

用于Poiseuille等微槽道流的Boltzmann 模型方程算法研究*

李志辉^{①②**} 张涵信^① 符松^③

(① 中国空气动力研究与发展中心国家计算流体力学实验室, 北京 100083; ② 中国空气动力研究与发展中心超高速研究所, 绵阳 621000; ③ 清华大学工程力学系, 北京 100084)

摘要 基于 MEMS 微尺度流动特点, 将气体运动论统一算法推广应用于 Poiseuille 等微槽道流动计算研究, 发展可用于微流动问题的气体运动论边界条件数学模型及数值处理方法, 以不同 Knudsen 数的 Couette 剪切流、热对流以及 Poiseuille 等短微槽道流为研究对象进行初步计算验证, 通过将本文计算结果分别与基于微观分子颗粒输运的类 DSMC 模拟值、基于宏观流体力学的滑移 N-S 解、基于气体分子动力论的 BGK-Burnett 数值解及线性 Boltzmann 近似分析解等的比较分析, 显示出发展的连接宏观流体力学与微观分子动力学的介观 Boltzmann 简化速度分布函数方程数值算法能很好地揭示近连续滑移、过渡流区气体流动现象和微弱流动变化细节, 并能较好地适应于微槽道流动问题计算研究, 可望发展起新型的模拟 MEMS 微槽道流动和传热问题气体运动论数值计算方法.

关键词 Boltzmann 模型方程 离散速度坐标法 有限差分法 Couette 流 Poiseuille 流 短微槽道流

微电子机械系统(Micro-Electro-Mechanical-Systems, MEMS)的研究作为当代技术创新的一个多学科交叉应用的重要方面, 自 20 世纪 80 年代以来, 已分别在微型泵、阀门、传感器、发动机、计算机芯片等的制造和运转等方面得到迅猛发展^[1]. 对于 MEMS 中的气体流动, 由于系统的微小尺度而使得刻划气体稀薄程度的 Knudsen 数相对较大, 一般 MEMS 器件尺寸在十分之一微米到数百微米之间, 其

2004-10-29 收稿, 2005-03-20 收修改稿

* 国家自然科学基金(批准号: 90205009, 10321002)、清华大学基础研究基金(批准号: JC2003033)资助项目

** E-mail: zhli0097@x263.net

流动的Knudsen数常位于 0.001 到 1 附近, 流动处于近连续滑移流或稀薄过渡流^[2]. 通常处于常温、常压下的微流动由于特征尺寸的微米量级甚至更小导致其存在许多完全不同于宏观气体流动的独特性质, 除严重的稀薄气体效应外, 还存在低 Mach 数流动下, 压力、密度急剧变化引起的可压缩效应和温度梯度导致的黏性加热及热蠕变效应等^[3,4]. 由于可用于微尺度流动问题的试验理论与测试手段尚不完备以及实验费用相当昂贵, 寻求有效的数值模拟方法研究解决微流动问题已成为无论工程应用部门还是学术研究领域较为关心的课题.

对应于气体流动的描述方法有基于分子颗粒输运的微观理论和基于连续介质的宏观流体力学理论, 目前用于 MEMS 微流动模拟的数值方法可归纳为两类:

(i) 基于颗粒输运的分子动力学模拟方法, 如将微观分子运动与碰撞解耦进行随机统计模拟的DSMC(直接模拟Monte Carlo)方法, 该方法自 1963 年Bird将其发展用于稀薄气体流动模拟^[5]以来, 经过 40 余年的发展, 已在稀薄气体动力学学科获得了广泛的应用与检验^[6,7], 但由于MEMS中的气体流动速度通常比分子热运动速度小得多, 利用DSMC方法模拟微尺度系统中的低速流动, 所遇到的最难克服的问题是DSMC模拟结果的巨大的统计波动^[2]; 将DSMC方法应用于MEMS常密度气体流动模拟^[2,8], 还遇到网格划分数过多、计算时间步长过小而导致所需计算机内存和机时过高要求的问题. 近年来, 有学者发展起DSMC信息保存(IP)法^[9], 以便光滑处理DSMC方法本身所存在的统计涨落现象, 并用于微槽道低速流动模拟, 获得了较好的效果. 也有学者将单调Lagrange网格(MLG)技术与DSMC方法相结合产生具有网格自适应性的DSMC-MLG算法, 并用于微槽道流动问题研究^[10]. DSMC方法因受网格划分、时间步长所限, 只能进行高Knudsen数下稀薄气体流动研究, 难以模拟近连续滑移流区复杂流动问题, 由此使得基于微观分子颗粒输运的类DSMC方法由于存在巨大的统计涨落, 用于仿真复杂的低速微几何流仍存在许多问题需要研究解决.

(ii) 用于微流动问题数值研究的另一类方法通常是以气体密度、温度、流动速度作为独立变量的宏观流体力学解算器, 如依托计算流体力学已经发展较为成熟的N-S(Navier-Stokes)方程数值求解技术, 有学者采用一阶或高阶滑移边界条件, 通过数值求解N-S方程, 建立可用于近连续滑移流区工程适用的流动计算模型来模拟微槽道流^[11], 获得了一些满意的结果, 揭示了位于滑移流区域的微槽道流可压缩效应及流动变化规律. 但由于这类方法是一种基于研究物面出现气体温度跳跃、速度滑移现象, 通过引入较为经验性的壁面调节系数, 提出的具有一阶、二阶或更高阶滑移边界条件的宏观流体力学解算器, 其本质不可能超越连续介质流动的基本假设. 计算实践表明^[11,12], 对于这种经滑移流理论修正的N-S方程计算技术可用于工程估算Knudsen数小于 0.1 的滑移流区微尺度气体流动

问题, 但是对更稀薄的情况, 该连续流计算模型不再有效. 当前国际上也有学者尝试开展基于平衡态Maxwell分布的高阶Chapman-Enskog展开而得到诸如Burnett或超级Burnett宏观流体力学方程的数值计算^[13], 并用于近连续流区微槽道流动计算研究, 已取得一些初步的结果, 但由于高度非线性Burnett方程的应力和热传递项本身的复杂性不仅在计算的实现与稳定性方面^[14], 而且基于物理问题的真实理解仍面临着巨大困难, 使得通过求解这种更高阶宏观流体力学方程来数值模拟近连续滑移过渡区气体流动问题仍存在许多问题需要研究解决.

鉴于纯粹从微观或宏观角度来研究同时存在近连续流、稀薄流等跨尺度多层次的MEMS气体流动问题各自所存在的特点和局限性, 近年来, 国际上有许多学者提出发展将宏观流体力学与微观分子动力学连接起来的介观理论, 通过发展基于气体分子运动论(气体动理学理论)Boltzmann方程的介观数值模型来再现特征尺度达微、纳米量级的气体流动问题^[15,16]. 如基于格子气自动机思想, 遵循各向同性原则, 沿仅有的几个离散速度方向, 对分子运动论BGK(Bhatnagar-Gross-Krook)模型方程进行形式积分得到宏观流动参数, 提出离散格子Boltzmann方法^[16](LBM), 用来模拟处于Maxwell或近Maxwell平衡态的连续流区或近连续滑移流区低速槽道流. 也有学者基于硬球分子模型假设通过对Boltzmann-BGK方程碰撞算子进行进一步线性化处理, 开展起适合求解气体速度远低于声速的MEMS低速流动问题线性化Boltzmann方程数值研究等^[17]. 还有学者直接从BGK模型方程出发, 在网格界面基于通量守恒, 利用气体分子速度分布函数对于Maxwell分布的Chapman-Enskog二阶展开构造可模拟宏观流体力学Burnett方程的BGK-Burnett格式, 用于模拟连续流或近连续滑移流区均匀微槽道低速流动问题, 获得了较满意的结果^[18]. 本文拟基于将不同尺度间相互作用统一起来的Boltzmann方程介观理论, 将近年来本文第一作者曾在中国空气动力研究与发展中心张涵信院士指导下所发展起来的基于Boltzmann模型方程的气体运动论统一算法^[19~21]¹⁾推广应用于微尺度流动问题计算研究. 考虑到二维或轴对称微槽道是通常微电子机械系统的典型元件, 在MEMS组件中有许多流动例子可以被模拟为二维微槽道流. 本文以不同Knudsen数的Couette剪切流、热对流以及由压力驱动的Poiseuille等短微槽道流为研究对象进行初步研究, 首先介绍描述二维微槽道气体流动问题的Boltzmann简化速度分布函数方程和相应的气体运动论数值计算方法, 发展可用于微流动问题的气体运动论边界条件数学模型及数值处理方法; 而后对上述槽道流进行算法验证, 将计算结果分别与类DSMC模拟值、经滑移流理论修正的N-S解、线性化Boltzmann方程渐近分析解及相关实验数据等进行比较分析.

