

# 微纳通道内稠密气体流动和换热的 Monte Carlo模拟\*

王沫然\*\* 李志信

(清华大学工程力学系, 北京 100084)

**摘要** 使用 Enskog 模拟 Monte Carlo 法(ESMC)对稠密气体在微纳通道内的流动和换热进行了模拟, 并与直接模拟 Monte Carlo 法(DSMC)和一致性 Boltzmann 算法(CBA)所得的结果进行了对比, 对微纳通道内稠密气体流动和换热特性进行了分析. 结果表明, 当气体密度较大时, 稠密气体效应对流动和换热的影响不可忽略, 这种效应使得通道内壁面阻力系数减小, 且壁面换热特性也与不考虑稠密气体效应时有所不同.

**关键词** 稠密气体流动 微纳通道 Monte Carlo 模拟 Enskog 方程

微纳电子机械系统(MEMS/NEMS)内部的流动和换热问题一直是制约和推动其进一步发展的重要理论问题, 是目前研究的热点<sup>[1,2]</sup>. 微纳通道内的气体流动因其特征尺度减小而表现出与常规尺度条件下不尽相同的流动和换热特性. 一般来说, 即使在常温常压下, 气体的平均自由程也可与特征尺度相比拟, Knudsen 数较大, 此时的流动可能处于滑移区甚至过渡区, 气体的流动表现出明显的“稀薄气体效应”. 气体在固壁面的速度滑移和温度跳跃现象已经得到了理论和实验的验证<sup>[3]</sup>.

钱学森等人<sup>[4]</sup>曾对稀薄气体流动的相似性作过详尽的分析, 近年来, 一些学者把这种相似性分析引入到微尺度气体流动研究中<sup>[5~7]</sup>, 并指出, 当气体满足理想气体状态方程时, 微尺度气体流动与常规尺度下稀薄气体流动具有相似性<sup>[7]</sup>. 这为微气体流动的研究带来了很大的方便, 大量的稀薄气体理论和模拟方法已经成功应用于微流动领域<sup>[3,7]</sup>. 然而, 在MEMS/NEMS中还会遇到这样的情况, 即

2004-02-28 收稿, 2005-03-25 收修改稿

\* 国家自然科学基金(批准号: 59995550-2)和国家重点基础研究发展规划(批准号: G1999033106)资助项目

\*\* E-mail: [moralwang@jhu.edu](mailto:moralwang@jhu.edu)

气体流动不仅处于高Knudsen数而且处在高压(高密度)条件下<sup>[8]</sup>, 此时不仅基于连续介质假定的理论和方法不能给出准确的解释和预测, 而且由于理想气体假设不再成立, 常规的稀薄气体理论和方法也不再适用. Alexander等人<sup>[9]</sup>提出了一种一致性Boltzmann算法(CBA), 试图对基于稀薄气体假设和理想气体假设的直接模拟Monte Carlo法(DSMC)<sup>[10]</sup>进行修正, 通过粒子碰撞后附加位移的方法引入van der Waals方程代替理想气体状态方程, 使之扩展到稠密气体甚至液体的模拟, 并已经在核子流<sup>[11]</sup>、气液表面特性<sup>[12]</sup>以及非理想气体微纳流动<sup>[13]</sup>的模拟中得到了成功应用. 然而值得注意的是, 由于附加位移在改变气体状态方程的同时也改变了气体的传输特性, 因此, 当气体分子的总体积占系统体积的比例较高时, 气体的传输特性会偏离真实值, 从而造成模拟失效<sup>[14~16]</sup>.

