

微纳尺度气体流动和换热的 Monte Carlo 模拟

(申请清华大学工学博士学位论文)

培养单位：清华大学工程力学系

学 科：动力工程及工程热物理

研 生：王沫然

指导教师：李志信 教授

二〇〇四年四月

Monte Carlo Simulations on Micro- and Nanoscale Gas Flow and Heat Transfer

Dissertation Submitted to

Tsinghua University

in partial fulfillment of the requirement

for the degree of

Doctor of Engineering

by

Moran Wang

(Power Engineering and Engineering Thermophysics)

Dissertation Supervisor: Professor Zhixin Li

April, 2004

摘 要

微纳尺度气体流动和换热机理的研究是推动 MEMS 和纳米科学与技术进一步发展的一个关键因素。由于特征尺寸小,努森数较大,传统的模拟方法不再适用,流动必须从分子运动的观点加以描述。直接模拟 Monte Carlo 法(DSMC)是适用范围最广、最可靠的模拟高努森数流动的数值方法。本文在理论分析的基础上,发展和使用 DSMC 法对微纳尺度气体流动和换热进行了模拟分析,并探讨了其物理机制。

为使 DSMC 适用于微纳尺度气体流动和换热的模拟,提出了一种处理压力边界的新方法,解决了前人方法中容易发散的问题,而且收敛速度显著提高;给出了处理非直通道进出口边界的具体方法,并对 90 度转角微通道内的气体流动进行了模拟,模拟结果与前人的实验数据基本符合,但转角处未发现流动分离现象。

对微尺度气体流动和常规尺度稀薄气体流动进行了相似性分析,总结归纳了微尺度气体流动与稀薄气体流动的相似性条件,即:几何形状和边界条件相似,同名准则数相等,且气体满足热完全气体假设。使用 DSMC 方法数值验证了上述相似性条件的正确性。

对于不满足热完全气体假设的 van der Waals 气体,分析并指出了现有模拟方法存在的问题及其原因,提出了一种基于 Enskog 方程的新算法——广义 Enskog Monte Carlo 法(GEMC),GEMC 引入了广义分子碰撞模型以反映分子间吸引势对碰撞截面的影响,考虑了气体稠密效应对分子间碰撞率的强化,引入了考虑分子间吸引势的内能转化模型。与其它方法相比,新算法对输运系数的计算结果与实验数据符合得最好。GEMC 的模拟表明, van der Waals 效应使得气体流动在通道壁面的阻力系数减小。

为实现跨流区流动的全粒子法耦合求解,发展了一种适用于近连续区气体流动模拟的新方法——驰豫时间 Monte Carlo 法(RTMC)。

使用 DSMC 方法对微纳尺度气体轴承和微型 Laval 喷管内的气体流动和换热进行了模拟分析,并针对各自的设计要求提出了优化建议。

关键词: 微纳尺度, 气体流动, DSMC, 相似性, van der Waals 效应

Abstract

The investigation of micro- and nanoscale gas flow and heat transfer is the key for the further developments of MEMS and nano science and technology. The Knudsen number becomes large enough due to the decreased characteristic length. The classical simulation methods are no longer suitable, and the flow must be described from a molecular point of view. The direct simulation Monte Carlo method (DSMC) is the most suitable and reliable numerical method for high-Knudsen-number flows. Based on theoretical analyses, the present dissertation studied the micro- and nanoscale gas flows and heat transfer by using the DSMC method, and then discussed their mechanism.

In order to make the DSMC method applicable for the simulations of the micro and nanoscale gas flow and heat transfer, a new method was developed to deal with the pressure boundary implements. The new method avoided the computational divergence in the previous methods, and a higher convergence speed was obtained. The inlet and outlet boundary implements for a non-straight channel were detailedly presented. With these new methods, gas flows in a micro channel with a 90 degree corner were simulated, the results agreed with the existed experimental data qualitatively and no vortex flow appeared at the corner.

The similarity was theoretically analyzed between microscale gas flows and normal-scale rarefied gas flows. The similarity qualifications were summarized as: similar geometries and boundary conditions, equal homonymous dimensionless criterions, and thermal perfect gas. This similarity rule was also numerically verified using the DSMC simulations for different scale flows.

The disadvantages of the existing methods for dense gas flow simulation, in which the thermal perfect gas assumption breaks down, were analyzed and the mechanisms were presented. To correctly simulate the van der Waals gas flow, an Enskog-equation-based new algorithm, generalized Enskog Monte Carlo method (GEMC), was proposed. In GEMC, a generalized collision model was introduced to

embody the effect of intermolecular attractive potentials on the collision cross section. The intermolecular collision rate was enhanced by considering the dense gas effect. A new internal energy transition model affected by the intermolecular attractive potential was also introduced into the new algorithm. By comparing the transport coefficients with the experimental data, the new algorithm was perfectly verified. The dense gas flows in micro and nanoscale channels were studied using the GEMC method, and the results showed that the van der Waals effect decreased the skin friction coefficient.

To implement the particle-only coupling simulations of multi-flow-regime flows, the present paper developed a new method, relax time Monte Carlo method (RTMC), based on the BGK equation. The RTMC method is more suitable for near continuum flows than DSMC.

Gas flows and heat transfer in micro and nanoscale gas slider bearings and micronozzles were simulated and analyzed using DSMC. The optimizations were suggested based on the numerical results and the design requirements.

Key words: micro- and nanoscale, gas flow, DSMC, similarity, van der Waals effect

目 录

摘 要.....	I
ABSTRACT.....	II
符号对照表.....	VIII
第一章 引 言	1
1.1 研究背景.....	1
1.1.1 MEMS 与纳米技术.....	1
1.1.2 微纳尺度流动与换热研究的驱动力.....	3
1.1.3 微纳尺度气体流动和换热数值模拟研究的必要性.....	6
1.2 研究现状.....	8
1.2.1 微纳尺度流动和换热的模拟方法.....	8
1.2.2 使用 Monte Carlo 法模拟微流动的研究现状	12
1.3 微纳气体流动和换热研究的问题与挑战.....	19
1.4 本文研究的主要内容.....	19
第二章 数值方法	21
2.1 直接模拟 MONTE CARLO 法 (DSMC)	21
2.1.1 基本思想.....	21
2.1.2 程序流程.....	22
2.1.3 分子间碰撞模型.....	23
2.1.4 碰撞率与碰撞对的选取.....	27
2.1.5 内能转换模型.....	28
2.1.6 边界上的处理.....	29
2.1.7 宏观量统计.....	29
2.2 程序的验证.....	30
2.2.1 与标准程序的对比.....	30
2.2.2 与滑移理论结果的对比.....	33
2.3 模拟参数对模拟结果的影响.....	37

2.3.1 网格尺寸的影响.....	37
2.3.2 时间步长的影响.....	40
2.3.3 单元网格内分子数的影响.....	41
2.3.4 分子质量的影响.....	42
2.3.5 分子直径的影响.....	43
2.3.6 粘性律的影响.....	44
2.3.7 碰撞率的影响.....	44
2.4 进出口边界条件的处理.....	45
2.4.1 前人的进出口边界条件处理方法及分析.....	45
2.4.2 压力边界处理的新方法.....	46
2.4.3 转角通道的速度边界处理方法.....	52
2.4.4 压力驱动下 90 度转角流动的算例.....	53
2.5 小结.....	57
第三章 微气体流动与稀薄气体流动的相似性分析.....	58
3.1 前人对稀薄气体流动相似性的讨论.....	58
3.2 微气体流动与稀薄气体流动的相似性条件.....	59
3.3 相似性的数值验证.....	60
3.3.1 亚音速通道流动的相似性数值验证.....	60
3.3.2 超音速横掠平板流动的相似性数值验证.....	65
3.4 小结.....	68
第四章 微纳尺度稠密气体流动的 VAN DER WAALS 效应.....	69
4.1 微纳尺度稠密气体流动的特点与模拟中的困难.....	69
4.2 两种现有的模拟方法.....	70
4.2.1 一致性 Boltzmann 算法(CBA).....	70
4.2.2 Enskog 模拟 Monte Carlo 法(ESMC).....	77
4.2.3 两种方法的结果对比及存在的问题分析.....	80
4.3 广义 ENSKOG 蒙特卡洛法.....	82
4.3.1 L-J 流体的广义分子碰撞模型.....	82
4.3.2 碰撞率的强化.....	85

4.3.3 van der Waals 流体的输运系数.....	86
4.3.4 Larsen-Borgnakke 内能转换模型.....	88
4.4 VAN DER WAALS 效应对微气体流动和换热的影响.....	90
4.5 小结.....	93
第五章 近连续区气体流动与换热的 MONTE CARLO 模拟	94
5.1 近连续区气体流动 DSMC 模拟的难点.....	94
5.2 模拟近连续区气体流动换热的 MONTE CARLO 法.....	95
5.2.1 Euler 方程.....	95
5.2.2 BGK 方程.....	96
5.2.3 驰豫时间 Monte Carlo 法——RTMC.....	97
5.3 模拟结果的分析.....	98
5.3.1 亚音速通道流动.....	98
5.3.2 超音速横掠平板流动.....	101
5.3.3 计算效率的讨论.....	104
5.4 小结.....	104
第六章 复杂微气体流动及换热的 DSMC 模拟与分析.....	105
6.1 微气体滑动轴承的性能分析.....	105
6.1.1 研究背景.....	105
6.1.2 前人的工作.....	106
6.1.3 结果与分析.....	108
6.2 微型 LAVAL 喷管内气体流动换热的模拟与性能分析.....	114
6.2.1 研究背景.....	114
6.2.2 前人的模拟工作和存在的问题.....	115
6.2.3 模型的选取与验证.....	116
6.2.4 模拟结果与分析.....	119
6.3 小结.....	128
第七章 结论与展望	130
7.1 主要结论.....	130
7.2 下一步工作的展望.....	131

目 录

参考文献	133
致谢及声明	146
个人简历、在学期间的研究成果及发表的学术论文	148

主要符号对照表

a	当地声速[m/s]; 或吸引势强度[Pa]
A	进出口的截面面积[m ²]
b	分子瞄准距离[m]
b_2	定义为 $2\pi\sigma^3/3$, 第二阶 virial 系数[m ³]
B	随机数, 可以表示为 $B = \sqrt{-\ln(R_f)}C_{mp}$
c'	分子热运动速度[m/s]
c_r	相对速度[m/s]
c_0, C_{mp}	分子的最可几热运动速度[m/s]
d	分子的碰撞直径[m]
D	气体扩散系数
D_t	喷管喉部宽度[m]
f	分子速度分布函数
f_0	分子平衡分布函数
F	分子数通量(m ⁻²)
F_t	喷管推力[N]
H, h	通道宽度[m]
I_{sp}	喷管比冲[s]
k	Boltzmann 常数[J/K]
Kn	努森数
L	通道长度[m]; 特征尺度[m]
L_y	(子)网格划分尺度[m]
m	分子质量[kg]
m_r	折合质量[kg]
Ma	马赫数

主要符号表

n	分子数密度[m ⁻³]
N	网格内的分子总数
N_c	分子碰撞数
N_{sample}	采样数
N_{total}	最终的计算分子数
p	气体压强[Pa]
P_c	临界压力[Pa]
P_{peak}	轴承的峰值压力[Pa]
Pr	普朗特数
q	分子数通量[s ⁻¹]; 壁面的热流通量[J/m s]
R	通用气体常数[J/kg K]
Re	雷诺数
R_f	0 和 1 之间均匀随机数
s	分子速度比, 定义为 $s = U\beta$ 或 $s = V\beta$
T	气体温度[K]
T_*	无量纲温度 $T_* = kT / \varepsilon$
T_c	临界温度[K]
T_{tr}	平动温度[K]
T_{rot}	转动温度[K]
u, v	分子速度分量[m/s]
U, V	气体的宏观速度分量[m/s]
\bar{v}_m	分子平均速度[m/s]
V_c	网格体积[m ³]
w	轴承的负载系数
Y	稠密气体碰撞强化算子
Z	松弛数
Z_R	旋转松弛数

希腊符号

α	软球散射率；壁面协调系数
α^*	广义软球模型中的软球散射率
α_j	广义软球模型中的参数
β	定义为 $1/\sqrt{2RT}$
δt	微小时间段[s]
ζ	内能自由度
γ	比热比
μ	动力粘度[kg/m s]
ν	运动粘度[m ² /s]
κ	气体导热系数[W/m K]
λ	气体平均自由程[m]
ω	粘性温度率
ω_j	广义碰撞分子模型中的幂参数
ϕ	0 和 2π 之间的均匀分布随机数
ρ	气体密度[kg/m ³]
Θ	$\langle \Delta v_{ij} \cdot r_{ij} \rangle$ ，碰撞对的速度改变量与粒子中心连线矢量的点积
σ	分子中心距势能为零处的距离[m]
σ_T	总碰撞截面面积[m ²]; 壁面热协调系数
σ_v	壁面动量协调系数
σ_μ	粘性碰撞截面[m ²]
σ_M	动量碰撞截面[m ²]
ϖ_B	基于 Boltzmann 方程的二元碰撞几率
ε	势井深[J]; 分子碰撞率的一个量度参数
δ	表征分子极化度的无量纲参数
ε_t	单分子平动能量[J]

主要符号表

ν	分子碰撞频率[s ⁻¹]
$\tau = \nu^{-1}$	驰豫时间[s]
Γ	单位时间单位体积的粒子碰撞率[s ⁻¹ m ⁻³]
$\Gamma(\dots)$	伽马函数
Λ	轴承数, 定义为 $6\mu UL / p_0 h_0^2$

下标

0	初始参量; 或理想状态下参量
<i>B</i>	基于 Boltzmann 方程的值
<i>c</i>	中心线上气体参数
<i>e</i>	出口边界物理量
<i>E</i>	基于 Enskog 理论的值
<i>g</i>	壁面处气体参数
<i>in</i>	入口边界物理量
<i>i</i>	入射分子物理量
<i>j</i>	网格位置
<i>r</i>	出射分子物理量
<i>ref</i>	参考量
<i>rot</i>	转动量
<i>s</i>	滑移量
<i>tr</i>	平动量
<i>th</i>	喷管喉部量
<i>w</i>	壁面参数
∞	无穷远处气体参数

第一章 引言

随着 MEMS 和纳米技术的飞速发展，人们对微纳米尺度的物理现象及其物理机制的深入认识有了迫切的要求。然而，由于加工水平和测量技术的限制，微纳尺度流动和换热的实验研究遇到了极大的困难，这使得理论分析和数值模拟成为研究微纳米流动和换热问题的主要手段。本章主要介绍微纳米尺度流动换热研究的应用背景和研究现状，在综合分析研究现状的基础上，介绍本文的研究内容。

1.1 研究背景

1.1.1 MEMS与纳米技术

在过去的十余年时间里，MEMS 技术和纳米科技得到了前所未有的发展，人们正在从米、毫米的宏观世界逐渐走进微米、纳米的微细观世界^[1-4]。

一提到 MEMS(微电子机械系统)和纳米技术，就不能不提及早在 1959 年诺贝尔物理学奖获得者 Richard P. Feynmann 在美国物理学会年会上作的“*There's Plenty of Room at the Bottom*”的报告^[5]，在报告中，Feynmann 博士科学的预见制造技术将沿两个途径发展：一个是从宏观到微观，即 Top-Down 的途径，另一个是从最小构造模块的分子开始，进行物质构筑，即 Bottom-Up 的途径。经过大量科学家数十年的研究，特别是上个世纪八十年代后期以来，Feynmann 的这两个构想分别在 MEMS 技术和纳米技术中得到了体现^[6-8]。

1.1.1.1 MEMS(微电子机械系统)

一般来说，狭义的 MEMS 技术主要指加工技术，它是以微电子加工技术为基础发展而来，除了氧化、扩散、光刻和离子注入等标准 IC 工艺外，目前还开发出大量新型微加工技术。目前通用的 MEMS 加工工艺主要包括：体硅加工方法(Bulk Silicon Micromachining)，表面硅加工方法(Surface Silicon Micromachining)、LIGA(德语 Lithographie Galvanoformung Abformung 的缩写)方法及电子放电加工(EDM)方法等^[6]。

广义的 MEMS 则不单指加工技术，是指基于（但不限于）IC 工艺设计并制造、可批量生产、集电子元件与机械器件于一体的微小系统^[8-10]。关于 MEMS 的定义，有以下 5 点需要注意^[9]：

- ✓ 一般来说，MEMS 的特征尺度在 1 毫米到 1 微米之间，它区别于一般常规(macro)尺度(即大于 1 厘米尺度)的传统“机械”，但也并非进入物理上的微观层次，因此多数的经典理论仍然适用；
- ✓ 基于硅微加工(microfabrication)技术设计制造，但绝不限于此；
- ✓ 与微电子芯片相同，可以大批量生产，因此生产成本降低，使其“性价比”较传统机械制造技术有大幅度的提高；
- ✓ MEMS 中的“机械”不限于狭义的机械力学中的机械，它代表一切具有能量转化、传输等功能效应，例如力、热、声、光、磁，甚至化学和生物等；
- ✓ MEMS 的目标是微机械和微电子集成的微系统，即具有智能的微系统。

从 MEMS 的定义可以看出，MEMS 的目的不仅在于缩小尺寸，还在于通过微型化和集成化来探索新原理、开发新功能的元件和系统，开辟一个新技术领域，形成一个新产业。MEMS 具有尺寸小，重量轻，响应快；精度高，性能好；可以集成控制、感应和执行等多种功能；生产成本低，生产周期短，能耗低；易制、易用、易改造；对环境的损害小；基于新思想、新原理的发明创造多，研究潜力大等特点。MEMS 在工业、国防、航空航天、航海、医学和生物工程、农业和家庭服务等领域有着潜在的巨大应用前景^[10]。

1.1.1.2 纳米技术

纳米技术(Nanotechnology)是指在 0.1~100nm 尺度内研究电子、原子和分子等运动规律和特性，并以在纳米水平上设计、装配和操纵器件为目标的学科，其内容涵盖了纳米物理学、纳米电子学、纳米材料学、纳米机械学以及纳米计量学在内的诸多学科^[11,12]。

鉴于纳米科技较 MEMS 对未来具有更为深远的意义，各主要科技强国对其研究展开了激烈的竞争，各国相继制定了纳米技术研究开发政策，增加了科研经费，以求在新的世界科技格局中处于领先地位。近五年来，纳米技术研究也

取得了突飞猛进的发展^[4,7]。2001年5月,美国 Connell 大学的科学家研制出了世界上第一台生物分子纳米发动机,其螺旋桨长约 750 nm,宽约 150nm;2002年1月,加州大学研制出的分子发动机,整台设备直径 11nm,高 11nm,可带动比自身大十几倍的物体^[13];2003年7月,Berkeley 大学研制出了世界上最小的人造发动机,其发动机的宽度仅有 500nm^[14];2004年2月在荷兰召开的 IEEE MEMS'04 会议上日本学者演示了在 10nm 的小球上刻画的立体三维世界地图^[15]。随着纳米技术的发展,MEMS 领域中众多术语的词头正在由 Micro 更替为 Nano,体现了纳米技术的冲击和微型化的步伐。

尽管 MEMS 和纳米科技走了截然相反的两条道路,但从整体上看,微米技术与纳米技术之间还是一种相互交叉融合和相互促进的关系^[13]。一方面,通过 MEMS 技术的集成,可以将基于 Nano 效应的功能和特性转变成为新的器件和系统,正如美国前 DARPA 的 MEMS 主管 A. Pisano 在 Nanotech 2003 会议上指出的“MEMS 技术将担任纳米科学走向纳米技术的桥梁”;另一方面, MEMS 同样需要通过利用纳米科学技术来寻求新的突破,纳米科技将成为微米技术拓展敏感事物和认识事物的窗口。从国外的研发状况看,微米纳米技术相互融合已经成为趋势和主流,一些基于微纳集成的科研计划和基础设施应运而生,例如美国 Los Alamos 国家实验室成立了集成纳米技术中心(CINT),法国将于 2004 年正式建成微米纳米技术发明中心,德国“微系统技术 2000 未来计划”也将微纳接口列为未来重要领域,德国 Karlsruhe 研究中心将在其中期计划中将微系统计划和纳米技术计划合并到一个计划中。2003 年在德国柏林召开的 NAMIX 第一届会议以及在法国 Grenoble 召开的 MINATEC 2003 都将会议主题定为微纳集成和接口^[16]。

1.1.2 微纳尺度流动与换热研究的驱动力

MEMS 技术以及纳米加工技术的发展为微纳尺度科学(物理问题等的研究)的发展提供了可能的研究平台;然而,如前文所述,在其发展过程中过于强调了加工技术的重要性,而对其内部物理问题的研究重视不够,以致于“加工水平的发展速度超越了对其内部存在的非常规物理问题的理解程度”^[17],后劲不足。以 MEMS 研究为例,在度过了 10 年多的研究高潮之后,已经开始走下坡路了。据称,目前在美国单以 MEMS 加工为课题的项目申请美国国家的研究资金

资助已经非常困难了。一些国际著名学者已经认识到了这个问题的严峻性，为了在现有加工水平的基础上进一步发展 MEMS 以及尽量避免纳米科技的发展重蹈此覆辙，纷纷撰文呼吁重视微纳尺度物理问题的基础性研究^[7,8,17-19]。

其实，在微纳尺度下的确存在很多亟待解决的流动和换热问题^[8,17-21]。以气体流动为例，气体在微通道内流动时的阻力是增大了还是减小了一直以来都是人们争论的焦点^[22]。近年来，由于微小卫星技术的发展及其在通讯和气象等方面的重要应用前景，为其提供轨道保持和转换以及姿态位置精确控制动力来源的微推进系统受到了各国学者的广泛关注^[23,24]。图 1-1 显示了 MIT 学者 R. L. Bayt 制造的一种喉部尺寸小于 20 微米的 Laval 喷管^[25]。由于面体比的增加，这种喷管能否产生超音速气流曾受到了质疑，直到 Bayt 用实验验证了出口超音速气流的存在，并指出微喷管的推力重量比可以比常规喷管大成千上万倍^[23,24]。但是，对于这种微喷管内跨音速、跨流区气流的流动和换热机理人们尚无准确认识，以至于对其性能的预测在雷诺数小于 1500 时严重偏离了实验数据^[25]，如何对其进行准确预测和分析是目前研究的难点和热点。另一个纳米尺度气体流动和换热的实例来源于计算机中使用的硬盘驱动器。图 1-2 显示了 IBM 的一款新型的硬盘驱动器。为了尽可能的提高硬盘读取数据的速度和准确性，其内部读写头和盘面磁道之间的距离要尽可能的小而且保持平稳，若距离过大，读写头不能准确读写数据；若距离过小，读写头就会卡死在盘面上。对读写头和磁道之间气体夹层内的流动和换热进行准确分析和预测对硬盘设计来说是至关重要的。据报道，在最新的 IBM 硬盘中，读写头和盘面之间的距离已经小于 20 纳米^[26,27]，此时常规的气体流动控制方程已不再适用，使用新的可靠的方法对其进行分析预测是目前科学家们努力的方向^[28-32]。

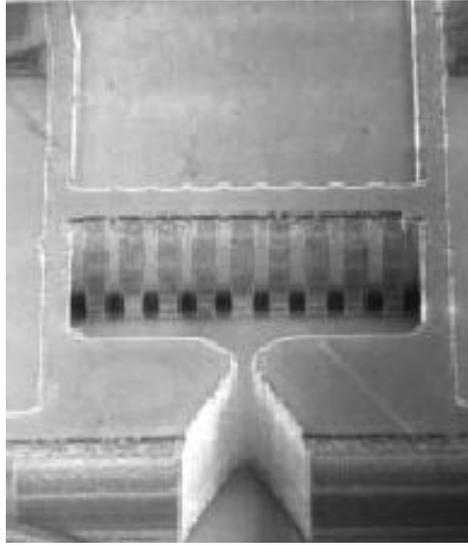


图 1-1 喉部尺寸小于 20 微米的微型 Laval 喷管^[25]



图 1-2 IBM25Gbit/in² 硬盘驱动器^[26]

综上所述，对微纳尺度下流动和换热现象的深入研究是 MEMS 和纳米科技进一步发展的必然需要，也是工程实际应用的迫切需求。近两年来，微纳尺度的流动和换热问题已经成为国际研究的一个热点问题。一些学术组织如 AIAA 和 ASME 等召开的与微流体研究相关学术会议的数量和规模在增大，例如，

ASME 从 2003 年开始主办的“Microchannels and Minichannels”的国际年会就是主要探讨微小尺度通道内的流动和换热问题的；MEMS 领域的专业刊物，例如《Journal of Micromechanics and Microengineering》中关于物理机制问题的文章数量和比例在增加，微尺度热物理问题的专业刊物《Microscale Thermophysical Engineering》的影响力在逐年提高，另一本专门探讨微流体和纳流体的杂志《Microfluidics and Nanofluidics》也于 2004 年由 Springer 出版社开始出版发行。

1.1.3 微纳尺度气体流动和换热数值模拟研究的必要性

1.1.3.1 实验研究的困难

对微尺度气体流动的实验研究要追溯到上个世纪初，1909 年 Knudsen 对微米通道内的气体流动阻力特性进行了实验研究，并指出其内部存在稀薄气体效应^[33]。随着加工技术的发展，上个世纪 90 年代至今许多学者对微尺度通道内的流动和换热作了大量的实验研究^[34-37]。然而，对这些实验做细致的分析可以发现，尽管 MEMS 的发展使得这些实验成为可能，但仍然存在很多问题和困难。一方面，MEMS 加工水平依然是限制实验水平的主要因素。由于尺度微小，加工所能保持一致性和可重复性受到限制，这使得实验结果即便在定性上都可能差别很大^[22]。另一方面，由于测量水平的限制，实验可以测量得到的数据通常是敏感程度最弱的、各种因素综合作用的物理量，例如压力分布或热流量等，而对于表征流动和换热细节的物理量，目前还没有有效的测量方法。因此实验结果对我们来说仿佛一个“黑匣子”，不能直接反映微尺度流动和换热的机理问题，而对实验结果的分析也会因不同的假想模型而有所不同，实验数据往往只充当一个模型验证的作用。

1.1.3.2 理论研究的困难

努森数 Kn 是稀薄气体动力学中用来表征气体稀薄程度的无量纲数，其定义为

$$Kn = \frac{\lambda}{L_c} = \frac{\lambda}{\rho/(d\rho/dx)} \quad (1-1)$$

根据努森数的大小，气体流动可以划分为 4 个区^[38,39]：

$Kn < 10^{-3}$	连续介质区
$10^{-3} < Kn < 0.1$	滑移区
$0.1 < Kn < 10$	过渡区
$Kn > 10$	自由分子流区

在连续区，气体流动可以通过连续介质控制方程加以描述；否则连续介质假设失效，但在滑移区，气体流动和换热仍然可以通过 N-S 方程加滑移修正得到求解；在过渡区和自由分子流区，气体流动必须使用粒子运动的观点加以描述，此时其控制方程为 Boltzmann 方程。

微纳米尺度的气体流动由于其特征尺寸小，尽管气体并非真的稀薄，但其努森数仍然会比较大。根据努森数对气体流动的分类，当微纳气体流动处在过渡区时，可以对其进行描述的只有 Boltzmann 方程。

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \left(\mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}} \right) + \frac{1}{m_i} \left(\mathbf{X}_i \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{v}_i} \right) = \sum_j J(f_i, f_j) \quad (1-2)$$

其中： $J(f_i, f_j)$ 为碰撞积分项。

Boltzmann 方程的碰撞积分项非常复杂，目前仍无普遍适用的数学表达式。前人只对最简单的几种流动情况给出过其数学表达式，例如一维直通道的稳态流动和无碰撞自由分子流等^[40-43]。为了求解 Boltzmann 方程，前人尝试了不同的简化模型，其中最著名的当属 BGK 模型^[44]以及由其衍生出的各种求解方法^[45-47]，但深入的研究表明，基于 BGK 模型的求解方法只适用于努森数小于 1 的情况^[47]。

综上所述，微纳气体流动和换热本身的特点以及其控制方程 Boltzmann 方程的复杂性给理论研究带来了巨大的困难和挑战。

鉴于微纳尺度气体流动和换热实验研究以及理论研究所遇到的目前难以克服的困难，数值模拟成了唯一可以寄予希望的方法。所幸近 10 年来计算机水平和计算技术得到了突飞猛进的发展，使得使用复杂的数值模拟技术对微纳米气体流动及换热机理进行深入的研究成为了可能。

1.2 研究现状

1.2.1 微纳尺度流动和换热的模拟方法

Mohamed Gad-el-Hak 在 1999 年的一篇综述中给出了如图 1-3 所示的流动模拟方法的分类^[17]，其中涉及到的模拟方法几乎涵盖了微尺度流动模拟所能用到的所有方法。

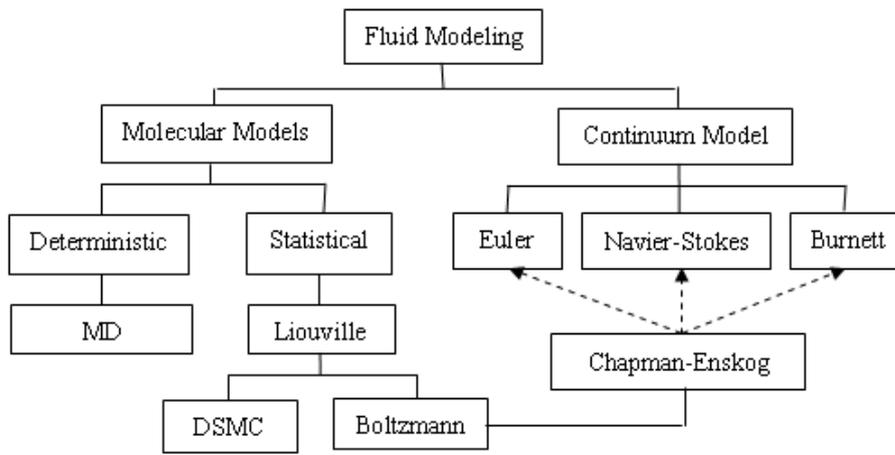


图 1-3 流动模拟方法的分类^[17]

1.2.1.1 基于连续介质假定的方法

对于处于滑移区的气体流动，尽管连续介质假定已经失效，但由于努森数小($Kn < 0.1$)，分子间断效应还不明显，因此仍然可以使用基于连续介质假定的方程加壁面滑移修正来描述。**N-S 方程的滑移修正**是目前使用最为广泛的方法^[38-39]，Maxwell 根据滑移理论对壁面处的气体速度和温度进行了复杂的分析，并给出了著名的 Maxwell-Smoluchowski 滑移条件^[48]；Kennard 对其进行了简化处理，得到了目前应用广泛的一阶滑移边界条件^[49]。一阶滑移边界条件适用范围有限，一般只适用于努森数小于 0.1 的情况，Beskok 发展了一阶滑移边界条件，引入了高阶滑移边界条件，并在此基础上提出了著名的 μ -Flow 模型^[38]。新的边界条件可以适用于努森数小于 0.3 的流动^[38,39]。

钱学森先生曾指出，对 Boltzmann 方程使用 Chapman-Enskog 展开的二阶近

似所导出的 Burnett 方程，在努森数不太大和马赫数下应可以给出比 Navier-Stokes 方程更好的结果，但同时也要在边界上提出更为复杂的条件^[50]。由于 Burnett 方程的复杂性和数值求解时遇到对高频扰动的不稳定性问题，曾使它的可靠性遭到了质疑^[51]。但最近在与 DSMC 以及实验结果的对比研究中表明，增广 Burnett 方程在滑移区的确优于 N-S 方程^[52,54]。

不论是 N-S 方程还是 Burnett 方程的滑移修正方法，其显著的优点就是计算效率高，特别是对于单组分、单流区(滑移区)、亚音速以及形状简单通道内的气体流动和换热的模拟；同时，它们的缺点也是显而易见的，当流动涉及到多组分，特别是含有化学反应，或流动跨流区，或流动马赫数比较大，或流动边界复杂时，基于连续介质假定和滑移修正的方法将遇到困难。

1.2.1.2 基于 Boltzmann 方程的方法

当流动处于或部分处于过渡区时，只做边界上的滑移修正不能对气体流动做出正确的预测，气体流动应该由 Boltzmann 方程加以描述。

对 Boltzmann 方程直接离散求解是模拟高努森数气体流动最直接的求解方法，可使用的离散方法包括有限差分法和有限单元法等。而使用这种方法最大的问题是必需的节点数（或有限单元数）非常大。例如对于只在一个空间维上存在梯度的一维稳态问题，分布函数在速度空间上是轴对称的，在相空间上需要一个三维数组。由于速度空间域可以无限扩展。因此，必须对有限的范围进行封闭，以致在此范围之外只能有少数可以忽略的分子，但要预测这些范围的恰当位置是非常困难的。这个问题在高超音速流动或高温流情况下尤其严格，因为即使相对气体主体来说很少的一部分高速气体分子对宏观流动性质都可能有很大的影响。当速度分布函数为二维或者三维的时候，在相空间上需要一个五维数组。若流动为非稳态，则时间也是一个独立变量。若每一维使用 100 个网格间距，三维稳态流动的 Boltzmann 方程求解则需要 10^{14} 个网格点。对于气体混合物中的每个气体分子都要进行耦合联立方程组的求解。若考虑到其他因素的影响，例如化学反应和热辐射等，则 Boltzmann 方程的求解会遇到几乎不可克服的困难。正是因为这些困难，对 Boltzmann 方程的直接求解只限于一些流动几何区域简单、单原子气体、中低马赫数的情况。尽管如此，求解碰撞项所需要

的巨大的计算量仍然是个问题。第一个成功对 Boltzmann 方程进行直接数值求解的方法是由 Nordsieck、Hicks^[55]和 Yen^[56]提出来的，他们使用传统的有限差分技术，求解了一维稳态流动问题。Tcheremissine 于 1973 年将这种方法扩展到了二维稳态流动^[57]。对碰撞积分求解的 Monte Carlo 方法由 Tcheremissine^[58]和 Tan 等^[59]提出。

Boltzmann 方程直接离散求解方法的主要缺点在于必须指定速度相的限制网格，这导致了计算量与方法易用性的矛盾。任何减少计算量的努力都会使方法更难使用。

另一种可以对 Boltzmann 方程求解的方法是格子 Boltzmann 方法(LBM)，它从更早的格子气自动机发展而来^[60]。格子 Boltzmann 方法本质上是一种介于宏观和微观之间的模拟方法，它使用运动分子的分布函数来代替在格子中运动的气体分子，气体质量(密度)只能沿格子联线的方向传递^[61,62]；格子 Boltzmann 方法避开了格子气自动机从整体型粒子数到实型粒子平均分布的统计平均过程，从而大大消除了统计误差。从理论上讲，格子 Boltzmann 方法可以看成是 N-S 方程差分法逼近的一种无限稳定格式^[63]。由于 LBM 较宏观的 N-S 方程更接近微观层次，因此更能反映流动的细节，通常被用来研究流动的物理机制问题^[64]。近两年来，LBM 也开始应用在 MEMS 的气体流动模拟中^[65-69]，但其采用的通过改变壁面附近格子点上的驰豫时间以反映速度滑移的方法仍值得进一步深入探讨。

采用格子 Boltzmann 方法模拟微纳尺度气体流动存在两个主要缺陷：一、从理论上讲，LBM 并非针对 Boltzmann 方程的模拟方法，而是基于 Boltzmann 方程的简化模型——BGK 方程，因此该方法从本质上不适于高努森数流动的模拟，一般来说，适用的努森数小于 1^[47]；二、尽管 LBM 方法较下面介绍的粒子法有更高的计算效率，但却付出了物理真实性的代价，事实上，这种方法应该更准确的称之为提供了气体的相似物，而不是气体模型^[61,62]。

1.2.1.3 粒子法

鉴于直接从 Boltzmann 方程出发的数值模拟方法所遇到的困难，一些学者根据气体分子的运动特性提出并发展了粒子法的模拟方法。经过多年的发展，

目前的粒子模拟方法已经有许多种，这里着重介绍两种最典型、影响力最大的方法：分子动力学方法和直接模拟 Monte Carlo 法。

分子动力学模拟(MDS)是基于第一原理性方程和确定性理论的模拟方法^[70-72]。此方法在设置分子的初始状态时可以使用随机过程，而计算随后的分子运动，包括分子之间碰撞和边界相互作用则是确定性的。当分子横截面交叠时认为碰撞发生。此方法的计算时间与模拟分子数的平方成正比。**MDS**最主要的难题是，对于给定的分子尺寸、流动区域和气体密度，模拟的分子数并非一个自由参数。表征流动的最佳分子数与平均自由程的三次方成正比。例如，对于一个分子直径为 $4 \times 10^{-10} \text{m}$ 的气体流动，这个分子数可以由下式给出：

$$N_{\lambda} \equiv n\lambda^3 = 3856(n_0/n)^2 \quad (1-3)$$

其中 n_0 为标准状况下的气体数密度。若考虑 **MD** 模拟在各个方向延伸 30 个平均自由程的三维流场，在标准数密度下大概有 10^8 个模拟分子。然而，对于密度为标准密度的 100 倍的情况下，需要模拟的分子数就降为 10^4 个，这个数量很容易在计算中达到。因此，使用真实分子直径的 **MD** 计算更适合于稠密气体，而且 **MD** 模拟的大部分应用例子也都证明如此^[71]。另一个极端情况，考虑密度比在 10^{-6} 量级的稀薄气体情况，方程(1-3)表明此时需要模拟的分子数大概在 10^{20} 个。若 **MD** 方法应用于如此低密度的情况，正确的平均自由程只能由如下方法获得：即用少量的大分子来代替大量的小分子。但这将导致不正确的状态方程以及错误的气体输运系数，从而使模拟流场出现偏差。还需要注意的一点是许多二维 **MD** 计算都是使用的圆柱形分子而不是球形分子，这会导致非物理真实的宏观特性^[70]。**MD** 方法被证明是适合模拟稠密气体或液体，而不适合模拟稀薄气体^[71]。

另一种非常重要的粒子模拟方法是**直接模拟 Monte Carlo 法(DSMC)**，它基于气体稀薄和分子混沌假设，在这两个假设下，气体分子之间可以只考虑二元碰撞为主体，当计算的时间步长小于分子平均碰撞时间时，分子的运动和碰撞可以解耦。**DSMC** 另一重要特点是每一个模拟粒子可以代表大量真实分子，因此在碰撞后模拟粒子的速度和能量可以通过统计规律随机分配。尽管对单个粒子来说速度和能量具有随机性，但其总体上保持了动量和能量的守恒^[73,74]。**DSMC** 方法是由 Bird 于 1963 年首次提出并应用于单原子气体的松弛问题，而应用于流动则是 1964 年对激波结构问题的求解。尽管 **DSMC** 是一种唯象的模拟方

法,但可以证明它与稀薄气体的 Boltzmann 方程具有一致性^[75,76]。DSMC 方法在航空航天领域得到了大量实验的验证^[77,78],已经成为其他新方法在过渡区适用性的一个评价标准^[79],近些年,DSMC 也应用在微尺度气体流动和换热的模拟分析中^[80-85]。

一般认为,DSMC 只能模拟稀薄气体的流动和换热,Bird 还建议所模拟的气体密度不要大于标准状况下气体密度的两倍^[74]。近些年,这种情况有所改善。Alexander 等^[86-89]提出了一致性 Boltzmann 算法(CBA),试图对 DSMC 进行修正,通过在粒子碰撞后引入附加位移的方法,使气体符合 van der Waals 方程,使之扩展到稠密气体甚至液体的模拟,并已经在核子流^[90]、气液表面特性^[91]以及非理想气体微纳流动^[92]的模拟中得到了成功应用。另外一些学者则直接从对稠密气体精确描述的 Enskog 方程出发,借鉴 DSMC 对 Boltzmann 方程求解的做法,提出了可以对 Enskog 方程直接求解的 Monte Carlo 法^[93-95]。尽管这两种方法还不很成熟,但其目的殊途同归,都是把 DSMC 扩展到稠密气体流动和换热的模拟分析中。

与其他几种方法相比,DSMC 具有以下几个重要特点:

- ✓ 它是一种介观的模拟方法,既能反映气体分子运动的微观特性,又具有可以承受的计算量要求,因此适用于微气体流动的模拟;
- ✓ 基于真实分子运动的物理模型,可以反映真实物理本质,且高效;
- ✓ 可以处理非常复杂几何形状和复杂流态的流场;
- ✓ DSMC 的计算过程不依赖于逆碰撞的存在,因此可以应用于复杂的物理化学过程;
- ✓ 与分子动力学模拟相比,DSMC 便于引入更真实的分子模型;
- ✓ 得到了广泛的实验验证,且理论上与 Boltzmann 具有一致性。

因此,本文选取 DSMC 方法作为主要模拟方法对微纳尺度的气体流动和换热进行模拟分析。

1.2.2 使用Monte Carlo法模拟微流动的研究现状

使用 DSMC 方法或其衍生的各种修正方法对微纳尺度气体流动和换热进行模拟分析已经有近 10 年的历史了,人们开发了新的分子碰撞模型、提出了新的边界处理办法、发展和尝试了新的算法以满足对 M/NEMS 中存在的各种气体流

动和换热状况的模拟要求。本节主要对上世纪 90 年代以来的最具影响力和具有深远意义的模型、算法及其应用加以综述。更早的综述可以参看文献[73,74]。

1.2.2.1 分子碰撞模型

分子间碰撞模型对于 DSMC 的准确性来说是非常重要的,在 Bird 的书中介绍了多种传统的模型,并着重介绍了可变硬球模型(VHS)和可变软球模型(VSS),它们目前分别大量的应用在常温和高温的气体流动和换热的模拟中^[77-85]。然而,在 MEMS 器件的应用中通常会遇到系统温度小于常温的情况,此时气体分子间吸引势的作用不可忽略。近几年来,一些学者对此作了深入的研究,引入了一些新的分子碰撞模型对 DSMC 方法进行了改进,以期使之适用于低于常温的流动工况。表 1-1 列出了近期的几种比较有影响的分子碰撞模型,更早的模型可参见文献[74]。

1.2.2.2 边界条件的处理

边界条件的处理一般包括气体-固壁边界处的处理和出入口处边界条件的处理两部分,在 Bird 的书^[74]中已经对气-固边界的处理作了详细的论述,那些方法特别是漫反射模型已经在微尺度流动模拟中得到了广泛的应用。近年来也有学者对一些特殊情况下的气-固边界处理作了进一步的分析并提出了新的模型^[103-105],但这些新模型还有待于实践的验证。

本节主要综述了微尺度模拟中常用的出入口边界处理方法的研究进展,如表 1-2 所示。

表1-1 近10年来的典型分子碰撞模型

时间	研究者	主题	主要贡献
1993	Hassan & Hash ^[97]	广义硬球模型 (GHS)	考虑到分子间吸引势的作用，首次提出了广义硬球模型，并对激波结构进行了模拟。
1994	Hash, et al ^[98]	广义硬球模型 (GHS)	根据实验数据拟和给出了模型参数，并对广义硬球模型的内能转换模型进行了改进和完善。
1995	Kunc, et al ^[99]		
1994	Choquet ^[100]	热力学非平衡态的 转动能量	对热力学非平衡态的转动能量进行了细致分析，给出了不同模型碰撞后的转动能量分配规律。
2002	Fan ^[101] (樊菁)	广义软球模型	考虑了散射角的影响，在 GHS 的基础上首次提出了广义软球模型，并使用理论数值解对模型参数进行了拟和，给出了通用的拟和参数，并考虑了分子极性的影响。
2002	Matsumoto ^[102]	可变球模型	对逆幂律分子和 LJ 分子的可变球分子模型进行了系统的分析，并指出了分子碰撞的散射律对宏观的输运现象影响很小。

表1-2 关于进出口边界处理方法的研究

时间	研究者	主题	主要贡献
1990	Ikegawa & Kobayashi ^[106]	稀薄气体流动 DSMC 模拟方法的改进	首次提出了使用“通量法”实现压力边界条件的处理方法。
1996	Piekos & Breuer ^[107]	微通道气体流动的 DSMC 模拟	发展了“通量法”，并首次使用 DSMC 对微尺度气体流动进行了模拟。
1998	Nance et al ^[108]	微尺度流动模拟的 压力边界实现方法	在出口处引入了“特征法”，避免了“通量法”造成的模拟发散的问题。
2000	Liou & Fang ^[109]	MEMS 流动模拟的 压力边界条件的隐式方法	在入口处提出了使用统计平均量代替通量法计算进入流场粒子的速度采样值。
2001	Wu et al ^[111] Wu et al ^[112]	微通道内气体流动的 DSMC 模拟分析	在通道进出口处都是用通量法实现压力边界；首次给出了非直通道的模拟结果，但没给出理论依据和技术细节。
2004	Wang&Li ^[113,114]	带转角的微通道的 DSMC 模拟	给出了非直通道进出口处边界的详细处理方法，并对 90 度转角的微通道内气体流动和换热进行了模拟。

1.2.2.3 低速流动的模拟算法

在使用 DSMC 模拟微尺度流动和换热的初期，人们主要研究了微通道内的高速流动，特别是超音速的流动^[77,78]。但在实际 MEMS 应用中存在大量的低速流动情况，例如流动的特征速度小于 1 m/s，此时使用 DSMC 模拟所需要付出的

计算代价是巨大的，气体的主流速度很容易湮没在分子热运动的噪声之中。另外人们还发现，由于计算机只能使用伪随机数代替真正的随机数，因此当气体主流速度小于 0.01(或更大的值)时，不论如何增大计算采样数，都无法得到清晰的流场结果。因此，一些学者开发了新的改进算法以期准确模拟低速气体流动。

Pan 等^[115,116]在分析了扰动误差的影响因素之后，提出了两种减小扰动误差的改进方案：一种是人为降低气体的温度^[115]，另一种是人为增大气体分子的质量——即大分子模型^[116]。第一种方法无法计算温度对流动的影响，因此实用性很小。第二种方法也因分子参数的改变影响到了气体宏观特性和流动的无量纲特征量，已被证明是失效的^[117]。事实上，最新的理论分析已经证明^[118]，若不改变气体流动的 Mach 数，根本无法改变标准的 DSMC 流程的收敛特性。

另一种用以减小低速气体流动模拟扰动误差的方法是中科院力学所樊菁和沈青^[84]提出的信息保存法(DSMC-IP)。IP 法建议赋予 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，计算规则与标准 DSMC 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、表面切应力等可通过统计平均信息速度获得^[80,120]。美国的 Boyd 教授在此基础上也作了大量的改进和发展工作^[119]。IP 法对 MEMS 中气体流动的模拟与实验数据的吻合程度比较令人满意^[84]，目前，IP 方法在推广到有温度变化的流场和更为复杂的流动模拟中也取得了一定的进展，但仍处在尝试阶段，有待于进一步大量工作的验证^[80,121]。

鉴于本文所涉及的微尺度流动的主流速度远大于 10m/s，本文仍采用标准的 DSMC 流程。

1.2.2.4 稠密气体模拟算法及应用

正如 1.2.1 节所分析的，由于标准的 DSMC 方法无法模拟稠密气体流动，一些学者发展了不同的模型或算法对其进行改进。表 1-3 列举了一些重要的算法及其发展和应用。

表1-3 模拟稠密微气体流动的算法及应用

时间	研究者	主要贡献
1995	Alexander et al ^[86]	首次提出了一致性 Boltzmann 算法(CBA),对 DSMC 进行了修正,得到了 van der Waals 方程
1996	Montanero&Santos ^[93]	首次提出了基于 Enskog 方程的 Monte Carlo 法
1996	Kortemeyer et al ^[90]	首次使用 CBA 对核子流进行了模拟
1997	Garcia et al ^[88] Alexander et al ^[87]	对由 CBA 引起的气体输运特性的改变提出了改进方案
2002	Garcia & Wagner ^[89]	
1997	Montanero&Santos ^[94] Frezzotti ^[95]	对基于 Enskog 方程的 Monte Carlo 法进行了改进,提出了与 Bird 的 DSMC 相似的流程 ESMC
2000	Hadjiconstantinou et al ^[91]	使用 CBA 对汽液界面的表面特性进行了分析

1.2.2.5 并行计算与耦合计算

由于 DSMC 对计算的网格尺寸和时间步长有严格的限制,因此当计算区域几何尺寸比较特殊,例如长宽比非常大,或者计算区域的几何形状非常复杂时,DSMC 的计算量就会变得非常大;另一方面,若计算区域的特征尺度变化比较剧烈,或者气体流动过程中压力、温度等参数变化比较大,在同一系统中的流动可能处在不同的流区,此时只采用一种计算方法很难进行有效模拟,若只使用 DSMC 进行模拟,其计算量是巨大的。这两种情况下通常所采用的解决方法是并行计算或多种方法耦合计算。表 1-4 列举了前人在并行计算和耦合计算方面的一些经典工作。

表1-4 DSMC的并行计算和耦合计算的研究

时间	研究者	主题	主要贡献
1991	Wilmoth ^[122]	DSMC 的并行算法	提出了区域分解法
1999	LeBeau ^[123]	DSMC 的并行算法 及应用	详细介绍了 DSMC 的并行计算实现 方法，是一篇经典文献。
2001	Bartel et al ^[124]	二维并行算法	详尽的介绍了算法及程序实现
2003	Wu & Lian ^[125]	三维并行算法	介绍了三维并行算法及应用
1996	Hash&Hassan ^[126]	N-S/DSMC 耦合	交接面上使用通量守恒方程
1996	Bourgat et al ^[127]	Boltzmann/NS 耦合	通过壁面摩擦力实现 Boltzmann 方 程和 N-S 方程的耦合
1997	Taltec et al ^[128]	Boltzmann/NS 耦合	通过交接面上的半通量实现耦合
1998	Tiwari ^[129]	Boltzmann 方程和 Euler 方程的耦合	使用自动区域分解法耦合
1999	Douglas et al ^[130] Boyd ^[131]	等离子推进器的羽 流模拟	实现了 PIC/DSMC 的全粒子法耦合
1999	Garcia et al ^[132]	CFD/DSMC 多尺度	使用自适应网格和算法精炼技术实 现连续法和 DSMC 的耦合
2003	Wijesinghe et al ^[133]	耦合	
2001	Macrossan ^[134]	近连续流的全粒子	实现了 EPSM/DSMC 全粒子法耦合
2002	吴, 等 ^[135,136]	法耦合模拟	
2002	Zeifman et al ^[137]	激光切削羽流	实现了 MD/DSMC 耦合模拟
2002	Aktas&Aluru ^[138]	CFD/DSMC 多尺度 耦合	在连续区使用有限云雾法(FCM)与 DSMC 实现全粒子法耦合，是目前 耦合效果最好的一种方法。
2002	Wang et al ^[139]	CFD/DSMC 多尺度	使用 DSMC-IP 法和连续方程耦合
2003	Sun et al ^[140]	耦合	求解