1) 李志辉, 从稀薄流到连续流的气体运动论统一数值算法研究(博士论文). 绵阳: 中国空气动力研究与发展中心研究生部, 2001

1 二维微槽道流 Boltzmann 简化速度分布函数方程数值算法

从修正的 Boltzmann-BGK 模型方程^[22]出发, 基于 274 页脚注 1) 中 2.3 节的叙述, 利用气体分子速度分布函数基于位置空间、速度空间在任一时刻由非平衡态向平衡态演化的碰撞松弛特性, 通过将不同流区的流态控制参数、宏观流动物理量、气体黏性输运特性、热力学效应及气体分子相互作用规则与气体分子碰撞松弛参数和当地平衡态分布函数联系起来, 可得到描述不同 Knudsen 数下二维微槽道流动问题的气体分子速度分布函数简化控制方程, 对于不受外力作用的简单气体而言, 其无量纲形式为

$$\frac{\partial f}{\partial t} + V_x \frac{\partial f}{\partial x} + V_y \frac{\partial f}{\partial y} = \nu(f^N - f), \quad (1)$$

$$f^N = f_M \left\{ 1 + \frac{(1-Pr) [(V_x - U)q_x + (V_y - V)q_y] \left(\frac{2[(V_x - U)^2 + (V_y - V)^2 + V_z^2]}{T} - 5 \right)}{5PT/2} \right\}, \quad (2)$$

$$f_M = \frac{n}{(\pi T)^{3/2}} \exp\{-[(V_x - U)^2 + (V_y - V)^2 + V_z^2]/T\}, \quad (3)$$

式中 f 是依赖于位置空间 x, y , 时间 t 和速度空间 (V_x, V_y, V_z) 共 6 个自变量的气体分子速度分布函数; ν 为气体分子碰撞频率; f^N 为气体分子当地平衡态分布函数; U, V 为气体流动沿 $x-, y-$ 方向的速度分量; P, T 分别表示气体流动的压力、温度, 其中用于无量纲化的特征参考量视具体问题而定, 一般取来自未扰参考状态的数密度 n_{ref} , 温度 T_{ref} 作为无量纲参考量; 引入气体分子最可几热运动速度 $c_{mref} = \sqrt{2RT_{ref}}$ 作为无量纲特征速度; 于是无量纲特征时间取为 $t_{ref} = L/c_{mref}$, L 为所研究问题的特征长度; 取来流动压 $mn_{ref}c_{mref}^2/2$ 作为气体压力、应力张量等有关力的无量纲参考量, m 为所研究气体分子的质量; 取 $mn_{ref}c_{mref}^3/2$ 作为气体热流的无量纲参考量; 取 n_{ref}/c_{mref}^3 作为气体分子速度分布函数的无量纲参考量.

对于微米甚至尺度更小的微槽道低速流动, 其宏观流动特性很容易受外界干扰, 不同种类的气体流动介质流经相同的微槽道所表现出来的宏观流动性质相差很大, 不同的分子模型、不同的分子相互作用对气体宏观流动性质会产生较大的影响. 为了计算分子黏性碰撞截面及扩散碰撞截面对微流动特性的影响, 本

1) 李志辉. 稀薄流到连续流气体流动问题统一算法应用研究(博士后研究报告). 北京: 清华大学, 2003

文将DSMC方法所广泛使用的变径硬球(Variable Hard Sphere,VHS)模型^[23]和变径软球(Variable Soft Sphere,VSS)模型^[24]引入微观分子速度分布函数控制方程,与气体分子碰撞频率相联系,确立可用于速度分布函数方程(1)式的气体分子碰撞频率无量纲表达式为

$$\nu = \frac{2\alpha(5-2\omega)(7-2\omega)}{5(\alpha+1)(\alpha+2)\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{Kn_{ref}} \cdot \rho T^{(1-\chi)}, \quad (4)$$

此处, ω , α 为变径软球、变径硬球分子模型指数; χ 为黏性系数温度依赖幂指数; Kn_{ref} 为微槽道流动的参考 Knudsen 数, 可表示为

$$Kn_{ref} = \frac{4\alpha(5-2\omega)(7-2\omega)}{5(\alpha+1)(\alpha+2)} \cdot \frac{1}{(2\pi RT_{ref})^{1/2}} \cdot \frac{\mu_{ref}}{\rho_{ref}} \cdot \frac{1}{H_{ref}}, \quad (5)$$

式中 H_{ref} 为表征微流动的特征尺度, 对于微槽道、管道流, 通常取槽道高度或管道直径作为流动特征长度; μ_{ref} , T_{ref} , ρ_{ref} 分别为相应于参考状态的气体黏性输运系数、温度、密度; R 为气体常数。

一旦方程(1)中的气体分子速度分布函数能被数值求解, 揭示微流动特性的各种宏观物理量, 诸如气体分子数密度、流动速度、温度、气体压力、黏性应力、热流矢量等, 均可通过将速度分布函数乘以分子速度的相关量对速度空间进行如下矩积分而得到^[21], 其无量纲形式为

$$n(\mathbf{r}, t) = \int f d\mathbf{V}, \quad (6)$$

$$nU_i(\mathbf{r}, t) = \int V_i f d\mathbf{V}, \quad (7)$$

$$\frac{3}{2}nT(\mathbf{r}, t) = \int c^2 f d\mathbf{V}, \quad (8)$$

$$P = nT, \quad (9)$$

$$\tau_{ij}(\mathbf{r}, t) = 2 \int c_i c_j f d\mathbf{V} - P\delta_{ij}, \quad (10)$$

$$q_i(\mathbf{r}, t) = \int c^2 c_i f d\mathbf{V}, \quad (11)$$

此处, $\mathbf{c}$ 为分子热运动速度 $\mathbf{c} = \mathbf{V} - \mathbf{U}$, 下标 i 和 j 取值范围为1到3, 分别表示 x -, y -, z -方向的分量。

针对二维(x , y)气体流动特点, 通过对气体分子速度分布函数关于宏观流动速度为零的 V_z 方向分别以权因子 1 和 V_z^2 进行 $-\infty$ 到 $+\infty$ 积分, 引入经约化的速度分布函数 g , h , 并将气体运动论离散速度坐标法^[20]应用于速度分量 V_x , V_y , 单一

1) 同 273 页脚注 1)

1) 同 273 页脚注 1)

的气体分子速度分布函数方程被转换成在各个离散速度坐标点 $V_{x\sigma}$, $V_{y\delta}$ 处基于时空空间具有非线性源项的双曲型方程组^{[20]2)}, 贴体坐标系 (ξ, η) 下其守恒形式为

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial \xi} + \frac{\partial G}{\partial \eta} = S, \quad (12)$$

$$\text{其中 } U = J \begin{pmatrix} g_{\sigma,\delta} \\ h_{\sigma,\delta} \end{pmatrix}, \quad F = \bar{U}U, \quad G = \bar{V}U, \quad S = J \begin{pmatrix} \nu(G_{\sigma,\delta}^N - g_{\sigma,\delta}) \\ \nu(H_{\sigma,\delta}^N - h_{\sigma,\delta}) \end{pmatrix}; \quad g_{\sigma,\delta}, \quad h_{\sigma,\delta},$$

$G_{\sigma,\delta}^N$, $H_{\sigma,\delta}^N$ 分别表示离散速度坐标点 $(V_{x\sigma}, V_{y\delta})$ 处经约化的 g , h , G^N , H^N 函数值, 这里的 G^N , H^N 是由 f^N 分别以权因子 1 和 V_z^2 经 $-\infty$ 到 $+\infty$ 积分得到; $J = \partial(x, y)/\partial(\xi, \eta)$; 分子逆变速度: $\bar{U} = V_{x\sigma}\xi_x + V_{y\delta}\xi_y$, $\bar{V} = V_{x\sigma}\eta_x + V_{y\delta}\eta_y$.

