

錐形管自由分子傳輸機率之測試粒子蒙地卡羅模擬

曾培元* 劉明和** 朱裕瑞**

* 國防大學中正理工學院航空系
** 國防科學研究所

摘要

本文應用測試粒子蒙地卡羅法模擬無碰撞或自由分子流區的氣體分子流經一錐形管的自由分子傳輸機率，藉以探討錐形管的幾何參數，如錐度及長徑比對傳輸機率之影響，同時也探討錐度為 0° 的直圓管自由分子傳輸機率方程式的適用範圍。研究結果顯示，測試粒子蒙地卡羅法確是適用於一單獨軌跡間導致多重表面反射之複雜的邊界流動的計算，而管的錐度及長度是影響管內自由分子傳輸機率的重要參數。另外，也明確定出直圓管自由分子傳輸機率方程式適用長徑比的範圍。

關鍵詞：測試粒子蒙地卡羅法，自由分子流，傳輸機率

Test-Particle Monte Carlo Simulation of the Free Molecular Transmission Probability Through a Taper Pipe

Pei-Yuan Tzeng^{*}, Ming-Ho Liu^{**}, and Yu-Jui Chu^{**}

^{*}Department of Aeronautical Engineering,
^{**}Graduate Institute of Defense Science,
Chung Cheng Institute of Technology,
National Defense University

ABSTRACT

In this paper we use test-particle Monte Carlo method to demonstrate the effects of the geometry parameters of a taper pipe on the free molecular transmission probability and examine the practical range of the ratio of length to radius for the free molecular transmission probability approximation equations for a cylindrical pipe. Based on the results of numerical simulation, we find that test-particle Monte Carlo method is suitable for flows with complicated boundaries that lead to multiple surface reflections during a single trajectory and the taper and the ratio of length to radius are important parameters in predicting the free molecular transmission probability for a taper pipe. In the meantime, we also clarify an applicable range of the ratio of length to radius for the free molecular transmission probability approximation equations of a cylindrical pipe.

Key words: test-particle Monte Carlo method, free molecular flows, transmission probability

壹、前言

稀薄氣體動力學 (rarefied gas dynamics) 是一多種多樣的領域，包含範圍非常廣，例如，高空極音速流場 (high altitude hypersonic flow fields)、與固體及液體表面作用的氣體之反射與反應特性、分子碰撞的能量轉移現象、噴霧動力學 (aerosol dynamics)、叢集形成與拓樸學 (cluster formation and topology)、蒸發與凝結誘發之流動 (flows induced by evaporation and condensation)、上氣層動力學 (upper-atmospheric dynamics) 等，其他的還有真空泵浦性能 (vacuum-pump performance)、太空船污染 (spacecraft contamination)、太空船充電 (spacecraft charging)、以及氣體與同位素分離 (gas and isotope separations) 等等 [1]，而目前相當熱門的微機電系統 (micro-electro-mechanical systems (MEMS)) 也不乏稀薄氣體動力學的應用。

基本上，上述提及的這些課題主要都是研究不連續的氣體分子性質在不能安全的忽略時的流動現象，這即是稀薄氣體動力學領域的中心主題。當氣體分子平均自由路徑 (mean free path) 與系統的特徵尺度 (characteristic length) 相比不能再忽略時，則連性流體 (continuum fluid) 的近似條件崩潰而必須考慮分子的性質，即需考慮氣體稀薄效應的影響。氣體流動的分子或微觀模式必須對比於巨觀或連體模式，因此必須導入一個無因次參數 Knudsen 數 Kn 來區分，定義為

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

其中 λ 為氣體分子的平均自由路徑，而 l 為系統的特徵流動尺度。根據 Kn 值的大小，氣體的流動區分如下 [2]: (1) $Kn \leq 0.01$ 稱為連

體流區 (continuum flow region); (2) $0.01 \leq Kn < 0.1$ 稱為滑動流區 (slip flow region); (3) $0.1 \leq Kn < 10$ 稱為過渡流區 (transition flow region); (4) $Kn \geq 10$ 稱為自由分子流或無碰撞流區 (free molecular or collisionless flow region)。

管道中稀薄氣體的流動問題已有許多學者進行研究，如 Davis [3] 以測試粒子蒙地卡羅法 (Test-particle Monte Carlo method) 計算在定常態下，自由分子流區的氣體通過肘形圓管以及同心圓管的流率，由於分子的平均自由路徑非常大，因此假設分子在管內彼此獨立不會發生碰撞，因此，大量的分子可逐一計算，其以分子流出圓管的機率來代表流率，研究結果顯示隨著圓管長徑比的增加，氣體分子流出機率逐漸減少。Cercignani 和 Daneri [4] 以數值方法探討兩平行板間的稀薄氣體體積流率與 Knudsen 數的關係， $Kn \approx 0.1 \sim 100$ ，結果顯示在 $Kn \approx 0.91$ 時，體積流率有最小值，且數值計算與實驗及 Takao [5] 的近似計算結果一致。Liepmann [6] 研究通過小圓薄孔 (orifice flow) 的氣體流率問題，以理論及實驗方式探討氣體由連體區轉換至自由分子流的限制，所使用的 Knudsen 數定義為 $Kn \equiv \lambda / D$ ，其中 D 為圓孔直徑， Kn 從 50 到 0.005，結果顯示轉換區相當窄， Kn 約在 0.1 至 10 之間。Berman [7] 根據 DeMarcus [8] 的傳輸機率的積分形式，重新整理而得出包括細長圓管 (capillaries)、平板 (flat plates) 以及稀薄的球基座 (dilute beds of spheres) 的自由分子流的傳輸機率 (transmission probability) 近似方程式，並列出各方程式的適用條件，惟並未詳細指出適用的確實值為何。Ohwada 等人 [9] 採用硬球 (hard sphere) 模式及散反射邊界條件的線性化 Boltzmann 方程式研究兩平行板間稀薄氣體的 Poiseuille 及熱蒸發的流動現象，

