)

Fig.2 Normalized stream-wise velocity contours (u/u^*) obtained by IP and DSMC. Left: IP; right: DSMC (continued)



(a) 矩形 ($\phi = 2$)

(a) Rectangle ($\phi = 2$)

(b) 正六边形

(b) Regular hexagon

(c) 半圆形

(c) Semicircle

(d) 圆形

(d) Circle

图 3 IP 和 DSMC 方法给出的沿中垂线 OM 的流向速度分布

Fig.3 Stream-wise velocity profiles along the mid-perpendicular line OM obtained by IP and DSMC

表 1 IP 方法和 DSMC 方法给出的无量纲质量流率与 BGK 模型方程数值解^[6,7] 的比较

Table 1 Comparison of normalized mass flow rates obtained by IP and DSMC with BGK numerical solutions^[6,7]

		Kn	0.0787	0.787	7.87
rectangle ($D = 2L$)	IP		6.505	2.230	2.073
	DSMC		6.647	2.259	2.076
	BGK ^[6]		6.718	2.278	2.088
regular hexagon	IP		3.909	1.529	1.455
	DSMC		3.972	1.546	1.455
	BGK ^[6]		3.885	1.550	1.461
semicircle	IP		1.733	0.921	0.951
	DSMC		1.748	0.923	0.950
	BGK ^[6]		1.687	0.929	0.955
circle	IP		3.768	1.458	1.392
	DSMC		3.848	1.477	1.391
	BGK ^[7]		3.880	1.481	1.400

$Kn = 0.787$ 和 7.87 时, 3 种方法得到的结果符合得很好; 而在 $Kn = 0.0787$ 时, 矩形截面的 BGK 值^[6] 略大于 IP 和 DSMC 结果. Aoki^[7] 在平面 Poiseuille 流动 BGK 解与线性 Boltzmann 方程解^[9] 比较中, 也观察到类似现象.

3 矩形截面宽高比对质量流率和速度分布的影响

$Kn = 0.226$ 时, 不同宽高比情况下矩形截面的无量纲质量流率 IP 和 DSMC 结果之比较见表 2, 两者是相符的, 相对差别仅为 2%, 已在 DSMC 本身的统计误差之内. 有限宽高比的质量流率与无限宽高比即平面 Poiseuille 流动结果相差很大, 例如 $\phi = 10$ 的质量流率也只有 $\phi = \infty$ 的 94%. 然而, 沿中垂线 OM 的流向速度分布比较却显示 (图 4), $\phi = 5, 10$ 和 ∞ 的结果相差很小, 以至于在图中很难分辨. 这是因为质量流率是与整个流场有关的积分量, 尽管 $\phi \geq 5$ 时侧壁对于中心线附近的局部流态影响可以忽略, 但侧壁面显著影响其附近流场仍会在质量流量中体现.

表 2 矩形截面宽高比 ϕ 对无量纲质量流率的影响 ($Kn = 0.226$)

Table 2 Effect of the height-to-width ratio on the normalized mass flow rate at $Kn = 0.226$ through a rectangular pipe

ϕ	1	2	5	10	∞
IP	2.28	3.35	4.16	4.44	4.72
DSMC	2.32	3.41	4.25	4.53	4.81

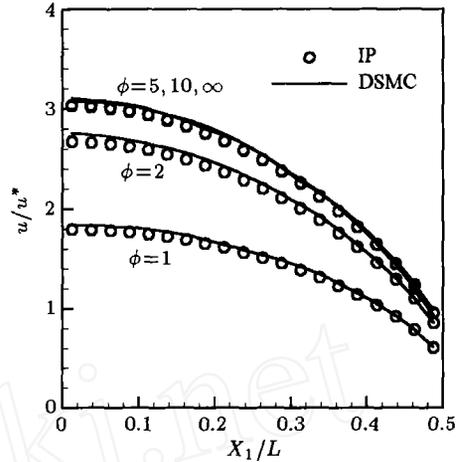


图 4 矩形截面不同宽高比情况下, IP 和 DSMC 给出的沿中垂线 OM 的无量纲流向速度分布 ($Kn = 0.226$)

Fig.4 Stream-wise velocity profiles along the mid-perpendicular line OM of rectangular cross sections obtained by IP and DSMC at different height-to-width ratios

图 5 给出了矩形截面宽高比 $\phi = 10$ 与 $\phi = \infty$ 的质量流率之比随 Kn 数的变化关系. $Kn < 0.2$ 时, $M_{10}/M_{\infty} \approx 0.94$ 基本不随 Kn 数变化; $Kn > 0.2$ 时, 从侧壁反射的分子直接运动到中心区域的几率随 Kn 增大而增加, 相应地 M_{10}/M_{∞} 随 Kn 增大而显著下降.

