

微尺度气体流动

樊菁 沈青

中国科学院力学研究所高温气体动力学开放实验室, 北京 100080

摘要 了解微尺度气体流动特点是机电系统设计和优化的基础. 有关的研究可以上溯到 20 世纪初 Knudsen 的平面槽道流动质量流量的测量和 Millikan 的小球阻力系数的测量, 实验结果揭示了稀薄气体效应即尺度效应对气体运动的重要影响. 由于流动特征长度很小, 微尺度气流经常处于滑流区甚至过渡领域, 流动的相似参数为 Knudsen 数和 Mach 数. 因此可以考虑利用相似准则, 通过增大几何尺寸、减小压力的途径, 解决机电系统实验观测遇到的困难. 为解决直接模拟 Monte Carlo 方法分析微机电系统中低速稀薄气流遇到的统计涨落困难, 我们提出了信息保存法 (IP), 该方法能够有效克服统计散布, 并已成功用于多种微尺度气流.

关键词 微尺度气流, 稀薄气体效应, 相似参数, DSMC 方法, IP 方法

1 引言

微小机器一直是人类追求的目标. 例如, Feynman^[1] 在 1959 年 12 月美国物理学会年会的演讲中, 设想了利用芯片加工技术制造微小机器的可能性, 甚至设计了主要技术路线, 分析了微尺度操作和控制可能遇到的问题, 还悬赏 1000 美元制造直径小于 1/64 inch (约合 0.4 mm) 的微小马达, 并预言“人们在 2000 年回首这个年代时, 会困惑为什么没有人在 1960 年就认真地开始钻研这个方向”. 1960 年 11 月, McLellan 手工雕刻了这样一个小马达, 并获得了 Feynman 的 1000 美元奖金. 然而, McLellan 的小马达与其说是一个机器, 勿宁说是一个艺术品. 此后的 30 年间, 微电子工业不断发展, 芯片加工技术日益成熟. 终于在 1988 年, Fan, Tai 和 Muller^[2] 利用微电子加工技术造出了一台直径只有 100 μm 的微型马达, Feynman 的预见提前得到证实. 为纪念这位物理学家的远见卓识, 1992 年, Journal of Microelectromechanical Systems 创刊号重新登载了他 40 多年前的演讲稿^[1].

微电子加工技术制造的微小机器, 不仅具有运动、探测等功能, 还嵌有用于控制的电子线路, 两者相辅相成, 成为一个兼具“头脑、感官和运动”功能的完整系统, 因此人们称其为微机电系统 (micro-electro-mechanical systems, MEMS). MEMS 空间分辨率在 μm 量阶、时间分辨率在 μs 或更小量阶. 我们周围世界中许多重要现象和过程的基本机制, 正是在这个尺度发生的, 它介于人类感官系统可以分辨的尺度和分子尺度之间, 过去一直缺乏有效手段对其进行观测和控制. MEMS 技术的发展, 为感知和控制这个微小世界, 提供了一个很好的工具. 现有的 MEMS 装置, 已在人类的生活中和工作中发挥着积极作用. 例如, 基于 MEMS 技术的安全“气囊”, 已在

收稿日期: 2002-01-21, 修回日期: 2002-04-25

新一代汽车中广泛采用,有效地缓减和降低了交通事故中的人员伤亡。MEMS 制造技术还在不断地发展和完善,其应用领域正在迅速扩大。毫无疑问,它必将深刻地影响人类未来的发展。

现有 MEMS,如微型马达、传感器、泵、阀门等,特征长度达到 μm 量阶。随着纳米技术的发展,更微小的器械也在积极研制中。对于这么小的装置,当流动介质是气体时,稀薄气体效应影响显著。也就是说,气体不再具有连续介质的行为,而要表现出分子离散运动的特征。实验发现稀薄气体效应对 MEMS 的气动力、热有显著影响^[3],这使得普通尺寸装置的设计经验不能直接推广应用于 MEMS。

稀薄气体效应通常用 Knudsen 数表征

$$Kn = \lambda/L \quad (1)$$

其中 λ 是气体分子平均自由程, L 是流动特征长度。钱学森按照 Kn 数的大小,将流动划分为 4 个领域^[4]: 连续介质区 ($Kn < 0.01$), 滑流区 ($0.01 < Kn < 0.1$), 过渡区 ($0.1 < Kn < 10$) 和自由分子流区 ($Kn > 10$)。经典流体力学适用于连续介质区;在滑流区, Navier-Stokes 方程仍然成立,但是,物面边界条件需要考虑速度滑移和温度跳跃;对于过渡领域和自由分子流,连续介质假设和 Navier-Stokes 方程不再成立,必须采取分子气体动力学的观点和方法进行研究。

本文包括 6 节。第 2 节介绍有关微尺度气流的早期工作,第 3 节讨论微尺度气流的相似参数,第 4 节综述过渡领域流动的求解方法,包括 Boltzmann 方程、直接模拟 Monte Carlo(DSMC)方法和 IP 方法;第 5 节介绍典型微尺度气流统计模拟结果;第 6 节是总结。

2 有关微尺度气流的早期工作

微尺度气流的研究可以上溯到 20 世纪初。著名的工作有 Knudsen^[5] 平面槽道流动的质量流量实验和 Millikan^[6] 的油滴阻力系数实验。

1909 年,Knudsen 在平面槽道气体流动实验中发现,无量纲质量流量 $Q_M/\rho u^* h$ 的最小值出现在分子平均自由程 λ 与槽道高度 h 之比等于 1 附近, ρ 是气体密度, $u^* = \alpha v_m$, $v_m = \sqrt{2RT}$ 是最可几热运动速度, α 是一个常数。这个现象为后来的实验所证实^[7],但与 Navier-Stokes 预测的随 Kn 数增加单调下降有很大不同,因此被称为 Knudsen 佯谬。按照 Navier-Stokes 方程和槽道表面滑移边界条件

$$u_s = \frac{2 - \sigma}{\sigma} \lambda \left. \frac{du}{dn} \right|_s \quad (2)$$

在流向线性压力分布 $p = p_o(1 + \alpha x/h)$ 作用下,质量流量表达式 ($\sigma = 1$) 为

$$\frac{Q_M}{\rho u^* h} = \frac{2(Kn^{-1} + 6)}{15\sqrt{\pi}} \quad (3)$$

图 1 比较了式 (3) 与实验数据。随着 Kn 数增大,滑移 Navier-Stokes 解单调下降,没有最小值出现,与实验结果定性不同。分子统计模拟结果 (IP)^[8,9] 和线化 Boltzmann 方程数值解^[10] 都与实验很好地符合,进一步讨论见第 5 节。

在 1909~1923 年间, Millikan 进行了一系列精细实验,测量电子的电荷。实验采用挥发率很低的鲸油滴,将它暴露在 X 射线产生的离子中获得电荷。观测油滴经过两个平行的黄铜电容器平板之间距离所需的时间,即可获得其运动速度。影响油滴运动的因素包括电场力、重力和空气阻力。开始的时候, Millikan 利用 Stokes 阻力系数公式

$$C_D = 12/Re \quad (4)$$

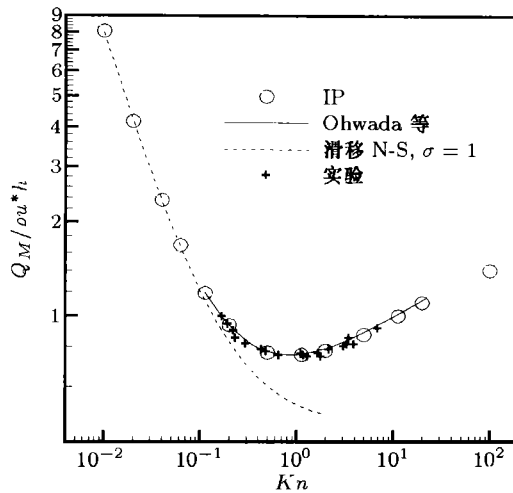


图1 平面槽道流动的无量纲质量流量与 Kn 数的关系^[9]