$Kn \approx 0.1 \sim 11$ 。研究結果顯示，在質量流率方面，與 Cercignani 和 Daneri [4] 的結果一致。Loyalka 和 Hamoodi [10] 以數值方法研究圓管中稀薄氣體的 Poiseuille 流動。其以 S_N 數值方法 [11] 並採用硬球模式及散反射邊界條件解算圓管的線性化 Boltzmann 方程式， $Kn \approx 0.001 \sim 10.0$ ，結果證明此法在模擬高階網格的大小及面積時是非常有效率，惟採用硬球模式的模擬結果與 Knudsen 的理論方程式有些偏差，需採用更接近實際分子間以及氣體與壁間的相互作用之模式。Tison [12] 實驗量測及不同的理論模式來探討氣體流經金屬毛細管 (metal capillary) 的流率問題， $Kn \approx 0.01 \sim 10$ 。研究結果顯示在整個研究範圍滑動流模式足以描述皺形 (crimped) 金屬毛細管的洩漏，對於固定直徑管，其流動在大的壓力差時，無論哪種理論模式表示式都不能滿足所觀察到的資料形式，而其導電性顯示與小壓力差的毛細管先前的實驗和理論模式的形式相似的一個截然不同最小量。

雖然過去對管道中稀薄氣體的流動有理論及實驗的研究，但其流動範圍多集中在轉換區，即 $0.01 \leq Kn < 10$ 的範圍 [3,4,9,10,12]，對於自由分子流區的探討較少 [2,6,7]，而其中有關自由分子流率的研究中，雖有數值計算以及理論方程式，但都僅針對直圓管，對於錐形圓管的幾何參數，如長徑比和錐度 (taper angle) 對分子流率的影響並未探討。另外，數值計算與理論方程式的結果其一致性為何亦未有深入研究。故本文即針對錐形管以測試粒子蒙地卡羅法模擬其自由分子傳輸機率，藉此瞭解錐形管幾何參數對自由分子流的影響，同時也在錐度為 0° 時與直圓管自由分子傳輸機率方程式進行比較，以了解兩者之差異性，並明確定出方程式適用的長徑比範圍。

本文架構如下：首先就所欲研究的物理問

題及其假設條件予以描述 (第二節)，其次就相關的理論方程式進行說明 (第三節)，接著簡單介紹測試粒子蒙地卡羅法及其步驟 (第四節)，再來探討錐度與長徑比對自由分子傳輸機率的影響，並對錐度為 0° 的直圓管定出各傳輸機率方程式的適用範圍 (第五節)，最後進行結論 (第六節)。

貳、問題描述

考慮內部流動為自由分子流的一錐形圓管，其幾何形狀如圖 1，其中 r_0 為圓管入口半徑； b 為管長； ϕ 為方位角； θ 為俯仰角； φ 為錐形管之錐度， P 為分子在管中的任意一點，該處分子速度為 v ， P' 則是沿 $-v$ 方向反推回去交於管壁上的點， P 與 P' 的軸向座標分別為 x 與 x' 。

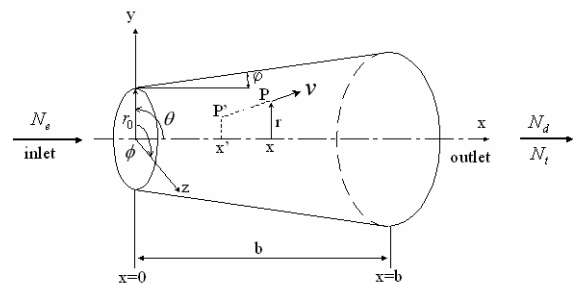


圖 1. 錐形圓管自由分子流幾何形狀圖。

假設(1)管道入口處為平衡狀態；(2)壁面溫度為常數；(3)流動定常、無外力作用於分子；(4)氣體分子在管壁處散反射 (diffuse reflection)，即熱協調係數 (thermal accommodation coefficient) 為 1，所以從壁面點 P' 反射之氣體分子的速度分佈函數為

$$f^+(v, x') = \frac{\Psi(x')}{2\pi(k_B T/m)^2} \exp\left(-\frac{v^2}{2k_B T/m}\right) \quad (2)$$

其中速度 $v = v_x \bar{i} + v_y \bar{j} + v_z \bar{k}$ ， $\Psi(x')$ 為分子與管壁的碰撞頻率， k_B 為 Boltzmann 常數， T 為管壁溫度， m 為分子質量。P 點處氣體分子的速度分佈函數與 P' 處相同，即 $f(v, x) = f^+(v, x')$ 。

