第 25 卷第 5 期 工 程 热 物 理 学 报 Vol.25, No.5
2004 年 9 月 JOURNAL OF ENGINEERING THERMOPHYSICS Sep., 2004

微通道内气体流动的三维效应

王沫然 李志信

（清华大学工程力学系， 北京 100084 ）

摘 要 本文使用直接模拟 Monte Carlo 法对三维直微通道内的气体流动进行了数值模拟，对比了不同截面形状的通道不同驱动压差的情况，探讨了截面形状对微通道内气体流动三维效应的影响以及三维效应对流量 - 压差关系的影响。

关键词 三维效应；微气体流动；直接模拟 Monte Carlo
中图分类号：TK16; TH20 **文献标识码**：A **文章编号**：0253-231X(2004)05-0840-03

THREE-DIMENSIONAL EFFECT OF GAS FLOW IN MICRO CHANNELS

WANG Mo-Ran LI Zhi-Xin

(*Department of Engineering Mechanics, Tsinghua University, Beijing* 100084, *China*)

Abstract The gas flows in three-dimensional straight micro channels are numerically simulated using the direct simulation Monte Carlo method. Different cross section formations and different driving pressures are taken into considerations. The simulated results indicate the three-dimensional effect of the cross section formations on the micro channel gas flows. The three-dimensional effect on the flowrate-pressuredrop relationship is also analyzed.

Key words three-dimensional effect; micro gas flow; direct simulation Monte Carlo

1 前 言

近年来，微电子机械系统 (MEMS) 及纳米科技的飞速发展大大推动了微尺度流动和换热的研究，并使之成为新的热点问题 [1,2]。微尺度气体流动研究对于航空航天领域以及民用的微型器件设计与优化起着举足轻重的作用，例如用于微小卫星姿态控制的微型喷管推进系统、微型飞机翼面流态控制的微型合成喷系统以及用于汽车气囊中的热对流加速度计等。

当气体分子的平均自由程与流动系统的特征尺度相比不可忽略时，必须考虑气体的“稀薄”效应。一般来说，当努森数 $Kn > 0.1$ 时，基于连续介质假定的描述方法及其修正形式不再适用。流动必须由基于分子运动观点的方法描述 [3]。直接模拟 Monte Carlo 法是一种求解高努森数的基于分子运动和统计规律的流体计算方法 [4]，它曾经成功的应用于常规尺度稀薄气体流动与换热的模拟，目前已有许多学者使用 DSMC 方法模拟 MEMS 中的气体流动和换热问题。

目前，由于计算量的限制，绝大多数的 DSMC 模拟使用了二维模型，即将第三维在空间上看作无穷长。这一假设在当通道截面的宽高比远大于 1 时是适用的，且可以得到与实验结果符合较好的模拟结果。但是，由于使用场合与加工条件的限制，这一条件在很多情况下难以成立，必须考虑流动的三维效应；特别的，当流动在一个方向上特征尺度很小，而在另一个方向上存在复杂的边界几何外形时，三维效应不可忽略，如何选择合理的二维假设是一个值得深入探讨的问题。

本文对不同截面宽高比的三维直通道气体流动进行了模拟，并与相同特征尺度的二维结果进行了对比，探讨了流动的三维效应；模拟了不同驱动压差下的 Poisueille 流动，并与滑移区的理论解进行了对比，分析了三维效应对流量 - 压力关系的影响。

2 数值方法

2.1 DSMC 方法简介

直接模拟 Monte Carlo (DSMC) 方法是一种基于分子运动和统计规律、用来模拟稀薄气体流动的数值方法。它通过计算成千上万的模拟粒子的运动

收稿日期：2004-01-06; **修订日期**：2004-06-16
基金项目：国家自然科学重大基金资助项目 (No.59995550-2); 国家重点基础研究发展项目资助 (No.1999033106)
作者简介：王沫然 (1977-)，男，吉林人，博士，主要从事微尺度流动和换热的研究工作。

© 1995-2004 Tsinghua Tongfang Optical Disc Co., Ltd. All rights reserved.

和碰撞再现了气体分子的运动过程，使气体流动的动力学方程得到求解。在模拟过程中，每个模拟粒子代表大量的真实气体分子，只考虑粒子间的二元碰撞，当计算时间步长小于物理碰撞时间时，分子的运动与分子间碰撞解耦。同时，在粒子运动、粒子间碰撞及粒子与边界间相互作用时保持动量和能量的守恒。

