

行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告

「分子動力學模擬法其在微熱流之應用」

計畫編號：NSC 89-2212-E-002-037

執行期限：88年8月1日至89年7月31日

主持人：楊照彥 台灣大學應用力學研究所

一、中文摘要

本文報告本計畫今年完成的工作(1)分子動力學及電腦模擬方法—蒙地卡羅直接模擬法—“DSMC”(2)微通道之熱流模擬(3)微噴嘴之熱流模擬。

關鍵詞：分子動力、DSMC、微通道、微噴嘴

Abstract

This report describes the main objectives accomplished in this project: (1) DSMC study of microchannel flows; (2) DSMC study of micronozzle flows; (3) A wide range of Knudsen numbers of both microflows are covered.

Keywords: Molecular Dynamics, DSMC, Boltzmann Equation, Microchannel, Micronozzle.

二、緣由與目的

我國近年來 IC 產業蓬勃發展，設計及製造積體電路的技術已成熟，藉由此法衍生出微加工技術，使微機械系統得以研究發展，此即所知的一微機電系統(MEMS)。

微機電系統中的一般機械性質研究已有相當的研究成果，但對於流體在微尺寸下的行為並不如前者有如此多之研究成果，這也是由於微流系統在實驗上無法獲得與一般常尺寸之流體系統下直接又明顯的結果，故研究即朝向電腦模擬的方向，以獲得微流系統的相關參數。

由於微流系統的尺寸等級約在 10^{-6} 公尺或更小，視流體為連續體的觀念將不再適用，必須視流體分子為離散個體，當尺寸等級更小至 10^{-9} 公尺時，分子動力學模擬法(含古典動力及量子動力學)就需考慮。

三、統御方程式與模擬法

在連體模型中，常以速度、溫度、壓力等巨觀變量去描述流場，而分子模型所處理的變量則為分子的分佈函數(distribution function)。廣義而言，每一個分子之間都可能相互影響，因此必須藉助 N 粒子分佈函數(N particle distribution function)去記錄每一個分子的分佈。但是這樣的方法在實際上會因為分子數目過於龐大而無法實行，因此利用稀薄氣體流場的假設對問題作簡化。符合稀薄氣體的條件為：

$$\frac{\delta}{d} \gg 1 \quad (3-1)$$

其中 d 為分子的直徑，而 δ 則是分子間的平均距離。

在這樣的情形下，我們可以認為分子間的撞碰是以二元撞碰(binary collision)為主，也就是說，每次只有兩個分子參與撞碰，所以可以只考慮二粒子分佈函數。再進一步假設分子在相空間(phase space, 由速度及位置所組成的六度空間)中的分佈不受其他分子的影響：二粒子分佈函數可以由兩個分子的單粒子分佈函數的相乘而求得，這樣的假設稱為分子混沌(molecular chaos)。

通過以上的假設，得出單粒子分佈函數的統御方程式：波茲曼方程式在單一稀薄氣體(simple dilute gas)的形式

$$\frac{\partial}{\partial t}(nf) + \vec{c} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}}(nf) + \vec{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{c}}(nf) \quad (3-2)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} n^2 (f^* f_1^* - ff_1) c_1 \, d\Omega \, dc_1$$

其中

$\vec{r}, \vec{c}, \vec{F}$: 位置、速度及外力向量

f: 速度分佈函數

- *: 碰撞後的狀態
- l: 表相碰撞的另一分子
- c_r : 碰撞對的相對速度
- σ : 碰撞截面積(collision cross section)
- $d\Omega$: 碰撞表面的固體角(solid angle)

我們嘗試將波茲曼方程式分解(decouple)成碰撞與自由運動兩部份。將(2-4)式寫成運算子(operator)的形式：

$$\frac{\partial F}{\partial t} + DF = JF \quad (3-3)$$

其中 $F=nf$ 而運算子 D 、 J 分別為

$$D = \vec{c} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \vec{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{c}} \quad (3-4)$$

$$JF = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{0}^{4\pi} (F^* F_l^* - FF_l) c_r \sigma d\Omega dc_l \quad (3-5)$$

