

9. S. Naris, D. Valougeorgis, D. Kalempa, F. Sharipov, Gaseous mixture flow between two parallel plates in the whole range of the gas rarefaction, *Phys. A Stat. Mech. Its Appl.* 336 (2004) 294–318. doi:10.1016/j.physa.2003.12.047.
10. S. Kosuge, S. Takata, Database for flows of binary gas mixtures through a plane microchannel, *Eur. J. Mech. B/Fluids.* 27 (2008) 444–465. doi:10.1016/j.euromechflu.2007.08.002.
11. M. Matsumoto, S. Nakaye, H. Sugimoto, Gas separation by the molecular exchange flow through micropores of the membrane, in: *AIP Conf. Proc.*, 2016: p. 80011. doi:10.1063/1.4967604.
12. S. Nakaye, H. Sugimoto, N.K. Gupta, Y.B. Gianchandani, Thermally enhanced membrane gas separation, *Eur. J. Mech. B/Fluids.* 49 (2015) 36–49. doi:10.1016/j.euromechflu.2014.07.004.
13. H. Sugimoto, T. Abe, Experiment on the Gas Separation Effect of the Pump Driven by the Thermal Edge Flow, in: *AIP Conf. Proc.*, AIP, 2008: pp. 1123–1128. doi:10.1063/1.3076450.
14. Якунчиков А.Н., Метод событийного молекулярно-динамического моделирования для изучения течения газа в микроэлектромеханических системах, in: *Современные Проблемы Аэрогидродинамики Тезисы Докладов XVIII Всероссийской Конференции, Посвященной 60-Летию Российского Национального Комитета По Теоретической И Прикладной Механике И 125-Летию Со Дня Рождения Академика АН СССР Н.И. Мухоморова*, 2016.
15. Якунчиков А.Н., Метод событийного молекулярно-динамического моделирования течений разреженного газа, in: *ЛОМОНОСОВСКИЕ ЧТЕНИЯ Научная Конференция Секция Механики 17–26 Апреля 2017 Года Тезисы Докладов, Серия Секция Механики. 17-26 Апреля 2017*, Издательство МГУ, 2017.

Моделирование течения разреженного газа в устройствах с быстро осциллирующими элементами

В.В. Косьянчук, А.Н. Якунчиков

Москва, Механико-математический ф-т МГУ им. М.В.Ломоносова;

Москва, Институт механики МГУ им. М.В.Ломоносова;

Москва, Институт машиноведения им. А.А.БлагонравоваРАН

E-mail: vasilliy.kosyanchuk@gmail.com

В данной работе проводилось численное исследование свободномолекулярного ($Kn > 10$) течения газов в двух устройствах с быстро осциллирующей границей: (1) течение в прямом микроканале с рядом осциллирующих перегородок; (2) течение в микроканале, стенки которого вынужденно изгибаются по волновому закону. Расчеты проводились с помощью упрощенной бесстолкновительной версии метода событийного молекулярно-динамического моделирования (EDMD). Было показано, что высокочастотные колебания оказывают существенное влияние на движение газа, и это влияние зависит от характерной тепловой скорости молекул. Показано, что таким образом, это влияние будет различным для газов с разной молекулярной массой, что приводит к эффекту разделения смеси.

Modeling of rarefied gas flow in devices with high-frequency oscillating elements. V.V.Kosyanchuk, A.N. Yakunchikov. *This paper presents a numerical study of a free-molecular ($Kn > 10$) gas flow in two devices with high-frequency oscillating boundary: (1) flow in plane channel with a series of oscillating barriers, (2) flow in a channel with wall performing forced harmonic motion. All calculations are performed using simplified collision-free version of Event-Driven Molecular Dynamics method (EDMD). It is shown that high-frequency oscillations have a significant influence on the gas flow, and this influence depends on molecules characteristic thermal speed. Thus, it is shown, that this influence will be different for gases with different molecular masses, which leads to gas separation effect.*

Введение. Развитие современной микроэлектроники и микротехники привело к появлению множества новых приложений микроэлектромеханических систем (МЭМС). Отдельным

подклассом всех МЭМС можно выделить микроустройства с подвижными частями, которые нашли приложения в различных областях микрофлюидики [1-3]. Относительно недавно появились работы, посвященные использованию микроустройств с применением поверхностных акустических волн (ПАВ) для разделения смесей твердых микрочастиц [4-6]. Вместе с тем, упоминания об использовании МЭМС с подвижными частями применительно к газам более редки.

