

Далее вычисляется проводимость канала в прямом направлении (от последнего колеса ТМН к входу в молекулярную ступень) из приведенного выше соотношения:

$$U_{12} = k_{12} \cdot \frac{1}{4} \cdot F_{\text{вхл}} \cdot \vartheta_{\text{ср}}$$

Вероятность обратного прохода молекул газа сквозь канал вычисляется следующим образом:

$$k_{21} = \frac{N_{\text{пр}}}{N_{\text{общ}}}$$

$N_{\text{пр}}$ – число молекул прошедших сквозь канал в обратном направлении;

$N_{\text{общ}}$ – общее число молекул.

Проводимость канала в обратном направлении определяется приведенным выше уравнением:

$$U_{21} = k_{21} \cdot \frac{1}{4} \cdot F_{\text{вхл}} \cdot \vartheta_{\text{ср}}$$

Моделирование течения многокомпонентного газа через систему нитей различной температуры

А.Н. Якунчиков, В.В. Косьянчук

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

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

Москва, Институт машиноведения им. А.А. Благовраова РАН

E-mail: art-ya@mail.ru

В работе исследована плоская задача о переходном течении ($Kn=0.1-10$) смеси инертных газов в системе, состоящей из нескольких рядов натянутых нитей, имеющих различную температуру. Рассмотрено две постановки задачи: (1) о равновесии, которое вырабатывается в закрытой системе, и (2) об истечении многокомпонентной смеси в вакуум через систему нитей. Расчеты проводились методом событийного молекулярно-динамического моделирования (EDMD). Показано, что под действием перепада температур возникает эффект разделения смеси, который можно усиливать, увеличивая количество ступеней (рядов нитей). Кроме этого, в закрытой системе возникает перепад давления (реализуется эффект насоса Кнудсена).

Simulation of multicomponent gas flow through a system of filaments having different temperatures. *A.N. Yakunchikov, V.V. Kosyanchuk.* *The paper deals with the plane problem of the transition flow ($Kn = 0.1-10$) of an inert gases mixture in a system consisting of several rows of stretched filaments having different temperatures. Two statements of the problem are considered: (1) the equilibrium that is produced in a closed system and (2) the flow of a multicomponent mixture into vacuum through a system of filaments. The calculations were performed by the method of Event-driven Molecular Dynamics (EDMD). It is shown that the effect of separation of the mixture takes place under the influence of the temperature difference. This effect can be increased by escalating the number of stages (rows of filaments). In addition, a pressure drop occurs in a closed system (the Knudsen pump effect is realized).*

Исследования течений разреженного газа, вызванные перепадом температуры, начались более ста лет назад [1,2]. Этот эффект (в литературе его принято называть эффектом температурной транспирации) был использован Кнудсенем для создания насоса без движущихся час-

тей [3,4]. В настоящее время данный способ создания перепада давления привлекает интерес исследователей в связи с развитием технологий нано/микро-электромеханических систем (НЭМС/МЭМС). Были предложены различные варианты геометрий насоса [5–7], в том числе многоступенчатые микронасосы [8]. Также было изучено течение смеси газов в таких системах [9,10] и показано наличие эффекта разделения компонент по молекулярной массе. На сегодняшний день созданы прототипы микроустройств для разделения газов на основе неизотермической мембраны [11,12] и на основе решетки пластин разной температуры [13]. В настоящей работе рассмотрена возможность создания газоразделительного устройства на основе решетки нитей (филаментов), имеющих различную температуру.

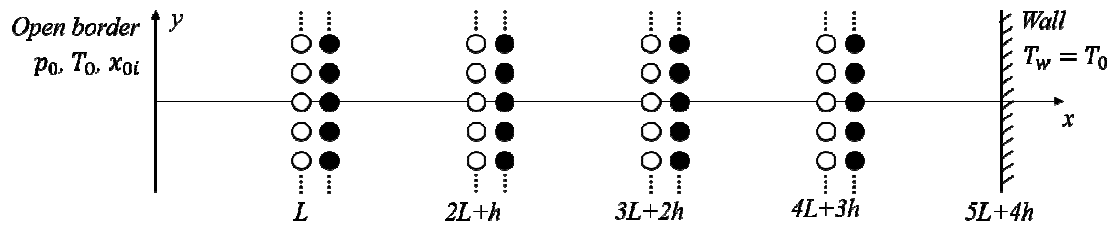


Рис. 1. Геометрия системы из 4-х ступеней филаментов, которая закрыта с одного из концов. Белыми кружками показаны филаменты, поверхность которых имеет температуру T_0 , черными – нагреваемые филаменты с температурой T_1 .