鉴于气体分子碰撞松弛与对流运动的非正常特点, 吸收 Monte Carlo 方法关于分子运动与碰撞解耦思想^[6,25], 使用非定常时间分裂数值计算方法将经过离散速度坐标法离散降维的速度分布函数方程(12)式分裂为代表碰撞松弛变化的源项方程和位置空间的对流运动方程进行耦合迭代求解. 基于文献[19~21]¹⁾介绍的有限差分思想, 使用二阶 Runge-Kutta 方法数值模拟源项松弛方程, 借助 NND-4(a) 格式^[26,27]差分离散位置空间对流运动项, 建立直接求解微观分子速度分布函数的气体运动论有限差分数值格式.

$$U^{n+1} = L_s(\Delta t/2)L_\eta(\Delta t/2)L_\xi(\Delta t)L_\eta(\Delta t/2)L_s(\Delta t/2)U^n, \quad (13)$$

其中

$$\begin{aligned} U^* &= L_s(\Delta t)U^n = U^n + \left(1 - \frac{\nu}{2}\Delta t\right)\Delta t \cdot S^n, \\ U^{**} &= L_\eta(\Delta t)U^* = \left[1 - \bar{V}\Delta t\delta_\eta + \frac{\bar{V}^2\Delta t^2}{2}\delta_{\eta^2}\right]U^*, \\ U^{n+1} &= L_\xi(\Delta t)U^{**} = \left[1 - \bar{U}\Delta t\delta_\xi + \frac{\bar{U}^2\Delta t^2}{2}\delta_{\xi^2}\right]U^{**}. \end{aligned}$$

2 微槽道流动边界条件数值处理方法

由于微槽道流动速度相当低, 槽道特征尺寸的微米量级导致槽道流具有相当大的表面/体积比, 边界条件对流动特性影响很大, 物面边界与出入口边界的处理对微流动模拟至关重要. 本文发展的气体运动论数值算法需要求解的是物理空间与速度空间各个离散网格点处的气体分子速度分布几率函数, 于是上述

2) 同 274 页脚注 1)

各类边界条件的数值实现, 始终需要通过求解宏观流动量所遵循的气体分子速度分布函数来进行, 这样就避免了针对纯粹微观颗粒分子进行随机统计模拟对微弱流动信息产生较大统计涨落的问题, 也避免了纯粹使用宏观流动量进行边界表述而不同位置的微流动边界具有强弱不同的稀薄效应、难于用固定关系式数值实现的不足。

2.1 物面边界条件数值方法

任何固体壁面边界均具有对气体分子的不可浸透性, 在任一计算时刻物面附近的分子要么撞击物面, 要么未撞击物面, 而所有撞击物面的分子均会反射回气体中^[28]。为了确定气体分子与固体表面相互作用数学模型, 本文假定撞击物面的气体分子紧接着以完全调节于壁面温度和速度的Maxwell平衡态速度分布散射。对于二维微槽道流, 物面边界网格在 t 时刻的分布函数由如下方式确定。

若气体分子撞击物面, 经物面反射的气体分子速度分布函数数值离散形式为^{[20]1)}:

$$g_{w\sigma,\delta} = \frac{n_w}{\pi T_w} \exp \left[-\frac{(V_{x\sigma} - U_w)^2 + (V_{y\delta} - V_w)^2}{T_w} \right], \quad (14)$$

$$h_{w\sigma,\delta} = T_w \cdot g_{w\sigma,\delta} / 2, \quad (15)$$

式中 n_w 为气体分子从物面散射的数密度, T_w 为壁面温度, U_w, V_w 为壁面速度。

若气体分子未撞击物面, 此时速度分布函数由流场内邻近边界的几排网格单边二阶差分给出^{[20]1)}。

2.2 入口与出口边界条件数值处理

在低速微槽道流动中, 存在槽道入口和出口边界条件相互影响的问题, 入口和出口边界条件不能互不依赖地任意给定, 这是亚声速流动信息沿左右特征线传播的性质决定的。为了反映流场外面的流体对内流场的影响, 在入口和出口面, 所引入的流动参数必须考虑流动特征量的信息传播问题^[2,3,29]。由于微流动出入口边界尤其是入口附近气体流动速度相当低, 纯粹基于宏观流动量进行边界离散处理, 难于准确表述流场出入口的流动信息及流场参数的光滑过渡。本文方法直接对分子一级的速度分布函数进行数值求解, 这使得气体分子运动与碰撞松弛变化在物理空间和速度空间的整体信息均通过各个离散网格点处的速度分布函数而被保存下来, 能较好地保护量值微小的宏观流动量信息, 于是在进行边界数值处理时, 同样立足速度分布函数本身, 将微流动出入口边界对宏观物理参数

1) 同 273 页脚注 1)

的控制条件及宏观流动量本身的变化规律通过气体分子速度分布函数再现出来.

对于压力驱动的二维微槽道低速气体流动问题, 一般来说, 其出入口压力值通常是适定的, 并且入口边界的气体温度、横向速度也是已知的, 通常取槽道入口处气体流动的横向速度为零.

在任一计算时刻, 为了通过内场信息计算调节出入口边界处的速度分布函数, 本文基于四阶精度的台劳展开思想, 将出入口边界网格中的速度分布函数由临近边界已经计算得到的几排网格中的离散速度分布函数进行渐近表示¹⁾.

对于入口边界, 可依靠边界附近四排网格 $i = 2, 3, 4, 5$ 上的离散速度分布函数值 $f_2 \sim f_5$ 进行四阶权重插值得到入口边界网格 $i = 1$ 上的函数值为

$$f_1 = 4f_2 - 6f_3 + 4f_4 - f_5 + O(\Delta\xi^4). \quad (16)$$

对于出口边界, 由临近出口边界的四排网格 $i = i_{\max} - 1, i = i_{\max} - 2, i = i_{\max} - 3, i = i_{\max} - 4$ 中速度分布函数值 $f_{i_{\max}-1}, f_{i_{\max}-2}, f_{i_{\max}-3}, f_{i_{\max}-4}$ 确定出口边界网格 $i = i_{\max}$ 中函数值 $f_{i_{\max}}$ 的四阶权重表达式:

$$f_{i_{\max}} = 4f_{i_{\max}-1} - 6f_{i_{\max}-2} + 4f_{i_{\max}-3} - f_{i_{\max}-4} + O(\Delta\xi^4). \quad (17)$$

在得到出入口边界网格的速度分布函数后, 再通过宏观流动取矩得到入口和出口边界的计算流动参数, 然后根据亚声速流动信息沿左右特征线传播的特征化理论确定满足入口和出口边界控制条件的宏观流动参数, 而后由此宏观流动参数基于(2)式获得当地时刻的离散速度分布函数.

利用本文介绍的气体运动论有限差分格式和本节设计的微槽道流动边界条件数值处理方法, 就可得到物理空间各点的离散速度分布函数. 对所有离散速度坐标点重复此差分求解过程, 在得到离散速度空间各离散速度坐标点处的气体分子速度分布函数后, 使用文献[21]²⁾所发展的离散速度数值积分方法对速度空间进行宏观取矩可得到物理空间各点处的宏观流动参数; 并使用 273 和 274 页脚注 1) 发展的气体运动论离散速度坐标法控制离散速度域以及计算过程中离散速度分布函数的数值精度. 重复上述算法, 伴随计算时间的推进而流场中气体分子速度分布函数将不断演化更新, 待表征流动特性的宏观物理量收敛于计算精度而结束该算法过程.

3 计算结果与检验

3.1 不同 Knudsen 数 Couette 流动计算验证

1) 同 274 页脚注 1)

2) 同 273 页脚注 1)

Couette流动是一种较为简单而经典的边界值问题, 是一个可以用来研究不同Knudsen数下物面对气体流动产生壁面效应的一个很好的例子. 虽说目前还没有人利用原始Boltzmann方程对其进行精确分析, 但已有许多学者对该问题进行过理论与实验研究^[30], 并由此产生了不同的近似分析方法, 如Gross, Ziering, Willis, Gorelov和Kogan等人分别在文献[31~33]中进行了阐述, 已有不少学者基于该问题进行算法考验^[9,17,34], 提供了大量可供算法比较的数据. 本节以此问题为研究对象进行较为详细的计算研究, 拟对前面介绍的微槽道物面边界条件数值处理方法及本文发展的气体运动论算法进行较为精确的定量化比较验证.

这里首先考虑的是平面 Couette 剪切流动, 它是由两个相对运动的无限大平行平板表面剪切应力驱动的单方向定常流动, 图1描述了该流动示意图, 两个相距 H 、置于相同温度 T_w 的平行无穷长平板向相反方向沿各自平面分别以 U_w 速度运动. 取两平板距离中央为坐标原点, x 轴为运动方向, y 轴与之垂直. 对于该问题, 文献[17]利用所发展的适合

