

# 直接模拟蒙特卡罗方法在微通道 流动模拟中的应用

王 嫻<sup>1</sup> 王秋旺<sup>1</sup> 陶文铨<sup>1</sup> 郑 平<sup>2</sup>

( 1. 西安交通大学能源与动力工程学院, 陕西 西安 710049;  
2. 香港科技大学机械系, 香港 )

**摘 要** 直接模拟蒙特卡罗方法是一种求解稀薄气体流动换热新的数值方法。本文采用该方法对  $Kn$  数跨越速度滑移区和过渡区的三个微通道内的流动进行了数值模拟, 给出了通道内速度、压力及局部阻力系数的变化曲线。为了表明通道横纵比对流动的影响, 还对每个算例在不同的横纵比下进行了比较。结果表明, 微通道内的流动特性不仅与  $Kn$  数有关, 而且与通道的横纵比也有很大的关系。

**关键词** 直接模拟蒙特卡罗; 微通道;  $Kn$  数; 横纵比

**中图分类号:** TK124 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-231X(2002)Suppl.-0125-04

## APPLICATION OF DIRECT SIMULATION MONTE CARLO METHOD TO GAS FLOW IN MICROCHANNELS

WANG Xian<sup>1</sup> WANG Qiu-Wang<sup>1</sup> TAO Wen-Quan<sup>1</sup> Chueng Ping<sup>2</sup>

(1. School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China;

2. Department of Mechanical Engineering, Hong Kong University of Science and Technology, Hong Kong, China)

**Abstract** The Direct Simulation Monte Carlo method is a useful numerical tool for solving fluid flow and heat transfer problem of rarefied gas. In the present work, the microchannels flow in velocity-slip and transitional regimes was simulated using nitrogen gas as working fluid. The variations of local velocity, pressure and frictional coefficient along the direction of channel's length were presented. Comparison was made among different microchannels with different channel aspect ratios (AR) to show the influence of AR on the gas flow. The results show that the microchannel flow characteristics not only depend on the Kn number but also relate to the channel's aspect ratio.

**Key words** Direct Simulation Monte Carlo; microchannel;  $Kn$  number; aspect ratio

## 1 引 言

随着微电子机械系统 MEMS (Micro-Electro-Mechanical Systems) 在各个领域的应用日益广泛, 研究微尺度下的气体流动与传热特性目前已成为一门十分活跃的课题。但是, 处于微尺度下稀薄气体的流动与传热特性已明显不同于宏观尺寸下的气体, 它不满足常规连续介质假设, 所以不能用基于连续介质假设的 N-S 方程来求解。人们根据气体粒子的平均自由程长度与所研究的传热或流动问题中的

特征尺寸之间的比值大小, 即 Knudsen 数来区分气体的稀薄程度<sup>[1]</sup>, 即:  $Kn = \lambda/L$ 。其中  $\lambda$  表示气体粒子的平均自由程,  $L$  代表问题中的特征尺寸。按照  $Kn$  数的大小, 可以将气体的流动传热问题分为以下几个区域: (1)  $Kn < 10^{-3}$ , 连续介质区, N-S 方程适用; (2)  $10^{-3} < Kn < 10^{-1}$ , 速度滑移与温度跳跃区; (3)  $10^{-1} < Kn < 10^1$ , 过渡区, 这一区域的流动与传热问题的处理是颇为困难的, 通常用一些简化的方法, 如矩法、模型方程法、分区法等求得问题的近似解, 工程计算中则常用一些半经验性的

收稿日期: 2002-02-02; 修订日期: 2002-04-30

基金项目: 国家重点基础研究发展规划资助项目 (No.G2000026303)