Enskog于1922年对基于硬球模型的Boltzmann方程进行了修正, 并提出了著名的Enskog方程, 以期反映气体稠密性的影响, 其具体形式为<sup>[17]</sup>

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = & \sigma^2 \int d\mathbf{v}_1 \int d\hat{\sigma} \Theta(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g})(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g}) \\ & \times [\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r} - \sigma) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) \\ & \times f(\mathbf{r} - \sigma, \mathbf{v}_1', t) - \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r} + \sigma) \\ & \times f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) f(\mathbf{r} + \sigma, \mathbf{v}_1, t)], \end{aligned} \quad (1)$$

其中,  $\Theta(x)$ 为Heaviside函数,  $\mathbf{r}$ 为坐标,  $\sigma = \sigma \hat{\sigma}$ ,  $\sigma$ 为分子直径,  $\mathbf{g} \equiv \mathbf{v} - \mathbf{v}_1$ ,  $\mathbf{v}' = \mathbf{v} - (\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g}) \hat{\sigma}$ ,  $\mathbf{v}_1' = \mathbf{v}_1 + (\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g}) \hat{\sigma}$ .

毫无疑问, Enskog方程较之Boltzmann方程更难于求解. 近年来一些学者在不改变原方程固有特征的前提下提出了简化的动力学模型<sup>[18]</sup>, 另外一些学者则借鉴直接模拟Monte Carlo法(DSMC)对Boltzmann方程精确求解的做法<sup>[19]</sup>, 提出了可以对Enskog方程直接求解的Monte Carlo法<sup>[20~22]</sup>, 其中, Montanero和Santos<sup>[20]</sup>提出类似Nanbu的DSMC方法的Enskog模拟Monte Carlo法(ESMC), 随后他们<sup>[21]</sup>和Frezzotti<sup>[22]</sup>分别指出, 类似Bird的DSMC的新ESMC方法有更好的计算效率并可以准确做到动量和能量的守恒. 然而需要指出的是, 前人对稠密气体模拟方法的研究还处在定性的探索阶段. 本文发展了后一种ESMC方法, 使用这种方法对微纳通道内Knudsen数高密度的气体流动进行模拟分析, 探讨了其流动和换热特性.

## 1 数值方法

### 1.1 Enskog 模拟 Monte Carlo 法(ESMC)

本文所使用的Enskog模拟Monte Carlo法(ESMC)最早是由Montanero和Santos<sup>[20,21]</sup>提出的, 类似于DSMC, 它也是使用大量粒子代替气体真实分子, 通过

计算粒子的运动和碰撞再现了气体分子的运动过程,从而使控制方程得到求解.当计算网格的特征尺寸远小于气体的平均自由程( $\Delta L \ll \lambda$ )且计算时间步长小于分子平均碰撞时间( $\Delta t < \tau$ )时,粒子的运动和碰撞过程可以解耦,这个过程与 DSMC<sup>[10]</sup>非常类似. ESMC与DSMC的不同之处在于处理碰撞的过程不尽相同. ESMC在处理粒子  $i=1, \dots, N$  的碰撞过程中主要采取以下步骤:

- (i) 对于粒子  $i$ , 随机选取一个方向  $\hat{\sigma}_i$ .
- (ii) 在  $\mathbf{r}_i + \sigma \hat{\sigma}_i$  的方向上选取临近粒子, 若网格内没有同类粒子  $j$ , 在相邻网格内选取.
- (iii) 粒子  $i$  和粒子  $j$  的碰撞在几率大于  $\chi(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_i + \sigma \hat{\sigma}_i) \cdot \omega_B$  时被接受, 其中,  $\omega_B$  为基于 Boltzmann 方程的二元碰撞几率.
- (iv) 若碰撞被接受, 碰撞后的速度为  $\mathbf{v}'_i = \mathbf{v}_i - (\hat{\sigma}_i \cdot \mathbf{g}_{ij}) \hat{\sigma}_i$ ,  $\mathbf{v}'_j = \mathbf{v}_j + (\hat{\sigma}_i \cdot \mathbf{g}_{ij}) \hat{\sigma}_i$ .
- (v) 对下一个粒子重复全过程.