參、理論方程式

在理論方程式方面，本文將分別就錐形管內自由分子的運動方程式及直圓管自由分子傳輸機率方程式予以說明：

一、錐形管內自由分子運動方程式

在錐形管自由分子流的傳輸機率上，我們採用測試粒子蒙地卡羅法來計算，因此首先必須推導出管內分子的運動軌跡方程式。根據圖 1 設錐形管每單位時間內有 N_e 個分子流入，流出的分子總數為 N_l ，不與管壁碰撞而直接流出之分子數為 N_d ，其分子總流出率及直接流出率分別定義為 N_l/N_e 與 N_d/N_e ，也就是分子的傳輸機率與直接傳輸機率，分子與固體邊界之交互作用為散反射(diffuse reflection)模式。流動為軸對稱流動，並已達定常狀態(steady state)，由於為個別分子運動軌跡的計算，其軌跡僅與分子速度的方向有關，而與速度之大小無關，至於速度的方向則利用蒙地卡羅法來給定。

圖 2 為錐形管測試粒子入口段運動軌跡之側視與透視圖，其中 s 表示分子由起點至管壁碰撞點所行走之距離； r_1 為分子在入口徑向之初始位置， r 為分子與壁碰撞處之管半徑。

根據圖 2 可建立錐形管之曲面方程式為：

$$y^2 + z^2 = (r_0 + px)^2 = r^2 \quad (3)$$

其中 $p = \tan \varphi$

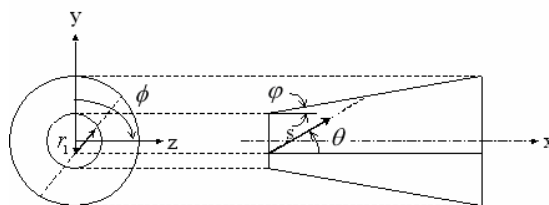


圖 2. 錐形管測試粒子入口段運動軌跡之側視與透視圖。

分子之運動軌跡可分為入口段以及與管壁碰撞後兩個部份。根據圖 2 之幾何分析可得入口段分子運動軌跡在水平方向的分量為

$$x_{c1} = \frac{l_1}{m_1^2 + n_1^2 - p^2 l_1^2} \left[m_1 r_1 + r_0 p l_1 + \sqrt{(r_0^2 - r_1^2) n_1^2 + m_1^2 r_0^2 + r_1 p l_1 (r_1 p l_1 + 2 r_0 m_1)} \right] \quad (4)$$

其中

$$l_1 = \cos \theta, \quad m_1 = \sin \theta \cos \phi, \quad n_1 = \sin \theta \sin \phi \quad (5)$$

$$\theta \in \left[0, \frac{\pi}{2} \right], \quad \phi \in [0, 2\pi], \quad r_1 \in [0, r_0]$$

由(4)式可知當 $m_1^2 + n_1^2 - p^2 l_1^2 < 0$ ，即分子入射的俯仰角 $\theta <$ 錐形管錐度 φ ，則入射分子不會與壁碰撞而直接穿出錐形管，所以

$$x_{c1} > b \quad (6)$$

反之， $m_1^2 + n_1^2 - p^2 l_1^2 > 0$ ，即 $\theta > \varphi$ ，則入射分子與壁碰撞，所以

$$x_{c1} < b \quad (7)$$

當分子未直接流出而與管壁發生碰撞，假設入射粒子與管壁碰撞後為散反射(diffuse reflection)，則 2 個撞擊點間水平方向的分量

為

$$x = \frac{2r_{c1}l_c(m_c + pl_c)}{m_c^2 + n_c^2 - p^2l_c^2} \quad (8)$$

分子總運動距離的水平分量為

$$x_c = x_{c1} + x = x_{c1} + \frac{2r_{c1}l_c(m_c + pl_c)}{m_c^2 + n_c^2 - p^2l_c^2} \quad (9)$$

其中

$$l_c = m_1, \quad m_c = l_1, \quad n_c = n_1$$

$$\theta \in [-\phi, \pi - \phi], \quad \phi \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right] \& \left[\frac{3\pi}{2}, 2\pi\right]$$

同理，當 $x_c > b$ ，則不再與管壁發生碰撞而流出，當 $0 < x_c < b$ ，則再次發生碰撞，需依(9)式再次計算 x_c ；若 $x_c < b$ 且 $x_c < 0$ ，則回流至入口，此粒子不予計算。

二、直圓管 ($\phi = 0^\circ$) 自由分子傳輸機率方程式

當管內分子處於自由流區時， $Kn \equiv \lambda/r_0 \rightarrow \infty$ ，即分子平均自由路徑遠大於管徑，因此可忽略氣體分子之間的碰撞，若流動由外壓力驅動，Knudsen 首先證明了管內的擴散傳輸過程與壓力梯度成正比而與密度無關，據此，圓管內的自由分子質量流率為 [13]

$$M_{FM} = \frac{4}{3}r_0^3 \frac{\Delta P}{b} \sqrt{\frac{2\pi}{RT}} \quad (10)$$

其中 ΔP 為管入口與出口壓力差， R 為理想氣體常數。

(10)式是基於無限長圓管 (即 $r_0 \square b$) 的假設導出的。當薄壁小孔兩側氣體溫度均為 T ，壓力差亦為 ΔP 時，通過面積 $A = \pi r_0^2$ 的小