计算油滴遇到的空气阻力。当油滴直径小于某个值，根据油滴速度和式(4)推出的电子的电荷系统增大，这使 Millikan^[11] 认识到 Stokes 公式需要修正。Knudsen 和 Weber 给出的小球阻力系数经验表达式为^[12]

$$C_D = \frac{12}{Re} \cdot \frac{1}{1 + c_o Kn} \quad (5)$$

其中 $c_o = \alpha + \beta \exp(-\gamma/Kn)$, α, β, γ 是常数，这里 Knudsen 数和 Reynolds 数的定义分别为 $Kn = \lambda/a$, $Re = ua/\nu$, u 和 a 为油滴的速度和半径， λ 和 ν 为空气的平均自由程和动理学黏性系数。Millikan^[6] 利用油滴实验数据，确定了 $\alpha = 0.864$, $\beta = 0.29$, $\gamma = 1.25$ 。图2将实验拟合公式(5)与无滑移 Navier-Stokes 方程解(4)，滑移 Navier-Stokes 解和自由分子流解^[13]进行了比较。Stokes 公式(4)和自由分子流解，分别当 $Kn > 0.01$ 和 $Kn < 10$ 时，开始显著偏离实验曲线；通过引入表面滑移速度，Navier-Stokes 方程适用范围可以拓宽到滑流区 ($Kn < 0.1$)。

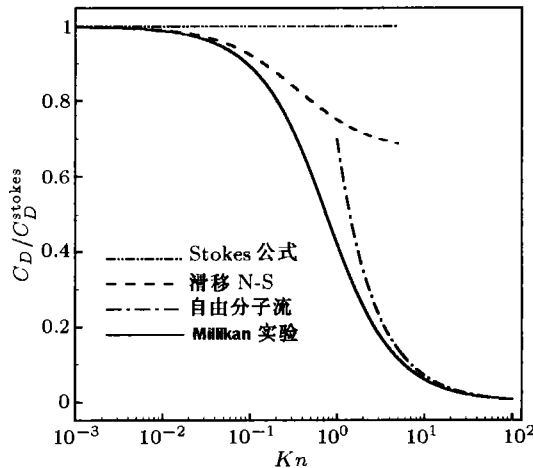


图2 圆球阻力系数与 Kn 数的关系

在过渡区和自由分子流区，平面槽道气流无量纲质量流量和小球阻力系数的滑移 Navier-Stokes 解与实验数据的显著差别甚至定性的不同表明连续介质假设不再成立。这反映了稀薄气体效应对气体运动特性的影响。MEMS 特征长度很小，介质为气体时，流动可能处于滑流区甚至过渡领域。以 Knudsen 和 Millikan 工作为代表的早期研究成果，对于当前 MEMS 关心的微

尺度气体内、外流动, 仍然有着重要价值.

3 微尺度气流的相似参数

按照分子动理论, 刚球模型下黏性系数的表达式为

$$\mu = 0.491\rho\bar{c}\lambda \quad (6)$$

其中 $\bar{c} = \sqrt{8RT/\pi}$ 为平均热运动速度. 钱学森利用方程 (6), 建立了 Kn 数与 Mach 数和 Reynolds 数的关系

$$Kn = \lambda/L = 1.255\sqrt{\gamma}Ma/Re \quad (7)$$

这里 γ 是比热比. 钱学森研究了大、小 Ma 数稀薄气流. 大 Ma 数情形是针对高空飞行的; 小 Ma 数情形的分析, 限于当时的技术水平, 还只是一个纯学术的研究, 然而正是当前 MEMS 所关心的. 针对稀薄气流, 钱学森还明确指出^[4]: “毫无疑问, 就所关心的流体本身而言, 特征参数仍然是气体动力学中 Mach 数和 Reynolds 数”. 这个结论, 对于目前广泛关注的 MEMS 中微尺度气流研究, 有现实的指导意义.

为了了解微尺度流动特点, 人们正在致力于发展 μm 尺度的测量途径. 如 Pong 等^[14] 发展的两代微流动系统来测量微槽道 (高为 $1.2\mu\text{m}$, 宽为 $40\mu\text{m}$, 长为 $3000\mu\text{m}$) 中的压力分布. 第一代系统有 4 个传感器, 第二代有 13 个传感器, 得到了微槽道中的压力分布. Shih 等人^[15] 用类似的系统得到了高为 $1.2\mu\text{m}$, 长为 $4000\mu\text{m}$ 的微槽道的压力分布. 他们的结果显示了压力分布沿轴向的非线性, 以及在较大 Kn 数下 Navier-Stokes 方程加滑移条件的不适用性. 这对于人们认识微槽道流动的特性起了很大作用.

然而, 由于 MEMS 尺寸很小, 一般的实验观测非常困难. 特征长度在 μm 量阶的气流特性是不是只能通过微型传感器测量? 可不可以通过增大尺寸但降低其中压力的途径来实验? 相似准则可以回答这个问题. 相似准则传统应用方式是, 在保持相似参数不变条件下, 把被观测物体 (如飞机、导弹), 按比例缩小, 以便风洞容纳. 如此获得的气动力、热数据, 一直是各种飞机、导弹设计的主要依据. 我们可以相反的方式应用相似准则进行 MEMS 气流的实验模拟. 将 MEMS 尺寸扩大, 但降低其中压力以保证模拟和实际 Ma 数和 Re 数的相同. 这样实验观测就容易多了.

由于特征尺寸很小, 微系统中的气体运动的稀薄气体效应显著, 因此连续介质假设和 Navier-Stokes 方程不再适用. 直接模拟 Monte Carlo (DSMC) 方法是模拟稀薄气流的有力工具 (见 4.2 节), 已在航天领域取得广泛成功. 但是, DSMC 方法模拟微尺度气流遇到统计散布的困难. 量阶为 0.1 m/s 的有用信息完全淹没在无规则热运动 (量阶为 10^3 m/s) 产生的背景噪声中. Hadjiconstantinou 和 Garcia^[16] 建议: 在保证可压缩效应可以忽略的范围内, 适当增大模拟 Ma 数, 以增加信噪比, 减小 DSMC 结果中的统计涨落. 这种做法实质是放弃 Ma 数模拟. 对于 MEMS 中感兴趣的滑流领域和过渡领域, Kn 数和 Ma 数 (分别为分子特征长度与速度, 流动特征长度与速度之比) 的相似都要保证, Hadjiconstantinou 和 Garcia^[16] 的建议违背了相似准则, 因此是不可行的.

以低速小球绕流为例. 在连续介质极限 $Kn \rightarrow 0$, $C_D = 12/Re$, 式 (5) 退化为 Stokes 公式; 在自由分子流极限 $Kn \rightarrow \infty$, $C_D \sim (ReKn)^{-1} \sim M^{-1}$. 这两种极限情况下, 相似参数只有一个, 分别为 Re 数和 Ma 数. 然而, 在滑流区和过渡领域 ($0.01 < Kn < 100$), 阻力系数由式 (5) 表达, 有两个相似参数: Re 数和 Kn 数. 图 2 显示的阻力系数单纯依赖 Kn 的关系, 是由

于 $C_D^{\text{Stokes}} = 12/Re$ 无量纲化的结果. 由于关系 (1), 相似参数也可以是 Kn 数和 Ma 数, 或 Re 数和 Ma 数. 后者是气体动力学常用的.

4 过渡领域流动的求解方法

对于过渡领域的微尺度气流, 比较简单的自由分子流理论和业已成熟的连续介质方法均不适用, 而不得不求解完全的 Boltzmann 方程, 或作为其等价的物理数学处理.

4.1 Boltzmann 方程

单组分气体的 Boltzmann 方程

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\mathbf{c}} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{4\pi} (f^* f_1^* - f f_1) c_r \sigma d\Omega dc \quad (8)$$

的仅有未知函数为有相空间密度意义的分子速度分布函数 $f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t)$, \mathbf{F} 为外力场. 一般情况下, f 是 7 个自变量的函数. 如果每一维布置 100 个网格, 就要求布置 10^{14} 个网格. 而且要合理地选择有限的速度上界, 使问题能够处理且不影响解的精度. Boltzmann 方程求解的难度, 还在于右端碰撞项的计算. 式 (8) 的右端第二项 ($-f f_1$) 代表碰撞引起的 \mathbf{c} 类分子数目的减少, 对于每一个 \mathbf{c} 的相空间点要求出对另一个相空间 \mathbf{c}_1 的所有点的求和. 式 (8) 的右端第一项代表逆碰撞引起的 \mathbf{c} 类分子的增加, 即要对 \mathbf{c}, \mathbf{c}_1 的所有逆碰撞求和. 而且每一项要对碰撞的所有参数求和. 所以 Boltzmann 方程的求解在方法上主要在于对碰撞积分计算的处理. 已经发展了许多解 Boltzmann 方程的方法, 这里仅限于讨论一部分针对低速流动的解法.