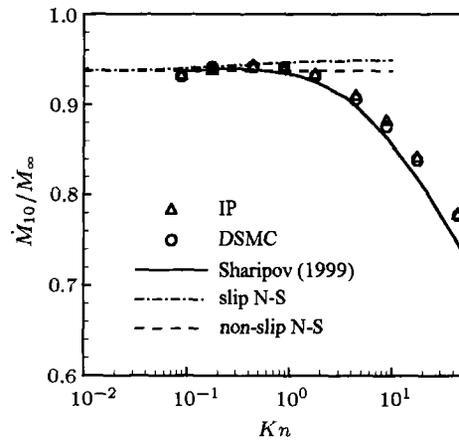


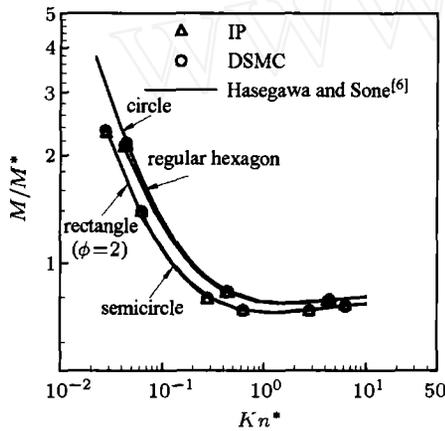
图 5 矩形截面宽高比 $\phi = 10$ 与 $\phi = \infty$ 的质量流率之比与 Kn 数的关系

Fig.5 Ratios of the mass flow rates for the rectangular cross sections with $\phi = 10$ and $\phi = \infty$, respectively, versus Kn

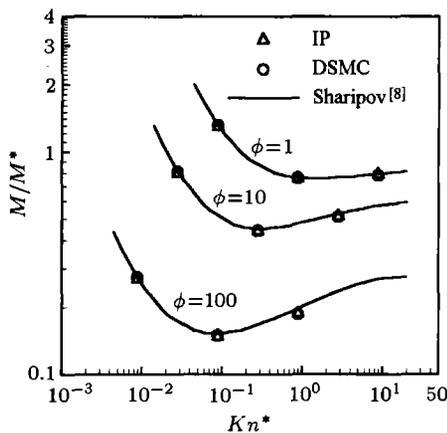
4 管道形状对质量流率的影响

为了了解微管道截面形状对质量流量的影响程度, 我们定义等效 Knudsen 数 $Kn^* = \lambda/S^{1/2}$. 在

截面积 S 相同的情况下, IP 和 DSMC 给出的圆形、半圆形、正六边形和矩形微管道的无量纲质量流率与 Kn^* 的关系相符甚好 (图 6), 并与经过我们换算的 Hasegawa & Sone^[6] 以及 Sharipov^[8] 的 BGK 数值解一致, 这里质量流量无量纲因子 $M^* = -S^{3/2}(dp/dX_3)/(2RT)^{1/2}$. 在管道流动中, 具有一定宏观速度的气体分子在与壁面碰撞时受到阻滞作用, 在截面积相同的情况下, 由于圆形截面的周长最小, 其对气体分子宏观运动的阻滞作用也最小, 故而圆形截面流量大, 六边形次之 (图 6(a)); 矩形截面中, 正方形 ($\phi = 1$) 周长最小, 故质量流量最大 (图 6(b)).



(a) 矩形 ($\phi = 2$)、正六边形、圆形、半圆形截面
(a) Rectangular ($\phi = 2$), regular hexagonal, circular, semi-circular cross sections



(b) 不同宽高比的矩形截面
(b) Rectangular cross sections with different height-to-width ratios

图 6 不同形状微管道无量纲质量流率与等效 Kn 数的关系
Fig.6 Normalized mass flow rates through different cross sections versus the equivalent Kn

为了实际使用的方便, 我们将不同形状微管道的无量纲质量流率与 Kn^* 的关系拟合如下

$$\frac{M}{M^*} = \frac{A}{Kn^*} + B + C \ln(1 + DKn^*) \quad (4)$$

其中参数 A, B, C, D 与截面形状有关, 它们由最小二乘法拟合图 6 中动理论结果确定 (表 3).

