

直接模拟蒙特卡罗方法下的逆温度抽样算法

贺群武¹, 王秋旺¹, 索晓娜¹, 徐进良²

(1. 西安交通大学动力工程多相流国家重点实验室, 710049, 西安; 2. 中国科学院广州能源研究所, 510640, 广州)

摘要: 从分子动力学出发, 讨论了直接模拟蒙特卡罗方法中分子平均总能量、平均平动能以及边界热流密度的抽样方法. 通过对与边界发生碰撞的分子进行统计平均, 得到了分子反射能量与入射能量以及边界热流密度的关系式. 在此基础上, 通过结合壁面漫反射模型下分子反射速度的抽样方法, 发展了一种从边界热流求得与壁面碰撞分子的平均反射特征温度的逆温度抽样算法. 数值结果表明: 该算法能够由分子反射能量准确求得分子反射特征温度, 进而求得分子反射速度, 从而将边界热流信息带入流场. 该方法为实现壁面处给定热流边界条件下的直接模拟蒙特卡罗方法提供了途径.

关键词: 逆温度抽样算法; 给定热流边界; 直接模拟蒙特卡罗

中图分类号: TK124 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-987X(2006)01-0022-04

Inverse Temperature Sampling under Direct Simulation Monte Carlo Method

He Qunwu¹, Wang Qiuwang¹, Suo Xiaona¹, Xu Jinliang²

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

2. Guangzhou Institute of Energy Conversion, Chinese Academy of Science, Guangzhou 510640, China)

Abstract: Based on the principle of molecular dynamics, a sampling method in Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) method for molecular total and translational energy, and the heat flux vector nearby the wall boundary is proposed. An important relationship among the mean incident energy, reflective energy and the wall boundary heat flux is obtained by statistically averaging the energy values of those molecules colliding with wall. Combining the generating method of molecular reflective thermal velocities according to diffuse reflection model, an algorithm named as Inverse Temperature Sampling (ITS) is developed, which enables to evaluate the molecular reflective characteristic temperature from the molecular incident energy and the boundary heat flux. The numerical results show that the molecular reflective temperature is accurately sampled with this algorithm, thus the information of heat flux at wall boundary is imposed to the flow field. In this way, the constant heat flux boundary condition in DSMC method can be implemented.

Keywords: inverse temperature sampling; constant heat flux boundary; direct simulation Monte Carlo

微对流传热问题广泛地存在于仪器科学、微电子学、生物工程及一些先进的微能量系统中^[1]. 目前, 人们已经普遍认识到微电子机械系统 (MEMS) 中特征尺寸远远低于常规问题, 由于此时气体已不

满足连续介质的假设, N-S 方程也就不再适用^[2], 从而应从分子层次上研究分子本身的运动以统计出其宏观特性. Bird 等人^[3]在 20 世纪 60 年代基于稀薄气体流动数值模拟研究的需要, 提出了一种计算气

收稿日期: 2005-04-08. 作者简介: 贺群武(1979~), 男, 硕士生; 王秋旺(联系人), 男, 教授, 博士生导师. 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(50376050, 50476088).

体流动与传热问题的方法,即直接模拟蒙特卡罗(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有效的工具^[3].

对于 DSMC 方法在微通道流动传热中的模拟,人们开展了广泛的研究,也取得了很大进展^[4-6]. Fan 等人^[7]提出了一种 DSMC-IP 方法,成功地模拟了低速 Couette、Poiseuille 和 Rayleigh 流动;Cai^[8]将该方法发展到二维,计算了二维微通道内气体的流动,其特征流速仅仅为 2 m/s,所得结果与实验结果符合良好,其碰撞模型采用的是简单的二元弹性碰撞,而且基于壁面边界绝热的假设. Pan^[9]调查了 DSMC 方法统计误差的分布特点,发展了 M-DSMC 方法,但其计算仅局限于一维,且没有温度梯度.可见,上述研究均没有考虑通道内的换热特性.然而,作为一种有效的散热方式, MEMS 中气体与壁面一般都存在着温差与换热,微通道中的温差不仅会影响通道中气体的流动与应力,还会带来如黏性加热和热蠕性等效应^[11],因此研究微通道内热特性对 MEMS 的研制、运行均有着十分重要的意义. Fang^[10]研究了气体在直通道及周期性突缩通道内气体的流动换热特点, He^[11]研究了壁面与流体的温差对气体稀薄性及可压缩性的影响,其所采用的壁面热边界条件均为给定温度.在分子与壁面碰撞时,由于温度是确定分子与壁面碰撞后的反射速度、平动能、转动能等参数的重要参量,且在给定壁温的边界条件中温度是以显式的方式给定的,故处理起来相对比较容易.在实际应用中,由于 MEMS 运行时的自身发热,相应壁面处给定热流的边界条件在微通道问题中是普遍存在的,但目前为止尚未见到有关对给定壁面热流边界条件的处理方法的报道,因此在给定壁面热流边界的条件下,研究微通道内稀薄气体的 DSMC 处理方法有着十分重要的意义.

