

信息保存方法在微尺度变温流场中的应用研究^{*}

薛小波 姚朝晖 何 枫

(清华大学航天航空学院, 北京 100084)

(2005 年 7 月 12 日收到 2005 年 9 月 16 日收到修改稿)

在信息保存法(IP)方法的基础上,提出了一个简单易行的温度模型,该模型可以有效模拟计算有温度变化的流动.此外研究发现,在用IP方法模拟计算的流场局部密度变化很大时,如果采用质量守恒方程的二阶中心差分格式更新信息密度时会使计算发散,因此建议采用一阶迎风格式更新信息密度.

关键词:IP方法,低速流动,微尺度,变温流动

PACC:4745,0710C

1. 引 言

随着微机电系统的发展及其应用领域的不断扩大, MEMS^[1-4]中涉及到许多微流体流动问题,流体在微尺度槽道中流动的研究引起了人们的重视.在微米尺度甚至纳米尺度下研究问题时,特征尺度与分子平均自由程相近或小于分子平均自由程,流动进入过渡区和自由分子流区,连续介质假设不再成立.相应的,基于连续介质假设的 Navier-Stokes 方程不再成立. Boltzmann 方程可以用来精确描述过渡区和自由分子流区的流动,但从总体看 Boltzmann 方程既有微分项又有积分项,使得求解非常困难.由于 Boltzmann 方程的复杂性,有学者提出简化它,最著名的为 BGK^[5]模型方程. BGK 模型方程虽然因其简单在过渡领域被广泛应用,然而从模型本质来看, BGK 模型方程在一定程度上简化了 Boltzmann 方程中的碰撞积分项,用一个近似项代替了有坚定物理基础的准确项,这种随意性将导致方法本身的不确定性.最近的研究表明,在模拟壁温突升引起的流动和 Rayleigh 问题等远离平衡的流动时, BGK 方程是不准确的^[6,7].为此人们提出了蒙特卡罗直接模拟(DSMC)^[8]方法. DSMC 方法是模拟这种流动的合适的工具,但在将 DSMC 方法应用于 MEMS 中时,由于大量的仿真分子数和计算步,会遇到对计算机内存和机时过高要求的问题.为了解决 DSMC 方法处

理低速流动时所遇到的巨大噪声远远大于有用信息从而引起的需要非常大的取样问题,樊菁和沈青提出了信息保存法(information preservation, IP)方法^[9,10]. IP 方法有效地解决了 DSMC 方法计算面临统计涨落困难,已成功应用于多种流动.对于微槽道流动, IP 方法可以高效率的模拟计算恒温的流场,但将 IP 方法推广到温度变化的流场,目前尚在尝试阶段.本文在 IP 方法的基础上,提出了一个简单易行的温度模型,该模型可以有效模拟计算有温度变化的流动.

2. 计算方法

2.1. DSMC 方法概述

Bird 在 1963 年提出了一种直接从流动的物理模拟出发的方法——DSMC 方法,最早模拟均匀气体中的松弛问题和激波结构,后来发展到模拟二维、三维几何复杂问题,并包含了流动中的复杂的物理化学过程.它通过计算大量的模拟分子的移动和碰撞再现气体分子的运动过程,从而计算得到流场的真实情况.它的基本做法可以表述为用有限个仿真分子代替大量的真实气体分子,通过随机抽样仿真分子并跟踪仿真分子的运动轨迹来求解真实气体流动问题. DSMC 方法的主要特点在于将仿真分子的迁移运动与碰撞作用解耦处理.在每个时间步长内,

^{*} 国家自然科学基金(批准号:10272066)资助的课题.

首先认为每个计算仿真分子作匀速直线运动到新的位置坐标,如果仿真分子与边界发生相互作用则进行相应处理,然后计算仿真分子之间的碰撞.流动的宏观量由网格内模拟分子的运动参数统计平均得到.DSMC方法采用概率论而不是决定论的方法计算仿真分子间的碰撞,是一种物理模拟的方法,也是数值求解稀薄气体力学问题获得巨大成功的一种方法.