Авторами данной работы был впервые открыт ряд новых эффектов, реализующихся при свободномолекулярном течении газа в микроструктурах с подвижными элементами [7-10]. Основная идея заключается в том, что при свободномолекулярном течении единственным фактором, влияющим на движение газа в канале, являются количество и характер соударений с поверхностью. Например, отмечено, что при движении в прямом неподвижном канале и диффузном законе отражения молекул на стенках вероятность того, что молекула пролетит через канал, экспоненциально снижается с увеличением количества столкновений. Таким образом, при движении в микроструктурах с подвижными элементами вероятность прохождения молекул газа через канал (и, соответственно, поток газа) существенно изменяется, когда соотношение характерной скорости колебаний в микроструктуре сопоставимо с тепловой скоростью молекул.

В данной работе изучается свободномолекулярное течение газа в двух устройствах: микроканале с рядом осциллирующих перегородок, и канале, стенки которого движутся по волновому закону. Показано, что можно управлять проводимостью канала для того или иного газа за счет вынужденных колебаний элементов границы. Дано объяснение, каким образом данный эффект можно использовать для разделения газовых смесей

Постановки задач. *Первая задача* – течение в плоском канале диаметра D с рядом колеблющихся затворов (рис. 1). Затворы расположены на расстоянии L друг от друга, и колеблются с частотой ω . Начальные фазы движения затворов выбираются таким образом, чтобы движение нижних точек затворов представляло собой бегущую “псевдоволну” длины λ . Характерной волновой скоростью k при таком движении считается произведение $\lambda\omega$.

Вторая задача – течение газа в изгибающемся канале (рис. 2), имеющем длину L и толщину D в неподвижном состоянии (т.е. при отсутствии колебаний, когда стенки канала прямые). Стенки канала изгибаются по волновому закону с амплитудой A , длиной волны λ и волновой скоростью k :

$$y_{\pm} = y_{0,\pm} + A \sin \left(2\pi \frac{x - kt}{\lambda} + \psi \right), \quad y_{0,+} - y_{0,-} = D$$

индекс \pm соответствует верхней и нижней границе.

Взаимодействие молекул газа с поверхностью канала описывается ядром рассеяния Максвелла с полной аккомодацией энергии и импульса. Это означает, что молекула при соударении приходит в тепловое равновесие со стенкой, и ее скорость после отражения распределена согласно равновесной максвелловской функции, соответствующей температуре стенки. Задача исследовалась в изотермической постановке – температура стенок и газа на входе в канал равны и не меняются со временем. Течение молекул газа в канале предполагалось свободномолекулярным (соударениями между молекулами пренебрегается), молекулы моделировались как материальные точки, внутренние степени свободы не учитывались, влияние внешних массовых сил не учитывалось.

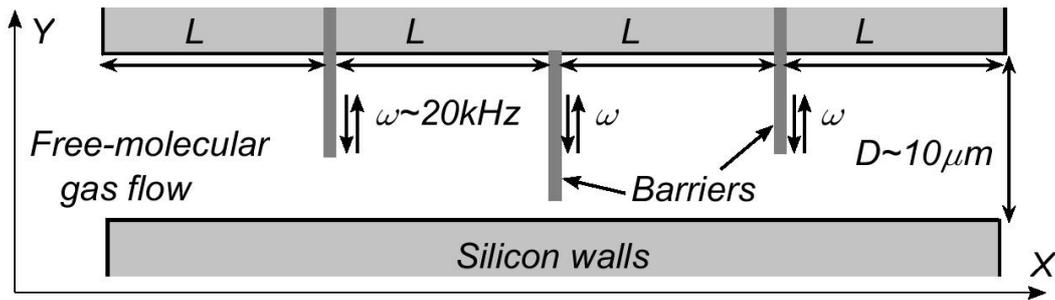


Рис. 1. Геометрия первой задачи. Канал с рядом осциллирующих перегородок (барьеров).