Boltzmann 方程在平衡态下的解 Maxwell 分布的存在, 使得可以寻求这个解附近的线性 Boltzmann 方程的解, 这当然就使问题限于低速的流动. 对于稍稍偏离于静止的气体, 其速度分布函数 $f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t)$ 与 Maxwell 分布 f_0 的差别为小量

$$f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t)/f_0 = 1 + \varphi(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t) \quad (9)$$

将式 (9) 代入 Boltzmann 方程 (8)(无外力场时), 并保留 φ 的一阶量, 得到

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + c_i \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} = \int f_{01}(\rho^* + \rho_1^* - \varphi - \varphi_1) c_r \sigma_T d\Omega dc_1 \quad (10)$$

Grad^[17] 和 Cercignani^[18] 研究了右端项进一步化简的问题. Sone 等^[19~21] 发展了有效的数值方法求解这简化的线性 Boltzmann 方程, 得到了一些低速 (剪切和热蠕变问题, Poiseuille 流和 Couette 流等) 问题的准确的数值解.

Boltzmann 方程右端碰撞项的复杂性还使有的研究者建议用简化的碰撞项来代替它, 最著名的模型方程是由 Bhatnagar, Gross 和 Krook^[22] 提出来的

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} = \nu_f (f_e - f) \quad (11)$$

其中 f_e 是局部平衡分布, ν_f 是碰撞频率, 并称为 BGK 方程. BGK 方程因其简单在过渡领域被广泛应用. 有一类有实际意义的小扰动问题, 是用 BGK 模型而不是用 Boltzmann 方程求解的. 但 BGK 方程终究是用一个近似项代替了有坚定物理基础的准确项. 最近, 对壁温突升引起的流动和 Rayleigh 问题用直接模拟 Monte Carlo 方法进行了模拟^[23,24], 并与用 BGK 方程的准确数值解进行了比较, 表明在远离平衡时, BGK 方程是不准确的.

4.2 DSMC 方法

Bird^[25,26] 提出的直接模拟 Monte Carlo (DSMC) 方法, 最早模拟均匀气体中的松弛问题和激波结构, 后来发展到模拟二维、三维几何复杂问题, 并包含了流动中的复杂的物理化学过程. 分子初始位形布置、碰撞和碰撞后果 (包括分子速度的改变) 都靠随机数的产生和变换决定. 同时 DSMC 方法以少量的模拟分子代表大量的真实分子. 方法的关键之点是在一个时间步长 Δt 内将分子的运动和碰撞解耦, 而依据分子动理论的分析来选择有代表性的碰撞以保证模拟中的运动和碰撞与真空流动中一致. DSMC 方法和 Boltzmann 方程遵循相同的物理推理, 均要求分子混沌和稀疏气体的假设. DSMC 方法不依赖逆碰撞的存在, 可以应用于三体碰撞的化学复合反应的情况. 在 DSMC 方法中, 引入真实的分子表面相互作用模型以及处理伴随有化学反应和辐射的气体流动是容易的, 同时 DSMC 方法可以较容易地模拟直到三维的复杂流场. 尤其是 DSMC 方法在模拟流动宏观总体效应^[27] 和流场的分布函数一级的精细结构^[28] 方面, 都经受了严格的实验检验, 使其地位和作用得到了流体力学界的确认.

作为一种统计方法, DSMC 面临的基本困难是计算宏观物理量中的统计散布. 统计散布的起源是无规则的热运动速度. 统计散布的量阶为 v_m/\sqrt{N} , 其中 $v_m = \sqrt{2RT}$ 为最可几热运动速度, N 为统计样本个数. 为获得统计意义下收敛的计算结果, 统计散布的量阶必须小于宏观物理量本身. 微尺度槽道实验中, 入口处的气流速度约为 0.2 m/s. 室温下氮气的最可几热运动速度约为 400 m/s. 为将 v_m/\sqrt{N} 的量阶减小到 0.02 cm/s, 统计样本个数需要达到 4×10^8 . 如此大样本数所对应的计算量, 是目前计算机无法承受的. 因此, 一些研究者^[29] 认为 DSMC 方法不适合处理 MEMS 中微尺度气流. 这种看法也符合当前情况. 以微槽道气流为例, 有关的实验结果已有大量报道, 而 DSMC 结果仅限于超声速甚至高超声速情况^[30,31], 与实验条件相去甚远. 国际上对这个问题十分重视, 认为是对统计模拟的挑战^[29].

4.3 IP 方法

DSMC 方法以分子作为研究对象, 每个分子的质量、动量和能量输运通过分子运动实现, 这样的输运方式适合于全部流动领域. 但是, 由于计算机中追踪的模拟分子数目有限, 因此一个模拟分子代表着数目巨大的真实分子, 分子个别的、无规则行为, 会引起宏观物理量计算结果的统计涨落. 连续介质方法, 如 Navier-Stokes 方程, 以大量分子的集体行为作为研究对象. 这些集体行为通常由宏观密度、速度和温度表征, 并通过本构关系输运. 宏观物理量不受分子个别的、无规则行为的影响, 但是现有的质量、动量和能量输运本构关系只在连续介质区适用. 我们提出的信息保存方法 (information preservation method, IP)^[8,9] 建议赋予 DSMC 方法中每个模拟分子 2 个速度: 一个是分子速度, 用来计算分子运动轨迹, 计算规则与 DSMC 方法相同; 另一个是信息速度, 对应于单个模拟分子所代表的大量真实分子的集体速度, 宏观物理量如速度、表面剪应力等可通过统计平均信息速度获得. IP 方法的实质是利用分子运动输运大量分子的集体行为, 下面以多维流动为例, 介绍其实现步骤^[8,9,32~34]:

(1) 赋予每个模拟分子信息速度 u_i , 密度 ρ_i , 温度 T_i 和热运动速度 c_i . 赋予每个网格宏观速度 U_ℓ , 密度 ρ_ℓ 和温度 T_ℓ .

(2) U_ℓ , ρ_ℓ 和 T_ℓ 的初值, 根据初始流动条件确定. 该网格中所有模拟分子的 u_i , ρ_i 和 T_i 的初值, 分别等于 U_ℓ , ρ_ℓ 和 T_ℓ .

(3) 模拟分子的运动由热运动速度决定, 具体算法与 DSMC 方法^[25,26] 相同.

(4) 在一个时间步长 Δt , 由于下列原因, 模拟分子的信息速度发生变化:

① 与物面碰撞. 根据大量真实分子物面反射的统计行为决定反射后的信息速度. 例如, 对

于漫反射表面, 反射后信息速度应等于物面速度.

②对于从外边界进入计算区域的模拟分子, 信息速度根据边界条件确定.

③外力加速. 若作用在第 ℓ 个网格的外力为

$$\mathbf{F}_\ell = \sum_{k=1}^{2\phi} p_\ell^k A_\ell^k \mathbf{n}_\ell^k + \mathbf{f}_\ell^k V_\ell \quad (12)$$

其中 p_ℓ^k 是气体作用在该网格第 k 个表面的压力, A_ℓ^k 和 \mathbf{n}_ℓ^k 分别为该表面的表面积和法向量, ϕ 是所考虑问题维数, \mathbf{f}_ℓ^k 为该网格受到的体积力, V_ℓ 为网格体积. p_ℓ^k 由拥有 k 表面的网格的压力求出, 网格压力利用理想气体状态方程和存储的 ρ_ℓ 和 T_ℓ 求出. 外力引起的加速度为

$$\mathbf{a}_\ell = \frac{\mathbf{F}_\ell}{\rho_\ell V_\ell} \quad (13)$$

它对网格中每个模拟分子速度增量贡献为 $\mathbf{a}_\ell \Delta t$.

