

## 用直接模拟 Monte Carlo 方法计算微通道的流动与换热

周 靖, 陶文铨

(西安交通大学动力工程多相流国家重点实验室, 710049, 西安)

**摘要:** 应用直接模拟 Monte Carlo(DSMC)方法模拟了平行板微通道中进口流速较低时的气体流动,应用质量守恒来处理进出口的压力边界. 所模拟流动的 Knudsen 数的范围是 0.05~1.00, 涉及了滑移区、过渡区和自由区. 计算了来流与平板等温以及平板对称加热两种工况, 揭示了压缩性与稀薄性对所研究微平行板通道中流动与换热的影响. 研究表明: ①随着 Knudsen 数增大, 沿程压力变化的非线性逐渐减弱, 沿程速度变化与温度变化都趋于平缓, 速度滑移量和温度跳跃量增大; ②沿程温度变化在进出口处较为明显; ③气体在微通道内的换热主要集中在进出口处, 在通道中部换热很弱.

**关键词:** DSMC 方法; 微通道; 亚音速; 传热

**中图分类号:** TK124 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-987X(2005)01-0041-04

## Prediction of Flow and Heat Transfer in Micro-Scale Channel with Direct Simulation Monte Carlo Method

Zhou Jing, Tao Wenquan

(State Key Laboratory of Multiphase Flow in Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

**Abstract:** The gas flow with low inlet velocity in micro parallel plate channel was simulated with direct simulation Monte Carlo (DSMC) method. The inlet and outlet boundaries for pressure were dealt with mass conservation condition. The Knudsen number varies from 0.05 to 1.00 and covers the slip, transition, and free molecule regions. Two cases were considered, i. e., the inlet fluid and plates having the same temperature and the fluid heated by the plates symmetrically. The effects of rarefaction and compressibility on the flow and heat transfer characteristics are analyzed. The simulation results show that: ① With the increase of Knudsen number, the non-linearity of pressure distribution decreases, and the stream-wise variation of both the velocity and temperature reduces; ② The variations of temperature at the channel inlet and outlet are significant; ③ The heat transfer between the channel and the gas is mainly concentrated in the inlet and outlet regions while the heat transfer process is rather weak in the middle part of the channel.

**Keywords:** DSMC method; micro-scale channel; subsonic; heat transfer

对于大多数微机电系统(MEMS)内部的流动, 流体分子的平均自由程  $\lambda$  与其特征尺度  $L$  相当接近, 甚至是同一数量级. 对于这类微尺度通道内的气体流动, 引入 Knudsen 数, 即  $Kn = \lambda/L$  来表征气体稀薄的程度,  $Kn < 10^{-3}$  为连续介质,  $10^{-3} < Kn < 0.1$  为速度滑移区,  $Kn > 0.1$  为过渡区. MEMS 中

流动的  $Kn$  值一般处于速度滑移区和过渡区, 如果按照连续介质流动处理会导致较大的误差, 所以从微观分子的角度描述流体运动的方法得到了广泛应用. Bird<sup>[1]</sup>提出的直接模拟 Monte Carlo(DSMC)方法就是一种基于微观分子角度的流动与传热的数值模拟技术. 这种方法被广泛应用于如稀薄气体动力

学问题<sup>[2,3]</sup>、空间平台的污染<sup>[4]</sup>等研究中. 文献[5-8]应用 DSMC 方法计算了微通道内及高速流动时的流动与传热问题.

能否成功地运用 DSMC 方法模拟流动问题, 边界的数值处理非常重要. 对于 MEMS 中的流动, 由于速度大大低于最可几热力速度, 如果运用文献[1-7]中提出的针对高流速流动边界的处理方法, 那么热涨落将造成模拟失真, 所以要寻求新的处理方法. 本文提出了一种新的处理方法<sup>[9]</sup>以适用于较低的进出口流速情形, 并运用于微通道的传热和流动特性研究, 其中  $Kn$  的范围在 0.05~1.00 之间.