从发展趋势来看，多方法多尺度的耦合模拟是当前以至未来一段时间内的研究热点。然而从研究现状来看，尽管许多学者在传统 CFD 方法和 DSMC 方法的耦合研究上作了很多开创性和深入的工作，但其效果仍很难让人满意，近来，一些学者采用的在连续区或近连续区使用粒子法模拟，再在全流场采取全粒子法耦合模拟的方法得到了很好的效果^[138]，其耦合结果与标准解之间的符合程度是最好的。因此可以看出，全粒子法耦合求解似乎有更为广阔的前景。

1.3 微纳气体流动和换热研究的问题与挑战

综上所述，微纳尺度气体流动和换热的研究在 MEMS 和纳米科技中有着广阔的应用前景，但目前仍处在研究的初级阶段，理论基础尚不完善，实验研究困难重重，数值模拟方法成了当前最主要的研究手段。在众多数值模拟研究方法中，直接模拟 Monte Carlo 法是最适于微纳尺度气体流动和换热模拟的方法，因此如何完善其算法和程序是目前所面临的一个重要问题。

就目前微纳尺度气体流动的研究现状而言，由于尺度的减小，微尺度流动可以与稀薄流动具有相同的无量纲准则数，而且实验研究也证明了微尺度气体流动在壁面处表现出了与稀薄气体流动类似的滑移特性，因此一般认为微尺度气体流动与常规尺度稀薄气体流动具有相似性^[17,80,121]。然而值得注意的是，尽管微纳尺度的流动可与常规尺度稀薄气体流动具有相同的高努森数，但内部机制是不同的：一种是由于特征尺度的减小；另一种是来自气体分子平均自由程的增大。因此二者之间除了表象的相似之外，必然还存在内部物理机制的差异。微纳尺度气体流动和换热的物理机制是目前一个悬而未决的问题。

如前文所述，对于存在跨流区流动的复杂系统，单使用 DSMC 一种方法模拟，其计算量往往是难以承受的，多尺度耦合求解是目前最有前景的一种方法。对比前人在耦合方法上所作的工作可知，全粒子法耦合求解是耦合效果最好的方法，因此开发适用于连续区及近连续区流动的高效粒子模拟方法仍是目前面临的一个挑战。

1.4 本文研究的主要内容

通过前面的分析，本文主要针对微尺度的气体流动和换热，在一定理论研

究的基础上，使用数值模拟的方法探讨其流动和换热的机理。主要内容包括：

1. 改进和完善标准 DSMC 程序，使其适用于微尺度气体流动和换热的模拟。Bird 的标准 DSMC 程序是针对简单稀薄气体流动的模拟，为将其应用于微尺度流动和换热，有必要深入理解其内在过程以及模拟参数对模拟结果的影响因素，并在此基础上对其进行改进和完善，使其满足微尺度的气体流动和换热的模拟要求。

2. 根据气体分子理论，对微纳尺度气体流动与常规尺度稀薄气体流动之间相似性推导的最基本假设进行分析，探讨其适用条件，并选取适当分子碰撞模型的 DSMC 方法对其进行数值验证。

3. 针对不满足相似性的微纳尺度稠密气体流动，在分析现有模拟方法所存在问题的基础上，开发新的算法对其进行数值模拟，并探讨 van der Waals 效应对微纳尺度气体流动和换热的影响。

4. 针对 DSMC 模拟效率较低的近连续区气体流动，在前人工作的基础上，发展基于 BGK 方程的新算法，并探讨跨流区复杂流动全粒子耦合模拟的可能性。

5. 对两种典型的微纳尺度器件内的气体流动和换热进行模拟分析，并对器件的优化设计提出建议。

第二章 数值方法

如前文所述, 对于 MEMS/NEMS 中出现的微纳尺度气体流动和换热现象, 由于其特征尺度小, 努森数大, 基于连续介质假定的传统模拟方法不能给出准确预测, 必须采用基于分子运动及统计规律的方法进行模拟。在众多模拟高努森数流动的粒子法中, Bird 提出的直接模拟 Monte Carlo 法(DSMC)无疑是适用范围最广的一种。本章在详细介绍 DSMC 的基本思想、基本过程和基本模型的基础上讨论了主要模拟参数对计算结果的影响, 并对进出口边界的处理方法作了改进。

2.1 直接模拟 Monte Carlo 法(DSMC)

直接模拟 Monte Carlo 法最初是由澳大利亚学者 G. A. Bird 提出^[73,74], 用来模拟稀薄气体流动的一种基于分子运动和随机-统计规律的方法。DSMC 曾在上世纪七、八十年代成功应用于航空航天领域超音速稀薄气体的流动分析^[77,78], 进入上世纪九十年代, 一些学者还把 DSMC 模拟应用在微小尺度高努森数气体流动和换热的分析中, 得到了与实验数据吻合较好的结果^[80-85]。近年来, DSMC 方法已经发展成为检验其他新方法在高努森数流区适用性的一个标准^[79]。

本节将主要介绍 DSMC 的基本思想、标准 DSMC 的基本过程以及目前 DSMC 所使用的处理分子间碰撞和分子-壁面碰撞的几种主要模型。

2.1.1 基本思想

由于描述高努森数气体流动的控制方程 Boltzmann 方程中的碰撞项目前仍难以用数学语言精确描述, 因此还无法对其进行直接的理论 and 数值求解^[42]。Bird^[73]于 1963 年首次提出了一种直接从气体流动的分子运动物理机制出发的方法——直接模拟 Monte Carlo 法(DSMC)。它通过计算成千上万的模拟粒子的运动和碰撞再现了气体分子的运动过程, 使气体流动的动力学方程得到求解。在模拟过程中, 每个模拟粒子代表大量的真实气体分子, 在分子混沌和气体稀薄的基本假设条件下, 只考虑粒子间的二元碰撞, 从而当计算时间步长小于分子的平均物理碰撞时间时, 分子的运动与分子间碰撞可以解耦。每个模拟粒子代

表大量的真实气体分子，在处理粒子间相互碰撞时，碰撞后的速度和能量按照一定的统计规律随机分配，而保证系统的动量和能量的总体守恒。由于模拟中的时间参数与真实流动中的物理时间相同，因此 DSMC 的计算都是非定常的，定常流动可通过增大模拟时间得到。

Bird 曾经指出^[75]，从 DSMC 使用的最基本原则出发，同样可以导出 Boltzmann 方程。Wagner^[76]在稍晚一些的文献中严格证明了 DSMC 与 Boltzmann 方程具有一致性。事实上，两者均建立在分子混沌和稀薄气体假设基础上，其物理本质是相通的。而且 DSMC 方法不依赖于逆碰撞的存在，因此还可以应用于诸如三体化学反应这样的复杂现象中。由于 DSMC 更接近物理模型的本质，在处理模拟分子与表面相互作用的问题上，引入较为复杂的或更真实的模型更加容易，而将真实模型引入 Boltzmann 方程，再进行数学求解是极其困难的。特别是对于处理一些同时具有化学反应和辐射的气体流动问题，目前还不存在 Boltzmann 方程的表达式，而用 DSMC 方法则可以较容易的解决。即使是对于那些 Boltzmann 方程可以表达的不包括化学反应和辐射等过程的问题，由于处理碰撞项的数学困难，直接求解 Boltzmann 方程也是比较复杂的，只限于比较简单的几何形状流场，而 DSMC 方法则甚至可以较容易的模拟复杂的三维流场。可以说，流场越复杂，DSMC 方法就越显示出其优越性。当然 DSMC 方法也有其局限性，例如误差波动，对模拟分子数、空间网格划分及时间步长的严格要求等，但众多实例表明，只要这些条件得到了满足，DSMC 方法都可以得到令人满意的结果。

2.1.2 程序流程

标准 DSMC 的程序流程如图 2-1 所示，即：在仿真的开始阶段，所有的粒子都被均匀的随机分布到网格中，在每个时间步中，粒子先以各自的速度平移一小段距离，并完成与边界的可能碰撞，然后粒子按一定顺序标号。在每个网格中，根据一定的原则选取“碰撞对”，并计算粒子碰撞后的速度和内能。流动的宏观特性通过统计规律采样计算得到。重复上述的步骤直到统计误差满足要求。

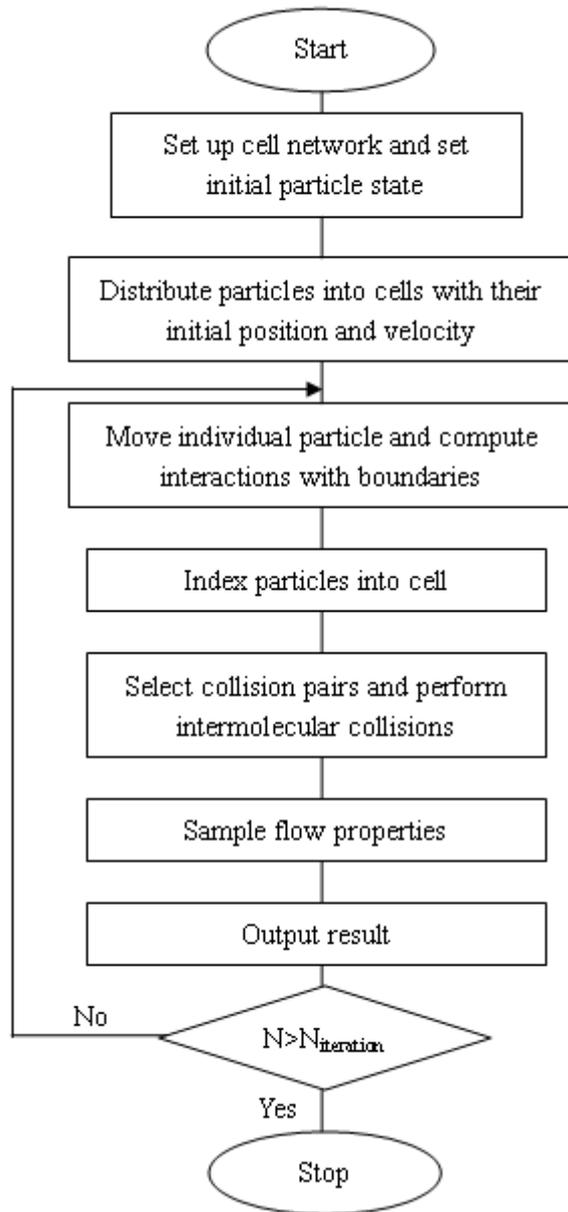


图 2-1 标准 DSMC 的流程图

2.1.3 分子间碰撞模型

DSMC 模拟的适用性依赖于分子间碰撞模型的合理选取。Bird 介绍了多种分子碰撞模型，例如硬球模型、逆幂律分子模型和可变软球模型等。一般来说，简单的模型适用的范围有限，复杂的模型计算效率较差。本节只简单介绍后面章节中可能用到的几种主要的分子碰撞模型，更详细的论述请参见 Bird 的著作

[74]或沈青的中文著作[80]。

硬球模型(hard sphere, HS)是最简单的分子模型。当两个分子中心距离小于两分子半径之和时, 分子发生碰撞, 此时的总碰撞截面积

$$\sigma_T = \pi d_{12}^2 \quad (2-1)$$

其中 d_{12} 表示两碰撞分子半径和。对于同种气体, $d_{12} = d$ 。碰撞后的分子满足均匀散射率:

$$\chi = 2 \arccos(b/d) \quad (2-2)$$

其中 b 为分子瞄准距离。

对于硬球模型, 其粘性碰撞截面积和动量传递截面积可以表示为

$$\sigma_\mu = \frac{2}{3} \sigma_T \quad (2-3)$$

$$\sigma_M = \sigma_T \quad (2-4)$$

值得注意的是, 硬球模型中的硬球分子直径并非真实气体的分子直径, 而是通过气体粘性系数反推得到的一个表象直径, 其具体关系式为:

$$d = \left[\frac{5}{16} (mkT_{ref} / \pi)^{1/2} / \mu_{ref} \right]^{1/2} \quad (2-5)$$

由上式可以看出, 硬球模型具有固定不变的碰撞截面, 而研究表明真实的气体分子的碰撞截面积是随着相对速度的增大而减小的, 这样才能保证气体粘度 μ 与温度 T 的关系与实际气体中一致。根据这一思想, Bird 提出了一种**可变硬球模型**(variable hard sphere, VHS)[74], 在这种模型假设下, 分子具有硬球模型一样的均匀散射率, 但令其碰撞截面积正比于相对速度的逆幂次:

$$\left(\sigma_T / \sigma_{T,ref} \right) = \left(d / d_{ref} \right)^2 = \left(c_r / c_{r,ref} \right)^{-2\xi} \quad (2-6)$$

根据这一关系, 可以得到可变硬球模型的粘度表达式

$$\mu = \frac{15}{8} (\pi mk)^{1/2} \frac{(4k/m)^\xi T^{1/2+\xi}}{\Gamma(4-\xi) \sigma_{T,ref} c_{r,ref}^{2\xi}} \quad (2-7)$$

若假设粘性系数与温度的幂律为 ω , 即

$$\mu \propto T^\omega \quad (2-8)$$

则令

$$\frac{1}{2} + \xi = \omega \quad (2-9)$$

得到 VHS 模型的分子直径的表达式为

$$d_{VHS} = \left[\frac{(15/8)(m/\pi)^{1/2} (kT_{ref})^\omega}{\Gamma(9/2 - \omega) \mu_{ref} \varepsilon_t^{\omega-1/2}} \right]^{1/2} \quad (2-10)$$

其中 $\varepsilon_t = \frac{1}{2} m_r c_r^2$, m_r 为分子折合质量, c_r 为分子相对速度。

注意到, 硬球模型和可变硬球模型都符合碰撞后的均匀散射率, 这一假设所导致的直接结果是粘性碰撞截面与动量碰撞截面的比值为—常值, 这与真实气体的理论分析相差甚远。特别是当考虑多组分混合气体中扩散起重要作用时, 这一假设所导致的与实验数据的偏差非常大。Koura 等^[141,142]分析了产生这种效果的原因, 认为硬球模型的均匀散射律导致气体分子“过硬”了, 并提出了可变软球模型(variable soft sphere, VSS), 在 VSS 模型中, 其他规律还与 VHS 一样, 散射律则变化为:

$$\chi = 2 \arccos \left[(b/d)^{1/\alpha} \right] \quad (2-11)$$

对于实际气体, 通常 $2 > \alpha > 1$, 此时 VSS 模型的偏转角小于 VHS 模型的偏转角。对于单组分气体, 可以得到如下的关系式

$$\sigma_T = \pi d_{12}^2 \quad (2-12)$$

$$\sigma_\mu = \frac{4\alpha}{(\alpha+1)(\alpha+2)} \sigma_T \quad (2-13)$$

$$\sigma_M = \frac{2}{\alpha+1} \sigma_T \quad (2-14)$$

此时气体的粘度为

$$\mu_{VSS} = \frac{5(\alpha+1)(\alpha+2)}{16\alpha} (\pi m k)^{1/2} \frac{(4k/m)^\xi T^{1/2+\xi}}{\Gamma(4-\xi) \sigma_{T,ref} c_{r,ref}^{2\xi}} \quad (2-15)$$

模拟分子的直径可以通过下式确定

$$d_{vss} = \left[\frac{5(\alpha+1)(\alpha+2)(m/\pi)^{1/2} (kT_{ref})^\omega}{16\alpha\Gamma(9/2-\omega)\mu_{ref}\varepsilon_t^{\omega-1/2}} \right]^{1/2} \quad (2-16)$$

前面介绍的这三种分子碰撞模型都是建立在分子间只受相互排斥力作用基础上的，分子间作用力满足逆幂律。对于温度变化较大的流动，粘度对温度的变化就不能只依靠一个方幂简单描述得了，特别是当温度较低时，分子间的吸引势作用不可忽略。Hassan 等^[97,98]提出了广义硬球模型(Generalized hard sphere, GHS, 或称概括化硬球模型^[80]), 引入了分子间吸引势作用对碰撞的影响。在 GHS 中，分子碰撞散射律与硬球模型相同，总碰撞截面通过与相对动能的关系反映吸引和排斥两种作用的影响，

$$\frac{\sigma_T}{\sigma^2} = \sum \alpha_j \left(\frac{\varepsilon_t}{\varepsilon} \right)^{-\omega_j} \quad (2-17)$$

其中： σ 和 ε 为气体分子固有参数， σ 为分子中心距势能为零处的距离， ε 为势井深。若式(2-17)只取一项，则与 VHS 模型相同，只相差常数关系不同。通常 GHS 模型取两项求和形式，其中参数 α_j 和 ω_j 需要通过输运系数关系式与实验数据的拟和得到^[98]，常用到的输运系数关系式为气体粘性系数和扩散系数的表达式

$$\mu_{GHS} = \frac{15}{8} \left(\frac{\pi m k T}{\sigma^2} \right)^{1/2} \left[\alpha_1 \Gamma(4-\omega_1) \left(\frac{\varepsilon}{kT} \right)^{\omega_1} + \alpha_2 \Gamma(4-\omega_2) \left(\frac{\varepsilon}{kT} \right)^{\omega_2} \right]^{-1} \quad (2-18)$$

$$D_{GHS} = \frac{3}{8} \left(\frac{2\pi k T / m_r}{n \sigma^2} \right)^{1/2} \left[\alpha_1 \Gamma(3-\omega_1) \left(\frac{\varepsilon}{kT} \right)^{\omega_1} + \alpha_2 \Gamma(3-\omega_2) \left(\frac{\varepsilon}{kT} \right)^{\omega_2} \right]^{-1} \quad (2-19)$$

使用 GHS 模型时常常会遇到这样一个问题，即使用实验数据拟和参数的时候很难得到一组参数使得拟和结果在粘性系数和扩散系数两方面都与实验数据符合很好，为此，Kunc 等^[143]不得不给出区分不同吸引强度下的拟和值，但从其结果来看，拟和效果仍然差强人意，而且使用者有时很难区分吸引势的强度，给模型的使用带来了不便。细致的考察发现，造成这种情况的原因是 GHS 还延续着硬球模型的碰撞散射律，粘性碰撞截面和动量碰撞截面之比为一固定值，严重偏离了真实气体的情况。人们很自然地想到了使用软球模型的散射律去修正它。樊菁^[99]2002 年把软球模型的散射律引入到广义碰撞模型中，提出了广义

软球模型(Generalized soft sphere, GSS, 或称概括化软球模型^[80])。GSS 模型的散射律满足式(2-11), 碰撞截面满足式(2-17)。GSS 模型摒弃了使用实验数据拟和参数的做法, 采用对求解气体粘性系数和扩散系数时引入的积分项 $\Omega^{(1,1)}$ 和 $\Omega^{(2,2)}$ 随 kT/ε 的变化关系的理论数值解进行最小二乘法拟和的方法, 这样确定的拟和参数几乎与气体的种类无关, 具有较大的适用性。GSS 模型还考虑了分子极性对碰撞截面的影响。用 GSS 模型计算得到的气体粘性系数和扩散系数在整个温度区都与实验或理论值符合较好, 而其他方法在温度很低或很高时候都与实验数据有一定偏差。

2.1.4 碰撞率与碰撞对的选取

对于考虑二元碰撞为主体的稀薄气体来说, Boltzmann 方程可以给出在平衡态下的分子平均碰撞率,

$$\nu = \overline{n\sigma_T c_r} \quad (2-20)$$

而单位时间单位体积下的气体分子总碰撞次数为

$$N_c = \frac{1}{2} n\nu = \frac{1}{2} n^2 \overline{\sigma_T c_r} \quad (2-21)$$

在 DSMC 中, 正确的实现 Δt 时间步长中的碰撞次数是非常重要的。根据式(2-21), 在 Δt 时间内网格中发生的碰撞次数为

$$N_t = \frac{N}{2} \nu \Delta t = \frac{nN}{2} \overline{\sigma_T c_r} \Delta t \quad (2-22)$$

其中 N 是网格内的分子数。式(2-22)的实现有很多方法, 例如 Bird 最初的时间计数器(Time Counter, TC)法^[73]、Koura 等的无碰撞(Null Collision, NC)法^[144]以及樊菁等的随机采样频率法(Randomly Sampled Frequency, RSF)^[145], Bird 建议采用无时间计数器(No Time Counter, NTC)方法^[74], 目前正在模拟中被广泛而成功的应用。在 NTC 方法中, 分子碰撞对的数目可以表示为

$$N_{NTC} = \frac{N\bar{N}}{2} F_N (\sigma_T c_r)_{\max} \Delta t / V_c \quad (2-23)$$

其中, \bar{N} 是网格内模拟粒子的时间统计平均值, F_N 为一个模拟粒子所代表的真实分子数, 即分子权重, V_c 为网格体积, $(\sigma_T c_r)_{\max}$ 通过在网格内的迭代找

出。对于寻找出来的碰撞对，其碰撞的几率为

$$P_{NTC} = \frac{\sigma_T c_r}{(\sigma_T c_r)_{\max}} \quad (2-24)$$

2.1.5 内能转换模型

对于二维以上的 DSMC 模拟来说，需要考虑分子碰撞时的动能与内能之间的相互转换，特别是当考虑到气体的换热问题时，这个问题就更加重要了，不仅要知道能量在碰撞后是如何分配的，还要保证总体能量的守恒，同时还要保证内能的激发与松弛速率与实验所给的结果一致。最著名的分子内能转化模型是 Larsen 和 Bergnakke 提出的一种唯象模型^[146]，目前得到了最广泛的应用。Larsen-Bergnakke 模型的中心思想是假设碰撞中的动能和内能遵循能量守恒，碰撞后的内能按照动能和内能组合的平衡分布取值，而能量松弛过程的速率根据调节弹性碰撞和非弹性碰撞的比率加以确定，使其满足实验得到的结果。关于碰撞后能量分布的论述在许多文献中都有详细地介绍，参见 Bird 的书^[74]中 5.3 节或沈青的书^[80]7.4 节，本文不再冗述。

Larsen-Bergnakke 模型中另一个比较重要的部分就是非弹性碰撞几率的确定。一般认为非弹性碰撞的几率与松弛数成反比，即

$$P = (1/Z) \quad (2-25)$$

然而，在很多情况下这一表达式并不正确。这一几率函数的形式很大程度上依赖于使用这一几率进行选取的方法以及所指定的松弛率方程的形式^[147]。Bird 在其标准程序中使用了式(2-25)所示的碰撞率公式，它是对每个碰撞的粒子都单独进行一次松弛判断^[74]。Hash 等^[98]提出了另外一种松弛方法，即对每个碰撞对进行一次松弛判断，若满足松弛条件，两个粒子都视为非弹性碰撞。对于这种处理方法，Lumpkin 等^[148]给出了更为精确的旋转松弛的几率函数，

$$P_R = (1 + \zeta_R / \zeta_t) / Z_R \quad (2-26)$$

其中： ζ_t 为相对平动自由度， ζ_R 为碰撞分子的转动自由度之和， Z_R 为转动松弛数。近来还有一些学者使用 Parker 公式^[149]以反映松弛数随温度的变化关系。

对于本文所涉及的计算，若分子模型采用 VHS 或 VSS，则非弹性碰撞几率使用式(2-25)所示的形式；若分子模型采用 GHS 或 GSS 模型，则非弹性碰撞几

率使用式(2-26)所示的形式。

2.1.6 边界上的处理

边界条件历来是计算流体力学(CFD)中比较重要的部分。在 DSMC 中, 气体分子与表面的相互作用是计算壁面阻力和换热特性的基础, 因此, 提出和应用与实际情况相符的分子-表面相互作用模型是正确预测物体在气体中受力受热的前提条件。由于这一问题在物理上的复杂性, 目前无论是理论上还是实验上的研究都尚不完善^[103-105]。

处理气体分子与壁面相互作用的模型主要有镜面反射模型、漫反射模型以及 Maxwell 型边界条件(即镜面反射和漫反射相结合的边界条件)。近年来, Cercignani 和 Lampis 提出了一种唯象模型, 后经 Lord 发展并在 DSMC 中程序实现, 这就是著名的 CLL 反射模型^[150-151]。

对于绝大多数 MEMS/NEMS 中的气体流动, 一般来说, 来流气体能量不太高, 真空度不太大, 表面温度通常在常温附近, 若壁面没有经过特殊的处理, 则漫反射模型都是适用的。目前使用 DSMC 模拟微尺度气体流动的绝大多数工作都使用了这一模型, 取得了非常好的效果, 并得到了实验的验证^[79-85]。本文也主要使用漫反射模型模拟分子与壁面的相互作用。

完全漫反射模型假设离开壁面的分子以壁面温度的平衡分布(即 Maxwell 分布)散射,

$$f_r(c_r) = n_r \left(\frac{m}{2\pi kT_w} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{mc_r^2}{2kT_w}} \quad (2-27)$$

对于进出口边界上的处理将在 2.4 节中作详细论述。

2.1.7 宏观量统计

流场的宏观物理特性可以通过如下的统计公式计算得到:

$$U_j = \frac{1}{N_j} \sum u \quad (2-28)$$

其中: U_j 表示 j 网格的宏观平均速度, N_j 表示 j 网格内的粒子数。

$$\rho = nm \quad (2-29)$$

$$T = (3T_{tr} + \zeta T_{rot}) / (3 + \zeta) \quad (2-30)$$

其中： T_{tr} 代表平动温度， T_{rot} 代表转动温度， ζ 为内能自由度。忽略振动温度。

平动温度和转动温度由下面公式计算：

$$T_{tr} = 2 \left(\overline{mv^2} - \overline{m \cdot v^2} \right) / 3k \quad (2-31)$$

$$T_{rot} = \frac{2}{k} (\overline{\varepsilon_{rot}} / \zeta) \quad (2-32)$$

其中： v 为分子的速度， k 为 Boltzmann 常数， ε_{rot} 为单个分子的转动动能。

壁面的阻力系数可以表示为：

$$C_f = \frac{\tau}{\frac{1}{2} \rho_\infty u_\infty^2} = \left\{ \frac{[\sum (mu)_i - \sum (mu)_r] \cdot N_0}{\Delta t (1 \cdot \Delta x)} \right\} / \left(\frac{1}{2} \rho_\infty u_\infty^2 \right) \quad (2-33)$$

其中：下标 i 和 r 分别表示入射和出射分子； N_0 为气体分子数； Δt 为采样时间间隔。

壁面的热流通量 q 可以表示为：

$$q = \frac{[(\sum \varepsilon_{tr} + \sum \varepsilon_{rot})_i - (\sum \varepsilon_{tr} + \sum \varepsilon_{rot})_r] N_0}{\Delta t (1 \cdot \Delta x)} \quad (2-34)$$

对于热完全气体来说，气体的压力可以通过克拉柏龙方程求得：

$$P = \rho RT = nkT \quad (2-35)$$

2.2 程序的验证

本文在 Bird 标准程序^[74]的基础上进行了发展和改进，使其适用于更为复杂的流动模拟。在使用本文的程序之前，有必要对其进行验证。本节分别与标准程序的模拟结果和滑移理论解析结果进行了对比，验证了程序的正确性。

2.2.1 与标准程序的对比

首先，使用本文的程序和 Bird 的标准程序对同一算例进行了模拟，对比了模拟结果。选取的算例为 Bird 书中的经典算例，即，超音速气流横掠平板的流动。物理模型如图 2-2 所示，计算区域为 1×0.6 m，底板长度为 0.9 m，来流马赫

数为 4.0，来流努森数为 0.0431，来流气体温度为 300 K，底板温度为 500K。来流气体选为氮气，其气体特性参数参见文献[74]中的表 A1 和 A2。两种方法都选取 VHS 模型，网格采用 $100 \times 60(2 \times 2)$ 均匀矩形网格。

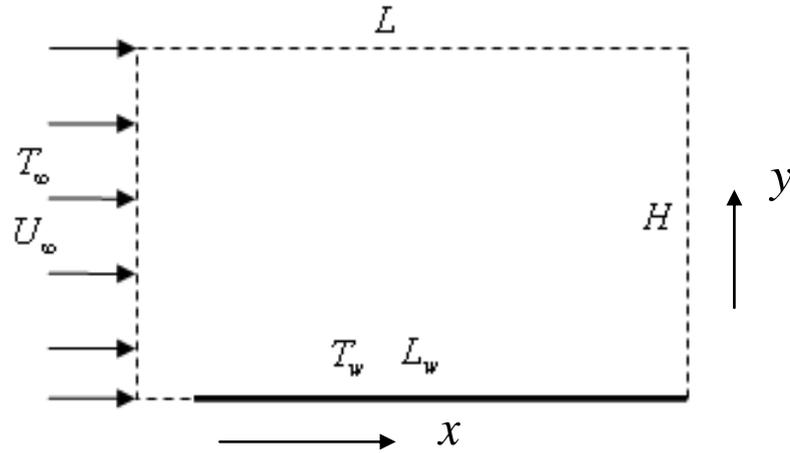


图 2-2 横掠平板超音速流的物理模型

图 2-3 对比了两个程序计算所得流场的密度、温度和速度的等值线图。图中左侧一列是标准程序计算的结果(a)，右侧是本程序计算的结果(b)。计算中的采样数为 1×10^5 。由于本文所选取的时间步长比较合理，因此较之标准程序所的结果略显光滑，当继续加大计算采样数时，两者结果是完全一致的。对于时间步长的选取将在下一节详细介绍。

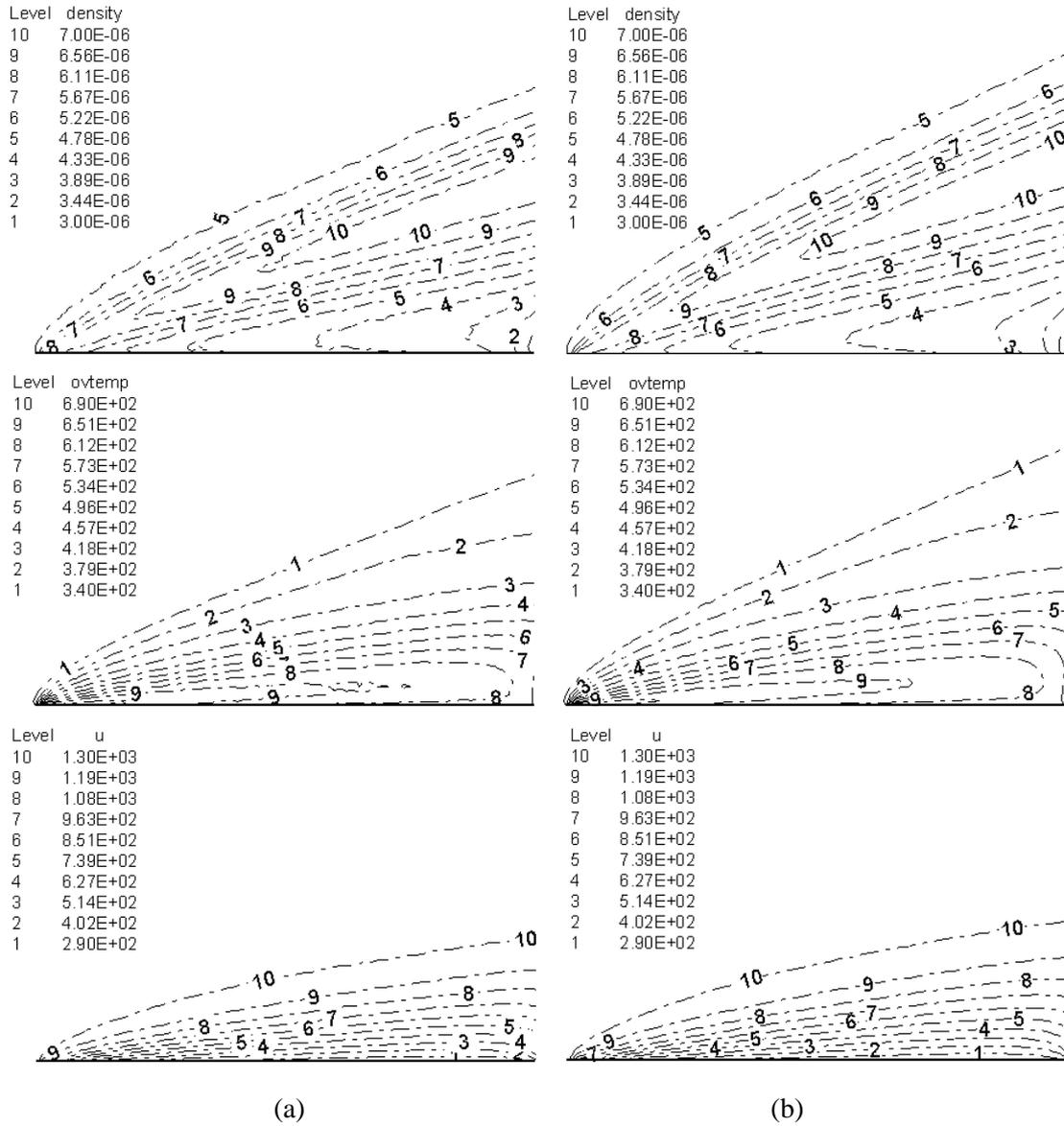


图 2-3 本文程序与标准程序计算结果对比

由于本文的程序在表面处理上作了改进，可以处理多个表面。因此还需要对模拟的表面特性加以验证。图 2-4 显示了两个程序计算所得壁面阻力特性和换热特性的对比。与图 2-3 所表现的规律相同，两种方法所得到的表面阻力系数和换热量结果在定性上和定量上都符合很好，而本程序的收敛性较好，但当加大采样量时，两者将完全重合。

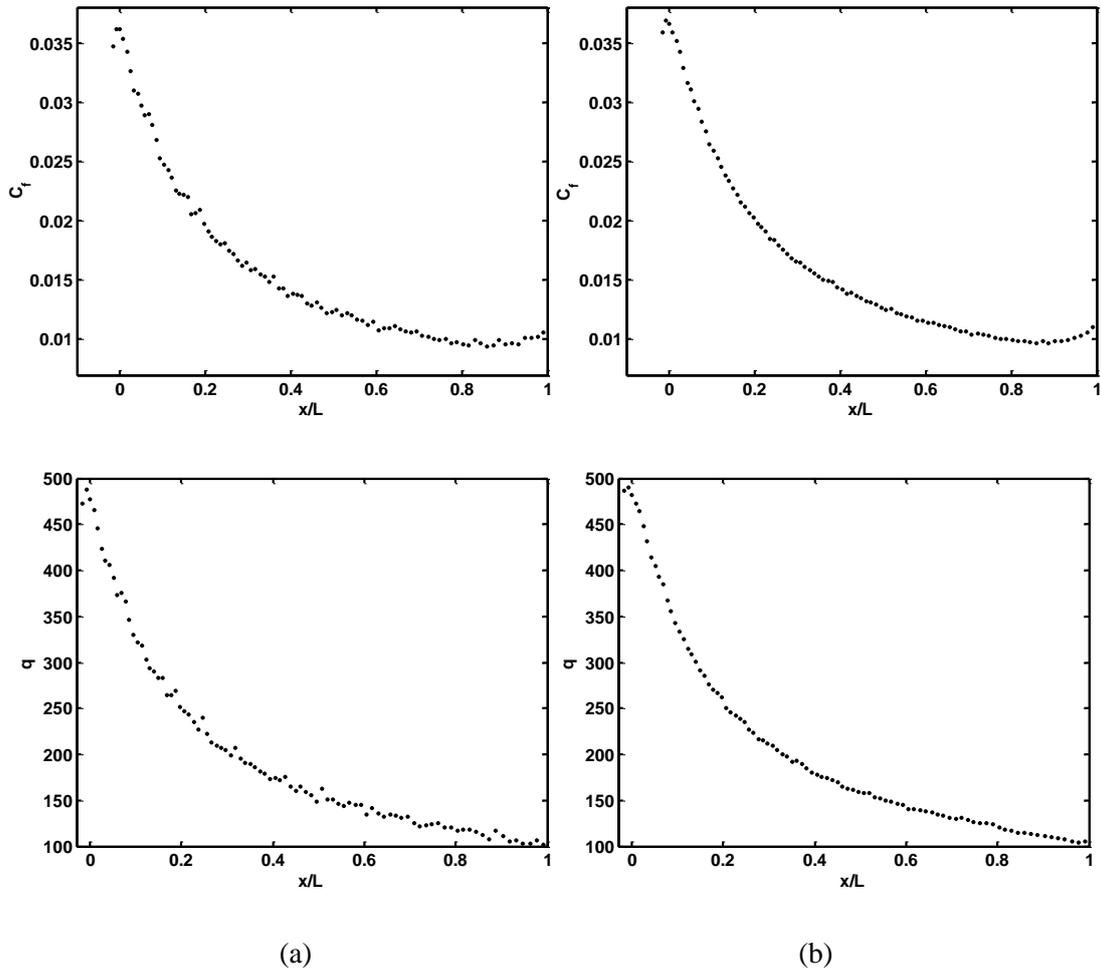


图 2-4 壁面阻力特性和换热特性计算结果的对比

与标准程序计算结果的对比表明，发展后的程序与标准程序具有同样的准确性。

2.2.2 与滑移理论结果的对比

为了验证程序的正确性，本文还对两种经典二维微通道流动，Couette 流动和 Poiseuille 流动，进行了模拟，并与滑移区理论解作了对比。两种流动的通道尺寸取为 $5\ \mu\text{m} \times 1\ \mu\text{m}$ ，模拟中使用了 50×50 的均匀矩形网格。

2.2.2.1 微尺度 Couette 流动

对于处在滑移区的微尺度 Couette 流动，根据 Beskok 等^[38]提出的二阶滑移边

界条件，可以得到无量纲速度分布为：

$$\frac{u}{U} = \frac{\frac{y}{h} + \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} Kn}{2 \left(\frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \right) Kn + 1} \quad (2-36)$$

其中： U 为移动壁的速度， h 为两壁间距， σ_v 为动量协调系数。

根据 Maxwell 的一阶滑移速度和温度跳跃理论还可以得到 Couette 流动的温度分布：

$$\frac{T - T_w}{T_g - T_w} = \left(- \left(\frac{y}{h} \right)^2 + \frac{y}{h} + \frac{2 - \sigma_T}{\sigma_T} \frac{2\gamma}{\gamma + 1} \frac{Kn}{Pr} \right) / \left(\frac{2 - \sigma_T}{\sigma_T} \frac{2\gamma}{\gamma + 1} \frac{Kn}{Pr} \right) \quad (2-37)$$

其中： T_w 为壁面的温度， T_g 为壁面处气体的温度， σ_T 为热协调系数。

使用 DSMC 方法对壁面移动速度为 300 m/s、壁温为 273 K 及进出口压力为标准大气压的氮气 Couette 流动作了模拟，并与理论解进行了对比。图 2-5 所示为对比结果，其中 σ_T 、 γ 和 Pr 分别取值为 1.0、1.4 和 0.72^[152]。结果显示 DSMC 模拟与理论结果符合得很好，其相对误差小于 2.5%。

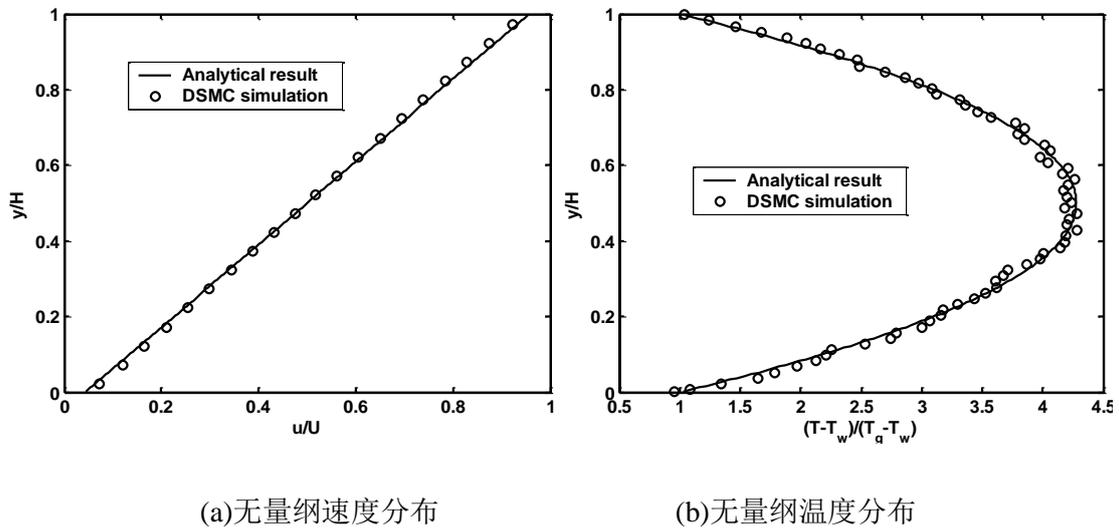


图 2-5 Couette 流动的 DSMC 模拟结果与滑移理论解析解的对比

2.2.2.2 微尺度Poiseuille流动

对于 Poiseuille 流动，一阶和二阶的无量纲速度分布滑移理论解为^[38]：

$$\frac{u}{u_c} = \left[-\left(\frac{y}{h}\right)^2 + \frac{y}{h} + Kn \right] / \left(\frac{1}{4} + Kn \right) \quad (2-38)$$

$$\frac{u}{u_c} = \left[-\left(\frac{y}{h}\right)^2 + \frac{y}{h} + \frac{Kn}{1+Kn} \right] / \left(\frac{1}{4} + \frac{Kn}{1+Kn} \right) \quad (2-39)$$

其中： u_c 为当地中心线上的速度。

根据上面两式，可以推出沿壁面的无量纲速度滑移的一阶和二阶近似表达式为：

$$\frac{u_s}{u_c} = Kn / \left(\frac{1}{4} + Kn \right) \quad (2-40)$$

$$\frac{u_s}{u_c} = \frac{Kn}{1+Kn} / \left(\frac{1}{4} + \frac{Kn}{1+Kn} \right) \quad (2-41)$$

本文对多组工况下的 Poiseuille 流动进行了模拟。壁面温度和来流温度设为 300 K。图 2-6 显示了不同工况下通道中心截面处无量纲速度的剖面图，并与一阶和二阶的滑移理论解进行了对比，当地 Kn 也标示在图中。

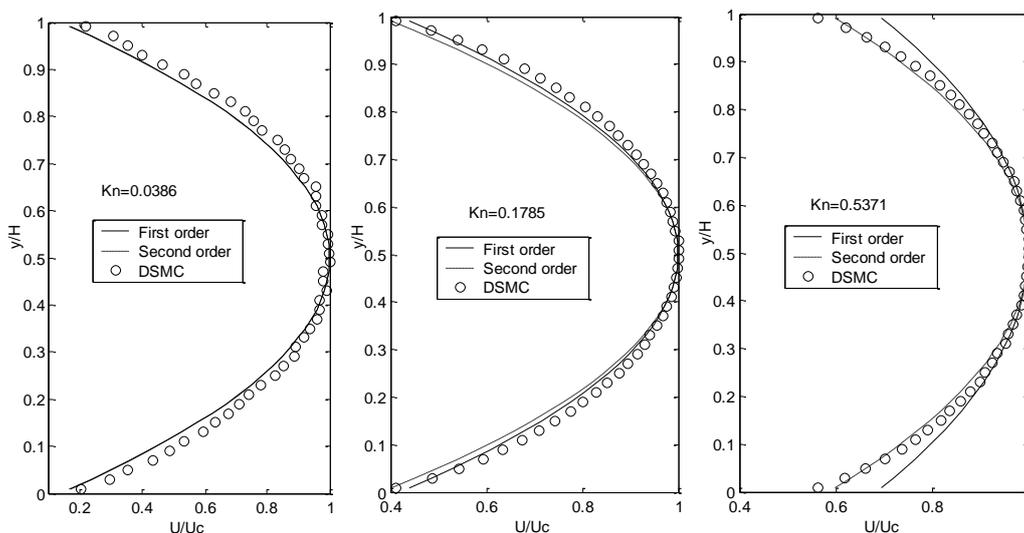


图 2-6 Poiseuille 流动 DSMC 模拟结果与滑移理论解的对比

对于努森数较小的情况($Kn=0.0386$), 流动处在滑移区, 一阶和二阶解析结果差异很小, 且与 DSMC 模拟结果符合较好; 随着努森数的增大, 不同阶的解析解出现差异; 对于努森数较大的情况($Kn=0.5371$), 流动处在过渡区, 一阶解析解与二阶解析解差异明显, DSMC 与二阶解析解符合较好。这一对比结果符合物理上的分析。

图 2-7 还对比了两种工况下滑移速度的沿程分布, 其中第一种工况的努森数分布区间为从 0.0358 到 0.0958, 第二种工况的努森数分布区间为从 0.268 到 1.077。对于第一种工况, 流动处于滑移区, 不同阶次的近似解差别很小, 而且 DSMC 与它们符合很好; 第二种工况的努森数较大, 流动处于过渡区, DSMC 与高阶的滑移近似相对符合较好, 在进出口处由于进出口效应而有所不同^[153], 而一阶近似的结果则严重偏离 DSMC 的结果。

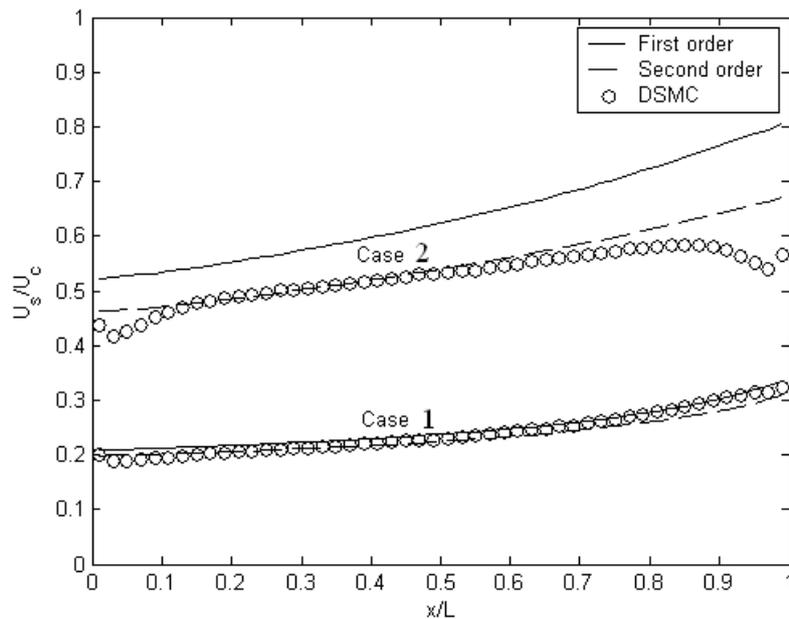


图 2-7 DSMC 与滑移理论解的无量纲滑移速度的沿程分布对比

通过对微尺度 Couette 流动和 Poiseuille 流动的模拟以及与滑移理论解的对比, 进一步验证了本文程序的正确性。

2.3 模拟参数对模拟结果的影响

对于几乎所有的数值模拟方法，模拟参数都是一个非常敏感的话题，因为它们直接影响模拟结果的正确性和准确性。网格尺寸和时间步长是 DSMC 两个最重要的参数，已有学者从理论上作了详细的分析，本文则在数值上对其选择加以限定，另外还讨论了 Bird 的子网格技术对网格划分的影响。近年来，一些学者试图通过改变分子参数，例如分子质量或分子直径等，以期减小 DSMC 的扰动误差，但深入的研究表明，对于某种气体来说，其分子参数对模拟的影响是相互关联的，改变其中的一个或几个，所造成的影响往往是改变后的结果不能重现原始的流动，因此这些方法通常被证明是不可行的。本文采用数值的方法探讨了分子参数对模拟结果的影响。

2.3.1 网格尺寸的影响

Bird 在其 DSMC 理论中指出，网格的划分需要满足网格的最大尺寸小于当地的分子平均自由程。这一要求一直以来被认为是纯经验性的结论，直到 Alexander 等^[154,155]和 Hadjiconstantinou^[157]从理论上研究了 DSMC 方法的输运系数随网格尺寸的变化规律，才给这一“经验”以理论依据。

气体输运系数随网格尺寸的变化规律可以表示为：

$$\mu = \frac{5}{16} \sqrt{\frac{mkT}{\pi}} \left(1 + \frac{16}{45\pi} \frac{L_y^2}{\lambda^2} \right) = \mu_0 \left(1 + 0.113 \frac{L_y^2}{\lambda^2} \right) \quad (2-42)$$

$$\kappa = \frac{75}{64\sigma^2} \sqrt{\frac{k^3T}{m\pi}} \left(1 + \frac{32}{225\pi} \frac{L_y^2}{\lambda^2} \right) = \kappa_0 \left(1 + 0.0453 \frac{L_y^2}{\lambda^2} \right) \quad (2-43)$$

其中： μ_0 为气体粘度的准确值， κ_0 为气体热导率的准确值， L_y 为网格特征尺寸。从式(2-42)和式(2-43)可以看出，气体输运系数的误差随网格尺寸的增大而增大，当网格尺寸与当地的分子平均自由程相等时，气体粘度和热导率的误差分别为 11.3% 和 4.53%。因此一般只要取网格尺寸小于平均自由程，所得到的模拟结果都认为是可靠的。不过近来也有学者研究表明^[158]，在流动方向上的网格划分即使网格尺寸是平均自由程的 100 倍时仍然可以得到正确结果。对此，有必要进行数值验证与研究。

选取了不同划分尺寸的网格对同一个一维 Couette 流动进行了模拟, 对比了模拟结果。算例中平板间距为 $10\ \mu\text{m}$, 下板静止不动, 上板的运动速度为 $211\ \text{m/s}$ 。气体为氮气, 采用 VHS 模型, 气体参数参见 Bird 的书^[74]。时间步长取为分子平均碰撞时间的一半, 不采用子网格。所有算例的总粒子数都相同, 且保证对于最细致的网格划分其中每个网格内的粒子数都超过 20 个。总的采样数相同, 为 8×10^5 。