作者简介: 王 嫻(1977-), 女, 吉林吉林人, 硕士研究生, 主要从事传热强化和计算传热方面的研究。

关系式; (4)  $10^1 < Kn$ , 自由分子区, 此时问题的处理较过渡区容易, 该区域内流动与传热问题的求解需依靠分子动力论方法。

DSMC (Direct Simulation Monte Carlo) 方法即直接模拟蒙特卡罗方法就是基于稀薄气体流动的数值模拟研究的需要发展起来的一种计算气体流动与传热问题的方法, 是由 Bird G.A. 等人在 60 年代提出的<sup>[2]</sup>。该方法在本质上与其它求解流动传热问题的方法有很大的不同, 它是在微观层次上, 直接从分子运动的机理着手, 以分子运动论为依据, 用有限个仿真模拟分子代替大量的真实气体分子, 通过跟踪仿真分子的运动轨迹, 记录各个仿真分子的状态参数, 最后将这些仿真分子做统计平均, 从而得到气体宏观的状态参数的一种方法, 整个模拟是一个时间过程。DSMC 的关键技术在于在一定的时间间隔内将分子的迁移运动与分子间碰撞的解耦处理, 即将分子的迁移运动视为匀速直线运动, 该分子在给定的时间步长内运动到了一个新的位置, 将该位置的坐标记录, 将所有仿真分子的迁移运动计算完之后, 再在各个网格内抽取碰撞对, 进行碰撞计算, 在碰撞的过程中不考虑分子的迁移运动。为了保证分子运动与碰撞的解耦, 计算的时间步长应远小于气体分子的平均碰撞时间。DSMC 方法的具体实施细节见文献<sup>[3]</sup>。

DSMC 方法也有其自身的缺陷, 由于网格尺寸很小, 导致其网格数量过大, 模拟分子数过多(一般每个网格中至少要安排 20~40 个模拟分子才能得到正确结果), 并且其时间步长很小以至流动达到稳态的时间很长。种种原因导致其计算量过大, 计算时间过长, 使得对计算机水平要求很高, 而使得它的深入发展受到限制。实践证明, 该方法对于处于过渡区与自由分子区的流动传热问题是一种极为有效

的研究手段。本文将在三个  $Kn$  数下, 对两单方向上无限长平行平板组成的微通道中的亚音速流用 DSMC 方法进行流动的数值计算, 指出微通道内雷诺数  $Re$  与阻力系数  $f$  的变化关系。为了表明通道长度对流动换热的影响, 本文还对每个  $Kn$  数下的微通道在三个纵横比下进行计算比较。旨在找出影响微通道内处于滑移区和过渡区的气体流动换热的主要因素。

## 2 物理问题描述

两单方向上无限长平行平板组成的微通道示于图 1, 通道尺寸见表 1。表中  $AR = L/h$  为通道的纵横比, 其中  $FNUM$  为一个模拟分子代表的实际分子数,  $p_{in}/p_{out}$  为进出口压比, 表明流体在通道内的被压缩程度,  $u_{out}$  为出口  $x$  方向流体速度。从表 1 可以看出, 工况 1 处于滑移区, 工况 2、工况 3 处于过渡区。

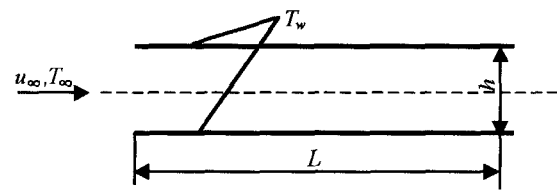


图 1 微通道示意图

本文计算工质为氮气, 来流速度  $u_{\infty}$  为 140 m/s, 温度  $T_{\infty}$  为 300 K, 压力为一个大气压, 通道上下壁温  $T_w$  为 300 K。计算中, 进出口采用宏观有流量通量的流体边界条件; 分子与上下壁面的碰撞采用漫反射模型, 反射分子速度满足麦克斯韦速度分布, 温度为完全热适应, 即反射分子温度与壁面温度相同; 分子间的作用势采用可变硬球 (VHS) 模

表 1 微通道尺寸及计算结果

工况	$h$ ( $\mu\text{m}$ )	$Kn$	$AR$	网 格	模拟分子数	$FNUM$	$p_{in}/p_{out}$	$u_{out}$ (m/s)	$Re$	$f$
1	1.04	0.046	5	100×15	53,931	$3 \times 10^9$	1.68	100.0	15.6	1.58
			15	210×15	103,900	$5 \times 10^9$	2.31	66.6	8.95	2.70
			25	350×15	176,156	$5 \times 10^9$	2.64	50.1	6.20	3.92
2	0.26	0.185	5	60×11	20,748	$5 \times 10^8$	1.97	79.4	2.86	4.18
			15	160×11	64,638	$5 \times 10^8$	2.65	44.2	1.35	8.94
			25	270×11	109,013	$5 \times 10^8$	2.93	31.4	0.88	13.8
3	0.065	0.741	5	20×8	6,394	$1 \times 10^8$	2.00	71.0	0.62	5.98
			15	60×8	15,054	$1 \times 10^8$	2.68	37.3	0.28	13.9
			25	80×8	16,267	$2 \times 10^8$	2.94	25.8	0.18	21.7