Bird 提出的 DSMC 方法包括以下几个步骤: ①对网格和网格中的模拟分子进行编号; ②跟踪分子的运动; ③选择碰撞对, 并计算碰撞后的参数值; ④统计得出所需值, 如压力、密度、温度等. 值得一提的是, DSMC 中的网格划分技术是先将计算域划分为若干网格, 然后再将每个网格划分为若干亚网格, 程序在执行第 1 个步骤的时候, 不单要对网格编号, 而且还要对亚网格编号, 详细内容可参见文献[1,9].

## 1 边界处理

根据 Maxwell 分布函数, 进入计算域的分子的数量<sup>[1]</sup>可描述为

$$F_i = \frac{n_i}{2\pi^{1/2}\beta_i} \{ \exp(-s_i^2 \cos^2 \vartheta) + \pi^{1/2} s_i \cos \vartheta [1 + \operatorname{erf}(s_i \cos \vartheta)] \} \quad (1)$$

其中  $s_i = U_i \beta_i$  (2)

$$\beta_i = 1/(2RT_i)^{1/2} \quad (3)$$

式中:  $F_i$  表示通过边界第  $i$  个网格的数流量;  $\operatorname{erf}$  是误差函数;  $R$  为气体常数;  $n_i$  代表第  $i$  个网格的分子数密度;  $T_i$ 、 $U_i$  各自表示当地温度和流向平均流速;  $\vartheta$  的值在上游边界赋 0, 在下游出口边界赋  $\pi$ .

本文计算的边界条件是给定入口压力和进出口压力的比值, 再给出入口的温度或者入口密度, 如此就可确定模拟计算在入口边界所需的参数, 有

$$n_m = \rho_m/m \quad (4)$$

$$T_m = p_m/(\rho_m R) \quad (5)$$

此类边界条件入口速度是不断变化的, 最后稳定到某一个值上, 利用质量守恒, 给出

$$(u_m)_i = (F_{i+} - F_{i-})/n_m \quad (6)$$

其中  $F_{i+}$  和  $F_{i-}$  都由最近一次迭代求得的  $(u_m)_i$  计算获取. 同理, 在出口边界上也利用质量守恒来迭代求出口速度. 出口温度可由最靠近边界的网格温度代替, 这样出口的数密度可写成

$$(n_e)_i = p_e/(k(T_e)_i) \quad (7)$$

式中:  $k$  是波尔兹曼常数;  $p_e$  为给定的出口压力.

这种方法在出口边界的处理上有别于 Nance<sup>[10]</sup> 首次提出并成功应用的特征理论方法, 但同样能获得合理的模拟结果. 我们首先应用所开发的程序计算了速度滑移区的 Couette 流动, 所得结果与文献[11]的分析解符合良好, 证明了所开发程序的可靠性. 本文下面还要将微尺度通道的模拟结果与其他介观方法的模拟结果作对比.

## 2 所模拟的物理问题

本文以氩气为介质, 对二维平板通道中压力驱动的流动进行模拟计算. 对所有的计算工况, 通道的几何参数不变, 通道高  $h=1 \mu\text{m}$ , 长  $L=5 \mu\text{m}$ . 计算网格均为  $100 \times 80$  的均分网格, 模拟分子数为 240 万个, 运行 150 万个时间步长, 在 34 万个步长后视为稳态并进行采样统计. 来流温度  $T_\infty=300 \text{K}$ , 进出口压力比  $p_m/p_e=3$ , 计算两种工况: 上下板均为 300 K; 上下板均为 350 K. 对每种工况都模拟 4 种不同的  $Kn$  下的流动 ( $Kn$  分别为 0.05、0.10、0.20、1.00),  $Kn$  的范围跨越了滑移区与过渡区.

## 3 结果及讨论

### 3.1 流动特性

两种工况的沿程压力变化、速度变化具有相似性, 仅沿程的温度变化有所差异, 故压力与速度的沿程变化以工况 1 为例说明. 不同  $Kn$  下通道中压力、速度和温度的分布如图 1~图 4 所示. 从图 1 可见在微通道中压缩效应的影响是巨大的, 使沿程的压力不呈线性分布; 从图 2 中可看出速度沿流动方向逐渐增加, 这是由于较大的压力梯度引起的压缩效应, 使流体密度降低, 导致沿程速度不断增加, 速度增加的结果又导致压力损失加大, 出口处速度梯度明显高于其他处. 微通道中由于压缩效应而引起的通道沿程压力不呈线性分布已经被实验所证实<sup>[12]</sup>, 文献[13]采用格子-Boltzmann 方法分析也得出了类似的结果.