④与其它模拟分子碰撞. 采用一种简单方式, 分配 2 个模拟分子碰撞后的信息速度

$$\mathbf{u}'_{i,1} = \mathbf{u}'_{i,2} = \frac{m_1 \mathbf{u}_{i,1}^* + m_2 \mathbf{u}_{i,2}^*}{m_1 + m_2} \quad (14)$$

这里上标 * 和 ' 分别表示碰撞前和碰撞后. 另一种分配方式保持信息速度在碰撞过程中不变. 这两种方式模拟 Couette 流动, Poiseuille 流动和 Rayleigh 流动给出相同结果. 这是容易理解的, 因为按照描述分子相互作用的变径刚球模型^[26], 在质心坐标系下, 碰撞后热运动速度的散射是各向同性的, 这使得可满足动量守恒的不同格式. 在统计意义上, 具有碰撞后动量分配的相同性.

(5) 每个时间步长, 更新 \mathbf{U}_ℓ , ρ_ℓ 和 T_ℓ

$$\mathbf{U}_\ell = \sigma \mathbf{U}_{\text{new}} + (1 - \sigma) \mathbf{U}_{\text{old}} \quad (15)$$

其中 σ 是松弛因子, 介于 0 和 1 之间, \mathbf{U}_{old} 是上一个时间步长 \mathbf{U}_ℓ 的值, \mathbf{U}_{new} 是当前网格所有模拟分子信息速度的算术平均值

$$\mathbf{U}_{\text{new}} = \frac{\sum_{k=1}^N m_k \mathbf{u}_k}{\sum_{k=1}^N m_k} \quad (16)$$

其中 m 是分子质量, N 是样本个数

$$\rho_\ell = \rho_{\text{old}} + \Delta\rho \quad (17)$$

这里 ρ_{old} 是上一个时间步长的网格密度, $\Delta\rho$ 是当前时间步长内密度变化量. 根据连续性方程, $\Delta\rho$ 可以写成

$$\Delta\rho = -\frac{\Delta t}{V_\ell} \sum_{k=1}^{2\phi} \rho_\ell^k \mathbf{U}_\ell^k \mathbf{n}_\ell^k A_\ell^k \quad (18)$$

其中 ρ_ℓ^k 和 \mathbf{U}_ℓ^k 分别为穿过网格 ℓ 第 k 个表面的宏观密度和速度.

更新 T_ℓ 的技术还在发展中^[35,50], 目前采用等温假设. 低速流动可以分为有、无外界加热两种. 等温假设适合于无外界加热情形, 此分析结果得到最近低速微槽道稀薄气流实验结果的支持^[14,15,47~49], 当前 MEMS 中遇到的气体流动多属于这种情况.

(6) 更新网格 ℓ 中所有模拟分子的信息密度

$$\rho_i = \rho_\ell \quad (19)$$

(7) 通过信息量的统计平均, 计算宏观物理量. 作用在一个面积为 ΔA_w 的表面元上的剪应力和压力分别为

$$\begin{aligned} \tau_w &= \sum_{j=1}^{N_w} m_j \gamma (u_{\tau,j}^{\text{in}} - u_{\tau,j}^{\text{re}}) / (t_s \Delta A_w) \\ p_w &= \sum_{j=1}^{N_w} \rho_j R T_j^{\text{in}} / N_w \end{aligned} \quad (20)$$

其中 N_w 是采样时间 t_s 内撞击该面元所有模拟分子的总数, γ 是每个模拟分子所代表的真实分子数, 下标 τ 表示面元切向, 上标 in 和 re 分别表示撞击面元前后的值. 每个网格宏观速度和密度分别等于 t_s 内所有样本的信息速度和密度的算术平均.

(8) 对于定常流动, 重复步骤 (3)~(6) 直到流动达到定常. 然后重复步骤 (3)~(7) 进行采样; 对于非定常流动, 在全部演化时间内重复步骤 (2)~(7)

IP 方法已成功应用于多种微尺度低速气流, 如经典的 Couette 流动, Poiseuille 流动, Rayleigh 问题^[8,9], 以及 NACA 0012 机翼绕流^[32,35], 平板绕流^[36], 微槽道流动^[33,34], 方腔流动^[37] 等, 模拟结果介绍见第 5 节. IP 方法引起了国际同行的兴趣和重视, 例如, 最近出版的 Karniadakis 和 Beskok^[38] 微流动专著中专节介绍了 IP 方法.

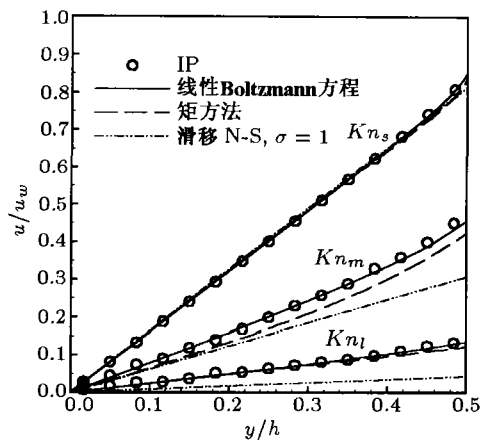
5 微尺度气流的统计模拟

5.1 单方向流动

Couette 流动是由两个相对运动的无限大平行平板表面剪应力驱动的单方向定常流动. 文献 [8, 9] 给出了用 IP 方法获得的 Couette 流动的无量纲化速度剖面 and 表面剪应力等, 并与 Sone 等^[39] 的线性 Boltzmann 方程数值解, Gross & Ziering^[40] 的矩方法解以及滑移 Navier-Stokes 方程和自由分子流准确解进行了比较. IP 方法给出的速度剖面 and 表面剪应力, 在自由分子流和连续介质区与准确解吻合, 在过渡领域与线性 Boltzmann 解符合得很好, 见图 3. 由图可知, 随着 Kn 数增大, 固壁表面滑移速度变得显著, 滑移 Navier-Stokes 速度剖面显著偏离 IP 和 Boltzmann 结果, 见图 3(a). 以自由分子流值无量纲化的表面剪应力, 随 Kn 数增大, 变化显著, 且滑移 Navier-Stokes 剪应力与 IP 和 Boltzmann 结果的符合一直延续到过渡领域, 见图 3(b).

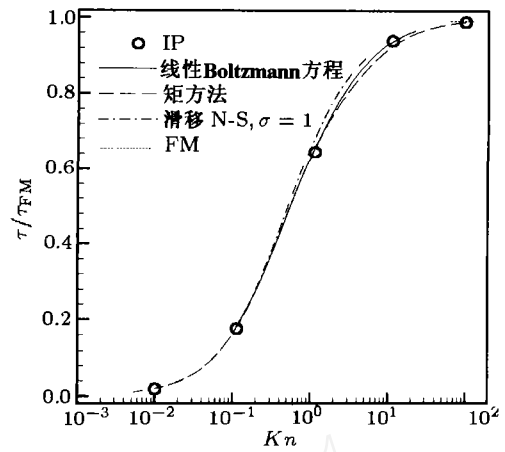
IP 方法、线性 Boltzmann 方程、滑移 Navier-Stokes 方程和实验获得的 Poiseuille 流动质量流量与 Kn 数 (分子自由程与槽道宽度之比) 的关系已在图 1 中给出^[8,9]. IP 计算令人满意地再现了 Knudsen 最小值, 在过渡领域与 Dong^[7] 的实验数据和 Ohwada 等^[10] 人的线性 Boltzmann 解吻合, 在滑流区与滑移 Navier-Stokes 解吻合, 显示了 IP 方法处理全部流动领域的的能力.

图 4 比较了 IP 方法、DSMC 方法、矩方法^[41]、滑移 Navier-Stokes 方程^[42] 和自由分子流理论给出的非定常 Rayleigh 流动的无量纲化速度剖面 and 表面剪应力随时间的变化^[8,9]. IP 速度剖面 and 表面剪应力, 在 $t \ll \tau_c$ (分子平均碰撞时间) 和 $t \gg \tau_c$ 时, 分别得到自由分子流和滑移 Navier-Stokes 解支持; 在过渡领域 ($t = 5\tau_c$), 与 DSMC 结果符合得很好. 但是 DSMC 结果所需时间, 在一个 DEC Alpha 1 000 A 服务器上, 约为 180 CPU h (仍有可见的统计涨落), IP 计算仅需 23 s. 从这里可以看到 IP 方法的价值.