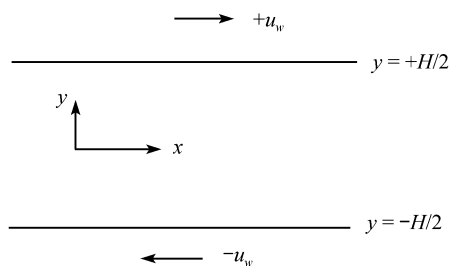


图1 Couette 流动示意图

于硬球分子模型的线化 Boltzmann 方程数值方法进行了计算研究; 文献[9]为了考验基于微观分子随机统计模拟的 DSMC 方法所发展起来的信息保存(IP)方法, 也对该问题进行了模拟. 为了将本文计算结果与上述文献得到的计算数据进行定量化比较, 拟定相同流动条件, 以具有温度 $T_{ref} = 273$ 、压力 $P_{ref} = 1.01325 \times 10^3$ Pa 的氩气作为模拟气体, 硬球分子模型 $\omega = 0.5$, $\alpha = 1$ 被用来描述分子间相互作用, 假设与气体保持相同温度的平板以 $U_w = 0.2$ m/s 的速度进行匀速运动. 本文分别计算了从近连续流到高稀薄近自由分子流对应的 $Kn = 0.001, 0.1128, 1.1284$ 和 11.2838 状态下该定常 Couette 流动问题. 图2展示了4种 Kn 数下该 Couette 流动上半槽道内无量纲流动速度剖面分布 $U/U_w \sim y/H$, 可以看出, 对用于比较大、中、小3个 Kn 数对应的速度剖面, 本文计算结果与 DSMC-IP 方法模拟结果、线化 Boltzmann 方程数值解均相当一致, 而经滑移流理论修正的 N-S 方程数值解却仅在小 Knudsen 数 $Kn = 0.1128$ 下给出较好的结果, 即使在该 Kn 数流动中, 滑移 N-S 计算值在运动平板附近的分布与上述3种方法的研究结果仍存在一定的偏离, 对于 $Kn = 1.1284$ 的中等 Knudsen 数 Couette 流, 滑移 N-S 计算则是完全失效的. 对于 $Kn = 0.001$ 对应的近连续流, 由于 DSMC-IP 方法和线化 Boltzmann 方法均未得到相关研究结果, 图中仅绘出了本文气体运动论数值算法研究结果. 从本文开展的稀薄流到连续流4种 Knudsen 数下 Couette 流动速度剖面的计算研究还可看出, 对属于近连续介质流的 $Kn = 0.001$ 流动状态, 本文所计算的流动速度

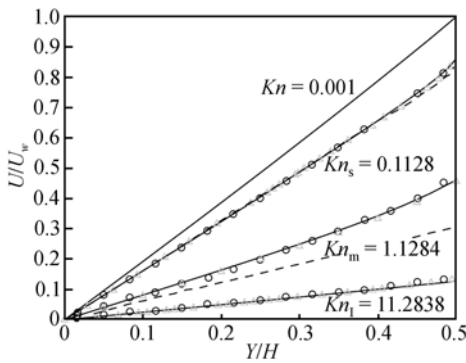


图 2 不同 Kn 数 Couette 流动速度分布计算比较

实线表示 4 种流动状态对应的本文计算结果, $\circ$ 示文献[9]使用 DSMC 信息保存(IP)方法模拟稀薄过渡流 $Kn(0.1128, 1.1284, 11.2838)$ 3 种状态的研究结果, $\triangle$ 示文献[17]得到的相应于上述 3 种状态的线化 Boltzmann 方程数值解, 同时以虚线标出使用带滑移边界条件修正的宏观流体力学 N-S 解算器计算 $Kn(0.1128, 1.1284)$ 两种流动状态得到的速度分布

由槽道中心逐渐增大, 到平板表面, 流动速度的无量纲值变为 $U/U_w = 0.9986$, 相当接近平板的运动速度, 气体与平板物面之间的滑移速度 $U_{slip}/U_w = 0.0014$ 近似等于零, 这正好与连续介质绕流关于壁面滑移速度为零的假设相吻合; 但随着流动 Knudsen 数增大, 虽然气体流动速度值都是从槽道中心网格的零逐渐增大, 到平板表面网格流速达到最大, 但是平板表面网格中的流动速度与平板运动速度之间的差距越来越大; 显示出 Knudsen 数越大, 气体的稀薄效应逐渐增强, 使得气体与物面之间的滑移速度不断增加, 产生严重的气面速度滑移现象, 即使对于 Knudsen 数($Kn = 0.001$)相当

低的近连续流, 壁面仍存在滑移速度, 本文计算很好地反映了随着 Knudsen 数增大, 气体流动从连续流逐渐变化到稀薄流的绕流规律。

为了对上述 Couette 流作进一步的计算比较, 拟定与文献[17]相同的 9 种较高 Knudsen 数流动状态: $Kn = 0.1128, 0.2257, 0.6770, 1.1284, 2.2568, 4.5135, 9.0270, 16.9257, 22.5676$ 进行计算研究, 图 3 绘出单位时间内流经上半槽道内无量纲质量流量 $\dot{M}/U_w$ 随 Kn 数的变化关系, 可见本文算法结果与文献[17]线化 Boltzmann 方程数值解相当一致。图 4 展示对应上述 9 种 Couette 流动状态所计算的剪切应力无量纲值 $-\tau_{xy}/U_w$ 随 Kn 数的变化情况, 特别要注意的是, 图中物理量取自第 1 节基于气体分子速度分布函数所定义的宏观流动量表示(10)式, 并已分别按第 1 节所述无量纲参考量进行了无量纲化。由于上述 Couette 流属于无限平板间剪切应力驱动的定常稳定流, 理论预测其剪切应力应趋于一个负常数, 随 Kn 数增大, 气体流动稀薄效应急剧增加, 气体分子间黏性剪切应力值 $\tau_{xy}(\mathbf{r}, t) = 2 \int c_x c_y f d\mathbf{V}$ 增大, 这已在本文计算调试中得到证实。只是靠近壁面, 剪切应力 τ_{xy} 值随位置 y 增加仅呈现相当微弱的减少, 这里取基于槽道内各网格位

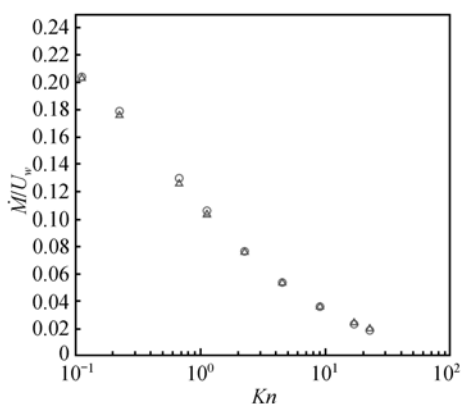


图3 Couette 半槽道质量流量计算比较
○ 示本文计算结果, △ 示来自文献[17]中表III的线化 Boltzmann 方程数值解

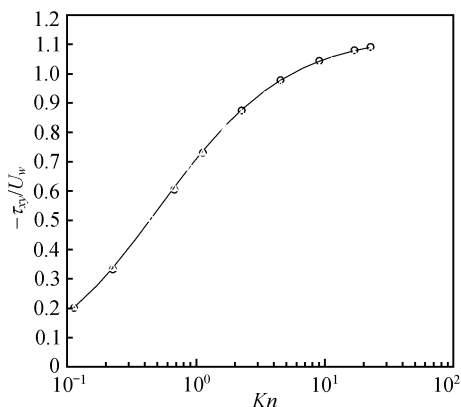


图4 Couette 流剪切应力随 Kn 变化
○ 示本文计算结果, 实线绘出来自文献[17]中的表IV给出的线化 Boltzmann 方程数值解, △ 示来自文献[33]的 Chapman-Enskog 四阶矩方法研究结果

置剪切应力的平均值, 为便于比较, 以来自文献[17]的定义式 $-\tau_{xy}/U_w \sim Kn$ 的形式在图4中绘出。由图4看出, 本文算法对上述高稀薄流区各个Knudsen数流动状态的计算结果均与文献[17]提供的线化Boltzmann方程数值解相当一致, 而文献[33]得到的四阶Chapman-Enskog近似矩方法解与上述两种结果在中等 Kn 数以下吻合较好, 但在较高 Kn 数下Chapman-Enskog矩方法的解却有所偏离, 说明Chapman-Enskog宏观流动矩方法对高 Kn 数的稀薄流模拟较困难, 通过几种研究方法计算比较看出, 本文气体运动论数值算法能较好地模拟高、低不同Knudsen数Couette剪切槽道流。图5绘出 $Kn = 1.1284$ 的Couette流动上半槽道内指向流动方向的无量纲热流 $-q_x/U_w \sim y/H$ 分布情况, 由图看出, 本文计算结果与文献[32]的BKW模型方程近似分析解变化趋势相当一致, 图中已显示本文算法结果在离运动壁面较近、稀薄效应进一步增强的地方要比来自文献[32]完全基于Maxwell平衡态分布的BKW模型渐近分析解高一些, 这是由于高稀薄气体流动的速度分布

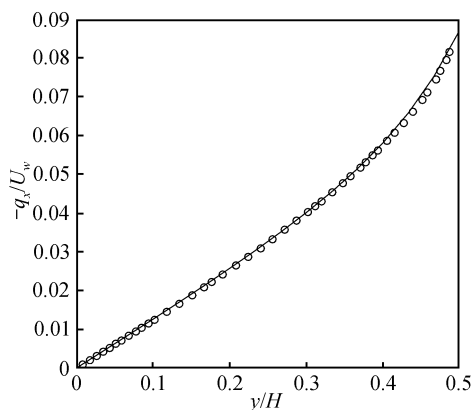


图5 Couette 流热流 $-q_x/U_w \sim y/H$ 分布
实线示本文计算结果, ○ 示来自文献[32]中基于标准的 Boltzmann-Krook-Welander (BKW)模型方程的小扰动渐近分析方法得到的研究结果

已经不再是Maxwell平衡分布¹⁾, 而存在严重的非平衡特性, 不能再利用文献[32]基于Maxwell分布的小扰动渐近展开法求解高稀薄流问题, 由此将导致文献[32]对较高Knudsen数的Couette流动问题热流的渐近分析结果与本文计算出现偏离. 通过图 5 的计算研究表明, 虽说Couette流动的气体温度设置为均匀不变的, 但是在气体流动的反方向确实存在热流, 且该热流值沿槽道横向从槽道中央到运动平板表面呈非线性增大, 这是一种典型的由运动壁面的剪切应力驱使气体流动产生稀薄热蠕变效应^[32], 本文气体运动论数值算法能很好地揭示这一稀薄过渡流区微槽道流动传热变化规律, 然而这种现象迄今很少有文献报道.