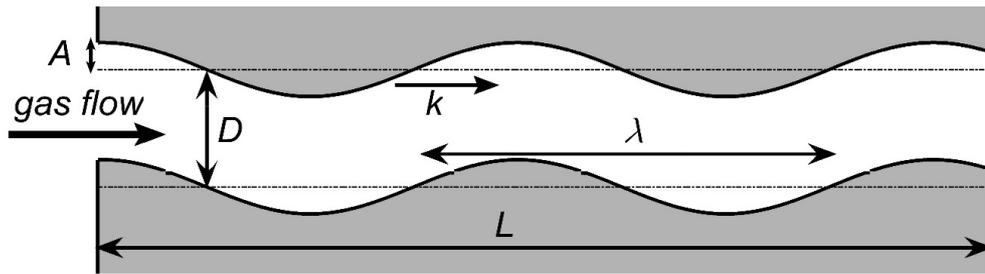


Рис. 2. Геометрия второй задачи. Канал с вынужденно изгибающимися по волновому закону стенками.

Метод решения. Алгоритм расчета данных задач подробно описан в работах авторов [7-9]. Предположение о свободномолекулярном течении дает возможность не учитывать столкновения молекул газа внутри канала и рассчитывать траектории молекул независимо друг от друга. Это позволяет существенно упростить алгоритм, который можно рассматривать как упрощенную версию метода событийного молекулярно-динамического моделирования (EDMD [11]) или прямого статистического моделирования Монте-Карло (DSMC).

Для каждой молекулы расчет состоял из трех этапов. Сначала на входном сечении создавалась молекула в соответствии с заданными распределениями координат и скорости. Потом рассчитывалась точка столкновения с каналом. После столкновения по ядру рассеяния рассчитывалась скорость после отражения, и находилась новая точка столкновения. Процесс столкновения и отражения повторялся до тех пор, пока молекула не вылетит из канала.

В результате расчета траекторий большого количества ($N = 10^7$) молекул получалась вероятность прохождения канала P – отношение кол-ва молекул пролетевших канал, к общему числу созданных на входном сечении молекул, и получались зависимости $P(k/c)$, где k – характерная скорость колебаний элементов устройства, $c = \sqrt{2k_B T/m}$ – характерная тепловая скорость (T – температура, k_B – константа Больцмана, m – масса молекулы). Т.к. в свободномолекулярном режиме поток газа J прямо пропорционален величине P , то для удобства полученные результаты будут представлены как графики нормированного потока $J(k/c)/J_0 \equiv P(k/c)/P_0$. Здесь P_0, J_0 – вероятность прохождения и поток через прямой неподвижный канал.

Результаты. Стоит отметить, что в свободномолекулярном режиме газы с разной молекулярной массой будут разделяться и без внешних воздействий, за счет разницы характерных тепловых скоростей. Этот эффект называется Кнудсеновской диффузией, а коэффициент разделения для пары газов A, B равен корню из обратного отношения масс молекул этих газов:

$$\alpha = \frac{J_A}{J_B} = \frac{c_A}{c_B} = \sqrt{\frac{m_B}{m_A}}$$

Однако при наличии внешних воздействий выражение для α примет вид:

$$\alpha = \frac{J_A}{J_B} = \frac{c_A P(k/c_A)}{c_B P(k/c_B)} = \frac{P(k/c_A)}{P(k/c_B)} \sqrt{\frac{m_B}{m_A}}$$

Для фиксированной пары газов и при фиксированной температуре выражение $\gamma(k) = P(k/c_A)/P(k/c_B)$ является функцией только скорости колебаний элементов устройства k , и представляет собой коэффициент усиления разделения (по сравнению с Кнудсоновской диффузией при отсутствии колебаний). Все последующие результаты будут представлены как графики $\gamma(k)$ для гелий-аргоновой (He – Ar) смеси при различных значениях других определяющих параметров.