1 逆温度抽样(ITS)算法

1.1 宏观参数的确定

对于大多数工程计算,人们关心的是流体的宏观物理量,而不是每一个分子的状态,所以用 DSMC 方法计算出每一个模拟分子的状态参数后,将用大量模拟分子的状态参数统计出宏观的物理参数.对于任意一个随机变量 η ,如果试验次数 N 足够大,则可以用算术平均值 $\bar{\eta}$ 来近似其数学期望值 $M(\eta)$,即

$$\bar{\eta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \eta_i \approx M(\eta) \quad (1)$$

对单一气体,该体积内气体宏观速度为 c_0 ,即为该体积内所有分子速度的平均值,其大小为

$$c_0 = (u_0^2 + v_0^2 + w_0^2)^{1/2} = (\bar{u}^2 + \bar{v}^2 + \bar{w}^2)^{1/2} \quad (2)$$

式中: u, v, w 为分子绝对运动速度 c 的分量; u_0, v_0, w_0 为流体宏观运动速度 c_0 的分量.设 c' 为分子热运动速度, u', v', w' 为它的 3 个分量,则

$$c' = c - c_0 \quad c_0 = \bar{c} \quad (3)$$

温度 T 、自由度 ζ 与能量 ε 之间的关系为

$$\bar{\varepsilon} = \bar{\varepsilon}_{tr} + \bar{\varepsilon}_{rot} + \bar{\varepsilon}_{vib} = \frac{\zeta}{2} kT \quad (4)$$

$$\bar{\varepsilon}_{tr} = \frac{3}{2} kT_{tr} = \frac{1}{2} m \bar{c}^2 = \frac{1}{2} m (\bar{u}^2 + \bar{v}^2 + \bar{w}^2) \quad (5)$$

该体积内的总温度、流体的宏观温度则按自由度加权平均计算

$$T = \frac{3T_{tr} + \zeta_{rot} T_{rot} + \zeta_{vib} T_{vib}}{3 + \zeta_{rot} + \zeta_{vib}} \quad (6)$$

式中: T_{tr} 为平动温度,也叫迁移温度; T_{rot} 为转动温度; T_{vib} 为振动温度; 3 表示迁移自由度为 3 个,因为在 DSMC 方法中,每个模拟分子均赋予 3 个速度分量 u, v, w ; ζ_{rot}, ζ_{vib} 分别表示分子的转动与振动自由度.对于单原子气体分子,计算中只需考虑其平动能,此时碰撞为弹性的,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,其碰撞为非弹性的.由于气体的振动特征温度很高(如氮气分子的振动特征温度为 3 337 K),大多数工况的温度不足以激发工质分子的振动能量,所以通常不考虑分子的振动^[3].

1.2 物面气动特性的确定

当气体分子与固体壁面碰撞时,碰撞的充分度和碰撞能量均与壁面性质有关,反射分子的特征温度可按下式进行调整^[2]

$$\alpha = \frac{E_i - E_r}{E_i - E_w} \quad (7)$$

式中: α 称为物面热协调系数, $\alpha \in [0, 1]$; E_i, E_r 分别表示入射分子与从物面反射回的气体流场的分子所具有的平均能量; E_w 表示当反射回的气体流场中分子的温度与实际物面温度 T_w 相等时气体分子所具有的平均能量.两种极限情况即: $\alpha = 1$,称为完全热协调,此时 $E_r = E_w$,也就是 $T_r = T_w$,反射分子完全吸收了壁面的温度; $\alpha = 0$,称为完全不协调,此时 $E_r = E_i$,也就是 $T_r = T_i$,分子在反射前后温度不变.与此对应,根据与壁面碰撞后分子的反射速度不同,反射模型可以分为镜面反射模型和漫反射模型.对于镜面反射,分子与固壁碰撞后其平行于固壁的切

向速度分量保持不变,而法向分量的大小不变,方向与碰撞前相反.镜面反射要求壁面在功能上要相当于几何对称面,该模型还可以推广到气体分子通过作为几何对称线(面)的流体边界的计算.对于漫反射模型,气体分子与固壁碰撞后的速度与碰撞前的速度完全无关,反射分子作为一个整体,在速度上满足麦克斯韦速度分布或局域平衡态速度分布^[2,3]

$$f(c) = \left(\frac{m}{2\pi k T_r} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mc^2}{2kT_r}} \quad (8)$$