在通道的每一个截面上, 等压线几乎是直线(图 3), 这证实了一般分析中采用  $dp/dy=0$  理论假设的合理性. 但是, 随着  $Kn$  的增大, 这一假设就呈现出不合理性. 在所研究的通道中, 气体的温度降低是非常明显的, 特别是在靠近出口的部分, 如图 4、图 5 所示. 这是因为沿程的压力不断降低, 使气体产生膨胀效应, 导致其温度下降, 这种现象在常规尺度的气

体流中是不会发生的。

由图 1 中给出的 4 种  $Kn$  下压力的沿程分布可知,随  $Kn$  的增大,压力的分布非线性减弱,这个结论同样可由自由分子分析获得.比较图 2 中不同  $Kn$  的速度分布可看出,随  $Kn$  增大,出口处的速度梯度变小, $Kn$  是气体稀薄性的度量,其值越大,稀薄性越明显,所以图 1 的结果是由于稀薄效应抑制了由

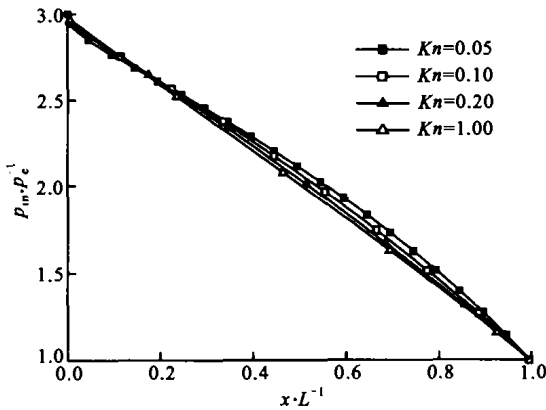


图 1 工况 1 的沿程压力比

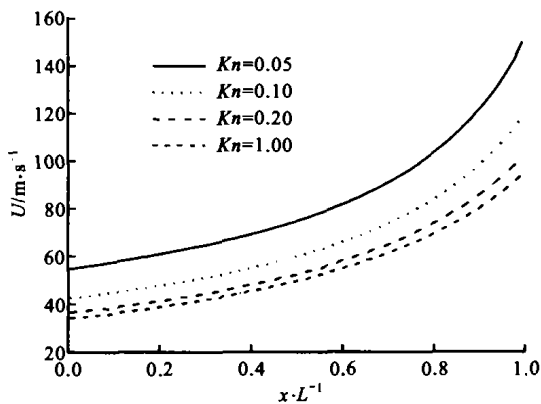


图 2 工况 1 的沿程速度变化

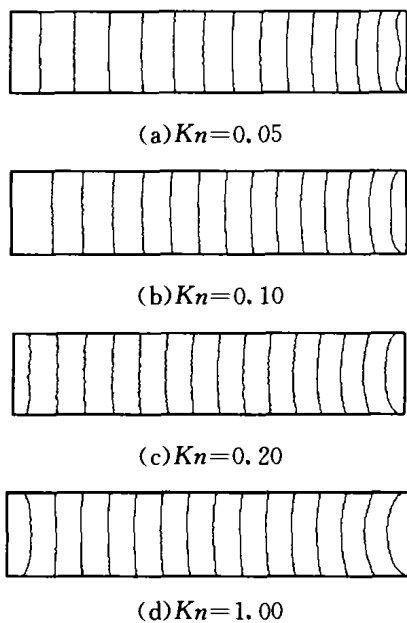


图 3 工况 1 的等压线分布

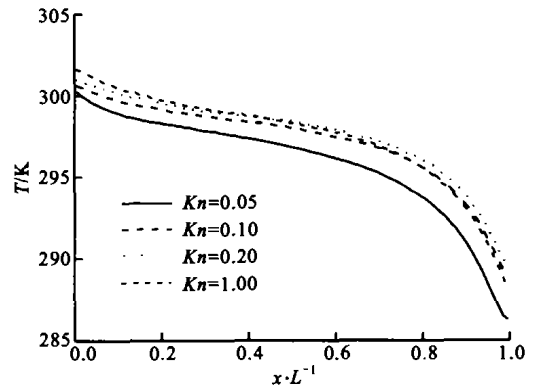


图 4 工况 1 的沿程温度变化

