

MEMS 稀薄气体内部流动模拟中的 信息保存 (IP) 法^{*,**}

沈 青

中国科学院力学研究所高温气体动力学实验室, 北京 100080

摘 要 首先综述了处理低速稀薄气体流动的一些方法: 线性 Boltzmann 方程方法、Lattice Boltzmann 方法 (LBM)、加滑移边界的 Navier-Stokes 方程、以及 DSMC 方法, 并讨论它们在模拟 MEMS 中过渡领域低速流动特别是内部流动所遇到的困难, 其中表明了 LBM 现有方案不适合模拟过渡领域中的 MEMS 流动问题. 信息保存 (IP) 法通过保存一个模拟分子所代表的大量分子的平均信息, 克服了流速低使得信息噪声比小而引起统计模拟的困难. 本文给出了方法的一些理论证实. MEMS 中内部流动的特点, 即流速低和大的长宽比的特点, 引起椭圆性问题, 即出入口边界条件相互影响需要协调的问题. 通过对 (长约几千微米) 微槽道流动应用 IP 方法的算例, 演示了采用守恒形式的质量守恒方程和超松弛法可成功地解决这一问题. 借助同样的方法, 用 IP 方法求解了真实长度 (1000 μm) 硬盘驱动器读写头在过渡领域的薄膜支撑问题, 压力分布与具有严格气体动理论基础的概括化 Reynolds 方程完全相符, 而在此之前, DSMC 方法只对短的读写头 (5 μm) 与 Reynolds 方程做了校验. 作者建议将原来用于求解读写头润滑问题的 Reynolds 方程退化来求解过渡领域中的微槽道流动问题, 从而提供了一个有严格气体动理论性的检验方法来验证求解 MEMS 内部流动的各种方法.

关键词 MEMS, 稀薄气体流动, 信息保存法, 守恒格式, 超松弛方法, 线性 Boltzmann 方程, Lattice Boltzmann 方法, 微槽道流动, 硬盘驱动器读写头, 退化的 Reynolds 方程

1 引 言

20 世纪 80 年代开始的微机电系统 (micro-electro-mechanical system, MEMS) 的加工制造和应用是高科技发展的前沿. 其中流动的空间尺度为微米量级, 时间尺度为微秒量级. 而常压下气体的平均自由程 λ 为 0.065 μm , 气体在 MEMS 中的流动一般进入了滑流领域, 而微槽道、微型泵、微型阀门、微型喷管中的流动会进入过渡领域. 求解工具则有过渡领域中发展起来的各种方法并有强大的电子计算机作为计算手段. 对于其中的一些方法, 包括线性 Boltzmann 方程方法, Lattice Boltzmann 方法 (LBM), 加滑移边界条件的 Navier-Stokes 方程方法

和直接模拟 Monte Carlo (DSMC) 方法等, 将在第 2 节求解 MEMS 中低速稀薄气体流动的一些方法中做综述和评介. 其中借助 DSMC 方法的检查表明 Lattice Boltzmann 方法不适合求解过渡领域的问题.

DSMC 方法是处理这一领域问题的合适的方法, 但当系统中的流动速度很小时, 信息噪声比十分小, 从而引起统计模拟的困难. 信息保存 (information preservation, IP) 法在 DSMC 方法的框架中令模拟分子携带其代表的大量分子的宏观信息, 用来得到宏观量, 原则上找到了克服这一困难的途径. 在第 3 节信息保存 (IP) 法中将介绍这一方法并对其基本假设做一些论证.

MEMS 中流速低和大的长宽比的特点还引入出

收稿日期: 2005-06-28, 修回日期: 2005-11-07

* 国家自然科学基金 (90205024) 资助项目

** 第 24 届国际稀薄气体动力学会议 '内流和真空系统' 专题邀请报告

† E-mail: cshen@imech.ac.cn

入口边界条件相互影响需要协调的问题, 我们通过第 4 节 IP 对微槽道流动的模拟作为例子着重介绍如何在信息保存法中通过采用守恒形式的质量守恒方程和超松弛法解决这一问题. 这是处理内部低速稀薄气体流动时均要采用的措施.

通过利用这样的措施, 用 IP 方法求解了真实尺寸 ($1000 \mu\text{m}$) 硬盘读写头在过渡领域中的薄膜空气支撑问题 (第 5 节), 所得的压力分布与其 Poiseuille 流动的流率由线化 Boltzmann 方程提供的概括 Reynolds 方程的结果出色相符. 而以前的 DSMC 模拟针对这一问题只是对于十分短的读写头 ($L = 5 \mu\text{m}$) 进行了计算.

作者建议将原来用于求解硬盘读写头润滑问题的 Reynolds 方程 (其中 Poiseuille 流动的流率用线化的 Boltzmann 方程算出) 加以退化用来求解过渡领域中的微槽道流动问题 (第 6 节, 应用退化的 Reynolds 方程用来求解微槽道流动问题). 算例表明与实验数据以及 DSMC 和 IP 方法的结果极其相符. 所建议的退化的 Reynolds 方程为在过渡领域检验各种求解 MEMS 中流动的方法提供了一个有严格动理论基础的标准. 最后给出一些综述和总结.

2 求解 MEMS 中低速稀薄气体流动的一些方法

2.1 线化 Boltzmann 方程方法

线化 Boltzmann 方程 (见文 [1] 中的综述和文献) 适合求解 MEMS 中的低速流动问题, 对于基准问题的解可以作为检验其他方法的标准. 同时, 线化 Boltzmann 方程适合求解有温度变化的流场. 有时线化的不是 Boltzmann 方程, 而是 BGK 方程 [2]. 这时求解要简单得多. 要使 BGK 方程的解对应于实际的物理问题, 要做一些调整参数性质的修正.