孔的質量流率為

$$M_{orifice} = \frac{r_0^2}{2} \Delta P \sqrt{\frac{2\pi}{RT}} \quad (11)$$

所以，長管與薄孔的質量流率比，又稱為“傳輸機率” (transmission probability) 為 [14]

$$P_{tr} = \frac{8}{3L} \quad (12)$$

其中 L 為長徑比，定義為 $L \equiv b/r_0$ 。所謂傳輸機率表示一個進入管入口的氣體分子最後通過出口 (而不是重又通過入口) 離開管出口的機率，也就是相當於測試粒子蒙地卡羅法模擬之自由分子流出率 N_i/N_e 。

對於直圓管自由分子流的傳輸機率最為熟知的是 Berman [7] 所整理的傳輸機率近似方程式，定義如下：

$$P_{tr} = P_{tr1} - P_{tr2} \quad (13)$$

其中

$$P_{tr1} = 1 + (L^2/4) - (L/4)(L^2 + 4)^{1/2}$$

$$P_{tr2} = \frac{[(8 - L^2)(L^2 + 4)^{1/2} + L^3 - 16]^2}{72L(L^2 + 4)^{1/2} - 288\ln[L + (L^2 + 4)^{1/2}] + 288\ln 2}$$

對於小 L

$$P_{tr} = 1 - (L/2) + (L^2/4) - (5L^3/48) + (L^4/32) - (13L^5/2560) - (L^6/3840) + \dots \quad (14)$$

對於大 L

$$P_{tr} \sim \frac{8}{3L} - \frac{2\ln L}{L^2} - \frac{91}{18L^2} + \frac{32\ln L}{3L^3} + \frac{8}{3L^3} - \frac{8(\ln L)^2}{L^4} + O(1/L^4) \quad (15)$$

由(15)式可看出，當 $L \gg 1$ ，則 $O(1/L) \gg O(1/L^2) \gg O(1/L^3) \gg \dots$ 時，二次項以上可忽略，故得傳輸機率為

$$P_r \sim \frac{8}{3L}$$

此式與(12)式相同，而(12)式是基於無限長圓管，也就是 $L \gg 1$ 的假設而推導出的，故可知(12)式為(15)式之特例，且確實僅適用於長圓管，不適用於短圓管。

在(14)式及(15)式中，其適用條件分別說明為小 L 及大 L ，然其值究竟為何，並未明確說明，因此，本研究將應用數值方法對這個部份進行探討，以了解(14)式及(15)式確實適用的範圍。

肆、數值方法及步驟

一、測試粒子蒙地卡羅法

本研究在數值計算上採用測試粒子蒙地卡羅法，這是 1961 年由 Davis [3] 提出的一種應用隨機數 (random number) 的方法，而任何應用隨機數 (random numbers) 的方法均可稱之為一種「蒙地卡羅法 (Monte Carlo method)」[15]。當流動為無碰撞或自由分子流時，Knudsen 數趨近於無窮大，分子間的平均路徑相對系統的特徵尺度非常大，換言之，分子不受其他分子作用力的影響。因此，根據牛頓運動定律，分子的運動軌跡應為一條直線而不會發生偏折，故分子間不會發生碰撞，其運動軌跡是彼此獨立而不會相互干擾，且是一連串的產生而不是同時，故可以一個分子一個分子依序處理，隨機的選取模擬分子逐一計算。若管道內之流動為自由分子流時，則分子仍會與固體表面發生交互作用而造成反射，而

因假設分子與壁碰撞為散反射，故碰撞後的運動軌跡亦是隨機的，測試粒子蒙地卡羅法即是應用此種特性進行計算。對程式而言可利用迴圈控制 (loop control) 來達到分子運動軌跡的計算。由於分子的運動軌跡只會受到固體表面的作用而反射，所以分子的運動狀態不外是直接流出出口或經表面一次或多次反射流出出口或流回入口兩種情形。雖然測試粒子蒙地卡羅法相當適合用於模擬自由分子流區的分運動，但由於大量的分子是一個個的計算，因此主要的計算需求不是儲存容量而是速度，惟由於現今電腦的計算速度已大幅提昇，大大了改善這項缺點。

二、數值步驟

測試粒子蒙地卡羅法的主要步驟依序為 (1) 設定模擬分子數。(2) 隨機選取入口分子計算其運動軌跡。(3) 判斷此分子是否與管壁發生碰撞，以決定其為直接流出或再次碰撞。(4) 若直接流出則紀錄後，重複步驟(2)計算下一分子；若分子與管壁再次發生碰撞，計算碰撞後的運動軌跡。(5) 判斷再次碰撞後的分子，若流出，則紀錄，重複步驟(2)；若回流，則不紀錄，重複步驟(2)；再次碰撞，則重複步驟(4)，直至分子為流出或回流止，再重複步驟(2)計算下一分子的運動軌跡。(6) 將流出的分子累加，作為計算流率之用。程式計算流程如圖 3 [16]。

伍、結果與討論

本研究首先計算錐形管之錐度 $\phi = 0^\circ$ 且長徑比 $L = b/r_0 = 1$ 的自由分子傳輸機率，以了解統計的散佈及驗證程式的正確性。入口抽樣分子數 (sampling size) N_e 分別取 1,000、