型, 时间步长取为  $10^{-11}$  s。局部雷诺数  $Re_x$  与局部阻力系数  $f_x$  的计算方法如下:

$$Re_x = \frac{\rho_x u_x 2h}{\mu_x} \quad \mu_x = \frac{5}{16\sigma^2} \sqrt{\frac{m\kappa T_x}{\pi}} \quad (1)$$

$$f_x = \frac{\tau_{w,x}}{\rho_x u_x^2 / 2} \quad \tau_w = \frac{\sum m u_i - \sum m u_r}{\Delta t \cdot A} \quad (2)$$

其中: 下标  $x$  表示  $x$  横截面上的平均值,  $\mu$  为在分子水平上的粘度系数,  $m$ 、 $\sigma$  分别为 VHS 模型中分子质量与直径,  $\kappa$  为 Boltzmann 常数,  $\tau_w$  为壁面上的剪切应力,  $u_i$ 、 $u_r$  分别为分子与壁面碰撞时入射分子与反射分子在  $x$  方向上的速度,  $\Delta t$ 、 $A$  分别为作用时间与作用面积。由于在通道内局部雷诺数  $Re_x$  与局部阻力系数  $f_x$  沿流动方向的变化不大, 故本文中的  $Re$  与  $f$  均为整个通道内局部值的平均值。

### 3 计算结果及讨论

#### 3.1 程序验证

图 2 所示为  $Kn = 0.046, AR = 5$  时, 相同的进口条件及壁面条件下, 本文计算的压力降结果与文献 [4] 的计算结果比较, 由图可以看出, 二者吻合得很好, 最大相对误差不超过 3%。

#### 3.2 流动计算结果

本文计算的部分结果示于表 1。由图 2 可以看出, 除了进口受进口效应影响使得压力略有增加外, 整个通道内的压力是呈线性下降的, 而且在每一个横截面上各点压力是均匀分布的。这一规律亦为文献 [4,5] 所证实。

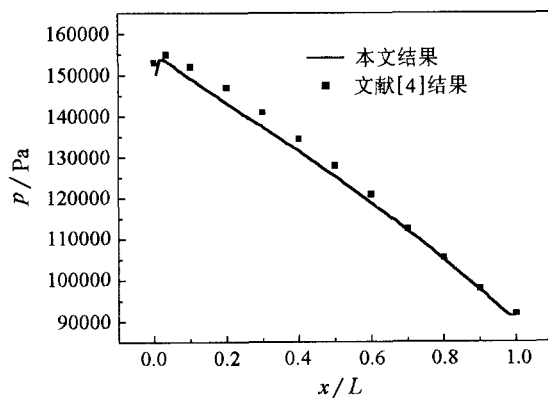


图 2 压力变化曲线与文献 [2] 的对比

图 3 为处于滑移区的工况 1,  $AR = 15$  时, 在不同横截面上速度分布图。由图可以看出, 当  $y/H = 0$  和 1 时, 即上下壁面处速度均不为 0, 出现了速度滑移。图 4 为三种  $Kn$  数下,  $AR = 15, x/L = 0.6$  时

速度分布的比较。由图可见, 随着  $Kn$  数的增大, 速度分布形线变得越来越扁平, 同时由于  $Kn$  数的增大而引起的速度滑移增大, 当地最大速度也随之减小。

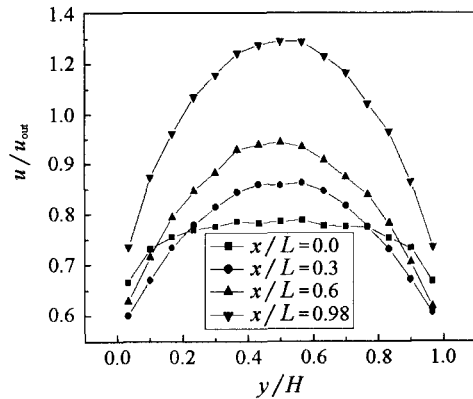


图 3  $Kn = 0.046, AR = 15$  不同截面上速度分布图

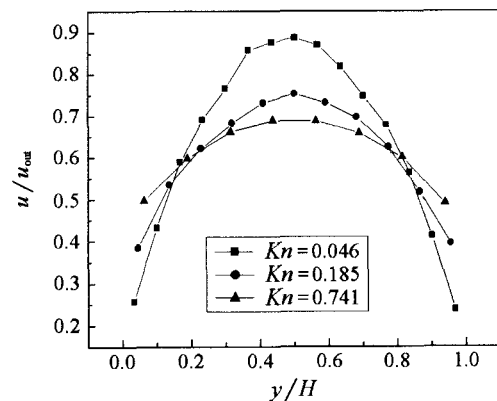


图 4  $AR = 15, x/L = 0.6$  截面上速度分布图

图 5 为  $Kn = 0.741$  时, 三个横纵比下局部阻力系数  $f_x$  沿流动方向上的变化曲线图。由该图可以看出  $AR$  越大, 同一无量纲长度处  $f_x$  越大且变化越剧烈