2.2. IP 方法

IP方法基于DSMC方法的一种方法,它赋予DSMC方法中每个模拟分子2个速度:一个是通常的DSMC方法中的分子速度,用来计算分子的运动、碰撞和在壁面的反射并完全遵循DSMC方法;另一个是信息速度(IP速度),用来记录每个模拟分子所代表的极大分子数目的真实分子的集团速度.它们对分子的运动不产生任何影响,只用于求和得到宏观速度,其原始信息取自于气体的来流和物体的表面,而当分子从表面反射、相互碰撞、受到力的作用以及从边界进入时,IP速度获得新值.具体步骤详见文献[9],原始的IP方法采用等温假设,不适合变温流场计算.为此国内外学者不断完善温度模型^[11],希望将IP方法推广到有温度变化的流场计算中.

2.3. IP 方法改进

2.3.1. 信息温度的处理

鉴于微尺度流动中的温度绝对值较大,其涨落较少,本文基于DSMC方法建立温度模型,在文献[9]的步骤(5)中采用

$$T_i = \frac{1}{5}(T_{i-1,j} + T_{i+1,j} + T_{i,j} + T_{i,j-1} + T_{i,j+1}) \quad (1)$$

更新信息网格温度.

(1)式对应的网格点如图1所示, $T_{i,j}$ 为每时间步DSMC所得到的每个网格的温度.(1)式可以减小网格温度的涨落,使程序收敛速度加快.该温度模型可以有效模拟计算有温度变化的流动.

2.3.2. 进、出口边界条件的处理

本文还在王沫然等人提出的进出口边界处理方法^[12,13]的基础上,对IP方法的进出口边界处理也做了改进.改进后的进出口边界处理方法具体如下:

入口边界

$$\rho_{in} = P_{in}(T_{in}R),$$

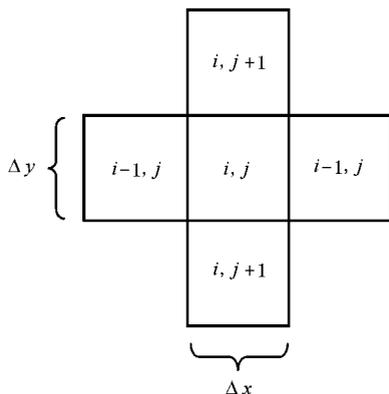


图1 IP方法中的网格点

$$(u_{in})_m = u_m + \frac{P_{in} - P_m}{\rho_m a_m}, v_{in} = 0. \quad (2)$$

出口边界

$$(\rho_e)_m = \rho_m + \frac{P_e - P_m}{(a_m)^2},$$

$$(u_e)_m = u_m + \frac{P_m - P_e}{\rho_m a_m}, \quad (3)$$

$$(v_e)_m = v_m, (T_e)_m = P_e / ((\rho_e)_m R).$$

下标 in 表示入口边界, e 表示出口边界, m 代表单元编号. a 是当地声速, R 是气体常数. P_m, ρ_m, u_m 和 v_m 为由IP方法所得到的每个单元网格的宏观量.

2.3.3. 信息密度的处理

在樊菁和沈青提出的IP方法中,采用

$$\rho_l = \rho_{old} + \Delta\rho, \quad (4)$$

更新信息密度.这里 ρ_{old} 是上一个时间步长的网格密度, $\Delta\rho$ 是当前时间步长内密度变化量,由连续性方程守恒形式

$$\Delta\rho = \Delta t \left(\frac{\rho_{i-1,j} U_{i-1,j} - \rho_{i+1,j} U_{i+1,j}}{2\Delta x} + \frac{\rho_{i,j-1} V_{i,j-1} - \rho_{i,j+1} V_{i,j+1}}{2\Delta y} \right) \quad (5)$$

的空间二阶中心差分格式计算得到.(5)式对应的网格点如图1所示.

