

微通道稀薄气体流动换热特性的研究*

王 娴 王秋旺 陶文铨

(西安交通大学能源与动力工程学院, 西安 710049)

郑 平

(香港科技大学机械系, 香港)

摘要 用直接模拟 Monte Carlo 方法对处于 $Kn = 0.05 \sim 1.0$ 范围下的微通道内气体的换热特性进行了分析研究, 结果给出了不同 Kn 数、不同横纵比下通道内气体温度、壁面热流密度的变化曲线以及同一工况下壁面总的热流密度与局部热流密度随进口流速的变化曲线. 结果表明, 微通道内的换热主要集中在进出口处, 中间部分的换热很微弱, 其换热特性与 Kn 数及通道的横纵比有很大的关系, 进口流速对总的换热量影响不大, 但却改变了局部热流密度的分布.

关键词 微通道 Kn 数 直接模拟 Monte Carlo 流动与换热

研究流体的流动换热情况既可以从宏观的角度进行分析也可以从微观层次上着手. 随着近几年来微电子机械系统(MEMS)的飞速发展, 研究流体在微尺度下的流动与换热特性已势不可挡^[1]. 此时, 微尺度下的流体已不满足连续介质的 Navier-Stokes 方程, 而与其对应的是 Boltzmann 方程. 对此, 人们根据 Knudsen 数 Kn 的大小将气体分为几个区域^[2], Kn 数表征了气体的稀薄程度, 定义为

$$Kn = \lambda / L, \quad (1)$$

式中, λ 表示气体粒子的平均自由程, L 代表问题中的特征尺寸. 通常当 $Kn > 0.1$ 时, Navier-Stokes 方程就已不再适用, 而应从分子层次上研究其本身的运动并统计出其宏观特性. 但是根据人们现有的知识, 要得到该区域控制方程(即 Boltzmann 方程)的解析解是相当困难的. 为此, 基于稀薄气体流动的数值模拟研究的需要, Bird 等人^[3]在 20 世纪 60 年代提出了一种计算气体流动与传热问题的方法, 即直接模拟 Monte Carlo (direct simulation of Monte Carlo, DSMC)方法. 实践证明, 该方法对于研究稀薄气体的流动传热问题是一种强有力的工具^[4].

本文将在 Kn 数为 $0.05 \sim 1$ 的范围内, 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 方法进行换热情况的研究. 为了表明通道长度对流动换热的影响, 本文对每个 Kn 数下的微通道在几个可以实现的横纵比下进行了计算比较. 旨在揭示微通道内气体的换热特性及其主要影响因素.

1 数值方法简介

DSMC 方法发端于分子动力学, 并不直接求解 Boltzmann 方程, 而是仿真该方程所描述的物理过程. DSMC 方法用有限个模拟分子代替大量的真实气体分子, 在一定的时间间隔内将分子的迁移运动与分子间的碰撞解耦处理, 通过直接跟踪模拟分子的运动, 记录各个模拟分子

的状态参数,最后将这些仿真分子做统计平均,从而得到气体宏观状态参数的一种方法,整个模拟是一个时间过程.气体的运动完全是杂乱无章的、随机的,但是它却满足一定的分布规律 DSMC 方法就是要从这些分布规律中随机抽样出气体分子的某种状态参数,从而达到统计宏观量的目的.为了实现碰撞对的选取是在最相邻的两个分子之间进行的,DSMC 方法将主网格再分为若干亚网格.同时为了保证模拟分子在网格内至少停留一个时间步长,主网格的尺寸应与当地分子的平均自由程相当. DSMC 方法计算的时间步长应远小于气体分子的平均碰撞时间,从而实现分子运动与碰撞的解耦.

本文的计算工质为氮气,由于单原子气体分子与双原子及多原子气体分子的结构并不相同,DSMC 方法在求解上也有不同.对于单元子气体分子,计算中只需考虑其迁移能量,碰撞视为弹性的.而双原子分子与多原子分子不仅具有迁移能量而且具有转动能量和振动能量,计算中应该考虑两者的影响,碰撞为非弹性的.但由于分子振动的特征温度很高(如氮气分子的振动特征温度为 3337 K),大多数工况的温度不足以激发工质分子的振动能量,所以在通常情况下,不考虑分子的振动是合理的^[5].当两个气体分子碰撞时,碰撞前后的总能量是不变的.但是,总能量在每种能量之间的分布却可能发生变化,能量是否重新分布,取决于气体分子的转动松弛碰撞数 Z_{rot} 及振动松弛碰撞数 Z_{vib} ,它们均可以表示为温度的函数.对于碰撞后能量的重新分布,本文采用 Larsen-Borgnakke 模型^[3],而流体温度按自由度加权平均计算,即

$$T = \frac{3T_{\text{tr}} + \zeta_{\text{rot}}T_{\text{rot}} + \zeta_{\text{vib}}T_{\text{vib}}}{3 + \zeta_{\text{rot}} + \zeta_{\text{vib}}}, \quad (2)$$