2,000、2,500 及 5,000 個，其對應抽樣次數 (number of sampling) N_s 分別為 10,000、5,000、4,000 及 2,000 次，每一次的運算即代表了一次的取樣，因此總共計算了 10^7 個分子的軌跡。模擬的結果顯示當抽樣粒子數 1,000 個，抽樣次數 10,000 次時， N_t/N_e 之平均值約為 0.672，與 Clausing [16] 計算結果相同；而當樣粒子數 5,000 個，抽樣次數 2,000 次時， N_t/N_e 之平均值約為 0.6719，也與羅 [17] 的結果 0.6727 相當接近，因此驗證了程式的正確性，同時也顯示測試粒子蒙地卡羅法確實適用於一單獨軌跡間導致多重表面反射之複雜的邊界流動的計算。

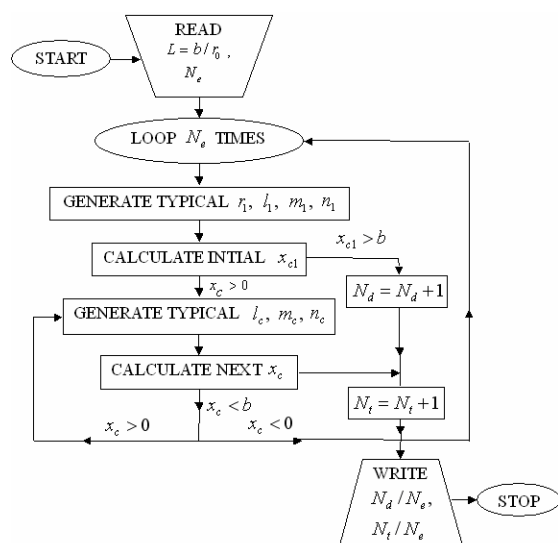


圖 3. 測試粒子蒙地卡羅法程式流程圖。

圖 4 顯示錐形管 $\varphi = 0^\circ$ 及 $L = 1$ 時，在不同的取樣情況下，其傳輸機率 N_t/N_e 值之散佈情形。由圖中可看出不論抽樣方式為何，其 N_t/N_e 的分佈趨勢相同，各種抽樣方式之平均值均約為 0.672，標準差約為 0.82%，若將其視為常態分佈則其標準差約為 0.66%，這些值均不因抽樣方式不同而有所不同。因此，後續我們皆採抽樣粒子數 1,000 個，抽樣次數 10,000 之抽樣方式，來進行不同錐度及長徑比

的模擬計算。

由上述的結果，我們驗證了測試粒子蒙地卡羅法的適用性及程式的正確性，接著我們以測試粒子蒙地卡羅法探討不同錐度與長徑比對錐形管傳輸機率的影響，模擬的錐度 $\varphi = -20^\circ \sim 20^\circ$ ，長徑比 $L = 1 \sim 3$ 。

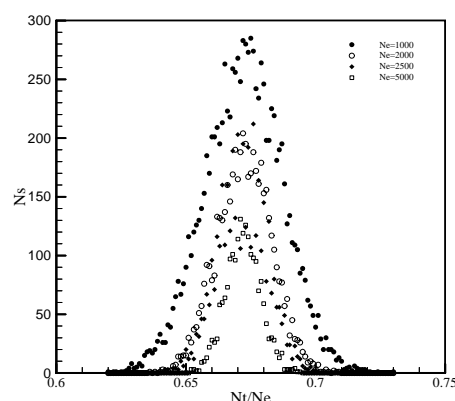


圖 4. 不同抽樣方式之直圓管自由分子傳輸機率散佈情形。

圖 5 顯示錐形管自由分子傳輸機率與錐度及長徑比之關係。由圖中可看出，在相同的長徑比下，隨著錐度由 20° 逐漸減小到 -20° 時，傳輸機率是逐漸減少，而對於不同的長徑比其減少的趨勢也不相同，在長徑比 $L = 1$ 時，傳輸機率隨著錐度減少的趨勢較平緩，但隨著 L 的增加，其隨錐度減小而減少的趨勢愈加陡峭。另外，在相同的錐度下，長徑比愈大則傳輸機率愈小，且隨著錐度減小，其減少的量更為明顯。而由圖可看出在 $\varphi = -20^\circ$ 且 $L = 3$ 時，流率為 0，這是因為此時錐形管出口半徑已趨零，即出口完全封閉，故無分子流出。又各算例之傳輸機率均小於 1，顯示流入的分子並未完全流出，而有部份的分子回流至入口處。