本文研究发现,在用IP方法模拟计算的流场局部密度变化很大时,如果采用连续性方程守恒形式的空间二阶中心差分格式计算信息密度增量时会使计算发散,因此在模拟计算局部密度变化很大的流场时,建议采用一阶迎风格式计算信息密度增量

$$\Delta\rho = \Delta t \left(\frac{F_{x1} - F_{x2}}{\Delta x} + \frac{F_{y1} - F_{y2}}{\Delta y} \right), \quad (6)$$

其中

$$\begin{aligned}
 Fx_1 &= \begin{cases} \rho_{i-1,j} U_{i-1,j}, U_{i-1,j} \geq 0, \\ \rho_{i,j} U_{i,j}, U_{i-1,j} < 0, \end{cases} \\
 Fx_2 &= \begin{cases} \rho_{i,j} U_{i,j}, U_{i,j} \geq 0, \\ \rho_{i+1,j} U_{i+1,j}, U_{i,j} < 0, \end{cases} \\
 Fy_1 &= \begin{cases} \rho_{i,j-1} V_{i,j-1}, V_{i,j-1} \geq 0, \\ \rho_{i,j} V_{i,j}, V_{i,j-1} < 0, \end{cases} \\
 Fy_2 &= \begin{cases} \rho_{i,j} V_{i,j}, V_{i,j} \geq 0, \\ \rho_{i,j+1} V_{i,j+1}, V_{i,j} < 0. \end{cases}
 \end{aligned} \tag{7}$$

$1 \times 10^5 \text{ Pa}$, 通道壁面温度 $T_w = 300\text{K}$.

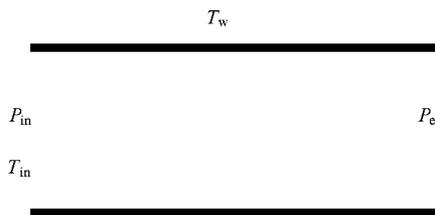


图 2 微通道流动的物理模型

3. 结果分析

3.1. 流场恒温假设微通道流

物理模型如图 2 所示, 计算区域为二维直通渠道, 尺寸为 $4\mu\text{m} \times 0.4\mu\text{m}$, 工作流体为氮气, 入口压力 $P_{in} = 1.5 \times 10^5 \text{ Pa}$, 入口温度 $T_m = 300\text{K}$, 出口压力 $P_e =$

在本算例的模拟计算中, 对于 DSMC 方法, 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 2×2 的子网格. 对于 IP 方法则采用樊菁和沈青提出的等温假设. 模拟分子数为 190000 个, 在 30000 万个步长后开始采样, 采样数为 30000 次.

图 3(a) 显示了沿程压力分布, 可以看出 IP 方法和 DSMC 方法得到的压力沿程分布几乎完全一致.

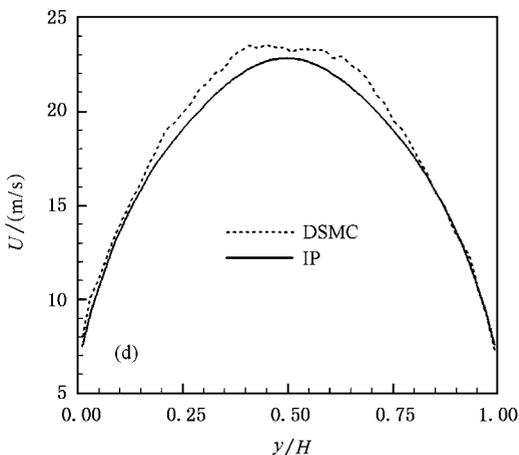
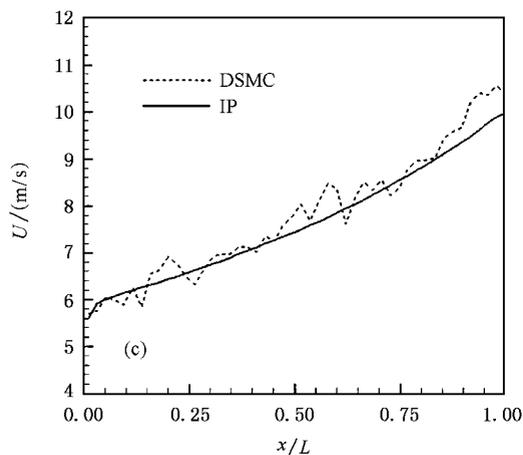
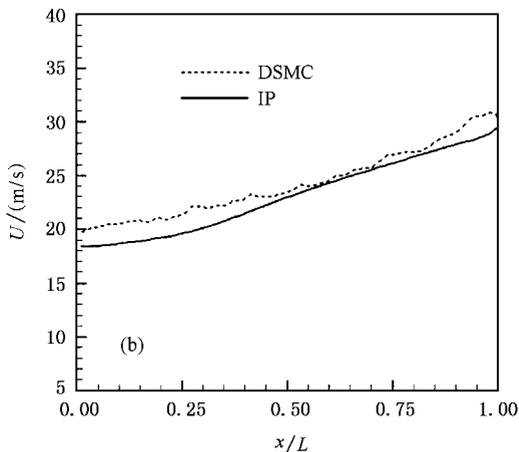
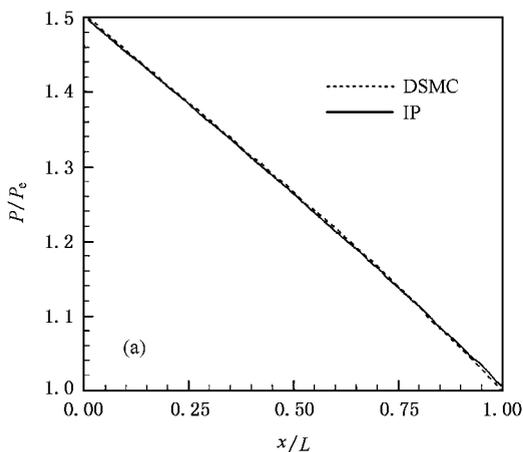