Канал с перегородками. Результаты расчетов для второй задачи представлены на рис.3. Характерной скоростью колебаний в данном случае является произведение длины псевдоволны на частоту колебаний затворов. Основными параметрами исследования также являются расстояние между затворами L , и длина псевдоволны (определяемая при фиксированном L количеством затворов и разностью фаз $\Delta\psi$ движения соседних затворов). Результаты на Рис. 3а свидетельствуют о том, что при малом количестве затворов усиление разделения возможно только при малых значениях L/D , однако на практике получить такое расстояние между затворами не представляется возможным. Вместе с тем, при увеличении количества затворов, можно добиться разделения и при больших значениях L/D . Более того, увеличением количества затворов, и соответственно увеличением длины псевдоволны λ , можно добиться значений характерной скорости $\lambda\omega$, сопоставимой с характерной тепловой скоростью молекул даже при относительно низких частотах ω колебаний (порядка кГц), что позволяет реализовать данный эффект на практике.

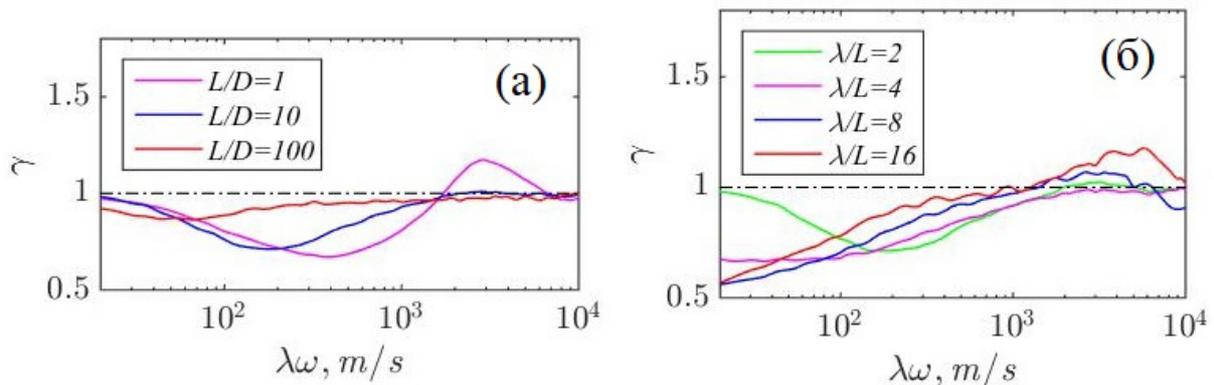


Рис. 3. Результаты моделирования в первой задаче. Зависимость коэффициента γ от характерной скорости $\lambda\omega$ для различных соотношений расстояний между перегородками L к диаметру канала D (а); для различных отношений длины “псевдоволны” к расстоянию между перегородками (б).

Канал с изгибающимися стенками. Вторая задача содержит больше параметров, и на рис. 4 представлены только основные результаты. Показано, что эффект разделения наблюдается при соотношении амплитуды волны к диаметру канала (A/D) порядка 0.2 (рис. 4а). При больших и меньших значениях эффект прокачки газа начинает доминировать, и устройство работает скорее, как газовый насос. Отмечено, что с увеличением длины волны λ эффект усиливается, но требует большей скорости волны k для достижения максимального эффекта (рис. 4а). Также отмечено, что с увеличением относительной длины канала L/D эффект разделения также усиливается (рис. 4б).