式中: c 为分子的热运动速度; T_r 为反射温度.对常温下气体进行试验发现,当碰撞表面粗糙且入射分子很分散时,反射过程接近于漫反射,而且是完全热协调的.目前,大多数的分析和数值计算都基于漫反射且完全热协调的假设,该假设对于大部分气体的流动均适用.根据式(8),很容易抽样得到反射后分子的热运动速度 (u_r', v_r', w_r') .不失一般性,设壁面水平放置,位置为 $y = y_w$,分子从初始位置 (x_0, y_0) 运动并与壁面碰撞,假设 $y_0 > y_w$,则反射速度分别为^[2]

$$v_r' = r_1 V_{mp}; \quad u_r' = r_2 \cos(\theta) V_{mp}; \quad w_r' = r_2 \sin(\theta) V_{mp} \quad (9)$$

式中: $r_1 = (-\ln R_1^*)^{1/2}$; $r_2 = (-\ln R_2^*)^{1/2}$; $\theta = 2\pi R_3^*$, R^* 为0~1之间的随机数; V_{mp} 为平衡气体的最概然速率,取为

$$V_{mp} = (2kT_r/m)^{1/2} \quad (10)$$

1.3 反射特征温度

根据分子动力学原理,表面热流密度 q_w 是单位时间单位面积上入射分子的总能量与反射分子的总能量之差,即

$$q_w = -\frac{\sum E_i}{\Delta t A} - \frac{\sum E_r}{\Delta t A} \quad (11)$$

式中:下标 i, r 分别代表入射分子和反射分子; E 表示分子的总能量,包括平动、转动、振动3种能量; $\Delta t, A$ 分别为作用时间与作用面积.对于壁面边界元 M ,设 Δt 内共有 N_M 个分子与该壁面元碰撞,对于定常流动,当流动进入稳态后, N_M 趋于恒定值,则式(11)可写成

$$q_w = \frac{\sum_{i=1}^{N_M} \bar{\epsilon}_{i,j} - \sum_{r=1}^{N_M} \bar{\epsilon}_{r,j}}{\Delta t A} = \frac{N_M (\bar{\epsilon}_i - \bar{\epsilon}_r)}{\Delta t A} \quad (12)$$

这里 $\bar{\epsilon}_i, \bar{\epsilon}_r$ 是 $\epsilon_{i,j}$ 和 $\epsilon_{r,j}$ 的平均值,即碰撞分子的平均入射、反射能量.整理式(12),得到

$$\bar{\epsilon}_r = \bar{\epsilon}_i - \frac{q_w \Delta t A}{N_M} \quad (13)$$

由此可见,从平均意义上说,分子反射能量由入射能

量和从壁面处获得的能量两部分组成.单原子气体分子没有转动自由度,仅有平动自由度,而常温下的气体流动又可以不考虑分子的振动,则分子总的反射能量仅有平动能,即

$$\bar{\epsilon}_r = \bar{\epsilon}_{tr} \quad (14)$$

联合式(5)、(9)、(10)可得

$$\bar{\epsilon}_{tr} = \frac{1}{2} m (\overline{u^2} + \overline{v^2} + \overline{w^2}) = \frac{1}{2} m (\overline{r_1^2} + \overline{r_2^2}) V_{mp}^2 = \frac{k T_r (\overline{r_1^2} + \overline{r_2^2})}{2} \quad (15)$$

由式(13)~(15)可得

$$\bar{\epsilon}_r = \bar{\epsilon}_{tr} = k T_r (\overline{r_1^2} + \overline{r_2^2}) = \bar{\epsilon}_i - \frac{q_w \Delta t A}{N_M} \quad (16)$$

整理得

$$T_r = \frac{\bar{\epsilon}_i}{k (\overline{r_1^2} + \overline{r_2^2})} - \frac{(q_w \Delta t A) / N_M}{k (\overline{r_1^2} + \overline{r_2^2})} \quad (17)$$

式(17)即为分子的平均反射特征温度,代入式(9)可得分子反射后的热运动速度.由式(17)可知,壁面处的热流通过影响分子的反射温度来影响分子的反射速度,从而对整个流场及温度场产生作用,而壁面处的热流也由此加入到流场中.

2 模型考核及讨论

由于目前尚无相关试验数据可供参考,本文将通过与预知的壁面温度相比较来考核 ITS 算法的有效性.考虑图1所示的边界元,设有 N 个单原子气体分子与温度为 T_w 的边界发生碰撞,分子入射特征温度 $T_i = T_w$.假定壁面完全热协调,则分子反射特征温度 $T_r = T_w$.若碰撞为漫反射,可以仅考虑分子的反射速度 (u_r', v_r', w_r') .设壁面处绝热,即式(17)中 $q_w = 0$,考核步骤如下:

- (1) 由式(9)、(10),计算得到各个分子的反射速度 (u_r', v_r', w_r') ;
- (2) 由式(16),求得 N 个分子的平均反射能量 $\bar{\epsilon}_r$;
- (3) 由式(17),求得反射后分子的宏观抽样温度 T_r ;
- (4) 将 T_r 与 T_i 比较.