表 3 不同截面形状的质量流率拟合公式 (4) 中的参数值
Table 3 The parameters of formula (4) for mass flow rates through different cross sections

	A	B	C	D
circle	7.14E-2	4.28E-1	4.20E-2	8.50E+2
regular hexagon	6.21E-2	5.18E-1	3.20E-2	5.20E+2
semicircle	4.78E-2	4.75E-1	3.58E-2	3.39E+2
square	6.23E-2	4.89E-1	3.53E-2	4.00E+2
rectangle ($\phi = 2$)	5.09E-2	4.71E-1	3.78E-2	2.23E+2
rectangle ($\phi = 5$)	2.63E-2	3.27E-1	4.42E-2	2.15E+2
rectangle ($\phi = 10$)	1.45E-2	2.16E-1	4.75E-2	1.90E+2
rectangle ($\phi = 20$)	7.80E-3	1.30E-1	4.58E-2	1.70E+2
rectangle ($\phi = 50$)	3.10E-3	1.17E-1	3.85E-2	4.42E+1
rectangle ($\phi = 100$)	1.48E-3	1.01E-1	3.18E-2	2.20E+1

图 7 对比了圆形截面微管道质量流量拟合公式 (4), IP 和 DSMC 计算结果以及无滑移 N-S 解

$$\begin{aligned} \frac{M_{c,N-S}}{M^*} &= \frac{-\rho\pi r^4/8\mu \times dp/dX_3}{-(\pi r^2)^{1.5}\sqrt{2RT} \times dp/dX_3} = \\ \frac{\rho r\sqrt{2RT}}{8\mu\sqrt{\pi}} &= \frac{2}{5\pi^{3/2}Kn} \end{aligned} \quad (5)$$

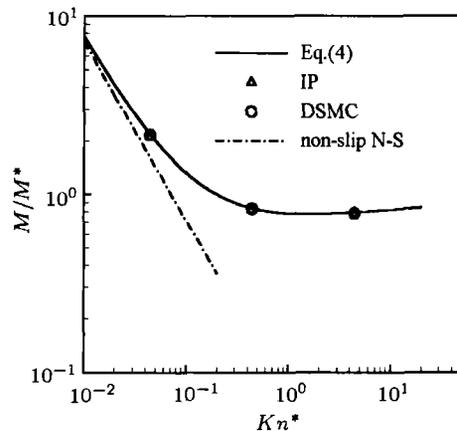


图 7 圆形管道式 (4) 的拟合数据与 IP, DSMC 计算结果以及 N-S 方程解的比较

Fig.7 Comparison of formula (4) with IP and DSMC, and N-S results for a circular pipe

其中 r 是圆形管道半径。 Kn^* 变化范围为 0.01~20, 拟合公式 (4) 与 DSMC 和 IP 结果的拟合误差在 3% 左右, 而经典的 N-S 解随 Kn^* 增加大幅偏离动理论结果。 矩形 ($\phi \leq 10$)、六边形、半圆形截面情况下, (4) 相对于 DSMC 和 IP 结果的拟合误差也在 3% 左右; $\phi = 50$ 和 $\phi = 100$ 的矩形截面的拟合误差, 在 $Kn^* = 0.02 \sim 0.08$ 和 $Kn^* > 10$ 较大, 分别为 5% 和 7%, 但其余 Kn^* 范围内, 仍在 3% 左右。

5 结 论

本文利用 IP 方法和 DSMC 方法模拟了矩形、正六边形、圆形和半圆形截面微管道中的稀薄气体流动, 仔细研究了管道形状对质量流率和速度分布的影响。 IP 方法和 DSMC 方法的计算结果符合得很好, 并与 Hasegawa & Sone^[6], Aoki^[7] 和 Sharipov^[8] 的 BGK 模型方程的数值解一致, 显示了 IP 方法方便处理不同几何形状的能力。 在本文有意选择的便于 DSMC 方法的计算条件下, IP 方法的统计收敛速度仍然比 DSMC 方法高 15 倍。

研究结果表明微管道截面形状对质量流率有显著影响。 在截面积相同的情况下, 圆形截面周长最小质量流量最大。 各种截面的微管道流动均有著名的 Knudsen 最小现象发生, 即无量纲质量流量在等效 Kn 数 1 附近均存在最小值。 本文通过拟合 IP 和 DSMC 结果, 给出了便于使用的各种截面微管道无量纲质量流率与等效 Kn 数的拟合关系。