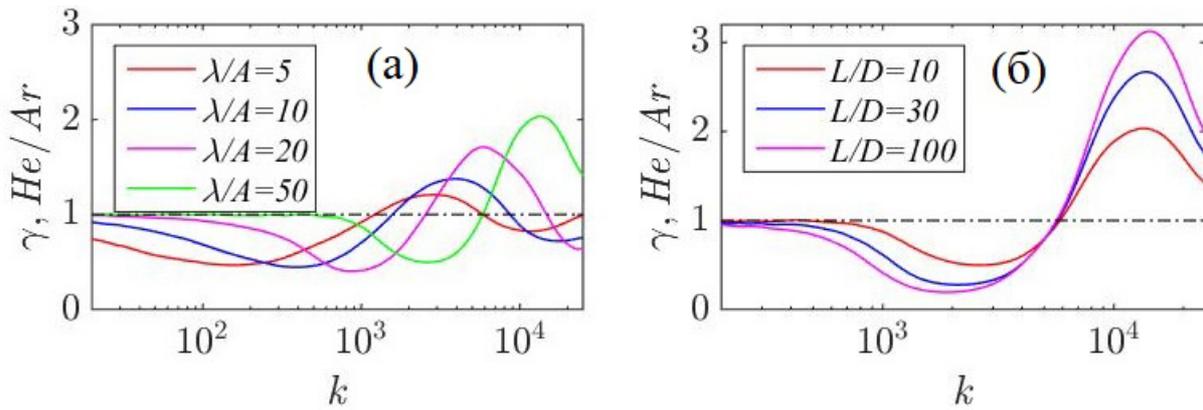


Рис. 4. Результаты моделирования во второй задаче. Зависимость коэффициента γ от характерной скорости k для различных соотношений длины волны λ к амплитуде колебаний A (а); и для различных отношений длины канала L диаметру канала D (б).

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова [12] и вычислительных ресурсов МСЦ РАН. Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (грант № 17-71-10227).

Литература

1. Friend J., Yeo L. Y. Microscale acoustofluidics: Microfluidics driven via acoustics and ultrasonics //Rev. Mod. Phys. 2011. V. 83. № 2. P. 647.
2. Nisar A., Afzulpulkar N., Mahaisavariya B., Tuantranont A. MEMS-based micropumps in drug delivery and biomedical applications //Sens. Actuators, B. 2008. V. 130. № 2. P. 917-942.
3. Iverson B. D., Garimella S. V. Recent advances in microscale pumping technologies: a review and evaluation //Microfluid. Nanofluidics. 2008. V. 5. № 2. P. 145-174.
4. Shi J., Ahmed D., Mao X., Colletti A., Huang T. J. Focusing microparticles in a microfluidic channel with standing surface acoustic waves (SSAW) //Lab on a Chip. 2008. V. 8. № 2. P. 221-223.
5. Shi J., Ahmed D., Mao X., Lin S., Lawit A., Huang T. J. Acoustic tweezers: patterning cells and microparticles using standing surface acoustic waves (SSAW) //Lab on a Chip. 2009. V. 9. № 20. P. 2890-2895.
6. Devendran C., Gunasekara N. R., Collins D. J., Neild A. Batch process particle separation using surface acoustic waves (SAW): integration of travelling and standing SAW //RSC Advances. 2016. V. 6. № 7. P. 5856-5864.
7. Ковалев В. Л., Косьянчук В. В., Якунчиков А. Н. Свободномолекулярное течение газа через колеблющуюся мембрану //Изв. РАН. МЖГ. 2014. № 4. С. 119-124.
8. Yakunchikov A., Kovalev V., Kosiantchouk V. Free-molecular gas flow through the oscillating membrane //Microfluid. Nanofluidics. 2015. V. 18. №. 6. P. 1039-1043.
9. Kosyanchuk V. V., Yakunchikov A. N., Bryukhanov Y. A., Konakov S. A. Numerical simulation of novel gas separation effect in microchannel with a series of oscillating barriers //Microfluid. Nanofluidics. 2017. V. 21. № 7. P. 116.
10. Косьянчук В. В., Якунчиков А. Н. Свободномолекулярное течение газа в канале с изгибающейся границей //Изв. РАН. МЖГ. 2018. № 3.
11. Bannerman M. N., Sargant R., Lue L. DynamO: a free O(N) general event-driven molecular dynamics simulator //J. Comput. Chem. 2011. V. 32. № 15. P. 3329-3338.
12. V. Sadovnichy, A. Tikhonravov, V. Voevodin, V. Opanasenko "Lomonosov": Supercomputing at moscow state university // Contemporary High Performance Computing: From Petascale toward Exascale. Chapman&Hall: Boca Raton, United States. 2013. P. 283-307.