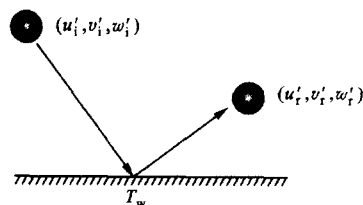


图1 壁面边界元示意图

设 T_w 分别为 273、300、350、400、500 K, 计算得到 T_r , 结果如图 2 所示. 可见, 在各个入射温度下, 经过 1 000 次抽样后的 T_r 均与期望值 T_i 符合良好, 而且不会随着抽样次数的增加而变化. 因此, ITS 算法能够实现从分子动能到特征温度的抽样.

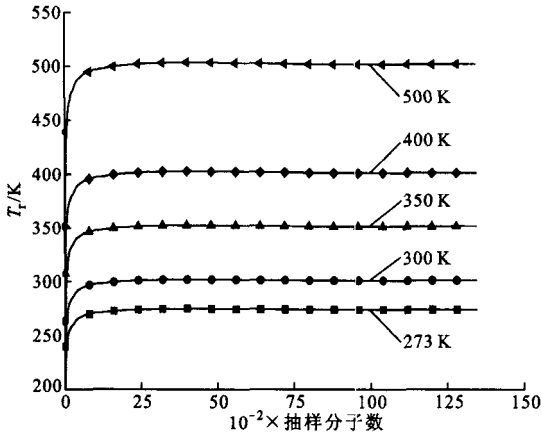


图 2 ITS 方法所得温度

DSMC 方法在本质上与其他通过求解 N-S 方程来模拟流动传热问题的方法不同, 它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. 在分子运动过程中, 分子通过与壁面碰撞以及分子之间的相互碰撞来改变运动轨迹, 进而传递能量. 分子在其时间步长内沿直线运动, 当其步进轨迹与边界交汇时分子就与壁面发生碰撞, 根据不同的分子-壁面碰撞模型可获得分子反射速度及运动方向, 同时也完成了分子与壁面的能量交换处理. 当壁面边界为给定热流边界条件时, 此时壁面处温度为未知. 依据上述 ITS 算法, 先由式 (16) 求得反射分子的平均能量, 进而可求得分子的反射特征温度. 考虑边界元 M , 将所有与边界元 M 碰撞的分子的反射特征温度加权平均作为边界元 M 的壁面温度, 然后由更新后的壁面温度求得分子反射速度及能量. 由此, 边界处的信息通过与边界发生碰撞的分子传入到整个流场, 并对流场产生作用, 壁面处给定热流边界条件的 DSMC 方法从而得以实施.

3 结 论

本文由分子动力学原理出发, 根据气体宏观温度、能量的抽样以及壁面边界热流密度的计算方法, 得到了气体平均反射能量与其平均入射能量和从边

界吸收能量的关系. 在此基础上, 发展了 ITS 算法, 该方法能准确地由壁面处气体分子的反射能量抽样得到气体的反射特征温度, 它与 DSMC 方法的结合为在 DSMC 方法下处理壁面给定热流边界条件提供了可行之路.

参考文献:

- [1] 刘 静. 微米/纳米尺度传热学[M]. 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[M]. 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 [M]. Oxford: Clarendon Press, 1994.
- [4] Nance R P, Hash D B, Hassan H A. Role of boundary conditions in Monte Carlo simulation of microelectromechanical systems [J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 1998, 12(3): 447-449.
- [5] Oran E S, Oh C K, Cybyk B Z. Direct simulation Monte Carlo: recent advances and applications [J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 1998, 30(1): 403-441.
- [6] Bird G A. Recent advances and current challenges for DSMC [J]. Computers & Mathematics with Applications, 1998, 35(1): 1-14.
- [7] Fan J, Shen C. Statistical simulation of low-speed rarefied gas flows [J]. Journal of Computational Physics, 2001, 167(1): 393-412.
- [8] Cai C P, Boyd I D, Fan J, et al. Direct simulation methods for low-speed microchannel flows [J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 2000, 14(3): 368-378.
- [9] Pan L S, Liu G R, Khoo B C, et al. A modified direct simulation Monte Carlo method for low-speed microflows [J]. Journal of Micromechanics and Microengineering, 2000, 10(1): 21-27.
- [10] Fang Y, Liou W W. Computations of the flow and heat transfer in microdevices using DSMC with implicit boundary conditions [J]. Journal of Heat Transfer, 2002, 24(2): 338-345.
- [11] He Q W, Wang Q W, Wang X, et al. Computational investigation of low-speed gas flow and heat transfer in micro-channel using DSMC with pressure boundary condition [A]. Advanced Computational Method in Heat Transfer: [C]. Southampton: WIT Press, 2004. 463-469.

(编辑 荆树蓉)