图 2-8 对比了不同网格尺寸的模拟结果, 同时对对比了滑移解析解的结果。由于来流努森数非常小(0.005), 在速度分布曲线上很难看出差别, 但在温度分布图中可以清晰地看到, 当网格尺度大于分子平均自由程时, 温度分布明显偏离滑移理论解, 而当网格尺寸小于平均自由程时, 不同的网格尺寸得到的结果几乎是一致的, 且与滑移解符合很好。

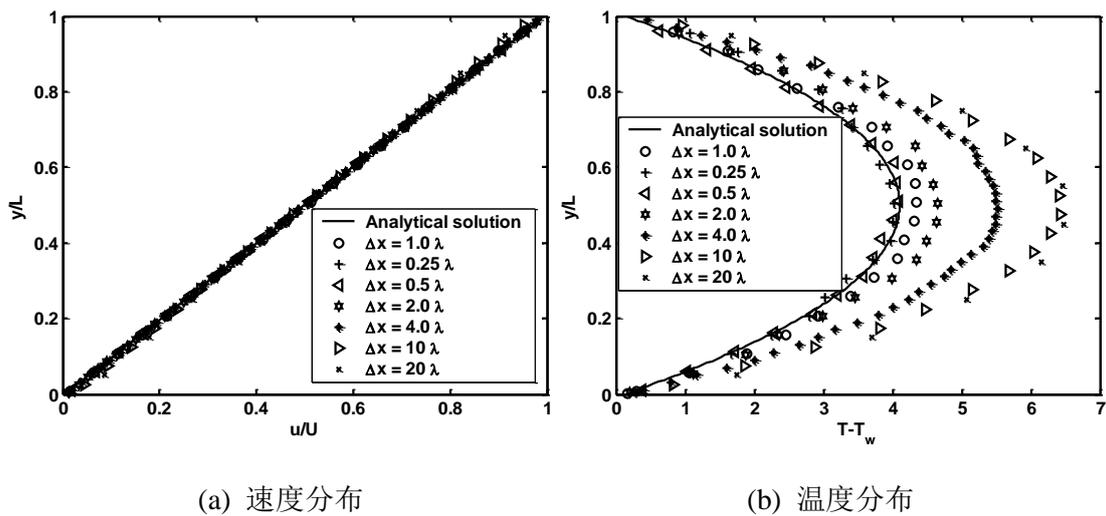


图 2-8 不同网格尺寸的模拟结果对比

与第一版^[73]相比, Bird 在其著作的第二版中引入了子网格技术^[74], 其作用在于保证粒子始终能和其附近最接近的粒子进行碰撞。通过模拟发现, 子网格的作用相当于网格的二次划分, 子网格的大小实际上相当于式(2-42)中 L_y 的大小。图 2-9 显示了网格划分相同但子网格划分不同的模拟结果, 其中 Δx_s 为子网格的大小。可以看出所反映的规律与图 2-8 中类似。

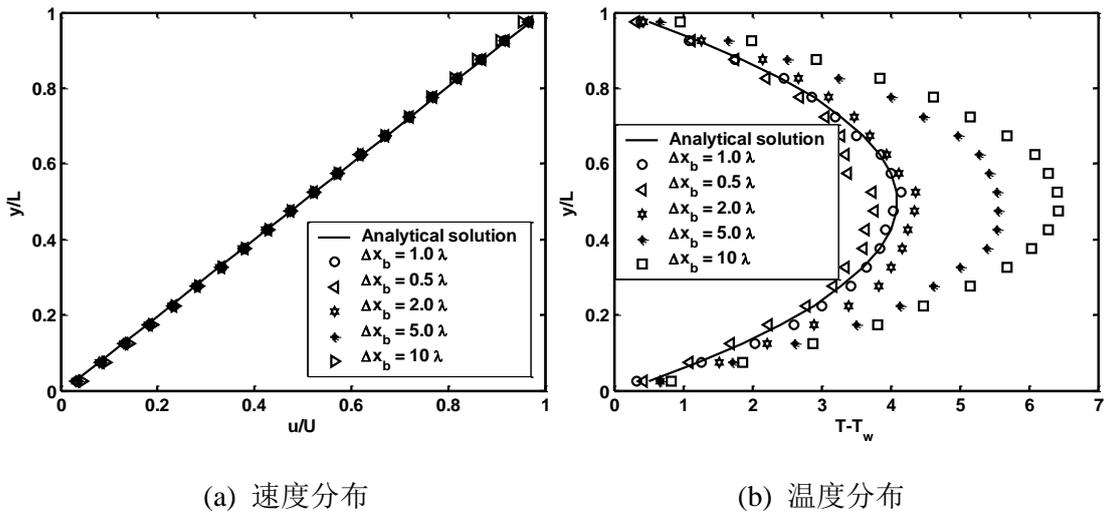


图 2-9 不同子网格划分的模拟结果对比

基于图 2-9 所反映的规律，进一步对比了网格划分不同，但子网格划分相同且满足小于分子平均自由程条件的模拟结果，如图 2-10 所示。与预期结果一致，尽管网格划分未必满足要求，但只要子网格的大小满足小于分子平均自由程的条件，最终的结果都是正确的。

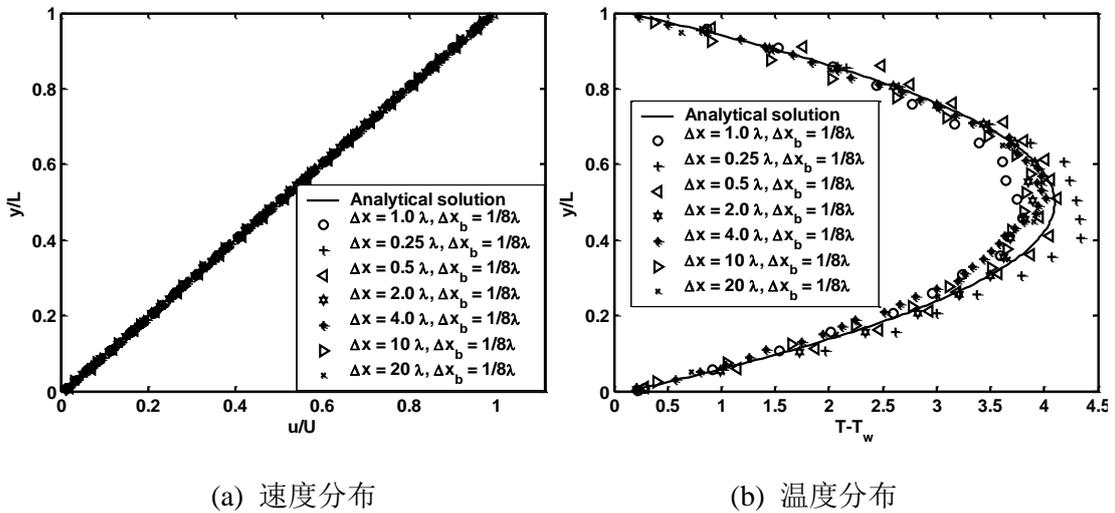


图 2-10 网格划分不同、子网格大小相同的模拟结果对比

除了网格的大小，还对网格均匀性对计算结果的影响作了讨论。DSMC 程序中提供了等比关系渐疏网格，比例参数由 IFC 因子控制。图 2-11 对比了不同 IFC 值的模拟结果，对于均匀网格 IFC=1。图 2-11 表明，当网格尺寸满足计算

要求时，模拟结果与网格的均匀性无关。

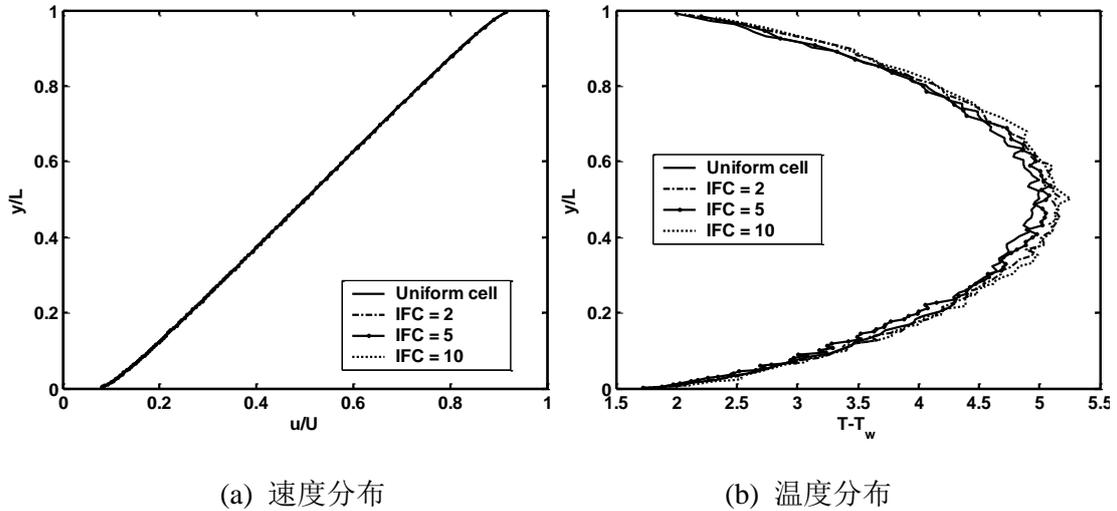


图 2-11 非均匀网格划分的模拟结果对比

以上结果表明，DSMC 模拟要求子网格尺寸要小于气体分子平均自由程。当网格划分满足要求时，DSMC 模拟结果具有网格无关性。

2.3.2 时间步长的影响

Garcia 等^[156,157]给出了如下所示气体输运系数随时间步长的变化关系：

$$\mu = \mu_0 \left(1 + \frac{32}{150\pi} \left(\frac{c_0 \Delta t}{\lambda} \right)^2 \right) = \mu_0 \left(1 + 0.068 \left(\frac{\Delta t}{\Delta t_0} \right)^2 \right) \quad (2-44)$$

$$\kappa = \kappa_0 \left(1 + \frac{64}{675\pi} \left(\frac{c_0 \Delta t}{\lambda} \right)^2 \right) = \kappa_0 \left(1 + 0.03 \left(\frac{\Delta t}{\Delta t_0} \right)^2 \right) \quad (2-45)$$

$$D = D_0 \left(1 + \frac{4}{27\pi} \left(\frac{c_0 \Delta t}{\lambda} \right)^2 \right) = D_0 \left(1 + 0.0472 \left(\frac{\Delta t}{\Delta t_0} \right)^2 \right) \quad (2-46)$$

其中： D 为气体的自扩散系数， c_0 为气体分子的最可几速率， Δt_0 可以代表分子平均碰撞时间。与网格划分的关系类似，DSMC 得到的气体输运系数与真实值之间的偏差随时间步长的增大而增大，当时间步长远小于分子平均碰撞时间时，误差可以忽略。

对上面提到的 Couette 流动算例选取不同的时间步长进行了模拟对比，几何条件和边界条件与前面的例子相同，网格划分保证满足计算要求。模拟结果如图 2-12 所示，其中 Δt 代表分子平均碰撞时间。

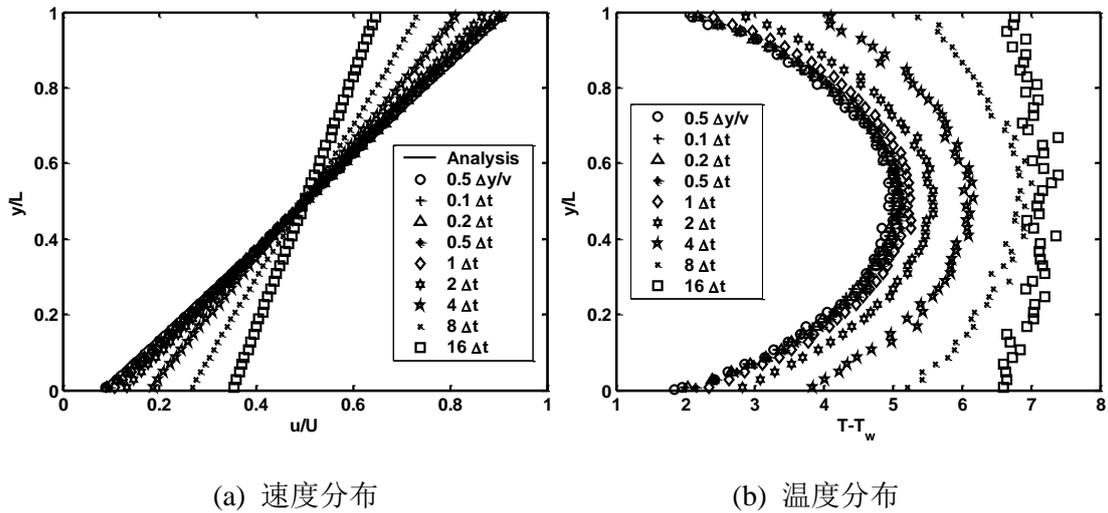


图 2-12 不同时间步长的模拟结果对比

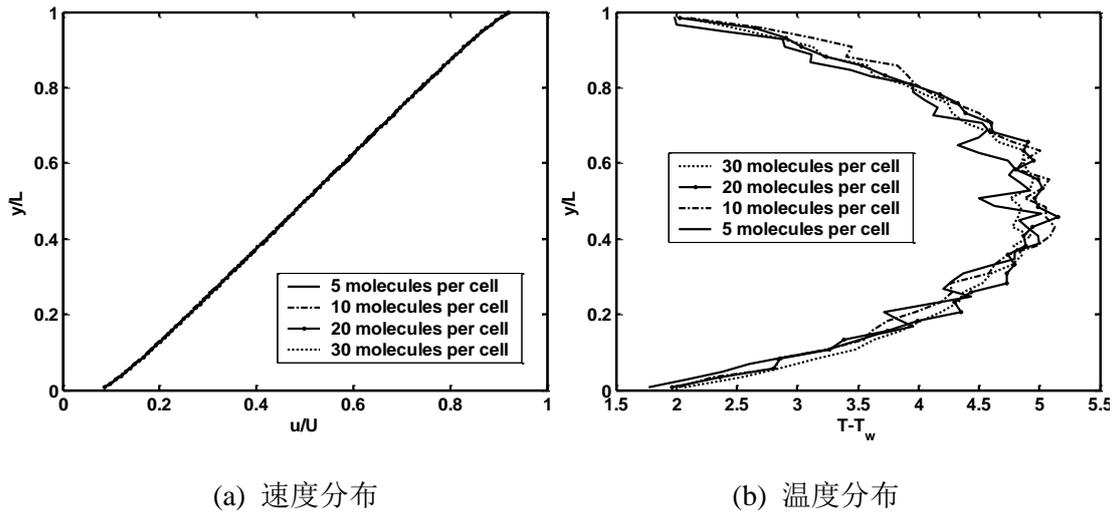
与网格划分类似，当时间步长小于 Δt 时，计算结果与理论结果符合较好，且满足时间步长无关性；当时间步长大于 Δt 时，计算结果严重偏离准确值。而且，时间步长的大小不仅影响温度分布，对速度分布也有剧烈影响，时间步长的偏大造成滑移长度偏大。

2.3.3 单元网格内分子数的影响

为了尽可能减少单个分子的随机状态对整个网格内的流场特性统计量的影响，Bird 建议在每个网格内至少有 20-30 个模拟粒子^[74]。这一条件在很多论文中被转述为“网格内至少安排 20-30 个模拟分子才能得到正确的结果”^[159,160]。其实这种转述并不严谨，由于 DSMC 中采用的是时间平均技术，因此对于稳态流动的模拟，单元网格内的模拟粒子数并不是决定模拟结果正确性的因素，它主要影响扰动误差的大小。为了说明这一问题，使用不同模拟分子数模拟了同一问题，并进行了对比。

对于 2.3.1 中的 Couette 流动，根据前面的讨论，保证网格划分和时间步长都严格满足所限定的条件。图 2-13 对比了初始状态下网格内分子数分别为 5 个、

10 个、20 个和 30 个的情况，其中，单元分子数为 5 个的时候采样数为 1×10^6 ，其他情况采样数均为 5×10^5 。从图 2-13 可以看出，模拟粒子数对速度分布的模拟几乎没有任何影响，对于温度分布的影响也只限于扰动误差，对温度分布的整体规律没有影响。



(a) 速度分布

(b) 温度分布

图 2-13 单位网格内分子数不同的模拟结果对比

2.3.4 分子质量的影响

近年来，为了在使用 DSMC 模拟低速微尺度流动时尽量减小扰动误差，一些学者采用改变分子参数的办法，例如改变分子质量^[116]或改变分子直径^[84]。下面探讨分子质量和分子直径等因素对模拟结果的影响。

对于前文所述的微尺度 Couette 流动，在保证网格尺寸和时间步长满足要求的条件下，为了尽量减小扰动误差，初始状态的分子数超过 40 个，人为改变了氮气的分子质量，对比其他参数相同时分子质量对模拟结果的影响。图 2-14 所示为采用三种构造分子质量与氮气真实分子质量的模拟结果。可以看出，当其他物性参数相同时，只改变分子的质量对速度分布的影响微弱，而对温度分布的影响很大，分子质量越大，壁面的温度跳跃值越高。观察温度分布可以发现，分子质量越大，对于相同的采样数扰动误差越小，这与理论分析是一致的^[116]。

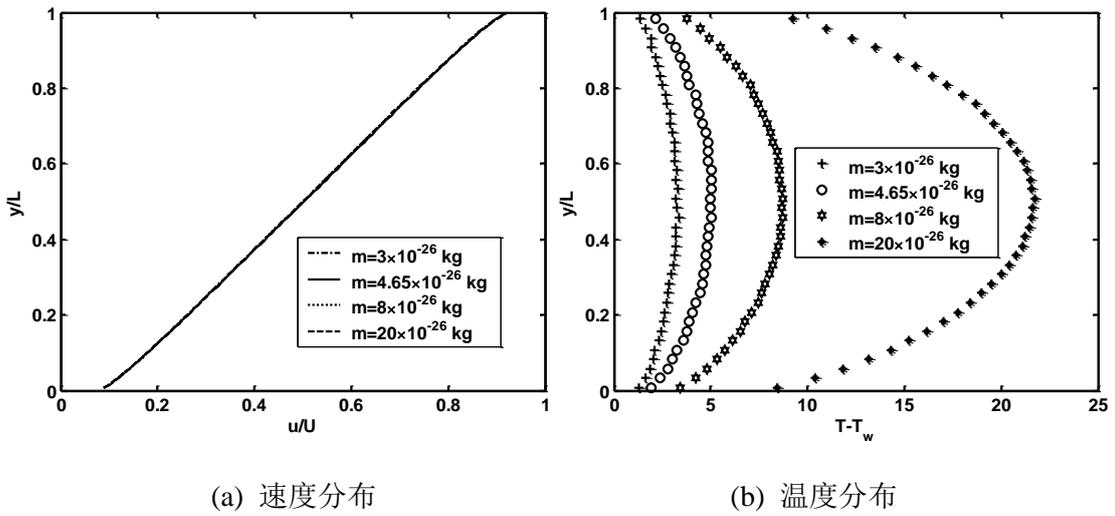


图 2-14 采用不同分子质量的模拟结果对比

2.3.5 分子直径的影响

图 2-15 对比了采用三种构造分子直径与氮气真实分子直径计算所得的微尺度 Couette 流的速度分布和温度分布。与分子质量的影响不同，分子直径不仅对温度分布有较大影响，而且直接影响速度分布，这一点同样可以由理论分析得到。值得注意的是，分子直径的增大使得滑移长度减小，同时温度跳跃值也减小。

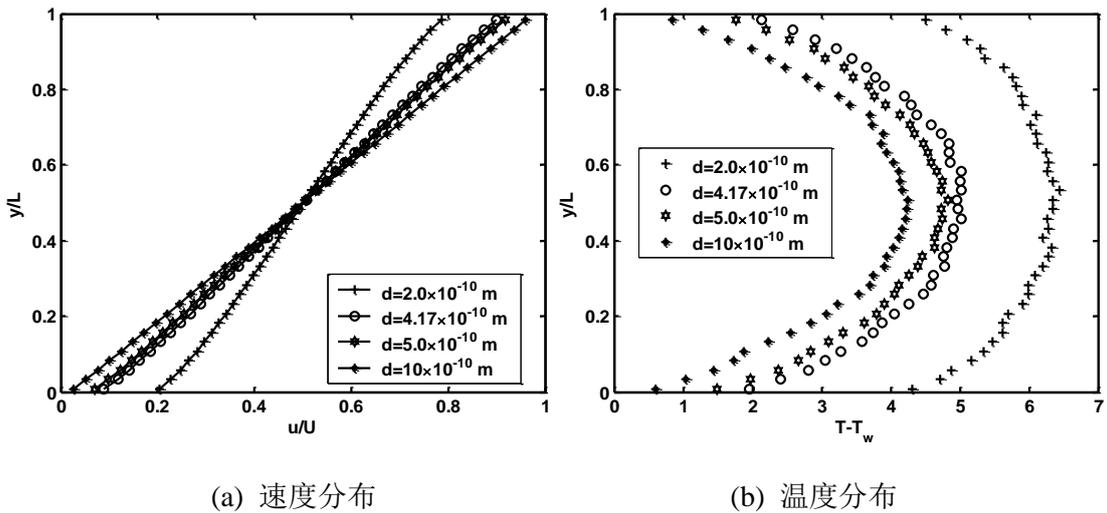


图 2-15 采用不同分子直径的模拟结果对比

2.3.6 粘性律的影响

气体的粘度—温度律同样是气体的固有特性参数之一，Macrossan 等^[161]通过改变粘性律的方法研究了激波结构，Torczynski 等^[162]则研究不同粘性律对稀薄气体中固体微粒的受力情况。本文通过人为改变氮气的粘性律，研究粘性律对流动和换热的影响。

从图 2-16 中可以看出，粘性律对 Couette 流动的速度分布和温度分布都有影响，粘性律的增大可以导致速度滑移和温度跳跃的增强。

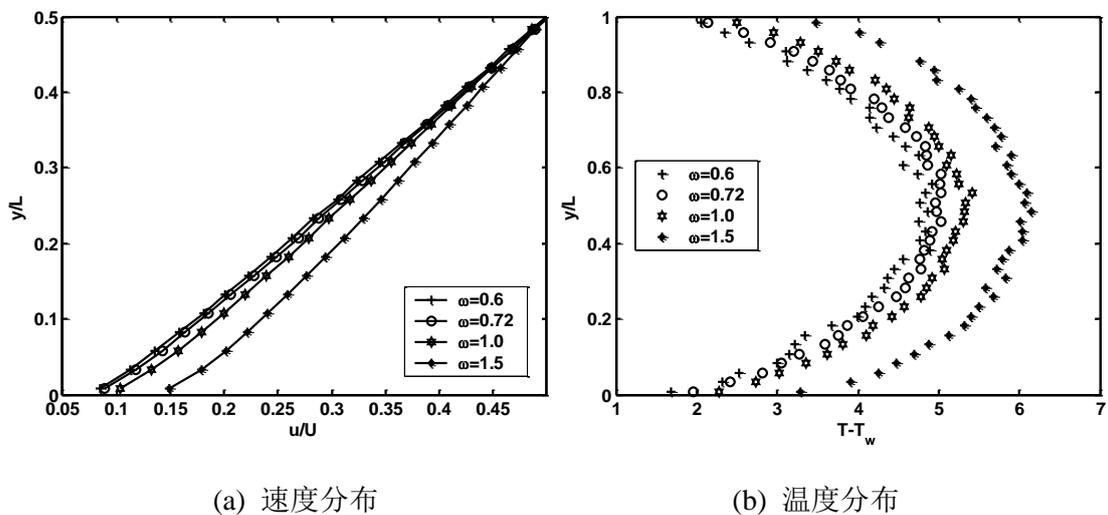


图 2-16 粘性律对模拟结果的影响

2.3.7 碰撞率的影响

DSMC 方法是基于气体稀薄假设的，即只考虑了气体分子间的二元碰撞，DSMC 的碰撞率也可以通过稀薄气体的 Boltzmann 方程严格推导得到。但气体密度增大到稀薄假设不再严格成立时，需要考虑气体分子的三元甚至多元碰撞效应，分子的碰撞率将由此得到强化。本文通过数值方法探讨了碰撞率对气体流动模拟结果的影响。结果如图 2-17 所示，碰撞率对速度分布和温度分布都有明显影响。碰撞率的强化将会使壁面的速度滑移和温度跳跃效应减弱。

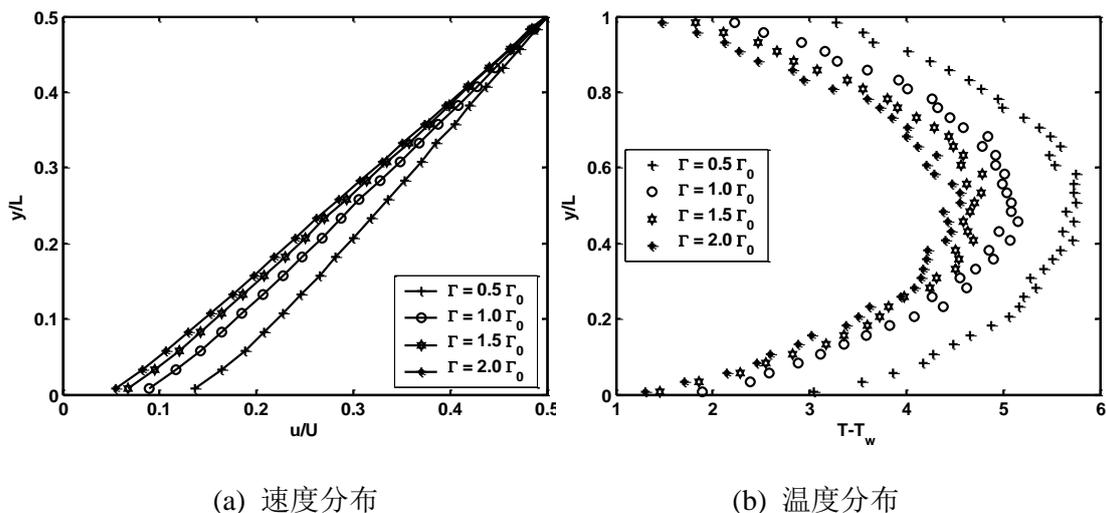


图 2-17 碰撞率对模拟结果的影响

2.4 进出口边界条件的处理

正如 2.2 节中所述, 边界条件的处理对 DSMC 模拟结果的影响是非常大的。本节主要介绍 DSMC 在进出口边界上的处理方法。

本节在总结前人工作的基础上, 提出了两种边界条件处理的改进方法: 一种是对进出口气流方向不一致情况下的边界处理; 另一种是对压力边界条件提出一种改进方案。

2.4.1 前人的进出口边界条件处理方法及分析

标准的 DSMC 程序在处理进出口边界时, 采用的特征量是来流气体的数密度 n_∞ 、无穷远均匀来流的速度 u_∞ 和温度 T_∞ 。这种处理方法有两个主要特点:

- 进出口气体状态无差别, 无法人为设定进出口状态;
- 来流为均匀来流且进出口流动方向一致。

对于常规尺度的模拟, DSMC 主要用来求解一些高速或超高速的流动, 此时在出口边界上也采用简单的均匀速度处理方法没有任何问题, 这种边界的处理已经被绝大多数的 DSMC 研究者所采用^[77]。另一种成功的做法是在出口边界上赋以“真空”边界条件, 这种处理方法所得的结果也得到了实验的验证^[74,82,163]。然而, 在微尺度情况下所遇到的流动通常是亚音速的通道内流动, 而且实验所能测得的宏观量通常是压力和温度等, 因此, 采用传统的无穷远处数密度和速

度作为边界条件只适于做理论上的探讨，所得到的结果难以直接与实验结果相对比。另一方面，在微系统中大量的出现非直通道的情况^[164,165]，常规的 DSMC 处理方法需要进行改进才能对这种流动进行模拟。

对于压力边界的处理方法，Ikegawa 等^[106]最早作了研究，并提出在边界上采用“通量法”来计算粒子的分布速度，这种方法的缺点是程序处理上比较复杂，且容易发散；Piekos 和 Breuer^[107]随后对其作了发展，通过对比设定数密度与由理想气体关系式计算所得值之间的差异来确定粒子的速度；Nance 等^[108]为了解决粒子法容易发散的问题，借用了传统 CFD 的特征法的思想，在出口边界上使用特征关系式以确定粒子速度；Liou 和 Fang^[109,110]则在此基础上，采用在入口处统计平均值作为分布粒子的采样量，这种方法程序处理最简单，但实践证明收敛速度较慢。本文在此基础上，提出一种新的压力边界处理方法，新方法避免了发散的产生，而且计算收敛性有所提高。

对于进口气流方向不一致的情况，其边界条件的处理方法鲜有报道，台湾国立交通大学的 Wu 等^[111]对此作了研究，并模拟了三通通道内的气体流动，但其文献中没有对边界处理的详细介绍。本文在分析了传统直通道边界条件的基础上，提出了处理这种非直通道进出口边界条件的具体方法。

2.4.2 压力边界处理的新方法

正如前面所提到的，传统的 DSMC 模拟超音速流所使用的边界条件通常是无穷远均匀气流的数密度 n_∞ 、速度 u_∞ 和温度 T_∞ ，而在微尺度的低速流动中，气体的数密度和速度很难在实验中准确测量，因此，使用 DSMC 模拟微尺度流动时，需要用压力边界代替数密度边界。一般来说，在实验中容易测量得到的量有入口的压力 P_m 和温度 T_m 以及出口的压力 P_e ，若这几个量确定，流动已确定。

2.4.2.1 入口边界

由于在入口处的温度和压力已知，因此只需要确定从入口界面进入计算区域的粒子速度。Ikegawa 等^[106]、Nance 等^[108]和 Wu 等^[111]通过使用入口处通量来确定入口处分子的分布速度

$$(u_m)_j = \frac{(\dot{n}_+ - \dot{n}_-)_j}{n_m A} \quad (2-47)$$

其中：下标 j 表示网格位置， A 为网格边界处面积， n 为气体数密度， \dot{n} 为通过边界处在某一方向上的粒子数通量，其具体可以表示为

$$\dot{n} = \frac{nc_0 \left[\exp(-q^2) + \sqrt{\pi}q(1 + \operatorname{erf}(q)) \right]}{2\sqrt{\pi}} \quad (2-48)$$

其中： $q = s \cos \theta$ ； s 为速度比 U/c_0 或 V/c_0 ； c_0 为分子最可几速度， θ 为速度向量与边界法向的夹角。Ikegawa 方法与 Nance 方法的区别在于前者将式(2-48)应用于整个边界的平均而后者只应用在单个网格内，且前者应用实际的粒子数统计值而后者采用 Maxwell 分布的计算值。

不过从式(2-48)可以看出，采用通量来确定入口速度的方法，由于时间步长的限制，分子分母都为小量，因此这种方法可能会由于随机扰动造成计算的发散。Liou 等^[110]提出了一种较简单的方法，即用入口界面处各网格内的速度统计量作为新进入粒子的速度分布量

$$(u_{in})_j = u_j \quad (2-49)$$

这种方法程序处理非常简单，而且可以证明在数学上与 Nance 的方法是统一的，但由于在速度项上缺乏反映压力信息的量，因此其缺点是收敛速度慢。

为了加快收敛速度，本文提出，借用传统 CFD 中的特征化理论以尽快反映入口压力信息：

$$(u_{in})_j = u_j + \frac{P_{in} - P_j}{\rho_j a_j} \quad (2-50)$$

$$v_{in} = v_j \quad (2-51)$$

对于热完全气体，入口的数密度可以从理想气体状态方程计算得到

$$n_{in} = \frac{P_{in}}{kT_{in}} \quad (2-52)$$

其中： a 是当地声速， k 是 Boltzmann 常数。

2.4.2.2 出口边界

在出口边界上采用类似的压力边界处理方法，可以得到如下公式：

$$(\rho_e)_j = \rho_j + \frac{P_e - P_j}{(a_j)^2} \quad (2-53)$$

$$(u_e)_j = u_j + \frac{P_j - P_e}{\rho_j a_j} \quad (2-54)$$

$$(v_e)_j = v_j \quad (2-55)$$

$$(T_e)_j = P_e / [(\rho_e)_j R] \quad (2-56)$$

$$(n_e)_j = (\rho_e)_j / M \quad (2-57)$$

其中： R 是气体常数， M 为分子质量。方程(2-53)-(2-57)所描述的是 x 方向的出口条件，对于 y 方向的出口，式(2-54)和式(2-55)改写为：

$$(u_e)_j = u_j \quad (2-58)$$

$$(v_e)_j = v_j + \frac{P_j - P_e}{\rho_j a_j} \quad (2-59)$$

边界网格内的宏观量统计值，可以通过如下的统计公式得到：

$$U_j = \frac{1}{N_j} \sum u \quad (2-60)$$

$$V_j = \frac{1}{N_j} \sum v \quad (2-61)$$

$$\rho_j = n_j M \quad (2-62)$$

$$T_j = (3T_{tr} + \zeta T_{rot}) / (3 + \zeta) \quad (2-63)$$

$$P_j = n_j k T_j \quad (2-64)$$

其中： N 为网格内的采样粒子数， T_{tr} 为平动温度， T_{rot} 为转动温度， ζ 为转动自由度。

这样，公式(2-50)~(2-64)就完成了压力边界条件向标准 DSMC 边界条件的转化。

2.4.2.3 对比与验证

在标准 DSMC 程序的基础上，使用所提出的新的压力边界处理方法，对微通道内压力驱动的气体流动进行了模拟，并与基于传统连续介质假设所得到的解析解和数值解作了对比。

物理模型如图 2-18 所示，计算区域尺寸 $L=5 \mu\text{m}$ ， $h=1 \mu\text{m}$ ，工作流体为氮气。入口压力 $P_{in}=1.5 \times 10^5 \text{ Pa}$ 、入口温度 $T_{in}=300 \text{ K}$ ，出口压力 $P_e=0.5 \times 10^5 \text{ Pa}$ ，通道壁面温度 $T_w=300 \text{ K}$ 。分子间碰撞模型为可变硬球(VHS)模型，壁面上为漫反射模型；采用 50×50 的均匀矩形网格，每个网格单元中分为 4×4 的子网格。

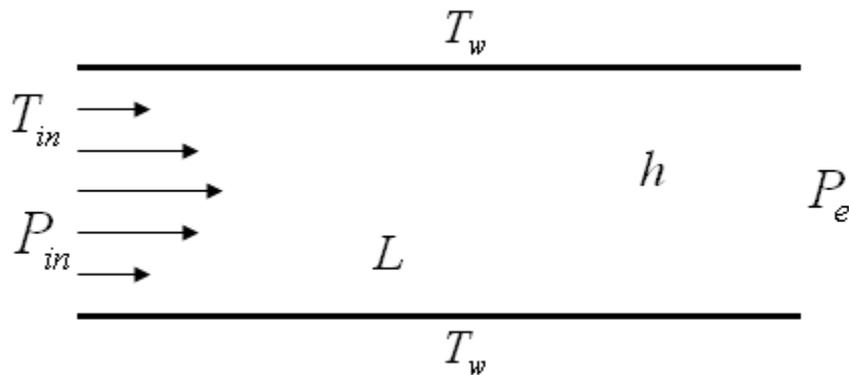


图 2-18 压力驱动微通道内气体流动的物理模型

在 Liou 等的文章中^[109]报道了 Liou 的压力边界处理方法较之以前的压力处理方法效率高，所以，下面主要对比了新方法与 Liou 的方法的结果，包括准确性和收敛速度。事实上，作者在工作中还发现几种基于粒子通量的方法很难得到预期的结果。图 2-19 对比了采用两种压力边界处理方法所得到的通道中心处的压力分布，图中同时对比了 Fluent 商用程序在无滑移条件下的数值模拟结果(NS Simulation)以及 Arkilic 无滑移和滑移近似的解析解^[35]。图 2-19 表明，本文所提出的压力边界处理方法得到的压力分布与 Liou 等的方法得到的压力分布几乎完全重合，这验证了新方法的正确性。Arkilic 的滑移近似解与 DSMC 的模拟结果差别较小，而无滑移近似解和无滑移数值解都与 DSMC 的结果有所差别。

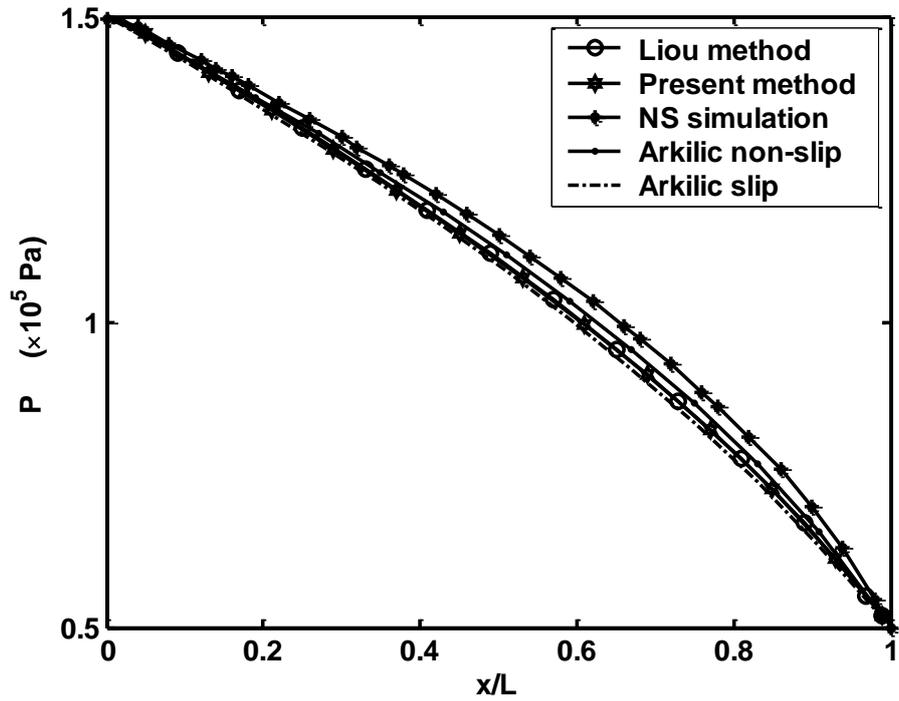
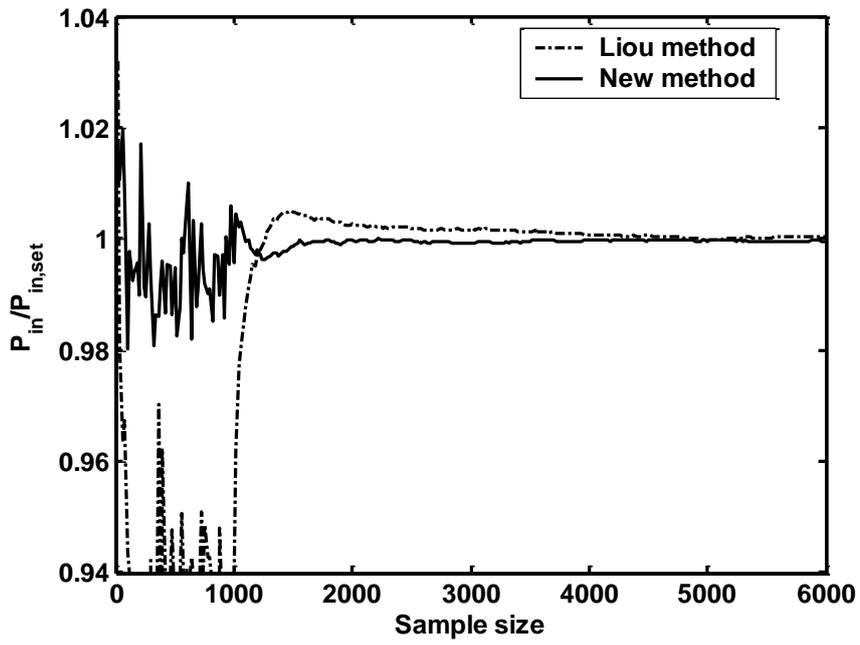
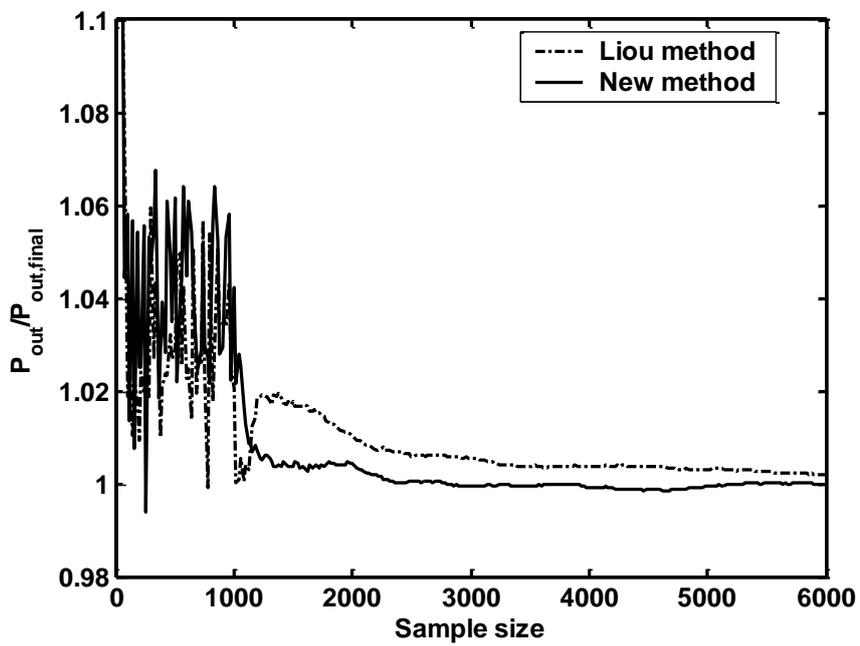


图 2-19 沿通道中心线上的压力分布结果对比

图 2-20 显示了采用两种压力边界处理方法所得进出口平均压力随采样数的演化过程，对比了它们的收敛特性。为了清晰起见，只对比了前 6000 个采样的情况。从图 2-20 可以看出，新的压力边界处理方法的收敛性要明显优于 Liou 等的方法。这也验证了理论分析的结论。



(a) 归一化的入口压力



(b) 归一化的出口压力

图 2-20 进出口的平均压力的演化对比

2.4.3 转角通道的速度边界处理方法

在前人的模拟中, 气流大多数是按照一个方向流动(至少在进出口处), 这种情况可以很容易的在 DSMC 程序中实现。然而, 在实际应用中总会遇到一些复杂的气体通道, 例如带有 90 度转角的流动就经常出现在 MEMS 系统中^[164,165]。对于这种流动的模拟, 很少见到相关的报道。Wu 等^[111]曾经对 T 型三通通道的流动做过模拟, 但没有给出具体的边界处理方法。本节将详细讨论这种带有转角流动的边界条件处理方法。

通常认为气体在流动过程中也会保持准平衡态, 因此不论是从上游入口还是下游出口进入计算区域的粒子都可以认为其符合 Maxwell 速度分布函数,

$$f_0 = \frac{\beta^3}{\pi^{3/2}} \exp(-\beta^2 c'^2) \quad (2-65)$$

通过 Maxwell 分布可以计算出进入计算区域的分子数通量。首先考虑沿 x 正方向的入口, 在入口边界, 进入计算区域的分子沿流向的热运动速度 u' 应该在 $[-U_j, \infty]$ 区间, 且其分布函数满足:

$$f_u' \propto (\beta u' + s_j) \exp(-\beta^2 u'^2) \quad (2-66)$$

在程序中实现无穷边界是非常困难的, 因此常采用截断值 $3C_{mp}$ 代替 ∞ , 其中 C_{mp} 代表当地分子的最可几速率,

$$C_{mp} = \sqrt{2RT_j} \quad (2-67)$$

因此速度 u' 的随机采样区间为 $[-U_j, 3C_{mp}]$, 此时进入计算区域的分子沿流线的总体速度可以表示为:

$$u = (U_{j,in} + 3C_{mp})R_f \quad (2-68)$$

其中: R_f 为 0 和 1 之间的均匀分布随机数。而截面方向的速度分量为

$$v = B \cos \phi + V_{j,in} \quad (2-69)$$

$$w = B \sin \phi \quad (2-70)$$

其中: B 的取值范围为 0 和 ∞ 之间, 其分布函数满足:

$$f_B = \exp(-\beta^2 B^2) \quad (2-71)$$

根据统计规则， B 可以表示为：

$$B = \sqrt{-\ln(R_f)} C_{mp} \quad (2-72)$$

式(2-69)和(2-70)中的 ϕ 满足 0 和 2π 之间的均匀分布，即，

$$\phi = 2\pi R_f \quad (2-73)$$

类似的，考虑沿 x 方向的出口边界，从出口下游进入计算区域的分子沿流线的热运动速度取值区间在 $[-3C_{mp}, -U_j]$ ，若出口的流线方向沿 y 方向，则这个区间在 $[-3C_{mp}, -V_j]$ 。因此，最终在出口边界上进入计算区域的分子速度分量分布，

对于 x 方向的出口：

$$u = (U_{j,out} - 3C_{mp}) R_f \quad (2-74)$$

$$v = B \cos \phi + V_{j,out} \quad (2-75)$$

$$w = B \sin \phi \quad (2-76)$$

对于 y 方向的出口：

$$u = B \cos \phi + U_{j,out} \quad (2-77)$$

$$v = (V_{j,out} - 3C_{mp}) R_f \quad (2-78)$$

$$w = B \sin \phi \quad (2-79)$$

2.4.4 压力驱动下90度转角流动的模拟

新的压力边界处理方法以及带有转角通道的进出口速度处理方法已经得到了诸多算例的验证，并已经成功应用在多种不同类型微通道气体流动的模拟与预测中^[113,167]。下面以一个压力驱动下 90 度转角气体流动的算例为例介绍它们的应用。

物理问题如图 2-21 所示，两个长 L 的直通道直角相联，通道宽 H 。Lee 等^[165]对特征尺度 $L_c = 1.1 \mu\text{m}$ 的转角通道进行了实验研究，结果表明通道的阻力损失大于直通道的滑移理论预测值，Lee 等将这种阻力损失增大现象归结为转角下游的流动分离。

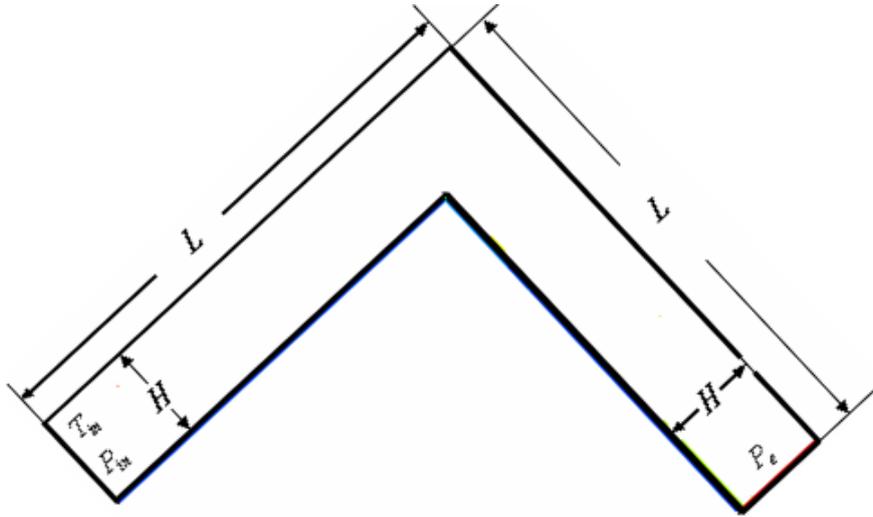


图 2-21 转角通道的几何参数和边界条件示意

在所模拟的转角流动中，参数尽可能与 Lee 等的实验参数相同，以便对比，其中， $L=5\ \mu\text{m}$ ， $H=1\ \mu\text{m}$ ，出口压力 P_e 保持 $1\times 10^5\ \text{Pa}$ ，入口来流气温 $T_{in}=300\ \text{K}$ ，入口压力 P_{in} 的变化范围从 $2.0\times 10^5\ \text{Pa}$ 到 $3.0\times 10^5\ \text{Pa}$ 。模拟中使用 100×100 的均匀网格，每个网格内又划分 3×3 的子网格。

图 2-22 所示为不同入口压力下沿通道的平均温度分布，其中温度为通道截面平均的体温度(bulk temperature)。横坐标为通道中心线上的归一化位置，其中转角的位置位于 $\frac{x}{2(L-H/2)}=0.5$ 处。由图 2-22 可知，温度沿通道的变化除在转角处的尖峰之外其他都与直通道内的温度分布非常类似。图 2-23 显示了沿通道的马赫数变化规律，其分布特点与两个独立的直通道压力驱动的情况很相像。在通道转角处，流动非常缓慢，其马赫数甚至小于入口处的值。图 2-24 所示为不同压力驱动下的流动沿通道的平均压力分布，在转角处，压力会出现突然增大的现象，在转角的上游，压力几乎成线性分布，在转角的下游，压力分布表现出明显的非线性分布规律，这一特点与 Lee 等的实验结果非常吻合^[166]。