其中,3 表示迁移自由度为 3 个,因为在 DSMC 方法中,不论求解问题是几维的,速度均视为三维事件. ζ_{rot} 和 ζ_{vib} 分别表示分子的转动与振动自由度, T_{tr} , T_{rot} 和 T_{vib} 分别表示分子的迁移温度、转动温度及振动温度.

DSMC 方法中壁面上热流密度 q_w 的计算也是大量模拟分子作用于其上的结果:

$$q_w = \frac{\sum E_i - \sum E_r}{\Delta t \cdot A}, \quad (3)$$

其中,下标 i 和 r 分别代表入射分子和反射分子; E 表示分子的总能量,包括迁移、转动和振动 3 种能量; m 为分子质量; Δt 和 A 分别为作用时间与作用面积.

气体分子与固体壁面碰撞的充分度和碰撞能量均与壁面性质有关,反射分子的温度可按下式进行调整:

$$\alpha_c = \frac{q_i - q_r}{q_i - q_w}, \quad (4)$$

α_c 称为物面热协调系数, q_i 和 q_r 分别为入射与反射的能流, q_w 为反射后气体分子的温度 T_r 与壁面温度 T_w 相等时反射所带走的能流, $\alpha_c \in [0,1]$.

2 求解物理问题及计算结果

2.1 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. 本文的计算工质为氮气,来流速度 u_∞ 为 100 m/s,温度 T_∞ 为 273 K,压力为一个大气压,通道上下壁温 T_w 为 500 K. 本文对 Kn 数分别为 0.05, 0.08, 0.25, 0.75 和 1.0 5 种工况进行计算,每种工况下对纵横比 $AR = L/h = 5, 15, 25$

3种情况进行计算比较.

计算中,时间步长取为 10^{-11} s,进出口采用宏观上有流量通量的流体边界条件.分子之间的作用势采用 VHS (variable hard sphere)模型^[3].分子与上下壁面的碰撞采用漫反射模型,即反射分子的速度与入射分子无关,反射分子的速度满足 Maxwell 速度分布,按下式抽取^[3]:

$$f(c') = \left(\frac{m}{2\pi\kappa T_r} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{mc'^2}{2\kappa T_r}}, \quad (5)$$

其中, c' 为分子的热运动速度, m 为分子质量, κ 为 Boltzmann 常数, T_r 为反射分子的温度. 本文物面热协调系数 α_c 为 1, 此时反射分子的温度与壁面温度相同.

另外,合理模拟分子数的选取必须兼顾计算效率及统计得到的宏观物理量的真实性. 因为过少的模拟分子会使计算结果失去统计的意义,导致错误的结果,而过多的模拟分子数又会大大增加计算时间. Bird^[6]建议,须在每一个计算单元中布置 20~30 个模拟分子. 由于每个网格中的模拟分子数在计算的过程中是不断变化的,但在亚音速流动中这种变化不是很大,所以本文对所有网格取同一权因子(即一个模拟分子代表的实际分子数),平均每个网格中布置 25~35 个模拟分子.