图 3 流场恒温假设微通道流计算结果 (a) 沿程压力分布的对比图; (b) 通道中心线速度沿程分布的对比图; (c) 壁面滑移速度沿程分布的对比图; (d) $x = L/2$ 处的速度分布剖面的对比图

图 3 (b) 是通道中心线速度沿程分布的对比图, 图 3 (c) 是壁面滑移速度沿程分布的对比图, 可以看出 IP 方法所得到的结果与 DSMC 方法得到的结果符合得较好, 并且 IP 方法所得结果的数值涨落非常小. 图 3 (d) 是 $x = L/2$ 处的速度分布剖面的对比图, 可以看出 IP 方法和 DSMC 方法得到的结果符合得较好, 并且 IP 方法所得结果的对称性更好.

可以发现, 在流场温度变化不大时, IP 方法采用恒温假设得到的结果与 DSMC 方法得到的结果是相符的, 并且 IP 方法所得结果的数值涨落非常小.

3.2. 流场有温度变化微通道流

物理模型如图 2 所示, 计算区域为二维直通通道, 尺寸为 $4\mu\text{m} \times 0.4\mu\text{m}$, 工作流体为氮气, 入口压力 $P_{\text{in}} = 1.5 \times 10^5 \text{ Pa}$, 入口温度 $T_{\text{in}} = 300 \text{ K}$, 出口压力 $P_{\text{e}} = 1 \times 10^5 \text{ Pa}$, 通道壁面温度 $T_{\text{w}} = 323 \text{ K}$.

在本算例的模拟计算中, 对于 DSMC 方法, 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 2×2 的子网格. 在 IP 方法中则采用新的温度模型. 模拟分子数为 480000 个, 在 30000 万个步长后开始采样, 采样数为 30000 次.

图 4 (a) 显示了沿程压力分布, 可以看出采用新的温度模型的 IP 方法和 DSMC 方法得到的压力沿程分布几乎完全一致. 图 4 (b) 是通道中心线速度沿程分布的对比图, 图 4 (c) 是壁面滑移速度沿程分布的对比图, 可以看出采用新的温度模型的 IP 方法所得到的结果与 DSMC 方法得到的结果符合得较好, 并且 IP 方法所得结果的数值涨落非常小. 图 4 (d) 是 $x = L/2$ 处的速度分布剖面的对比图, 可以看出采用新的温度模型的 IP 方法和 DSMC 方法得到的结果符合得较好, 并且改进后 IP 方法所得结果的对称性更好.