在計算的過程中， $t=\Delta t$ 時間的速度分佈函數 $f(\Delta t)$ 是由起始條件 $f(0)$ 求得，利用泰勒展開(Taylor expansion) 得

$$F(\vec{c}, \vec{x}, \Delta t) = F(\vec{c}, \vec{x}, 0) + \Delta t (\partial F / \partial t)_{t=0} + O(\Delta t^2) \quad (3-6)$$

代入(3-1)式並忽略 $(\Delta t)^2$ 以上的高次項，得

$$F(\vec{c}, \vec{x}, \Delta t) = (1 - \Delta t D + \Delta t J) F(\vec{c}, \vec{x}, 0) \quad (3-7)$$

$$\Rightarrow F(\vec{c}, \vec{x}, \Delta t) = (1 - \Delta t D)(1 + \Delta t J) F(\vec{c}, \vec{x}, 0) + O(\Delta t^2) \quad (3-8)$$

是故，我們可令：

$$F^*(\vec{c}, \vec{x}) = (1 + \Delta t J) F(\vec{c}, \vec{x}, 0) \quad (3-9)$$

$$F(\vec{c}, \vec{x}, \Delta t) = (1 - \Delta t D) F^*(\vec{c}, \vec{x}) \quad (3-10)$$

因此，

$$F(\vec{c}, \vec{x} + \vec{c}\Delta t, \Delta t) = F^*(\vec{c}, \vec{x}) \quad (3-11)$$

在(3-9)中，等號兩邊成上一個定體積 dx 來看，在 \vec{x} 位置上， dx 內的分子之速度分佈是 Δt 時間內，分子碰撞後的結果。而在(3-11)中，分子間並未發生碰撞，僅僅是由 \vec{x} 位置移動到 $\vec{x} + \vec{c}\Delta t$ 位置，可是因為 Δt 非常小，以至於 $\vec{c}\Delta t$ 也很小，等於位置幾乎沒什麼改變。

由這樣的概念，將本來是同時發生的碰撞與自由運動分開處理。

這樣分解的程序必須符合以下的條件才能近似真實的情形。

1. $\Delta t |JF| \ll F, F \propto n, |JF| \propto n\bar{c} / \lambda$
2. $\Delta t |DF| \ll F, |DF| \propto \bar{c} |\partial n / \partial x|$

其中 \bar{c} 為分子的平均速度

為了滿足 1、2 的條件，我們令：

I. $\Delta t \ll \frac{\lambda}{\bar{c}}$ 其中， $\frac{\bar{c}}{\lambda} = \tau$ (τ 是平均碰撞頻率)

II. $\bar{c}\Delta t \ll L$ 其中， L 為流場之特徵尺寸，我們可以看成 $\bar{c}_x \Delta t \leq \Delta x$

因此，當利用 DSMC 方法來求解波茲曼方程式時， Δt 及 Δx 的設定必須符合 I、II 的條件。

四、計畫成果

(A) 微通道之熱流模擬

通道幾何尺寸為高 $1 \mu\text{m}$ ，長 $5000 \mu\text{m}$ ，並以 Argon 作為模擬用流體，入口溫度與壁面溫度均為 300K，結果參考圖 1。

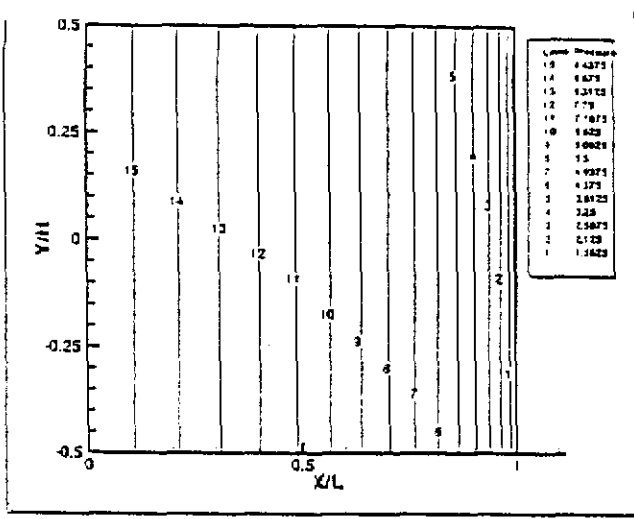
(B) 微噴嘴之熱流模擬

噴嘴幾何尺寸為喉部高 $32 \mu\text{m}$ ，出口高 $148 \mu\text{m}$ ，長 $216 \mu\text{m}$ ，並以 Argon 作為模擬用流體，入口溫度為 300K，結果參考圖 2。