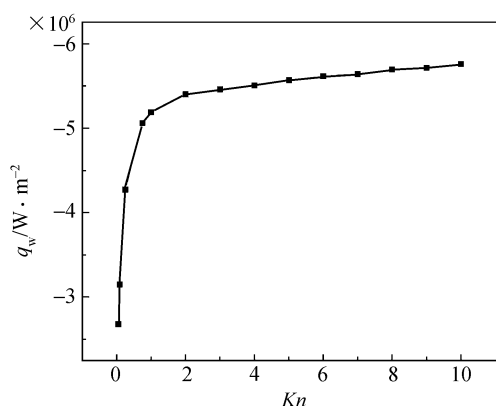


图2 $AR = 5$ 时,壁面上热流密度随 Kn 数的变化曲线图

的碰撞频率越小,在自由分子区($Kn > 10$)内,甚至可以忽略不计.此时,壁面热流的传递主要依靠分子与壁面之间的碰撞.而当 Kn 数较小时,气体分子之间的碰撞显得更为重要,尤其是在连续介质区($Kn < 10^{-3}$)时,分子与壁面的碰撞频率远远小于分子之间的碰撞频率.故 Kn 数较小时,只有离壁面很近的分子才会与壁面碰撞,这就导致了壁面热流密度的减小.以上也正说明了为什么微通道内壁面热流密度($10^6 \sim 10^7$ W/m²)会远远大于宏观通道的壁面热流密度(通常小于 10^4 W/m²).但当 Kn 数增大到一定程度时,气体更加稀薄,分子间碰撞机会减少,而与壁面作用的分子数没有明显变化,使得壁面热流密度变化不大.故在本文所研究的 Kn 数范围内,呈现图 2 所示的变化趋势.

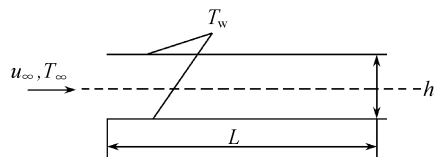


图1 微通道示意图

2.2 计算结果与分析

图 2 为纵横比 $AR = 5$ 时,通过壁面的热流密度随 Kn 数的变化曲线图.其中壁面换热量为负值,由(3)式可知,表示热流从壁面传向流体.为了充分表明微通道内的换热随 Kn 数的变化关系,将 Kn 数增大到 10,即在整个过渡区内进行计算.从图 2 可以看出,在本文所研究的范围内,壁面热流密度随 Kn 数的增大而增大.当 $Kn < 1$ 时,热流密度随 Kn 数的增大而剧烈增加.随着 Kn 数的增大,热流密度随 Kn 数的变化逐渐趋于平缓.这主要是因为 Kn 数越大,气体的稀薄程度越高,气体分子与壁面的碰撞频率越大,而气体分子之间的

图 3(a)为 $AR = 5$ 时, 不同 Kn 数下沿流动方向局部热流密度变化曲线图, 图 3(b)为相应的流体温度变化曲线图. 由两图可以看出, 不同 Kn 数下的换热情况基本相同, 换热量主要集中在通道的进出口处, 中间部分的换热量很小, 但此时换热是遍及整个通道的, 这一结论亦被文献[7]所证实.

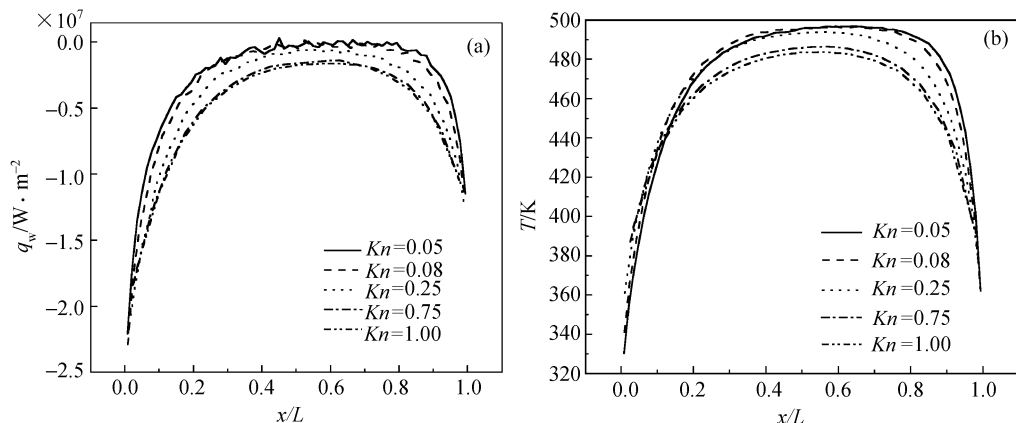


图 3 $AR = 5$ 时, 不同 Kn 数下壁面局部热流密度(a)和截面平均温度(b)变化曲线图

图 4(a)和(b)分别为 $Kn = 0.25$ 时, 不同纵横比下的壁面热流密度及相应的温度变化图. 由图 4(a)可以看出, AR 越大, 即通道越长, 壁面局部换热量越小. 当纵横比增大时, 流体很快被加热, 在通道进出口处换热量急剧变化, 中间部分的热流密度几乎为 0, 且流体温度也更接近壁面温度(图 4(b)). 在通道大部分区域为绝热区, 流体几乎保持等温流动, 并且绝热区开始处的有量纲横坐标基本相同, 约为 10^{-7} m 数量级, 与通道的纵横比基本没有太大关系.