## 1.2 碰撞修正因子的确定

根据稠密气体的 Enskog 理论<sup>[23]</sup>, 当稠密气体的密度使得气体分子的总体积与系统的体积相比不可忽略时, 分子就不能当成点粒子对待, 因此, 由 Boltzmann 方程得到的碰撞频率需要考虑密度对碰撞过程的影响加以修正. 直观来讲, 稠密气体的碰撞频率因分子占有一定的空间而增大为  $V/V'$ , 其中,  $V' = (1 - 4n\pi\sigma^3/3)$ . 然而, 当考虑粒子间的三元碰撞时, 碰撞频率还要减小  $(1 - 11n\pi\sigma^3/12)$ , 此时碰撞几率的修正因子可以表示为

$$\chi(\eta) = \frac{1 - 11\eta/8}{1 - 2\eta}, \quad \eta = \frac{2}{3} n \pi \sigma^3. \quad (2)$$

(2)式仅在  $\eta < 0.03$  时可以认为是准确成立的, 当考虑粒子间的四元或四元以上的碰撞时, 这一修正因子显然是被高估了. 在本文的计算中, 综合考虑各种因素后使用了如下的修正因子表达式<sup>[23]</sup>:

$$\chi(\eta) = 1 + 0.625\eta + 0.2869\eta^2 + 0.1103\eta^3. \quad (3)$$

可以证明这一表达式低于 Frezzotti<sup>[22]</sup>和 Kortemeyer 等人<sup>[11]</sup>所给出的表达式的值, 而与 Garcia 等人<sup>[24]</sup>在 CBA 中的修正因子表达式的值非常接近.

## 1.3 宏观量统计

流场的宏观物理特性可以通过如下的统计公式计算得到

$$U_j = \frac{1}{N_j} \sum u, \quad (4)$$

其中,  $U_j$  表示  $j$  网格的宏观平均速度,  $N_j$  表示  $j$  网格内的粒子数.

$$T = (3T_{tr} + \zeta T_{rot}) / (3 + \zeta), \quad (5)$$

其中,  $T_{tr}$  代表平动温度,  $T_{rot}$  代表转动温度,  $\zeta$  为内能自由度. 忽略振动温度, 平动温度和转动温度由下面公式计算:

$$T_{tr} = 2(\overline{mv^2} - \overline{m} \cdot \overline{v}^2) / 3k, \quad (6)$$

$$T_{rot} = \frac{2}{k} (\overline{\varepsilon_{rot}} / \zeta), \quad (7)$$

其中,  $v$  为分子的速度,  $k$  为 Boltzmann 常数,  $\varepsilon_{rot}$  为单个分子的转动能.

壁面的阻力系数可以表示为

$$C_f = \frac{\tau}{\frac{1}{2} \rho_\infty u_\infty^2} = \left\{ \frac{[\sum (mu)_i - \sum (mu)_r] \cdot N_0}{\Delta t (1 \cdot \Delta x)} \right\} / \left( \frac{1}{2} \rho_\infty u_\infty^2 \right), \quad (8)$$

其中, 下标  $i$  和  $r$  分别表示入射和出射分子,  $N_0$  为气体分子数,  $\Delta t$  为采样时间间隔.

壁面的热流通量  $q$  可以表示为

$$q = \frac{[(\sum \varepsilon_{tr} + \sum \varepsilon_{rot})_i - (\sum \varepsilon_{tr} + \sum \varepsilon_{rot})_r] N_0}{\Delta t (1 \cdot \Delta x)}. \quad (9)$$

## 2 模拟结果与分析

本文对稠密气体微纳通道内的流动和换热进行了模拟, 与标准 DSMC 方法以及 CBA 方法所得结果进行了对比, 并分析了微纳通道内稠密气体流动和换热的特点.