参 考 文 献

- Bird GA. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Clarendon, Oxford, 1994
- 沈青. 稀薄气体动力学. 北京: 国防工业出版社, 2003 (Shen Ching. *Rarefied Gas Dynamics*. Beijing: National Defence Industry Press, 2003 (in Chinese))
- Pong KC, Ho CM, Liu JQ, et al. Non-linear pressure distribution in uniform microchannel. *ASME-FED*, 1994, 197: 51~56
- Shih JC, Ho CM, Liu JQ, et al. Monoatomic and polyatomic gas flow through uniform microchannels. *ASME-DSC*, 1996, 59: 197~203
- Shen C. A strict kinetic solution of the finite length microchannel flow problem. In: 3rd International Conference on Microchannels and Minichannels, June 13-15, 2005, Toronto, Ontario, Canada
- Ohwada T, Sone Y, Aoki K. Numerical analysis of the Poiseuille and thermal transpiration flows between two parallel plates on the basis of the Boltzmann equation for Hard-sphere molecules. *Phys Fluids A*, 1989, 1: 2042~2049
- Hasegawa M, Sone Y. Poiseuille and thermal transpiration flows of a rarefied gas for various pipes. *J Vac Soc Japan*, 1988, 31: 416~419
- Aoki K. Dynamics of rarefied gas flows: asymptotic and numerical analyses of the Boltzmann equation. *AIAA J*, 2001-0874, 2001
- Sharipov F. Rarefied gas flow through a long rectangular channel. *J Vac Sci Technol A*, 1999, 17: 3062~3066
- Sharipov F. Data on internal rarefied gas flows. *J Phys Chem Ref Data*, 1998, 27: 657~706
- Oran ES, Oh CK, Cybyk BZ. Direct simulation Monte Carlo: recent advances and applications. *Annu Rev Fluid Mech*, 1998, 30: 403~441
- Fan J, Shen C. Statistical simulation of low-speed unidirectional flows in transition regime. In: Brun R, et al. eds. *Rarefied Gas Dynamics*. Cepadues Editions 2, 1999. 245~252
- Fan J, Shen C. Statistical simulation of low-speed rarefied gas flows. *J Comp Phys*, 2001, 167: 399~412
- Fan J, Boyd ID, Cai CP, et al. Computation of rarefied gas flows around a NACA 0012 airfoil. *AIAA J*, 2001, 39: 618~625
- Xie C, Fan J, Shen C. Statistical simulation of rarefied gas flows in micro-channels. In: Ketsdever AD, Muntz EP, eds. *Rarefied Gas Dynamics*. AIP, New York, 2003. 800~807
- Shen C, Fan J, Xie C. Statistical simulation of rarefied gas flows in micro-channels. *J Comput Phys*, 2003, 189: 512~526
- Shen C, Tian DB, Xie C, et al. Examination of LBM in simulation of microchannel flow in transitional regime. *Microscale Thermophys Eng*, 2004, 8: 423~432
- Shen C. Use of the degenerated Reynolds equation in solving the microchannel gas flow problem. *Phys Fluids*, 2005, 17: 046101
- Sun QH, Boyd ID. A direct simulation for subsonic microscale gas flows. *J Comp Phys*, 2002, 179: 400~425
- Sun QH, Boyd ID, Candler GV. A hybrid continuum/particle approach for modeling rarefied gas flows. *J Comp Phys*, 2004, 194: 256~277
- Sun QH, Boyd ID. Flat-plate aerodynamics at very low Reynolds number. *J Fluid Mech*, 2004, 502: 199~206
- Sun QH, Boyd ID. Drag on a flat-plate in low-Reynolds-number gas flows. *AIAA J*, 2004, 42: 1066~1072
- Shen C. *Rarefied Gas Dynamics*. Berlin: Springer, 2005b
- Liou WW, Fang Y. *Microfluid Mechanics, Principles and Modeling*. The McGraw-Hill Companies, Inc, 2005

GAS FLOWS THROUGH MICRO-PIPES WITH DIFFERENT CROSS-SECTION SHAPES ¹⁾

Jiang Jianzheng²⁾ Shen Ching Fan Jing

(Laboratory of High Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

Abstract The information preservation (IP) method and the direct simulation Monte Carlo (DSMC) method are employed to investigate gas flows through micro-pipes with the circular, semi-circular, hexagonal or rectangular cross sections, respectively, as an important issue in the design and optimization of MEMS devices. The IP and DSMC results agree well with each other, and are compared with the numerical solutions of the BGK model equation given by other researchers. For low Mach number cases in micro-pipe flows, the IP method demonstrates the statistically convergent efficiency superior to DSMC. The investigation shows that the cross-section shapes of micro-pipes considerably affect their mass flow rates. A relation between the mass flow rate and the equivalent Knudsen number for circular, semi-circular, hexagonal and rectangular cross sections is suggested through fitting the IP and DSMC results.

Key words micro-pipe, rarefied gas flows, IP, DSMC

Received 3 August 2005, revised 14 September 2006.

1) The project supported by the National Natural Science Foundation of China(90205024, 10425211, RFBR-NSFC-39004).

2) E-mail: jzjiang@imech.ac.cn