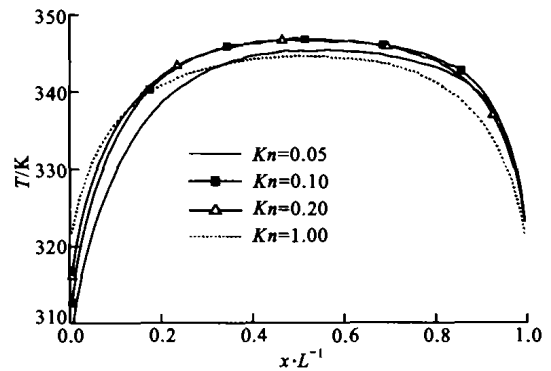


图 5 工况 2 的沿程温度变化

于压缩性造成的流动加速所致.另外,图 2 还表明,随  $Kn$  增大而速度分布变得平缓,这是由于流动经由滑移区 ( $Kn = 0.05$ )、过渡区和自由区 ( $Kn = 1.00$ ),分子碰撞的频率逐次降低,导致沿程速度变化减小.图 4、图 5 表明,随  $Kn$  增加, $Kn$  对气体温度的影响减小,这同样是由于气体变稀薄,分子碰撞减少所造成的.在微通道流动中,气体的可压缩性与稀薄性对压力分布与速度分布这种相反的影响,文献[11]中也有报道.

### 3.2 换热特性

图 6、图 7 分别是两种工况不同  $Kn$  下壁面沿程热流密度的分布,所示的现象是连续介质区域流动中所没有的.从图中可以看出以下特点:通道的换热主要集中在入口和出口位置;越靠近中部通道的换热量越少,在通道中间位置换热量近似为 0;随  $Kn$  的增加,通道的换热量逐渐减少,且沿程换热量的变化越趋于平缓.

产生这种现象的主要原因是由于在微通道的进出口处均有气体分子进入和逸出,进入和逸出的分子个数均可由分子运动论的有关知识得出,如式(1)所示.由于在微通道的进出口处,刚进入的分子的能量与壁面能量有很大差别,并且气体进入微通道后,分子平均自由程与通道特征尺度具有可比性,稀薄