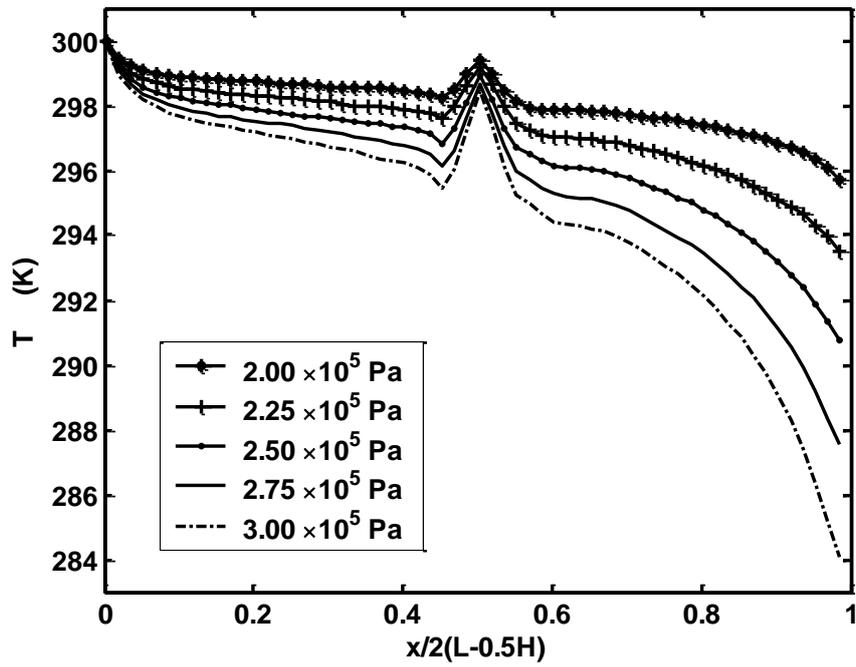


图 2-22 平均温度分布

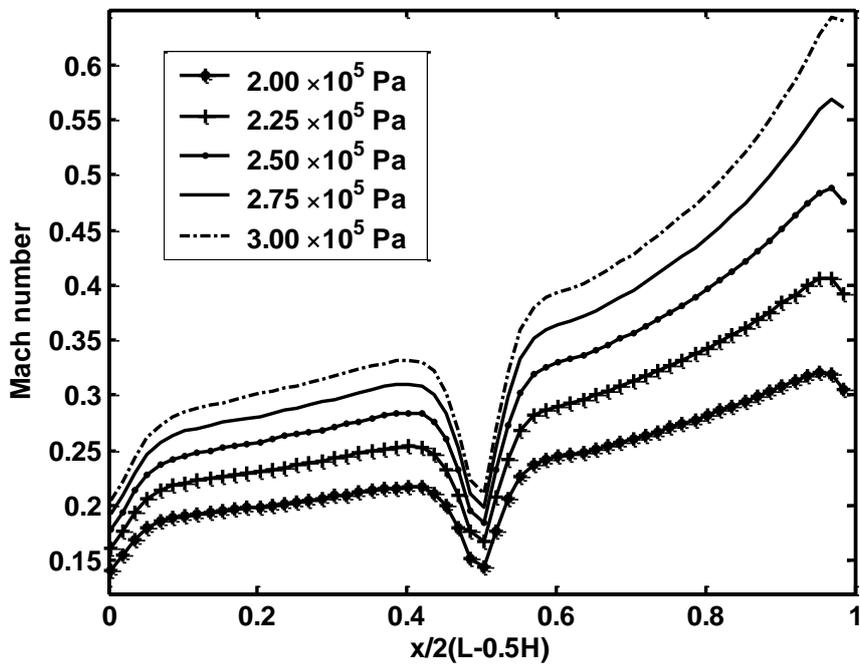


图 2-23 马赫数分布

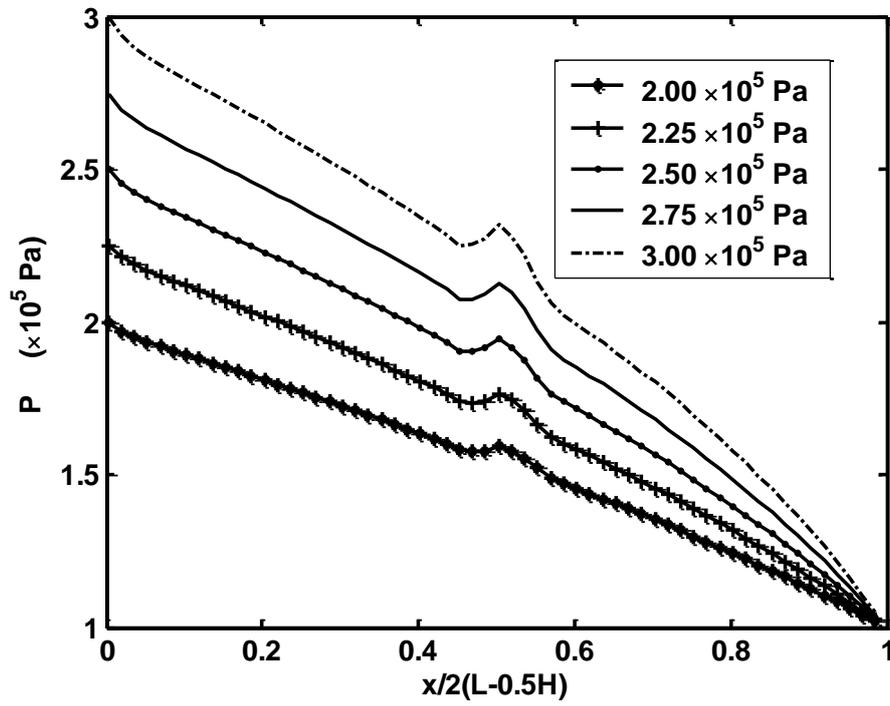


图 2-24 压力分布

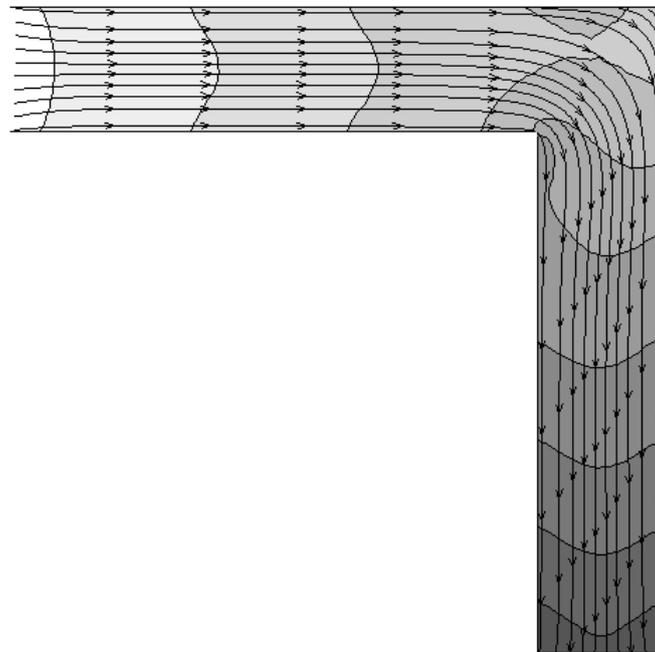


图 2-25 转角流动的流线图(背景为密度等值图)

Lee 等^[165]通过滑移理论的分析将转角通道流动的阻力增大现象归结为转角下游的流动分离。图 2-25 所示为入口压力为 3.0×10^5 Pa 条件下的流线，表明即使在这样的压力驱动下，转角的下游并没有出现流动的分流现象，因此 Lee 等的结论以及转角通道阻力增大的原因尚需进一步探讨。

2.5 小结

数值探讨了网格尺寸和时间步长以及其它模拟参数对模拟结果的影响，结果表明，只有在满足网格尺寸小于气体的平均自由程且时间步长小于气体分子的平均碰撞时间的条件下才能保证 DSMC 模拟结果的正确性；对于存在子网格划分的情况，需要保证子网格的尺寸小于气体平均自由程，而放宽对网格尺寸的要求；当网格划分和时间步长满足要求时，模拟结果具有网格无关性和时间步长无关性。这一结果验证了前人的理论分析。其他模拟参数(例如分子质量、分子参考直径、粘性-温度律等)对模拟所得的温度场或速度场也有重要影响，单独改变其中的一个或几个都可能影响模拟结果的正确性。

分析了微尺度气体流动的特点，在前人工作的基础上提出了一种实现压力边界的新方法，新方法在入口处借鉴了传统 CFD 处理边界时的特征化理论，既避免了“通量法”容易发散的缺点，又较“均值法”更快的反映入口的压力信息。新方法与已有方法相比，模拟结果吻合很好，收敛速度显著提高。

通过理论推导给出了有转角通道的进出口处边界处理的具体方法，并对压力驱动 90 度转角微通道内的气体流动进行了模拟分析，所得结果在定性上与已有的实验数据基本符合。模拟结果未发现转角处有涡流产生，所以，对前人关于转角处可能由于流动分离导致流动阻力增大的分析提出了质疑。

第三章 微气体流动与稀薄气体流动的相似性分析

通过前面两章的介绍可以看出，对微尺度气体流动的分析、模拟以及实验结果都表明，微尺度气体的流动和换热存在明显的稀薄气体效应，即在壁面处出现速度滑移和温度跳跃现象。这不禁让人想到两者之间存在着某种相似关系，本章在前人研究结果的基础上分析了这种相似关系及其适用条件。

3.1 前人对稀薄气体流动相似性的讨论

稀薄气体流动因其在航空航天领域有着重要的应用背景而得到了非常广泛而深入的研究^[168]。特别是在研究航天飞机高轨道飞行性能时，稀薄气体流动的相似性曾经起到了非常重要的作用^[169]。

一般说来，当考虑两个不同尺度的不可压流体的流动相似时，相似准则数为雷诺数， Re ；当考虑了气体的可压缩效应时，需增加马赫数， Ma ，为相似准则；对于稀薄气体流动，努森数 Kn 的大小将直接影响气体在壁面处的速度和温度边界条件，因此也是一个表征其流动特性的重要参数。然而，对于稀薄气体来说，这三个量并非彼此独立，许多学者经过推导得到了如下的关系式^[17,80,121,170]：

$$Kn = \sqrt{\frac{\pi\gamma}{2}} \frac{Ma}{Re} \quad (3-1)$$

式(3-1)的意义在于将稀薄气体流动三个相似准则数简化为任意两个的组合。通常习惯上选择 Kn 和 Ma 或者 Ma 和 Re 的组合作为两种稀薄气体流动的相似准则数。

很少有人对此相似性的条件进行深入分析，沈青^[80]在其著作中将这种相似性限定为“不太高速的流动”，并指出，对于航天领域的高速流动，应以 Birkhoff^[169]提出的双体碰撞模拟律(Binary collision modeling law)为相似判别准则，即除两个无量纲数外还要求两个流动的气体静温相等。

3.2 微气体流动与稀薄气体流动的相似性条件

由于特征尺度的减小，微尺度气体流动可以表现出与稀薄气体流动相同的努森数，一些学者因此将稀薄气体的相似性直接推广到微尺度气体流动^[80,121,170]。然而，直观上来说，微尺度气体流动和稀薄气体流动既有相似之处，也存在不同。因此有必要对这两种流动相似性的条件进行深入分析。

三个无量纲数的定义为：

$$\text{Re} = \frac{UL}{\nu} \quad (3-2)$$

$$\text{Ma} = \frac{U}{a} \quad (3-3)$$

$$\text{Kn} = \frac{\lambda}{L} \quad (3-4)$$

根据气体的分子理论^[170]，对于只考虑分子间排斥力的光滑弹性硬球分子模型的热完全气体来说，气体的运动粘度与分子平均自由程之间的一阶近似关系可以表示为：

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} = 0.499\lambda\bar{v}_m \approx \frac{1}{2}\lambda\bar{v}_m \quad (3-5)$$

其中： \bar{v}_m 为分子平均速度，其大小略高于声速：

$$\bar{v}_m = \sqrt{\frac{8}{\pi\gamma}}a \quad (3-6)$$

联立式(3-2)至(3-6)即可以得到关系式(3-1)。在整个推导过程中，所使用的唯一假设为式(3-5)，其成立的条件与热完全气体成立的条件相一致^[172]。更深入的研究表明，若考虑到气体密度对气体宏观特性的影响（稠密气体效应），则两个不同尺度流动的三个无量纲数不可能同时相等。因此，可以认为，微尺度气体流动与稀薄气体流动可以相似的必要条件为气体满足热完全气体假设。

气体分子理论对热完全气体的描述为：它是一种理想化的气体，不考虑气体分子之间的内聚力和分子本身的体积，仅考虑分子的热运动（包括分子间的碰撞）^[173]。气体动力学对热完全气体条件的限定为：温度远大于临界温度且压力远小于临界压力的简单气体（所谓简单气体，即不应该发生离解、电离以及

化学反应等现象)^[174]；热完全气体满足克拉珀龙方程(又称理想气体状态方程)，它与理想气体的区别仅在于，热完全气体考虑气体粘性和导热性而理想气体不考虑。热力学对理想气体状态方程成立的条件作了进一步定量的限定，即压力不太高($P < 1000 \text{ atm}$)，温度不太高也不太低($30 \text{ K} < T < 2500 \text{ K}$)并且速度不太高($Ma < 5$)的简单气体满足理想气体状态方程^[175]。

事实上，前人所给的适用范围过于宽松了，从热完全气体的分子理论描述出发，这个范围应该由考虑了分子间吸引势以及分子体积影响的结果与热完全气体的结果对比给出，这样所得到的压力和温度范围应该是耦合的，而且还应与气体的种类有关。详细的过程将在下一章中介绍。这里示例的给出氮气的热完全气体状态方程的简化条件： $P < 10 \text{ atm}$ 以及 $100 \text{ K} < T < 2000 \text{ K}$ 。

至此，微尺度气体流动与稀薄气体流动的相似性条件可以归纳为：几何形状和边界条件相似、两个同名准则数 Kn 和 Ma (或 Kn 和 Re ，或 Ma 和 Re)相等，且气体满足热完全气体假设。

3.3 相似性的数值验证

使用 DSMC 方法对微尺度气体流动与稀薄气体流动的相似性进行了数值验证。根据第二章的介绍，可变硬球模型(VHS)是一种只考虑分子间排斥力、分子间碰撞满足弹性碰撞规律的分子模型^[74]，这与式(3-5)的成立条件基本一致；标准 DSMC 的碰撞率由硬球 Boltzmann 方程确定，由无时间计数器(NTC)法选择“碰撞对”来实现，没有考虑气体密度对气体性质的影响。因此，使用可变硬球模型的 DSMC 方法与热完全气体假设成立的条件是一致的。

下面分别对亚音速通道内流和超音速横掠平板外流两种典型流动进行模拟，在保证几何形状和边界条件相似以及同名准则数相等的条件下对比了不同尺度的模拟结果。

3.3.1 亚音速通道流动的相似性数值验证

如图 3-1 所示，无穷远处速度为 u_∞ 的均匀来流流过一平行平板通道，通道的长宽比 $L:H = 5:1$ ，来流气体温度为 T_∞ ，通道壁面温度为 T_w 。以通道的宽度为特征尺度，保持来流的努森数和马赫数相同，考虑通道尺寸从米的量级变化到纳米量级的 4 种情况。对所有的工况使用 100×60 的矩形均匀网格，每个网格

内划分为 2×2 的子网格。工质为氮气，其特性参数见表 3-1^[74]，其中 m 为分子质量， ζ 为内能自由度， d_{ref} 为分子参考直径， T_{ref} 为参考温度， ω 为粘性温度律。其他模拟参数参见表 3-2，其中 n_{∞} 为无穷远来流的数密度， N_{total} 为最终的模拟粒子数， N_{sample} 为总采样数。

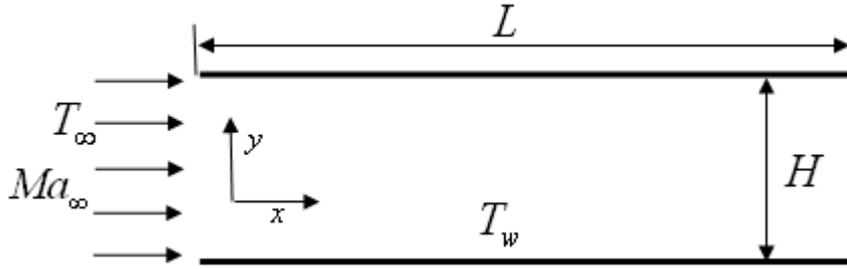


图 3-1 平行平板通道流动的几何参数和边界条件

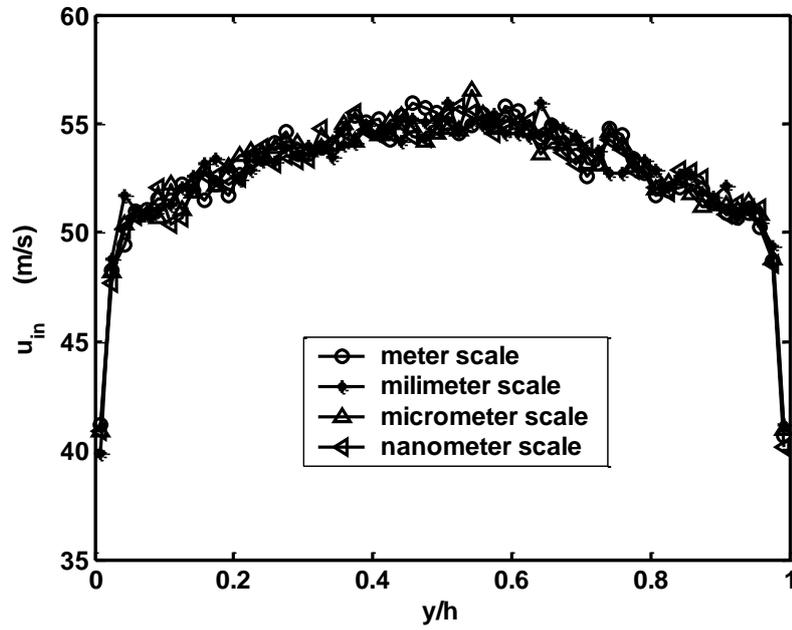
表3-1 氮气的特性参数

m	ζ	d_{ref}	T_{ref}	ω
(kg)		(m)	(K)	
4.65×10^{-26}	2	4.17×10^{-10}	273	0.74

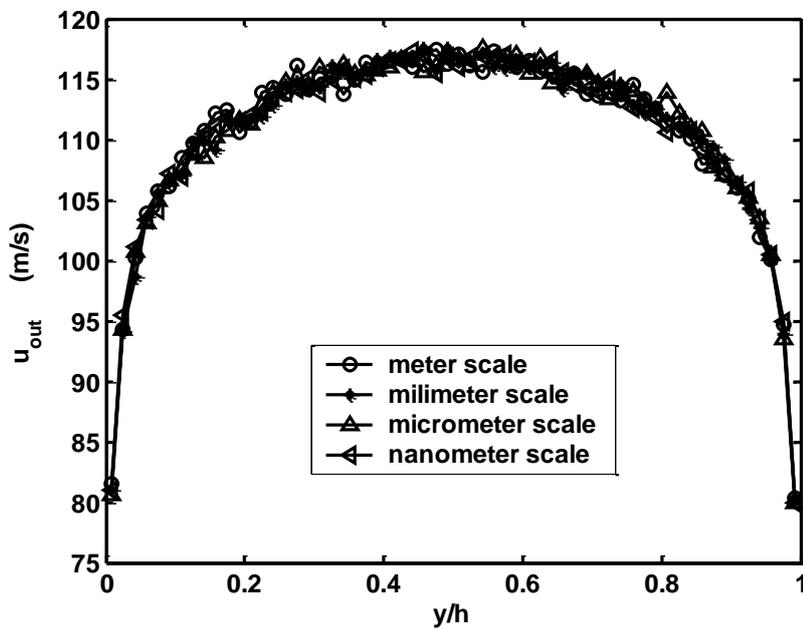
表3-2 亚音速通道流动的模拟参数

工况	H(m)	Kn_{∞}	Ma_{∞}	T_{∞} (K)	T_w (K)	n_{∞}	N_{total}	N_{sample}
1	1					1.294×10^{18}	101133	1011050
2	1×10^{-3}	1	0.57	300	300	1.294×10^{21}	101253	1005050
3	1×10^{-6}					1.294×10^{24}	101552	1010050
4	1×10^{-8}					1.294×10^{26}	101329	1010050

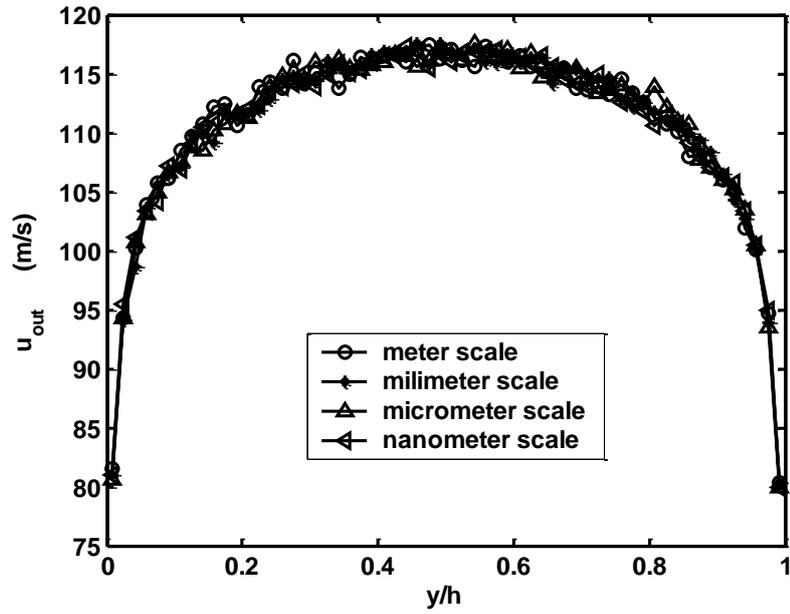
图 3-2 所示为通道进出口处的速度和温度剖面，图中对比了不同尺度的结果。从图 3-2 可以看出，尽管 4 种情况的尺度不同，气体的密度不同，但由于流动的努森数和马赫数相同，它们的速度分布和温度分布几乎完全相同。图中各曲线的波动来源于统计误差。



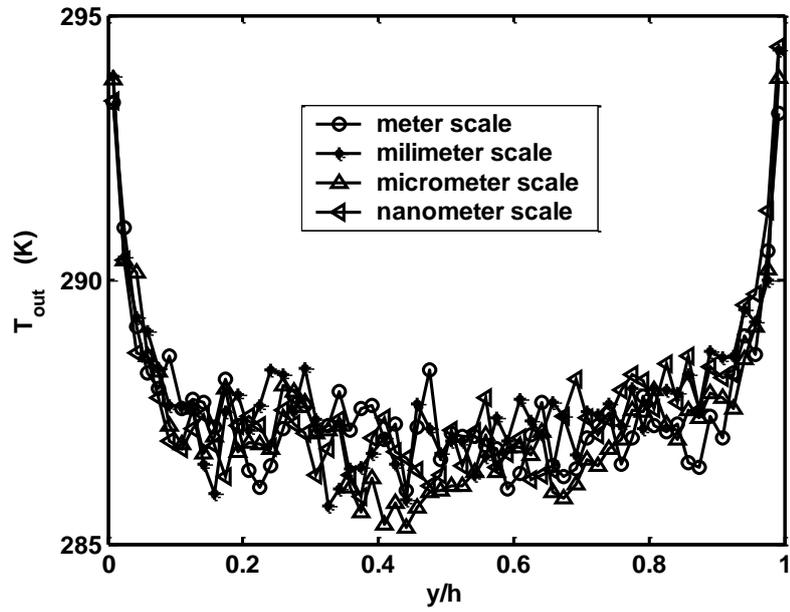
(a) 入口处的速度剖面



(b) 出口处的速度剖面



(c) 入口处的温度剖面

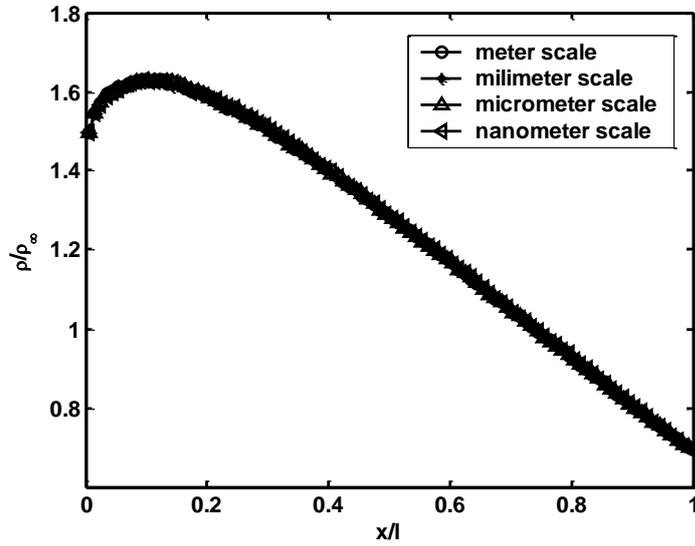


(d) 出口处的温度剖面

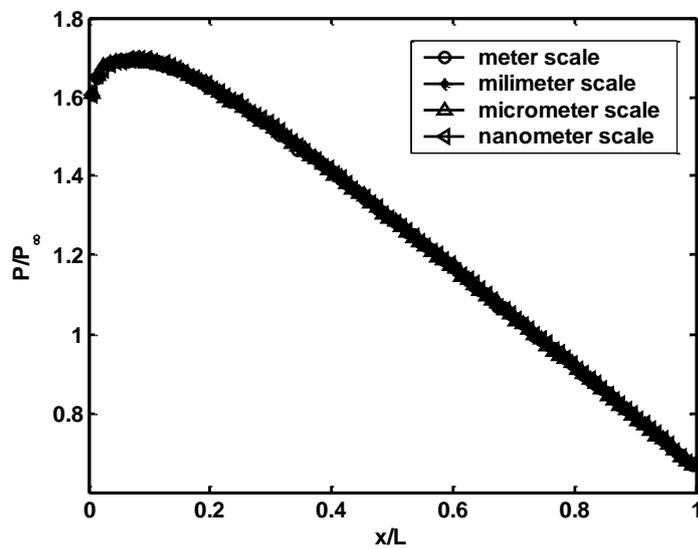
图 3-2 通道进出口处的速度和温度分布

图 3-3 给出了通道中心线上的密度和压力分布，为保证不同尺度的努森数

相同，各算例间的密度和压力存在差异，图中用各自的无穷远来流的密度和压力进行了无量纲化处理。经无量纲化处理过的密度和压力分布不再随尺度的不同而有所差异，四条曲线完全一致。



(a) 无量纲密度分布



(b) 无量纲压力分布

图 3-3 通道中心线上的无量纲压力分布和密度分布

对不同尺度亚音速通道内流的模拟表明，微尺度流动与稀薄气体流动具有相似性。

3.3.2 超音速横掠平板流动的相似性数值验证

为了做进一步的验证，还使用 DSMC 对不同尺度的超音速横掠平板流动进行了模拟。

物理模型如图 3-4 所示，计算区域长为 L ，宽为 H ，保持 $L:H=1:0.6$ ，在计算区域的底部横放一平板，长为 $L_w=0.9L$ 。工质为氮气，其他模拟参数参见表 3-3。

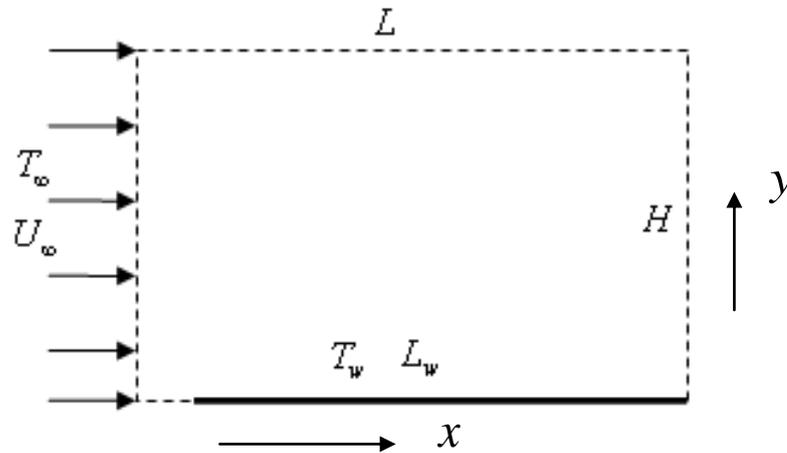
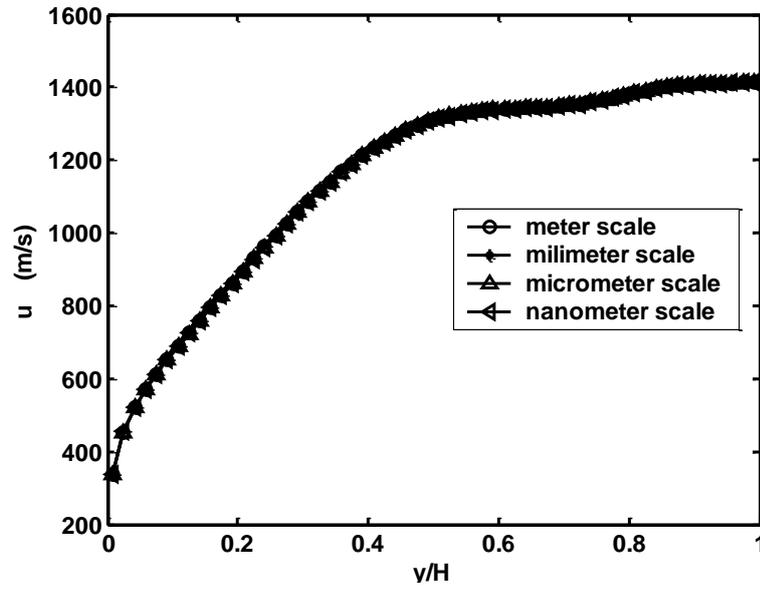


图 3-4 超音速横掠平板流动的物理模型

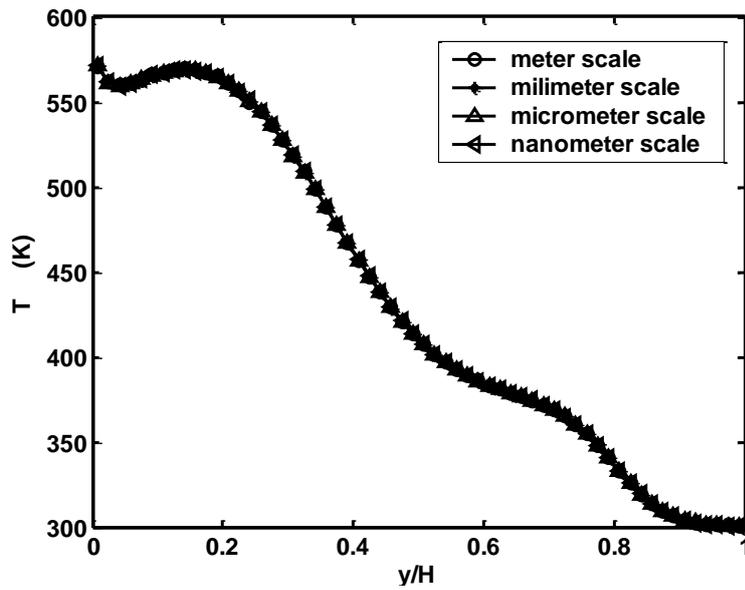
表3-3 超音速横掠平板流动的模拟参数

工况	$L(m)$	Kn_∞	Ma_∞	$T_\infty(K)$	$T_w(K)$	n_∞	N_{total}	N_{sample}
1	1×10^0					1×10^{20}	37640	500000
2	1×10^{-3}	0.0216	4.0	300	500	1×10^{23}	37693	500000
3	1×10^{-6}					1×10^{26}	37453	500000
4	1×10^{-8}					1×10^{28}	37660	500000

图 3-5 显示了计算区域右边界处沿 y 方向上的速度分布和温度分布，由于气体速度很大，模拟所得的曲线非常光滑，不同尺度的速度和温度分布几乎重合在一条线上。



(a) 速度分布



(b) 温度分布

图 3-5 右边界处 Y 方向的速度和温度分布

图 3-6 对比了计算区域右边界处沿 y 方向上的无量纲化的密度分布。图 3-7 则显示了沿壁面的切应力分布。对于不同尺度的情况，为了保证努森数相同，

气体密度是不同的。为了消除密度对切应力的影响因素，图 3-7 中纵坐标取为切应力与无穷远流密度之比。

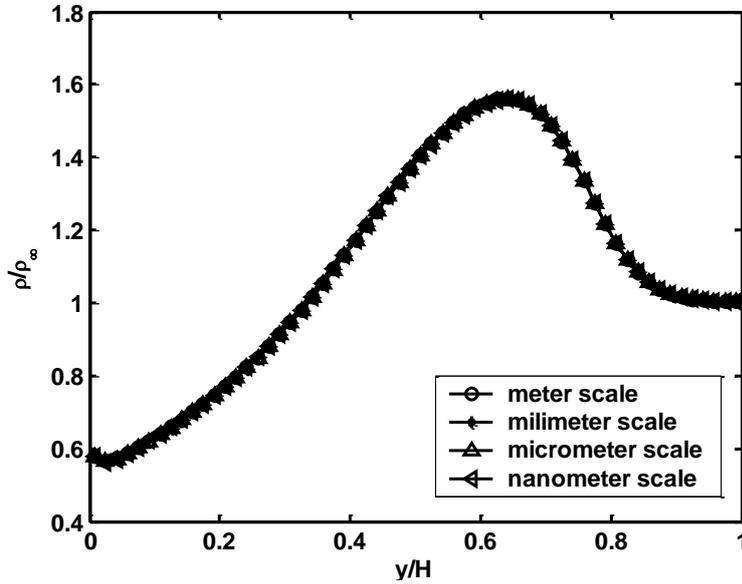


图 3-6 右边界 Y 方向上的无量纲密度分布

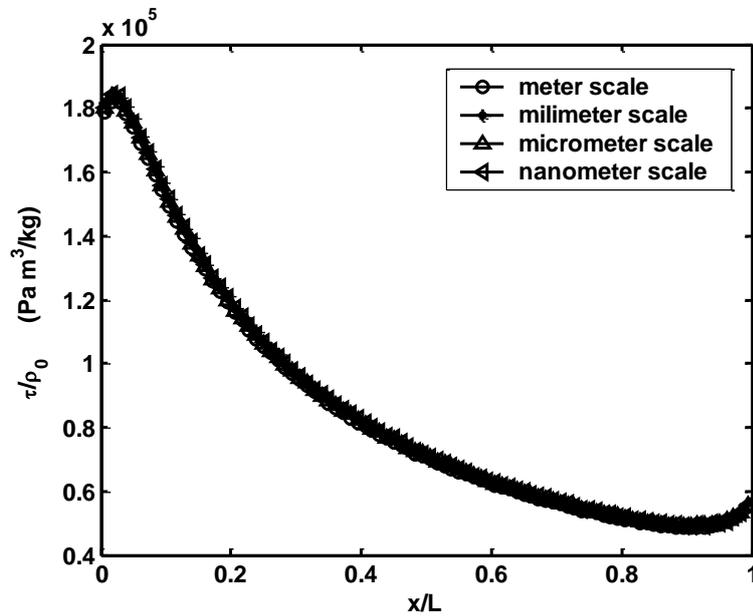


图 3-7 底边界 X 方向的无量纲压力分布

对超音速横掠平板外流的 DSMC 模拟结果也证明了微尺度流动与稀薄气体

流动之间在热完全气体的假设下存在相似性。

3.4 小结

在前人稀薄气体流动相似性研究的基础上，分析了微尺度气体流动与稀薄气体流动之间的相似性条件，即除了要求二者之间几何形状和边界条件相似、两个同名准则数(Kn 和 Ma 或 Kn 和 Re ，或 Ma 和 Re)相等之外，气体还必须满足热完全气体假设。

采用可描述热完全气体的可变硬球(VHS)模型，分别对气体在平行平板通道内的亚音速流动和超音速气流横掠平板的流动进行了 DSMC 模拟，对比了尺度从米的量级到纳米量级的模拟结果。结果表明在相似性条件下，不同尺度气体流动的无量纲速度场和温度场相同，从而数值验证了微尺度气体流动与稀薄气体流动之间的相似性。

微尺度气体流动与常规尺度稀薄气体流动在一定条件下相似的意义在于：一方面，许多稀薄气体流动的已有成果可以通过相似律直接应用到微气体流动；另一方面，对微尺度气体流动细节的研究可以通过相似律放大到相应的常规尺度稀薄气体流动中进行，这为实验研究带来了很大的方便。

第四章 微纳尺度稠密气体流动的 van der Waals 效应

前一章介绍了当气体满足理想气体状态方程，且同名准则数相等时，微尺度气体流动可以与稀薄气体流动相似。但当气体密度大到一定程度时，热完全气体假设不再成立，此时必须考虑 van der Waals 效应对气体流动和换热的影响。本章在分析现有对稠密气体流动的模拟方法的基础上，提出了一种基于 Enskog 方程的新的 Monte Carlo 法，并对微纳尺度稠密气体流动和换热中的 van der Waals 效应进行了模拟和分析。

4.1 微纳尺度稠密气体流动的特点与模拟中的困难

近年来，随着加工水平的不断进步，亚微米量级的通道或狭缝内的气体流动研究已经越来越受到人们的关注^[8]。以 IBM 的硬盘驱动器为例^[26-28]，目前其读写头与盘面磁道之间的距离已经接近 10 纳米，这一距离远远小于空气在标准状况下的分子平均自由程（约 65 纳米），而且随着对读写速度要求的不断提高，这一距离还有可能会进一步减小。另一方面，由于读写头与盘面之间的相对运动速度较大，在读写点附近的气体压力可能会很大（大于 10 个大气压），此时理想气体状态方程可能失效^[30]。如何对这种微纳尺度下的稠密气体流动进行准确的模拟与预测是一个非常重要的理论问题和工程问题。

一般来说，微纳尺度的稠密气体流动有两个重要的特点：一个是气体稠密，理想气体状态方程不再适用，van der Waals 效应不可忽略；另一个是流动的特征尺度小，尽管是稠密气体，但努森数仍然很大，流动很可能处在过渡区。

正如在第二章中所述，对于处在过渡区内的气体流动，直接模拟 Monte Carlo 法(DSMC)是唯一有效的模拟方法。而从理论上来说，标准的直接模拟 Monte Carlo 法受限于稀薄气体假设，它只能给出密度最低阶的气体状态方程，即理想气体状态方程。另外还注意到，直接模拟 Monte Carlo 法中的碰撞率和输运系数都是粒子横截面的函数而状态方程不是，这可能是造成 DSMC 无法体现稠密气体内 van der Waals 效应的原因^[87]。

4.2 两种现有的模拟方法

前人对微纳尺度稠密气体的模拟作了开创性的工作，主要可分为两条路线，一种是对现有的基于 Boltzmann 方程的 DSMC 进行修正，另一种是直接描述稠密气体流动的 Enskog 方程出发，提出新的方法。

Alexander 等^[86]于 1995 年发表在《Physical Review Letters》上的文章提出了一致性 Boltzmann 算法(CBA)，对标准 DSMC 方法进行了修正。CBA 通过在粒子碰撞后附加一定量位移的方法引入 van der Waals 方程代替理想气体状态方程，从而使 DSMC 扩展到了稠密气体甚至液体的模拟。CBA 已经在核子流^[90]以及汽液表面特性^[91]等模拟和定性分析中得到了重要应用。

Montanero 等^[93]1996 年发表于《Physical Review E》上的文章提出了一种基于修正 Enskog 理论(RET)的新型 Monte Carlo 法——Enskog 模拟 Monte Carlo 法(ESMC)。ESMC 法借用了 DSMC 中的处理技术，并在强激波预测^[176]和二元混合物剪切粘度^[177]等研究中得到了应用。

本节发展了这两种方法，分别使用这两种方法首次对微纳尺度稠密气体通道内流动进行了模拟，并对比了两种方法的模拟结果，分析了两种方法各自存在的问题。

4.2.1 一致性 Boltzmann 算法 (CBA)

一致性 Boltzmann 算法(CBA)于 1995 年首次提出^[86]，并经过了随后几年的发展^[87-89]，它主要用来将标准 DSMC 方法扩展到稠密的 van der Waals 流体。对于 van der Waals 流体，分子间不仅受到对方的排斥力作用，还需考虑相互之间的吸引势，从而使气体满足 van der Waals 状态方程。在 CBA 中，这种吸引势不是靠力的作用体现，而是通过在粒子碰撞后附加位移的办法实现。具体过程描述如下。

根据 Virial 理论，van der Waals 流体的压强可以表示为当地分子数密度(n)、温度(T)以及分子质量(m)的函数，

$$P = nkT + \frac{1}{3} m \Gamma \Theta \quad (4-1)$$

其中 $\Theta \equiv \langle \Delta v_{ij} \cdot r_{ij} \rangle$ 表示在粒子碰撞过程中的碰撞对(粒子 i 和粒子 j)，的速度改变

量与粒子中心连线矢量的点积； Γ 为单位时间单位体积的粒子碰撞率。在标准 DSMC 中，由于粒子碰撞后的位置与各自的速度变化量无关，因此式(4-1)的右边第二项为零。

如图 4-1 所示，对于分子直径为 σ 的硬球气体，CBA 使用在粒子碰撞后附加位移 $\mathbf{d} = \sigma \hat{\mathbf{d}}$ 的方法来修正 Θ ，其中 $\hat{\mathbf{d}}$ 为单位向量，其表达式为

$$\hat{\mathbf{d}} = \frac{(\mathbf{v}_i' - \mathbf{v}_j') - (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)}{|(\mathbf{v}_i' - \mathbf{v}_j') - (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)|} = \frac{\mathbf{v}_r' - \mathbf{v}_r}{|\mathbf{v}_r' - \mathbf{v}_r|} \quad (4-2)$$

其中 \mathbf{v}_r 为碰撞对的相对速度，不带上标的为碰撞前的速度，带上标的为碰撞后的速度。碰撞后，碰撞对粒子的移动位移分别为

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i'(t)\Delta t + \mathbf{d} \quad (4-3)$$

$$\mathbf{r}_j(t + \Delta t) = \mathbf{r}_j(t) + \mathbf{v}_j'(t)\Delta t - \mathbf{d} \quad (4-4)$$

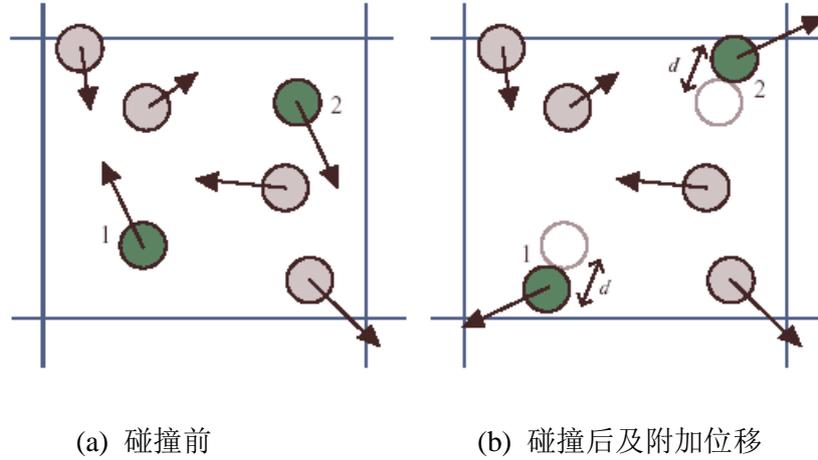


图 4-1 CBA 过程图解

通过附加位移的引入可以得到对 virial 量 Θ 的修正 $\Theta = \sigma \sqrt{\pi kT/m}$ ，此时若使用 Boltzmann(稀薄气体)碰撞率 $\Gamma_B = 2\sigma^2 n^2 \sqrt{\pi kT/m}$ ，气体压强可以表示为 $P = nkT(1 + b_2 n)$ ，其中 $b_2 = \frac{2}{3} \pi \sigma^3$ 为第二阶 virial 系数。

考虑到气体稠密时密度的影响，引入稠密气体 Enskog 理论对碰撞律的修正 $\Gamma_E = Y(n)\Gamma_B$ ，则 CBA 可以给出与 Markov 假设相对应的气体状态方程和高密度

下的气体输运系数。

引入 CBA 对 DSMC 进行修正还需要考虑系统平衡的影响，更加详细的推导得到了如下的 van der Waals 方程^[87]，

$$\frac{P_{vdW}}{nkT} = 1 + b_2 n Y - \frac{an}{kT} \quad (4-5)$$

此时的附加位移为

$$d_{vdW} = \sigma - \frac{a\sigma}{b_2 Y kT} = \sigma - d_a \quad (4-6)$$

至此，CBA 理论完成了对 DSMC 的修正，并使之可以用于稠密的 van der Waals 气体的流动模拟。Hadjiconstantinou 等^[91]甚至使用 CBA 对汽液表面特性作了模拟和定性分析。然而要使用 CBA 对通道内的稠密气体流动进行定量研究还需要对一些参数进行分析确定，本文主要作了以下几方面工作。

1. Y 算子的确定

根据稠密气体的 Enskog 理论^[178]，当稠密气体的密度大到使得气体分子的总体积与系统总体积相比不可忽略时，气体分子将不能再当作点粒子处理，由 Boltzmann 方程得到的分子碰撞率需要考虑到密度对碰撞过程的影响加以修正。

直观地讲，由于气体分子占有一部分空间的体积，分子间的碰撞几率将提高：

$$\Gamma' = \frac{V}{V'} \Gamma_B \quad (4-7)$$

其中 $V' = \left(1 - n \cdot \frac{4}{3} \pi \sigma^3\right)$ 。

另外，考虑到分子间的三元碰撞效应和相互屏蔽作用，实际的碰撞率还需减小 $\left(1 - n \frac{11}{12} \pi \sigma^3\right)$ 。综合考虑这些因素之后，修正的分子碰撞率为

$$\Gamma_{HS} = Y(n) \Gamma_B \quad (4-8)$$

其中：

$$Y(n) = \frac{1 - n \cdot \frac{11}{12} \pi \sigma^3}{1 - n \cdot \frac{4}{3} \pi \sigma^3} = \frac{1 - 11\eta/8}{1 - 2\eta} \quad (4-9)$$

$$\eta = \frac{2}{3} \pi n \sigma^3 \quad (4-10)$$

然而，式(4-9)仅在 $\eta < 0.03$ 时可以认为是准确成立的，当考虑到粒子间的四元或四元以上的碰撞时，这一修正因子显然是被高估了^[178]。在综合考虑各种因素后，本文使用了如下的修正因子表达式：

$$Y(n) = 1 + 0.625\eta + 0.2869\eta^2 + 0.1103\eta^3 \quad (4-11)$$

可以证明这一表达式低于 Frezzotti^[95]和 Kortemeyer 等^[90]所给出的表达式的值，而与 Garcia 等^[179]所给的修正因子表达式的值非常接近。

2. 吸引势强度 a 的确定

从经典的热力学理论出发得到的 van der Waals 方程为^[180]

$$P = \frac{RT}{v - b'} - \frac{a'}{v^2} \quad (4-12)$$

其中： R 为气体常数， T_c 为临界温度， P_c 为临界压力， a' 和 b' 为方程参数，且理论分析表明： $a' = \frac{27}{64} \frac{R^2 T_c^2}{P_c}$ 。

对比式(4-12)和式(4-5)可以得到吸引势强度 a 的表达式：

$$a = \frac{27}{64} \frac{R^2 T_c^2}{P_c} m^2 \quad (4-13)$$

确定了两个重要的参数表达式之后，本节使用 CBA 方法对微纳尺度通道内稠密气体的流动及换热进行了数值模拟。通道几何形状及边界条件如图 4-2 所示，与第三章图 3-1 所示的算例非常类似，通道长宽比 L/H 保持常数 5，工质为氮气，其热力学参数参见表 4-1。共模拟了 3 个算例，模拟参数见表 4-2，壁面温度 $T_w = 300\text{K}$ ，通道尺度从 1 微米变化到 0.01 微米，分子数密度从 2.59×10^{25} 变化到 2.59×10^{27} 。

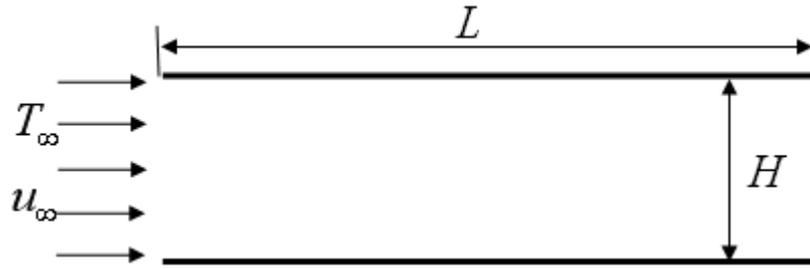


图 4-2 微通道的几何参数和边界条件

表4-1 氮气的热力学参数

R (J/kg K)	T_c (K)	P_c (Pa)
296.8	126.2	3.39×10^6

表4-2 模拟参数表

算例	L (μm)	H (μm)	Kn_∞	u_∞ (m/s)	T_∞ (K)	n_∞	N_{total}	N_{sample}
1	5	1	0.05	200	300	2.59×10^{25}	57042	500000
2	0.5	0.1	0.05	200	300	2.59×10^{26}	57117	301050
3	0.05	0.01	0.05	200	300	2.59×10^{27}	99687	257050

图 4-3 所示对比了不同算例的出入口处的速度分布和温度分布，图中还对对比了对算例 3 使用标准 DSMC 方法模拟的结果。根据第三章的论述，若完全气体状态方程成立，不同尺度的气体流动具有相似性。从图 4-3 可以看出，对于算例 1，由于其来流气体分子数密度不大 ($n_\infty=2.59 \times 10^{25}$)，与标准状况下的空气密度相当，此时的理想气体状态方程还适用，因此图中与标准 DSMC 的结果符合很好。这也说明 CBA 修正在低密度时可以退化成标准 DSMC 方法，验证了程序的正确性。当来流气体的分子数密度增大到一定程度，以算例 2 为例 ($n_\infty=2.59 \times 10^{26}$)，与相同温度下 10 个大气压的空气密度相当，此时的温度分布和速度分布开始偏离标准 DSMC 的结果，van der Waals 效应开始显现。随着来流气体分子数密度的继续增大，如算例 3 ($n_\infty=2.59 \times 10^{27}$)，CBA 结果偏离标准 DSMC 结果的程度也增大，图中为点实线所示，这说明 van der Waals 效应对气体流动