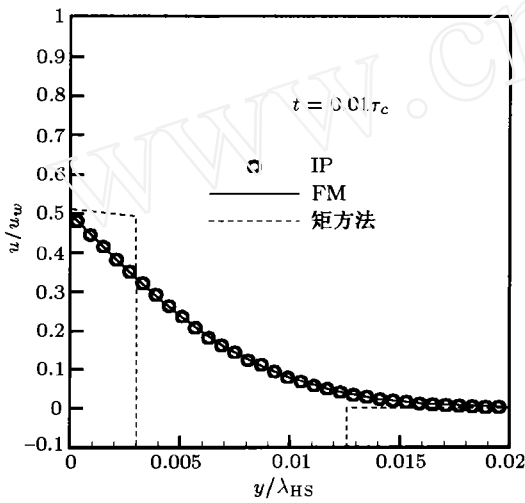
$Kn_s = 0.2/\sqrt{\pi}$, $Kn_m = 2/\sqrt{\pi}$, $Kn_l = 20/\sqrt{\pi}$

(a) 上半槽宽的速度剖面

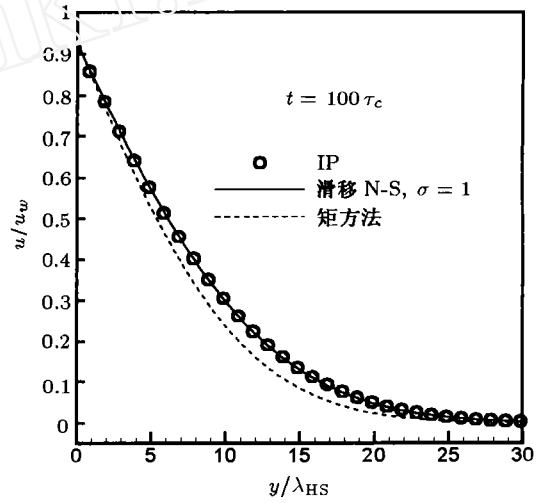


(b) 无量纲化表面剪应力与 Kn 数的关系

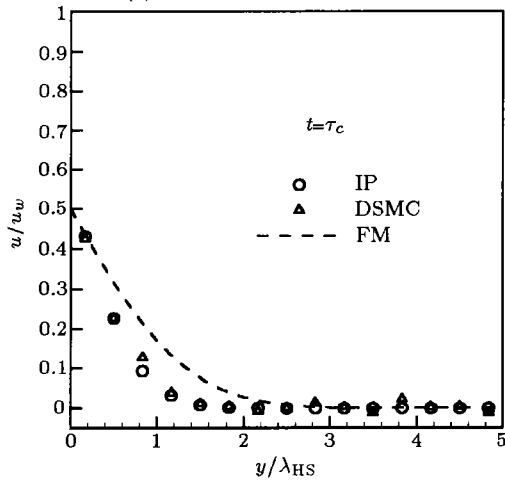
图 3 Couette 流动的 IP 方法, 线性 Boltzmann 方程, 矩方法和滑移 Navier-Stokes 方程解的比较 [8,9]



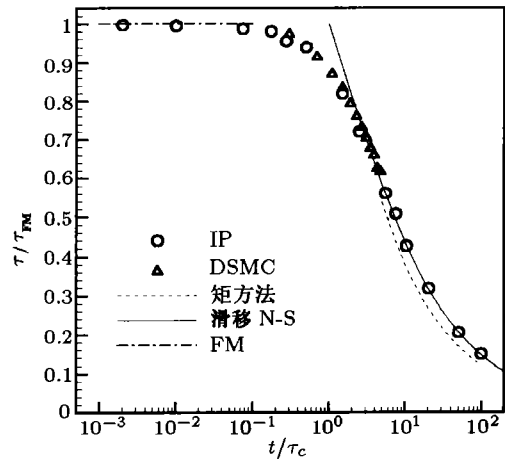
(a) 自由分子流区的速度剖面



(b) 连续介质区的速度剖面



(c) 过渡领域的速度剖面

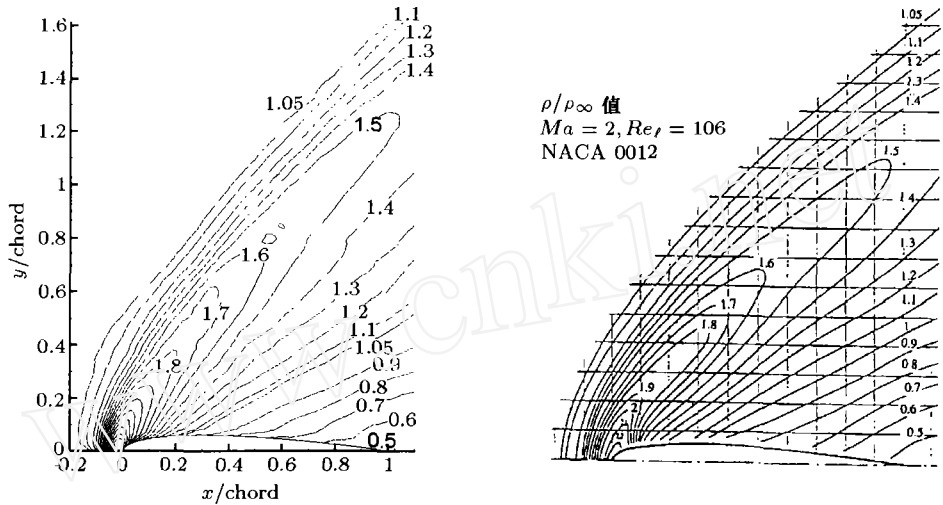


(d) 阻力系数随时间的变化

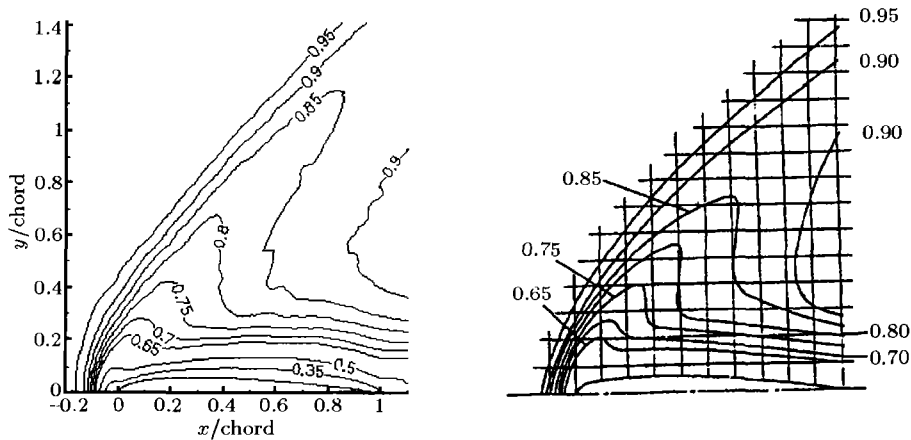
图 4 IP 方法给出的 Rayleigh 流动无量纲化速度剖面和表面剪应力与自由分子流准确解 (FM), 滑移 Navier-Stokes 解, 矩方法解和 DSMC 结果的比较 [8,9]

5.2 NACA 0012 机翼绕流

文献 [32] 利用 IP 方法, DSMC 方法和滑移 Navier-Stokes 方程数值模拟了超声速 ($Ma=2.0$), 跨声速 ($Ma=0.8$) 和低亚声速 ($Ma=0.1$) 的 NACA 0012 机翼绕流. 在超、跨声速情况, 有 Allegre 等 [43,44] 的无量纲化密度场和速度场的测量数据可以比较. 为便于 Navier-Stokes 计算, 基于机翼弦长 (chord) 定义的 Kn 数处于近连续介质区. 图 5 比较了超声速情况下 DSMC 方法、滑移 Navier-Stokes 方程和实验给出的速度场和密度场 [32], 3 种结果彼此相符, 细节上 DSMC 与测量数据符合得更好一些 (如 V/V_∞ 等值线位置).