Рассматривалась плоская задача о течении смеси пяти газов (He, Ne, Ar, Kr, Xe) в системе, состоящей из нескольких рядов натянутых нитей, имеющих различную температуру. Изучены две постановки задачи: (1) о равновесии в системе (см. рис. 1), один конец которой подключен к резервуару с постоянными параметрами – давлением p_0 , температурой T_0 и составом x_{0i} (x_{0i} – молярная концентрация i -той компоненты в резервуаре), а второй закрыт; (2) стационарном течении через систему (см. рис. 2), подключенной с обеих сторон к резервуарам с постоянными параметрами (левый вакуумирован, в правом – давление p_0 , температурой T_0 и составом x_{0i}).

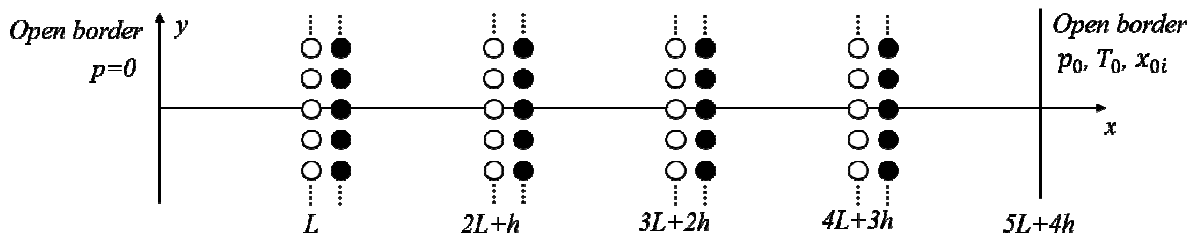


Рис. 2. Геометрия открытой системы из 4-х ступеней филаментов: белыми кружками показаны филаменты, поверхность которых имеет температуру T_0 , черными – нагреваемые филаменты с температурой T_1 .

В обеих постановках моделировалась система, состоящая из четырех ступеней филаментов. Каждая ступень содержит два ряда филаментов, первый из которых имеет температуру T_0 , а второй – температуру $T_1 > T_0$. Расстояние между рядами в ступени и между филаментами в ряду – h (см. Рис. 3), расстояние между ступенями – L , диаметр филамента – d . Минимальное расстояние между поверхностями соседних филаментов обозначим $g = h - d$. Предполагалось, что в перпендикулярной к оси x плоскости размеры системы много больше, чем перечисленные геометрические параметры, поэтому задача рассматривалась в плоской постановке с условиями симметрии по оси y . Было проведено моделирование течения в 24 геометрических конфигурациях ($L/d = 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40$, $h/d = 1.25, 1.5, 2$), которые приведены в Табли-

це вместе с соответствующими числами Кнудсена, рассчитанными по давлению p_0 и температуре T_0 .

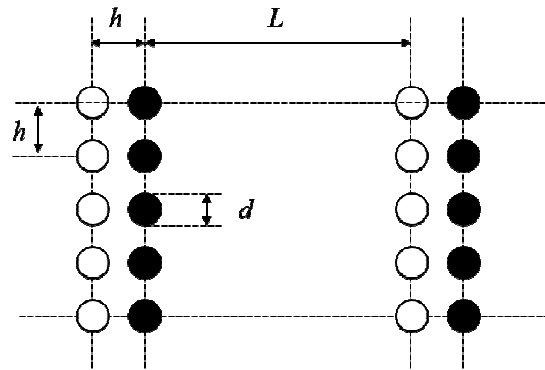


Рис. 3. Геометрия ступени филаментов.

Для описания взаимодействия газа с поверхностью использовалось ядро рассеяния Максвелла с полной аккомодацией импульса и энергии. В этом случае плотность вероятности для скорости молекулы после отражения от стенки будет

$$\rho(\vec{u}) = \frac{2\beta_w^4 u_n}{\pi} \exp(-\beta_w^2 u^2)$$

где $\beta_w = \sqrt{m/2kT_w}$, T_w – температура поверхности, k – константа Больцмана, m – масса молекулы. На открытых границах задачи (границах с резервуарами) ставилось равновесное граничное условие с параметрами соответствующего резервуара.