如图 1 所示, 气体在长度为  $L$  宽度为  $H$  的二维直通道内流动, 入口的无穷远来流数密度  $n_\infty$ 、速度  $u_\infty$  和温度  $T_\infty$  给定. 在本文的模拟中, 通道尺寸为  $L = 0.05 \mu\text{m}$  和  $H = 0.01 \mu\text{m}$ , 计算区域划分为  $100 \times 60$  个均匀矩形网格, 每个网格内又被分为  $2 \times 2$  个子网格; 工作气体为氮气, 其气体特性参见表 1, 其中  $m$  为分子质量,  $\zeta$  为分子的内能自由度,  $d_{ref}$  为分子的参考直径,  $T_{ref}$  为参考温度,  $\omega$  为黏度温度率; 来流速度  $u_\infty = 200 \text{ m/s}$ , 来流温度  $T_\infty = 300 \text{ K}$ , 通道壁面温度  $T_w = 300 \text{ K}$ . 对于三种方法, 气体的分子模型都采用可变硬球模型(VHS), 气体与固壁面的作用采用漫反射模型. 对于所有算例, 总的模拟粒子数都超过  $10^5$ , 总的采样数都超过  $3 \times 10^6$ .

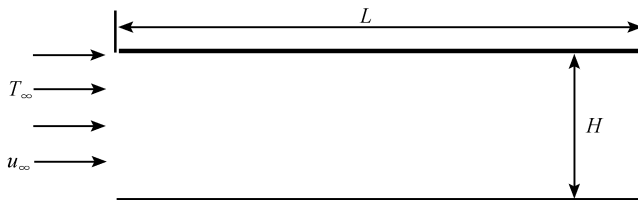


图 1 物理模型及边界条件示意图

表 1 氮气的物性<sup>[10]</sup>

| $m/\text{kg}$         | $\zeta$ | $d_{\text{ref}}/\text{m}$ | $T_{\text{ref}}/\text{K}$ | $\omega$ |
|-----------------------|---------|---------------------------|---------------------------|----------|
| $4.65\times 10^{-26}$ | 2       | $4.17\times 10^{-10}$     | 273                       | 0.74     |

图 2 显示了无穷远来流数密度  $n_\infty = 1.29\times 10^{26}$  时沿通道中心线上的速度分布和温度分布, 图中分别对比了 ESMC 和 DSMC 的结果. 由于黏性的作用, 均匀气体来流在入口附近受到边界层的挤压, 速度下降, 远小于来流速度, 同时气体温度由于压力升高而高于来流温度; 与之对应, 在出口处, 由于气体膨胀, 气体平均速度增大, 平均温度也会低于来流温度. 由于文中给出的是通道中心线上的速度和温度分布, 在出口处由于速度剖面“饱和”, 中心线上的速度略有下降. 对于