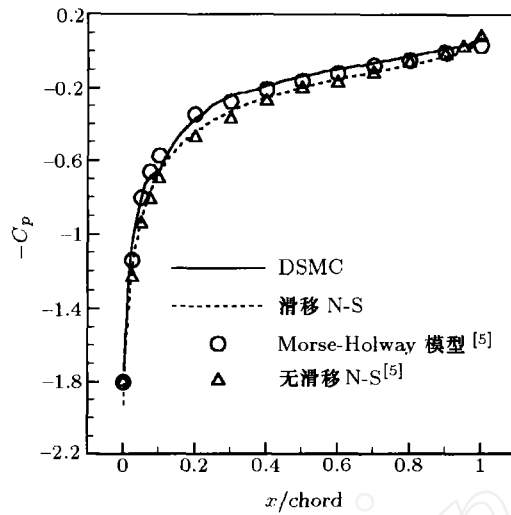
(a) 无量纲化密度场等值线 左: DSMC; 右: 实验



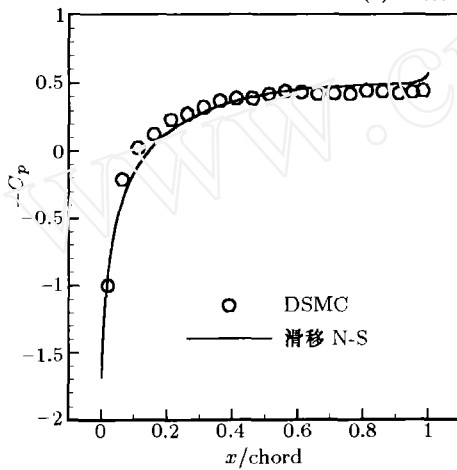
(b) 无量纲化速度场等值线 左: DSMC; 右: 实验

图 5 NACA 0012 翼型绕流 ($Ma = 2, Re = 108$) 流场等值线的 DSMC 结果与实验数据的比较 [32]

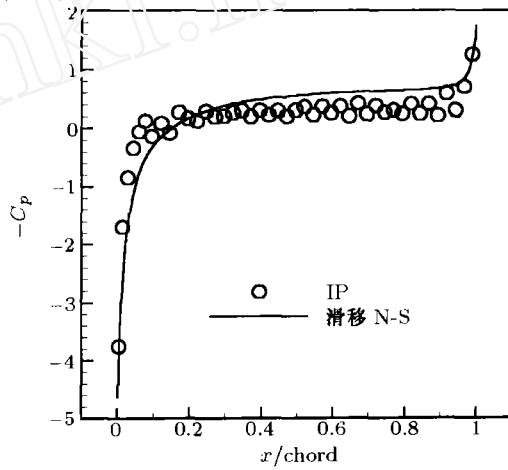
图 6 给出了不同来流 Ma 数的机翼表面压力系数分布 [32], DSMC 和滑移 Navier-Stokes 解相互符合. 由于压缩效应, 压力系数在翼尖陡增, 这与预期相同. 令人感兴趣的是后缘点的压力的下降, 这与低 Re 数流动黏性主导作用有关. 这种现象在高 Re 数流动中未曾出现, 由于膨胀后的重新压缩, 高 Re 数流动的后缘点压力会增加. 这表明简单按比例地缩小机翼, 不能提供微小飞行器所需的优化气动性能.



(a) $Ma_{\infty} = 2, Kn_{\infty} = 0.026$



(b) $Ma_{\infty} = 0.8, Kn_{\infty} = 0.014$



(c) $Ma_{\infty} = 0.1, Kn_{\infty} = 0.013$

图 6 NACA 0012 翼型绕流的表面压力分布 [32]

5.3 平板绕流

绕平板前缘的流动，在距离前缘足够小的区域内，气体平均自由程总会与流场尺度可比，是典型的稀薄气体流动问题。图 7，图 8 比较了 IP 方法和 DSMC 方法获得的跨声速 ($Ma=0.8, Kn=0.01$) 和低亚声速 ($Ma=0.1, Kn=0.01$) 有限平板绕流无量纲化密度等值线 [35]。DSMC 和 IP 计算的样本数皆为 800 000。两种情况，IP 密度等值线均轮廓分明。当 $Ma=0.8$ ，密度场变化幅度较大，虽然 DSMC 结果有显著统计涨落，但趋势可以辨别，与 IP 结果一致； Ma 数降到 0.1，DSMC 结果被统计噪声淹没，未能给出有意义的结果。

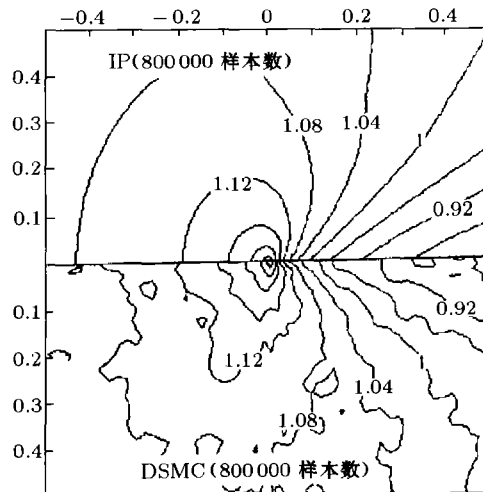


图 7 跨声速平板绕流 ($Ma = 0.8, Kn = 0.01$) 无量纲化密度场的 IP 和 DSMC 结果的比较 [35]

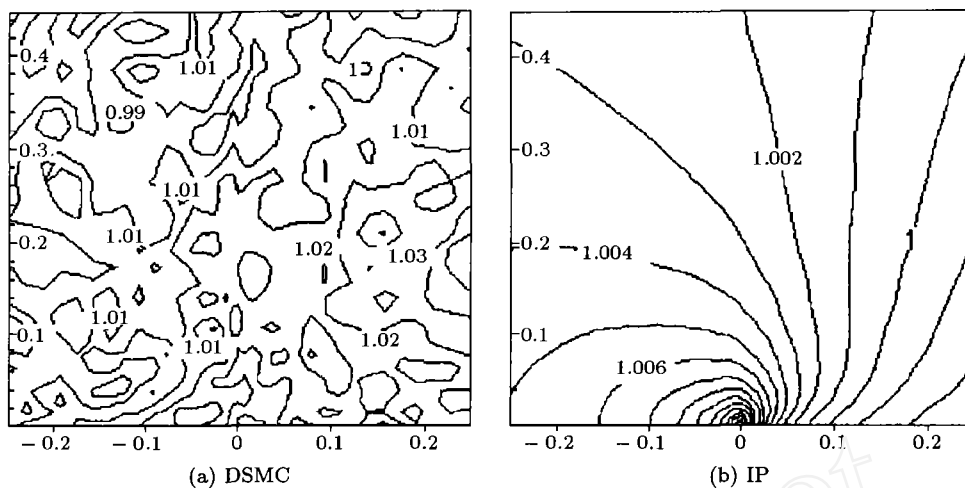


图 8 低亚声速平板绕流 ($Ma = 0.1, Kn = 0.01$) 无量纲化密度场的 IP 和 DSMC 结果的比较 [35]

最近, Sun, Boyd 和 Candler^[52] 比较了不同方法给出的二维平板绕流阻力系数, 见图 9. IP 计算结果与 Schaaf 等^[53] 和 Janour^[54] 分别得到的可压缩和不可压缩条件下的实验数据的出色相符, 在总体量上证明了 IP 计算的正确性.

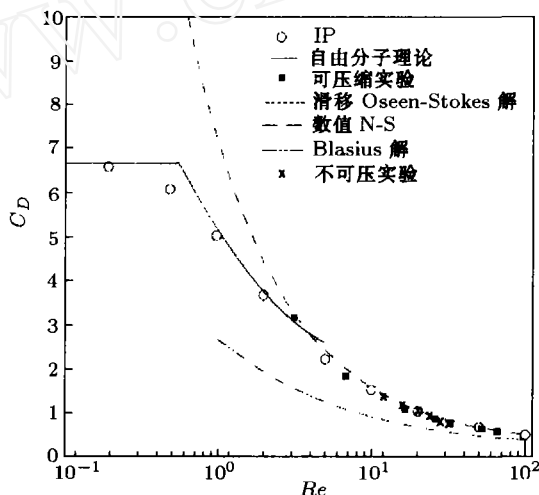


图 9 平板绕流主楼阻力系数随 Reynolds 数的变化 [52]

5.4 微槽道流动

实验条件微槽道气流的统计模拟被认为是一个挑战^[31,3]. 模拟困难在于气流速度很小 (入口处约为 20 cm/s), 槽道很长 (约为分子平均自由程的 $10^4 \sim 10^5$ 倍)、入口和出口边界条件不易处理等. 由于这些困难, 有些研究者^[29,31] 认为以 DSMC 方法为代表的统计模拟途径尚不具备处理实际 MEMS 气体流动的能力.