Таблица 1. Геометрические конфигурации, которые были рассмотрены в работе

№	L/d	h/d	g/d	$Kn_L = \lambda/L$	$Kn_h = \lambda/h$	$Kn_g = \lambda/g$
0	40	2	1	0,10	1,92	3,85
1	35	2	1	0,11	1,92	3,85
2	30	2	1	0,13	1,92	3,85
3	25	2	1	0,15	1,92	3,85
4	20	2	1	0,19	1,92	3,85
5	15	2	1	0,26	1,92	3,85
6	10	2	1	0,38	1,92	3,85
7	5	2	1	0,77	1,92	3,85
8	40	1,5	0,5	0,10	2,57	7,70
9	35	1,5	0,5	0,11	2,57	7,70
10	30	1,5	0,5	0,13	2,57	7,70
11	25	1,5	0,5	0,15	2,57	7,70
12	20	1,5	0,5	0,19	2,57	7,70
13	15	1,5	0,5	0,26	2,57	7,70
14	10	1,5	0,5	0,38	2,57	7,70
15	5	1,5	0,5	0,77	2,57	7,70
16	40	1,25	0,25	0,10	3,08	15,40
17	35	1,25	0,25	0,11	3,08	15,40
18	30	1,25	0,25	0,13	3,08	15,40
19	25	1,25	0,25	0,15	3,08	15,40
20	20	1,25	0,25	0,19	3,08	15,40
21	15	1,25	0,25	0,26	3,08	15,40
22	10	1,25	0,25	0,38	3,08	15,40
23	5	1,25	0,25	0,77	3,08	15,40

Задача решалась с помощью подхода событийного молекулярно-динамического моделирования (EDMD)[14,15]. Сильными сторонами разработанного метода является бессеточность, отсутствие стохастичности при моделировании межмолекулярных столкновений (по сравнению с методом прямого статистического моделирования Монте-Карло) и существенное снижение вычислительной нагрузки по сравнению с классическим молекулярно-динамическим моделированием.

Закрытая система. В резервуаре, к которому подсоединен левый конец системы, были заданы равные молярные концентрации всех компонент $x_{0i} = 0.2, i = 1, \dots, 5$, температура горячих филаментов $T_1 = 2T_0$. На рис. 4(а) представлены результаты моделирования геометрии №16 (она имеет наибольшее различие между числами Кнудсена в камере и в ступени филаментов среди всех рассмотренных геометрий). Температура в камерах между ступенями филаментов имеет линейный профиль, давление в камерах растет с каждой следующей ступенью. В результате со стороны закрытого конца системы вырабатывается давление, которое примерно в 2 раза выше, чем давление в резервуаре. Числовые концентрации компонент растут как $1/T$ в направлении холодной стороны камеры между ступенями, а в самих ступенях снижаются скачком. Разница в молярных концентрациях вырабатывается именно в камерах между ступенями, а в самих ступенях нитей состав практически не меняется.

Открытая система. В резервуаре, к которому подсоединен правый конец системы, были заданы равные молярные концентрации всех компонент $x_{0i} = 0.2, i = 1, \dots, 5$. В резервуаре, к которому подсоединен левый конец системы, моделировалось нулевое давление. Чтобы установить эффекты, которые связаны непосредственно с разницей температур филаментов при таком течении, было проведено две серии расчетов: (2.1) все филаменты ступени имели одинаковую температуру (то есть $T_1 = T_0$) и (2.2) правый ряд в каждой ступени нагрет до $T_1 = 2T_0$. На Рисунке 4(б) представлены результаты моделирования геометрии №16 при $T_1 = 2T_0$. Температура в камерах между ступенями филаментов имеет линейный профиль со скольжением. Давление между ступенями практически постоянно, а в ступенях меняется скачком. Числовые плотности компонент убывают как $1/T$ от холодной стороны камеры к горячей. Молярная концентрация легкого компонента увеличивается, а тяжелого уменьшается при движении в сторону вакуумированного резервуара. Шум в кривых молярных концентраций в левой камере вызван тем, что в ней практически нулевое давление. В случае открытой системы без перепада температур нитей ($T_1 = T_0$) поведение молярных концентраций принципиально отличается – молярная концентрация легкого компонента уменьшается, а тяжелого увеличивается при движении в сторону вакуумированного резервуара.

В отличие от постановки задачи о закрытой системе в рассматриваемом случае стационарного истечения интерес представляют не столько молярные концентрации, установившиеся в системе, сколько соотношение потоков различных компонент, протекающих через систему в единицу времени. Когда все филаменты имеют одинаковую температуру, потоки различных компонент через систему тоже отличаются (за счет разницы тепловых скоростей). Наличие разницы температур филаментов позволяет незначительно увеличить эту разницу, благодаря отличию в поведении молярных концентраций между случаями ($T_1 = T_0$) и ($T_1 = 2T_0$), описанному выше.