2.2 Lattice Boltzmann 方法

在 20 世纪 80 年代后半期 Frisch 等人发展起来一种格子气方法 [3]. 这一方法通过引入格子 Boltzmann 方法 (LBM, 见文 [4] 及那里援引的文献) 而得到了改善. 最近, Nie 等 [5] 用 LBM 方法模拟了大 Knudsen 数下的微槽道流动, 得到了沿槽道的压力分布等结果. 我们用 Nie 等的 LBM 方法和 DSMC 方法对于同样参数下 (长高比 $l/h = 100$, 进出口压力比 $p_i/p_e = 1.4$, 另外补充了 $p_i/p_e = 2$ 的算例) 的微槽道流动进行了模拟 [6,7], 以对 LBM 方法在过渡领域的适用性进行检验. 结果表明, 对于小 Knudsen 数 ($Kn = 0.0194$), LBM 方法和 DSMC 方法相符很

好. 对于 $Kn = 0.194$, LBM 和 DSMC (以及 IP) 的速度剖面结果有小的差异, 而压力分布结果则有明显差异. 在过渡领域, 当 $Kn = 0.388$ 时, DSMC 模拟不证实 LBM 所预言的压力与线性分布的负偏离, 而数值上两者相差很大 (见图 1). 这说明现在的 LBM 方法还不能用来模拟过渡领域的 MEMS 流动 (详见文献 [6, 7]).

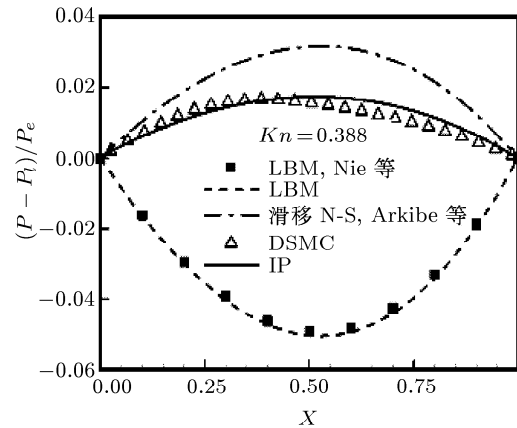


图 1 压力分布与线性分布 ($p_i = p_e + (p_i - p_e)(l - X)$) 的偏离, LBM, DSMC 和 IP 模拟的比较, $Kn = 0.388$, $p_i/p_e = 2.0$, $l/h = 100$ [6,7]

2.3 加滑移边界条件的 Navier-Stokes 方程

用施加滑移边界条件的 Navier-Stokes 方程求解稀薄气体流动问题可以利用计算流体力学 (CFD) 的成熟方法和模型. Karniadakis 和 Sherwin 发展了高阶有限元 (谱元) 方法 [8] 采用一阶或高阶滑移边界求解可压缩或不可压缩 Navier-Stokes 方程, 并利用所谓的 μ 流动程序求解了许多有趣的 MEMS 流动问题, 这些也在文 [9] 中有所报道. Karniadakis 等将其推广应用于 Knudsen 数高达 0.5 的微型流动. 这是一种超出合理范围的外推. 这里我们援引两个例子, 一个表明外推时小心的必要性, 另一个说明外推的成功之处. 第一个例子是流经短槽道的质量流率的计算 [10]. 用滑移 Navier-Stokes 方法和 DSMC 方法得到的流率在 $Kn > 0.1$ 时有很大差别, 而且前者给不出 Knudsen 最小值 (见图 2). 第二个例子是硬盘驱动器读写头与平片间的空气滑润流动. 加了滑流修正的 Reynolds 方程可以在 Kn 数大到 4.2 时提供与 DSMC 结果相符尚好的结果 (见文 [11]). Fukui 和 Kaneko 基于 Boltzmann 方程解的 Reynolds 方程 [12] 与 DSMC 的结果有出色的相符. 当然, 这后一成功与滑流解无关, 而应归因于在得到 Reynolds 方程中的 Poiseuille 流的流率时用的是 Boltzmann 方程, 这在整个过渡领域都是合适的.

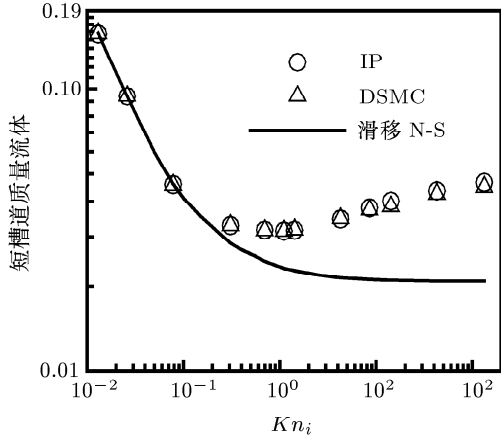


图2 通过短槽道质量流率的变化, $l/h = 15$, $p_i/p_e = 1.43$, IP, DSMC 方法和滑移 Navier-Stokes 计算的比较

2.4 直接模拟 Monte-Carlo (DSMC) 方法

DSMC 方法^[13]是处理 MEMS 中气体流动的合适方法, 能够模拟从自由分子流到稀薄过渡区各种复杂的流动问题. 其对于基准问题的解可以作为其他方法的标准, 并可以处理物理内容丰富的问题. 但将 DSMC 方法应用于 MEMS 中会遇到对计算机内存和机时过高要求的问题. 对于 DSMC 方法, 调整长槽道和其它 MEMS 器件出入口边界条件从而使流动达到定常是十分困难的任务. 这使有些研究者认为 DSMC 不适合模拟 MEMS 中的流动^[14]. 事实上, 已有许多微槽道流动的实验结果^[15~19], 而 DSMC 方法对微槽道的模拟则仅限于高速甚至高超声速的情况^[20,21].

3 信息保存 (information preservation, IP) 法

为了解决 DSMC 方法处理低速流动时所遇到的问题, 樊和沈提出了基于粒子的方法, 信息保存 (information preservation, IP) 法^[22,23]. 这是嵌入于 DSMC 方法的一种方法, 建议每一个模拟分子携带两种速度: 即如 DSMC 方法中的分子热运动速度 c 和信息速度 (IP 速度) u_i . c 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. IP 速度用来记录每个模拟分子所代表的极大数目真实分子的集团速度, 它们对于分子的运动不产生影响, 只用于求和得到宏观速度. 当分子从表面反射、互相碰撞、经受力的作用以及从边界进入时, 信息速度取得新值 (见文 [24, 25]):

(1) 当模拟分子从漫反射表面反射时, 反射的 IP 速度 u_i 与壁面速度取同值.