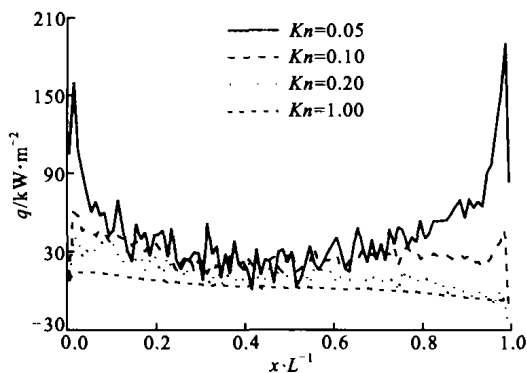


图6 工况1沿程壁面热流密度变化

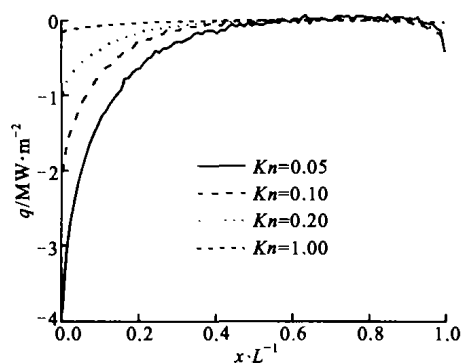


图7 工况2沿程壁面热流密度变化

程度大大增加,几乎所有进入的分子都会与壁面发生碰撞,所以此时会产生很强的能量交换。其次,也由于进出口处高能分子的逸出,使得此处的分子平均温度下降形成较大温差,两种因素同时作用(前者占主导地位),在图6中表现为进出口处壁面热流密度急剧上升。另外,由于压力驱动流的出口速度必然高于进口速度,出口的高速就减少了分子与壁面碰撞的机会,所以进口壁面热流密度大于出口的。在微通道中部,虽然也有大量分子与壁面碰撞,但大多数气体分子经过在进出口与壁面的多次碰撞,其能量已与壁面能量差距大大减小,故二者在微通道中部碰撞时,交换的能量是很小的。随 $Kn$ 增大,气体的稀薄程度增加,分子数急剧减少导致碰撞减少,所以整体能量交换量大大减小。在气体速度较高的微通道流动的DSMC模拟中也有类似结果的报道,如文献[14]。

## 4 结论

本文采用DSMC方法模拟了低速气体在微通道中的流动与换热,所得结果与文献中现有的实验结果和格子-Boltzmann方法的结果一致,证明了采用DSMC方法模拟微尺度流动现象的可靠性与实用性。对所模拟的情形,可以得出以下结论。

(1)随着 $Kn$ 增大,沿程压力变化的非线性逐渐

减弱,沿程速度变化趋于平缓,进出口速度都相应减小,沿程温度变化也趋于平缓,速度滑移量和温度跳跃量增大。

(2)沿程温度变化在进出口处较为明显,进口明显是剧烈换热所致,而出口明显则是由于出口压力降增大造成的。

(3)气体在微通道内的换热主要集中在进出口处,在通道中部换热很小,随 $Kn$ 增大而趋近于0。

## 参考文献:

- [1] Bird G A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows[M]. Oxford: Clarendon Press, 1994. 92-93,105,208-216,219,425.
- [2] Moss J N, Mitcheltree R A, Dogra V K, et al. Direct simulation Monte Carlo and Navier-Stokes simulations of blunt body wake flow[J]. AIAA, 1994, 32(7): 1 399-1 406.
- [3] Ivanov M, Markelov G N, Gimelshein S F, et al. Capsule aerodynamics with real gas effects from free molecular to near-continuum regions[R]. AIAA Paper, 97-0476. New York: AIAA, 1997.
- [4] Rault A G, Woronowicz M S. Application of direct simulation Monte Carlo satellite contamination studies [J]. J Spacecr Rockets, 1995, 32(3):392-397.
- [5] Sun H, Faghri M. Effects of rarefaction and compressibility of gaseous flow in microchannel using DSMC [J]. Numer Heat Transfer, Part A, 2000, 38(2):153-168.
- [6] Muntz E P. Rarefied gas dynamics[J]. Annu Rev Fluid Mech, 1989(21):387-417.
- [7] Oran E S, Oh C K, Cybyk B Z. Direct simulation Monte Carlo: recent advances and applications[J]. Annu Rev Fluid Mech, 1998(30):403-441.
- [8] Liou W W, Fang Y C. Heat transfer in microchannel devices using DSMC [J]. J Microelectromech Syst, 2001, 10(2):274-279.
- [9] 周靖. 用直接模拟蒙特卡罗法计算微通道中的流动与换热[D]. 西安: 西安交通大学能源与动力工程学院, 2004.
- [10] Nance R P, Hash D B, Hassan H A. Role of boundary conditions in Monte Carlo simulation of MEMS Devices[J]. J Thermophys Heat Transfer, 1998, 12(3): 447-449.
- [11] Karniadakis G E, Beskok A. Micro flows fundamentals and simulation[M]. New York: Springer, 2002. 31,63-66.