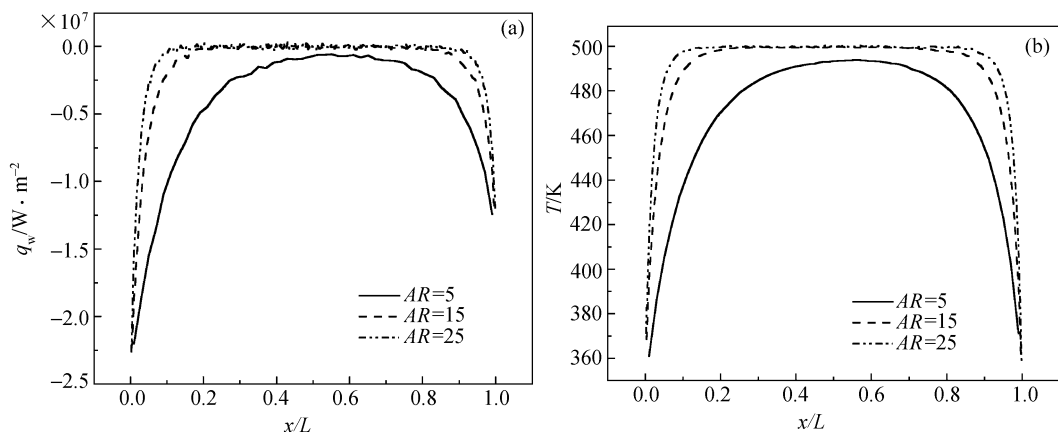


图 4 $Kn = 0.25$ 时, 不同纵横比下壁面局部热流密度(a)和截面平均温度(b)变化曲线图

图 3 和 4 所示的现象是连续介质区域流动中没有碰到过的. 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, 进入的分子个数均可由分子运动论的有关知识得出^[3]. 当分子进入后, 进入前的宏观速度对其不再有影响, 此时分子以各自的热运动速度向各个方向运动, 且向各方向运动的几率是相同的, 所以在微通道的进出口也均有分子逸出. 由于

在微通道的进出口处, 刚进入的分子的能量与壁面有很大差别, 并且气体进入微通道后, 稀薄程度大大增加, 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, 两种因素同时作用(前者占主导地位), 在图中表现为进出口处壁面热流密度急剧上升. 另外, 只要来流速度大于零, 进口处进入的分子数就会多于出口处进入的分子数, 所以进口壁面热流密度大于出口. 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后, 其能量已与壁面差距大大减小, 故两者在微通道中部碰撞时, 交换的能量是很小的.

对于通道横纵比较小的情况(如图 4(a)中 $AR = 5$), 气体分子还没有来得及与壁面多次碰撞, 就已经从进出口逃逸出去. 所以, 在微通道中的碰撞始终具有较大的能量差, 换热会遍及整个通道.

图 5 为 $AR = 5$ 时, 在 $x/L = 0.3$ 横截面上温度在通道高度方向上的分布曲线图. 由图可以看出, 壁面处(即 $y/H = 0.0$ 及 1.0 处)的温度出现了滑移, 不等于壁面温度, 且随着气体稀薄程度的增加, 即 Kn 数的增大, 滑移程度越大.

图 6(a)和(b)分别为 $Kn = 1.0$, $AR = 5$ 时, 壁面上总的热流密度及局部热流密度随进口流速(均为亚音速)的变化曲线. 在这里仅针对通道横纵比很小, 热流遍及整个通道的情形($AR = 5$)而言. 由图 6(a)可以看出, 壁面上总的热流密度随进口流速变化很小, 但是进口流速的变化却改变了壁面局部热流密度的分布(图 6(b)). 速度较小时进出口处的换热量大致相当, 随着进口流速的增大, 通道前半部分换热量增大, 后半部分换热量减小, 通道中部的换热量几乎不随流速变化(图中表示为几条曲线相交于一点). 这是由于当进口流速增加时, 从微通道进口进入