(2) 当两个模拟分子相互碰撞时, 碰撞后的 IP 速度取为下值

$$u_{i,1}^* = u_{i,2}^* = \frac{m_1 u_{i,1} + m_2 u_{i,2}}{m_1 + m_2} \quad (1)$$

这里上标 * 标记碰撞后的值.

(3) 对于从边界进入计算区域的模拟分子, IP 速度 u_i 取为满足边界条件.

(4) 一般情况下, 在等温假设 (对于无加热的低速亚声速微流动这是对的) 下, 要引入模拟分子的 IP 速度 u , 网格的 IP 速度 U 和 IP 密度 ρ (或 n), 它们遵循质量守恒和动量守恒方程

$$\iiint \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = \iint \rho \mathbf{U} \cdot \mathbf{l} dS \quad (2)$$

$$\iiint \rho \frac{d\mathbf{U}}{dt} dV = - \iint p \mathbf{l} dS \quad (3)$$

式中积分对网格的体积和表面进行, \mathbf{l} 是表面的单位外法线矢量. 式 (3) 右端写为了无黏的形式. 事实上 IP 量为一个一般的动量方程所控制

$$\iiint \rho \frac{d\mathbf{U}}{dt} dV = - \iint \boldsymbol{\sigma} \mathbf{l} dS = - \iint p \mathbf{l} dS + \iint \boldsymbol{\tau} \mathbf{l} dS \quad (4)$$

其中 $\boldsymbol{\sigma}$ 为压力应力张量, $\boldsymbol{\tau}$ 为黏性应力张量, IP 量随着模拟分子经表面 S 的正向和逆向运动已体现了黏性输运作用, 所以虽然动量守恒写为式 (3), 实际控制 IP 量的是包括黏性输运的守恒律. 经过一个时间步长 Δt , 网格 IP 密度根据式 (2) 获得增量

$$\Delta \rho = - \frac{\Delta t}{\Delta V} \iint \rho \mathbf{U} \cdot \mathbf{l} dS \quad (5)$$

这样密度和压力得到更新: $p = nkT$. 网格的 IP 速度增量为

$$\Delta \mathbf{u} = - \frac{\Delta t}{\rho \Delta V} \iint p \mathbf{l} dS \quad (6)$$

并加到网格的模拟分子的 IP 速度上去. 更新的量用于下一步的计算. 网格的宏观速度从网格中的分子的 IP 速度求平均得到

$$u_0 = \frac{1}{N_c} \sum_{k=1}^{N_c} u_{i,k} \quad (7)$$

其中 N_c 是网格中的分子数, k 是网格中分子的标号.

3.1 方法的论证

我们论证 IP 过程的反射规则 (1)^[25]. 由于一个模拟分子代表大量的真实分子, 我们跟踪大量的真实

分子的速度并通过平均得到 IP 速度. 一个单个的分子在从一个静止的表面漫反射后将有下列分量的速度 [13,24,25]

$$\begin{aligned} u &= -(\ln(\text{ranf}))^{1/2}/\beta, \quad v = V \cos \theta \\ w &= V \sin \theta \end{aligned} \quad (8)$$

其中

$$\begin{aligned} \beta &= \left(2 \frac{k}{m} T_w\right)^{-1/2} \\ V &= -(\ln(\text{ranf}))^{1/2}/\beta \\ \theta &= 2\pi \text{ranf} \end{aligned} \quad (9)$$

而 ranf 是在 0 和 1 均布的随机分数. 在 IP 过程中我们记录 u, v, w 的平均值. 从 (8) 式的推导和 DSMC 的实践我们知道这样取样得到的速度分量 u 在整体上保证漫反射分子的质量通量的正确值而在表面的法向不给出宏观速度. 所以在平均所有的 u 以后得到零宏观速度分量

$$\bar{u} = 0 \quad (10)$$

平均 v (方程 (8)) 给出

$$\bar{v} = \overline{V \cos \theta} = \overline{V} \overline{\cos \theta} = 0 \quad (11)$$

因为 V 和 $\cos \theta$ 是独立随机变量而根据方程 (9) $\overline{\cos \theta} = 0$. 类似有

$$\bar{w} = 0 \quad (12)$$

如果表面不是静止的而有一个速度, 则其速度分量会加到 u, v, w 上去, 而在平均后, 这一速度就会作为漫反射后的 IP 速度而被得到. 所以, ‘当模拟分子从漫反射表面反射时, 反射的 IP 速度 u_i 与壁面速度取同值’ 的论断得到证明.

下面我们论证 IP 的碰撞规则 [25,26]. 两个碰撞分子 (在碰撞前速度分量为 u_1, v_1, w_1 和 u_2, v_2, w_2) 之一的碰撞后的速度的分量 u_1^* 可以求得为

$$u_1^* = \frac{m_1 u_1 + m_2 u_2}{m_1 + m_2} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \sin \theta \cos \phi c_r^* \quad (13)$$

其中 c_r^* 是碰撞后的相对速度, ϕ 是在 0 与 2π 之间均布的随机变量, 而 $\cos \theta$ 是在 -1 与 1 之间均布的随机变量. 这里我们理解 $u_1, v_1, w_1, u_2, v_2, w_2$ 是许多单个真实分子的某组速度分量. 我们要做的是记录 (保存) 极大量分子的速度分量的平均值. 从式 (13) 我们得到

$$\begin{aligned} \bar{u}_1^* &= \frac{m_1 \bar{u}_1 + m_2 \bar{u}_2}{m_1 + m_2} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \overline{\sin \theta \cos \phi} \bar{c}_r^* = \\ &= \frac{m_1 \bar{u}_1 + m_2 \bar{u}_2}{m_1 + m_2} \end{aligned} \quad (14)$$

因为 $\sin \theta$ 和 $\cos \phi$ 是独立随机变量而 ϕ 在 0 与 2π 之间均布. 这样 IP 的碰撞规则, 第二步的方程 (1), 得到证明.