通过上面由运动平板引起的不同 Knudsen 数下 Couette 剪切流动的计算研究, 表明将本文算法用于平板表面剪切应力驱动的槽道流动, 模拟气体的黏性输运特性是完全可行的, 下面拟将本文算法用于由平板温度差导致板间气体热传导形成非线性定常 Couette 热对流问题的计算研究, 以验证本文算法用于气体热传递稀薄槽道流问题的计算能力. 该问题可描述为有两个冷热温度不同的平板分别位于 $y=0$ 和 $y=H$, 其中位于 $y=0$ 处温度较低的冷平板温度恒定为 T_C , 置于 $y=H$ 的热平板温度恒定为 T_H , 由于两平行平板温度差别较大, 会导致板间气体因热传导输运影响, 使得密度分布出现严重的非均匀现象. 为了研究这个典型的热传导非线性问题, 文献[30]已利用高能电子束荧光测试实验技术得到板间密度分布; 文献[34]从标准的 BGK 模型方程出发借助离散坐标技术对该问题进行了数值分析研究. 为了将计算结果与上述文献得到的数据进行比较验证, 拟定与上述文献相同的流动条件, 设置冷热两平行平板温度分别为 $T_C = 79\text{ K}$, $T_H = 294\text{ K}$, 以氦气(He)作为平板间模拟气体, 以两平板温度的平均值作为气体流动参考温度 $T_{ref} = 186.5\text{ K}$, 定义气体流动的 Knudsen 数为平板间中央位置的分子平均自由程与板间距离之比, 本文对 $Kn = 0.033$ 流动状态下该 Couette 槽道传热问题进行计算研究. 图 6 绘出槽道内气体密度无量纲分布 $\rho/\rho_0 \sim y/H$, 这里 ρ_0 表示板间中央位置的气体密度, 图 6 中表明, 本文计算结果与实验数据吻合很好; 同时看出本文计算结果远比文献[34]基于标准 BGK 方程得到的研究结果更能吻合实验数据, 本文计算曲线显示出, 槽道内气体密度随位置 y 呈现明显的非线性分布, 而将 BGK 模型方程用于求解该热传导输运问题却难于反映其严重的非线性热传导效应, 说明标准的 BGK 方程并不适合于描述传热流动问题, 这是由于使用 Chapmann-Enskog 矩方法从标准 BGK 方程得不到正确的黏性输运系数 μ 和热传导系数 K 的封闭关系式, 而导致 BGK 模型得到的 Prandtl 数为 $Pr = 1$, 使得 BGK 模型只能用于模拟处于 Maxwell 平衡态或近 Maxwell 平衡态动量交换起主导作用的气体流动而对能量交换起主要作用的热传导问题却具有相当大的局限性; 从

1) 同 274 页脚注 1)

完全呈现线性变化的滑移 N-S 方程计算曲线反映出基于滑移边界条件的 N-S 连续介质理论预测方法对于该 Knudsen 数较低的近连续滑移流区低速热传导对流问题, 已经难以可靠模拟气体介质黏性加热及稀薄热蠕变效应.

3.2 Poiseuille 微槽道流计算分析

本节要考虑的 Poiseuille 流^[36]问题和上节已经研究的 Couette 流动虽然都是简单而经典的槽道流问题, 但它们却涵盖了 MEMS 微槽道流应用中需要控制的许多流体的最为基本而重要的流动属性, 由于这些问题具有清楚的

流动机理, 对这类问题在低速条件下的求解是检验新算法的基准问题. 这里考虑的平面 Poiseuille 流是限制在两个分别位于 $y = \pm H/2$, 长为 L 的静止无限大平行平板之间由平行于平板的压力梯度所驱动的一种定常槽道流, 其流动结构标示于图 7. 为了与来自文献[37]的 DSMC 模拟结果和经滑移流理论修正的 N-S 解以及来自文献[18]基于气体分子动力学

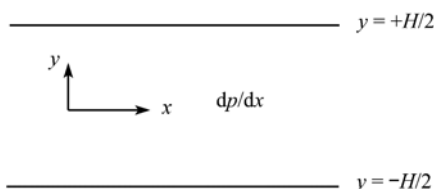


图7 压力驱动的二维 Poiseuille 流示意图

BGK 模型方程所建立起来的 BGK-Burnett 宏观量差分格式得到的研究结果进行分析比较, 拟定相同的流动条件, 所计算的气体为具有分子质量 $m = 1$, 分子直径 $d = 1$ 的单原子硬球气体, 假设所计算的气体参考密度为 $\rho_{ref} = 1.21 \times 10^{-3}$ 由此可得到气体分子的参考平均自由程为 $\lambda_{ref} = m/(\sqrt{2}\rho_{ref}\pi d^2) = 186$, 两个等温平板间距离即槽道高 $H = 10\lambda_{ref}$, 槽道长 $L = 30\lambda_{ref}$, 平板温度设定为流动参考温度 $T_{ref} = 1$, 流动特征速度设置为气体分子最可几热运动速度 $C_{mref} = \sqrt{2RT_{ref}} = 1$, 于是气体常数被取作 $R = 1/2$, 驱使气体流动的压力梯度设定为入口压力 $P_{in} = 3P_{ref}/2$, 出口压力 $P_{out} = P_{ref}/2$, 其中 P_{ref} 为流动的参考压力由气体状态方程根据参考密度和温度确定 $P_{ref} = 6.05 \times 10^{-4}$, 由此流动设置, 导致所考虑的 Poiseuille 流成为 $Kn = \lambda_{ref}/H = 0.1$ 的低速近连续滑移流, 所要研究的流场范围为 $-L/2 \leq X \leq L/2$, $-H/2 \leq Y \leq H/2$, 坐标原点取为槽道

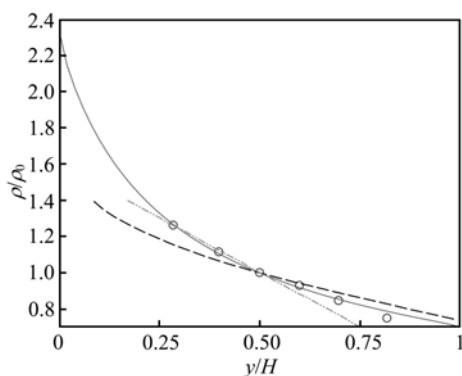


图6 温差引起板间热对流 $Kn = 0.033$

密度分布

实线示本文计算结果, $\circ$ 示来自文献[30]的实验数据, 长虚线表示文献[34]基于 BGK 方程的计算分析值, 虚双点划线绘出来自文献[35]的连续流预测值

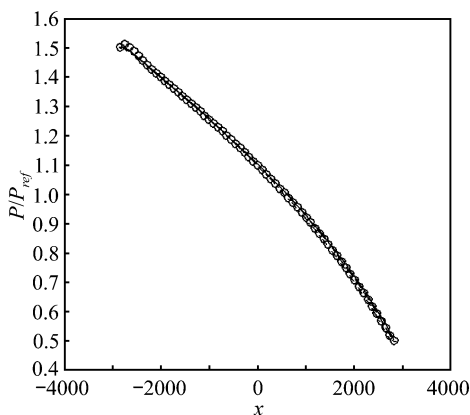


图 8 Poiseuille 流轴线压力分布计算比较
实线示本文计算结果, $\circ$ 示文献[37]提供的 DSMC 模拟值, 虚点划线绘出自文献[18]基于气体分子动力论 BGK 模型方程经 Chapman-Enskog 二阶展开得到的 BGK-Burnett 格式研究结果, 虚线绘出经滑移边界条件修正的宏观流体力学 N-S 方程计算结果

中心. 特别要说明的是, 由于 Poiseuille 槽道流是为考验流体力学理论与计算模型所设定的一种具有普适性的气体流动算例, 上述关于该流动问题的描述, 不存在固定的量纲单位.