(下转第65页)

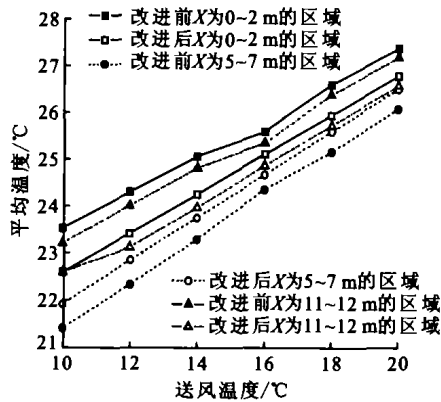


图8 车内不同区域改进前后的平均温度

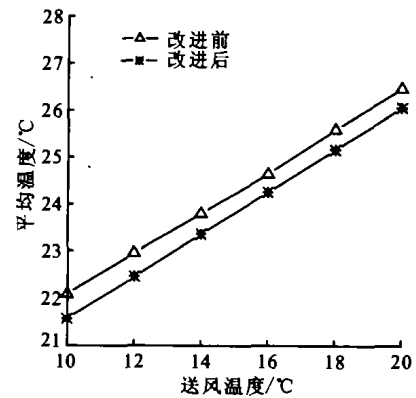


图9 改进前后车内平均温度

车内的温度分布更趋于均匀,总体平均温度还有所降低,达到了预期的目的,即通过改进使乘客的舒适度得到了提高。

## 5 结论

本文对客车空调回风系统进行了改进,将一个回风口改为前后2个回风口,对空调客车内的气流组织建立模型并进行了模拟,得出了改进前后车内温度的分布情况。

对改进前后的情况进行比较可以看出,通过对客车空调回风系统的改进,车内的气流组织以及温度分布情况得到明显改善。在本文所模拟的工况中,改进后车内前后两端的空调效果更加明显,温度都有所下降,中部有微幅上升,但整体温度更为均匀。在同样的送风温度(289.15 K)下,车内温度平均下降0.5 K,可以更好地满足客车空调系统的标准和要求,对于提高客车空调系统运行效率和降低能耗具有重要的意义。

## 参考文献:

- [1] 吴宝志,金永康. 汽车空调[M]. 北京: 宇航出版社, 1992. 10-15.
- [2] Lin C H, Han T, Koromilas C A. Effects of HVAC

design parameters on passenger thermal comfort [J]. SAE Transactions, 1992, 101(5): 209-231.

- [3] Currie J. Numerical simulation of the flow in a passenger compartment and evaluation of the thermal comfort of the occupants [J]. SAE Transactions, 1997, 106(6): 806-816.
- [4] 吴俊云,童灵,陈芝久. 空调客车室内三维紊流流动与传热数值研究[J]. 上海交通大学学报, 1999, 33(3): 331-334.
- [5] 陈江平,孙召璞,阙雄才,等. 轻型客车室内通风的数值模拟与实验研究[J]. 应用科学学报, 2002, 20(2): 170-173.
- [6] 邓建强,靳谊勇,张早校,等. 空调客车内风道三维湍流流动特性数值研究[J]. 制冷学报, 2001(1): 30-34.
- [7] Kohler J. Numerical calculation of the distribution of temperature and heat flux in buses under the influence of the vehicle air-conditioning system [J]. ASHRAE Transactions, 1990, 96(1): 432-446.
- [8] 卢曦,吴文权. 汽车车内热环境研究的现状和发展[J]. 上海理工大学学报, 2001, 23(2): 162-166.
- [9] 陶文铨. 数值传热学[M]. 第二版. 西安: 西安交通大学出版社, 2001. 347-362.
- [10] JT/T 216-1995, 客车空调系统技术条件[S].

(编辑 王焕雪)

(上接第44页)

- [12] Ho C M, Tai Y C. Micro-electrical-mechanical-systems(MEMS) and fluid flows[J]. Annual Review of Mechanics, 1998(30): 579-612.
- [13] Tang G H, Tao W Q, He Y L. Lattice Boltzmann method for simulation gas flow in microchannels[J]. International Journal of Modern Physics: C, 2004, 15

(3): 335-347.

- [14] Wang X, Wang Q W, Tao W Q, et al. Simulation of rarefied gas flow and heat transfer in microchannels [J]. Science in China: Series E, 2002, 45(1): 322-327.

(编辑 荆树蓉)