4 微槽道流动的 IP 模拟与入口、出口边界条件的调节

微槽道是 MEMS 器件的基本构成单元, 它的几何形状规则简单却也能显示出低速内部流动的特点, 即问题的椭圆性引起出入口边界条件的相互影响, 需要在模拟中加以调节最终达到收敛. 对于 DSMC-IP 模拟, 需要在槽道的入口和出口规定压力值 p 和沿槽道截面的速度分布 U 才能开始任何模拟. 但同时在出入口固定 p 和 U , 则过度规定了边界条件: 任意选定的 p 和 U 会互相矛盾. 正确的出入口处的 p 和 U 总是在求解过程通过互相调节得到的. 这里采用的办法是固定出入口处的 p 令其与预先规定的值 (如实验值) 相等, 而允许 U 通过模拟不断调整变化. 这样 DSMC-IP 求解过程, 总是一个逐渐调节达到定常化的过程: 各个截面质量流量不同的流场通过非定常的模拟过程逐步调整到质量流量处处相等的过程 (见文 [10, 24, 25]). 重要的是, 计算中一定要采用守恒形式的质量守恒方程, 二阶中心差分格式给出密度增量

$$\begin{aligned} \Delta \rho &= \Delta t \left(\frac{\rho_{i-1,j} U_{i-1,j} - \rho_{i+1,j} U_{i+1,j}}{2\Delta x} + \right. \\ &\quad \left. \frac{\rho_{i,j-1} V_{i,j-1} - \rho_{i,j+1} V_{i,j+1}}{2\Delta y} \right) \end{aligned} \quad (15)$$

这保证了从网格流出的流量不带误差地流入相邻网格, 避免了非守恒形式方程引起的数值误差的积累而使边界条件的调节成为不可能. 实际上, 非守恒格式不能将质量流量调整为各个截面上相等的状态 (见文献 [10]). 从式 (6) 和式 (15) 得到的 $\Delta \rho$ 和 Δu 使网格中的 IP 压力和速度得以更新, 从而得到更新的 $\rho u, \rho v$ 场, 可惜它们有大的涨落, 要加以光滑, 以免误差放大影响计算的稳定性. 当 Δt 取为碰撞时间时, 对于低速长管道流动, 从式 (15) 得到的 $\Delta \rho$ 仅为 ρ 的 10^{-9} 大小. 直接利用这一 $\Delta \rho$ 来调整流场以达到定常化是太费时了. 我们建议采用超松弛方法加速收敛

$$\rho_{i,j}^{t+\Delta t} = \rho_{i,j}^t + \omega \Delta \rho_{i,j}^t \quad (16)$$

式中 ω 为超松弛因子, 实际计算中取为 100 到 2000 之间, 随着计算趋于定常化, ω 逐渐趋近于 1. 采用超松弛方法来加速收敛的作用通过氮流经 $1.2 \mu\text{m}$

$\times 30 \mu\text{m} \times 3000 \mu\text{m}$ 微槽道 (入口压力为 15 psig (1 psig=6.89 kPa), 流入大气) 的实验^[16] 为例加以说明. 图 3 给出了 IP 计算中分别利用超松弛因子 ω 为 1, 100 和 1000 时, 距离入口 $2500 \mu\text{m}$ 截面中心处密度 ρ 的演变过程. 当 ω 取为 1000 时, ρ 在约 6×10^4 步长内趋近 1.39 kg/m^3 的定常值, 对于 $\omega = 100$, ρ 在 6×10^4 步长后距定常值差一半还多, 而

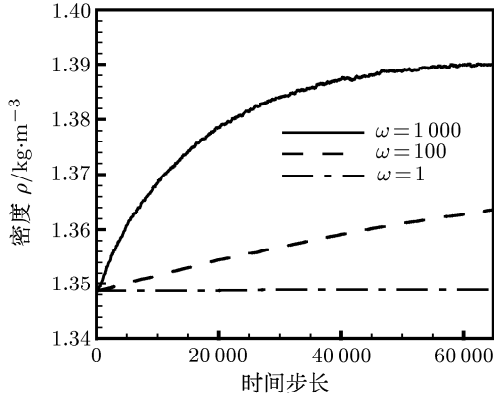


图 3 密度 ρ 在距离槽道入口 $2500 \mu\text{m}$ 处 (参数条件与文献 [15] 的实验条件同, 槽道长 $3000 \mu\text{m}$, 高 $1.2 \mu\text{m}$, 介质为氮) 在不同超松弛因子 ($\omega = 1$, $\omega = 100$, $\omega = 1000$) 下的演化过程

5 薄膜空气支撑问题

在一个 Winchester 类型硬盘驱动器中, 读写头在高于转动硬盘表面上方大约 50 nm 处漂浮. 特征长度 (间隙高度) 比标准状态下空气中的分子平均自由程 ($\sim 65 \text{ nm}$) 为小. 典型的 Knudsen 数约为 1.3. 平板的速度一般约为 25 m/s (在以 4800 转/min 旋转的磁盘的 5 cm 的半径处), 相应于 Mach 数 ~ 0.07 , 而 Reynolds 数 ~ 0.12 . 磁盘驱动器滑动头的典型长度是 1 mm , 即为磁头后端处间隙的 20000 倍, 磁头的宽度一般为 $(1/10 \sim 1/3)$ 长度. 这一挤压空气滑润问题可以图解地模型化为一个下平板 (旋转平面) 在自己平面内以速度 U 在倾斜放置的静止上平板 (读写头) 下面的运动 (见图 5). 两个平板间薄膜空气流动用 Reynolds 方程描述最为合适, 这是最早由 Reynolds^[27] 针对连续流体发展起来的将气体的压力 p 、密度 ρ 、平板速度 U 和间隙高度 h 联系在一起的微分方程. 这本质上是一个应用于被挤压的气体流动的各个截面而不是应用于一个流体元的质量守恒方程. 对于定常二维情况, 这一方程可以写为如下的归一化的形式^[28]

$$\frac{d}{dX} \left(H^3 P \frac{dP}{dX} \right) = A \frac{d}{dX} (PH) \quad (17)$$

其中 $X = x/L$, $H = h/h_0$, $P = p/p_0$, 而 $A = 6\mu UL/p_0 h_0^2$ 称为支撑系数. 在文献 [25] 中表明, 方

当未采用超松弛方法时 ($\omega = 1$), ρ 几乎保持不变. 图 4 给出 $1.2 \mu\text{m} \times 40 \mu\text{m} \times 4000 \mu\text{m}$ 槽道中入口压力为 8.7 psig, 13.6 psig 和 19.0 psig 时 IP 方法和实验^[17] 给出的氮的压力分布, 出口 Knudsen 数为 0.16, 结果相符很好. IP 模拟结果将在倒数第 2 节中用基于线化 Boltzmann 方程的更严格的计算加以验证.