在本文的模拟中，采用可变硬球模型 (VHS)，边界上气体分子与壁面的相互作用采用漫反射模型，选取的时间步长保证小于粒子平均碰撞时间。

2.2 边界条件

标准的 DSMC 程序使用的是速度边界条件，即给定出入口处气体速度及数密度，而在微尺度气体流动中，速度和数密度很难在实验中确定，一般可以比较准确测量的量只有压力及温度。Piekos 等 [5] 在入口处使用“通量法”来确定进入流场的粒子速度，其缺点是随机扰动很容易造成计算发散；Liou 等 [6] 提出使用入口截面处各单元速度的统计量作为新粒子的速度分布量，方法简单易行，但收敛速度慢。本文提出采用类似传统 CFD 压力边界的处理方法，即在入口处速度项引入压力信息：

$$(u_{\rm in})_j = u_j + \frac{p_{\rm in} - p_j}{\rho_j a_j} \tag{1}$$

$$(v_{\rm in})_j = v_j \tag{2}$$

$$(w_{\rm in})_j = w_j \tag{3}$$

$$n_{\rm in} = \frac{P_{\rm in}}{kT_{\rm in}} \tag{4}$$

其中，j 是边界单元的坐标。同样的方法应用到出口处，则有：

$$(\rho_{\rm out})_j = \rho_j + \frac{p_{\rm out} - p_j}{(a_j)^2} \tag{5}$$

$$(u_{\rm out})_j = u_j + \frac{p_j - p_{\rm out}}{\rho_j a_j} \tag{6}$$

$$(v_{\rm out})_j = v_j \tag{7}$$

$$(w_{\rm out})_j = w_j \tag{8}$$

$$(T_{\rm out})_j = p_{\rm out}/[(\rho_{\rm out})_j R] \tag{9}$$

$$n_{\rm out} = \rho_{\rm out}/m \tag{10}$$

其中，a_j 是当地声速。公式 (1)~(10) 实现了压力边界条件向标准 DSMC 边界条件的转化。

3 结果及分析

对不同截面形状 (宽高比) 的三维微通道内的气体流动进行了模拟。如图 1 所示，通道长 L，宽 W，高 H。工质为氮气，其气体性质参考文献 [4]。模拟中保持 $L = 5\mu$m 和 $H = 0.2\mu$m 不变，改变 W 以改变通道截面宽高比 $s = W/H$。入口压力为 1.5×10^5 Pa，出口压力为 1.0×10^5 Pa。入口气体温度和壁温都为 300 K。共研究了 4 种不同宽高比的三维通道，同时对比了相同特征尺度的二维通道结果，具体的工况与部分模拟数据参见表 1。三维算例使用了 $50\times20\times10$ 的网格，二维算例使用了 $50\times10(2\times2)$ 均匀矩形网格。时间步长取为 4.739×10^{-11} s。算例均在 Pc550MHz 的机器 UNIX 系统上运行，计算耗时均在 400 个小时以上。

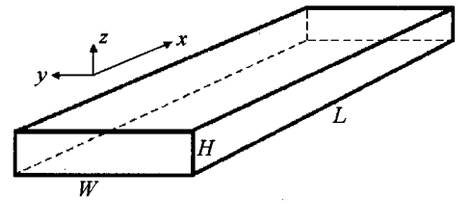

图 1　三维通道示意图

表 1　研究算例

算例	W (μm)	s	总粒子数	总采样数
1	1	5	201356	468060
2	0.5	2.5	202250	499860
3	0.2	1	201913	499860
4	0.1	0.5	201725	494860
5 (2D)	5μm×0.2 μm		37741	1×10^5

图 2 和显示了上 (下) 底面中心线上 (即 xz 中截面的壁面处) 沿流动方向的气体速度 U_s 和温度 T_s 的沿程分布。从图 2 可知，当 $s = 5$ 时，三维气体的滑移速度与二维的结果符合很好，随着 s 的减小滑移速度减小，三维效应逐渐明显，滑移速度逐渐偏离二维结果。

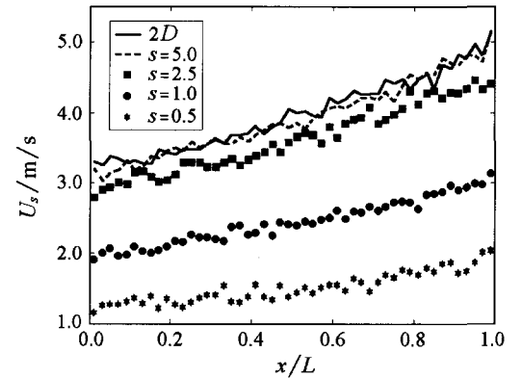

图 2　壁面处气体速度分布

对速度分布作进一步处理，三维通道 xz 中截面的壁面滑移速度和通道中心线速度都分别用二维结果作无量纲处理，其结果如图 3 所示。图 3 为使用二

© 1995-2004 Tsinghua Tongfang Optical Disc Co., Ltd. All rights reserved.