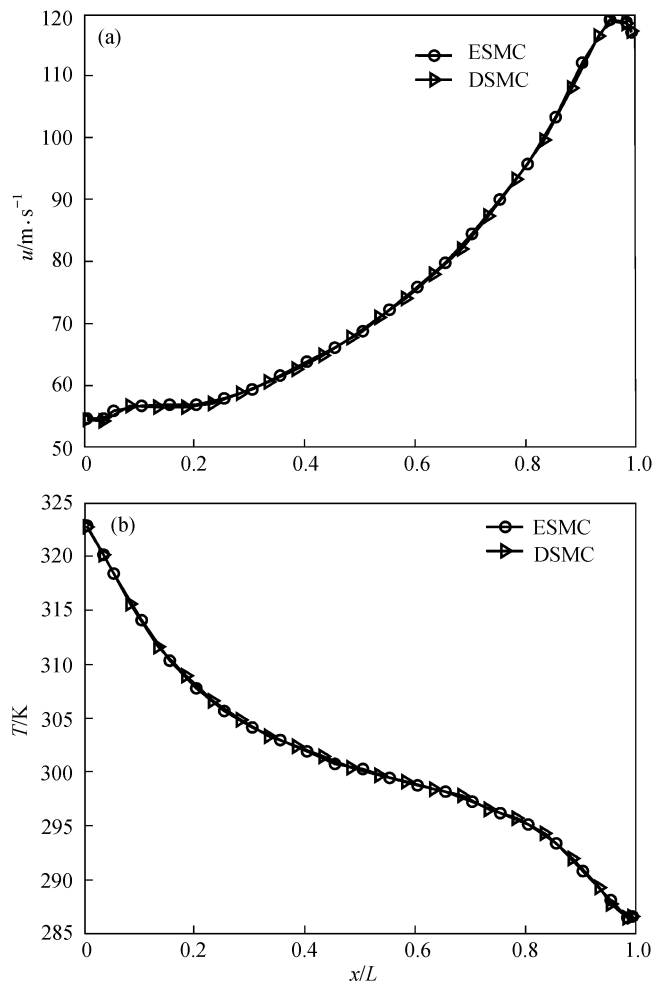


图 2  $\eta = 0.0196$  时通道中心线上速度和温度的沿程变化  
(a) 速度分布, (b) 温度分布

这种工况,  $\eta = 0.0196$ , 稠密气体效应还不明显, ESMC 和 DSMC 的结果符合很好. 这说明 ESMC 在气体密度不是很大时完全退化为 DSMC, 也验证了 ESMC 程序的正确性.

图 3 显示了  $n_\infty = 2.59 \times 10^{27}$  时的情况. 图中不仅对比了 ESMC 和 DSMC 在通道中心线上的速度和温度, 同时还对比了 CBA 的模拟结果. 对于这种工况,  $\eta = 0.393$ , 稠密气体效应明显, ESMC 与 DSMC 的速度模拟结果有很大差异, 而与 CBA 的结果符合较好; 而对于温度分布, 两种针对稠密气体的模拟方法(ESMC和 CBA<sup>[5]</sup>)的结果差异较大, 而 ESMC 和 DSMC 的结果比较接近, ESMC 所得的温度分布在通道的前半程略高于 DSMC 的结果, 而在后半程差异较小. 造成 ESMC 和 CBA 在温度分布上有较大差异的可能有两方面的原因: 一是 CBA 模型的引入

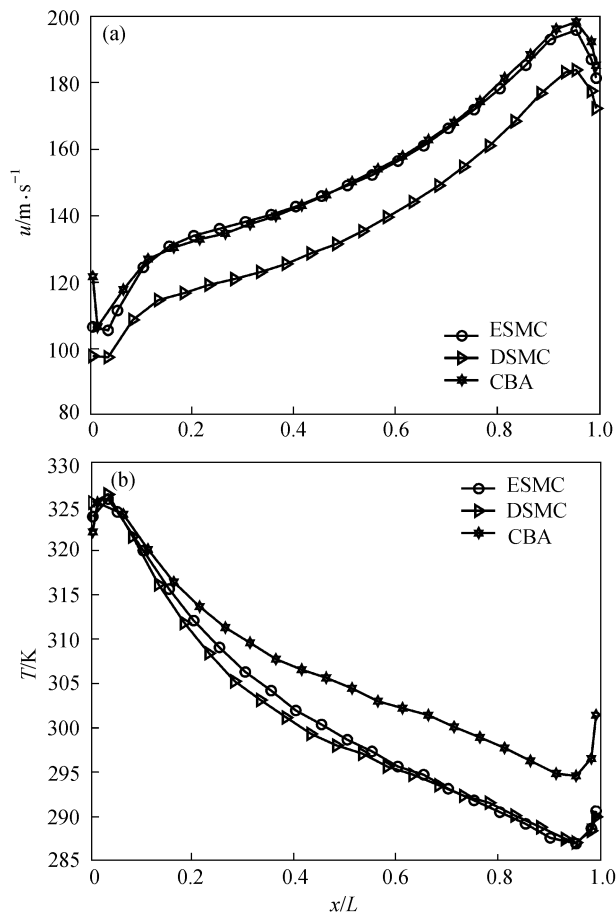


图 3  $\eta = 0.393$  时通道中心线上速度和温度的沿程变化  
(a) 速度分布, (b) 温度分布

造成了对气体传输特性的影响,从而带来了计算宏观流动换热特性的偏差<sup>[14~16]</sup>;另一个因素可能在于ESMC所使用的硬球模型没有反映气体稠密时分子间作用力的影响.对此,还需要作进一步的研究和分析.