可以发现, 采用新的温度模型的 IP 方法适用于计算有温度变化的流场, 并且所得到的结果与 DSMC 方法得到的结果是相符的, 同时可以看到采

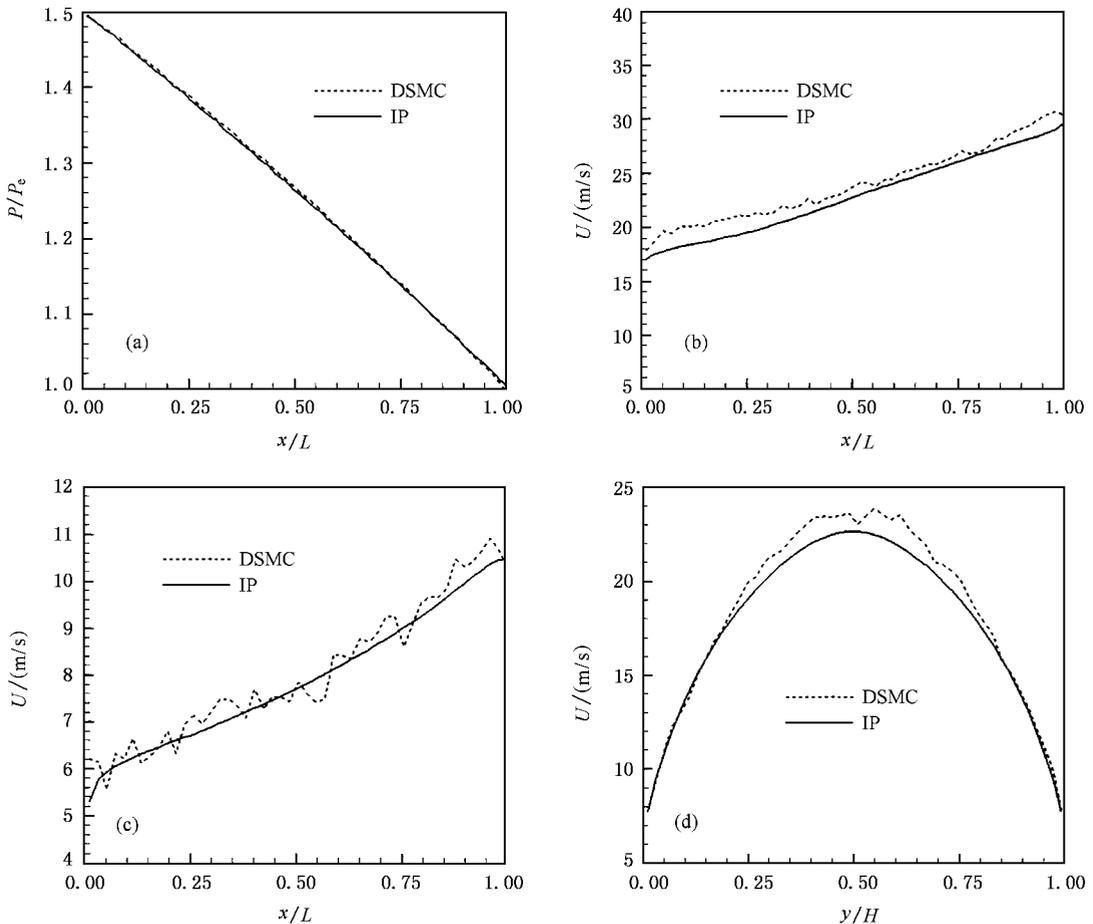


图 4 流场有温度变化微通道流计算结果 (a) 沿程压力分布的对比图; (b) 通道中心线速度沿程分布的对比图; (c) 壁面滑移速度沿程分布的对比图; (d) $x = L/2$ 处的速度分布剖面的对比图

用新的温度模型的 IP 方法所得结果的数值涨落非常小.

图 5 显示了在入口温度都为 300K 而壁面温度分别为 300K 和 323K 下通道中心线温度的沿程分布,可以看出当壁面温度和入口温度相差较大时,沿通道中心线的温度变化也很大.图 6 显示了在入口温度都为 300K 而壁面温度分别为 300K 和 323K 下通道壁面滑移速度的沿程分布,可以看出当壁面温度和入口温度相差变大时,壁面滑移速度也会发生变化.由图 5 和图 6 的分析可知,当壁面温度和入口温度相差较大时,等温假设会使计算结果产生误差,而本文提出的新的温度模型正好可以克服上述缺点.