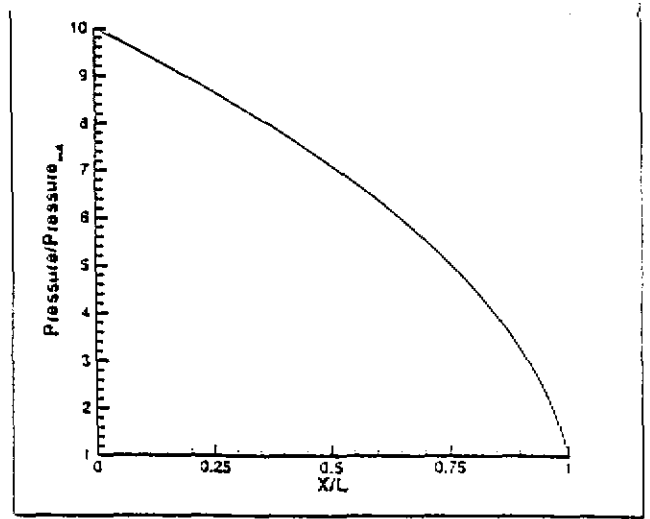
以上兩算例包括相當廣泛之流域：黏性流、滑動流、轉移流及自由分子流。

五、參考文獻

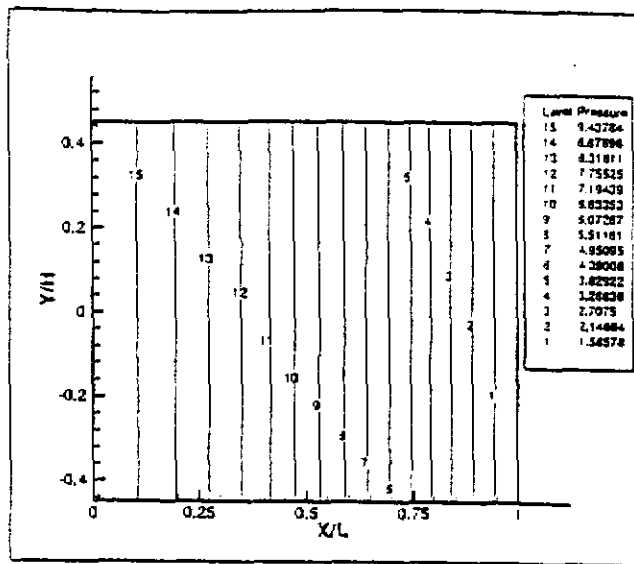
- [1] G. A. Bird, Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows, 1994, Clarendon Press, Oxford, UK.
- [2] J.M. Haile, Molecular Dynamics Simulation, Wiley Interscience, NY, 1992
- [3] W. Greiner, N. Ludwig and H. Stöcker, Thermodynamics and Statistical Mechanics, Springer, 1995
- [4] E. S. Oran, C. K. Oh, and B. Z. Cybyk, "Direct Simulation Monte Carlo: Recent Advances and Applications", Annu. Rev. Fluid Mech. 1998, 30:403-441
- [5] K. Naibu, "Stochastic Solution Method of the Boltzmann Equation II Simple Gas, Gas Mixture, Diatomic Gas, Reactive Gas, and Plasma", The Report of the Institute of Fluid Science, Tohoku University, vol. 8, 1996
- [6] C.M. Ho, Y.C. Tai, "Micro-Electro-Mechanical System (MEMS) and Fluid Flows" Annu. Rev. Fluid Mech. 30:579-612, 1997
- [7] E. S. Piekos, and K. S. Breuer, "Numerical Modeling of Micro-mechanical Device Using the Direct Simulation Monte Carlo Method" ASME, Journal of Fluid Engineering, vol. 118 pp.464-469, 1996