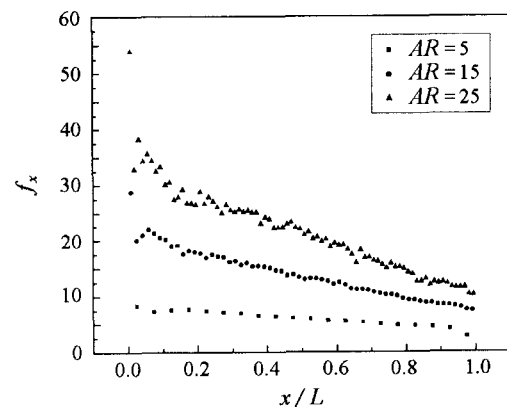


图 5  $Kn=0.0741$  时, 局部阻力系数  $f_x$  的变化曲线

烈。总体上看,  $f_x$  呈下降趋势, 进口处  $f_x$  急剧下降, 随着流动的进行,  $f_x$  变化逐渐缓慢。图 6 为  $T_w = 500 \text{ K}$ ,  $Kn = 0.741$ ,  $AR = 5$  时, 总体阻力系数  $f$  随  $Re$  的变化曲线, 其中  $Re$  数是通过改变进口流速 (均为亚音速) 而改变的。由图可以看出, 阻力系数总体上是随着  $Re$  数的增加而减小的, 但当  $Re < 0.2$  时, 阻力系数随  $Re$  数的变化十分剧烈, 直到  $Re > 0.2$  时, 变化曲线逐渐趋于平缓。

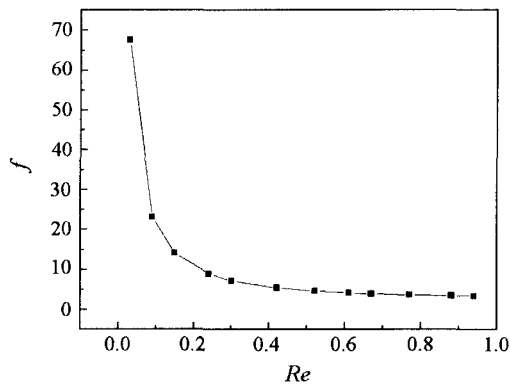


图 6  $Kn = 0.741$ ,  $AR = 5$  时, 阻力系数  $f$  随  $Re$  的变化曲线

## 4 结 论

(1) 处于同一区域的流动, 气体在微通道内的被压缩程度与  $Kn$  数没有太大关系, 通道横纵比是影

响气体压缩程度的主要因素。

(2) 随着气体稀薄程度的增加, 即  $Kn$  数的增大, 在同一横纵比下, 出口流速减小, 阻力系数增加, 在通道内动能损失增加,  $Re$  数减小, 粘性对流动的影响增加; 同时, 边界处的速度滑移越大。

(3) 当气体稀薄程度相同, 即  $Kn$  数相同时, 通道越长, 进出口压比越大, 气体在通道中被压缩程度越高, 阻力系数增加,  $Re$  数减小, 粘性对流动的影响增大。

(4) 进口速度越大, 即  $Re$  数越大, 阻力系数越小, 且当  $Re$  数很小时, 少量提高进口流速就可大幅度降低阻力系数, 反之亦然。

## 参 考 文 献

- [1] 陈熙. 动力论及其在传热与流动研究中的应用. 北京: 清华大学出版社, 1996. 1-74
- [2] Bird G A, Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. New York, U.S.A: Oxford University Press, 1994
- [3] 吴其芬, 陈伟芳. 高温稀薄气体热化学非平衡流动的 DSMC 方法. 长沙: 国防科技大学出版社, 1999. 61-71
- [4] Mavriplis C, Ahn J C, Goulard R. Heat Transfer and Flowfields in Short Microchannels Using Direct Simulation Monte Carlo. J Thermophysics and Heat Transfer, 1997, 11(4): 489-496
- [5] Sun H W, Faghri M. Effects of Rarefaction and Compressibility of Gaseous Flow in Microchannel Using DSMC. Numerical Heat Transfer, Part A, 2000, 38: 153-168