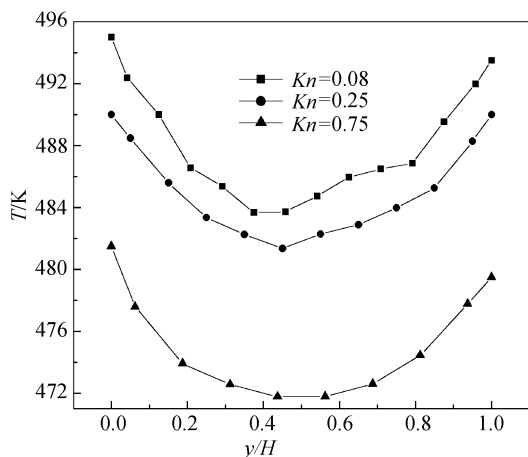


图 5 $AR = 5$, $x/L = 0.3$ 截面上, 不同 Kn 数下温度在通道高度方向上的分布图

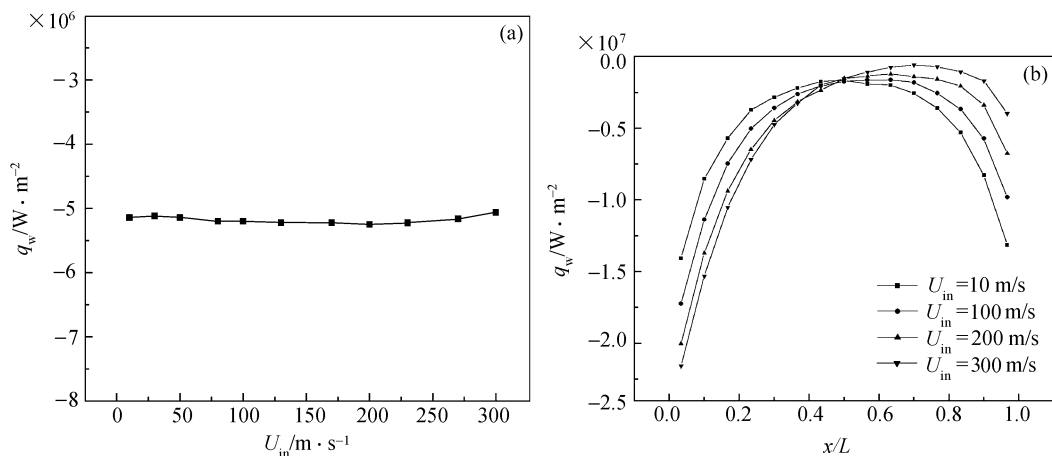


图 6 $Kn = 1.0$, $AR = 5$ 时, 壁面总热流密度(a)和局部热流密度(b)随进口流速的变化曲线图

的分子数就会随之增加,而从通道出口处进入的分子数就会减小.在本文的计算中,进出口进入分子数的比例约为: $u_{\infty} = 10 \text{ m/s}$ 时,约为 $1:1$; $u_{\infty} = 100 \text{ m/s}$ 时,约为 $2:1$; $u_{\infty} = 300 \text{ m/s}$ 时,约为 $15:1$.这就使得在进口处与壁面能量差大的分子数更多,故碰撞时产生的能量交换更大.当外部宏观流速达到超音速甚至更大时,通道出口则可以采用真空边界模型,即出口没有进入的分子,此时通道出口处的换热情况与中部相同.图 6(b)中的热流密度曲线尾部会继续趋近于零,不会再有明显的增加.这一现象亦被文献[7]所证实.

3 结论

通过本文的计算,可以得出如下结论:

(i) 微通道内的换热主要集中在进出口处,通道横纵比很小时,换热遍及整个通道.随着横纵比的增加,通道中间很大一部分的换热几乎为零,气体在通道内大部分区域作近似等温流动,其温度与壁面温度几乎相同,总的壁面热流密度随 Kn 数的增大而增大,随通道横纵比的增加而减小.

(ii) 气体温度在壁面处出现滑移, Kn 数越大,滑移程度越大.

(iii) 在亚音速范围内,壁面总的热流密度受进口流速的影响不大,但局部热流密度的分布却随进口流速的变化而改变.

参 考 文 献

- 1 刘 静. 微米/纳米尺度传热学. 北京: 科学出版社, 2001. 1~6
- 2 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
- 3 Bird G A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. New York: Oxford University Press, 1994
- 4 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
- 5 Cheng C H, Liao F L. DSMC analysis of rarefied gas flow over a rectangular cylinder at all Knudsen numbers. J Fluids Engineering, 2000, 122: 720~729
- 6 Bird G A. Molecular Gas Dynamics. Oxford: Clarendon Press, 1976
- 7 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