的影响随气体密度的增大而增大。

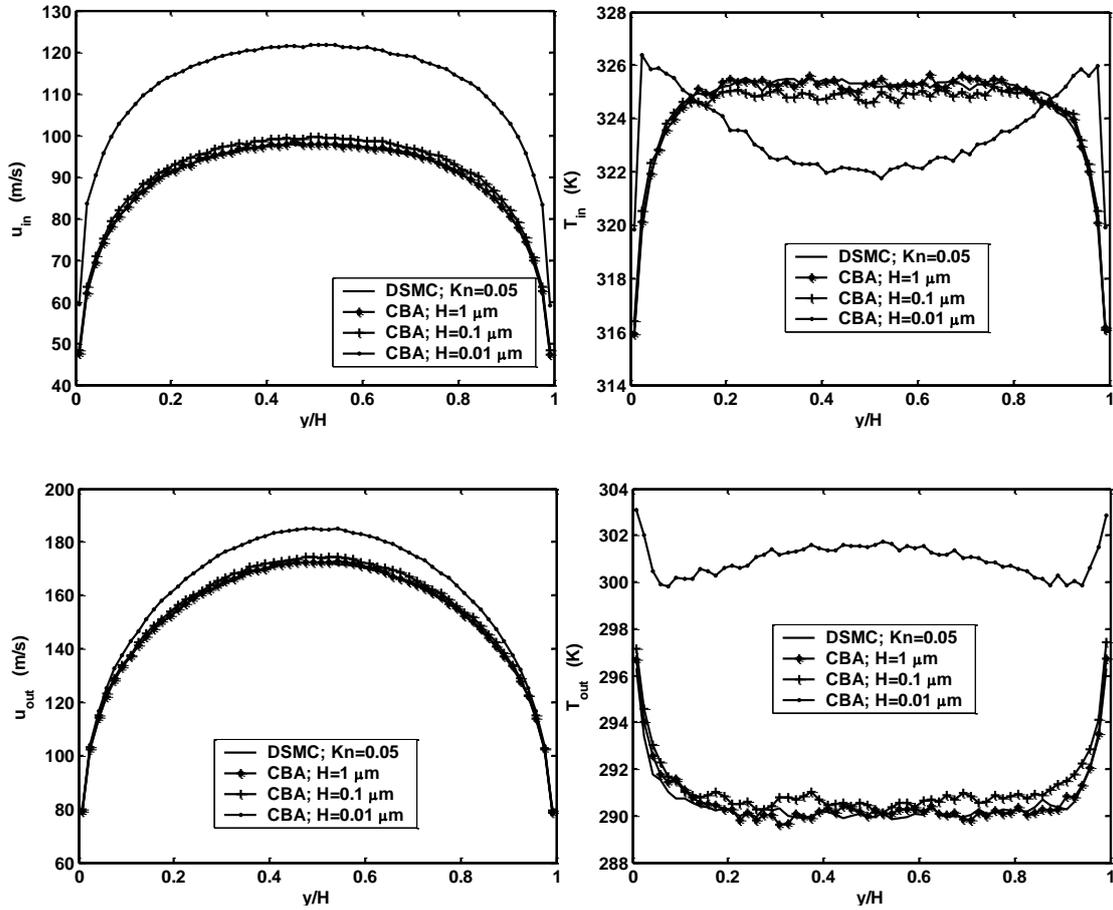


图 4-3 Kn=0.05 时不同通道尺寸的通道流动出入口处的速度和温度分布

根据第二章中对壁面阻力系数和热流通量的定义，图 4-4 和图 4-5 分别对比了三个算例壁面阻力系数和热流通量沿壁面的分布，与图 4-3 类似，同时对比了使用标准 DSMC 方法对算例 3 的模拟结果。由于热流通量与气体分子数密度相关，图 4-5 中使用来流气体的摩尔流量作了归一化处理。结果表明，van der Waals 效应影响了通道内稠密气体的壁面阻力特性和换热特性。就本文所涉及的算例而言，CBA 模拟结果表明，稠密气体的 van der Waals 效应使得壁面的阻力系数增大，换热特性在通道的前半部分减小，后半部分增大。

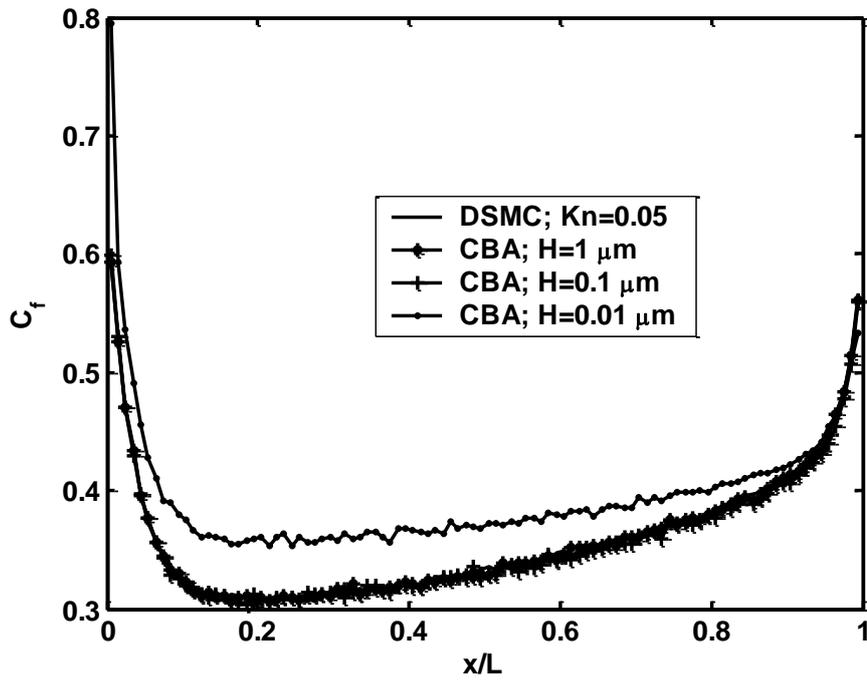


图 4-4 不同尺度通道壁面的阻力系数

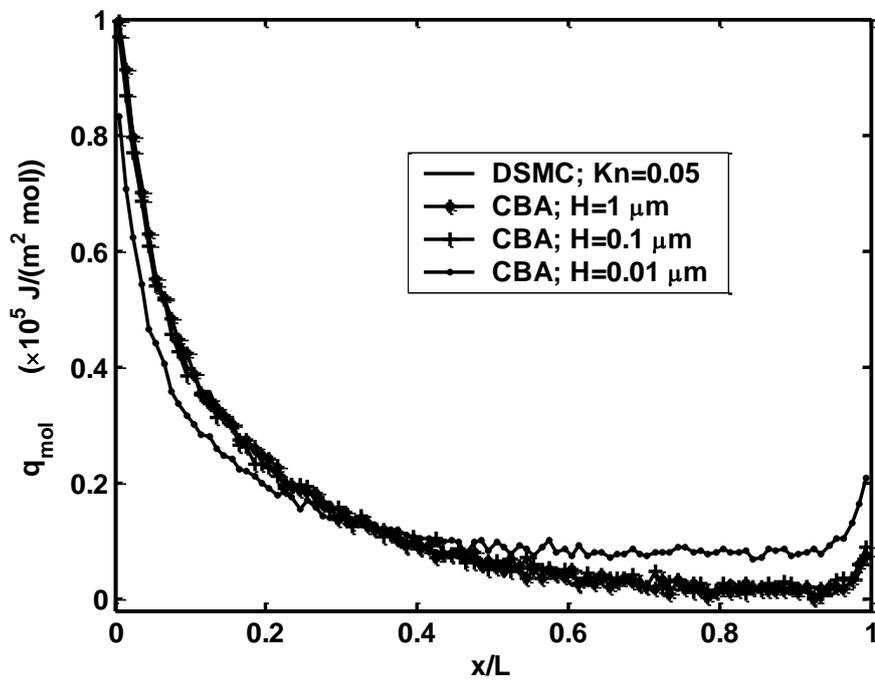


图 4-5 不同尺度通道壁面的热流量

至此, CBA 对稠密气体 van der Waals 效应的模拟似乎是“成功”的, 然而, 正如《Physical Review E》的审稿人所指出的, 附加位移不仅会改变气体的状态方程, 而且会影响气体的粘度和热导率等宏观输运系数, 而且这种影响随着气体密度的增大而增大。尽管 Garcia 等^[89]曾努力尝试对此作进一步的改进, 但效果很有限。正如 Garcia 教授本人所说^[181], 目前还没有有效的改进方法, 而这一状况可能与 CBA 的特点有关。

另外, 使用 CBA 模拟通道流动时在壁面碰撞的处理上也出现一定困难, 粒子由于运动碰撞到壁面上可以遵循漫反射原则与壁面发生碰撞, 而由于附加位移导致粒子与壁面发生碰撞的反射规则还没有一个合理的物理模型和数学描述, 目前暂时采用漫反射模型, 但其物理机制难以令人信服, 对此, Garcia 教授也承认还没有充分考虑^[181]。对此本文认为, CBA 结果所反映的 van der Waals 效应导致避免阻力系数增大的结论尚需验证。

4.2.2 Enskog 模拟 Monte Carlo 法 (ESMC)

由于一致性 Boltzmann 算法(CBA)本身存在一些目前尚难以克服的缺点, 因此需要直接从描述稠密气体流动的 Enskog 方程出发, 对微纳尺度的稠密气体流动和换热特性进行了研究。

Enskog 于 1922 年对基于硬球模型的 Boltzmann 方程进行了修正, 并提出了著名的 Enskog 方程, 以期反映气体稠密性的影响, 其具体形式为:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = & \sigma^2 \int d\mathbf{v}_1 \int d\hat{\sigma} \Theta(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g})(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g}) \\ & \times [\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r} - \sigma) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) \\ & \times f(\mathbf{r} - \sigma, \mathbf{v}_1', t) - \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r} + \sigma) \\ & \times f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) f(\mathbf{r} + \sigma, \mathbf{v}_1, t)]. \end{aligned} \quad (4-14)$$

其中: $\Theta(x)$ 为 Heaviside 函数, \mathbf{r} 为坐标, $\sigma = \sigma \hat{\sigma}$, σ 为分子直径, $\mathbf{g} \equiv \mathbf{v} - \mathbf{v}_1$, $\mathbf{v}' = \mathbf{v} - (\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g}) \hat{\sigma}$, $\mathbf{v}_1' = \mathbf{v}_1 + (\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g}) \hat{\sigma}$ 。

毫无疑问, Enskog 方程较之 Boltzmann 方程更难于求解。近年来一些学者在不改变原方程固有特征的前提下提出了简化的动力学模型^[183], 另外一些学者则借鉴直接模拟 Monte Carlo 法(DSMC)对 Boltzmann 方程精确求解的做法, 提出了可以对 Enskog 方程直接求解的 Monte Carlo 法^[93-95], 其中, Montanero 和

Santos^[93]提出类似 Nanbu 的 DSMC 方法的 Enskog 模拟 Monte Carlo 法(ESMC), 随后他们^[94]和 Frezzotti^[95]分别指出, 类似 Bird 的 DSMC 的新 ESMC 方法有更好的计算效率并可以准确做到动量和能量的守恒。然而需要指出的是, 前人对稠密气体模拟方法的研究还处在定性的探索阶段。本文使用后一种 ESMC 方法, 并使用这种方法对微纳米通道内高努森数高密度的气体流动进行模拟分析。

Enskog 模拟 Monte Carlo 法(ESMC)与标准 DSMC 非常类似, 它使用大量模拟粒子代替气体真实分子, 通过计算粒子的运动和碰撞再现了气体分子的运动过程, 从而使控制方程得到求解。当计算网格的特征尺寸远小于气体的平均自由程 ($\Delta L \ll \lambda$) 且计算时间步长小于分子平均碰撞时间 ($\Delta t < \tau$) 时, 粒子的运动和碰撞过程可以解耦。ESMC 与 DSMC 的不同之处在于处理碰撞的过程不尽相同。ESMC 在处理粒子 $i=1, \dots, N$ 的碰撞过程中主要采取以下步骤:

- 1) 对于粒子 i , 随机选取一个方向 $\hat{\sigma}_i$;
- 2) 在 $\mathbf{r}_i + \sigma \hat{\sigma}_i$ 的方向上选取临近粒子, 若网格内没有同类粒子 j , 在相邻网格内选取;
- 3) 粒子 i 和粒子 j 的碰撞在几率大于 $Y(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_i + \sigma \hat{\sigma}_i) \cdot \varpi_B$ 时被接受, 其中 ϖ_B 为基于 Boltzmann 方程的二元碰撞几率;
- 4) 若碰撞被接受, 碰撞后的速度为 $\mathbf{v}'_i = \mathbf{v}_i - (\hat{\sigma}_i \cdot \mathbf{g}_{ij}) \hat{\sigma}_i$, $\mathbf{v}'_j = \mathbf{v}_j + (\hat{\sigma}_i \cdot \mathbf{g}_{ij}) \hat{\sigma}_i$;
- 5) 对下一个粒子重复全过程。

与 CBA 中类似, 由于气体稠密而导致的气体分子碰撞率增大的修正因子 Y 由式(4-11)确定。

使用 ESMC 方法对图 4-2 所示尺寸为 $L=0.05 \mu\text{m}$ 和 $H=0.01 \mu\text{m}$ 的微通道内氮气流动进行了模拟, 氮气的分子参数参见表 4-1。来流速度 $u_\infty=200 \text{ m/s}$, 来流温度 $T_\infty=300 \text{ K}$, 通道壁面温度 $T_w=300 \text{ K}$ 。

图 4-6 显示了无穷远来流数密度 $n_\infty=1.29 \times 10^{26}$ 时沿通道中心线上的速度分布和温度分布, 图中分别对比了 ESMC 和 DSMC 的结果。对于这种工况, 气体密度不是很高 (与标准状况下大气密度的 5 倍相当), 稠密气体效应还不明显, ESMC 和 DSMC 的结果符合很好。这说明 ESMC 在气体密度不是很大时退化为 DSMC, 从而验证了 ESMC 程序的正确性。

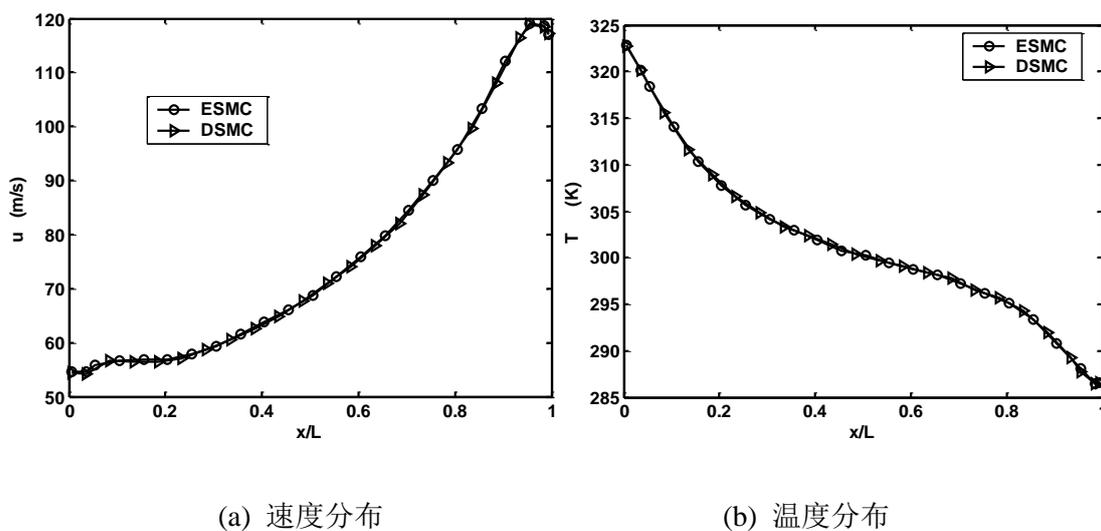


图 4-6 来流气体密度 $n_{\infty}=1.29 \times 10^{26}$ 时通道中心线上速度和温度变化

图 4-7 显示了 $n_{\infty}=2.59 \times 10^{27}$ 时的情况。图中对比了 ESMC 和 DSMC 在通道中心线上的速度和温度。对于这种工况，由于气体密度很大（相当于标准状况下大气密度的 100 倍），稠密气体效应明显，ESMC 与 DSMC 对速度的模拟结果差异很大，而温度分布则差异较小。

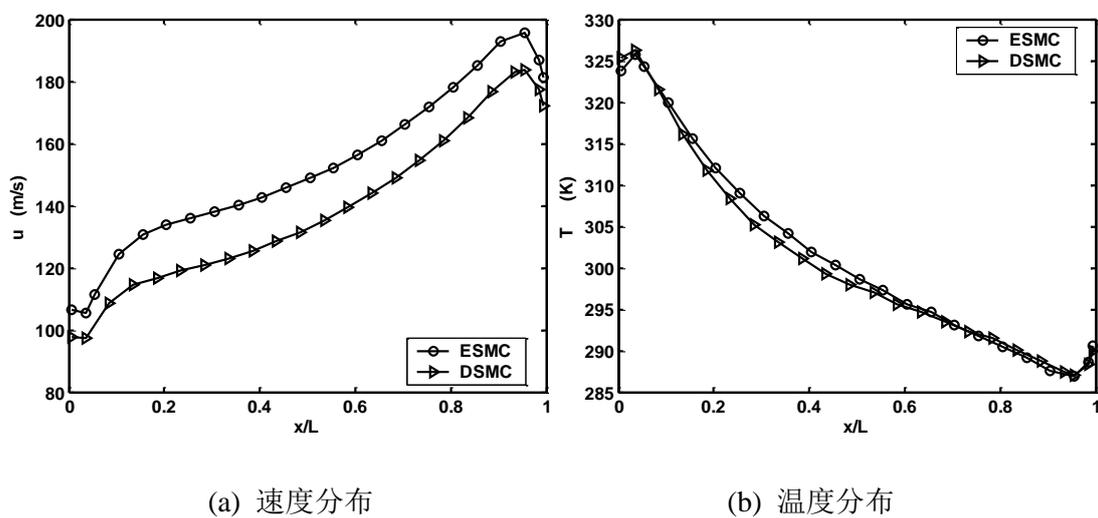


图 4-7 来流气体密度 $n_{\infty}=2.59 \times 10^{27}$ 时通道中心线上速度和温度变化

图 4-8 对比了稠密气体流动时 ($n_{\infty}=2.59 \times 10^{27}$) ESMC 和 DSMC 对壁面阻力

特性和换热特性的模拟结果。可以看出，当考虑到气体的稠密效应时，所预测得到的流动阻力系数要小于 DSMC 的预测值；考虑稠密气体效应时，壁面的换热特性也有所不同，在通道的前半段换热流量要明显低于 DSMC 的结果，而在通道的后半段的热流量要比 DSMC 的结果略高。

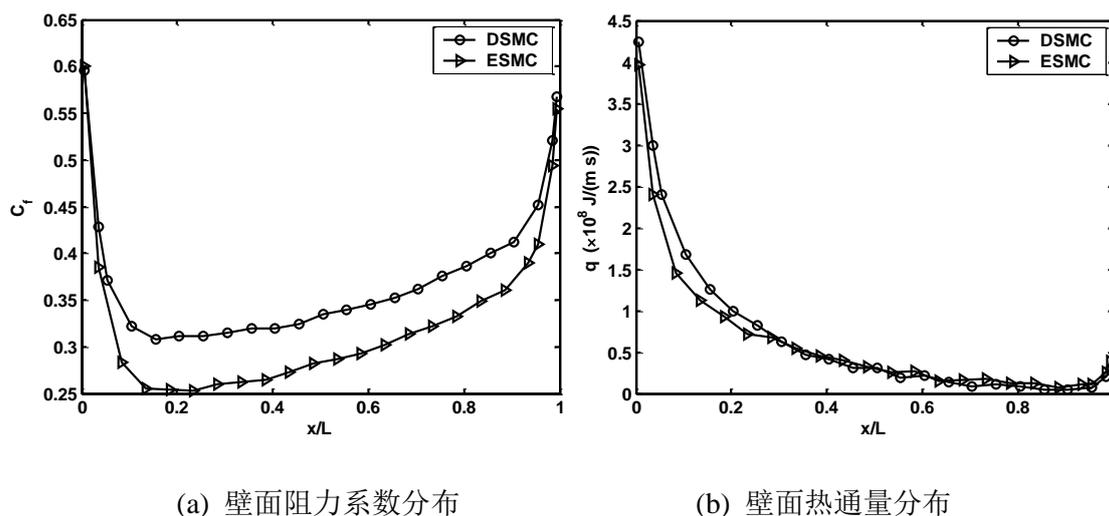


图 4-8 来流气体密度 $n_0=2.59 \times 10^{27}$ 时通道壁面阻力和换热特性

4.2.3 两种方法的结果对比及存在的问题分析

注意到 4.2.1 节中的算例 3 与 4.2.2 节中的算例 2 的物理问题相同，但使用不同的模拟方法，所得到的壁面阻力系数与 DSMC 方法的对比结果截然相反，因此有必要将其放在一起做详细的对比和分析。

图 4-9 对比了三种方法在通道中心线上速度和温度分布的模拟结果。在速度分布图中，CBA 和 ESMC 都表现出了明显的稠密气体效应，两种方法模拟出的速度分布符合很好，而与 DSMC 的模拟结果明显偏离。而对于温度分布，ESMC 的结果与 DSMC 的结果差异较小，而 CBA 结果与其他两种方法的差异较大。其原因可能在于在 ESMC 中没有反映出气体分子间吸引势对气体内能转换的影响，而 CBA 通过附加位移的办法体现了这种作用，因此 ESMC 在这方面还有待改进。

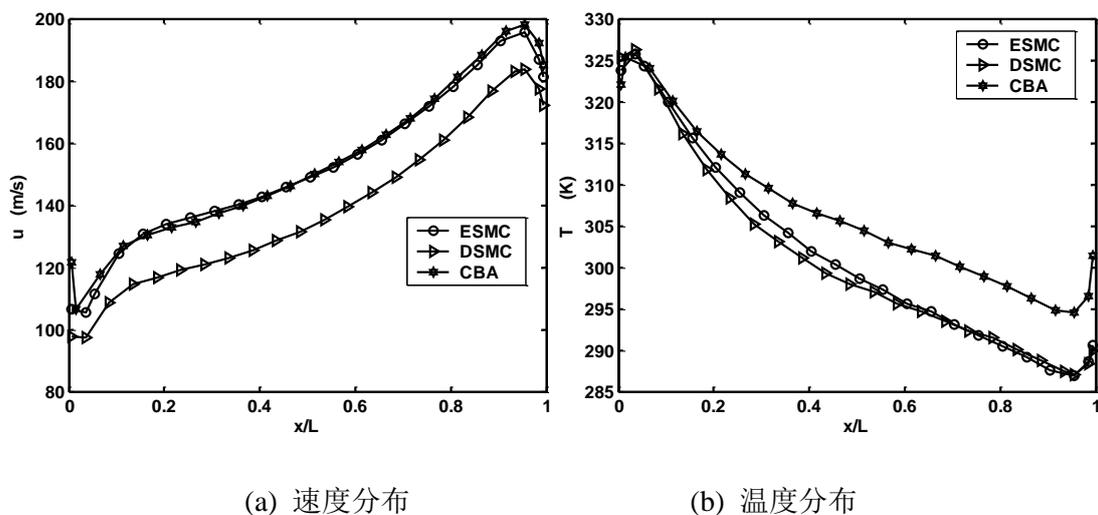


图 4-9 中心线上速度和温度分布对比($n_{\infty}=2.59 \times 10^{27}$)

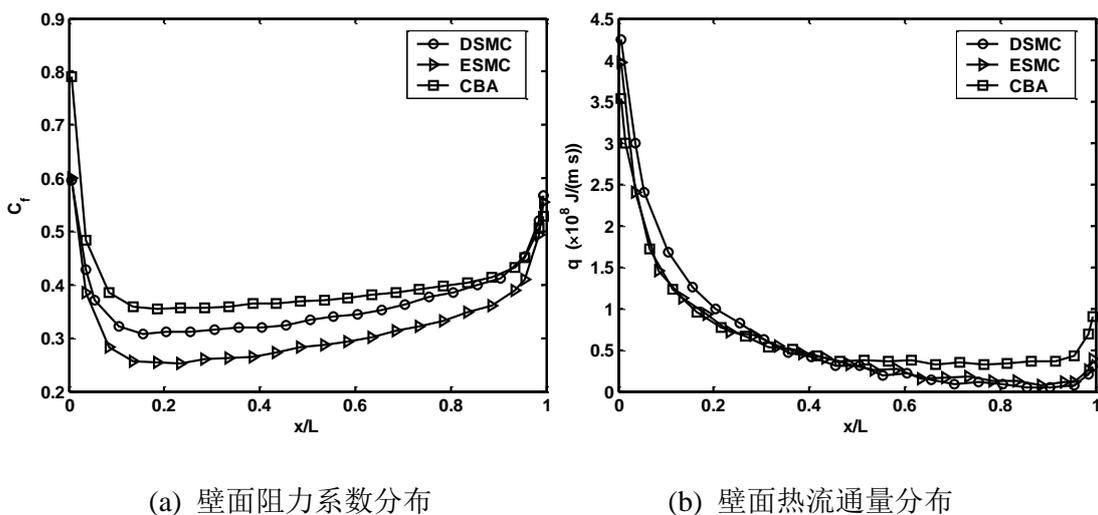


图 4-10 壁面阻力和换热特性结果对比($n_{\infty}=2.59 \times 10^{27}$)

图 4-10 对比了三种方法对壁面阻力特性和换热特性的模拟结果。可以看出，ESMC 和 CBA 计算所得的壁面阻力系数与 DSMC 的对比结果在定性上恰好相反，CBA 得到的阻力系数大于 DSMC 的结果，而 ESMC 得到的阻力系数小于 DSMC 的结果。其原因如前面分析 CBA 的结果时所述，CBA 在处理边界上还不很完善。从壁面热流通量的对比可以看出，在通道的前半段($x/L < 0.4$)，CBA 与 ESMC 的结果符合很好，而在后半段($x/L > 0.5$)，CBA 的结果显著高于 ESMC 和 DSMC 的结果。

DSMC 的结果。一方面, CBA 算法本身对气体输运系数(如气体热导率等)的影响可能是造成这一偏差的原因, 另一方面, 如前面对 ESMC 的分析所述, ESMC 对分子间吸引势的忽略也可能是原因之一。

4.3 广义 Enskog 蒙特卡洛法

通过前面的介绍可以看出, 现有的模拟方法经过发展和改进之后仍然难以完全准确地模拟 van der Waals 气体流动和换热, 因此有必要在前人工作的基础上开发一种新的算法, 以期在综合考虑各种影响因素的基础上, 准确模拟非理想气体的 van der Waals 效应。

本文所提出的新方法是建立在 Enskog 方程基础上的 Monte Carlo 法, 所采用的路线为: 首先对 Lennard-Jones 流体的吸引势进行了分析, 引入广义分子碰撞模型; 考虑有限气体密度对分子碰撞率和气体输运系数的影响, 得到非理想气体的状态方程, 即 van der Waals 方程; 引入考虑分子间吸引势的内能转换模型, 从而完成新方法的程序流程。

4.3.1 L-J流体的广义分子碰撞模型

在理想气体或完全气体假设中, 气体分子只受到其他分子的排斥力作用, 而对于真实气体, 分子间除了在较小的距离时受到排斥力之外, 在距离更远时还受到彼此之间的弱吸引力的作用。这一作用可以由著名的 L-J (6-12)模型作简单的描述^[171]:

$$\varphi(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (4-15)$$

更加系统的研究表明, 这一模型对大多数非极性分子的气体是适用的, 例如绝大多数的单原子和双原子气体以及空气, 而对于诸如氨气和水蒸气等极性分子气体来说, 还需要考虑分子间的静电力对分子间作用势的影响, Stockmayer^[171,184]在考虑了这种效应之后对 L-J 模型进行了改进, 对于极性分子, 引入一表征分子极化度的无量纲参数 δ , 分子间的作用势可以表示为:

$$\varphi(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 - \delta \left(\frac{\sigma}{r} \right)^3 \right] \quad (4-16)$$

这就是著名的 Stockmayer 势函数，它已经成功的应用在许多极性分子气体的分析中。本节后面的推导主要以非极性分子为对象，对于极性分子气体，可以根据式(4-16)进行类似的推导，或参见文献[101]。

对于考虑到分子间吸引势的 L-J 流体的分子间碰撞过程，一些学者作了相关研究，Hassan 等^[97]提出过广义硬球模型（GHS），樊菁教授^[101]进一步将其扩展为广义软球模型（GSS），以解决其动量碰撞截面积与粘性碰撞截面积之比偏离真实值的问题。根据前人的模型，对于 L-J 流体分子间的碰撞总截面可以表示为：

$$\frac{\sigma_T}{\sigma^2} = \sum \alpha_j \left(\frac{E_t}{\varepsilon} \right)^{-\omega_j} \quad (4-17)$$

其中： σ_T 为碰撞总截面面积， E_t 为碰撞分子的相对平动能， α_j 和 ω_j 为待定参数，可以通过对气体传输特性的实验数据拟和确定^[98]，但这种方法确定的参数值受实验数据和气体种类的限制，使用起来很不方便。本文借鉴樊菁在 GSS 模型中的方法^[101]，通过拟和理论数据^[184]的方法确定参数值，因此获得的参数具有一定的普适性。

对于简单气体，粘性系数和自扩散系数的一阶近似可以表示为温度的函数：

$$\mu = \frac{5}{16} \left(\frac{(\pi m k T)^{1/2}}{\pi \sigma^2 \Omega^{(2,2)*}} \right) \quad (4-18)$$

$$D = \frac{3}{16} \left(\frac{(2\pi k T / m_r)^{1/2}}{n \pi \sigma^2 \Omega^{(1,1)*}} \right) \quad (4-19)$$

其中：

$$\Omega^{(1,1)*} = \frac{1}{\pi \sigma^2} \int_0^\infty \exp(-\xi^2) \xi^5 \sigma_D d\xi \quad (4-20)$$

$$\Omega^{(2,2)*} = \frac{1}{2\pi \sigma^2} \int_0^\infty \exp(-\xi^2) \xi^7 \sigma_\mu d\xi \quad (4-21)$$

其中： $\xi^2 = E_t / kT$ ， σ_μ 和 σ_D 分别为粘性横截面积和动量横截面积。

对于 GSS 模型，这两个积分可以表示为：

$$\Omega^{(1,1)*} = \frac{1}{\pi(\alpha^* + 1)} \sum \alpha_j \Gamma(3 - \omega_j) T_*^{-\omega_j} \quad (4-22)$$

$$\Omega^{(2,2)*} = \frac{1}{\pi(\alpha^* + 1)(\alpha^* + 2)} \sum \alpha_j \Gamma(4 - \omega_j) T_*^{-\omega_j} \quad (4-23)$$

其中： α^* 为软球模型的散射率， $T_* = kT / \varepsilon$ ， $\Gamma(\dots)$ 为 Gamma 函数。一般来说，参数 α_j 和 ω_j 的值可以通过式(4-20)及(4-21)的解析解与式(4-22)及(4-23)的对比确定。然而，这样的积分关系式只能在逆幂律(IPL)和硬球散射率的特殊条件下有解析解。而对于 L-J(6-12)这样的复杂势函数，无法给出解析解。Hirschfelder 等人^[184]通过数值方法求得了这几个积分函数值随无量纲温度 $T_* = kT / \varepsilon$ 的变化规律，并列于表中，参见参考文献[184]的表 Table I-M。这样，可以通过最小二乘法对表中的数据拟和来确定各参数的值。与 Hassan 等^[98]通过实验数据拟和的方法相比，这种方法对不同种类的气体可以有更广泛的适用性。

本文采用式(4-22)及(4-23)的两项求和形式，并使用不同的方法对参数进行了拟和，从综合的指标看，所得到最佳的拟和参数组合与樊菁的拟和结果一致，即 $\alpha_1 = 3.962$ ， $\alpha_2 = 4.558$ ， $\omega_1 = 0.133$ ， $\omega_2 = 1.25$ 以及 $\alpha^* = 1.5$ 。图 4-11 给出了不同拟和参数值与理论数值解的对比，其中圆点所示为 Hirsch-Felder 等的理论数值解，实线为本文所使用的拟和参数值，其他曲线所表示的为 Hassan 等在 GHS 模型中给出的拟和参数。可以看出，除 Hassan 等在 1994 年所给出的氮气的实验数据拟和参数在 $\Omega^{(2,2)*}$ 图中与理论数值解符合较好外，其他模拟参数所得曲线都与理论数值解有较大偏差，只有本文所使用的参数不论在 $\Omega^{(1,1)*}$ 还是 $\Omega^{(2,2)*}$ 图中都与理论数值解符合得很好。

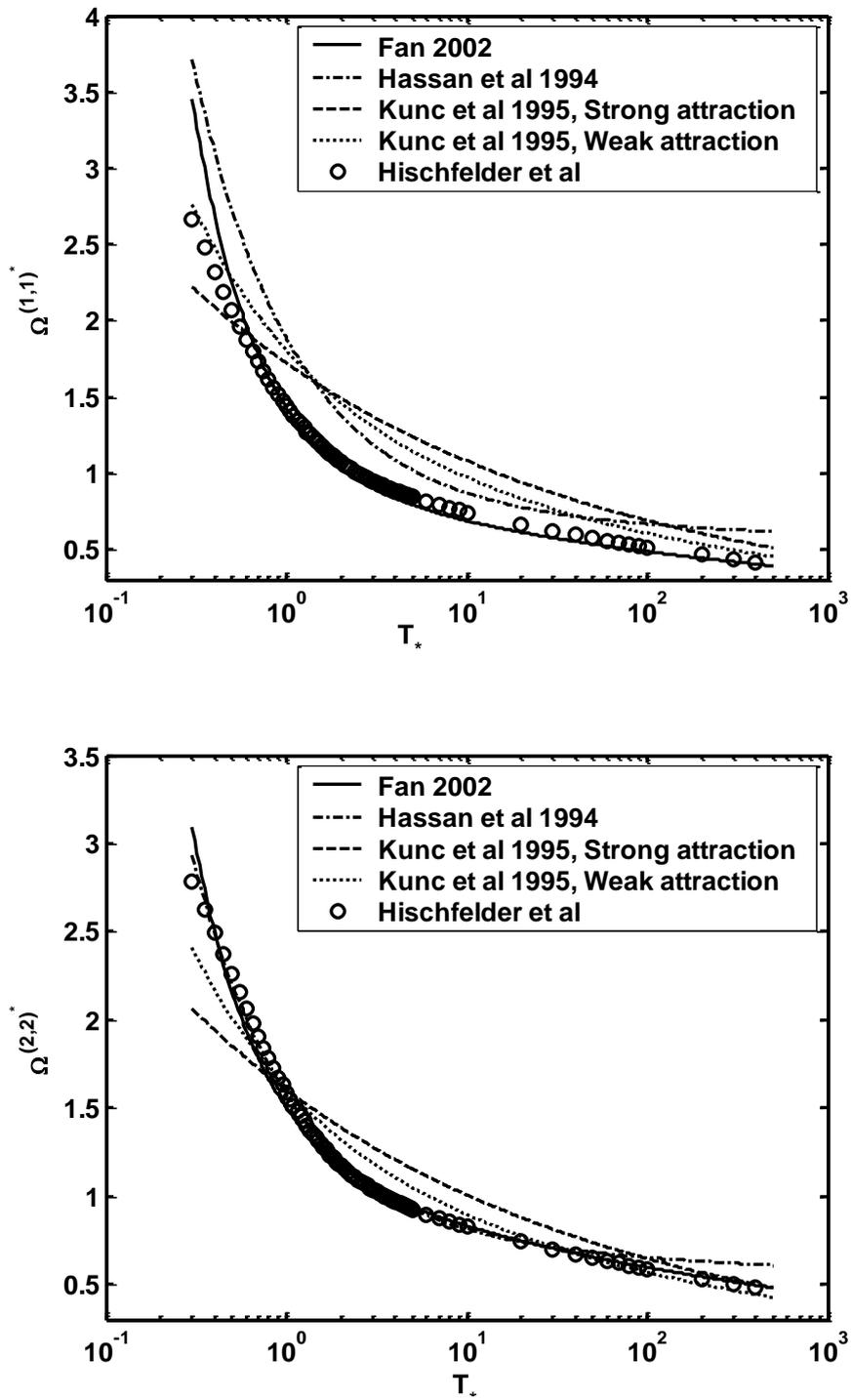


图 4-11 不同拟和数据之间的对比

4.3.2 碰撞率的强化

根据稠密气体的 Enskog 理论, 考虑到气体密度对分子间碰撞率的影响, 正如 4.2 节中所介绍的, 稠密气体的碰撞率与稀薄气体的碰撞率应有如下关系:

$$\Gamma_E = Y(n)\Gamma_B \quad (4-24)$$

其中: $Y(n)$ 由式(4-11)确定。

再根据标准 Enskog 理论(SET), 由于气体分子碰撞率的强化, 稠密气体的压力可以表示为

$$p_0 = knT[1 + b_2 n Y(n)] \quad (4-25)$$

然而, Enskog 在考虑到了 $b_2 n Y$ 与气体可压缩性之间的密切关系之后提出了一种不同的过程, 并阐明, 当气体分子处在相互之间弱引力场的作用之下时, 气体的状态方程应当修正为^[171]:

$$p_0 + a\rho^2 = knT[1 + b_2 n Y(n)] \quad (4-26)$$

其中 a 为吸引势强度, 其大小可以通过式(4-13)确定。

不难看出, 式(4-26)正是 van der Waals 方程。

4.3.3 van der Waals 流体的输运系数

根据稠密气体的 Enskog 理论, 稠密气体的输运系数可以通过如下关系式建立起与相同温度下低密度气体的传输特性之间的联系^[171]:

$$\mu' = \mu b_2 n [(b_2 n Y)^{-1} + 0.8 + 0.7614 b_2 n Y] \quad (4-27)$$

$$\lambda' = \lambda b_2 n [(b_2 n Y)^{-1} + 1.2 + 0.7574 b_2 n Y] \quad (4-28)$$

其中: μ 为气体粘度, λ 为气体导热系数; 不带上标的代表低密度气体, 带上标的代表稠密气体。

根据式(4-18)、(4-23)以及(4-27), 本文对比了不同模型或方法所得到的气体粘度与实验值随温度和密度的变化。图 4-12 显示了氮气粘度随温度变化的曲线, 其中实验数据来自文献^[184]中的表 16 和表 28。采用的分子参数为 $m=4.65 \times 10^{-26}$ kg, $\sigma=3.68 \times 10^{-10}$ m, $\varepsilon/k=91.46$ K。从图中可以看出, 只有本文所使用的方法不论在低温区还是在高温区都与实验数据符合较好。

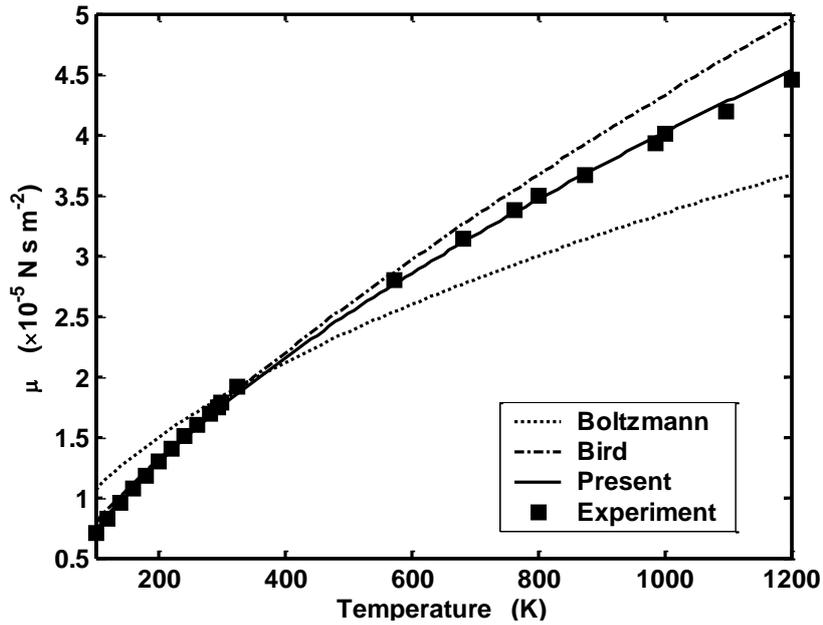


图 4-12 不同方法得到的粘度随温度变化与实验对比

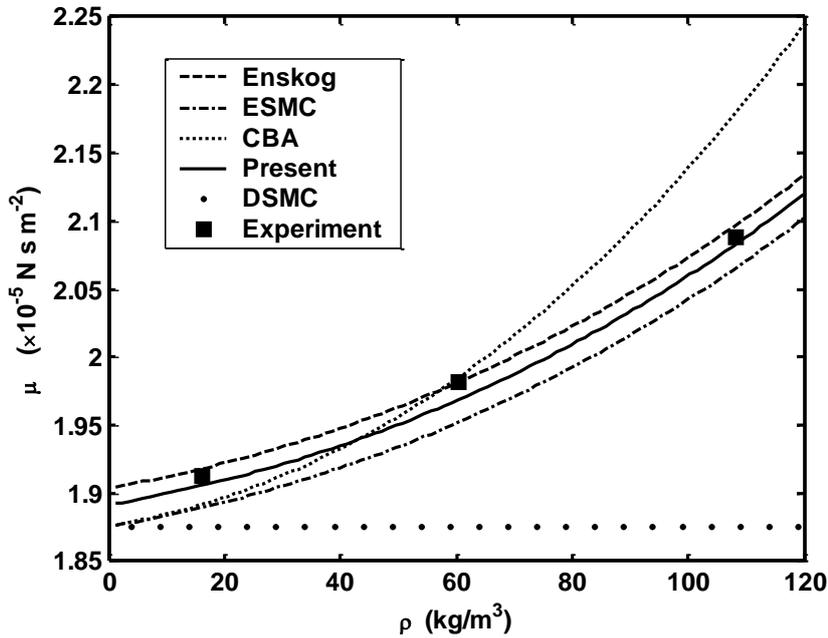


图 4-13 不同方法得到的粘度随密度变化与实验数据对比

图 4-13 对比了 50°C 时氮气的粘度随密度变化的理论值和实验数据，其中实验数据来自文献[184]的表 28，图中只对比了 150 个大气压下的数据，对于更

高的压力下的实验值与所有方法差异都很大，数据来源于 1931 年，因此难以确定在更高压力时实验数据的准确性。从图中可以看出，在这个温度下，Enskog 理论值和本文所采用的方法都与实验数据符合较好，ESMC 与实验值的差异也不大，而 DSMC 和 CBA 所得到的气体粘度随密度的变化与实验值有较大差异。

4.3.4 Larsen-Borgnakke 内能转换模型

通过前面的介绍，本文提出了基于 Enskog 理论的、既考虑了分子间吸引势又考虑了气体稠密性影响的分子模型，为了能在此基础上完成算法，还需要对分子间碰撞时的内能转换模型加以说明。

通常所使用的内能转换模型为 Borgnakke-Larsen 模型，在这个模型中，一部分碰撞为非弹性碰撞，碰撞后的平动能和内能根据平衡分布采样得到，另一部分碰撞则可以看成弹性碰撞，即动能内能之间没有相互转换。

对于分子间的非弹性碰撞，碰撞后的总能量可以表示成相对平动能和内能之和，

$$E_c = E_t + E_i \quad (4-29)$$

内能为 E_i 的分子分布函数

$$f_{E_i} \propto E_i^{\zeta-1} \exp(-E_i / kT) \quad (4-30)$$

其中： ζ 为碰撞对平均自由度。平动能 E_t 的分布函数，

$$f_{E_t} = \frac{2}{m_r^2} \left(\frac{m_r}{kT} \right)^{3/2} \sqrt{(2/\pi)} \frac{\sigma_T}{\sigma_T c_r} E_t \exp(-E_t / kT) \quad (4-31)$$

因此，内能为 E_i ，平动能为 E_t 的碰撞对的几率正比于 f_{E_i} 和 f_{E_t} 之积，

$$f_{E_i} f_{E_t} \propto \sigma_T E_t (E_c - E_t)^{\zeta-1} \exp(-E_c / kT) \quad (4-32)$$

对于每一个碰撞对的非弹性碰撞，碰撞后的能量都可以通过式(4-32)的“接受-拒绝法”重新分配。然而这种方法最大的缺陷就是计算效率非常低，Borgnakke-Larsen 法提出了根据自由度均分能量的方法并确保系统的能量平衡。根据这一原理，碰撞分子的平均动能可以表示为

$$\overline{E_t} = (\zeta_t / 2) kT \quad (4-33)$$

$$\text{其中: } \zeta_i = 2 \left\{ 2 - \omega_1 + \frac{\omega_1 - \omega_2}{(\alpha_1 / \alpha_2) [\Gamma(2 - \omega_1) / \Gamma(2 - \omega_2)] (kT / \varepsilon)^{\omega_2 - \omega_1} + 1} \right\}$$

通过这一变换, 碰撞后能量分布的过程大大简化, 甚至可以采用 DSMC 中的类似过程, 唯一额外的计算量在于对网格内温度的计算。

Borgnakke-Larsen 方法的另一个重要的问题是对非弹性碰撞几率的确定。最直接的想法是

$$P = (1/Z) \quad (4-34)$$

其中: Z 为松弛数。但这一公式过于粗糙了, 并在很多场合中被证明是不正确的^[147]。Lumpkin 等^[148]提出了旋转松弛的选取方法

$$P_R = [(1 + \zeta_R / \zeta_i) / Z_R] \quad (4-35)$$

其中: ζ_R 为碰撞分子的旋转自由度, ζ_i 为相对平动自由度, Z_R 为旋转松弛数。

还有学者提出了与温度相关的 Z_R 的 Parker 公式^[98,149], 目前这种方法得到了广泛认可和应用, 对于广义分子碰撞模型, Parker 公式可以写为:

$$Z_R = \frac{\left[\sum \alpha_j \left(\frac{T^*}{T} \right)^{\omega_j} \Gamma(2 - \omega_j) \right] \frac{2 - \omega_1}{2} Z_{R,\infty}}{\sum \alpha_j \left(\frac{T^*}{T} \right)^{\omega_j} \left[\frac{\Gamma(3 - \omega_j)}{2} + \frac{2\pi}{3} \Gamma\left(\frac{5}{2} - \omega_j\right) \left(\frac{T^*}{T} \right)^{1/2} + \left(\frac{\pi^2}{4} + 2 \right) \Gamma(2 - \omega_j) \left(\frac{T^*}{T} \right) \right]} \quad (4-36)$$

至此, 一种新的基于 Enskog 方程的 Monte Carlo 算法建立起来了, 并且基于这种方法的气体输运系数得到了实验的验证。本文的目标是最方便简洁的方法实现对 van der Waals 气体流动的模拟, 因此, 以 Bird 的标准 DSMC 程序为母体, 对其进行必要的修改, 这样既可以充分继承 DSMC 程序中一些高效的处理方法, 又大大降低了工作量。

由于新方法基于广义分子碰撞模型(Generalized collision model)和 Enskog 方程, 因此称其为广义 Enskog 蒙特卡洛(Generalized Enskog Monte Carlo)法, 简称 GEMC。

4.4 van der Waals 效应对微气体流动和换热的影响

从前面的介绍中可以看出，对于稠密的 van der Waals 气体流动和换热的模拟，GEMC 较之 CBA、ESMC 以及 DSMC 等几种方法在理论上具有优越性，且输运系数已经得到了实验数据的验证。因此，本节将对 4.2.3 节中的算例使用 GEMC 方法进行模拟，并将模拟结果与其他方法进行对比，以便分析 van der Waals 效应对微纳尺度气体流动和换热的影响。

对于图 4-2 所示的尺寸为 $L=0.05 \mu\text{m}$ ， $H=0.01 \mu\text{m}$ 的微通道内氮气流动，来流速度 $u_\infty=200 \text{ m/s}$ ，来流温度 $T_\infty=300 \text{ K}$ ，通道壁面温度 $T_w=300 \text{ K}$ 。图 4-14 显示了几种方法所模拟出的通道中心线上的速度分布，与 DSMC 的结果相比，在 GEMC 模拟得到的通道中心线上的速度增加了(10%左右)，这一点与 ESMC 和 CBA 方法在定性上是一致的；与 ESMC 和 CBA 的模拟结果相比，速度的增加量要略小(5%左右)，不同方法间输运系数的差别可能是造成这一偏差的原因之一。另外，ESMC 和 CBA 都使用的是标准 DSMC 的内能转换模型，即没有考虑分子间吸引势作用的 Borgnakke-Larsen 模型，这也可能是造成其速度偏大的一个原因。

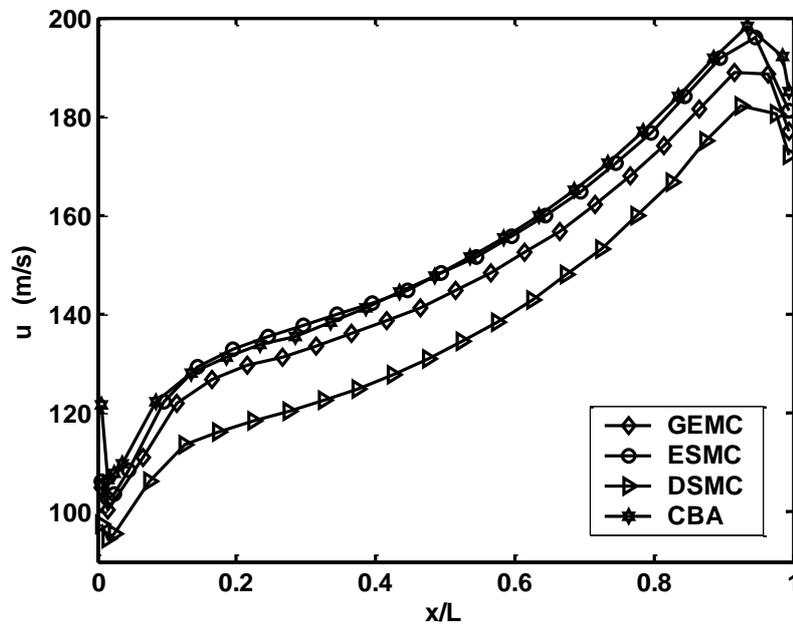


图 4-14 通道中心线上的速度分布

图 4-15 对比了不同方法模拟出的中心线上的温度分布。由于 DSMC 和 ESMC 方法都没有考虑到分子间吸引势的作用，模拟得到的温度分布差异较小，但都明显小于 GEMC 的结果；GEMC 和 CBA 虽然采取的手段不同，但都考虑了分子间吸引势的作用，因此这两种方法给出的温度分布比较接近，但又不完全符合，在通道的前半部分，GEMC 得到的温度高于 CBA 的结果，在通道的后半部分则正好相反。与前面的分析相同，气体输运系数的偏差和内能转化模型的差异是造成 CBA 方法偏离 GEMC 结果的主要原因。