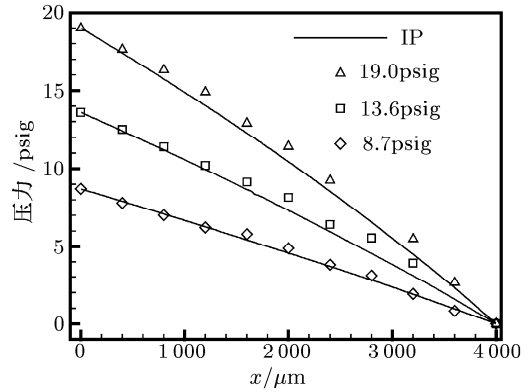


图 4 IP 方法和文 [16] 的实验数据的沿槽道压力分布的比较. 槽道长 $4000 \mu\text{m}$, 高 $1.2 \mu\text{m}$, 介质为氮, $Kn = 0.16$, 图中给出的以 psig 为单位的压力值为实验进口处的表压

程 (17) 不过反映了这样一个事实, 即流经任一截面的流率是 Couette 流的流率 (方程右端项) 与 Poiseuille 流的流率 (方程的左端, 带负号) 之和, 且这一流率在定常流动中从一个截面到另一个截面不发生变化. Fukui 和 Kaneko^[12] 表明薄膜支撑问题的线化 Boltzmann 方程的解可以分解为平面 Couette 流和 Poiseuille 流的解, 并推导出了概括化 Reynolds 方程, 在等温情况下可以将其写为

$$\frac{d}{dX} \left[\bar{Q}_{P,TR}(Kn) H^3 P \frac{dP}{dX} \right] = A \frac{d}{dX} (PH) \quad (18)$$

其中 $\bar{Q}_{P,TR}(Kn)$ 是 Poiseuille 流根据线化 Boltzmann 方程计算出来的过渡领域的流率 (经无滑流值 $Q_{P,C}$ 归一化了的), 并被证明与 Cercignani 和 Daneri 所得到的解^[28] 相同. 文 [30] 中提供了从 $\sigma = 0.7$ 到 $\sigma = 1$ 的 $\bar{Q}_{P,TR}(Kn)$ 计算值的列成表格的数据库, 而文 [11] 中则纪录了 Robert 给出的 $\sigma = 1$ 时的拟合公式

$$\bar{Q}_{P,TR}(Kn) = 1 + 6AKn + \frac{12}{\pi} Kn \log(1 + BKn) \quad (19)$$

这里 $A = 1.318889$, $B = 0.387361$. Alexander, Garcia 和 Alder^[11] 利用 DSMC 方法模拟了短头部长度 ($L = 5 \mu\text{m}$, $h_0 = 50 \text{ nm} = 0.05 \mu\text{m}$, $U = 25 \text{ m/s}$, $\sigma = 1$ 以及以上参数的其它组合条件下的) 空气支撑问题, 并得到了 DSMC 模拟与概括化 Reynolds 方程 (18) (以及 $\sigma = 1$ 情况下的方程 (19)) 出色的相符. 这证

明了概括化 Reynolds 方程可以在整个过渡领域求解空气支撑问题. 注意, Winchester 硬盘驱动器读写头的真实长度是 $1000 \mu\text{m}$, 而求解这一问题的 DSMC 方法只对短读写头 ($\sim 5 \mu\text{m}$) 进行了模拟.

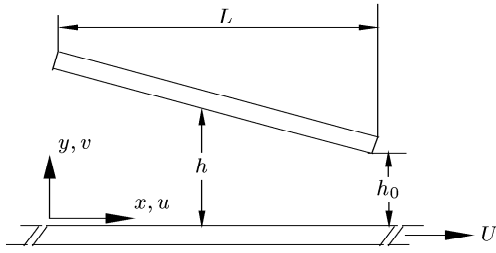


图 5 薄膜空气支撑流动的图解模型

文 [31] 用 IP 方法求解了薄膜空气滑润问题. 长方形区域 (从 $x = 0$ 到 $x = L$, 及从 $y = 0$ 到 $y = h(x = 0)$) 划分为均匀的长方网格, 其中有些为上平板所切割. 不完全网格与其相邻的下面的完全网格组成新的网格. 在文 [31] 中采用了一种光滑方法以去掉非物理振荡. 网格和相邻网格中的密度本身的加权平均值用来进行光滑. 例如, 对于短的读写头 ($L = 5 \sim 25 \mu\text{m}$), 将网格本身所占权重限制在 0.996 到 0.9996 之间, 保证了无振荡的正确结果. 如若对于 DSMC 方法和 IP 方法采用不同的时间步长, 也可以不用光滑过程: 对于 DSMC 方法, 通常的量级为碰撞时间的的时间步长就足够了, 但对于 IP 模拟, 要用小一点的时间步长以保证得到真实的宏观量的解. 利用合适的超松弛因子可以得到定常的收敛结果. 图 6 给出 IP 方法和

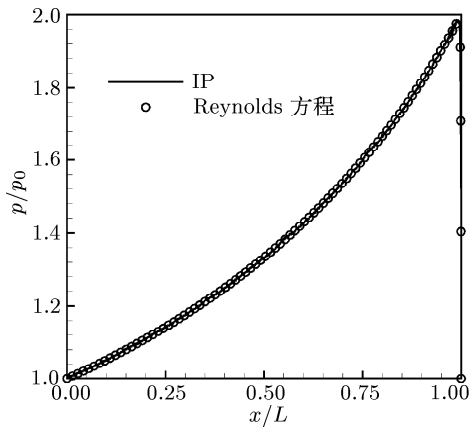


图 6 硬盘驱动器读写头支撑中的压力分布. 读头长度 $L = 1000 \mu\text{m}$, $U = 25 \text{ m/s}$, $\sigma = 1$, $Kn_0 = 1.25$, IP 和概括化 Reynolds 方程结果比较 [31]

利用拟合公式的概括化 Reynolds 方程 (19) 得到的压

力分布的比较. 相符是非常好的. IP 方法能够模拟真实长度的支撑问题, 提供详细的流场结构, 并能对于不同的边界条件 (不同的 σ) 给出结果.