图 8~12 部分绘出了本文计算与 DSMC 模拟值及滑移 N-S 解、气体分子动力论 BGK-Burnett 格式几种方法得到的研究结果比较情况, 为了便于与文献结果比较, 其中图 8, 10 将气体压力轮廓以 P/P_{ref} 的形式绘出, 图 9 和 11, 12 分别绘出的是上述 Poiseuille 槽道流气体密度 $\rho \times 10^{-3}$ 和气体 y 向流动速度 V 、剪切应力 τ_{xy} 的实际值. 从图 8 与图 9

分别绘出的沿 Poiseuille 槽道流动方向中心轴线上压力与密度分布的变化情况, 可以看出, 槽道内流动参数无论压力还是密度其轴向分布都呈现较强的非线性效应, 而且 4 种研究方法得到的结果均相互吻合较好, 只是密度分布的滑移 N-S 解在槽道后部特别是临近出口的区域与本文计算值、DSMC 模拟结果及气体动理论 BGK-Burnett 数值解存在一定的偏离, 并显示出滑移 N-S 解提供的密度轴向分布非线性较弱, 说明滑移 N-S 解算器可用于计算近连续滑移流区微槽道轴向流动参数, 并能揭示其非线性效应, 但使用滑移 N-S 解算器模拟稀薄效应进一步增强的微槽道后部气体流动, 其有效性受到

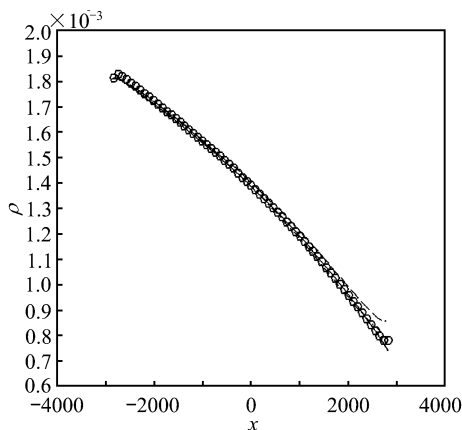


图 9 Poiseuille 流轴线密度分布计算比较
图注同图 8

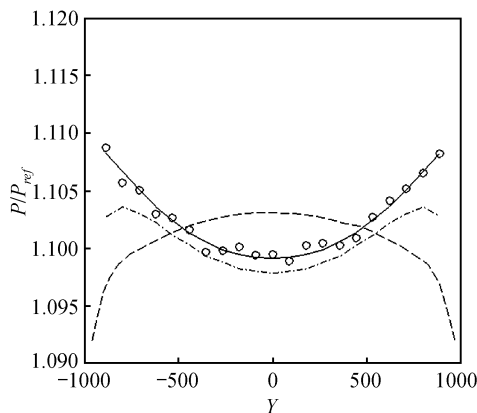
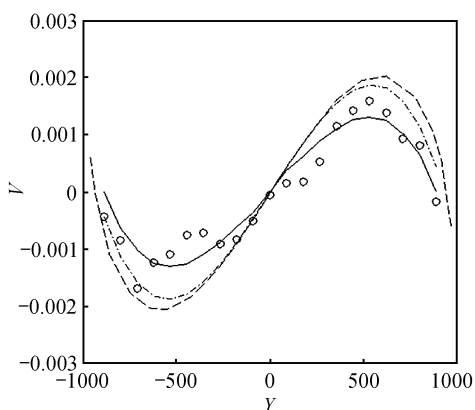
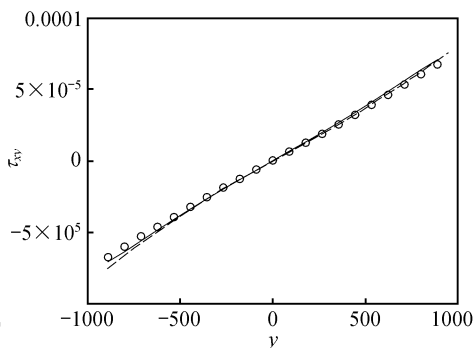


图 10 Poiseuille 流 $x = L/2$ 压力横向分布
图注同图 8

图 11 Poiseuille 流 $x = L/2$ 处 y 向速度

横向分布

图注同图 8

图 12 Poiseuille 槽道流 $x = L/2$ 处剪切应力 τ_{xy} 横向分布

图注同图 8

质疑.

图 10 示 Poiseuille 槽道流中间位置 $x = L/2$ 处压力横向分布 $P/P_{ref} \sim y$ 计算比较, 显示出本文计算值和 DSMC 模拟值、气体动力论 BGK-Burnett 数值解 3 种方法研究结果在槽道内部变化趋势相一致, 证实槽道内气体压力分布随横向位置发生变化, 且在槽道中心轴线处压力最小, 这与文献[37,38]的分析完全一致, 同时看出本文计算值与 DSMC 结果相当吻合, 证实本文气体运动论数值算法的准确可靠性, 也反映出 DSMC 模拟值存在较大统计涨落, 虚线绘出的滑移 N-S 解变化趋势却与上述 3 种方法的研究结果变化趋势完全相反, 显示出将滑移 N-S 解算器用于模拟 $Kn = 0.1$ 微槽道横向流已经完全失效. 这种现象说明为了揭示滑移流区气体流动特性, 仅仅依靠对边界条件进行基于 Knudsen 数的若干阶滑移流理论或本构关系式修正的 N-S 解算器是不可靠的.

图 11 标出 Poiseuille 槽道流中间位置 $x = L/2$ 处 y 向速度横向分布 $V \sim y$ 的变化情况, 图中看出, 虽然 DSMC 方法用于模拟量值达 10^{-3} 的横向流动速度时, 其巨大的统计波动背景噪声差不多淹没了需要模拟的有用信息, 但从本文计算结果与 DSMC 模拟值的变化趋势来看, 两者吻合很好, 显示出本文算法能相当光滑地再现大小不同的气体流动变化细节; 而滑移 N-S 解却与本文计算结果、DSMC 模拟值竟有一个量级的偏差; 同时看出, 气体动力论 BGK-Burnett 数值解与 DSMC 模拟值、本文计算结果存在很大偏离, 显示出本文气体运动论数值算法在求解上述稀薄效应进一步增强的微弱横向流动明显优于模拟连续流或近连续滑移流区均匀槽道流动的 BGK-Burnett 气体动力论结果, 而基于 Maxwell 分布的 Chapman-Enskog 二阶展开而构造的 BGK-Burnett 数值解与滑移 N-S 解相比, 已经

更加接近本文计算值与 DSMC 模拟值. 图 12 绘出 Poiseuille 槽道流剪切应力横向分布 $\tau_{xy} \sim y$ 变化关系, 看出本文气体运动论数值算法、DSMC 方法和经滑移流理论修正的 N-S 解 3 种方法得到的研究结果变化趋势比较一致, 反映出压力驱动的 Poiseuille 微槽道流剪切应力关于槽道中心轴线成反对称线性分布. 从图 8 ~ 12 所展示的关于 Poiseuille 微槽道流几种方法研究结果的量化比较看出, 本文发展的气体运动论数值计算方法不仅能准确捕捉槽道轴向流动参数的变化特性而且能较为精细地刻画槽道横向流动参数的微弱变化细节, 能够相当光滑地再现大小尺度不同的微流体现象及流动变化规律.

3.3 不同流区的微槽道流计算

算例 1 滑移流区微槽道流动模拟

图 13 描述较低出口 Knudsen 数 $Kn_{out} = 0.05$ 的近连续滑移流区二维微槽道氮

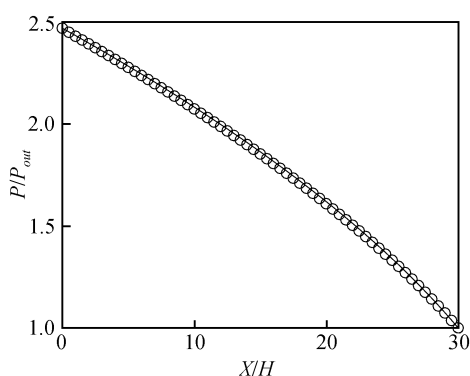


图 13 $Kn_{out} = 0.05$ 微槽道轴向压力计算与滑移 N-S 解比较

气流动算例(槽道长 $L = 31.14 \mu\text{m}$, 高 $H = 1.04 \mu\text{m}$, 入口与出口压力比 $P_{in}/P_{out} = 2.47$ 、出口压力给定为 $P_{out} = 1.01325 \times 10^5 \text{ Pa}$, 槽道入口温度与壁面温度相等 $T_i = T_w = 300 \text{ K}$, 相应于该温度的氮气黏性系数为 $\mu = 1.775 \times 10^{-5} \text{ N/m}^2$, 气体常数 $R = 296.9 \text{ J/(kg} \cdot \text{K)}$, $Pr = 0.72$, $C_p/C_v = 1.4$), 沿槽道轴线压力分布计算结果与来自文献[11]经滑移流理论修正的 N-S 解比较情况, 图中符号表示本文计算结果、实线代表滑移流 N-S 解, 可见两者吻合很好; 该图还直观显示了低速微槽道内部流动的可压缩性引起沿槽道轴向压力分布出现明显的

非线性变化. 为了考察通过该槽道横截面的质量流量, 按槽道宽度方向为单位长度计算得到单位时间内上述微槽道流动的质量流量为 $\dot{m} = 6.2834 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$, 而来自文献[3]由滑移流理论修正(其中切向动量调节系数取为 0.87)的 N-S 解换算得到的质量流量为 $\dot{m} = 6.0709 \times 10^{-5} \text{ kg/s}$, 两者较为一致, 其偏差为 3.50%.