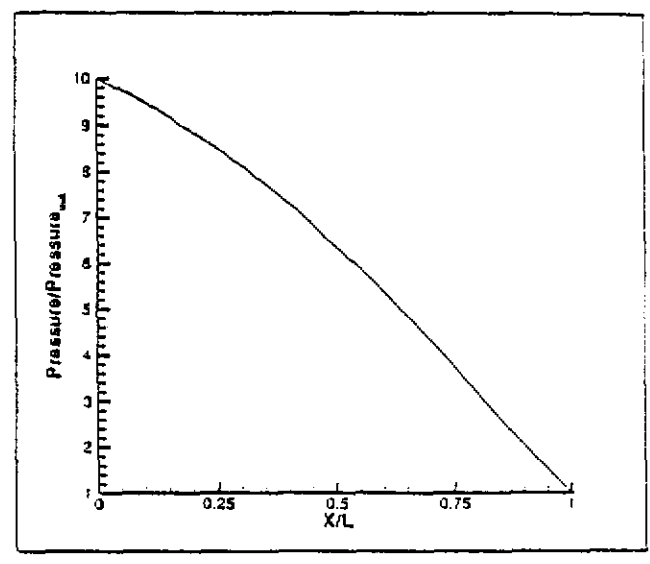
連續流的算例，流場中無因次壓力的分佈



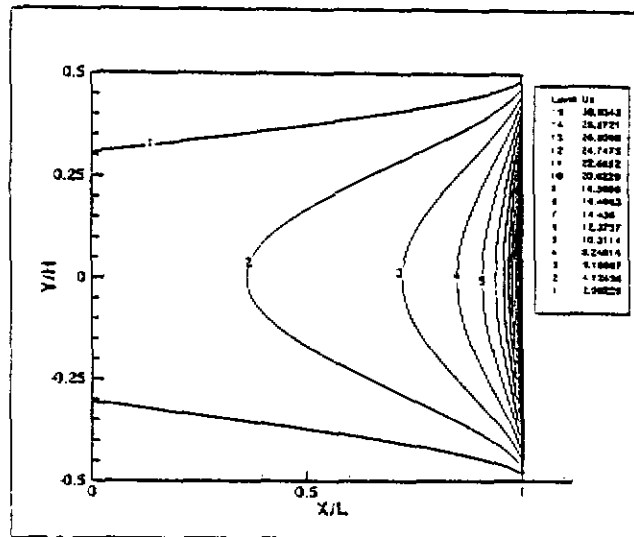
連續流的算例，無因次壓力隨著 X/L 的變化



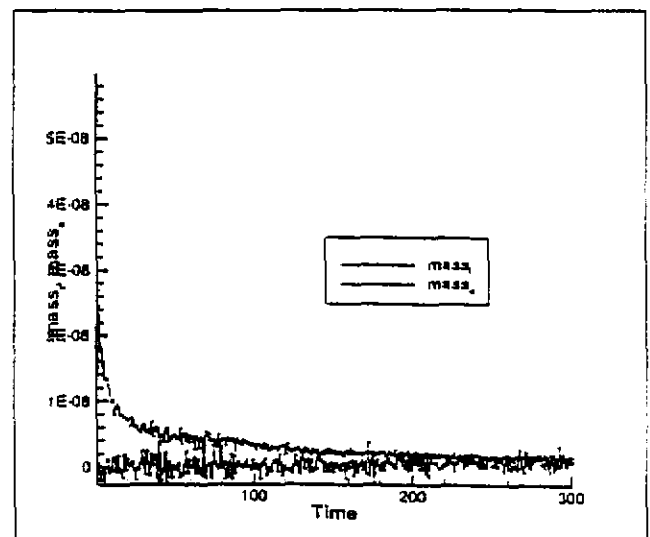
自由分子流的算例，流場中無因次壓力的分佈