6 利用退化的 Reynolds 方程求解微槽道流动问题

概括化 Reynolds 方程 (generalized Reynolds equation) 式 (18) 原本推导出来是为了应用于薄膜空气支撑问题的, 其中下平板以速度 U 运动而上平板倾斜一个角度. 我们建议将这一概括化 Reynolds 方程加以退化 (degenerate) 用来求解微槽道流动问题 [25,32]. 由于槽道的下平板静止, 右端项为零, 因为 $U = 0$ 及 $\Lambda = 0$. 由于两个平板平行, H 为常数, 可以从方程中消去. 因而应用于微槽道流动问题的概括化 Reynolds 方程退化为如下形式*)

$$\frac{d}{dX} \left[\bar{Q}_{P,TR}(Kn) P \frac{dP}{dX} \right] = 0 \quad (20)$$

$\bar{Q}_{P,TR}(Kn)$ 是 Poiseuille 流的由线化 Boltzmann 方程计算出来的、并用无滑流值 $Q_{P,C}$ 归一化了的过渡领域的流率. 槽道的入口和出口处的 P 之值要加以规定以使微槽道流动问题可解. 对于漫反射情况, 可以利用 $\bar{Q}_{P,TR}$ 的拟合公式近似方程 (19), 这时退化的 Reynolds 方程取为如下形式

$$\frac{d}{dX} \left\{ \left[1 + 6AKn + \frac{12}{\pi} Kn \log(1 + BKn) \right] P \frac{dP}{dX} \right\} = 0 \quad (21)$$

局地 Knudsen 数 Kn 最方便通过 P 来表达

$$Kn = \frac{\lambda}{h} = \frac{C}{P} \quad (22)$$

这里

$$C = \frac{\mu}{p_0 h} \sqrt{\frac{\pi RT_0}{2}} = \lambda_0/h = Kn_{out} \quad (23)$$

因为对于硬球有

$$\lambda = \frac{\mu}{p} \sqrt{\frac{\pi RT}{2}} \quad (24)$$

p_0 为出口处的压力, T_0 是气体的温度, μ 是温度 T_0 时气体的黏性系数. C 的物理意义是槽道出口处的 Knudsen 数. 将方程 (22) 代入方程 (21) 得到

$$\left[P + 6AC + \frac{12}{\pi} C \log \left(1 + \frac{BC}{P} \right) \right] \frac{dP}{dX} = D \quad (25)$$

其中 D 是通过积分定出的待定常数, 每次积分求解压力分布时, 其值同时得到, 其物理意义是用无滑流流率归一化了的经槽道的流率.

*) 关于 Reynolds 方程, 概括化 Reynolds 方程 (generalized Reynolds equation) 和退化 Reynolds 方程 (degenerated Reynolds equation) 的详细解释和推导, 参见 Shen C. Phys. of Fluids, 2005, 17: 046101

为了演示利用退化的 Reynolds 方程求解微槽道流动问题, 我们计算氮在 $1.2 \mu\text{m} \times 40 \mu\text{m} \times 3000 \mu\text{m}$ 槽道中和氮在 $1.2 \mu\text{m} \times 40 \mu\text{m} \times 4000 \mu\text{m}$ 槽道中的压力分布, 并和文 [16] 及文 [17] 的实验结果及文 [10] 中的 IP 计算比较. 对于 $T_0 = 294 \text{ K}$, $C = Kn_0$ 之值, 对于氮为 0.155 79, 对于氮为 0.052 325. 方程 (25) 在如下边界条件下积分

$$P|_{X=0} = p_{\text{in}}/p_{\text{out}}, \text{ 及 } P|_{X=1} = p_{\text{out}}/p_{\text{out}} = 1 \quad (26)$$

p_{in} 之值由文 [16, 17] 中提供实验数据给出. 积分的结果在图 7 和图 8 中绘出. 从比较中我们看到退化的 Reynolds 方程与 IP 方法 (两者曲线几乎重合) 及实验数据相符得很好. 这可以看做是 IP 方法用一个基于线化的 Boltzmann 方程的严格动理论计算进行

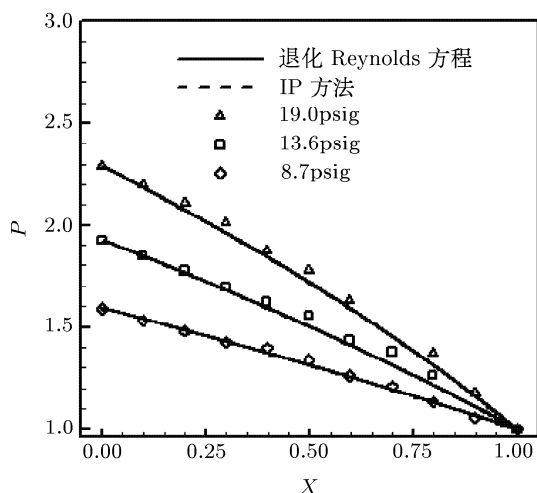


图 7 氮在微槽道流动中的压力分布. 槽道长 $4000 \mu\text{m}$, 高 $1.2 \mu\text{m}$, $Kn = 0.16$. 退化的 Reynolds 方程、IP 方法和实验结果 [17] 的比较. 注意, 退化的 Reynolds 方程与 IP 方法的曲线很难区分开来. 图中给出的以 psig 为单位的压力值为实验进口处的表压

7 结 语

信息保存 (IP) 法可以模拟长的 ($3000 \sim 7500 \mu\text{m}$) 微槽道和真实长度 ($1000 \mu\text{m}$) 的硬盘驱动器的支撑的低速稀薄气体流动问题, 其结果与实验数据、DSMC 方法、概括化 Reynolds 方程和退化的 Reynolds 方程极其相符. 由于后者是利用线化的 Boltzmann 方程计算出来的 Poiseuille 流动的流率, 这种相符就可以看做是用准确的气体动理论对于 IP 方法模拟二维微流动的验证. 经过这样的检验以后, 就可以有信心地将 IP 方法应用于复杂外形的 MEMS 流动, 这样的流动可以容易地、与 DSMC 方法一样灵活地, 用 IP 方法加以处理. 守恒格式和超松弛方法是求解所有 MEMS 中内部稀薄气体流动时要使用

的验证.