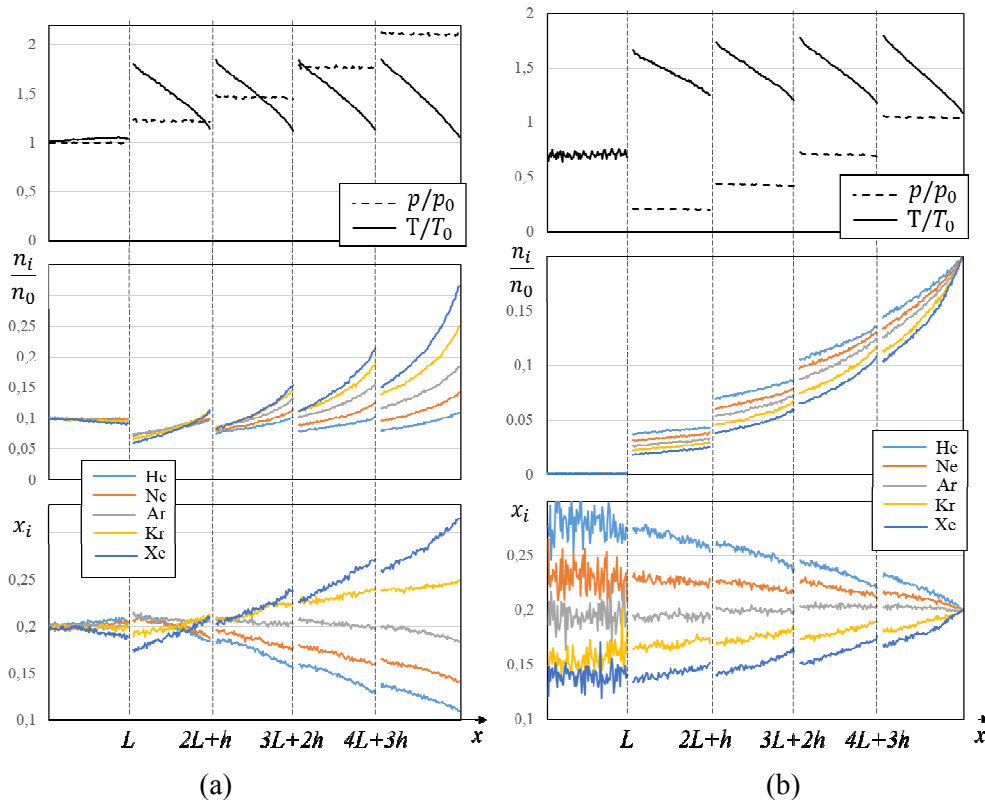


Рис. 4. Температура, давление, числовая плотность и молярная концентрация компонент в закрытой (а) и открытой системе (б) для геометрии №16.

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

Литература

1. J.C. Maxwell, On Stresses in Rarefied Gases Arising from Inequalities of Temperature, Philos. Trans. R. Soc. London. 170 (1879) 231–256. doi:10.1098/rstl.1879.0067.
2. O. Reynolds, On Certain Dimensional Properties of Matter in the Gaseous State. Part I. Experimental Researches on Thermal Transpiration of Gases through Porous Plates and on the Laws of Transpiration and Impulsion, Including an Experimental Proof That Gas is Not a Con, Philos. Trans. R. Soc. London. 170 (1879) 727–845. doi:10.1098/rstl.1879.0078.
3. M. Knudsen, Eine Revision der Gleichgewichtsbedingung der Gase. Thermische Molekularstromung, Ann. Phys. 336 (1909) 205–229. doi:10.1002/andp.19093360110.
4. M. Knudsen, Thermischer Molekulardruck der Gase in Röhren, Ann. Phys. 338 (1910) 1435–1448. doi:10.1002/andp.19103381618.
5. K. Aoki, P. Degond, L. Mieussens, S. Takata, H. Yoshida, A Diffusion Model for Rarefied Flows in Curved Channels, Multiscale Model. Simul. 6 (2008) 1281–1316. doi:10.1137/070690328.
6. D.M. Bond, V. Wheatley, M. Goldsworthy, Numerical investigation of curved channel Knudsen pump performance, Int. J. Heat Mass Transf. 76 (2014) 1–15. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2014.04.021.
7. D.M. Bond, V. Wheatley, M. Goldsworthy, Numerical investigation into the performance of alternative Knudsen pump designs, Int. J. Heat Mass Transf. 93 (2016) 1038–1058. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2015.10.069.
8. N.K. Gupta, S. An, Y.B. Gianchandani, A Si-micromachined 48-stage Knudsen pump for on-chip vacuum, J. Micromechanics Microengineering. 22 (2012) 105026. doi:10.1088/0960-1317/22/10/105026.

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. Мухомеловичи*, 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 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