圖 6 顯示直接流出之自由分子流率與錐度及長徑比之關係。如同上述自由分子傳輸機率與錐度及長徑比之關係，隨著錐度逐漸減

小，直接流出之分子流率亦逐漸減少，在長徑比 $L=1$ 時，幾乎呈線性變化，隨著 L 的增加直接流出之分子流率也愈小。

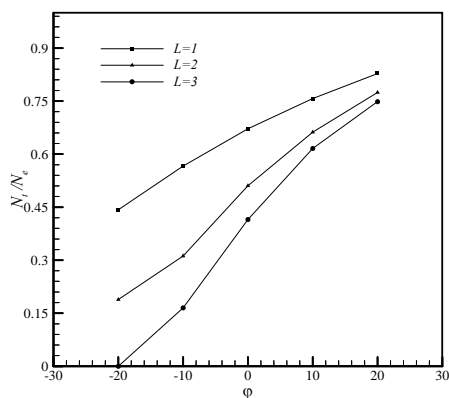


圖 5. 錐形管自由分子傳輸機率與錐度及長徑比之關係。

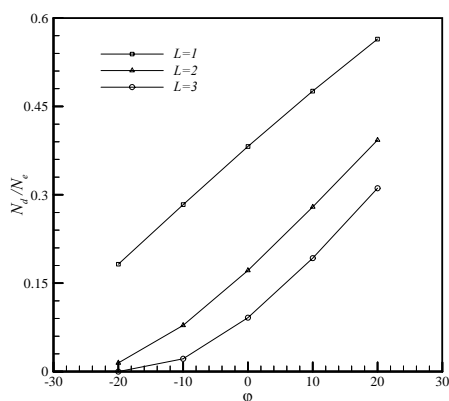


圖 6. 直接穿越管之分子流率與錐度及長徑比之關係。

由圖 5 及圖 6 的結果可知，錐形管之錐度及長度是影響傳輸機率的重要參數，當錐度愈小或長度愈長，則傳輸機率愈小，這是因為當錐度變小或管長增長時，分子直接穿越錐形管所涵蓋的角度變小，因此使得分子與管壁碰撞機率增加，直接流出的機率減少，故直接流出的分子流率相對的減少。而由於碰撞機率的增加，而分子與管壁表面的作用採用散反射模式，反射角之角度分佈在 $-\pi$ 到 π 之間，因此使得分子回流的機率亦增加，分子流出機率減

少，故管長愈長，錐度愈小，則傳輸機率愈小。

圖 7 顯示錐形管 $\phi=0^\circ$ 時，傳輸機率 P_r 隨長徑比 L 的變化情形。由圖中可看出傳輸機率 P_r 隨著長徑比 L 的增加而逐漸減小，即流出圓管的分子流率隨管長增加而逐漸減少，因此可知長徑比 L 是影響分子流率的重要參數。由圖也可看出無論 L 大小為何，測試粒子蒙地卡羅法模擬的結果與完整傳輸機率方程式(13)均非常一致，因此，證明測試粒子蒙地卡羅法是非常適合用於預測圓管自由分子流的流率。(12)式在較大的 L 時，才逐漸與數值模擬的結果接近，這是因為(12)式是在無限長圓管的假設下推導出來的，而在有限長圓管時，要考慮管的端壁效應 [18]，因此在小 L 不適用。另外，(14)和(15)兩式分別適用於小 L 及大 L ，故與數值模擬的結果比較，在某些範圍會有偏離的現象。

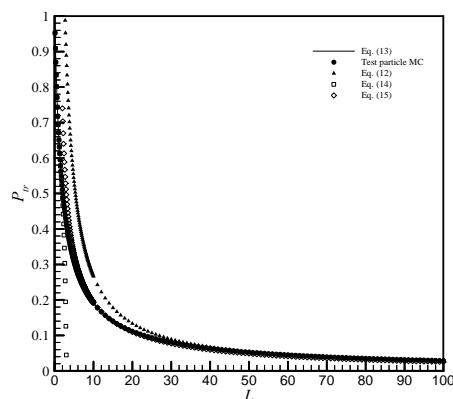


圖 7. 測試粒子蒙地卡羅法及各傳輸機率方程式與長徑比之關係。

圖 8 為測試粒子蒙地卡羅法及各傳輸機率方程式相對完整傳輸機率方程式(13)的誤差百分比 Er 與長徑比 L 之關係。由圖中可看出，只有(14)式的相對誤差明顯的隨 L 的增加而增大，其餘的則明顯的減小，惟誤差減小的程度各不相同，這顯示不同的方程式各有其適用範圍。因此，為明確區分各方程式之適用

範圍，接下來我們將長徑比區分成 $L=0 \sim 10$ 以及 $L=10 \sim 100$ 等兩個範圍來討論。

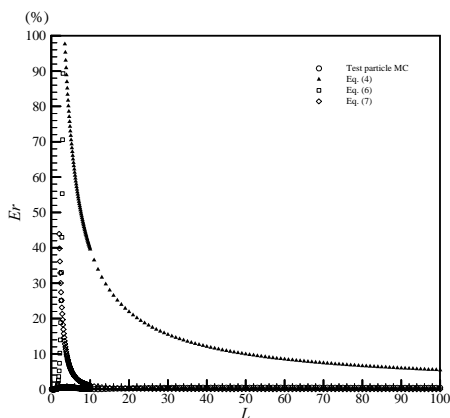


圖 8. 測試粒子蒙地卡羅法及各傳輸機率方程式相對(13)式之誤差百分比與長徑比的關係。

圖 9 顯示在 $L=0 \sim 10$ 的範圍內，傳輸機率的隨 L 變化的情形。由圖中可看出，在此範圍內測試粒子蒙地卡羅法模擬的結果與完整傳輸機率方程式(13)結果相當一致，其相對誤差約在 0.5 % 以下。而由(14)式計算的結果約在 $L > 2$ 時，即逐漸偏離(13)式，其相對誤差約在 10% 以上，因此可知(14)式約適用在 $L \leq 2$ 的範圍內；對(12)式及(15)式而言，傳輸機率隨管長的增加逐漸與(13)式接近，惟(15)式接近速度較快，在 $L > 4$ 時，其相對誤差約在 10% 以下，且隨著管長增加而漸漸減小，在 $L=10$ 時，誤差即已降至 1% 以下，故(15)式所述的大 L 值，應在 4 以上，即適用於 $L > 4$ 的直圓管；(12)式在 $L=0 \sim 10$ 的範圍內偏離(13)式相當大，其誤差均超過 40% 以上，如前述，因(12)式是基於無限長圓管的假設推導出來的結果，故當圓管不夠長時，需考慮管的端壁效應，此式便不適用。另外，在 $L=2 \sim 4$ 之間，(12)、(14)及(15)式相對(13)式誤差均在 10% 以上，因此，在 $L=2 \sim 4$ 的範圍內需採用完整傳輸機率方程式(13)或測試粒子蒙地卡羅法，才