其流率 $Q_{P,TR}(Kn)$ 由线化的 Boltzmann 方程所提供的退化的 Reynolds 方程 (21) 适合于求解微槽道流动问题并可用于检验整个过渡领域中的各种方法. 从方程 (25) 看出, 微槽道稀薄气体流动在规定了入口和出口的压力 P_{in} 和 P_{out} 以及出口处的 Knudsen 数 $C = Kn_0$ 后就被完全确定了, 槽道的长度不作为一个决定因子进入问题之中 (请注意大的长度给直接模拟带来了多么大的麻烦). Poiseuille 流基于严格的气体动理论的、在各种可能的表面性质的组合下计算出的流率的数据, 尤其是以拟合公式形式给出的数据, 对于微槽道流动问题, 薄膜空气支撑问题, 以及微机械加速器的气体阻尼问题 [33] 都是很希望得到的.

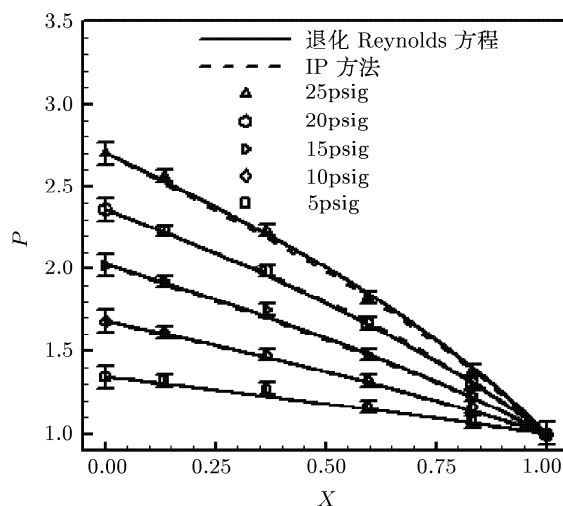


图 8 氮在微槽道流动中的压力分布. 槽道长 $3000 \mu\text{m}$, 高 $1.2 \mu\text{m}$, 退化的 Reynolds 方程、IP 方法和实验结果 [16] 的比较. 图中给出的以 psig 为单位的压力值为实验进口处的表压

的方法.

建议将退化的 Reynolds 方程 (其中 Poiseuille 流动的流率由线化的 Boltzmann 方程计算出来) 应用于微槽道流动, 提供了一个具有严格的气体动理论性的、检验各种试图处理内部 MEMS 流动方法的基准. 希望能够得到 Poiseuille 流基于严格的气体动理论的、在各种可能的表面性质组合下计算流率的数据库.

IP 方法已用于模拟单方向流动、2D 和 3D 外流问题, 其结果与理论研究或者实验数据相符很好, 本文由于篇幅有限而未加以讨论. 有兴趣的读者可参看文献 [24, 25].

将 IP 方法扩展到温度变化的情况是有实际意义的和有趣的, 有一些部分的成功的尝试 [25,34,35]. 将

现在的 IP 算法加以改进和发展使其适用于温度变化的情况是一个挑战. 此外, 进一步对方法的基本假设加以理论论证也是希望的.

致谢 作者感谢第 24 届国际稀薄气体动力学会议主席 Mario Capetelli 教授的邀请, 以及国际咨询委员会对其最近工作的兴趣并指定他做“内流和真空系统”专题的邀请报告.