IP 方法的提出和发展, 为解决上述问题提供了有效途径. 文献 [33] 利用 IP 方法尝试模拟了一种微槽道气流实验条件^[14]: 槽道长 $3000 \mu\text{m}$, 高 $1.2 \mu\text{m}$, 实验气体为室温氮气, 入口压力为 20 psig ($x \text{ psig} = (6.89 \times 10^3 x + 1.01 \times 10^5) \text{ Pa}$), 出口压力为 101.325 kPa (1 atm). IP 给出的流向压力分布与 Pong 等^[14] 人的测量数据符合. 最近, 谢冲等^[34,45,46] 利用 IP 方法系统地研究了微槽道气流, 并与 Pong 等, Shih 等, Arkilic 等^[14,15,47~49] 的实验数据进行了全面比较. 在不同入口压力条件下, IP 方法获得的流向压力分布与 Pong 等^[14] 利用第一代压力测量系统得到数据的比较, 见图 10. IP 方法与 Shih 等^[15] 人利用第二代压力测量系统得到的数据的比较, 见

图 11(a). 计算与实验的比较令人满意. Shih 等^[15] 还测量了微槽道气流的质量流量, 实验保持出口压力为 101.325 kPa (1 atm), 改变入口压力, 测量数据很好地支持 IP 的计算结果, 见图 11(b). IP 方法对微槽道气流的成功模拟显示其处理实际 MEMS 气流的能力.

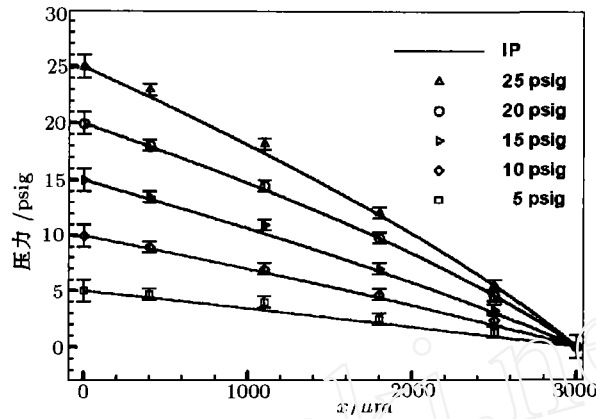
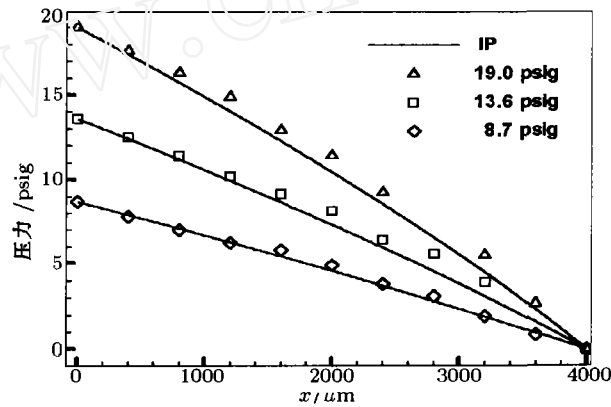
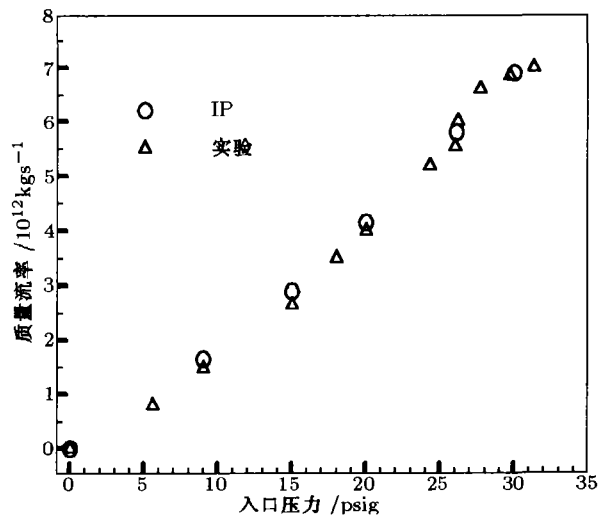


图 10 微槽道流向压力分布 IP 模拟结果与 Pong 等人实验数据的比较^[34]



(a) 流向压力分布



(b) 质量流量随入口压力的变化

图 11 微槽道质量流量 IP 模拟结果与 Shih 等人实验数据的比较^[34]

$$(x \text{ psig} = (6.89 \times 10^3 x + 1.01 \times 10^5) \text{ Pa})$$

6 总 结

MEMS 中的气体流动, 由于特征长度很小, 经常处于滑流区甚至过渡领域, 稀薄气体效应变得重要, 其行为与基于连续介质假设的经典气体动力学的预测, 有着定量甚至定性的不同, 因此需要采取分子气体动力学的观点和方法进行研究。

MEMS 中气体运动速度量阶通常为 1 m/s , 属于低 Ma 数稀薄气体流动。虽然低 Ma 数连续介质气流只有一个相似参数 Re 数, 但是滑流区和过渡领域的稀薄气流有两个相似参数: Kn 数和 Ma 数。它们分别代表着分子特征长度和速度与流动特征长度和速度之比。由方程 (6), 相似参数可以是 Kn 数和 Ma 数, 或 Re 数和 Ma 数, 后者是气体动力学常用的。作为实验力学基石的相似准则, 也适用于微尺度气流, 因此可以考虑采取增大几何尺寸、减小压力的方法, 做为观测 MEMS 流动特征的另一途径。

对于低 Ma 数稀薄气流, DSMC 方法给出的宏观物理量面临着难以克服的统计涨落。为解决这个问题, 我们提出了 IP 方法, 它结合了粒子模拟和连续介质模拟的优点, 已成功模拟了多种微尺度气流。对于经典问题如定常 Couette 流动、Poiseuille 流动和非定常 Rayleigh 流动, IP 结果在连续介质区和自由分子流区与准确解吻合, 在滑流区和过渡领域与实验数据或 Boltzmann 数值解符合得很好。对于 MEMS 实际相关的问题, 如微槽道气流, IP 预测与实验数据的比较也令人满意。在尽可能多的流动条件下将 IP 模拟结果与实验数据和 DSMC 结果进行细致比较仍有必要。在流场物理内容方面, 将 IP 方法推广到有温度变化的流场^[35,36,50]和更复杂的情况如等离子流场^[51], 目前尚在尝试阶段, 有待进一步的深入工作。此外, IP 方法理论基础的细致论证也将有助于其完善和推广。

参 考 文 献

- 1 Feynman R P. There's plenty of room at the bottom. *Journal of Microelectromechanical Systems*, 1992, 1: 60~66
- 2 Fan L S, Tai Y C, Muller R S. Integrated movable micromechanical structures for sensors and actuators. *IEEE Trans Electron Devices*, 1988, 35: 724~730
- 3 Ho C M, Tai Y C. Micro-electro-mechanical systems (MEMS) and fluid flows. *Ann Rev Fluid Mech*, 1998, 30: 579~612
- 4 Tsien H S. Superaerodynamics, Mechanics of rarefied gases. *J Aeronautical Sciences*, 1946, 13: 653~664
- 5 Knudsen M. *Ann Phys*, 1909, 28: 75
- 6 Millikan R A. The general law of fall of a small spherical body through a gas, and its bearing upon the nature of molecular reflection from surfaces. *Phys Rev*, 1923, 22: 1~23
- 7 Dong W. University of California Report UCRL-3353, 1956
- 8 Fan J, Shen C. Statistical simulation of low-speed unidirectional flows in transition regime. In: *Rarefied Gas Dynamics*, 1998, 2: 245~252
- 9 Fan J, Shen C. Statistical simulation of low-speed rarefied gas flows. *Journal of Computational Physics*, 2001, 167: 393~412
- 10 Ohwada T, Sone Y, Aoki K. Numerical analysis of the Poiseuille and thermal transpiration flows. *Phys Fluids A*, 1989, 1: 2042~2049
- 11 Millikan R A. The isolation of an ion, a precision measurement of its charge, and the correction of Stokes's law. *Phys Rev*, 1911, 32: 349~397
- 12 Knudsen M, Weber S. Luftwiderstand gegen die langsame bewegung kleiner kugeln. *Ann Phys*, 1911, 36: 981~984
- 13 Epstein P S. On the resistance experienced by spheres in their motion through gases. *Phys Rev*, 1923, 23: 710~733