图4对比了稠密气体流动时( $\eta = 0.393$ )ESMC和DSMC对壁面阻力特性和换热特性的模拟结果.可以看出,当考虑到气体的稠密效应时,所预测得到的流动阻力系数要小于DSMC的预测值;考虑稠密气体效应时,壁面的换热特性也有所不同,在通道的前半段热流量要明显低于DSMC的结果,而在通道的后半段的热流量要比DSMC的结果略高.

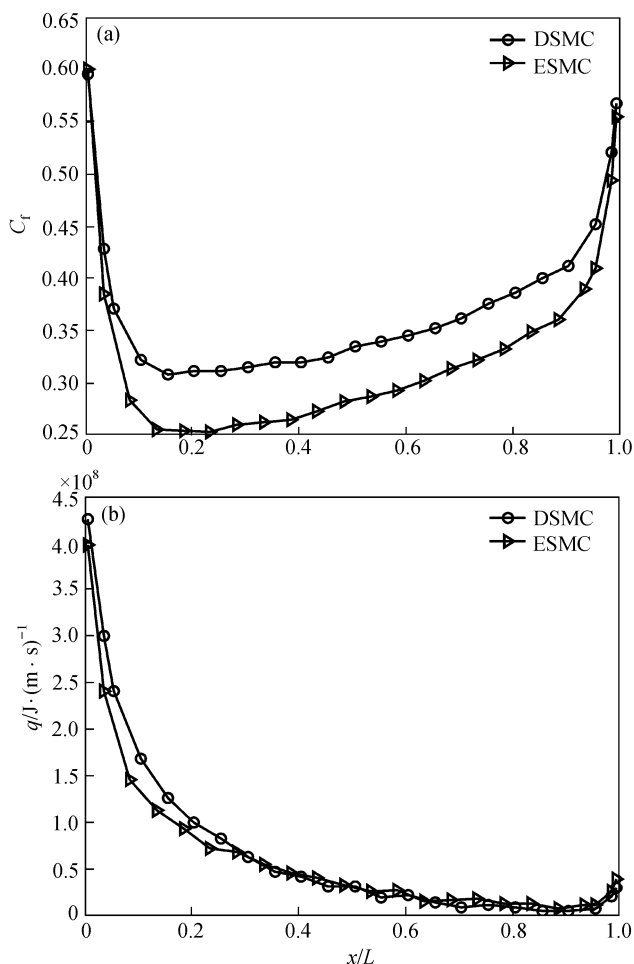


图4  $\eta = 0.393$  时通道壁面阻力和换热特性

(a) 壁面阻力系数分布, (b) 壁面热通量分布

### 3 结论

本文发展了 Enskog 方程的 Monte Carlo 模拟方法(ESMC), 根据 Enskog 稠密气体理论重新确定了碰撞修正因子的表达式, 并对稠密气体微纳通道内的流动和换热进行了模拟和分析. 模拟结果表明, 当  $\eta$  很小时, ESMC 完全退化成 DSMC; 当  $\eta$  较大时, 考虑稠密气体效应所得到的速度场与不考虑稠密气体效应的速度场差异较大, 而 ESMC 与 CBA 的结果符合很好; ESMC 的温度场计算结果与 DSMC 结果差别不明显, 而与 CBA 结果存在较大差异, 其原因需要进一步研究. 考虑稠密气体效应时的壁面阻力系数明显低于不考虑时的结果; 壁面的换热特性也与不考虑稠密气体效应时有所不同, 在通道的前半段考虑稠密气体效应的热流量要低于不考虑的结果, 而在后半段情况恰好相反.