维滑移速度无量纲化的滑移速度沿程分布。图 3 显示了使用二维对应结果无量纲化后的速度不再随位置的变化而改变，而只随通道宽高比的不同而有所不同。此时定义三维与二维气体流动的速度相似因子为

$$\phi_u = \frac{U_{3d}}{U_{2d}} \tag{11}$$

其中，U 可以是通道壁面上的速度或者通道中心处的速度。通过对模拟结果的数据整理，我们提出了以下关系式：

$$\phi_u = 1 - e^{-C \cdot s} \tag{12}$$

其中，s 代表通道截面的几何特性，C 为常数，从本文的算例结果拟和可得 $C = 0.92$ 。图 4 显示了拟和关系式与模拟结果的对比，可看出两者符合很好。

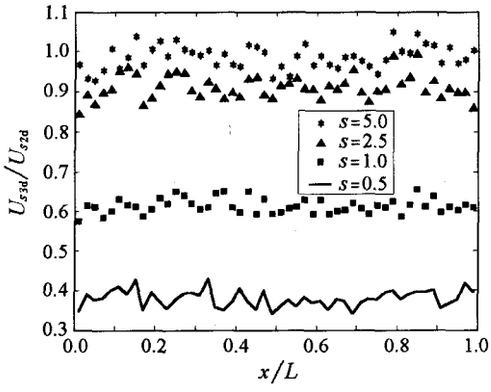

图 3 无量纲化的壁面处气体速度分布

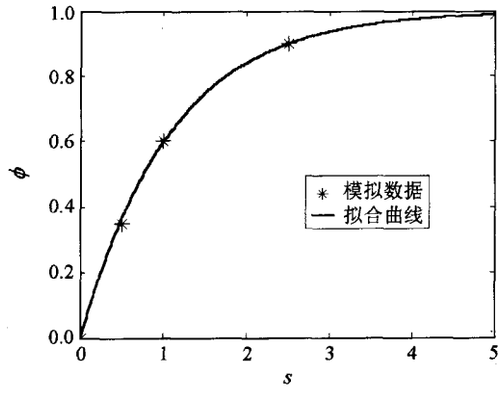

图 4 拟和关系式与模拟结果对比图

本文还研究了三维直通道的流量 - 压力关系，并与滑移区的一阶和二阶理论解 [7] 进行了对比。使用了算例 1 的通道尺寸和网格划分，入口压力选取了从 1.1×10^5 Pa 到 1.5×10^5 Pa 的 5 种边界，出口压力保持 1.0×10^5 Pa 。计算的结果如图 5 所示，DSMC 方法模拟得到的流量 - 压力关系在当前的通道和边界条件下近似成线性关系，在压差很小时，DSMC 结果与滑移理论解有较好的符合，当压力增大时，两者分离。其原因可能在于滑移理论解精确成立的条件为通道的宽高比非常大，即通道在宽度维上作了二维简化处理，而在本文的模拟中，宽高比为一有限值，可以看出明显的三维效应。

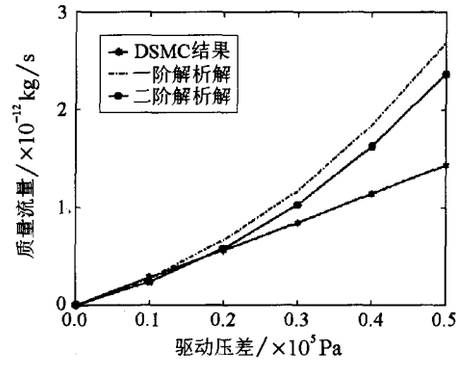

图 5 流量 - 压差关系与滑移理论解对比图

4 结 论

(1) 通道的截面形状 — 宽高比对流动三维效应的影响很大，直接影响气体的壁面滑移速度和最大速度。仅当通道宽高比远大于 1 时，三维流动可以简化为二维流动处理；当通道宽高比小于 5 时，三维效应明显，气体的壁面滑移速度和最大速度明显小于同特征尺度下的二维流动，但二者之间存在与形状因子 s 相关的定量关系。

(2) 在三维效应对速度及其分布影响很小的通道内，三维效应对流量 - 压差关系的影响依然较大。与滑移理论解析解的对比发现，两者在压差很小的时候符合很好，但随着压差的增大而分离，三维效应是分离发生的根本原因。

参 考 文 献

[1] 王沫然，李志信. 热科学及其在 MEMS 中的应用. 仪表技术与传感器. 2002, (7): 1–4

[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(1): 149–159

[3] Karniadakis G E, Beskok A. Micro Flows: Fundamentals and Simulation. New York: Springer, 2002

[4] Bird G A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Oxford: Clarendon Press, 1994

[5] Piekos E S, Breuer K S. Numerical Modeling of Micromechanical Devices Using the Direct Simulation Monte Carlo Method. Journal of Fluids Engineering Transactions of the ASME. 1996, 118(3): 464–469

[6] Liou W W, Fang Y. Implicit Boundary Conditions for Direct Simulation Monte Carlo Method in MEMS Flow Predictions. Computer Modeling in Engineering & Science, 2000, 1(4): 119–128

[7] Arkilic E B. Measurement of the Mass Flow and Tangential Momentum Accommodation Coefficient in Silicon Micromachined Channels: [Ph.D Thesis]. MIT., 1997

© 1995-2004 Tsinghua Tongfang Optical Disc Co., Ltd. All rights reserved.