能預測圓管中自由分子流率。各計算結果相對於(13)式的誤差百分比 Er 與長徑比 L 的關係如圖 10。

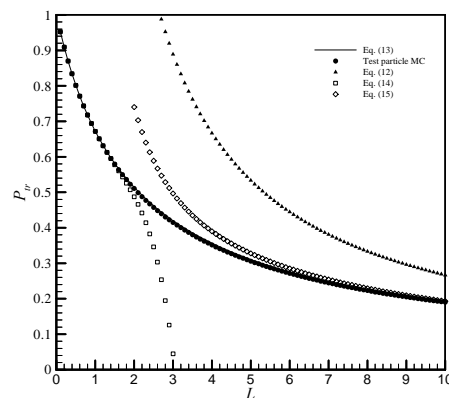


圖 9. 測試粒子蒙地卡羅法及各傳輸機率方程式在 $L=0 \sim 10$ 範圍內與長徑比之關係。

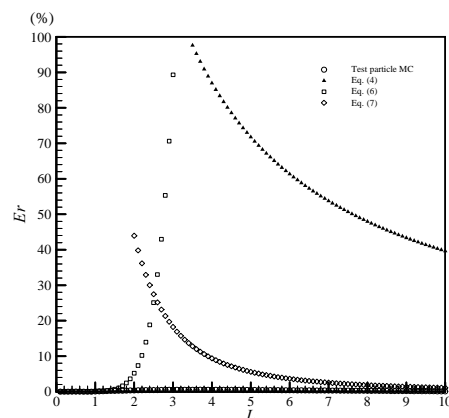


圖 10. 測試粒子蒙地卡羅法及各傳輸機率方程式在 $L=0 \sim 10$ 相對(13)式之誤差百分比與長徑比的關係。

圖 11 顯示在 $L=10 \sim 100$ 的範圍內，傳輸機率隨 L 的變化。由圖中可看出在此範圍內，測試粒子蒙地卡羅法模擬的結果與完整傳輸機率方程式(13)結果仍然相當一致，其相對誤差仍約在 0.5 % 以下。而由(15)式計算的結果，在此範圍內也幾乎完全與(15)式重合，其相對誤差約在 1% 以下，且隨著 L 增加，誤差愈小，由此可知管愈長，(15)式愈適用。另外，對(12)式的結果而言，隨著管長的增加，也漸

漸與(13)式一致，但速度甚為緩慢，在 $L \geq 50$ 時，誤差才降至約 10% 以下，至 $L=100$ 時，傳輸機率仍約有 5% 的誤差，即對(12)式來說， $L=100$ 的直圓管也不能處理為理想的長管，仍必須考慮管的端壁效應，而由其誤差隨管長漸減的趨勢可推論(12)式對於 $L > 100$ 直圓管較為適用。各計算結果相對於(13)式的誤差百分比 Er 與長徑比 L 的關係如圖 12。