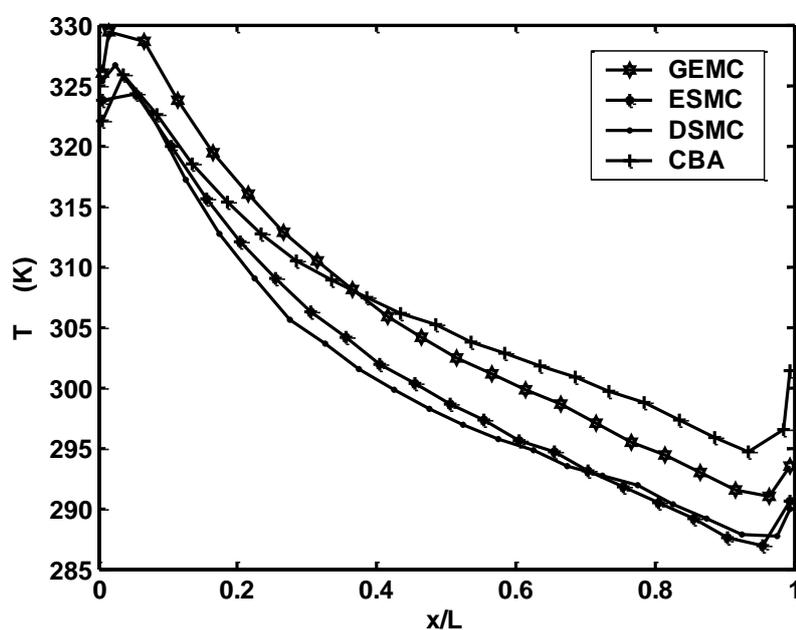


图 4-15 通道中心线上的温度分布对比

图 4-16 所示为通道壁面阻力系数的沿程分布。4.2 节中 ESMC 和 CBA 对壁面阻力系数的计算结果得到了截然相反的结论，图 4-16 中的结果应该可以对这种情况加以澄清。从图中可以看出，GEMC 计算得到的壁面阻力系数与 ESMC 的结果符合较好，即 van der Waals 效应使得气体在微通道内的流动阻力系数减小。其原因可能在于考虑了分子本身所占有的体积之后，van der Waals 效应减小了气体的可压缩性，从而导致通道内的流动阻力减小。

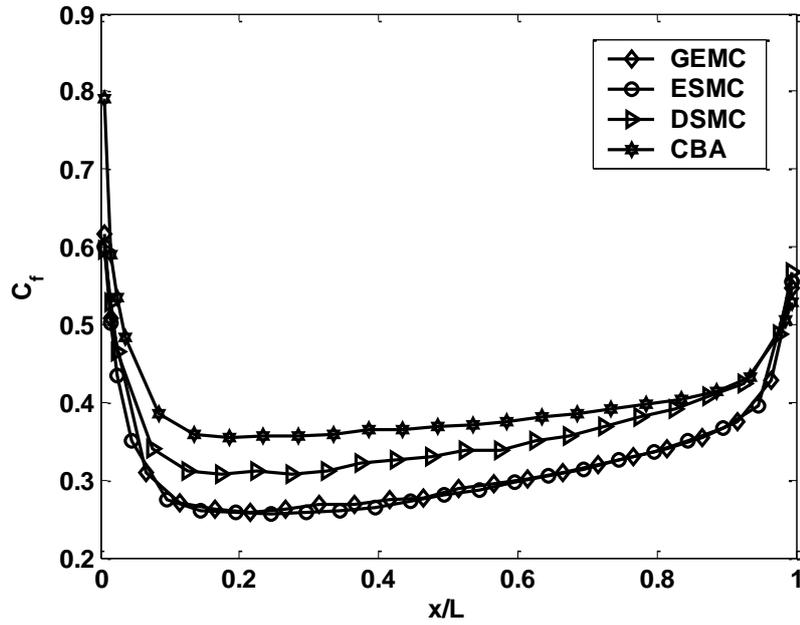


图 4-16 通道壁面阻力系数

图 4-17 显示了通道壁面热流通量的沿程分布。对于来流气温与壁温相同的这种流动情况，GEMC、ESMC 以及 CBA 在通道的前半段的壁面热流通量都小于 DSMC 的值，而在通道的后半段都略大于 DSMC 的值。

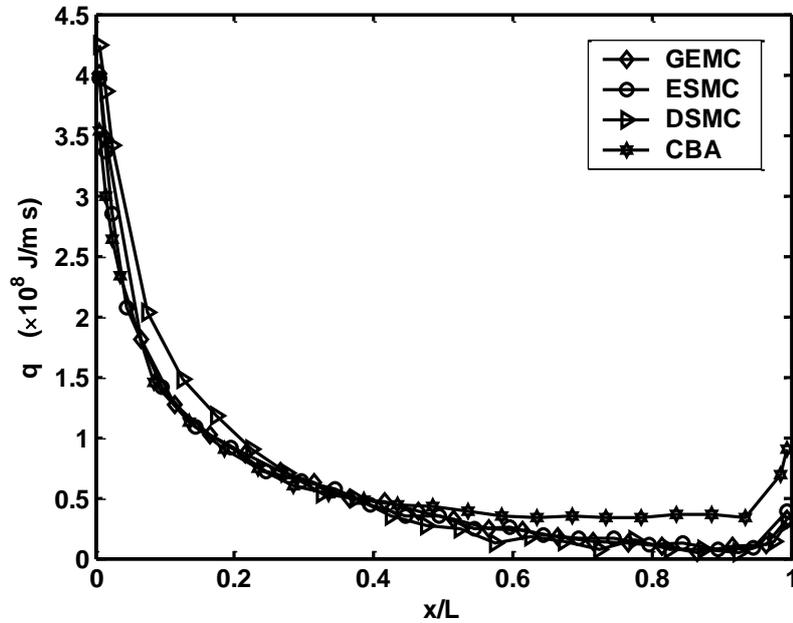


图 4-17 壁面热流通量对比

本文还对来流气温大于或小于通道壁温的通道壁面热流作了细致模拟，结果表明，CBA 方法对不同情况的模拟结果与 DSMC 的对比会出现定性上的不同，而 GEMC 对不同情况的模拟与 DSMC 的对比在定性上结果一致，即，在通道前半部分，热流量小于 DSMC 的结果，而在后半部分会略大于 DSMC 的结果，甚至趋于一致。

4.5 小结

发展并使用已有的用来模拟微尺度稠密气体流动的两种方法(一致性 Boltzmann 算法和 Enskog 模拟 Monte Carlo 法)对微纳尺度直通道内的稠密气体流动和换热进行了模拟，并与 DSMC 的模拟结果作了对比。两种方法对通道壁面阻力系数的预测与 DSMC 模拟结果的定性对比得到的结论截然相反，温度场也存在较大差异。通过对算法的深入分析，发现一致性 Boltzmann 算法(CBA)改变气体状态方程的同时也改变了气体的输运系数，且在壁面处理时出现困难；而 Enskog 模拟 Monte Carlo(ESMC)法在分子碰撞模型和内能转换模型中存在不足。

考虑到已有的两种方法都存在缺陷，在综合考虑了气体的稠密效应和分子间吸引势的作用之后，提出了一种基于 Enskog 方程的新的 Monte Carlo 法(GEMC)。新方法分析了 L-J 流体分子间作用势对碰撞截面的影响，引入了广义分子碰撞模型；根据 Enskog 理论考虑了气体稠密效应对分子间碰撞率的强化；引入了考虑到分子间吸引势的内能转化模型。与其他方法相比，GEMC 对输运系数的计算结果与实验数据符合得最好，验证了其正确性。

使用 GEMC 方法模拟了稠密气体在微纳尺度通道内的流动和换热，结果表明稠密效应使气体在通道内流动的壁面阻力系数减小，壁面热流量在通道的前半部分减小，而在后半部分略有增加。

第五章 近连续区气体流动与换热的Monte Carlo模拟

通过前面章节的介绍可以看出，当努森数比较大时，完全气体的流动可以通过基于 Boltzmann 方程的 DSMC 进行模拟分析；稠密的 van der Waals 气体可以通过基于 Enskog 方程的 GEMC 进行模拟分析。当气体流动处于近连续区，即努森数较小时，这两种方法都遇到计算量的问题。本章发展了基于 BGK 方程的 Monte Carlo 法，为微尺度下跨流区流动的全粒子耦合模拟作了有益的探索。

5.1 近连续区气体流动DSMC模拟的难点

对于标准的 DSMC 模拟，影响其计算量的最主要因素为流动的马赫数，这一点在最近的文献上有比较系统全面的论述^[185]。前人的文献中很少提及努森数对计算量的影响，大多数研究只注意到需要多少计算步可以达到相应的误差限要求，而忽略了每一个计算步所需的计算时间。事实上，对于相同流速的气体流动，影响每一个计算步所需计算量的因素除了模拟粒子数之外，还有努森数。研究表明，当其他条件相同时，模拟粒子间碰撞的次数与努森数成近似的反比关系。也就是说，当气体努森数很小时，所需计算的粒子间碰撞次数会非常大，此时 DSMC 的计算量主要集中在粒子间碰撞的模拟上。这个特点给 DSMC 模拟近连续区的气体流动带来了很大困难，有时甚至导致模拟无法实现。

对于系统内只有处于单一近连续区的气体流动来说，可以直接使用基于连续介质假设的滑移修正方法进行模拟^[38]；而对于在同一个系统内既有滑移区的流动又有过渡区的流动甚至还有自由分子流区的复杂流动来说，任何一种单一的方法求解都是非常困难的。近年来，很多学者在 N-S 方程与 DSMC 方法的耦合上作了开创性的工作^[126-128,186]，但客观地说，成果有限，耦合方法得到的模拟结果与标准解相比其符合程度还不能令人完全满意。另一些学者则探讨了对近连续区流动也采用粒子法模拟，然后在全流区使用两种粒子法联合求解的办法，这种方法在 FCM-DSMC^[187]以及 PIC-DSMC^[188]的应用中取得了成功。

本章就是从这种思想出发，希望能找到一种可以对近连续区气体流动实现高效模拟的 Monte Carlo 方法，为今后的耦合求解打下基础。

5.2 模拟近连续区气体流动与换热的Monte Carlo法

本节在前人工作的基础上，探讨并发展了近连续区气体流动及换热模拟的Monte Carlo法。

5.2.1 Euler方程

根据 Boltzmann 方程：

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \left(\mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}} \right) + \frac{1}{m_i} \left(\mathbf{X}_i \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{v}_i} \right) = \sum_j J(f_i, f_j) \quad (5-1)$$

其中： $J(f_i, f_j)$ 为粒子的碰撞积分：

$$J(f_i, f_j) = 2\pi \iint (f_i' f_j' - f_i f_j) g_{ij} b db d\mathbf{v}_j \quad (5-2)$$

通过引入摄动参数 ε ，Boltzmann 方程的级数解可以表示为：

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \left(\mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}} \right) + \frac{1}{m_i} \left(\mathbf{X}_i \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{v}_i} \right) = \frac{1}{\varepsilon} \sum_j J(f_i, f_j) \quad (5-3)$$

其中， $1/\varepsilon$ 是分子碰撞率的一个量度，若 ε 为小量，则表示分子间碰撞极其频繁，气体可以认为是连续介质，并处处保持局部平衡态。此时，粒子的分布函数可以展开成 ε 的级数形式：

$$f_i = f_i^{[0]} + \varepsilon f_i^{[1]} + \varepsilon^2 f_i^{[2]} + \dots \quad (5-4)$$

再根据 H 理论，局部平衡分布函数满足 Maxwellian 分布：

$$f_i^{[0]} = n_i \left(\frac{m_i}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left\{ -m_i (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_0)^2 / 2kT \right\} \quad (5-5)$$

将(5-5)式代入 Boltzmann 方程中就得到了零阶近似关系，即 Euler 方程：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad (5-6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) + \frac{\partial (\rho RT)}{\partial x_i} = 0 \quad (5-7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \left(\frac{1}{2} |u|^2 + \frac{3}{2} RT \right) \right) + \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho u \left(\frac{1}{2} |u|^2 + \frac{5}{2} RT \right) \right] = 0 \quad (5-8)$$

根据前面的分析,当气体处在近连续区,分子间碰撞相对来说就会非常频繁,此时 ε 为一小量,气体分子在经历了一定时间步长之后仍然保持局部平衡态,即满足 Maxwell 分布,这一观点在 Bird 的 DSMC 理论中也有类似阐述^[74]。Pullin^[189]首先提出了基于这一观点的平衡分布粒子模拟方法——EPSM,用来对一维 Euler 方程数值求解。随后 Macrossan 等人^[45]对 EPSM 作了发展并对 Taylor-Couette 流动进行了模拟。Macrossan^[134]和陈等^[135,136]还使用 EPSM 与 DSMC 混合算法对近连续流动作了简单模拟。

更深入的研究表明, EPSM 在理论上可以看作是 DSMC 在无限碰撞率下的一种简化,然而事实上,气体在流动过程中很难达到完全的平衡态,所谓的局部平衡只是一种近似。对此, BGK 模型作了进一步的阐述。

5.2.2 BGK方程

由于形如式(5-1)的 Boltzmann 方程几乎无法直接求解,前人对它提出过各种各样的简化模型,其中最为著名的是 Bhatnager、Gross 和 Krook 三人在 1954 年提出的 BGK 模型^[44]。

$$\frac{\partial}{\partial t}(nf) + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}(nf) + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{c}}(nf) = n\nu(f_0 - f) \quad (5-9)$$

其中:通常可以认为 ν 为分子碰撞频率, n 为分子数密度, f_0 为当地 Maxwell 分布函数;方程的右边为碰撞项,若定义驰豫时间 $\tau = \nu^{-1}$,则碰撞项可以写成

$$\left[\frac{\partial nf}{\partial t} \right]_{coll} = n\nu(f_0 - f) = \frac{n}{\tau}(f_0 - f) \quad (5-10)$$

等式(5-10)的精确解为

$$f(t) = (f(0) - f_0)\exp(-t/\tau) + f_0 \quad (5-11)$$

其中: $f(0) = f(t=0)$ 为粒子碰撞作用之前的速度分布。因此,当经过了一段时间的分子碰撞之后 $t = \Delta t$,分子的分布函数可以表示为:

$$f(\Delta t) = \exp(-\Delta t/\tau)f(0) + (1 - \exp(-\Delta t/\tau))f_0 \quad (5-12)$$

式(5-12)表明,当分子经过一段时间的碰撞之后,最终的分子速度分布可以看作是初始速度分布与最终状态下平衡分布的统计和。

这里所提到的驰豫时间与碰撞时间还不是一个概念。根据 Chapman-Enskog

理论, 气体粘度可以表示为驰豫时间的函数 $\mu = \rho RT \tau^{[171]}$, 因此, 驰豫时间可以通过下式确定:

$$\tau = \frac{\mu}{\rho RT} = \frac{\mu}{nkT} \quad (5-13)$$

5.2.3 驰豫时间Monte Carlo法——RTMC

使用式(5-12)所示原理, Macrossan^[45,190]对 Pullin 的 EPSM 进行了修正和发展, 提出了 RTSM 方法, 并使用 Matlab 语言实现了 RTSM 对一维问题的模拟^[191]。这里注意到由 EPSM 发展而来的 RTSM 在算法的实现上存在三大弊端: 一, 在 RTSM 中, 需要跟踪每个粒子的位置和运动, 即在粒子重新分布的前后, 粒子的个数、速度以及能量都需要保存, 这就无形中增加了计算的存储量; 二, 每一个计算时间步长, 每个网格内的宏观物理量都要通过本网格内所有粒子的统计采样规律获取, 因此需要每个网格内保证大量的粒子数以减小统计误差; 三, 从理论上讲, EPSM 和 RTSM 都没有关于内能转换方面的讨论, 因此在扩展到高维的时候存在缺陷。

针对 RTSM 存在的这些问题, 本文在其基础上, 采用 DSMC 中的诸多处理方法, 例如: 使用粒子识别(Index)技术判断粒子的位置和运动, 而不用对每个粒子跟踪; 采用时均采样技术以减少对单个网格内粒子数的需求; 使用 Larsen-Borgnakke 内能转换模型计算粒子速度重新分布后的能量分布。新方法实际上具备了 RTSM 和 DSMC 两种方法的主要特点, 因此为其命名为驰豫时间 Monte Carlo 法(RTMC)。

图 5-1 显示了 RTMC 的流程, 其主要步骤包括: i) 平移粒子, 处理粒子与边界的相互作用; ii) 对粒子在各个网格内标号; iii) 采样并计算各个网格内的气体宏观特性; iv) 根据(5-13)式计算当地驰豫时间, 并根据(5-12)式计算重新分布粒子的几率; v) 每个网格内重新分布粒子。

RTMC 与 DSMC 的区别在于使用重新分布粒子的方法代替了粒子间的相互碰撞, 因此, RTMC 的计算量与粒子间碰撞率的关系较小, 当气体处于近连续区时, RTMC 的计算量不会有明显的增加, 从而优于 DSMC 方法。RTMC 与 EPSM 的主要区别在于只对部分粒子重新分布而不是全部。

从理论上讲, RTMC 是基于 BGK 模型, 不适用于高努森数的情况。因此只

探讨了 RTMC 对近连续区($Kn \leq 0.1$ 时)气体流动和换热的模拟。

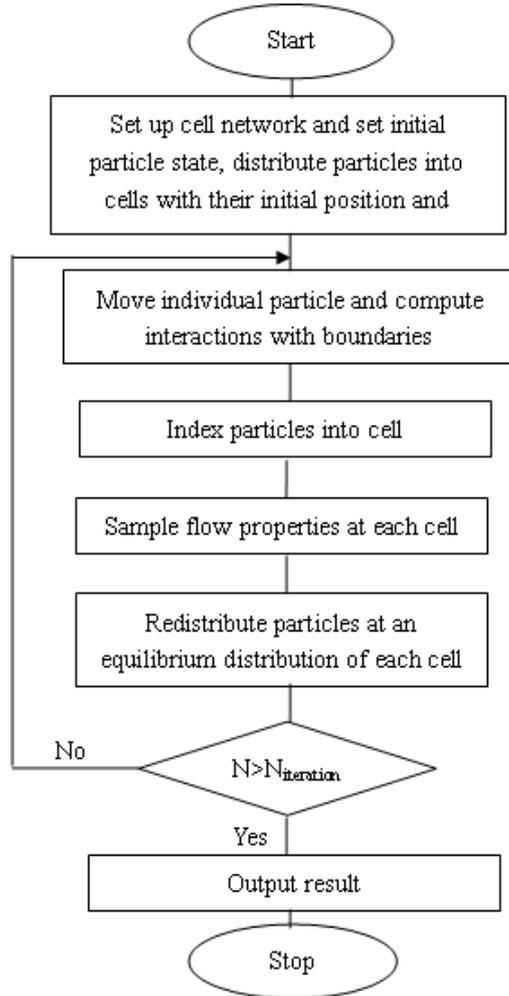


图 5-1 RTMC 方法的流程图

5.3 模拟结果的分析

为了验证 RTMC 的适用性和可靠性，对亚音速通道内流动和超音速横掠平板外流这两个经典算例进行了模拟，并将模拟结果与标准 DSMC 方法以及 EPSM 方法作了对比。

5.3.1 亚音速通道流动

考虑氮气在如图 3-1 所示通道内的流动，通道尺寸为 $5 \times 1 \mu\text{m}$ ，来流气体速

度为 200 m/s, 气温 300 K, 来流努森数为 0.1, 壁面温度为 300 K。使用了 50×10 的网格, 每种算法的最终模拟粒子数约为 10^5 个, 最终采样数都超过 10^6 。

图 5-2 至图 5-5 显示了沿通道中心线上的密度、速度和压力分布以及沿壁面的摩擦阻力系数。图中对比了 RTMC、DSMC 以及 EPSM 三种方法所得到的结果。

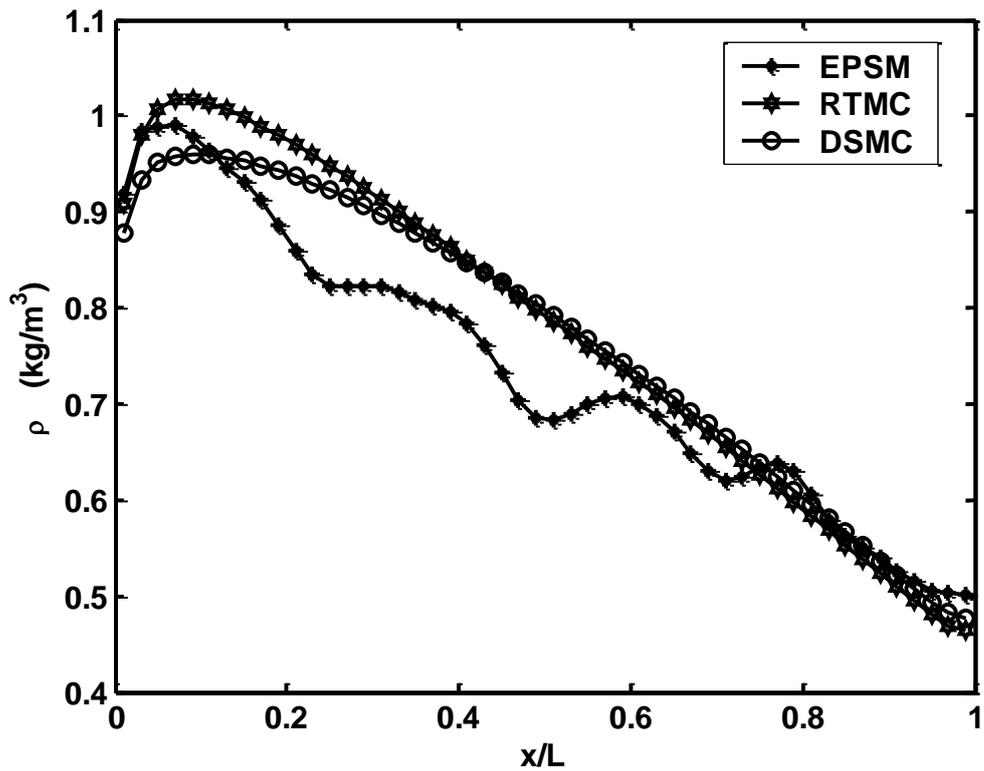


图 5-2 通道中心线上的密度分布

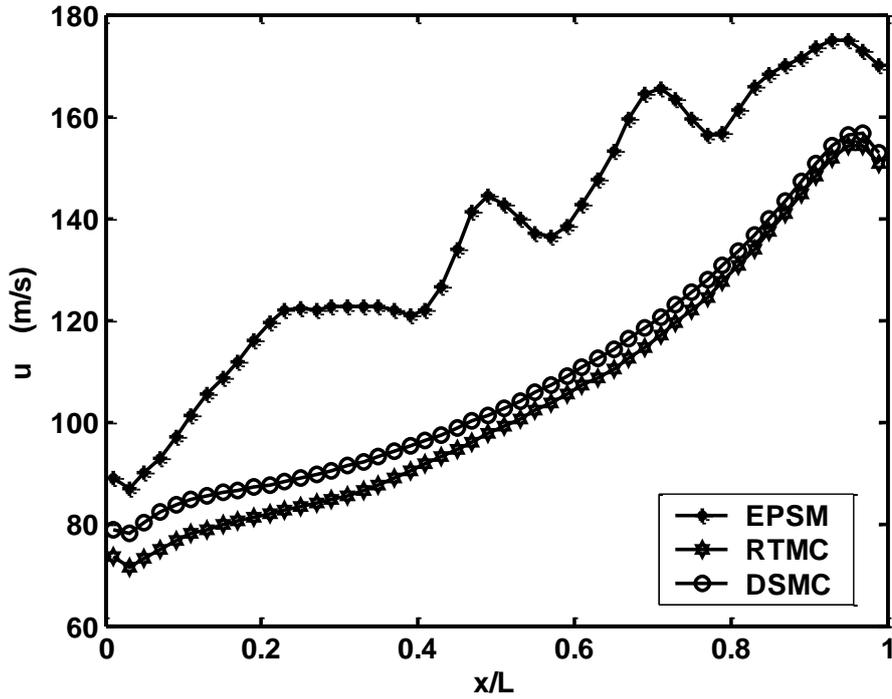


图 5-3 通道中心线上的轴向速度分布

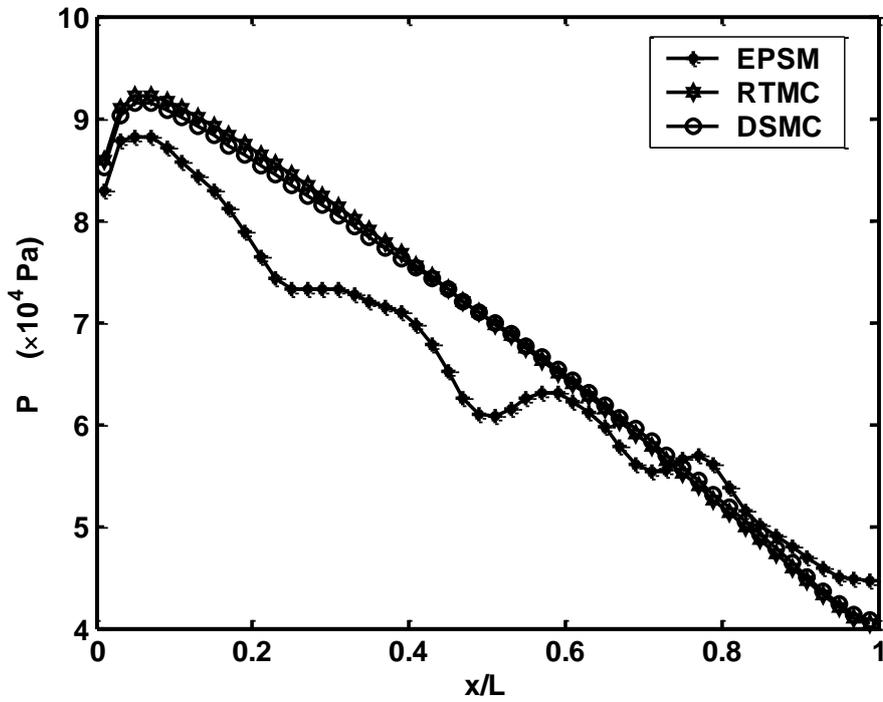


图 5-4 通道中心线上的压力分布

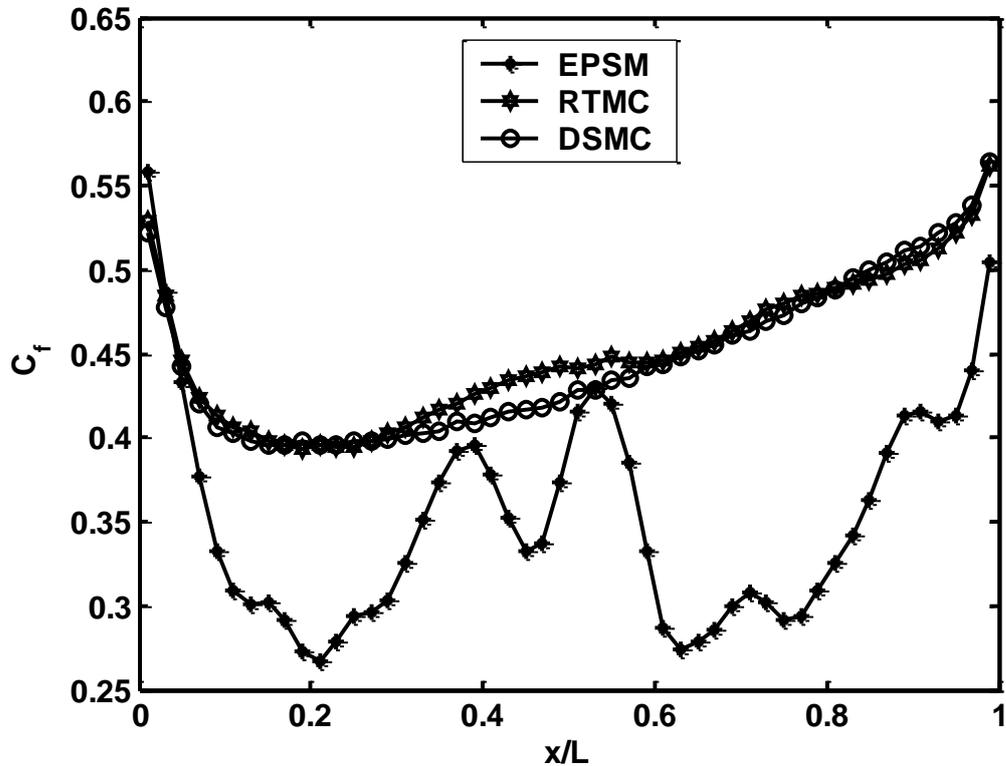


图 5-5 沿通道壁面的摩擦阻力系数

从对比结果可以看出，三种方法所得到的结果在定性上基本一致，但 EPSM 的结果出现明显的波动；同 EPSM 相比，尽管 RTMC 的计算量略大，但与 DSMC 的模拟结果有更好的一致性。另外，对 EPSM 的算例进一步加大了采样数至 10^7 以上，结果没有得到明显的改善，这表明 EPSM 在算法上的缺陷难以仅用增大计算量得到弥补。

5.3.2 超音速横掠平板流动

考虑超音速氮气流过一热平板，如图 3-4 所示，计算区域尺寸 $L=1\text{ m}$ ， $H=0.6\text{ m}$ ，底部的平板长度 $L_w=0.9L$ ，来流气体 $Ma_\infty=4.0$ ， $T_\infty=300\text{ K}$ ， $Kn_\infty=0.022$ ，平板的温度为 500 K 。划分网格数为 100×60 ，最终粒子数约为 4×10^4 ，总的采样数都为 5×10^5 。

由于在 5.3.1 中证明了 EPSM 模拟二维流动时存在很大偏差，图 5-6 至图 5-8 中只对比了 RTMC 和 DSMC 的结果。图 5-6 对比了两种方法得到的密度等值线

图, 图 5-7 对比了平板末端($x/L=1$)处沿 y 方向上的 x -速度分布, 图 5-8 对比了沿平板的阻力系数分布。

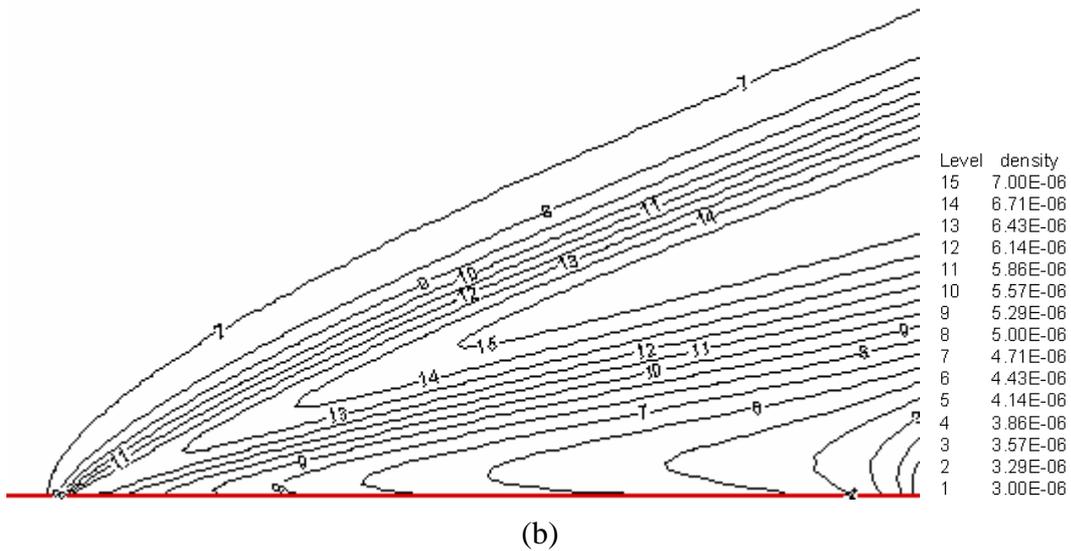
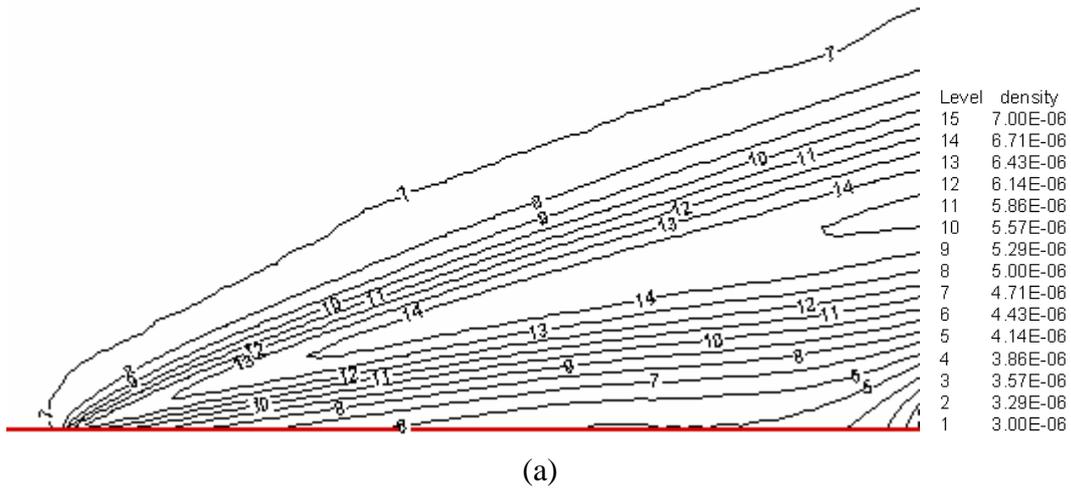


图 5-6 密度等值线 (a) RTMC 方法; (b) DSMC 方法

从图 5-6 至图 5-8 的对比中可以看出, 对于超音速的横掠平板流动的情况, RTMC 与 DSMC 也符合较好。

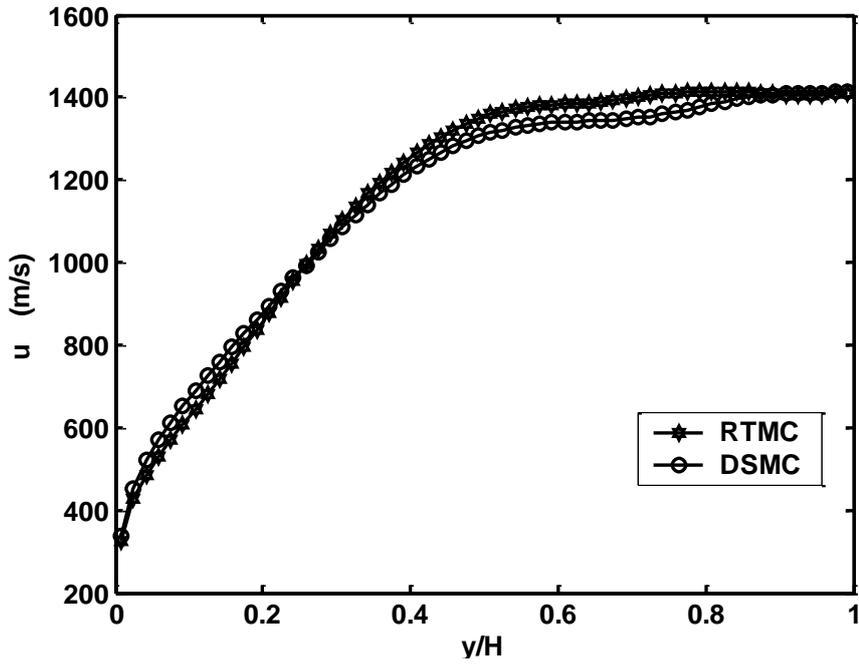


图 5-7 (x/L)处速度在 y 方向上的分布

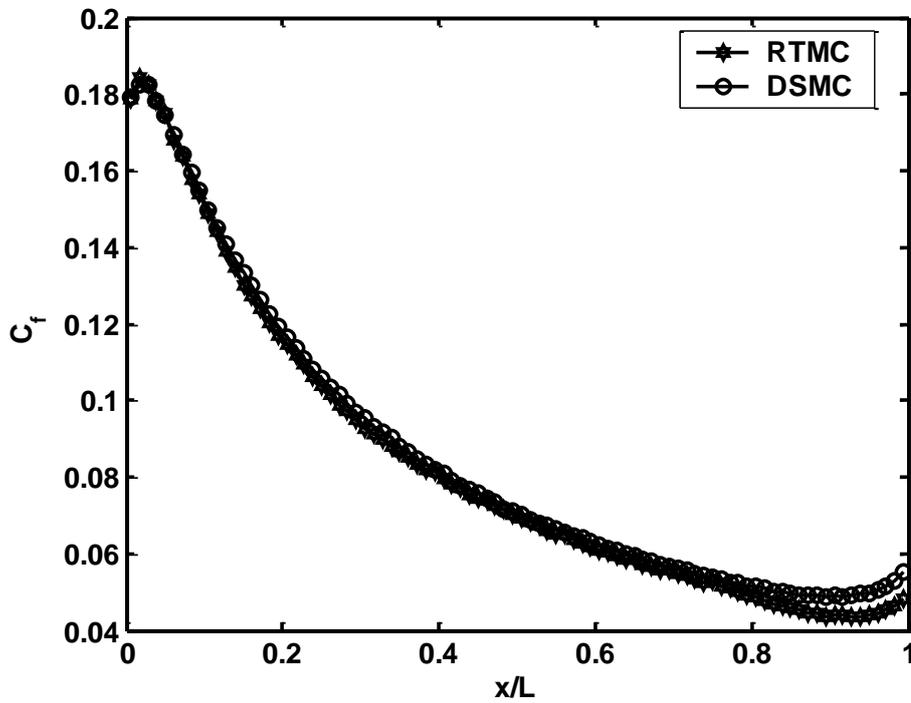


图 5-8 沿平板壁面的阻力系数分布

5.3.3 计算效率的对比

根据式(5-12)所示, RTMC 方法的计算量主要与驰豫时间 τ 相关, 而与气体的努森数关系不大, 与此形成鲜明对比的是 DSMC 方法随气体努森数的减小计算效率下降, 因此可以判断, 当气体的努森数小于某一临界值时, RTMC 的计算效率就要高于 DSMC。为了验证这一观点, 对 5.3.1 中的平行平板通道流动算例选取不同的来流努森数条件进行了对比, 结果发现, 当努森数为 0.05 时, RTMC 与 DSMC 的计算效率相当; 当努森数为 0.01 时, DSMC 的计算效率约为 RTMC 计算效率的 60%。

由于 RTMC 与 DSMC 的主要区别在于对分子碰撞的处理不同, 其他方面类似, 因此难以给出一个统一的临界努森数, 其值的大小还应该与边界条件的复杂程度和模拟粒子数有关。

通过对两种方法计算效率的对比可以看出, RTMC 在近连续区较之 DSMC 计算效率有所提高, 另外, 鉴于两种方法在算法上的相似性, 可以考虑在近连续区使用 RTMC 模拟而在远离连续区使用 DSMC 模拟, 进而在全流场实现全粒子耦合的高效模拟方法。

5.4 小结

由于 DSMC 的计算量与努森数近似成反比关系, 因此不适于努森数较小的近连续区流动模拟。对于密度变化剧烈或特征尺度差异较大的跨流区流动, 需要采用多种方法耦合求解。前人的研究表明全粒子法耦合求解是最有前景的方法。

本章在前人关于近连续区粒子模拟算法研究的基础上, 提出了一种基于 BGK 方程的新算法——驰豫时间 Monte Carlo 法(RTMC), 该算法使用重新分布粒子代替 DSMC 中计算粒子间相互碰撞的过程, 从而使其在近连续区流动的模拟中效率提高。同时, 新算法充分利用了 DSMC 中的成熟技术, 例如粒子识别技术、时均采样技术和内能转换模型等, 因此该方法易于与 DSMC 方法实现耦合模拟。使用该方法的算例表明, 它有望应用在同时存在近连续区、滑移区和过渡区的跨流区流动的全粒子法耦合模拟中。

第六章 复杂微气体流动及换热的DSMC模拟与分析

前面的章节主要介绍了基础理论和算法方面的工作，本章将通过两个算例介绍使用 DSMC 模拟和分析微尺度气体流动和换热情况的基本方法和研究思路，并给出了典型工况下流动的分析结果。

6.1 微气体滑动轴承的性能分析

6.1.1 研究背景

微尺度气体滑动轴承的物理背景主要来源于计算机中的硬盘驱动器。对于新型的 IBM 硬盘驱动器，如图 6-1 所示，其读写头与盘面之间的距离已经小于 20nm ^[26-28]，而这一距离远远小于空气在标准状况下的平均自由程(约 65nm)，因此考虑“稀薄气体”效应对驱动器的设计与优化至关重要。对读写头上的受力预测直接影响到驱动器的性能，若读写头与盘面的设计距离过高，硬盘不能准确的读写数据；反之，读写头则可能因距离过小而卡死在盘面上。

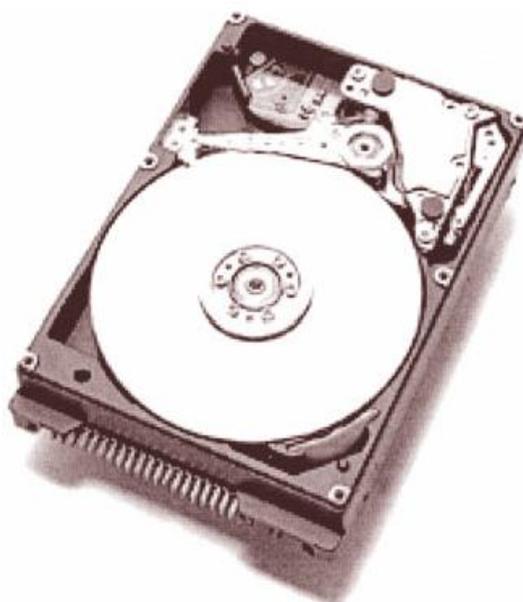


图 6-1 IBM 的 $25\text{Gbit}/\text{in}^2$ 硬盘驱动器^[26]

读写头、盘面以及中间的气体夹层恰好构成了一个气体滑动轴承。按照经典润滑理论,气体滑动轴承可以由基于连续介质假定的 Reynolds 方程来描述^[192],对于处在滑移区的气体流动,Reynolds 方程的某些滑移修正形式可能依然适用,而对处于过渡区的流动则必须使用基于 Boltzmann 的粒子法进行模拟^[193]。

6.1.2 前人的工作

考察如图 6-2 所示的滑动气体微轴承结构,底部的斜面固定,顶部的水平面以速度 U 朝 x 方向运动,气体在壁面剪切力的作用下如箭头所示方向运动。入口气体温度为 T_0 ,壁面的温度保持 T_w ,入口和出口的气体压力为环境压力 p_0 。轴承的水平长度为 L ,出口处的宽度为 h_0 。

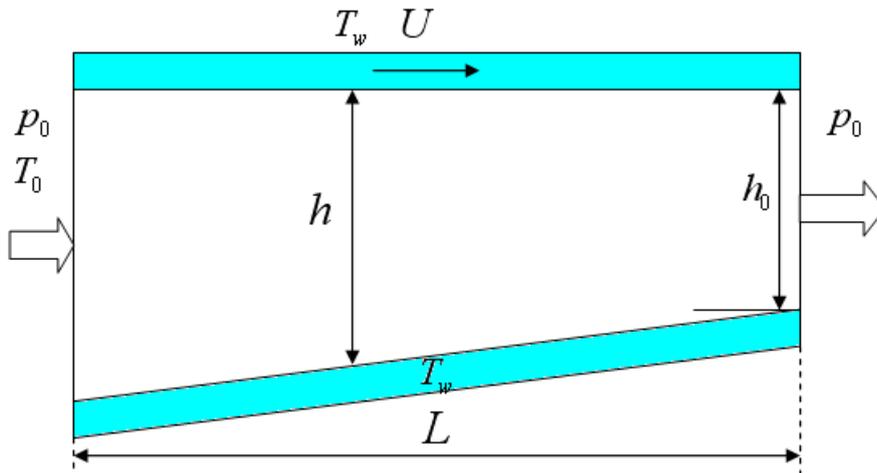


图 6-2 气体滑动轴承结构

6.1.2.1 传统润滑理论

一般来说,斜面的角度很小($<1^\circ$)时,可以认为通道内的压力在竖直的截面上是相同的。根据标准的一维润滑理论^[192],气体的压力可以由 Reynolds 方程计算得出

$$\frac{d}{dx} \left(ph^3 \frac{dp}{dx} \right) = 6\mu U \frac{d}{dx} (ph) \quad (6-1)$$

其中: μ 是气体的动力粘度, $h(x)$ 为壁间距离。

方程(6-1)的无量纲形式为

$$\frac{d}{dX} \left(PH^3 \frac{dP}{dX} \right) = \Lambda \frac{d}{dX} (PH) \quad (6-2)$$

其中: $X = x/L$, $P = p/p_0$, $H = h/h_0$, 轴承数定义为 $\Lambda \equiv 6\mu UL/p_0 h_0^2$ 。

方程(6-2)适用于计算常规尺度和压力条件下的压力分布, 对于微气体轴承来说, 努森数较大, 稀薄气体效应不可忽略。Burgdorfer^[193]对式(6-2)进行了滑移修正:

$$\frac{d}{dX} \left(\left[1 + \frac{2-\sigma_v}{\sigma_v} 6Kn \right] PH^3 \frac{dP}{dX} \right) = \Lambda \frac{d}{dX} (PH) \quad (6-3)$$

其中: σ_v 为壁面协调系数, 在通常情况下 $\alpha=1$ 。

Fukui 和 Kaneko^[194,195]发展了一个更为复杂的修正关系式:

$$\frac{d}{dX} \left(\bar{Q}_p(Kn) PH^3 \frac{dP}{dX} \right) = \Lambda \frac{d}{dX} (PH) \quad (6-4)$$

其中 $\bar{Q}_p(Kn)$ 的物理意义为 Poiseuille 流的无量纲流率。Robert^[196]对文献[194]中 $\bar{Q}_p(Kn)$ 的数据表格拟和, 得到了如式(6-5)所示的 $\bar{Q}_p(Kn)$ 随 Kn 变化的关系式:

$$\bar{Q}_p(Kn) \approx 1 + 6A\sqrt{\pi}Kn + \frac{12}{\pi}Kn \log(1 + BKn) \quad (6-5)$$

其中: 当壁面协调系数 $\sigma_v=1$ 时, $A=1.318889$, $B=0.387361$ 。

轴承的承载能力可由负载系数 w 表征, 其定义为:

$$w = \frac{1}{L} \int_0^L \frac{p(x) - p_0}{p_0} dx \quad (6-6)$$

6.1.2.2 前人的DSMC模拟工作

Alexander 等^[29]首先使用 DSMC 方法对微气体滑动轴承作了模拟, 并证明了 DSMC 的模拟结果与 Reynolds 方程的修正解在不同几何构型的轴承情况都是一致的。Huang 等^[30]使用三维 DSMC 方法对出口努森数高达 35 的轴承进行了模拟, 结果表明 DSMC 模拟与分子气膜润滑理论值(MGL)符合得较好。Liu 等^[31]也使用 DSMC 方法研究了滑块斜面构型对轴承性能的影响。

前人的工作主要集中在讨论轴承的几何构型以及滑动速度对轴承性能的影响

响，对壁温以及环境压力等条件对轴承承载能力的分析不足。

6.1.3 结果与分析

6.1.3.1 与传统理论的对比

首先，对 $h_0=25\text{nm}$ 、 $U=30\text{m/s}$ 、 $p_0=1 \times 10^5\text{Pa}$ 、 $T_w=300\text{K}$ 、 $L=5\ \mu\text{m}$ 、 $h_0 : h(x=0) = 1 : 2$ 、 $T_0=300\text{K}$ 的氮气轴承进行了模拟，并与传统润滑理论分析中 Reynolds 方程(6-2)式及其修正形式式(6-3)和式(6-4)的计算结果作了对比。图 6-3 显示了 DSMC 模拟与连续 Reynolds 方程、一阶滑移修正 Reynolds 方程以及 Fukui 等拟和修正 Reynolds 方程的数值解的压力分布对比。

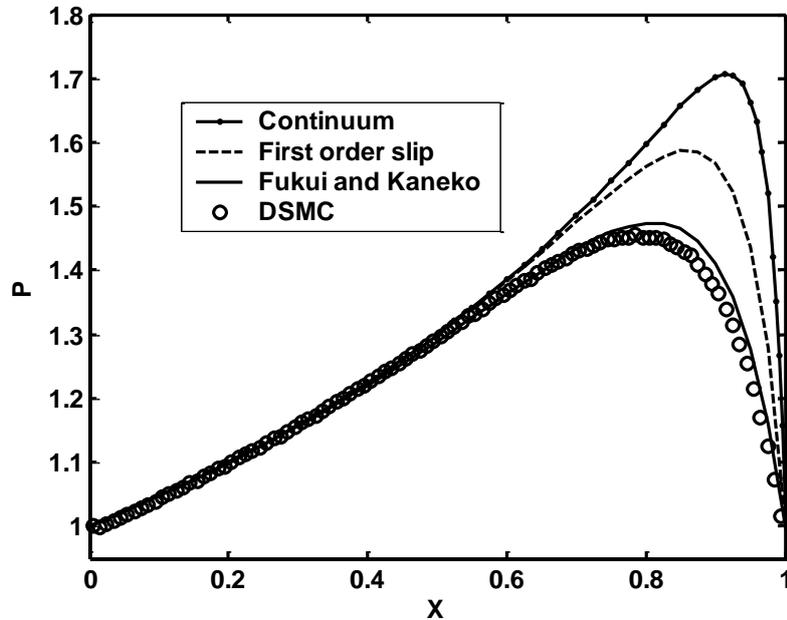


图 6-3 DSMC 与传统 Reynolds 方程数值解的比较

从图中可以看出，在轴承的前半段，各种方法得到的压力分布符合较好；而在轴承的后半部，各种方法的模拟结果发生分离。Fukui 等的修正方程与 DSMC 模拟出的压力分布差异较小，而其他方法与 DSMC 相比偏离较大。注意到出口努森数较大， $Kn_0=2.1445$ ，基于连续介质假定的理论预测方法在过渡区难以适用，而拟和修正方法也必将随着轴承尺寸的进一步减小使其应用受到限制，此时基于分子运动的 DSMC 方法是唯一可靠的方法。