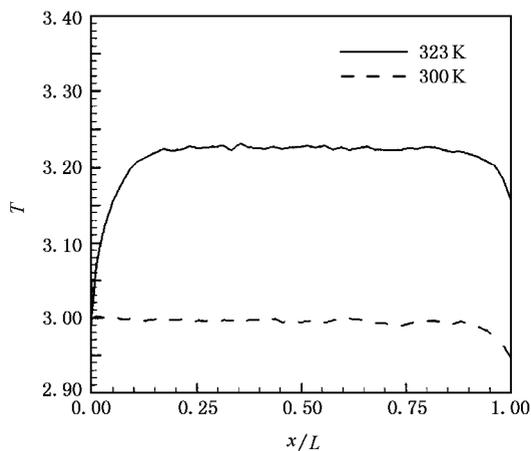


图 5 不同温度下通道中心线温度的沿程分布

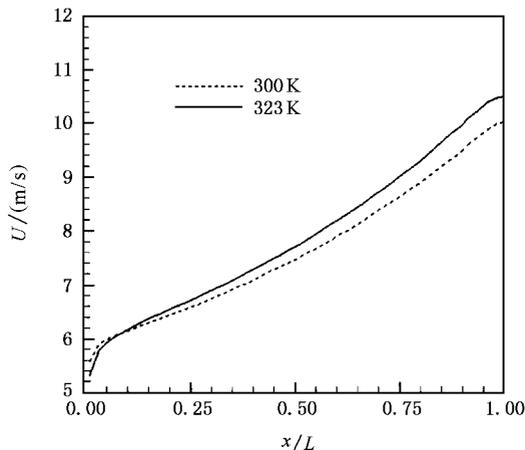


图 6 不同温度下壁面滑移速度的沿程分布

3.3. 孔口流动

物理模型如图 7 所示,通道长 $L = 20\mu\text{m}$,高 $H = 4\mu\text{m}$,orifice 宽 $d = 1\mu\text{m}$,长 $l = 1\mu\text{m}$,入口温度 $T_{in} =$

300K,入口压强 $P_{in} = 3 \times 10^5 \text{ Pa}$,出口压强 $P_e = 1 \times 10^5 \text{ Pa}$.

在本算例的模拟计算中,对于 DSMC 方法,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 200×40 的均匀矩形网格,每个网格单元中分为 2×2 的子网格.对于 IP 方法则分别采用两种不同的改进后的 IP 方法进行模拟计算:1)信息

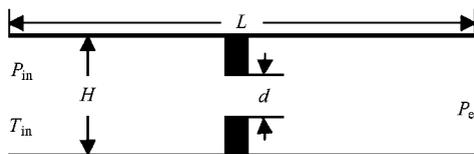


图 7 孔口流动的物理模型

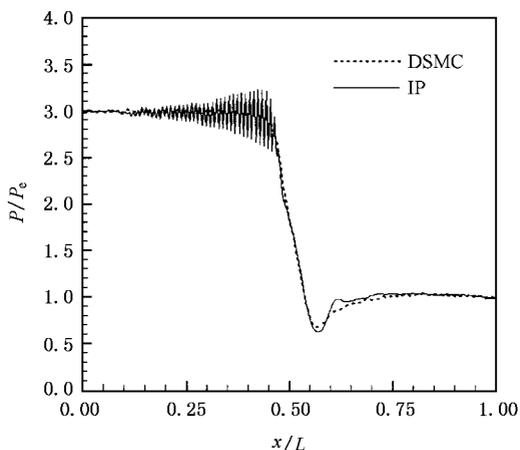


图 8 二阶中心差分格式下的沿程压力分布

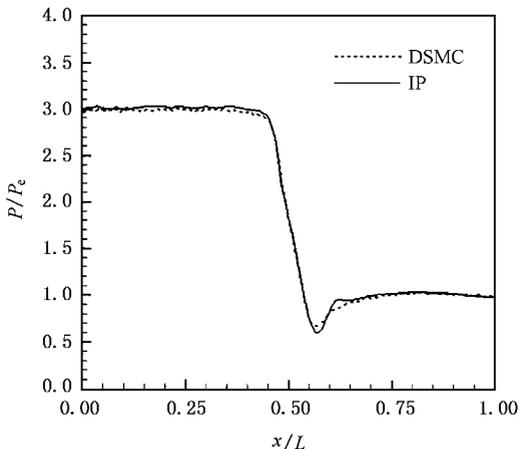


图 9 一阶迎风格式下的沿程压力分布

密度增量采用二阶中心差分格式计算,信息密度增量采用一阶迎风格式计算.以上模拟方法的初始条件相同,模拟分子数都为 200000 个左右,都在 50000 万个步长后开始采样,采样数为 50000 次.