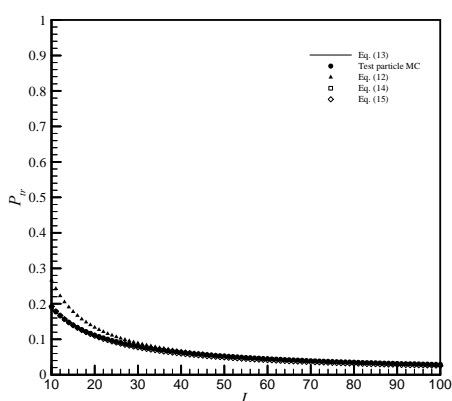


圖 11. 測試粒子蒙地卡羅法及各傳輸機率方程式在 $L=10 \sim 100$ 範圍內與長徑比之關係。

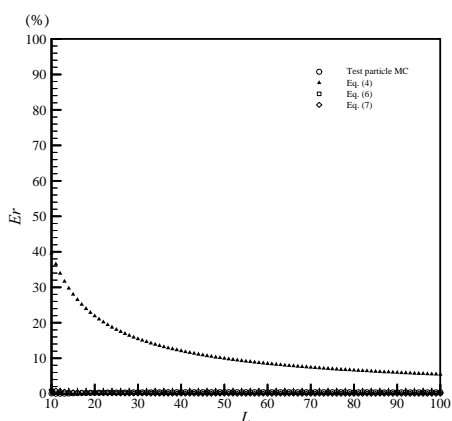


圖 12. 測試粒子蒙地卡羅法及各傳輸機率方程式在 $L=10 \sim 100$ 相對於(13)式之誤差百分比與長徑比的關係。

陸、結論

本研究主要目的在利用測試粒子蒙地卡

羅法探討錐形管內為無碰撞或自由分子流動時，自由分子傳輸機率與幾何參數的關係，結論如下：

- (一) 在相同的幾何參數條件下，不論抽樣方式為何，使用測試粒子蒙地卡羅法計算之錐形管自由分子傳輸機率的散佈趨勢、平均值及標準差均相同，不因抽樣方式不同而有所不同。
- (二) 錐形管之錐度及長度是影響管內自由分子傳輸機率的重要參數，傳輸機率隨錐度的減小或長徑比的增加而減少，且在小錐度及大長徑比時，減少量愈明顯，這是因為錐度愈小、管徑比愈大，分子與管壁碰撞機率增加，直接流出分子減少，分子回流的機率增加，總分子流出機率相對減少，故管長愈長，錐度愈小，則傳輸機率愈小。
- (三) 對直圓管無論長徑比 L 大小為何，測試粒子蒙地卡羅法模擬的結果與完整傳輸機率方程式(13)計算結果非常一致，其相對誤差幾乎均在 0.5 % 以下，證明測試粒子蒙地卡羅法是非常適用於預測直圓管自由分子傳輸機率。
- (四) 根據無限長圓管假設下推導出的傳輸機率方程式(12)，其相對於(13)式之誤差雖隨長徑比增加而逐漸減小，但至 $L=100$ 時，傳輸機率仍約有 5% 的誤差，即 $L=100$ 的長直圓管也不能處理為理想的長管，仍需視為有限長圓管而考慮管的端壁效應，但應可適用於 $L > 100$ 的長直圓管。
- (五) 方程式(14)適用於 $L \leq 2$ 的直圓管的傳輸機率預測，其誤差在 10% 以下，且長徑比愈小，誤差愈小；而方程式(15)式則適用於 $L > 4$ 的直圓管，且長徑比愈大，誤差愈小，在 $L \geq 10$ 時，誤差約在 1%

以下；在 $L=2\sim 4$ 之間，則需以測試粒子蒙地卡羅法或完整傳輸機率方程式 (13) 來預測。

柒、參考文獻

- [1] Muntz, P. E., "Rarefied Gas Dynamics," *Ann. Rev. Fluid Mech.* Vol. 21, pp. 387-417, 1989.
- [2] Schaaf, S. A. and Chambre, P. L., Flow of Rarefied Gases, Princeton, NJ, Princeton University Press, 1961.
- [3] Davis, D. H., "Monte Carlo Calculation of Molecular Flow Rates through a Cylindrical Elbow and Pipes of Other Shapes," *J. Appl. Phys.*, Vol. 31, No. 7, pp. 1169-1176, 1960.
- [4] Cercignani, C. and Daneri, A., "Flow of a Rarefied Gas Between Two Parallel Plates," *J. Appl. Phys.*, Vol. 34, pp. 3509-3513, 1963.
- [5] Takao, K., *Trans. Japan Soc. Aero-Space Sciences* 3, 30, 1960 in Rarefied Gas Dynamics, Talbot, L. Ed., New York, Academic Press, p. 465, 1961.
- [6] Liepmann, H. W., "Gaskinetics and Gasdynamics of Orifice Flow," *J. Fluid Mech.*, Vol. 10, pp. 65-79, 1961.
- [7] Berman, A. S., "Free Molecule Transmission Probabilities," *J. Appl. Phys.*, Vol. 36, No. 10, pp. 3356, 1965.
- [8] DeMarcus, W. C., Union Carbide Corporation Report K-1302, Part 3, 1957.
- [9] Ohwada, T., Sone, Y., and Aoki, K., "Numerical Analysis of the Poiseuille and Thermal Transpiration Flows Between Two Parallel Plates on the Basis of the Boltzmann Equation for Hard Sphere Molecules," *Phys. Fluids A*, Vol. 1, No. 12, pp. 2042-2049, 1989.
- [10] Loyalka, S. and Hamoodi, S., "Poiseuille Flow of a Rarefied Gas in a Cylindrical Tube: Solution of Linearized Boltzmann Equation," *Phys. Fluids A*, Vol. 2, No. 11, pp. 2061-2065, 1990.
- [11] Bell, G. I. and Glasstone, S., Nuclear Reactor Theory, New York, Wiley Press, 1971.
- [12] Tison, S., "Experimental Data and Theoretical Modeling of Gas Flows Through Metal Capillary Leaks," *Vacuum*, Vol. 44, pp. 1171-1175, 1993.
- [13] Karniadakis, G. E. and Beskok, A., Micro Flows: Fundamentals and Simulation, New York, Springer-Verlag Press, Chap. 5, pp. 114, 2002.
- [14] 陳熙，動力論及其在傳熱與流動研究中的應用，北京，清華大學出版社，Chap. 3, pp. 92-100, 1994.
- [15] Bird G. A., "Monte Carlo Simulation of Gas Flows," *Ann. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 10, pp. 11-31, 1978.
- [16] Bird, G. A., Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows, New York, Oxford University Press, Chap. 7, pp. 175-181, 1994.
- [17] 羅仲禹，"微通道氣體流動與熱傳之蒙地卡羅直接模擬"，碩士論文，國防大學中正理工學院，桃園，2001。
- [18] Polard, W. and Present, R., "On Gaseous Self-diffusion in Long Capillary tubes," *Phys. Rev.*, Vol. 73, No. 7, 762-774, 1948.