- 14 Pong K C, Ho C M, Liu J Q, et al. Nonlinear pressure distribution in uniform microchannels. *ASME-FED*, 1994, 197: 51~56
- 15 Shih J C, Ho C M, Liu J Q, et al. Monatomic and polyatomic gas flow through uniform microchannels. *ASME-DSC*, 1996, 59: 197~203
- 16 Hadjiconstantinou N G, Garcia A L. Statistical error in particle simulations of low Mach number flows. In: Proceedings of the First MIT Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics, Elsevier, June 2001
- 17 Grad H. Asymptotic theory of the Boltzmann equation. In: *Rarefied Gas Dynamics*, 1963, 1, 26~59
- 18 Cercignani C. *The Boltzmann Equation and its Applications*. New York: Springer-Verlag, 1988
- 19 Sone Y, Ohwada T, Aoki K. Temperature jump and Knudsen layer in a rarefied gas over a plane wall. *Phys Fluids A*, 1989, 1: 363~370
- 20 Sone Y. Continuum gas dynamics in the light of kinetic theory and new features of rarefied gas dynamics. In: *Rarefied Gas Dynamics*, 1996. 3~24
- 21 Sone Y. Flows induced by temperature fields in a rarefied gas and their ghost effect on the behavior of a gas in the continuum limit. *Ann Rev Fluid Mech*, 2000, 32: 779~811
- 22 Bhatnagar P L, Gross E P, Krook M. A model for collision processes in gases. *Phys Rev*, 1954, 94: 511~525
- 23 Shen C, Xu X, Hu Z, Wu W. Transient motion of rarefied gas caused by heat addition. *Progress in Astronautics and Aeronautics*, 1994, 159: 234~242
- 24 Shen C, Yi Z Q. Direct numerical test of the BGK model by the DSMC method. *Acta Mechanica Sinica*, 2000, 16: 133~140
- 25 Bird G A. *Molecular Gas Dynamics*. Oxford: Clarendon Press, 1976
- 26 Bird G A. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford: Clarendon Press, 1994
- 27 Bird G A. Application of the DSMC method to the full shuttle geometry. AIAA paper 90-1692, 1990
- 28 Pham-Van-Diep G C, Erwin E A, Muntz E P. Nonequilibrium molecular motion in a hypersonic shock wave. *Science*, 1989, 245: 624~626
- 29 Oran E S, Oh C K, Cybyk B Z. Direct simulation Monte Carlo: recent advances and application. *Ann Rev Fluid Mech*, 1998, 30: 403~441
- 30 Oh C K, Oran E S, Sinkovits R S. Computations of high-speed, high Knudsen number micro-channel flows. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 1997, 12: 497~505
- 31 Nance R P, Hash D, Hassan H A. Role of boundary conditions in Monte Carlo simulation of MEMS devices. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 1997, 11: 447~449
- 32 Fan J, Boyd I D, Cai C P, Hennighausen K, Candler G V. Computation of rarefied gas flows around a NACA 0012 airfoil. *AIAA J*, 2001, 39: 618~626
- 33 Cai C P, Boyd I D, Fan J, Candler G V. Direct simulation methods for low-speed micro-channel flows. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 2000, 14: 368~378
- 34 谢冲, 樊菁, 沈青. 微槽道气体流动. *计算物理*, 2002, (5)
- 35 Sun Q H, Boyd I D, Fan J. Development of an information preservation method for subsonic, micro-scale gas flows. In: *Rarefied Gas Dynamics*, 2000. 547~553
- 36 Sun Q H, Boyd I D, Fan J. Development of particle methods for computing MEMS gas flows. In: IMECE 2000 MicroFluidics Symposium, Orlando, November 2000
- 37 Jiang J E, Fan J, Shen C. Statistical simulation of Micro cavity flows. In: The 23rd International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Whittler, July 20~25, 2002
- 38 Karniadakis G E, Beskok A. *Micro Flows: Fundamental and Simulation*. New York: Springer, 2002
- 39 Sone Y, Takata S, Ohwada T. Numerical analysis of the plane Couette flow of a rarefied gas on the basis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules. *European J Mech, B/Fluids*, 1990, 9: 273~288
- 40 Gross E P, Ziering S. Kinetic theory of linear shear flow. *Phys Fluids*, 1958, 1: 215~224
- 41 Gross E P, Ziering S. Kinetic theory of impulsive motion of an infinite plane. *Phys Fluids*, 1958, 1: 318~328
- 42 沈青. *稀薄气体动力学*. 北京: 国防工业出版社, 2002
- 43 Allegre J, Raffin M, Lengrand J C. Experimental flowfields around naca 0012 airfoils located in subsonic and supersonic rarefied air streams. In: Bristeau M O, et al, eds. *Numerical Simulation of Compressible Navier-Stokes Flows*, Friedr. Vieweg & Sohn, 1985. 59~68

- 44 Allegre J, Raffin M, Gottesdient L. Slip effect on supersonic flowfields around NACA 0012 airfoils. In: Boffi V, Cercigani C, eds. *Rarefied Gas Dynamics*, 1986. 548~557
- 45 谢冲, 樊菁, 沈青. 微槽道流动的直接统计模拟. 见: 中国工程热物理学会传质传热学术会议论文集, 2000年, 济南. 388~390
- 46 Xie C, Fan J, Shen C. Rarefied gas flows through micro-channels. In: *The 3rd International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, Whitler, July 20~25, 2002
- 47 Arkilic E B, Breuer K, Schmidt M A. Gaseous slip flow in long micro-channels. *MicroElectroMechanical Systems*, 1997, 6: 167~178
- 48 Arkilic E B. Measurement of the mass flow and tangential momentum accommodation coefficient in silicon microchannels. [Ph.D. thesis], MIT, FDRL TR 97-1
- 49 Arkilic E B, Schmidt M A, Breuer K S. Measurement of the TMAC in silicon microchannels. In: Shen C, ed. *Rarefied Gas Dynamics 20*, Beijing: Peking University Press, 1997. 983~988
- 50 Shen C, Jiang J Z, Fan J. Information preservation method for the case of temperature variation. In: Bartal T J, Gallis M A, eds. *Rarefied Gas Dynamics*, AIP Conference Proceedings 585, 2001. 185~192
- 51 Fan J, Boyd I D. Particle simulation of low-speed plasma instability. Report of the Department of Aerospace Engineering, University of Michigan, Ann Arbor. 2000
- 52 Sun Q H, Boyd I D, Candler G V. Numerical simulation of gas flow over micro-scale airfoils. AIAA Paper 2001-3071
- 53 Schaff S A, Sherman F S. Skin friction in slip flow. *J Aero Sci*, 1954, 21: 85~90
- 54 Janour Z. Resistances of a plate in parallel flow at low Reynolds numbers. NACA TM 1954-1316

MICRO-SCALE GAS FLOWS

Fan Jing Shen Ching

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

Abstract Understanding the features of micro-scale gas flows is essential to designing and optimizing micro-electro-mechanical systems (MEMS). Research on micro-scale gas flows originated from the famous experiments carried out by Knudsen and Millikan, respectively, i.e. the measurements of mass flux through a plane channel and drag coefficient of a small sphere, at the beginning of the 20th century. The experimental results revealed the significant effects of scale influence (rarefaction) on the gas flow characteristics. In the slip and transition regimes, the similar parameters of gas flows are the Knudsen number and Mach number, and therefore, there is a possibility to utilize the principle of similarity, i.e. increasing the geometric scale while decreasing the pressure, to solve the difficulty associated with the measurement in MEMS experiments. An information preservation (IP) technique was proposed by us to address the serious statistical scatter encountered in Monte Carlo direct simulation of low-speed gas flows. The IP technique may reduce the statistical scatter efficiently, and has been successfully applied to many micro-scale gas flows.

Keywords micro-scale gas flows, rarefaction, similar parameters, DSMC method, IP method