参 考 文 献

- 1 Aoki K. Dynamics of rarefied gas flows: asymptotic and numerical analyses of the Boltzmann equation. AIAA Paper 2001-0874, 2001
- 2 Bhatnagar L, Gross E P, Krook M A. A model for collision processes in gases. *Phys Rev*, 1954, 94: 511~525
- 3 Frish U, Hasslacher B, Pomeau Y. Lattice gas automaton for the Navier-Stokes equation. *Phy Rev Let*, 1986, 56: 1505~1508
- 4 Chen S, Doolen G D. Lattice Boltzmann method for fluid flows. *Ann Rev Fluid Mech*, 1998, 30: 329~364
- 5 Nie X, Doolen G D, Chen S. Lattice Boltzmann simulation of fluid flows in MEMS. *J Stat Phys*, 2002, 107: 279~289
- 6 Shen C, Tian D B, Xie C, Fan J. Examination of the LBM in simulation of microchannel flow in transitional regime. *Microscale Thermophysical Engineering*, 2004, 8: 423~432
- 7 Tian D B, Shen C, Xie C, Fan J. The testing of the feasibility of the LBM in simulation of the transitional flow regime. In: Proceedings of the 2003 seminar on frontier problems of the aerodynamics, 2003 (in Chinese)
- 8 Karniadakis G E, Sherwin S. Spectral/hp Element Method for CFD. New York: Oxford Univ Press, 1999
- 9 Karniadakis G E, Beskok A. Micro Flows, Fundamentals and Simulation. New York, Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2001
- 10 Shen C, Fan J, Xie C. Statistical simulation of rarefied gas flows in micro-channels. *J Comp Physics*, 2003, 189: 512~526
- 11 Alexander F J, Garcia A L, Alder B J. Direct simulation Monte Carlo for thin film bearings. *Phys of Fluids*, 1994, 6: 3854~3860
- 12 Fukui S, Kaneko R. Analysis of ultra-thin gas film lubrication based on linearized Boltzmann equation: first report-derivation of a generalized lubrication equation including thermal creep flow. *J Tribology*, 1988, 110: 253~262
- 13 Bird G A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Oxford: Clarendon Press, 1994
- 14 Oran E S, Oh C K, Cybek B Z. Direct simulation Monte Carlo: recent advances and applications. *Ann Rev Fluid Mech*, 1998, 30: 403~431
- 15 Liu J Q, Tai Y C, Pong K C, Ho C M. Micromachined channel/pressure sensor systems for micro flow studies. In: The 7th International Conference on Solid State Sensors and Actuators, Tranducers, 1993. 995~998
- 16 Pong K C, Ho C M, Liu J Q, Tai Y C. Non-linear pressure distribution in uniform microchannels. ASME, FED 197, *Application of Microfabrication to Fluid Mechanics*, 1994. 51~56
- 17 Shin J C, Ho C M, Liu J Q, Tai Y C. Monatomic and polyatomic gas flow through uniform microchannels. ASME-DSC 59, 1996. 197
- 18 Arkilic E B, Schmidt M A, Breuer K S. Measurement of the TMAC in silicon microchannels. In: Shen C, ed. Rarefied Gas Dynamics, Beijing: Peking Univ. Press, 1997. 983~988
- 19 Arkilic E B. Measurement of the mass flow and the TMAC in silicon microchannels. [Ph D Thesis]. MIT, DFRL TR 97-1, 1997
- 20 Oh C K, Oran E S, Sinkovits R S. Computation of high-speed, high Knudsen number microchannel flows. *J Thermophysics and Heat Transfer*, 1997, 12: 417~449
- 21 Nance R P, Hash D, Hassan H A. Role of boundary conditions in Monte Carlo simulation of MEMS devices. *J Thermophysics and Heat Transfer*, 1997, 11: 497
- 22 Fan J, Shen C. Statistical simulation of low-speed unidirectional flows in transitional regime. In: Brun R, Campargue R, Catignol R, Lengrand J C, eds. Rarefied Gas Dynamics, Cepadues Editions, 1999. 2: 245~252
- 23 Fan J, Shen C. Statistical simulation of low-speed rarefied gas flows. *J Computational Physics*, 2001, 167: 393~412
- 24 Shen C. Rarefied Gas Dynamics. Beijing: National Defense Industry Press, (in Chinese), 2003
- 25 Shen C. Rarefied Gas Dynamics, Fundamentals, Simulations and Micro Flows. Berlin-Heidelberg: Springer Verlag, 2005
- 26 Jiang J, Shen C, Fan J. Statistical simulation of non-circular cross section Poiseuille flows. In: Proceedings of the 1st Intern. Conference on micro and mini-channels, ASME, 2003. 411~418
- 27 Reynolds O. On the theory of lubrication and its application to Mr. Beauchamp Tower's experiments including an experimental determination of the viscosity of the olive oil. *Philos Trans R Soc London*, 1886, A177: 157~234
- 28 Gross W A, Matsch L A, Castelli V, Eshel A, et al. Fluid Film Lubrication. New York: Wiley, 1980
- 29 Cercignani C, Daneri A. Flow of a rarefied gas between two parallel plates. *J Applied Physics*, 1963, 34: 3509~3513
- 30 Fukui S, Kaneko R. A database for interpolation of Poiseuille flow rates for high Knudsen number lubrication problems. *J Tribology*, 1990, 112: 78~83
- 31 Jiang J Z, Shen C, Fan J. Statistical simulation of thin-film bearings. Capitelli M, ed. Rarefied Gas Dynamics, AIP proceedings-762, 2005. 180~185
- 32 Shen C. Use of the degenerated Reynolds equation in solving the microchannel flow problem. *Phys of Fluids*, 2005, 17: 046101
- 33 Veijola T, Kuisma H, Lahdenpera J. Equivalent-circuit model of the squeezed gas film in a silicon accelerometer. *Sensors and Actuators*, 1995, A48: 239
- 34 Shen C, Jiang J Z, Fan J. Information preservation method for the case of temperature variation. In: Bartel T J, Gallis M A, eds. Rarefied Gas Dynamics, AIP proceedings-585, 2001. 185~192
- 35 Sun Q H, Boyd I D. A direct simulation method for subsonic, microscale gas flows. *J Computational Physics*, 2002, 179: 400~425

(译自 Information Preservation (IP) method in simulation of internal rarefied gas flows in MEMS.

In: Capitelli M, ed. AIP Conference Proceedings-762, Rarefied Gas Dynamics, 24th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics. 2005. 141~149

AIP0-7354-0247-7/05)

INFORMATION PRESERVATION (IP) METHOD IN SIMULATION OF INTERNAL RAREFIED GAS FLOWS IN MEMS ^{*,**}

SHEN Ching[†]

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

Abstract This paper reviews firstly method for treating low speed rarefied gas flows: the linearized Boltzmann equation method, the Lattice Boltzmann method (LBM), the Navier-Stokes equation plus slip boundary conditions and the DSMC method, and discussed the difficulties in simulating low speed transitional MEMS flows, especially the internal flows. In particular, the present version of the LBM is shown unfeasible for simulation of MEMS flow in transitional regime. The information preservation (IP) method overcomes the difficulty of the statistical simulation caused by the small information to noise ratio for low speed flows by preserving the average information of the enormous number of molecules a simulated molecule represents. A kind of validation is given in this paper. The specificities of the internal flows in MEMS, i. e. the low speed and the large length to width ratio, result in the problem of elliptic nature of the necessity to regulate the inlet and the outlet boundary conditions that influence each other. Through the example of the IP calculation of the microchannel (thousands micrometers long) flow it is shown that the adoption of the conservative scheme of the mass conservation equation and the super relaxation method resolves this problem successfully. With employment of the same means the IP method solves the thin film air bearing problem in transitional regime for authentic hard disc write/read head length ($L = 1\,000$ micrometers) and provides pressure distribution in full agreement with the generalized Reynolds equation, while before this the DSMC check of the validity of the Reynolds equation was done only for short ($L = 5$ micrometers) drive head. The author suggests degenerate the Reynolds equation to solve the microchannel flow problem in transitional regime, thus provide a means with merit of strict kinetic theory for testing various methods intending to treat internal MEMS flows in transitional regime.

Keywords MEMS, rarefied gas flow, information preservation method, conservation scheme, super relaxation method, linearized Boltzmann equation, Lattice Boltzmann method, microchannel flow, hard disc drive write/read head, degenerated Reynold equation

* The project supported by the National Natural Science Foundation of China (90205024)

** An invited paper on the topic International Flows and Vacuum Systems, Rarefied Gas Dynamics

† E-mail: cshen@imech.ac.cn