6.1.3.2 轴承性能分析

使用 DSMC 方法, 对不同构型的微气体滑动轴承, 以及轴承在不同的速度、压力及温度条件下的流动情况进行了模拟, 对轴承内的压力分布及负载能力随外界条件的变化规律作了系统的研究。共选取了 10 个算例, 其几何构型及边界条件参数如表 6-1 所示, 出口宽度 h_0 的变化范围为 15nm 到 500nm, 滑动速度 U 从 30m/s 变化到 300m/s, 环境压力 p_0 从 1×10^4 Pa 到 1×10^6 Pa, 壁温 T_w 从 300K 变化到 500K。其他公用参数有: 轴承计算的总长度 $L=5 \mu\text{m}$, 出入口宽度比 $h_0:h(x=0)=1:2$, 来流气体温度为 $T_0=300\text{K}$, 气体为氮气, 其分子参数参考文献[74]。所有的算例都在 P IV 2.0G Hz 的 PC 机上运行, 所有算例的耗时都在 100 小时以上。

表6-1 算例几何构型及边界条件参数表

算例编号	h_0 (nm)	U (m/s)	p_0 (Pa)	T_w (K)
0	15	30	1×10^5	300
1	25	30	1×10^5	300
2	50	30	1×10^5	300
3	500	30	1×10^5	300
4	500	100	1×10^5	300
5	500	300	1×10^5	300
6	25	30	1×10^5	400
7	25	30	1×10^5	500
8	25	30	1×10^4	300
9	25	30	1×10^6	300

算例 1-3 对比了不同尺寸的微气体滑动轴承。具体的模拟参数参见表 6-2, 其中 Kn_0 为出口努森数, Λ 为轴承数, w 为压力负载系数, P_{Peak} 为压力峰值。所有模拟的采样次数为 10^6 。

表6-2 不同尺寸的轴承算例

Cases	h_0 (nm)	Kn_0	Λ	P_{Peak}	w
0	15	3.5742	710.28	1.5823	0.2934
1	25	2.1445	255.7	1.4543	0.2477
2	50	1.1223	63.925	1.2723	0.1611
3	500	0.1122	0.6393	1.0153	0.0090

图 6-4 显示了三种构型轴承的压力分布。从图 6-4 和表 6-2 中可以看出，轴承的几何参数对轴承的性能影响很大。对比算例 1 和算例 2，当出口的几何尺寸增大一倍，轴承的压力峰值降低了 12.51%，轴承的承载能力降低了 34.98%。对于算例 3，由于轴承数 Λ 太小，几乎没有什么承载能力。

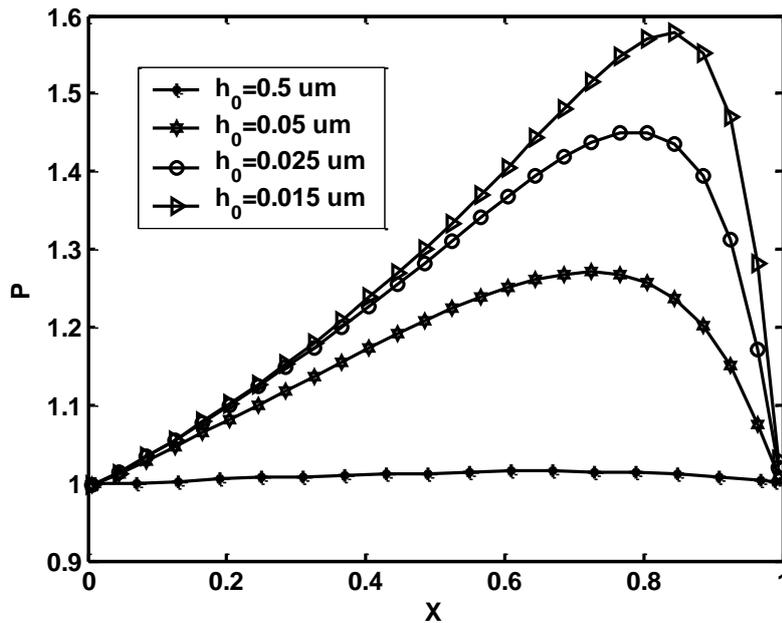


图 6-4 构型不同的轴承压力分布

算例 3-5 研究了不同滑动速度对微气体滑动轴承性能的影响。具体的模拟参数参见表 6-3。三个算例的出口努森数 Kn_0 都为 0.1122，网格划分都为 50×50 (子网格为 4×4) 的均匀矩形网格。

表6-3 不同滑动速度的轴承算例

Cases	U (m/s)	Λ	P_{Peak}	w
3	30	0.6393	1.0153	0.0090
4	100	2.1308	1.0542	0.0325
5	300	6.3925	1.1698	0.0931

图 6-5 显示了三个不同滑动速度条件下轴承的压力分布。从图 6-4 和表 6-3 中可以看出，滑块的滑动速度对轴承的性能影响也是很大的。对比算例 4 和算例 5，滑动速度增大三倍，轴承的承载能力相应的增大了 2.868 倍，因此，增大滑动速度可以以提高轴承的承载能力。

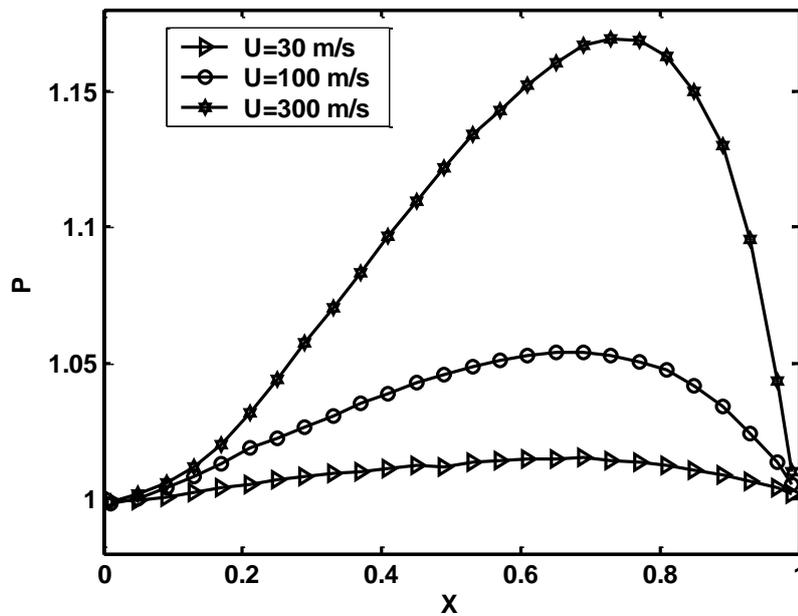


图 6-5 不同滑动速度的轴承压力分布

上述计算结果表明：轴承的构型和滑动速度对气体轴承性能的影响非常大，这一结论同样可以通过 Reynolds 方程的理论分析得到，而且与其他研究者的结论一致。但通常在实际应用中，轴承的构型和滑动速度可调整的范围是有限的，甚至是不可变的。当轴承的构型和滑动速度不可变时，还要考虑轴承通道的壁温以及环境压力对轴承性能的影响，这一点通过理论分析是难以确定的。

算例 1、6 和 7 对比了不同壁温对气体滑动轴承性能的影响。模拟参数参见表 6-4，其中氮气的动力粘度是根据随温度的 0.72 幂率计算得到，网格划分都为 100×50 (子网格为 8×2) 的均匀矩形网格。

表6-4 不同壁温的轴承算例

Cases	T_w (K)	Λ	P_{Peak}	w
1	300	255.7	1.4543	0.2477
6	400	316.4	1.4882	0.2956
7	500	373.2	1.5039	0.3239

图 6-5 显示了三种不同壁温下轴承的压力分布。从图 6-6 和表 6-4 中可以看出，轴承的性能随壁温的增大而略有提高。虽然相对于轴承构型和滑动速度来说，壁温对轴承的峰值压力影响较小，但对轴承承载能力的影响较大。对所涉及三个算例，壁面温度从 300 K 升高到 500 K，峰值压力分别提高了 2.33% 和 3.41%，但承载能力却分别提高了 19.34% 和 30.76%。另外，轴承内气体的压力分布在峰值之前受壁温的影响较大，而在峰值之后几乎不再受壁温的影响，不同情况的压力分布趋于统一。

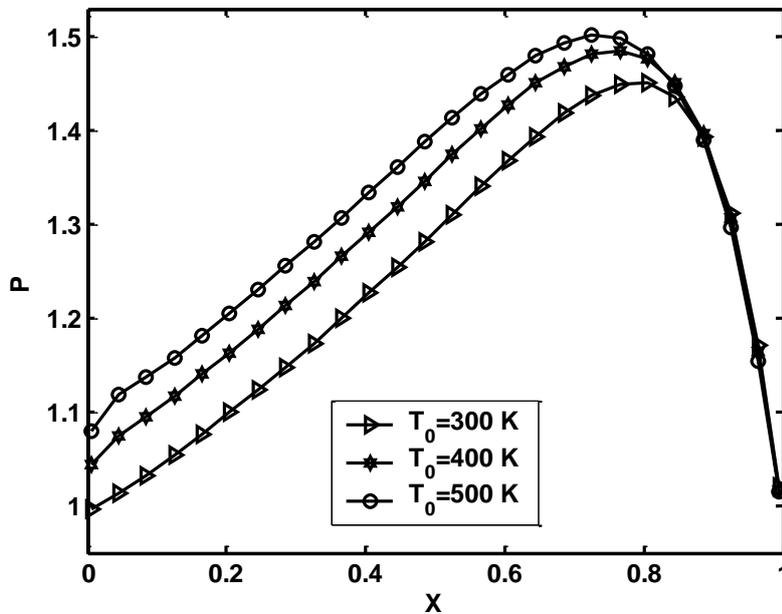


图 6-6 不同壁温的轴承压力分布

算例 1、8 和 9 研究了环境压力对轴承性能的影响。模拟参数如表 6-5 所示。由于缺乏气体粘度随压力的变化关系，无法具体给出轴承数 Λ 的数值。

表6-5 不同环境压力的轴承算例

Cases	p_0 (Pa)	P_{Peak}	w
1	1×10^5	1.4543	0.2477
8	1×10^4	1.3781	0.2154
9	1×10^6	1.4351	0.2368

图 6-6 显示了三种不同环境压力下轴承的压力分布。从图 6-7 和表 6-5 可以看出，轴承的性能随环境压力的变化而有所不同，对于所比较的三个算例，峰值压力之间的最大差异略大于 5%，而承载能力的差异则大于 15%。由此可见，环境压力也是研究微气体轴承的一个比较重要的因素。相对于前面的几个因素，其影响较小，在压力变化不是很大时可以忽略。

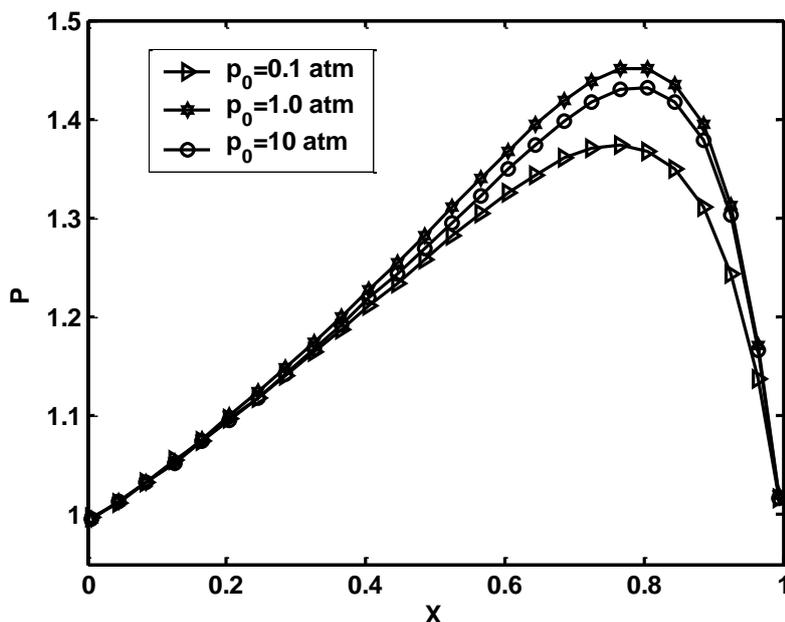


图 6-7 不同环境压力下的轴承压力分布

综上所述，可以得到如下结果：轴承的几何构型和滑动速度对轴承的性能影响很大，对于相同长度的轴承，气体的峰值压力与轴承的承载能力随轴承出

口尺寸的减小和滑动速度的增大而增大；当轴承的几何形状和滑动速度无法改变时，通道壁温也是影响轴承性能的重要因素：壁温越高，轴承的承载能力越强；环境压力不同，轴承性能也会有所不同，但当压力变化不大时，其影响可以忽略。

根据所得结果，若要硬盘驱动器快速准确地读取数据，需要读写头在盘面磁道上快速平稳“滑行”，即读写头的受力平衡，由此对硬盘的设计提出以下优化原则或建议：

- ✓ 读写头加工更加精细；
- ✓ 若环境温度升高，需增加读写头上的平衡力，或减小硬盘转速以确保数据准确；

6.2 微型Laval喷管内气体流动换热的模拟与性能分析

6.2.1 研究背景

微小航天器由于体积小，重量轻，成本低，开发、制造和发射周期短，抗毁能力强，应用范围广(特别是在需要巨型动力系统的星级探测领域)，并能利用多种发射方式快速灵活发射等诸多优点，从上个世纪 80 年代后期以来就一直深受各空间技术发达国家的高度重视。有人预测，今后 50 年间微型航天器将占全世界航天器发射总量的 70% 以上，微型航天器技术将成为未来航天高技术竞争的主要热点之一^[36]。

一般来说，推进系统重量占整个航天器重量的比例很高，对于执行星际探测任务的飞行器来说，这一比例高到 50~60% 以上^[197]，因此研制体积小、重量轻、成本低以及性能高的先进推进系统已经成为摆在各国科学家面前的一个重要任务。

微型航天器对其推进系统的设计与性能主要有两个方面的要求：一是比冲大、效率高，增大推进系统的比冲和效率可以在任务一定的情况下尽可能的减小推进器的质量；二是单推力小，对于质量小于 1 kg 的微型卫星来说，维持其飞行轨道所需要的推力在 0.1~10 mN，而当对其进行精确的轨道控制或姿态调整时，推力水平应当保持在 10~100 μ N 之间。为了达到这些要求，Lewis 等^[198,199]提出了“数字化微推进系统”的概念，即使用阵列式的微型喷管组合实现单喷

推力小、组合推力大的要求，由于微型喷管具有天然的比冲大的特点，因此这种“数字化微推进系统”具有很好的应用前景。图 6-8 为 Lewis 等研制的“数字化微推进系统”的示意图。

为了获得如此小的推力，通常采用减小喷管尺寸或减小喷腔温度和压力的办法，这就导致了喷管喉部的雷诺数处于 10 到 500 之间，而且由于加工水平的限制，人们在很长一段时期内都认为在微型喷管内根本无法达到超音速流动。随着 MEMS 等高精加工技术的发展，使得加工小阻力微型喷管成为可能。Bayt^[25]对 MEMS 加工的微型 Laval 喷管的推进性能进行了实验研究，验证了在喉部尺寸小于 100 μm 的微型 Laval 喷管内仍然会出现超音速流动，实验结果还表明，与传统喷管理论和数值模拟结果相比，喷管的比冲效率在雷诺数小于 1000 时严重偏小，传统理论和数值方法在这一条件下不能给出准确预测和分析^[24,25]。

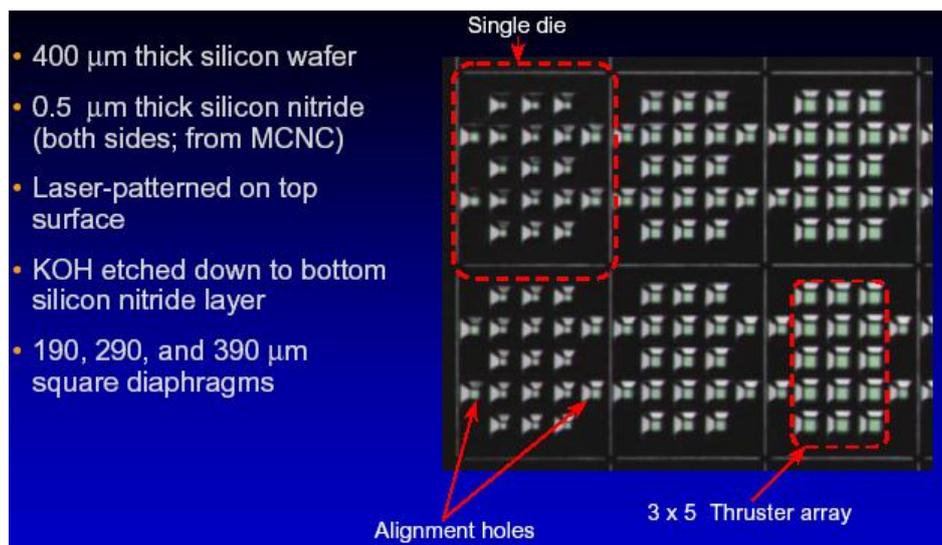


图 6-8 “数字化微推进系统”的示意图^[199]

6.2.2 前人的模拟工作和存在的问题

由于 Laval 喷管内的气体流动通常为跨音速流动，使用标准的 N-S 方程求解器求解会遇到困难，特别是当喉部努森数比较大、通道形状复杂以及出口为真空条件时，基于连续介质假设的 N-S 方程难以给出准确的预测和分析。Bayt^[25]使用经过改进的 N-S 方法对喷管性能的分析表明，即使雷诺数在 1000 附近时，

计算所得到的比冲值也远大于实验测得的实际值。

近几年来,一些学者使用 Bird 的 DSMC 方法或者基于 DSMC 程序的软件(例如 Ivanov 的 SMILE^[200])对微喷管的性能进行了模拟分析,结果表明,对于向真空喷射的微型喷管来说,当气体温度比较高时,得到的模拟结果与实验结果符合较好^[200-202]。

然而,注意到在前人对微喷管的模拟中几乎所有人都使用了 VHS 模型^[203-205](喷腔温度在 300 K 到 1000 K 之间时)或者 VSS 模型^[201,202](喷腔温度在 1000 K 以上时)。而实际情况是,若气体向真空环境喷射,由于气体的膨胀加速作用,当喷腔温度在 500 K 以下时,出口气体的气温会远小于常温(300 K)。通过第二章的介绍可知,VHS 模型和 VSS 模型都只考虑了分子间的排斥力,VHS 模型在常温下以及 VSS 模型在中、高温下尚可得到与实验结果相吻合的模拟结果,但对于低温气体流动,由于分子间的吸引力不可忽略,因此必须引入广义分子碰撞模型,如 GHS 模型^[97]或 GSS 模型^[101]。

6.2.3 模型的选取与验证

本文选取了樊菁的广义软球(GSS)分子碰撞模型,其具体描述参见 2.1.3 节,其中的模型参数为 $\alpha_1=3.962$, $\alpha_2=4.558$, $\omega_1=0.133$, $\omega_2=1.25$ 以及 $\alpha^*=1.5$ 。内能转换模型选取了 Hash 等^[98]引入的 Larsen-Borgnakke 模型,详细介绍可参见本文的 4.3.3 节。

在使用新模型对喷管的性能进行分析之前,首先需要对新模型引入的必要性加以验证。如图 6-9 所示的微型 Laval 喷管,其喉部尺寸为 20 μm ,扩张比为 3.8,其形状尺寸来源于实际测量^[36]。考察当入口压力为一个大气压、出口为真空条件、进口气温和壁面温度都为 300 K 的流动情况,气体为氮气,壁面边界采用漫反射条件。为了减少计算量,只对图 6-9 所示的计算区域的一半进行了模拟,在中心线上采用对称边界条件。网格划分和时间步长的选取满足第二章中所限定的条件。

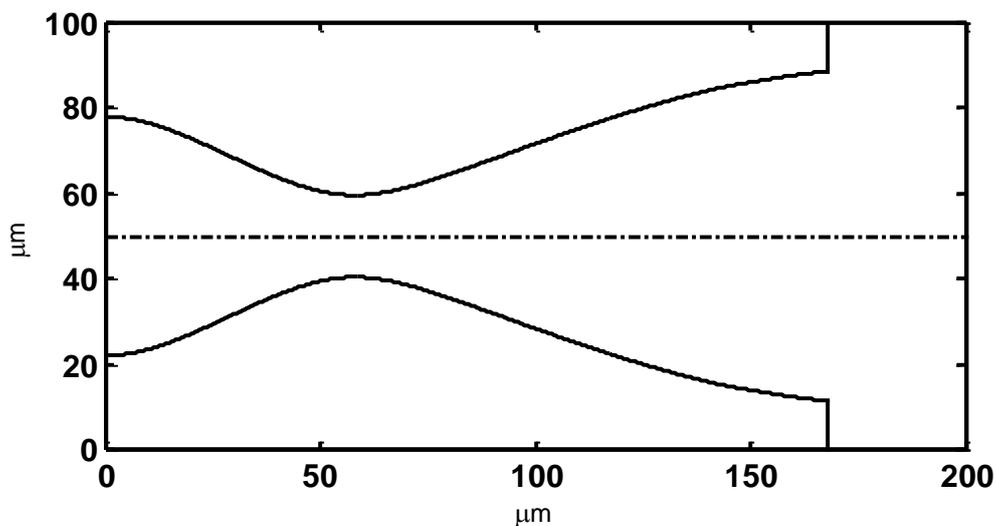


图 6-9 喉部尺寸为 20 μm 、扩张比为 3.8 的微型 Laval 喷管

图 6-10 所示为 GSS 模型与 VSS 模型对喷管中心线上的平动温度分布的模拟结果对比。图 6-11 则显示了两种模型得到的整体温度的分布。

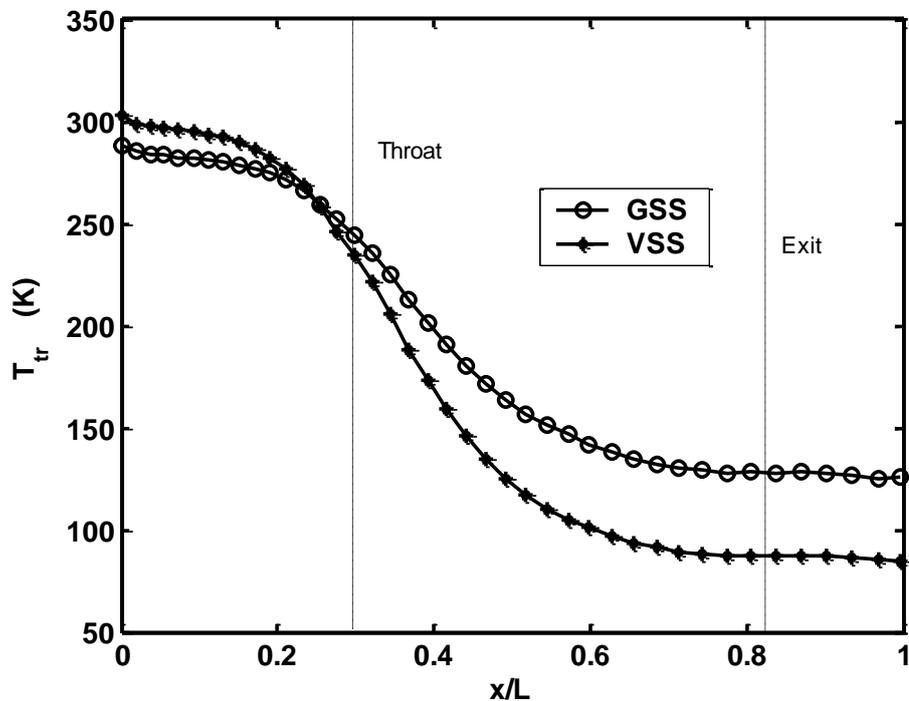


图 6-10 两种模型模拟所得的平动温度分布

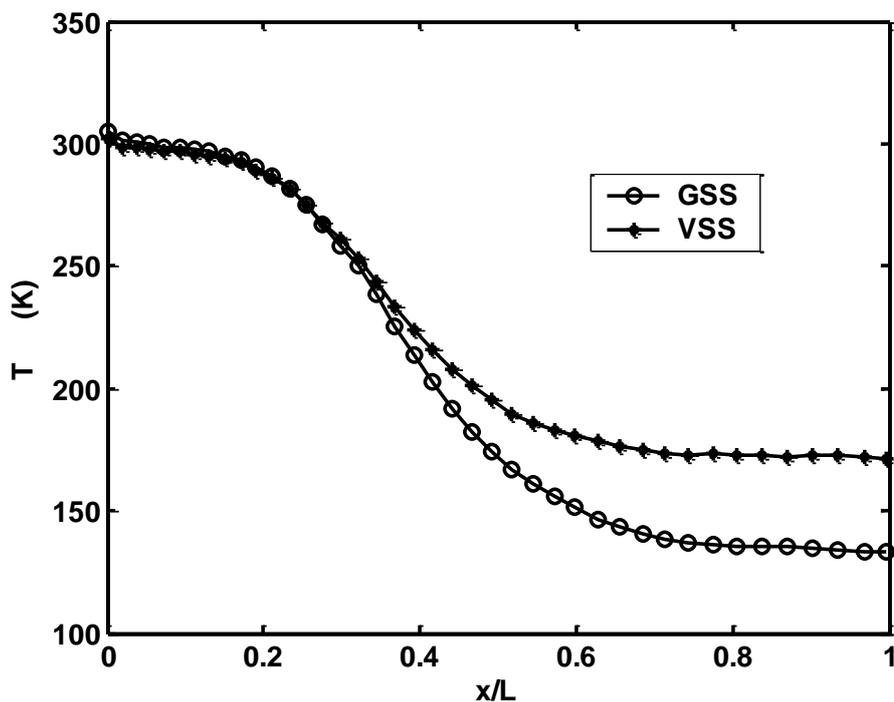


图 6-11 两种模型模拟所得的温度分布

从图 6-10 和图 6-11 可以看出：一、对于入口温度为 300 K 的情况，出口温度的确远小于常温；二、当考虑了由于低温造成的分子间吸引势不可忽略的情况后，模拟结果与不考虑低温影响的情况相比差距很大，这表明，在这种情况下分子间的吸引势不可忽略。

微喷管中心线上的马赫数分布如图 6-12 所示，喷管喉部的努森数小于 0.009，因此图中同时对使用了可压缩性 N-S 方程计算所得到的结果(Fluent 6.0 软件实现)。可以看出，GSS 模型的 DSMC 与 N-S 方程的模拟结果符合较好，而 VSS 模型的模拟结果在喉部下游与前两者偏离，从而验证了使用 GSS 模型的合理性。

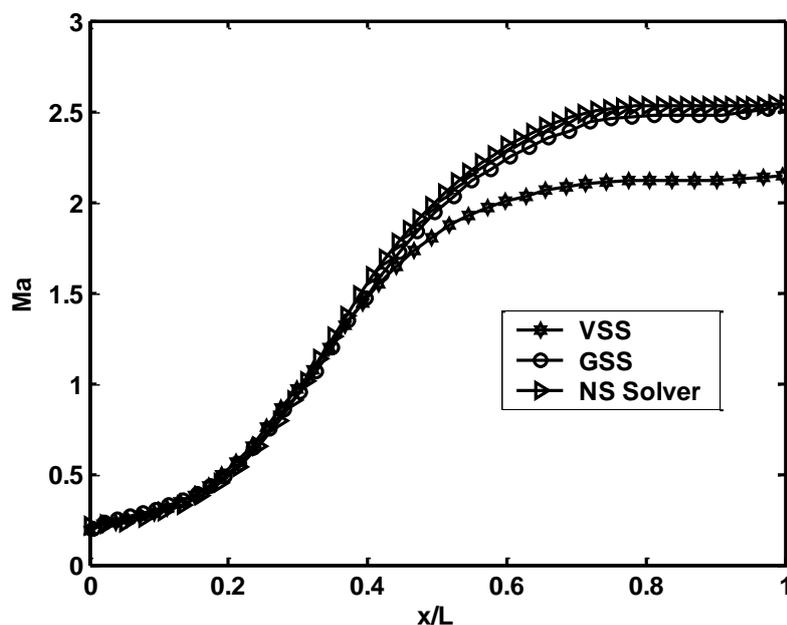


图 6-12 不同方法模拟所得喷管中心线上马赫数分布($Kn_{th} < 0.009$)

6.2.4 模拟结果与分析

分别对入口压力从 1 atm 变化到 3 atm, 出口压力从 0.5 atm 变化到真空条件, 来流气温变化从 300 K 到 1000 K, 出口段膨胀比从 1.5 变化到 3.8, 喉部尺寸从 $4 \mu\text{m}$ 变化到 $20 \mu\text{m}$, 气体种类分别为 N_2 , O_2 , CO_2 以及 H_2 的算例进行了模拟分析。所有的模拟都在 Pentium III 550 MHz 的处理器上运行, 总的采样数都大于 10^5 , 计算耗时都在 100 小时以上。

本节中的模拟若没有特别说明, 则认为通常的“标准计算条件”为: 入口压力 1 atm, 出口压力为真空条件, 来流气温 300 K, 入口段膨胀比为 3.8, 喉部尺寸为 $20 \mu\text{m}$, 气体为氮气, 喷管构型如图 6-9 所示。

6.2.4.1 出口压力的影响

出口的压力对喷管内的气体流动有非常大的影响。一维理想 Laval 喷管的理论分析表明, 只要喷管背压比小于 0.528 喷管喉部下游就会出现超音速流动。当考虑到粘性的影响, 对喷管的二维分析表明, 出现超音速流动的背压临界值应该在 0.2 附近。

对入口压力保持 1 atm, 出口压力从 0.5 atm 变化到真空状态的 4 个流态进

行了模拟。喷管内的马赫数等值图如图 6-13 所示。

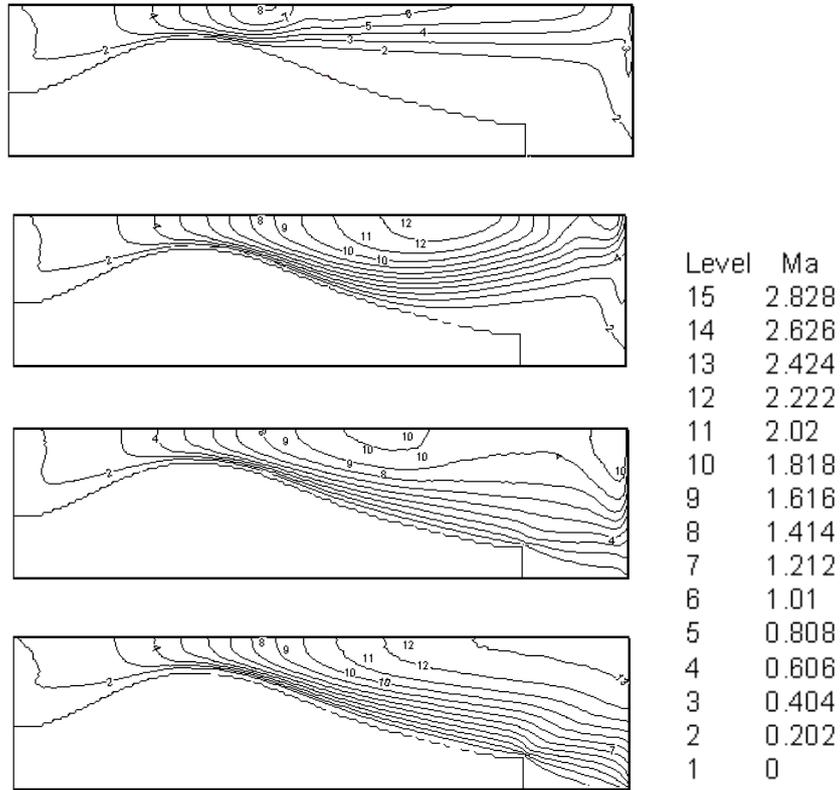


图 6-13 马赫数等值图 (出口压强分别为 0.5 atm、0.2 atm、0.1 atm 和真空)

图 6-13 可以说明三个问题：一、音速点的位置并非如一维分析中所述恰好在喷管的喉部，而是在喉部下游的某一位置，其原因主要在于粘性的作用；二、当出口背压比略小于 0.528 而大于 0.2 时，喉部下游确实出现了超音速区，但在很小的范围内耗散掉，流动又回到亚音速，因此出现了所谓的“超音速环”现象；三、当出口背压比远小于 0.2，出口为超音速流，若出口为真空条件，则出口速度达到最大，但此时的出口压力由于膨胀波的存在不会为零。这些现象与传统方法预测结果在定性上差别不大，而存在定量差别。

出口压力对喷管性能的影响是非常大的。图 6-14 显示了喷管的比冲和推力随背压比的变化曲线。可以看出，喷管的比冲和推力都随背压比的增大而减小。当背压比大于 0.2 时，喷管性能随之变化趋于平缓；而当背压比在 0 和 0.1 之间变化时，这种变化则比较剧烈。这表明，若在实验中存在丝毫的真空泄漏现象，

都会导致喷管的性能严重低于理论预测值。

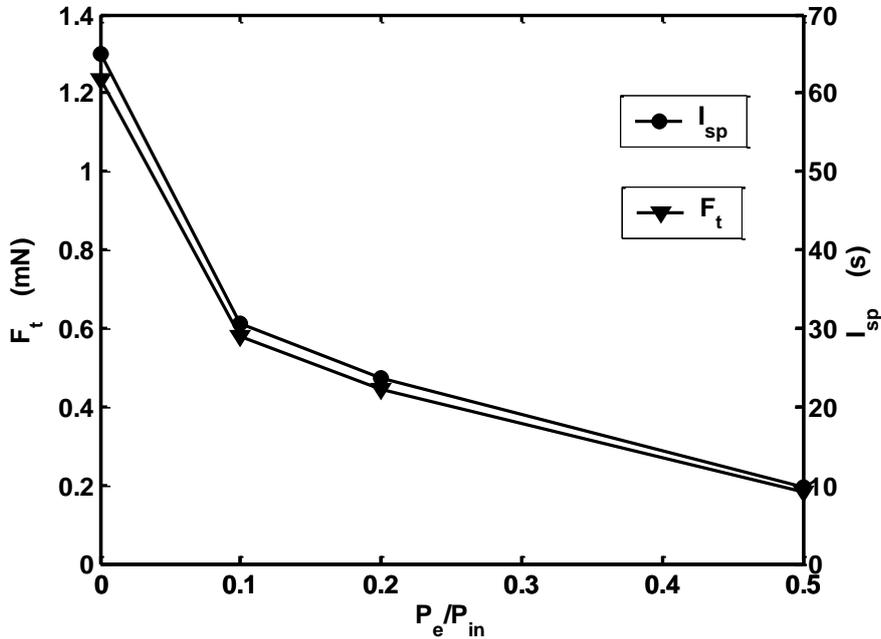


图 6-14 喷管的比冲和推力随背压比的变化

6.2.4.2 入口压力的影响

保持出口为真空条件，入口压力从 1 atm 变化到 3 atm，其他条件与标准计算条件相同。表 6-6 显示了不同入口压力条件的流动特性和喷管性能。其中雷诺数是根据喉部截面的流场平均值计算得到。可以看出，喷管的推力几乎与入口压力成正比，而比冲几乎不受入口压力的影响。

表6-6 不同入口压力下的喷管性能

P_0	Re_{th}	F_t (mN)	I_{sp} (s)
1 atm	128.06	2.47	64.99
2 atm	258.05	5.00	65.43
3 atm	387.52	7.52	65.54

不同入口压力时喷管的压力沿程分布是不同的，但当都用入口压力作无量纲处理之后可以发现统一的规律。图 6-15 显示了喷管中心线上的无量纲化压力沿程分布，可以看出无量纲化的压力分布与入口压力的大小无关，应该只与喷

管的通道特性有关。对于图 6-9 所示构型喷管来说,无量纲化出口压力约为 0.04。

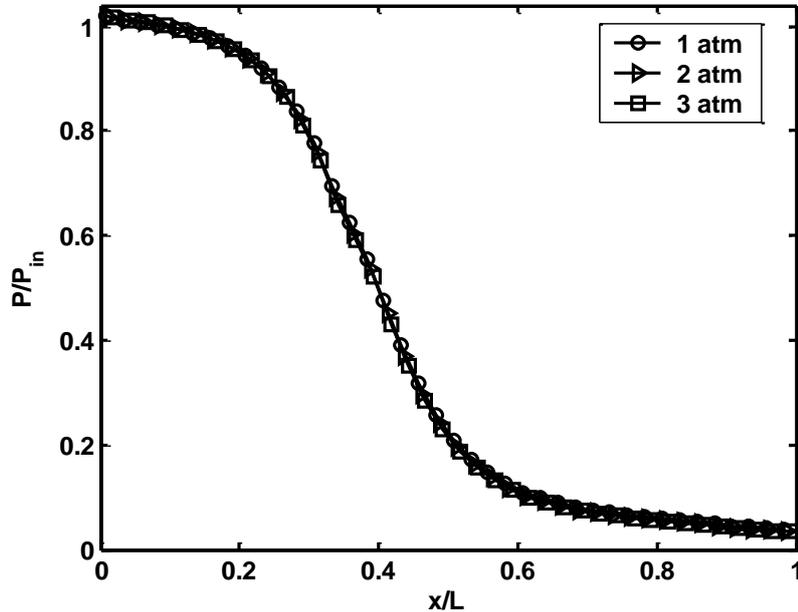


图 6-15 入口压力不同时的沿程无量化压力分布

6.2.4.3 入口温度的影响

温度对喷管性能的影响也很大,这在近两年来对高温喷管性能分析的文献中也有报道^[201]。本文对不同入口温度的喷管进行了模拟分析,并设来流气温和通道壁温相同。表 6-7 列出了不同入口温度条件下的流动特性和喷管性能。

表6-7 入口温度不同时的喷管性能

T	Re_{th}	F_t (mN)	I_{sp} (s)
300 K	128.06	2.47	64.99
400 K	88.72	2.43	74.58
600 K	52.42	2.35	90.22
1000 K	26.52	2.21	113.93

可以看出,喷管的比冲几乎随温度的增大成线性关系增大,而推力则相应的减小,但减小的幅度要小得多。当温度从 300 K 增大到 400 K 时,比冲增大了 14.67%,而推力减小了 1.43%。

6.2.4.4 通道构型的影响

喷管的构型主要包括三个主要因素：喉部尺寸、膨胀比和通道形状。对图 6-9 所示的通道，若上下壁面平移使得喉部的尺寸可以变化，考察喉部尺寸从 $20\ \mu\text{m}$ 变化到 $4\ \mu\text{m}$ 时喉部尺寸对喷管性能的影响。图 6-16 所示为不同喉部尺寸的喷管中心线上的沿程速度分布，图 6-17 则显示了喷管中心线上的无量纲压力分布，喉部尺寸变化对喷管性能的影响见表 6-8。可以看出，喉部尺寸的减小导致了流动雷诺数的减小，从而导致了喷管推力的下降，而喷管的比冲随喉部尺寸的变化较小。

表6-8 不同喉部尺寸的流动特性和喷管性能

D_t	扩张比	Re_{th}	F_t (mN)	I_{sp} (s)
$20\ \mu\text{m}$	3.8	128.06	2.47	64.99
$10\ \mu\text{m}$	6.6	60.27	1.05	64.53
$4\ \mu\text{m}$	15	14.22	0.28	61.10

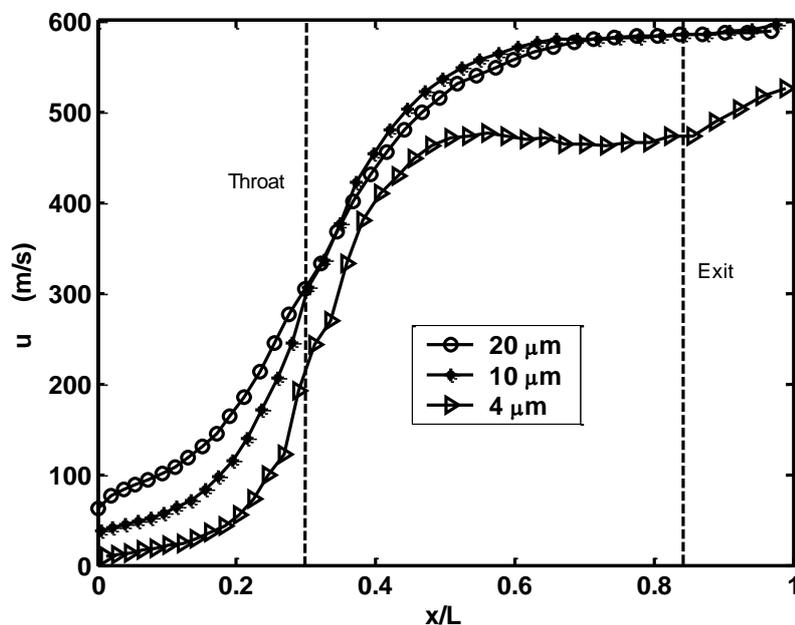


图 6-16 不同喉部尺寸喷管中心线上的速度分布

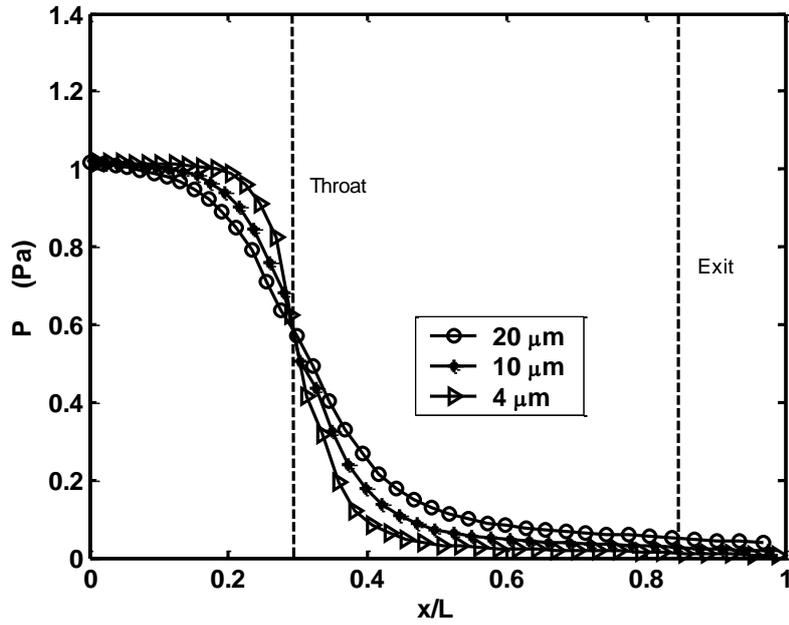
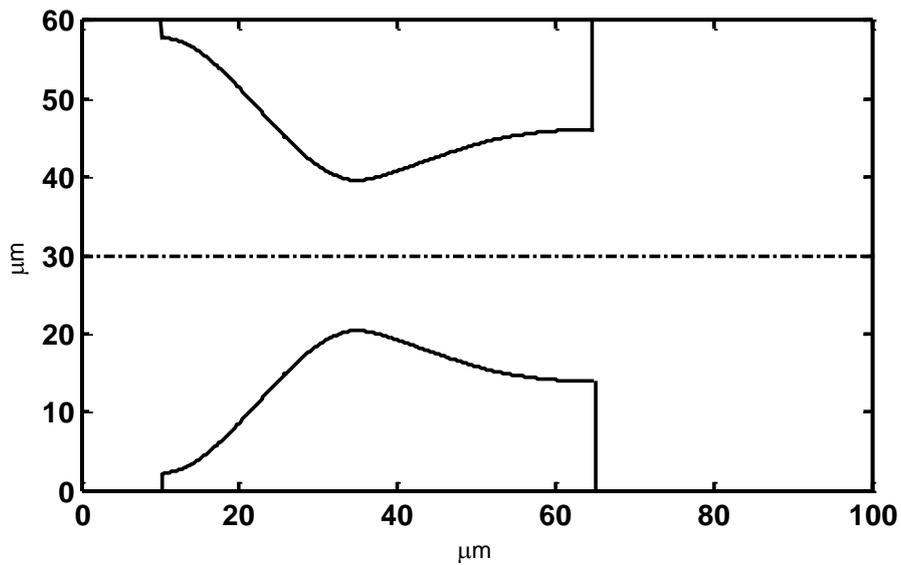
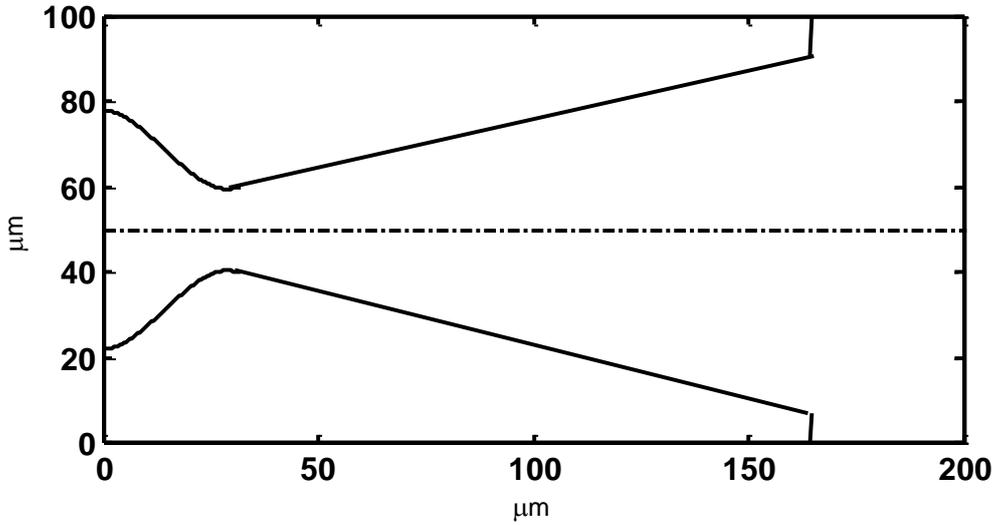


图 6-17 喷管中心线上的压力分布

为了研究喷管通道形状和膨胀比对喷管性能的影响，对比研究了三种不同构型的喷管，如图 6-9 和图 6-18 所示。图 6-18 所示的两种喷管的喉部尺寸与图 6-9 的喷管一致，都为 $20\ \mu\text{m}$ 。其中喷管 a 的膨胀比为 1.5，喷管 b 的膨胀比与图 6-9 的喷管相同，但其通道形状有所不同。



(a)



(b)

图 6-18 两种新型的喷管

表 6-9 对比了三种喷管在标准计算条件下的喷管性能，其中 Geometry1 表示图 6-9 的喷管，Geometry2 表示图 6-18(a)所示的喷管，Geometry3 表示图 6-18(b)所示的喷管。计算所得的沿喷管中心线上的压力和马赫数分布如图 6-19 和图 6-20 所示。结果表明：在喉部尺寸一定的情况下，通道的形状和膨胀比对流动的影响很大，而对喷管的性能影响很小。

表6-9 不同通道形状的喷管性能

Geometry	Re_{th}	F_t (mN)	I_{sp} (s)
1	128.06	2.47	64.99
2	354.34	2.53	63.14
3	159.29	2.60	64.59

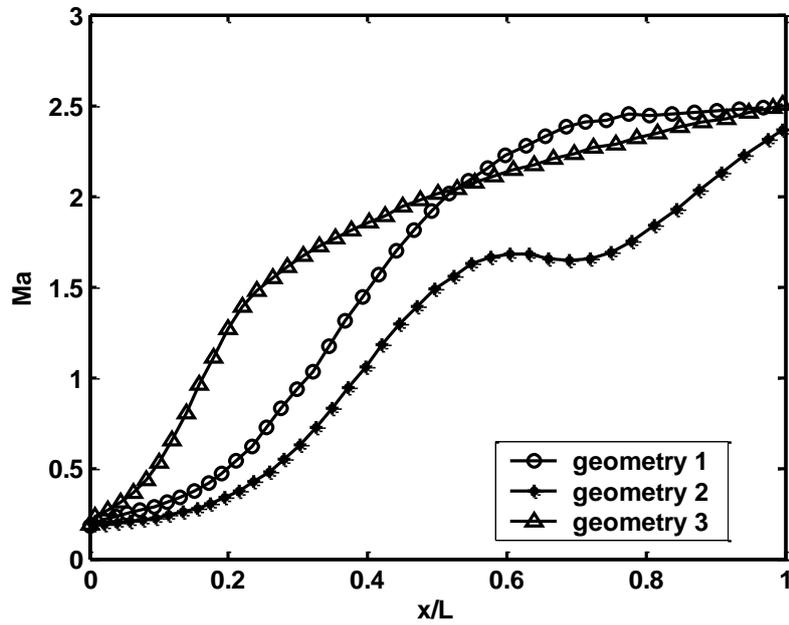


图 6-19 不同通道形状的喷管沿中心线上的速度分布

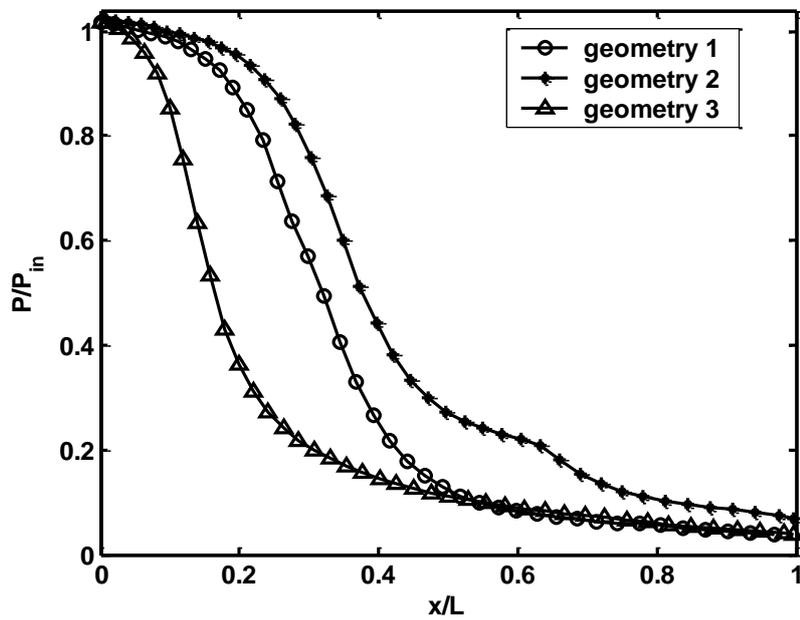


图 6-20 不同通道形状的喷管沿中心线上的压力

6.2.4.5 气体种类的影响

考察气体种类对喷管性能的影响对将来微小卫星用的推进器选择最佳的工作介质来说具有重要意义。这里选择了四种不同的气体，氮气、氧气、二氧化碳和氢气。由于对除氮气之外的其他气体，GSS模型所需要的几个重要参数尚不确定，这里使用VSS模型进行了模拟。为了尽量减小模型引入的误差，特提高了来流气温和壁温为400 K，其他条件与“标准计算条件”一致。计算的结果如表6-10所示。从计算结果中可以看出，气体越轻，比冲越大，而推力越小。这一特性与微推进系统的要求完全符合，因此在设计推进系统时可以考虑尽量选取分子量较小的气体作为工质。