算例 2 过渡流区微槽道流动计算

图 14 绘出了较高出口 Knudsen 数 $Kn_{out} = 0.44$ 的高稀薄过渡流区二维微槽道氮气流算例(槽道长 $L = 6.61 \mu\text{m}$, 高 $H = 0.11 \mu\text{m}$, 入口与出口压力比 $P_{in}/P_{out} = 4.2$ 、出口压力给定为 $P_{out} = 1.01325 \times 10^5 \text{ Pa}$, 槽道入口温度与壁面温度相等 $T_i = T_w = 300 \text{ K}$, $Pr = 0.72$, $C_p/C_v = 1.4$), 槽道内气体流向速度等值线计算结果与来自文献[2]的 DSMC 模拟值定性比较情况, 由图看出, 利用本文算法得到的计算结

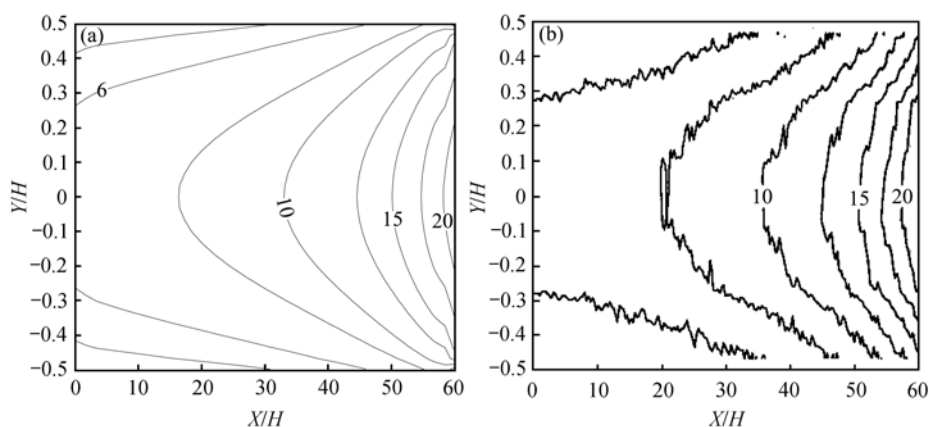
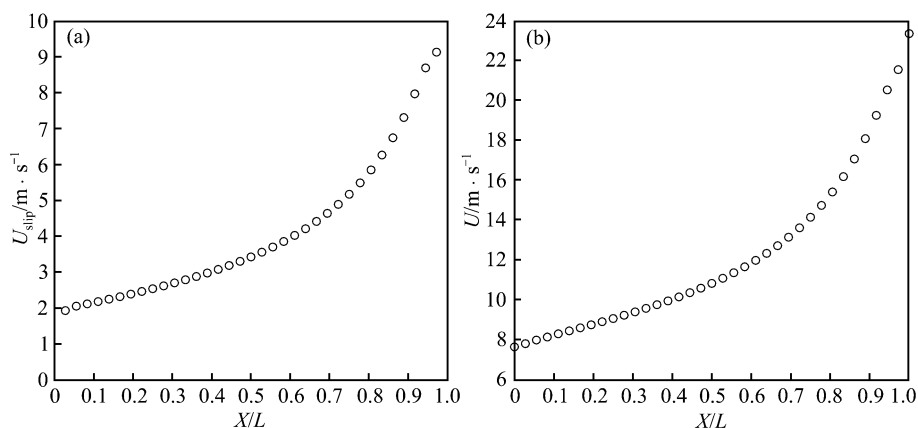


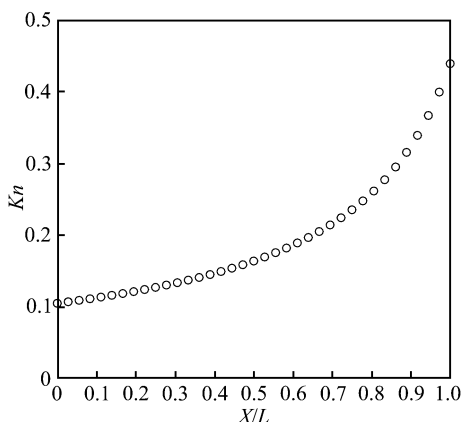
图 14 $Kn_{out} = 0.44$ 微槽道流向速度等值线计算结果与 DSMC 模拟值定性比较

(a) 本文计算值, (b) DSMC 模拟值. 实线示等值线, 其上数字代表该等值线对应的流向速度大小, 单位为 m/s

果与 DSMC 模拟值变化趋势一致; 从图 14(b)反映出 DSMC 模拟值存在巨大的统计波动, 这是由于微槽道内气体流动速度很低, 在出口轴线处达到最大仅为 23.34 m/s, 比氮气在 300K 时的分子热运动最可几速率 422.07 m/s 小很多. 在 DSMC 模拟中, 为了从这样的背景噪声中取出有用信息, 对微观分子运动与碰撞进行统计平均所需要的样本容量会相当大, 而且不可避免地出现巨大的统计涨落, 掩盖了有用信息的变化, 由此显示出利用传统 DSMC 方法模拟过渡区相当低速的微尺度流动暴露出较大统计波动掩盖有用信息的不足; 而在本文计算中, 即使在物理空间使用均匀网格划分流向×横向(37×25)较粗糙, 但本文方法所计算得到的流场等值线无论在入口与出口附近还是物面附近都相当平稳光滑, 能很好地再现微槽道内流场各个位置处的宏观流动变化细节. 图 15 分别绘出了该微槽道壁面滑移速度分布与槽道轴线上流向速度分布的非线性变化情况, 图 16 展示该微槽道中心轴线上气体流动当地 Knudsen 数从槽道入口处的 $Kn = 0.11$ 沿流向呈现明显的非线性急剧增加直到出口处变为 $Kn_{out} = 0.44$. 从图 15 可以看出, 对此稀薄过渡流区的微流动, 其壁面滑移速度在槽道入口处就变得很大, 占轴线上主流速度的四分之一左右, 流动到槽道出口处, 其壁面滑移速度差不多变成轴线上主流速度的二分之一了, 足显对于本身流动速度很低的微流动, 由于流动 Knudsen 数由槽道入口向槽道出口的非线性增加引起流动稀薄效应的急剧增强, 导致壁面滑移效应大大增强, 对槽道内的气体流动产生相当严重的影响, 气体流动从槽道入口附近的近连续滑移流变化为槽道出口附近的高稀薄流. 从图 14 和 15 反映出槽道内的流动速度变化范围大约在 1.93~23.34 m/s, 这与氮气分子的最

图 15 $Kn_{\text{out}} = 0.44$ 微槽道流向速度分布

(a) 壁面滑移速度分布, (b) 中心线流动速度分布

图 16 微槽道中心轴线上当地 Kn 数分布

可几热运动速度相比仅是后者的 $1/220 \sim 1/18$ 左右, 说明微流动的宏观有用信息完全隐藏在分子随机热运动中, 本文从直接求解分子一级的速度分布函数方程出发, 将包含所有分子输运信息的几率密度分布函数在速度空间、位置空间的信息均保存起来进行数值求解, 而后将速度分布函数对速度空间进行宏观矩积分来捕捉物理空间尺度微小的流动参数, 由此所发展起来的本文气体运动论数值算法应该能较好地适应和有效模拟尺度微小的气体流动变化规律.