自由分子流的算例，無因次壓力隨著 X/L 的變化



連續流的算例，流場中無因次流向速度的分佈



自由分子流的算例，出入口之質量流率隨著時間的變化

圖1、微通道入口處 $Kn < 0.01$ 和 $Kn > 5$ 之壓力分佈與質量流率隨時間變化。

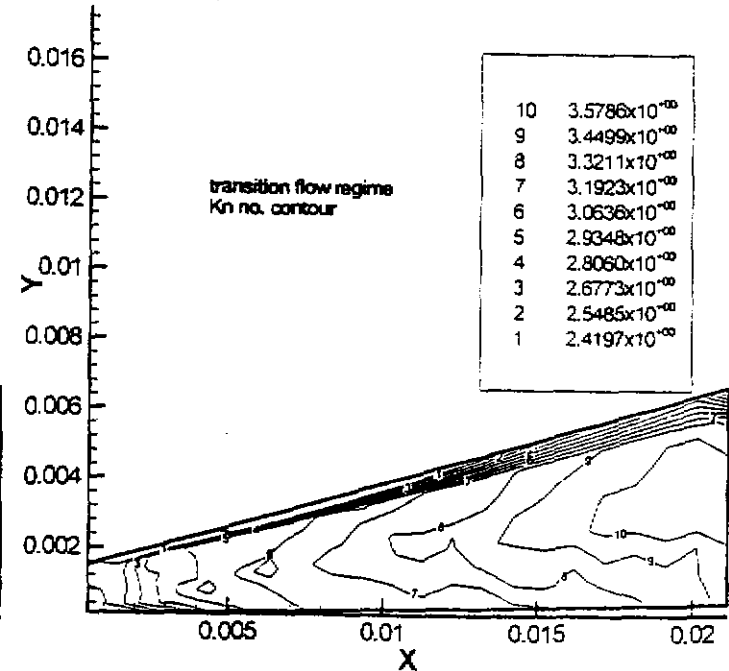
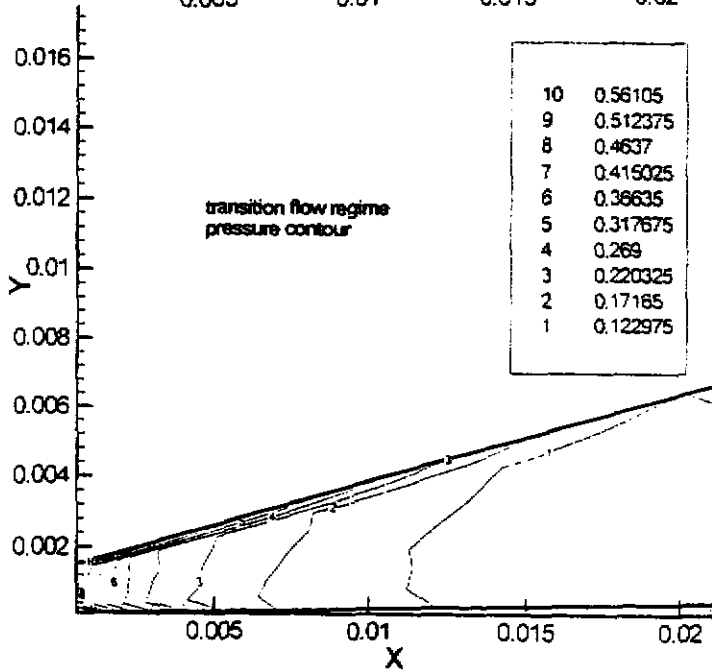