表6-10 不同种类工质的喷管性能

气体种类	Re_{th}	F_t (mN)	I_{sp} (s)
N_2	92.79	2.58	75.27
O_2	84.94	2.58	70.35
CO_2	132.59	2.68	61.49
H_2	47.70	2.44	275.56

综上所述，通过对微尺度Laval喷管内气体流动和喷管性能进行了系统详细的分析，可以总结出以下结论：

对于向真空喷射、来流气温和壁温小于500 K的Laval喷管，由于喉部下游膨胀降温，使用传统的VHS或VSS模型会带来较大的计算误差，需要使用考虑到分子间吸引势的GSS模型进行模拟。

对二维喷管的模拟研究表明：出口压力对喷管的性能影响很大，出口压力越低，这种影响就越大，并且喷管的推力和比冲随出口相对压力的增大而减小；喷管的推力与入口压力近似成正比关系，但比冲受入口压力的影响很小；工作温度越高，比冲越大而推力越小；当喉部尺寸一定，喷管的形状对其性能的影响是有限的；若喷管形状给定，喉部尺寸对喷管推力的影响很大，而对比冲的影响比较小；对不同种类的气体研究表明，其他条件相同时，分子量较小的气体产生的推力较小，但比冲比较大。

根据所得结果，针对微喷管比冲大和单推力小的设计要求，提出以下优化

设计的建议:

- ✓ 减小入口压力;
- ✓ 提高入口温度;
- ✓ 在加工条件允许的情况下减小喉部尺寸;
- ✓ 尽量使用分子量小的气体作工质。

6.3 小结

1. 将硬盘驱动器中读写头和盘面磁道之间形成的气体夹层简化为气体滑动轴承, 采用 DSMC 方法研究了各种参数对轴承性能的影响, 结果表明: 轴承的几何构型和滑动速度对轴承的承载能力影响很大, 对于相同长度的轴承, 峰值压力与承载能力随轴承出口尺寸的减小和滑动速度的增大而增大; 当轴承的几何形状和滑动速度无法改变时, 通道壁温和环境压力也是影响轴承性能的重要因素: 壁温越高, 轴承的承载能力越强; 环境压力不同, 轴承性能也会有所不同。因此在设计中, 需尽可能地提高读写头的加工精度; 若环境温度升高, 需增加读写头上的平衡力, 或减小硬盘转速以确保数据准确; 若环境压力发生剧烈变化, 读写头上的平衡力需重新设计。
2. 采用 DSMC 方法模拟研究了应用在微小卫星推进系统中的微型 Laval 喷管内的气体流动和换热, 分析了外界条件对喷管推力和比冲的影响。指出当入口气温低于 500 K 且气体向真空环境喷射时, 分子间的吸引势对流动的影响不可忽略, 需选择合适的分子间碰撞模型(如 GSS 模型)进行模拟。使用 DSMC 方法对微喷管的模拟结果表明: 当出口压力较小时($P_{out}/P_{in}<0.5$), 微型 Laval 喷管在扩张段会出现超音速流动, 但由于粘性耗散的作用, 音速点并非出现在喉部, 而是在喉部的下游, 若出口压力尚未接近真空(如 $P_{out}/P_{in}>0.1$), 喉部下游还会出现明显的“超音速环”现象。对于向真空环境喷射的喷管, 喷管的推力与入口压力近似成正比关系, 但比冲受入口压力的影响很小; 工作温度越高, 比冲越大而推力越小; 当喉部尺寸一定, 喷管的形状对其性能的影响较小; 若喷管形状给定, 喉部尺寸对喷管推力的影响很大, 而对比冲的影响比较小; 分子量较小的气体所产生的比冲大, 且推力小。针对微喷管比冲大和单推力小的设计要求, 可以减小入口压力, 或提高入口温度, 或在加工

条件允许的情况下减小喉部尺寸，或尽量使用分子量小的气体作工质。

第七章 结论与展望

7.1 主要结论

采用基于分子运动和统计规律的 Monte Carlo 模拟方法,并结合必要的理论分析对微纳尺度气体流动和换热进行了研究,主要结论包括:

1. 从两方面改进和完善了 Bird 的标准 DSMC 程序:提出了进出口压力边界处理的新方法,使收敛速度明显提高;给出了非直通道进出口边界的处理方法,使 DSMC 适用于转角流动的模拟。
2. 分析确定了微尺度气体流动和稀薄气体流动的相似性条件:除满足几何形状和边界条件相似、两个同名准则数 Kn 和 Ma (或 Kn 和 Re, 或 Ma 和 Re) 相等的条件外,气体还必须满足热完全气体假设。并进行了数值验证。由此可以推断,只要满足相似性条件,稀薄气体流动的结论适用于微气体流动,微尺度气体流动的实验也可以在放大的模型中进行。
3. 在分析并指出原有模拟高努森数微纳尺度稠密气体流动的算法(CBA, ESMC)存在缺陷的基础上,提出了基于 Enskog 方程的广义 Enskog 蒙特卡洛法(GEMC)。该方法引入了广义分子碰撞模型,考虑了气体稠密效应对分子间碰撞率的强化,还引入了考虑到分子间吸引势的内能转化模型。与其它方法相比,该方法对输运系数的计算结果与实验数据符合得最好。用 GEMC 对微纳尺度稠密气体在通道内的流动模拟结果表明, van der Waals 效应使得气体流动的通道壁面阻力系数减小。
4. 在前人工作的基础上,提出了基于 BGK 方程的驰豫时间 Monte Carlo 法(RTMC)。该方法在近连续区的计算效率高于 DSMC 方法。RTMC 的提出为在同一系统中存在不同流区的流动实现全粒子耦合模拟作了有益的探索。
5. 使用 DSMC 方法对微气体轴承和微型 Laval 喷管内的气体流动和换热进行了模拟分析,结果表明:对于相同长度的轴承,峰值压力与承载能力随轴承出口尺寸的减小或滑动速度的增大而增大;当轴承的几何形状和滑动速度无法改变时,通道壁温也是影响轴承性能的重要因素,壁温越高,轴承的承载能力越强。微型 Laval 喷管中同样可产生超音速流动,但音速不是出现在喉部,

而是在喉部下游；根据进出口压比的不同，扩张段可出现超音速环。对于向真空喷射的跨声速、跨流区的微型 Laval 喷管，喷管的推力与入口压力近似成正比关系，但比冲受入口压力的影响很小；入口温度越高或气体越轻，比冲越大而推力越小。

7.2 下一步工作的展望

1. 从理论上讲，本文发展的 Monte Carlo 方法已经可以适用于绝大多数稀薄气体和微纳尺度气体的流动和换热问题的模拟研究，但由于基于随机-统计原理的 Monte Carlo 方法本身的固有特点，若要真正的应用于实践，计算量是一个亟待解决的问题。为解决这一问题，需要做的工作有：

(a) 并行计算

不论标准的 DSMC，还是本文发展的几种 Monte Carlo 方法，均具有非常好的负载均匀性，即这些方法非常适于并行化（笔者曾经对这一特点进行过验证，但由于时间的关系未能对并行化做深入的工作）。因此，程序的并行化是使用本文发展和开发的算法程序模拟真实流动工况的基础。

(b) 耦合求解

正如第五章中所分析的，对于某些特殊的复杂流动，并非单靠增加计算量就能对其实现准确模拟的，例如跨流区的流动等。此时，解决问题的方法之一是多方法(多尺度)耦合求解。从前人的工作来看，全粒子耦合求解是耦合效果最好的方法，本文已经对近连续区的流动开发了相应算法并作了验证，为下一步的耦合求解打下了基础。

2. 另一个值得注意的问题是气体与壁面间的相互作用问题，这也是目前国际上的一个热点问题。尽管漫反射模型满足大多数常规流况下的壁面边界处理，但随着通道尺寸进一步减小或气体密度的增大，漫反射模型略显粗糙。引入更为精确的壁面反射模型是下一步需要解决的重要问题。

3. 最后需要指出的是，微纳尺度气体流动和换热的研究方兴未艾，很多研究尚处在积累阶段，对其内部物理机制的探讨需假以时日，目前尚无定论。本文也只是做了些许基础性的工作，后来者若能在本文的基础上作进一步深入的研究，应该能为人类对微纳尺度气体流动和换热的机理有更为清晰的认识提供

帮助。

参考文献

- [1] 李志坚. 微电子机械系统 (MEMS) 发展展望. 香山会议'99. 1999
- [2] 王立鼎, 刘冲. 微机电系统科学与技术发展趋势. 大连理工大学学报. 2000, 40: 508-511
- [3] 周兆英, 杨兴. 微/纳机电系统. 仪表技术与传感器. 2003, (2): 1-5
- [4] 白春礼. 纳米科技及其发展前景. 微纳电子技术. 2002, 38(1): 2-5
- [5] Feynman R P. There's Plenty of Room at the Bottom. Miniaturization. Edited by Gilbert H D. Reinhold Publishing, New York. 1961, pp. 282-296
- [6] Hsu T R. MEMS & microsystems : design and manufacture Boston: McGraw-Hill, 2002
- [7] 白春礼. 全面理解纳米科技内涵 促进纳米科技在我国的健康发展. 微纳电子技术. 2003, 39(1): 1-3
- [8] Ho C M and Tai Y C. Micro-Electro-Mechanical-Systems (MEMS) and Fluid Flows. Annu. Rev. Fluid Mech. 1998, 30: 579-612
- [9] 王沫然, 李志信. 热科学及其在 MEMS 中的应用. 仪表技术与传感器. 2002, (7): 1~4
- [10] 王沫然, 李志信. 基于 MEMS 的微流体机械研究进展. 流体机械. 2002, 30(4): 23-28
- [11] 林鸿溢. 纳米科学技术的新进展. 电子商务. 1998, (7): 2-6
- [12] 冯晓利. 纳米薄膜晶格热导率的分子动力学模拟研究. [博士学位论文]. 北京: 清华大学工程力学系, 2001
- [13] 丁衡高. 在第六届全国微米纳米技术学术大会开幕式上的讲话. 微纳米电子技术. 2003, 40(10): 1-4
- [14] Fennimore A M, Yuzvinsky T D, Han W Q, et al. Rotational actuators based on carbon nanotubes. Nature. 2003, 424: 408-410
- [15] Yamazaki K, and Namatsu H. Three-Dimensional Nanofabrication (3D-NANO) Down to 10-nm Order Using Electron-Beam Lithography. In: IEEE MEMS2004, Maastricht, The Netherlands, 2004, 609-612
- [16] <http://www.minatec.com/minatec2003/us/index.htm>
- [17] Gad-el-Hak M. The Fluid Mechanics of Microdevices—The Freeman Scholar Lecture. J. Fluid Engin. 1999, 121: 5-33
- [18] Guo Z Y and Li Z X. Size effect on microscale single-phase flow and heat transfer. International J. Heat Mass Transfer. 2003, 46: 149-159

- [19] Guo Z Y, and Li Z X Size effect on single-phase channel flow and heat transfer at microscale Int. J. Heat Fluid Flow. 2003, 24(3): 284-298
- [20] Karniadakis G E and Beskok A. Micro Flows: Fundamentals and Simulation. New York: Springer. 2002
- [21] 过增元. 国际传热研究前沿——微细尺度传热. 力学进展. 2000, 30: 1-6
- [22] 杜东兴. 可压缩性及粗糙度对微细管内流动及换热特性的影响. [博士学位论文]. 北京: 清华大学工程力学系, 2000
- [23] Epstein A H, Senturia S D, Midani O A, and et al. Micro-Heat Engines, Gas Turbines, and Rocket Engines —The MIT Microengine Project. 1997, AIAA Paper 97-1773.
- [24] Janson S W, Helvajian H, and Breuer K. MEMS, Microengineering and Aerospace Systems, 1999, AIAA Paper99-3802
- [25] Bayt R L. Analysis, Fabrication and Testing of a MEMS-based Micropropulsion System. [Ph.D Thesis]. Cambridge, MIT. 1999
- [26] Gatzert H H. Rigid disk slider micromachining challenges to meet microtribology needs. Tribology International. 2000, 33: 337-342
- [27] Menon A K. Interface tribology for 100Gb/in² Tribology International. 2000, 33: 299-308
- [28] Honchi M, Kohira H, and Matsumoto M. Numerical simulation of slider dynamics during slider-disk contact. Tribology International. 2003, 36: 235-240
- [29] Alexander F J, Garcia A L and Alder B J. Direct simulation Monte Carlo for thin-film bearings. Phys. Fluids. 1994, 6(12): 3854-3860
- [30] Huang W and Bogoy D B. Three-dimensional direct simulation Monte Carlo method for slider air bearings. Phys. Fluids. 1997, 9(6): 1764-1769
- [31] Liu N and Ng E Y K. The posture effects of a slider air bearing on its performance with a direct simulation Monte Carlo method. J. Micromech. Microengin. 2001, 11: 463-473
- [32] Fukui S and Kaneko R. A Database for Interpolation of Poiseuille Flow Rates for High Knudsen Number Lubrication Problems, J. Tribology, 1990, 112: 78-83
- [33] Knudsen M. Die Gesetze der Molekularströmung und der inneren Reibungsströmung der Gase durch Röhren. Annalen der Physik, 1909, 28: 75-130
- [34] Pong K C, Ho C M, Liu J Q, and Tai Y C. Nonlinear Pressure Distribution in Uniform Microchannels. Application of Microfabrication to Fluid Mechanics, FDRL Vol. 197, ASME, 1994, 51-56
- [35] Arkilic E B. Measurement of the Mass Flow and Tangential Momentum Accommodation Coefficient in Silicon Micromachined Channels. Ph.D Thesis, Cambridge, MIT, 1997

- [36] 唐飞. 一种硅微推进器的理论及实验研究. [博士学位论文]. 北京: 清华大学精密仪器与机械系. 2003
- [37] 丁英涛. 表面效应对微管道中气体流动特性的影响. [博士学位论文]. 北京: 清华大学工程力学系. 2003
- [38] Beskok A. Simulation and Models for Gas Flows in Microgeometries. [Ph. D Thesis]. Princeton University. 1996
- [39] Beskok A, Karniadakis G E, and Trimmer W. Rarefaction and Compressibility Effects in Gas Microflows. *J. Fluids Engin.* 1996, 118: 448-456
- [40] Ivanov M S, and Gimelshein S F. Computational Hypersonic Rarefied Flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.* 1998, 30: 469-505
- [41] Grad H. Asymptotic theory of the Boltzmann equation. In: *Rarefied Gas Dynamics*, 1963, 1: 26-59
- [42] Cercignani C. *The Boltzmann Equation and its Applications*. New York: Springer- Verlag, 1988
- [43] Narasimha R. Collisionless expansion of gases into vacuum. *J. Fluid Mech.*, 1962, 12: 294-308
- [44] Bhatnagar P L, Gross E P, Krook M. Model for collision processes in gas, I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Phys. Rev.* 1954, 94: 511-524
- [45] Macrossan M N. A Particle simulation method for the BGK equation. In: *Rarefied Gas Dynamics Proceedings of the 22nd International Symposium, Sydney, 2000*, edited by T. Bartel and M. Gallis (Am. Inst. Of Phys., New York 2001) 585(1): 426-433
- [46] 李志辉, 张涵信. 稀薄流到连续流的气体运动论统一数值算法初步研究. *空气动力学学报*. 2000, 18(3): 255-263
- [47] Chen S, and Doolen G D. Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.* 1998, 30: 329-364
- [48] Maxwell J C. *Phil. Trans, R. Soc. 1, Appendix*, 1878
- [49] Kennard E H. *Kinetic Theory of Gases*, McGraw-hill, 1938
- [50] Tsien H S. Superaerodynamics, mechanics of rarefied gases. *J. Aeronautical Sci.*, 1946, 13: 653-664
- [51] Zhong X, McCormack R W, and Chapman D R. Stabilization of the Burnett equations and application to high-altitude hypersonic flows, 1991, AIAA paper 91-0770
- [52] Zhong X. On numerical solutions of Burnett equations for hypersonic flow past 2-D circular blunt leading edges in continuum transition regime. 1993, AIAA paper 93-3092

- [53] Zhong X, and Furumoto G. Solutions of Burnett equations for axisymmetric hypersonic flow past spherical blunt bodies. 1994, AIAA paper 94-2055
- [54] Deng Z T, and Liaw G S. Computation of hypersonic transitional flows by solving 3-D Burnett equations. 1998, AIAA paper 98-1607
- [55] Nordsieck A, and Hicks B L. Monte Carlo evaluation of the Boltzmann collision integral, In: Rarefied gas dynamics (Ed. C. L. Brundin, Academic Press, New York), 1967, pp. 675-710
- [56] Yen S M. Monte Carlo solutions of nonlinear Boltzmann equation for problems of heat transfer in rarefied gases. *Int. J. Heat Mass Transfer*. 1970, 14: 1865-1869
- [57] Tcheremissine F G. Dokl. Akad. Nauk SSSR 1973, 209: 811-814
- [58] Tcheremissine F G. Fast solutions of the Boltzmann equation, In: Rarefied gas dynamics, (Ed. A. E. Beylich, VCH, Weinheim) 1991, 273-284
- [59] Tan Z, Chen Y K, Varghese P L, and et al. New Numerical strategy to evaluate the collision integral of the Boltzmann equation. *Prog. In Astro. and Aero*. 1989, 118: 359-373
- [60] Frisch U, Hasslacher H, and Pomeau Y. Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation. *Phys. Rev. Lett*. 1986, 56: 1505-1508
- [61] Sauro S. *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*. Oxford University Press. 2001
- [62] Wolf-Gladrow D A. *Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. 2000
- [63] 陶文铨. 计算传热学的近代进展. 北京: 科学出版社. 2000
- [64] 俞慧丹. 用格子玻耳兹曼方法模拟复杂流动现象. [博士学位论文]. 北京: 北京大学物理学院, 2001
- [65] Nie X, Doolen G D, and Chen S. Lattice-Boltzmann Simulations of Fluid Flows in MEMS. *J. Stat. Phys*. 2002, 107: 279-289
- [66] Lim C Y, Shu C, Niu X D, and Chew Y T. Application of lattice Boltzmann method to simulate microchannel flows. *Phys. Fluids*. 2003, 14(7): 2299-2308
- [67] 马斌, 雷树业, 郝锦志, 卢秋敏. 微通道气体流动的格子-Boltzmann 法模拟. *广西师范大学学报(自然科学版)*. 2003, 21(2): 20-24
- [68] Tang G H, Tao W Q, and He Y L. Gas Flow Study in MEMS Using Lattice Boltzmann Method. In: the First International Conference on Microchannels and Minichannels. Rochester, New York, 2003, 389-395

- [69] Shen C, Tian D B, Xie C, and Fan J. Examination of the LBM in Simulation of Microchannel Flow in Transitional Regime. In: the First International Conference on Microchannels and Minichannels. Rochester, New York, 2003, 405-410
- [70] Koplik J and Banavar J R. Continuum Reductions from Molecular Hydrodynamics. *Annu. Rev. Fluid Mech.* 1995, 27: 257-292
- [71] Allen M P, and Tildesley D J. *Computer Simulation of Liquid*. Oxford University Press. 1987
- [72] 王遵敬. 蒸发与凝结现象的分子动力学研究. [博士学位论文]. 北京: 清华大学工程力学系, 2002
- [73] Bird G A. *Molecular gas dynamics*. Oxford: Clarendon Press, 1976
- [74] Bird G A. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford Science Publications, 1994
- [75] Bird G A. Direct simulation of the Boltzmann equation. *Phys. Fluids*, 1970, 13: 2676
- [76] Wagner W. A convergence proof for Bird's direct simulation Monte Carlo method for the Boltzmann equation. *J. Stat. Phys.* 1992, 66: 1011-1044
- [77] Oran E S, Oh C K and Cybyk B Z. Direct Simulation Monte Carlo: Recent Advances and Applications. *Annual Review of Fluid Mechanics*. 1998. 30: 403-441
- [78] Bird G A. Recent advances and current challenges for DSMC. *Computers Math. Applic.* 1998, 35: 1-14
- [79] 沈青. DSMC 方法与稀薄气流计算的发展. *力学进展*. 2002, 26(1): 1-13
- [80] 沈青. *稀薄气体动力学*. 北京: 国防工业出版社. 2003
- [81] Alexander F J and Garcia A L. The direct simulation Monte Carlo method. *Computers in Physics*, 1997, 11(6): 588-93
- [82] Liou W W and Fang Y. Heat Transfer in Microchannel Devices Using DSMC. *J. Microelectromech. Syst.* 2001, 10: 274-279
- [83] Hadjiconstantinou N G, Simek O. Constant-Wall-Temperature Nusselt Number in Micro and Nano-Channels. *J. Heat Transfer*. 2002, 124: 356-364
- [84] Fan J, and Shen C. Statistical simulation of low-speed rarefied gas flows. *J. Comput. Phys.* 2001, 167: 393-412
- [85] Sun Q, Boyd I D. A direct simulation method for subsonic, microscale gas flows. *J. Comput. Phys.*, 2002, 179: 400-425
- [86] Alexander F J, Garcia A L, and Alder B J. A Consistent Boltzmann Algorithm. *Phys. Rev. Lett.* 1995, 74: 5212-5215

-
- [87] Alexander F J, Garcia A L, and Alder B J. The consistent Boltzmann algorithm for the van der Waals equation of state. *Physica A*, 1997, 240: 196-201
- [88] Garcia A L, Alexander F J, and Alder B J. A particle method with adjustable Transport properties—The generalized consistent Boltzmann algorithm. *J. Stat. Phys.* 1997, 89: 403-409
- [89] Garcia A L and Wagner W. Some new properties of the kinetic equation for the consistent Boltzmann algorithm. *Transport Theo. Stat.* 2002, 31: 579-594
- [90] Kortemeyer G, Daffin F, and Bauer W. Nuclear flow in consistent Boltzmann algorithm models. *Phys. Lett. B*, 1996, 374: 25-30
- [91] Hadjiconstantinou N G, Garcia A L, and Alder B J. The surface properties of a van der Waals fluid. *Physica A* 2000, 281: 337-347
- [92] Wang M R and Li Z X. Nonideal gas flow and heat transfer in micro- and nanochannels using the direct simulation Monte Carlo method. *Phys. Rev. E.* 2003, 68: 046704
- [93] Montanero J M and Santos A. Monte Carlo simulation method for the Enskog equation. *Phys. Rev. E.* 1996, 54: 438-444
- [94] Montanero J M and Santos A. Simulation of Enskog Equation a la Bird. *Phys. Fluids.* 1997, 9(7): 2057-2060
- [95] Frezzotti A. Particle scheme for the numerical solution of the Enskog equation. *Phys. Fluids.* 1997, 9(5):1329-1335
- [96] Bird G A. Forty Years of DSMC, and Now? In: *AIP Conference Proceedings* 2001, 585(1): 372-380
- [97] Hassan H A, and Hash D B. A generalized hard-sphere model for Monte Carlo simulation. *Phys. Fluids.* 1993, 5: 738-744
- [98] Hash D B, Moss J N, and Hassan H A. Direct Simulation of Diatomic Gases Using the Generalized Hard Sphere Model. *J. Thermophys. Heat Transfer.* 1994, 8: 758-764
- [99] Kunc J A, Hash D B, and Hassan H A. The GHS interaction model for strong attractive potentials *Phys. Fluids.* 1995, 7: 1173-1175
- [100] Choquet I. Thermal nonequilibrium modeling using the direct simulation Monte Carlo method: Application to rotational energy. *Phys. Fluids.* 2002, 6(12): 4042-4053
- [101] Fan J. A generalized soft-sphere model for Monte Carlo simulation. *Phys. Fluids.* 2002, 14(12): 4399-4405
- [102] Matsumoto H. Variable sphere molecular model for inverse power law and Lennard-Jones potentials in Monte Carlo simulations. *Phys. Fluids.* 2002, 14(12): 4256-4265

- [103] Wadsworth D C, VanGilder D B, and Dogra V K. Gas-Surface Interaction Model Evaluation for DSMC Applications. In AIP Conference Proceedings. 2003, 663(1): 965-972
- [104] Sazhin O V, and Borisov S F. Surface composition influence on internal gas flow at large Knudsen numbers. In: AIP Conference Proceedings 2001, 585(1): 911-915
- [105] Choquet I. A new approach to model and simulate numerically surface chemistry in rarefied flows. Phys. Fluids 1999, 11(6): 1650-1661
- [106] Ikegawa M, and Kobayashi J. Development of a rarefied flow simulator using the direct-simulation Monte Carlo method. JSME International Journal, 1990, 30: 463-467
- [107] Piekos E S and Breuer K S. Numerical Modeling of Micromechanical Devices Using the Direct Simulation Monte Carlo Method. J. Fluids Engin. 1996, 118: 464-469
- [108] Nance R P, Hash D B, and Hassan H A. Role of Boundary conditions in Monte Carlo Simulation of MEMS devices. J. Thermophys. Heat Transfer. 1998, 12: 447-449
- [109] Liou W W, and Fang Y C. Implicit Boundary Conditions for Direct Simulation Monte Carlo Method in MEMS Flow Predictions. Computer Model. Engin. Sci. 2000, 4: 119-128
- [110] Liou W W and Fang Y C. Computations of the Flow and Heat Transfer in Microdevices Using DSMC with Implicit Boundary Conditions. J. Heat Transfer. 2002, 124: 338-345
- [111] Wu J S, Lee F, and Wong S C. Pressure Boundary Treatment in Micromechanical Devices Using The Direct Simulation Monte Carlo Method. JSME International Journal. 2001, 44: 439-450
- [112] Wu J S, and Tseng K C. Analysis of micro-scale gas flows with pressure boundaries using direct simulation Monte Carlo method. Computers & Fluids. 2001, 30: 711-735
- [113] 王沫然, 李志信. 微通道内气体流动的三维效应. 中国工程热物理学会第十二届年会, 北京, 2003, 673-676
- [114] Wang M R, and Li Z X. Simulations for Gas Flows in Microgeometries Using the Direct Simulation Monte Carlo Method. Int. J. Heat Fluid Flow. In press
- [115] Pan L S, Liu G. R, Khoo B C, and et al. A modified direct simulation Monte Carlo method for low-speed microflows. J. Micromech. Microeng. 2000, 10: 21-27
- [116] Pan L S, Ng T Y, Xu D, et al. Molecular block model direct simulation Monte Carlo method for low velocity microgas flows. J. Micromech. Microeng. 2001, 11: 181-188
- [117] Wang M R, and Li Z X. Failure analysis of the molecular block model for the DSMC method. Phys. Fluids, 2004, to be appeared in June.
- [118] Hadjiconstantinou N G, Garcia A L, Bazant M Z, and He G. Statistical Error in Particle Simulations of Hydrodynamic Phenomena J. Comput. Phys., 2003, 187: 274-297

- [119] Sun Q, Boyd I D, and Candler G V. Numerical Simulation of Gas Flow over Microscale Airfoils. *J. Thermophys. Heat Transfer*. 2002, 16(2): 171-179
- [120] 谢冲, 樊菁, 沈青. 微槽道气体流动的统计模拟. *计算物理*, 2002, 19(5): 377-382
- [121] 樊菁, 沈青. 微尺度气体流动. *力学进展*. 2002, 32(3): 321-336
- [122] Wilmoth R G. Adaptive Domain Decomposition for Monte Carlo Simulations on Parallel Processors. In *Rarefied Gas Dynamics*. Aachen. 1991, 1: 709-716
- [123] LeBeau G J. A parallel implementation of the direct simulation Monte Carlo method. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 1999, 174: 319-337
- [124] Bartel T J, Plimpton S, and Gallis M A. A 2-D Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) Code for Multi-processor Computers. Sandia Report, 2001
- [125] Wu J S, and Lian Y Y. Parallel direct simulation Monte Carlo method and its applications. *Computer and Fluids*. 2003, 32: 1133-1160
- [126] Hash D B, and Hassan H A. Assessment of Schemes for Coupling Monte Carlo and Navier-Stokes Solution Methods. *J. Thermophys. Heat Transfer*. 1996, 10(2): 242-249
- [127] Bourgat J F, Tallec P L, and Tidriri M D. Coupling Boltzmann and Navier-Stokes Equations by Friction. *J. Comput. Phys.* 1996, 127: 227-245
- [128] Tallec P L, and Mallinger F. Coupling Boltzmann and Navier-Stokes Equations by Half Fluxes. *J. Comput. Phys.* 1997, 136: 51-67
- [129] Tiwari S. Coupling of the Boltzmann and Euler Equations with Automatic Domain Decomposition. *J. Comput. Phys.* 1998, 144: 710-726
- [130] VanGilder D B, Font G I, and Boyd I D. Hybrid Monte Carlo-Particle-in-Cell Simulation of an Ion Thruster Plume. *J. Propul. Power*. 1999, 15(4): 530-538
- [131] Boyd I D. Computation of the Plume of an Anode-Layer Hall Thruster. *J. Propul. Power*. 2001, 6(5): 902-909
- [132] Garcia A L, Bell J B, and Crutchfield W Y, and et al. Adaptive Mesh and Algorithm Refinement Using Direct Simulation Monte Carlo. *J. Comput. Phys.* 1999, 154: 134-155
- [133] Wijesinghe H S, Garcia A L, and Hornung R, and et al. 3-Dimensional hybrid continuum-atomistic simulations for multiscale hydrodynamics. In: *Proceedings of International Mechanical Engineering Congress and R&D Exp., IMECE2003-41251*, 2003
- [134] Macrossan M N. A particle-only hybrid method for near-continuum flows. In *AIP Conference Proceedings*. 2001, 585(1): 388-395
- [135] 吴明巧, 陈伟芳, 任兵. 超声速平头圆柱绕流 DSMC/EPSCM 混合算法研究 *空气动力学学报*, 2002, 20(2): 206-210

- [136] 陈伟芳, 吴明巧, 任兵. DSMC/EPSC 混合算法研究. 计算力学学报. 2003, 20(3): 274-278
- [137] Zeifman M I, and Garrison B J. Combined molecular dynamics-direct simulation Monte Carlo computational study of laser ablation plume evolution. J. App. Phys. 2002, 92(4): 2181-2193
- [138] Aktas O and Aluru N R. A Combined Continuum/DSMC Technique for Multiscale Analysis of Microfluidic Filters. J. Comput. Phys. 2002, 178, 342-372
- [139] Wang W L, Sun Q H, and Boyd I D. Towards Development of a Hybrid DSMC-CFD Method for Simulating Hypersonic Interacting Flows. 2002, AIAA paper 2002-3099
- [140] Sun Q H, Boyd I D, and Candler G V. A Hybrid Continuum/Particle Approach for Micro-Scale Gas Flows. In: AIP Conference Proceedings 2003, 663(1): 752-759
- [141] Koura K and Matsumoto H. Variable soft sphere molecular model for inverse-power-low or Lennard-Jones potential. Phys. Fluids. 1991, 3: 2459-2465
- [142] Koura K and Matsumoto H. Variable soft sphere molecular model for air species. Phys. Fluids. 1992, 4: 1083-1085
- [143] Kunc J A, Hash D B, and Hassan H A. The GHS interaction model for strong attractive potentials. Phys. Fluids. 1995, 7(5):1173~1175
- [144] Koura K. Null-collision technique in the direct simulation Monte Carlo technique, Phys. Fluids. 1986, 29: 3509-3511
- [145] 樊菁, 沈青. 直接模拟蒙特卡洛方法中的一个新算法——随机取样频率法. 计算流体力学的理论、方法和应用. 北京: 科学出版社, 1992, 127-130
- [146] Borgnakke C and Larsen P S. Statistical collision model for Monte Carlo simulation of polyatomic gas mixture. J. Comput. Phys. 1975, 18: 405
- [147] Haas B L, Hash D B, Bird G A, Lumpkin F E. Rates of thermal relaxation in direct simulation Monte Carlo methods. Phys. Fluids, 1994, 6(6): 2191-2201
- [148] Lumpkin F E, Haas B L, and Boyd I D. Resolution of differences between collision number definitions in particle and continuum simulations. Phys. Fluids. 1990, 3(9): 2282-4
- [149] Parker J G. Rotational and Vibrational Relaxation in Diatomic Gases. Phys. Fluids. 1959, 2(4): 449-462
- [150] Cercignani C, and Lampis M. Kinetic models for gas-surface interactions, Transport Theory. Statist. Phys., 1971, 2: 505
- [151] Lord R G. Application of the C-L scattering kernel to DSMC calculation. In Rarefied Gas Dynamics, Ed. By A. E. Beylich, VCH, 1991, 1427-1433

- [152] Weast R C, Astle M J, and Beyer W H. CRC Handbook of Chemistry and Physics, 64th Edition. CRC Press, 1984
- [153] 许波. 气体温度跳跃与速度滑移区若干传热与流动问题的研究. [硕士学位论文], 北京: 清华大学工程力学系, 2002
- [154] Alexander F J, Garcia A L, and Alder B J Cell size dependence of transport coefficients in stochastic particle algorithm Phys. Fluids 1998, 10: 1540-1542
- [155] Alexander F J, Garcia A L and Alder B J. Erratu: "Cell size dependence of transport coefficients in stochastic particle algorithm". Phys. Fluids. 2000, 12: 731
- [156] Garica A L and Wagner W. Time step truncation error in direct simulation Monte Carlo Phys. Fluids. 2000, 12: 2621-2633
- [157] Hadjiconstantinou N G. Analysis of discretization in the direct simulation Monte Carlo. Phys. Fluids. 2000, 12: 2634-2638
- [158] Ilgaz M, and Celenligil M C. DSMC Simulations of Low-Density Choked Flows in Parallel-Plate Channels. In: AIP Conference Proceedings 2003, 663(1): 831-840
- [159] 王嫻, 王秋旺, 陶文铨, 郑平. 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
- [160] 王嫻, 王秋旺, 陶文铨, 傅游, 康继昌. 直接模拟蒙特卡罗方法的并行方案设计. 西安交通大学学报. 2003, 37(1): 105-107
- [161] Macrossan M N and Lilley C R. Viscosity of argon at temperature $> 2000\text{K}$ from measured shock thickness. Phys. Fluids. 2003, 15: 3452-3457
- [162] Torczynski J R, Gallis M A, and Rader D J. Using DSMC to Compute the Force on a Particle in a Rarefied Gas Flow. In: AIP Conference Proceedings 2003, 663(1): 662-669
- [163] Piekos E S, and Breuer K S. DSMC modeling of micromechanical devices. AIAA Paper 95-2089, 1995
- [164] Lee W Y, Wong M, and Zohar Y. Flow Separation in Constriction Microchannels. In Proceeding IEEE MEMS'01, 2001, 495-498
- [165] Lee S Y K, Wong M, and Zohar Y. Pressure Losses in Microchannels with Bends. In Proceeding IEEE MEMS'01, 2001, 491-494
- [166] Lee S Y K, Wong M, and Zohar Y. Gas flow in microchannels with bends. J Micromech. Microengin. 2001, 11: 635-644
- [167] 王沫然, 陈泽敬, 李志信. 微喷管内流动和换热数值模拟与分析. 微纳电子技术. 2003, 7/8: 65-67
- [168] Muntz E P. Rarefied Gas Dynamics. Ann. Rev. Fluid. Mech. 1989, 21: 387-417

- [169] Birkhoff G. Hydrodynamics, 2nd ed., Princeton University Press, 1960
- [170] Qin F H, Sun D J, Yin X Y. Discussion about the similarity of micro-scale gas flows, Int. J. Nonlinear Sci. Num. Simu. 2002, 3(3-4): 573-576
- [171] Chapman S, and Cowling T G. The Mathematical Theory of Non-uniform Gases. Oxford: Cambridge University Press, 1970
- [172] Wang M R, Li Z X. Similarity of Ideal Gas Flow at Different Scales. Sci. China (E), 2003, 46: 661~670
- [173] 小邦德 J W, 沃森 K M, 小韦尔奇 J A. 气体动力学原子理论 (傅仙罗译) 北京: 科学出版社. 1986
- [174] 童秉纲, 孔祥言, 邓国华. 气体动力学. 北京: 高等教育出版社. 1990
- [175] 卞荫贵, 徐立功. 气动热力学. 合肥: 中国科学技术大学出版社. 1997
- [176] Garzo V, Montanero J M. Shear viscosity for a moderately dense granular binary mixture Phys. Rev. E. 2003, 68 (4): 041302
- [177] Montanero J M, de Haro M L, Santos A, et al. Simple and accurate theory for strong shock waves in a dense hard-sphere fluid Phys. Rev. E. 1999, 60(6): 7592-7595
- [178] Schram P P J M. Kinetic Theory of Gas and Plasmas. Kluwer Academic Publishers. Dordrecht, 1991
- [179] Garcia A and Baras F. Direct Simulation Monte Carlo: Novel Application and New Extensions. In: Proceedings of the 3rd Workshop on Modelling of Chemical Reaction Systems, Heidelberg, 1997
- [180] Aston J G, Fritz J J. Thermodynamics and statistical thermodynamics. (New York : John Wiley & Sons, Inc.; London: Chapman & Hall, Ltd., 1959)
- [181] Garcia A L, Personal Communications. 2003
- [182] Kauzmann W. Kinetic theory of gases. New York: Benjamin, Inc., 1976
- [183] Dufty J W, Santos A and Brey J J. Practical kinetic model for hard sphere dynamics. Phys. Rev. Lett. 1996, 77: 1270-1273
- [184] Hirschfelder J O, Curtiss C F, and Bird R B. Molecular Theory of Gases and Liquids. New York: Wiley, 1954
- [185] Rieffel M A. A Method for Estimating the Computational Requirements of DSMC Simulations. J. Comput. Phys. 1999, 149: 95-113
- [186] Christopher H M. Development of a continuum/rarefied hybrid scheme for flows with thermal and chemical non-equilibrium. Ph.D Thesis, Stanford University, 2001

- [187] Aktas O. Simulation of Rarefied Flows in MEMS Devices by Atomistic and Multiscale Methods, Ph.D Thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, 2001
- [188] VanGilder D B. Numerical Simulations of the Plumes of Electric Propulsion Thrusters. Ph.D Thesis, Cornell University, 2000
- [189] Pullin D I. Direct Simulation Methods for Compressible Inviscid Ideal-Gas flow. *J Comput. Phys.*, 1980, 34, 231-244
- [190] Macrossan M N. v-DSMC: A Fast Simulation Method for Rarefied Flow. *J Comput. Phys.*, 2001, 173, 600-619
- [191] Macrossan M N. Personal Communications
- [192] Gross W A, Matsch L A, Castelli V, and et al. *Fluid Film Lubrication*. New York,;Wiley, 1980
- [193] Burgdorfer A. The influence of the molecular mean-free path on the performance of hydrodynamic gas lubricated bearings. *Trans. ASME*, 1959, 81: 94
- [194] Fukui S, and Kaneko R. Analysis of ultra-thin gas film lubrication based on the linearized Boltzmann equation (influence of accommodation coefficient). *JSME International Journal*, 1987, 30(268): 1660-1666
- [195] Fukui S and Kaneko R. A Database for Interpolation of Poiseuille Flow Rates for High Knudsen Number Lubrication Problems, *Trans. ASME, J. Tribology*, 1990, 112: 78-83
- [196] Robert M. New implementation of Boltzmann correction to lubrication theory. IBM Research Report. 1993
- [197] 叶雄鹰, 周兆英, 唐飞, 丁海青. 微推进器的研究. 微小卫星和星座技术学术研讨会. 山东威海, 1999
- [198] Lewis D H, Janson Jr S W, Cohen R B and Antonsson E K. Digital MicroPropulsion, Technical Digest. IEEE International MEMS 99 Conference. Twelfth IEEE International Conference on Micro Electro Mechanical Systems, 1999, 517-22
- [199] Lewis D H, Janson Jr S W, Cohen R B and Antonsson E K. Digital micropropulsion, *Sensor. Actuat. A*, 2000, 80: 143-54
- [200] Ivanov M S, Markelov G N and Gimelshein S F. Statistical simulation of reactive rarefied flows: numerical approach and applications. 1998, AIAA Paper 98-2669
- [201] Alexeenko, A A, Levin D A, Gimelshein S F, and et al., Numerical simulation of high-temperature gas flows in a millimeter-scale thruster. *J. Thermophys. Heat Transfer*. 2002, 16: 10-16

- [202] Alexeenko, A A, Levin D A, Gimelshein S F, and et al. Numerical Investigation of Physical Processes in High-Temperature MEMS-based Nozzle Flows. In AIP Conference Proceedings. 2003, 663(1): 760-767
- [203] Markelov G N and Ivanov M S. Numerical study of 2D/3D micronozzle flows In AIP Conference Proceedings 2001, 585(1): 539-546
- [204] Hyakutake T and Nishida M. Numerical Simulation of Rarefied Nozzle Plume Impingements. In: AIP Conference Proceedings, 2001, 585(1): 806-811
- [205] Hyakutake T and Yamamoto K. Numerical Simulation of Rarefied Plume Flow Exhausting from a Small Nozzle. In AIP Conf. Proc. 2003, 663(1): 604-611

致 谢

本文是在导师李志信教授的悉心指导下完成的，导师渊博的学识、开阔的视野、敏锐的科学洞察力以及严谨的科学作风给我留下了深刻的印象，他的言传身教将使我终生受益。

感谢中科院力学所的沈青研究员和樊菁研究员，和他们的讨论使我受益匪浅；感谢美国 San Jose 大学的 A. L. Garcia 教授、西密歇根大学的 W. W. Liou 教授以及澳大利亚 Queensland 大学的 M. Macrossan 教授的卓有价值的讨论。

感谢传热研究室学术带头人过增元院士对本文的关心和指导，以及实验室全体老师的热情帮助和支持！论文工作还得益于与王金库、许波、曹炳阳、徐向华等同学的讨论和帮助，在此向他们表示由衷的感谢。

本课题承蒙国家自然科学基金(No.59995550-2)和国家基础研究发展规划项目(No.G1999033106)资助，特此致谢。



声 明

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师指导下，独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本学位论文的研究成果不包含任何他人享有著作权的内容。对本论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明。

签 名：_____日 期：_____

个人简历、在学期间的研究成果及发表的学术论文

个人简历

1977年3月出生于吉林省舒兰市，1995年9月考入清华大学工程力学系工程热物理专业，1999年7月本科毕业并获得工学学士学位，同年9月免试保送清华大学工程力学系攻读动力工程及工程热物理专业工学博士至今。

在学期间所获奖励

2004	清华大学研究生“航天海鹰杯”学术新秀奖 (Top 8)
2004	清华大学工程力学系“学术新秀” (Top 1)
2004	清华大学机械学院“中日友好 NSK” 优秀论文奖
2003	“清华之友——砝码通” 特等奖学金
2002	“清华之友——东风汽车” 一等奖学金
2001	“高田” 二等奖学金
2000	“光华” 二等奖学金

在国际和国内学术刊物上发表的论文

- [1] Moran Wang, Zhixin Li. Failure analysis of molecular block model for the direct simulation Monte Carlo method. ***Physics of Fluids*** 2004, **16**(6): 2122~2125 (SCI: 819WB)
- [2] Moran Wang, Zhixin Li. Gas Flow and Heat Transfer in Micro Geometries Using the Direct Simulation Monte Carlo Method. ***International Journal of Heat and Fluid Flow*** **25**(6): 975-985, 2004
- [3] Moran Wang, Zhixin Li. Micro and Nano Dense Gas Poiseuille Flow in a Consistent Boltzmann Algorithm Model. ***Journal of Micromechanics and Microengineering***. 2004, **14**(7): 1057~1063
- [4] **M. Wang**, Z. Li*. Numerical Simulations on Performance of

- MEMS-Based Nozzles at Moderate or Low Temperatures. *Microfluidics and Nanofluidics*, **1(1)**: 62-70, 2004
- [5] Moran Wang, Zhixin Li. Flow and Heat Transfer Characteristics of Dense Gas in Micro- and Nanoscale Channels. *Science in China E*. (Accepted) [note: **48(3)**: 317-325, 2005]
- [6] Zhixin Li, Moran Wang, Xiaobo Yao, Zengyuan Guo. Pumping Mechanism of Thermally Driven Phase Transition Micropump. *Microscale Thermophysical Engineering*. 2004, **8(1)**: 31~42 (SCI: 779MA)
- [7] **M. Wang**, Z. Li. A Monte Carlo Method for Perfect Gas Near-Continuum Flows. *Recent Advances in Fluid Mechanics*. pp. 716-719, 2004
- [8] Moran Wang, Zhixin Li. Non-ideal gas flow and heat transfer in micro and nano channels using the direct simulation Monte Carlo method. *Physical Review E*. 2003, **68**: 046704 (SCI: 743KP)
- [9] Moran Wang, Zhixin Li. Similarity of Ideal Gas Flow at Different Scales. *Science in China E*. 2003, **46**: 661~670 (SCI: 747WN)
- [10] Moran Wang, Zhixin Li, Zejing Chen. The Pumping Effect of Phase Transition in a Micro Tube. *International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation*, 2002, **3(3-4)**: 565~568 (SCI: 574RR)
- [11] Zhixin Li, Moran Wang, Liyan Tan. Experimental Investigation on phase transformation type micropump. *Chinese Science Bulletin*. 2002, **47**: 518~522, (SCI: 545SN)
- [12] **M. Wang**, X. Lan and Z. Li*. Analysis of Gas flows in Micro- and Nanochannels. *Int. J. Heat Mass Transfer*. **51(13-14)**: 3630-3641, 2008
- [13] **M. Wang***, M. Macrossan and Z. Li. Relaxation Time Simulation Method with Internal Energy Exchange for Perfect Gas Flow at Near-Continuum Conditions. *Communications of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation*. **12(7)**: 1277-1282, 2007

- [14] **M. Wang***, Z. Li. An Enskog based Monte Carlo method for high Knudsen number non-ideal gas flows. *Computer & Fluids* **36**(8): 1291-1297, 2007
- [15] H. Liu, **M. Wang***, J. Wang et al. Monte Carlo simulations of gas glow and heat transfer in vacuum packaged MEMS devices. *Applied Thermal Engineering*. **27**: 323-329, 2007
- [16] **M. Wang***, Z. Li. Gas mixing in microchannels using the direct simulation Monte Carlo method. *Int. J. Heat Mass Transfer* **49**: 1696-1702, 2006
- [17] 王沫然, 李志信. 微通道内气体流动的三维效应. 工程热物理学报 (In Press) [注: **25**(5): 840-842, 2004]
- [18] 王沫然, 王金库, 李志信. DSMC 方法的压力边界条件实现. 计算物理 (In Press)[注: **21**(3): 48-52, 2004]
- [19] 王沫然, 李志信. 微尺度气体滑动轴承的数值模拟与性能分析. 摩擦学学报 (已接收)[注: **25**(1): 55-60, 2005]
- [20] Moran Wang, Zhixin. Li. Valve-less thermally-driven moving-phase- change micropump. *Tsinghua University Science and Technology*. **9**(6): 688-693, 2004
- [21] 王沫然, 陈泽敬, 李志信. 微气体流量计的模拟与优化. 微纳电子技术 2003, (7/8): 61~64 (Inspec: 7904280)
- [22] 王沫然, 陈泽敬, 李志信. 微喷管内流动和换热数值模拟与分析. 微纳电子技术 2003, (7/8): 65~67 (Inspec: 7875048)
- [23] 王沫然, 李志信. 微尺度热科学及其在 MEMS 中的应用. 仪表技术与传感器. 2002, (7): 1~4
- [24] 王沫然, 李志信. 基于 MEMS 的微流体机械研究进展. 流体机械. 2002, (4): 23~28
- [25] 王沫然, 李志信, 谭立彦. 相变型热驱动微泵的泵送机理研究. 机械科学与技术. 2002, (6): 966~968 (EI: 02517284628)

- [26] 王沫然, 李志信. 基于 MEMS 的微泵研究进展. 传感器技术. 2002, (6): 59~61
- [27] 王沫然, 陈泽敬, 李志信. 微型拉法尔喷管内气体流动的数值模拟. 压电与声光. 2001, 23(s5): 207~209

在国际和国内学术会议上发表的论文

- [28] Moran Wang, Zhixin Li. Performance Predictions of MEMS-Based Nozzles at Moderate of Low Temperatures. The 2nd International Conference of Minichannel and Microchannel ASME, Rochester, New York, 2004
- [29] Moran Wang, Zhixin Li. A Monte Carlo Method for Perfect Gas Near-Continuum Flows. The Fourth International conference on Fluid Mechanics, Dalian, 2004
- [30] Moran Wang, Zhixin Li. Gas Flow and Heat Transfer in Microchannels with Bends Using DSMC. In: Proceedings of the 3rd International Symposium on Heat Transfer and Energy Conservation, Guangzhou, 2004 (ISTP: BY59A)
- [31] Moran Wang, Zhixin Li, Zejing Chen. The Pumping Effect of Phase Transition in a Micro Tube. International Conference on Micro & Nano Systems, Kunming, 2002 (ISTP: 574RR)
- [32] Moran Wang, Li Zhixin. Valve-less Thermally-driven Phase-change Micropump. Pacific Rim Workshop on Transducers and Micro/Nano Technologies. Xiamen, China, 2002 (Inspec: 7928741)
- [33] Xiaobo Yao, Moran Wang, Zhixin Li, Zengyuan Guo. Pumping Mechanism of Thermally Driven Phase Transformation Type Micropump. International Symposium on Micro/Nano Scale Energy Conversion and Transport. Antalya, Turekey, 2002 (ISTP: 779MA)
- [34] 王沫然, 李志信. 微通道内气体流动的三维效应. 中国工程热物理学会第十二届年会. 北京. 2003
- [35] 王沫然, 李志信. 微轴承内气体流动和换热的数值模拟. 中国工程热物理学

- 会第十二届年会. 北京. 2003
- [36] 王金库, 王沫然, 李志信. 合成喷外场流动的数值模拟. 中国工程热物理学会第十二届年会. 北京. 2003
- [37] 王沫然, 李志信. 相变型热驱动微泵的压力模型. 中国工程热物理学会第十届年会. 青岛. 2001