对于图 7 的物理模型,孔口处密度变化很大.图 8 显示了二阶中心差分格式下的沿程压力分布,图 9 显示了一阶迎风格式下的沿程压力分布.由图 8 和图 9 对比可以看出在用 IP 方法模拟计算的流场局部密度变化很大时,如果采用连续性方程守恒形式的空间二阶中心差分格式计算信息密度增量时会使计算发散,因此在模拟计算局部密度变化很大的流场时,建议采用一阶迎风格式计算信息密度.

4. 结 论

本文在信息保存法(IP)方法的基础上,提出了一个简单易行的温度模型,使用该方法模拟计算了有温度场变化的微通道流,并将计算结果与由 DSMC 方法的计算结果进行了对比,验证了程序的正确性和有效性.本文还通过孔口流动的模拟计算说明在用 IP 方法模拟计算的流场局部密度变化很大时,如果采用连续性方程守恒形式的空间二阶中心差分格式计算信息密度时可能会使计算发散,因此在模拟计算局部密度变化很大的流场时推荐采用一阶迎风格式计算信息密度.

-
- [1] Ho C M , Tai Y C 1998 *Annu Rev. Fluid Mech.* **30** 579
- [2] Mohamed Gad-el-Hak 1999 *Journal of Fluids Engineering ASME* **121** 5
- [3] Ding Y T , He F , Yao Z H *et al* 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2050 (in Chinese) [丁英涛、何枫、姚朝晖等 2004 物理学报 **53** 2050]
- [4] Yu X M , Zang D C , Li T 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 31 (in Chinese) [于晓梅、张大成、李婷 2004 物理学报 **53** 31]
- [5] Sun X M , Yao Z H , Yang J L 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1942 (in Chinese) [孙喜明、姚朝晖、杨京龙 2002 物理学报 **51** 1942]
- [6] Shen C , Xu X , Hu Z , Wu W 1994 *Progress in Astro Aeronautics* **159** 234
- [7] Shen C , Yi Z Q 2000 *Acta Mechanica Sinica* **16** 133
- [8] Bird G A 1994 *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* (Oxford :Clarendon)
- [9] Fan J , Shen Q 2002 *Advances in Mechanics* **32** 321 (in Chinese) [樊菁、沈青 2002 力学进展 **32** 321]
- [10] Fan J , Shen C 2001 *J. Computational Physics* **167** 393
- [11] Shen C , Jiang J Z , Fan J. 2001 in *Rarefied Gas Dynamics* 185
- [12] Wang M R , Li Z X 2004 *International Journal of Heat and Fluid Flow* **25** 975
- [13] Wang M R , Wang J K , Li Z X 2004 *Chinese Journal of Computational Physics* **21** 316 (in Chinese) [王沫然、王金库、李志信 2004 计算物理 **21** 316]

Information preservation method for micro-scale flow with temperature variation^{*}

Xue Xiao-Bo Yao Zhao-Hui He Feng

(*School of Aerospace, Tsinghua University, Beijing 100084, China*)

(Received 12 July 2005; revised manuscript received 16 September 2005)

Abstract

Based on the information preservation (IP) method, a simple effective temperature model is presented. The IP method with new temperature model can simulate the flow which has temperature variation. Moreover, studies show that when the local density gradient of the simulated flow is large, it will cause numerical divergence if the second order central difference scheme of the mass conservation equation is used to update the information density. So the first order upwind scheme is recommended to update the information density for the flow with large density gradient.

Keywords : IP method, low flow, micro-scale, temperature variation flow

PACC : 4745, 0710C

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10272066).