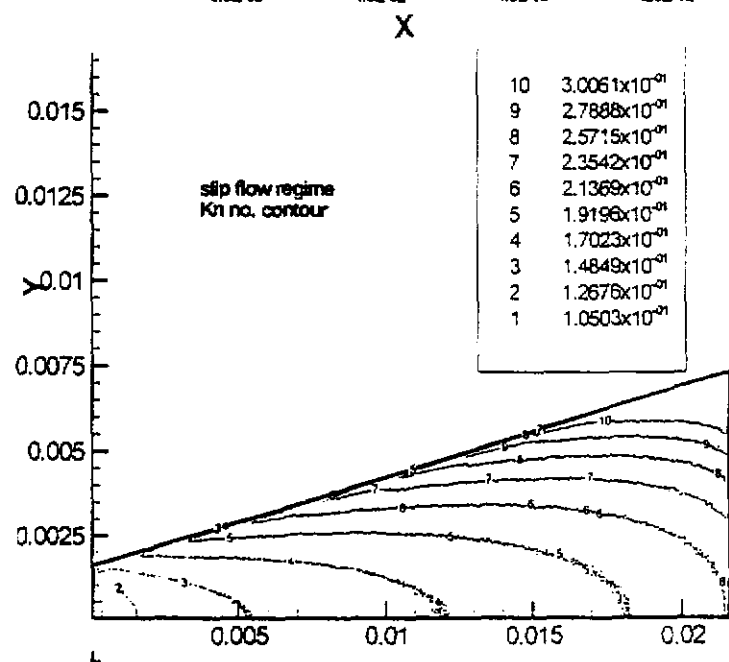
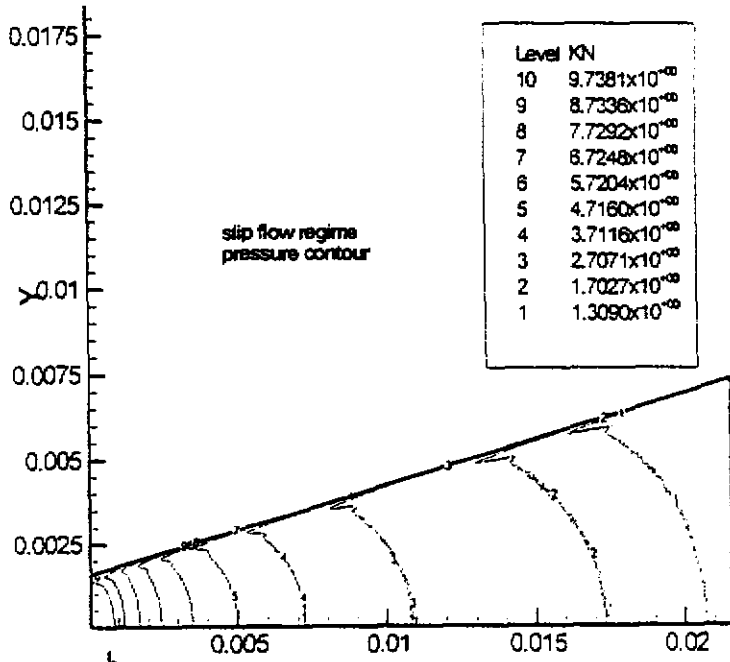
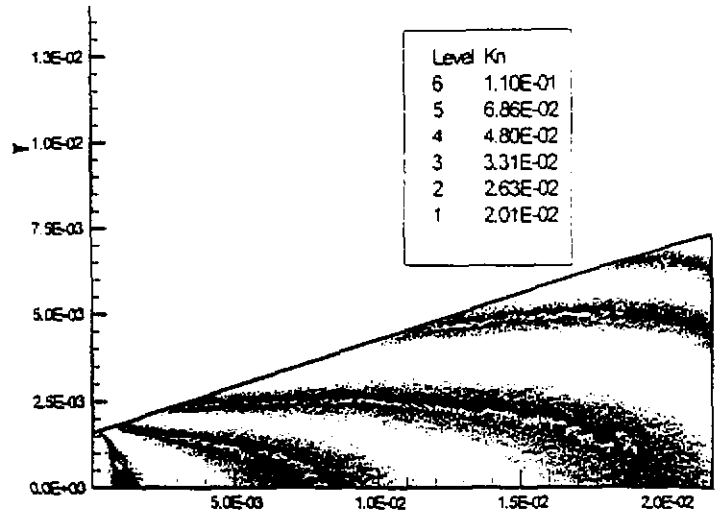
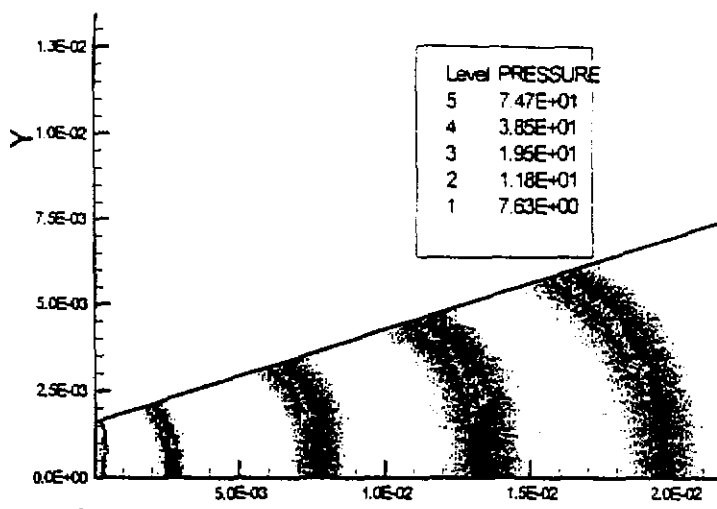


圖 2、微噴嘴入口處 $Kn=0.01, 0.05$ 和 1 之壓力分布與流場 Kn 數分布。