4 结论

本文通过将气体运动论统一算法推广应用于 MEMS 微槽道流动计算研究, 发展可用于微流动问题的气体运动论边界条件数学模型及数值处理方法, 研究建立模拟不同 Knudsen 数二维低速微槽道流动问题的气体运动论数值算法, 以不同 Knudsen 数的 Couette 剪切流、热对流以及 Poiseuille 等短微槽道流为研究对象进行计算验证. 通过将本文计算结果分别与基于微观分子随机统计模拟的类 DSMC 模拟值、基于宏观流体力学的滑移 N-S 解、气体动力论 BGK-Burnett 数值解和相关实验数据及有关 Boltzmann 近似分析解的比较分析, 表明基于微观颗粒输运的 DSMC 方法模拟速度很低、量值微小的气体流动存在较大统计涨落, 以致掩盖有

用信息的困难; 而基于滑移边界条件修正的宏观流体力学 N-S 解算器只能用于近连续滑移流区微槽道流, 对于象本文研究的 $Kn = 0.1$ 的 Poiseuille 槽道流问题, 仅能计算给出部分流动参数, 对某些流动参数的滑移 N-S 计算却存在不可靠; 而本文发展的连接宏观流体力学与微观分子动力学的介观 Boltzmann 简化速度分布函数方程数值算法对高低不同 Knudsen 数的低速微槽道气体流动问题具有较好的模拟能力. 研究发现, 由于微尺度流动问题通常具有很低的宏观流动速度和较高的 Knudsen 数, 为此只需较少的离散速度坐标点就可保证气体运动论离散速度坐标法的数值精度, 这使得本文发展的气体运动论数值算法应该对微尺度气体流动问题的数值模拟具有很好的适应性, 从本文已经开展的初步计算尝试体会到, 算法过程很稳定, 且在有限时间内就可给出满意的结果, 预期若在有关研究条件保障下, 以本文气体运动论数值算法为研究基础, 进一步开展各类复杂微槽道流动问题计算研究, 可望发展起新型的模拟 MEMS 微槽道流动和传热问题的气体运动论数值计算方法.

本文工作仅仅是 Boltzmann 简化速度分布函数方程数值算法对 Couette, Poiseuille 等槽道流的计算验证和对微尺度槽道流动问题计算研究的初步尝试. 将本文发展的数值算法应用于各种微尺度气体流动问题, 特别是纵横比相当大的长槽道微流动问题, 在尽可能多的流动条件下与实验、DSMC 等可靠结果进行细致比较以及对方法本身的改进和发展, 均有待进一步研究和展开.

致谢 本文第一作者曾于 2001 年 9 月至 2003 年 9 月在清华大学力学博士后流动站、2002 年 10 月至 2003 年 4 月在香港科技大学研究工作, 期间曾和 Kun Xu、曾实、章光华、沈青教授、崔尔杰院士等人进行过有益讨论、交流; 本工作还得到中国博士后基金资助. 特此表示感谢.

参 考 文 献

- 1 Feynman R. There's plenty of room at the bottom. *Journal of Microelectromechanical Systems*, 1992, 1: 60~66[DOI]
- 2 Piekos E S, Breuer K S. Numerical modeling of micromechanical devices using the direct simulation Monte Carlo method. *Transactions of the ASME. Journal of Fluids Engineering*, 1996, 118: 464~469
- 3 Beskok A, Karniadakis G E, Trimmer W. Rarefaction and compressibility effects in gas microflows. *Transactions of the ASME. Journal of Fluids Engineering*, 1996, 118: 449~456
- 4 刘 静. 应用物理学丛书: 微米/纳米尺度传热学. 北京: 科学出版社, 2001
- 5 Bird G A. Approach to translational equilibrium in a rigid sphere gas. *Phys Fluids*, 1963, 6: 1518~1519
- 6 Bird G A. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. London: Oxford Univ Press, 1994
- 7 Moss J N, Price J M, Dogra V K, et al. Comparison of DSMC and experimental results for hypersonic external flow. *AIAA Paper 95-2028*, 1995
- 8 王 娟, 王秋旺, 陶文铨, 等. 微通道稀薄气体流动换热特性的研究, *中国科学, E 辑*, 2003, 33(3):

- 245~250[摘要][PDF]
- 9 Fan J, Shen C. Statistical simulation of low-speed rarefied gas flows. *J of Comput Phys*, 2001, 167: 393~412[DOI]
 - 10 Oh C K, Oran E S, Sinkovits R S. Computations of high-speed, high Knudsen number microchannel flows. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 1997, 11(4): 497~505
 - 11 Arkilic E B, Schmidt M A, Breuer K S. Slip flow in microchannels. In: Harvey J, Lord G, eds. 19th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Washington, DC AIAA, 1999, 347~353
 - 12 Beskok A, Karniadakis G E. A model for flows in channels, pipes, and ducts at micro and nano scales. *Microscale Thermophysical Engineering*, 1999, 3: 43~77[DOI]
 - 13 Balakrishnan R, Agarwal R K. Entropy consistent formulation and numerical simulation of the BGK-Burnett equations for hypersonic flows in the continuum-transition regime. *Proceedings of the International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics*, New York: Springer-Verlag, 1996
 - 14 Comeaux K A, Chapman D R, MacCormack R W. An analysis of the Burnett equations based in the second law of thermodynamics. AIAA Paper 95-0415, Reno: American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1995
 - 15 Patankar N A, Ko T, Choi H G, et al. correlation for the lift-off of many particles in plane Poiseuille flows of Newtonian fluids. *Journal of Fluid Mechanics*, 2001, 445: 55~76
 - 16 Nie X, Doolen G D, Chen S. Lattice Boltzmann simulation of fluid flows in MEMS. *Journal of Statistical Physics*, 2002, 107: 279[DOI]
 - 17 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. *Eur J Mech, B/Fluids*, 1990, 9(3): 449~456
 - 18 Xu K, Li Z H. Microchannel flow in the slip regime: gas-kinetic BGK-Burnett solutions. *Journal of Fluid Mechanics*, 2004, 513: 87~110[DOI]
 - 19 李志辉, 张涵信. 稀薄流到连续流的气体运动论模型方程算法研究. *力学学报*, 2002, 34(2): 145~155
 - 20 Li Z H, Zhang H X. Numerical Investigation from Rarefied Flow to Continuum by Solving the Boltzmann Model Equation. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2003, 42: 361~382[DOI]
 - 21 Li Z H, Zhang H X. Study on gas kinetic unified algorithm for flows from rarefied transition to continuum. *Journal of Computational Physics*, 2004, 193(2): 708~738[DOI]
 - 22 Shakhov E M. Kinetic model equations and numerical results. *Proceedings of 14th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, Tsukuba, 1984. 137~148
 - 23 Bird G A. Monte Carlo simulation in an engineering context. *Proceedings of International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Progr Astro Aero*, 1981, 74: 239~255
 - 24 Koura K, Matsumoto H. Variable soft sphere model for air species. *Phys Fluids A*, 1992, 4: 1083~1085 [DOI]
 - 25 李志辉, 吴振宇. 阿波罗指令舱稀薄气体动力学特征的蒙特卡罗数值模拟. *空气动力学学报*, 1996, 14(2): 230~233
 - 26 张涵信. 无波动、无自由参数的耗散差分格式. *空气动力学学报*, 1989, 6(2): 145~155
 - 27 Zhang H X, Zhuang F G. NND schemes and their applications to numerical simulation of two- and three-dimensional flows. *Advances in Applied Mechanics*, 1992, 29: 193~256
 - 28 Aksenova O A, Khalidov I A. The diffusion process as a model of rarefied gas atom scattering from a surface. *Proceedings of 21th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, Marseille, 1999, 1030~1036
 - 29 Nance R P, Hash D B, Hassan H A. Role of boundary conditions in Monte Carlo simulation of microelectromechanical systems. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 1998, 12(3): 447~449
 - 30 Alofs D J, Flagan R C, Springer G S. Density distribution measurements in rarefied gases contained between parallel plates at high temperature differences, *Phys Fluids*, 1971, 14(3): 529~533

-
- 31 Gross E P, Ziering S. Kinetic theory of linear shear flow. *Phys Fluids*, 1958, 1: 215~224
 - 32 Willis D R. Linearized Couette Flow for Arbitrary Knudsen Number, Royal Institute of Technology. Stockholm, KTH Aero. TN52, 1960
 - 33 Gorelov S L, Kogan M N. Solution of linear problem of rarefied gas dynamics by the Monte Carlo method. *Fluid Dynamics*, 1968, 3: 96~98
 - 34 Huang A B, Hwang P F. Test of statistical models for gases with and without internal energy states. *Physics of Fluids*, 1973, 16(4): 466~575
 - 35 Schlichting H. *Boundary-Layer Theory*. Chap.XII. New York: McGraw-Hill, 1968
 - 36 Tritton D J. *Physical Fluid Dynamics*. Oxford: Oxford University Press, 1988
 - 37 Zheng Y, Garcia A L, Alder B J. Comparison of kinetic theory and hydrodynamics for poiseuille flow. *Journal of Statistical Physics*, 2002, 109: 495~505[\[DOI\]](#)
 - 38 Uribe F J, Garcia A L. Burnett description for plane Poiseuille flow. *Phys Rev E*, 1999, 60: 4063~4078 [\[DOI\]](#)