### 参 考 文 献

- 1 Ho C M, Tai Y C. Micro-electro-mechanical-systems (MEMS) and fluid flows. *Annu Rev Fluid Mech*, 1998, 30: 579~612
- 2 Guo Z Y, Li Z X. Size effect on microscale single-phase flow and heat transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2003, 46: 149~159[DOI]
- 3 Karniadakis G E, Beskok A. *Micro Flows: Fundamentals and Simulation*. New York: Springer, 2002
- 4 Tsien H S. Superaerodynamics, mechanics of rarefied gases. *J Aero Sci*, 1946, 13(12): 653~664
- 5 沈 青. 稀薄气体动力学. 北京: 国防工业出版社, 2003
- 6 Gad-el-Hak M. The fluid mechanics of microdevices—the freeman scholar lecture. *J Fluid Engin*, 1999, 121: 5~33
- 7 Wang M R, Li Z X. Similarity of ideal gas flow at different scales. *Science in China, Ser E*, 2003, 46: 661~670
- 8 Gatzert H H. Rigid disk slider micromachining challenges to meet microtribology needs. *Tribol Int*, 2000, 33: 337~342[DOI]
- 9 Alexander F J, Garcia A L, Alder B J. A consistent Boltzmann algorithm. *Physical Review Letters*, 1995, 74: 5212~5215[DOI]
- 10 Bird G A. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford: Clarendon Press, 1994
- 11 Kortemeyer G, Daffin F, Bauer W. Nuclear flow in consistent Boltzmann algorithm models. *Physics Letters B*, 1996, 374: 25~30[DOI]
- 12 Hadjiconstantinou N G, Garcia A L, Alder B J. The surface properties of a van der Waals fluid. *Physica A*, 2000, 281: 337~347
- 13 Wang M R, Li Z X. Nonideal gas flow and heat transfer in micro- and nanochannels using the direct simulation Monte Carlo method. *Physical Review E*, 2003, 68: 046704[DOI]
- 14 Alexander F J, Garcia A L, Alder B J. The consistent Boltzmann algorithm for the van der Waals equation of state. *Physica A*, 1997, 240: 196~201
- 15 Garcia A L, Alexander F J, Alder B J. A particle method with adjustable transport properties—The generalized consistent Boltzmann algorithm. *J Stat Phys*, 1997, 89: 403~409
- 16 Garcia A L, Wagner W. Some new properties of the kinetic equation for the consistent Boltzmann algorithm. *Transport Theo Stat*, 2002, 31: 579~594[DOI]

- 17 Kauzmann W. Kinetic Theory of Gases. New York : Benjamin Inc, 1976
- 18 Dufty J W, Santos A, Brey J J. Practical kinetic model for hard sphere dynamics. Physical Review Letter, 1996, 77: 1270~1273[DOI]
- 19 Wagner W. A convergence proof for Bird's direct simulation Monte Carlo method for the Boltzmann equation. J Stat Phys, 1992, 66: 1011~1044[DOI]
- 20 Montanero J M, Santos A. Monte Carlo simulation method for the Enskog equation. Physical Review E, 1996, 54: 438~444[DOI]
- 21 Montanero J M, Santos A. Simulation of Enskog equation a la bird. Phys Fluids, 1997, 9(7): 2057~2060[DOI]
- 22 Frezzotti A. Particle scheme for the numerical solution of the Enskog equation. Phys Fluids, 1997, 9(5): 1329~1335[DOI]
- 23 Schram P P J M. Kinetic Theory of Gas and Plasmas. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1991
- 24 Garcia A, Baras F. Direct simulation Monte Carlo: Novel application and new extensions. In: Proceedings of the 3rd Workshop on Modelling of Chemical Reaction Systems, Heidelberg, 1997