Теплофизика и аэромеханика, 2023, том 30, № 6

УДК 533.6.011.8

Прямое стохастическое моделирование течения разреженного газа в каналах переменного сечения*

А.О. Сажин, О.В. Сажин

Уральский федеральный университет, Екатеринбург

E-mail: artem.sazhin@urfu.ru, oleg.sazhin@urfu.ru

Методом прямого статистического моделирования Монте–Карло исследуется истечение разреженного газа в вакуум через короткие линейно расширяющийся и сужающийся каналы. Задача решается в полной геометрической постановке, а именно: с включением в рассмотрение достаточно больших областей на входе и выходе модельного канала. В широком диапазоне разреженности газа выполнен расчет массового расхода через канал и поля течения газа как внутри канала, так и в областях вверх и вниз по течению. Результаты расчета сравниваются с соответствующими данными для канала постоянного поперечного сечения. Установлено сильное влияние геометрии канала и разреженности газа на массовый расход и на поле течения.

Ключевые слова: разреженный газ, течение в каналах, расход газа, число Кнудсена, метод прямого статистического моделирования Монте–Карло.

Возросший интерес к изучению течений разреженного газа связан с необходимостью глубокого понимания газодинамических процессов, протекающих в микро- и нанофлуидных устройствах [1 – 3]. Функционирование таких устройств существенно отличается от работы соответствующих макроскопических аналогов. Например, внутри газоуправляемого устройства с характерным размером 1 микрон газ является разреженным даже при атмосферном давлении. Для описания течения газа в широком диапазоне разреженности должны применяться методы кинетической теории газов, основным уравнением которой является интегро-дифференциальное кинетическое уравнение Больцмана для функции распределения.

Исторически течение разреженного газа исследовалось в прямых каналах, т.е. в каналах с постоянным поперечным сечением [4]. Однако конфигурации микро- и нанофлуидных устройств зачастую представляют собой каналы сложной конфигурации, в частности, изогнутые каналы и каналы с переменным поперечным сечением. Так, например, в работе [5] течение разреженного газа через линейно расширяющуюся трубу в вакуум численно изучалось в трехмерном пространственном измерении на основе уравнения

* Исследование выполнено за счет совместного гранта Российского научного фонда и Правительства Свердловской области № 22-21-20121, https://rscf.ru/project/22-21-20121/.

© Сажин А.О., Сажин О.В., 2023

Больцмана с S-моделью интеграла столкновений. Исследование выполнялось в полной геометрической постановке, которая включала в себя не только саму трубу, но и области высокого и низкого давления, примыкающие к входу и выходу трубы. Было установлено, что увеличивающийся радиус трубы не только повышает расход газа во всем диапазоне чисел Кнудсена (разреженности), но и приводит к нелинейному распределению газовых макропараметров внутри трубы.

Метод прямого статистического моделирования Монте – Карло (DSMC — Direct Simulation Monte – Carlo), который принято считать стохастическим подходом к решению точного уравнения Больцмана, был использован в работе [6] для исследования течения азота в расширяющихся микроканалах, вызванное перепадом давления. Авторы выполнили оценку влияния угла расширения, отношения давлений на концах канала, степени разреженности газа и коэффициента аккомодации тангенциального импульса на тепловое и гидродинамическое поля течений. В частности, было установлено, что в каналах с достаточно большим углом расширения может возникать разделение тепловых потоков даже в случае отсутствия гидродинамического разделения течения, а вклад градиента давления в формирование направления и величину теплового потока увеличивается с ростом числа Кнудсена. Следует отметить, что задача решалась не в полной геометрической постановке, а с использованием приближенных, так называемых неявных граничных условий для давления газа, которые задаются непосредственно на входном и выходном сечениях канала.

Экспериментально и численно течение разреженного газа в расширяющихся и сужающихся микроканалах в вязком (гидродинамическом) режиме и в так называемом режиме раннего проскальзывания (в конце переходного режима) исследовалось в работах [7, 8]. В результате была предложена эмпирическая корреляция между массовым расходом газа и числом Пуазейля. Позже в таких каналах был экспериментально установлен минимум массового расхода газа [9], который впервые обнаружил и исследовал Кнудсен в прямой трубе. В работе [10] авторы показали, что параметр разреженности, при котором наблюдается кнудсеновский минимум, и сама величина минимума расхода одинаковы для расширяющегося и сужающегося каналов для всех исследуемых углов расширения и сужения.

В работе [11] была разработана одномерная модель уравнений сплошной среды и получено аналитическое решение стационарного изотермического течения сжимаемого газа через расширяющиеся, сужающиеся и прямые каналы для широкого диапазона чисел Кнудсена и Маха. А именно: в явном виде были получены решения для массового расхода, распределения давления и скорости газа в канале, а также предложена корреляция произведения коэффициента трения и числа Рейнольдса (числа Пуазейля) с числом Кнудсена. Чтобы расширить решение уравнений сплошной среды на широкий диапазон разреженности газа авторы использовали эти уравнения совместно с граничными условиями на поверхности канала, которые охватывают все степени разреженности газа: от гидродинамического (сплошная среда) до свободномолекулярного режима течения. Полученные решения показали хорошее согласование с экспериментальными, аналитическими и численными результатами, представленными в открытых публикациях, в частности было подтверждено существование минимума числа Кнудсена не только в прямых, но и в расходящихся и сходящихся каналах.

Из анализа доступной литературы можно заключить, что несмотря на практическую значимость управляемое перепадом давления течение разреженного газа через линейно расширяющиеся и сужающиеся каналы исследовано недостаточно как экспериментально

так и теоретически, в частности, для случая истечения газа в вакуум. Среди теоретических работ можно выделить работу [5], в которой подробно и в полной геометрической постановке исследовалось течение разреженного газа в вакуум через линейно расширяющуюся трубу цилиндрической формы. Цель настоящей работы заключается в исследовании истечения газа в вакуум через прямоугольные каналы как с линейным расширением, так и с сужением поперечного сечения в широком диапазоне разреженности: от свободномолекулярного до почти гидродинамического режима течения. Предлагается решение задачи в полной геометрической постановке, а именно: с включением в рассматриваемую геометрию областей необходимого размера на входе и выходе модельного канала. Из-за сильной неравновесности процесса (истечение в вакуум) целесообразно использовать метод прямого статистического моделирования Монте – Карло [12], который является эффективным средством решения задач газодинамики для любых режимов течения газа от свободномолекулярного до почти гидродинамического.

Рассмотрим стационарное истечение разреженного газа через линейно расширяющийся и сужающийся каналы длиной l в вакуум. На рис. 1 представлены конфигурация течения через линейно расширяющийся канал и система координат. В области вверх по течению вдали от канала находится равновесный газ при давлении P_1 и температуре T_1. В области вниз по течению давление P_2 настолько мало по сравнению с P_1, что можно положить $P_2 = 0$ (вакуум). Температура поверхности во всей моделируемой системе равна T_1. Будем считать, что ширина канала w значительно превышает его высоту h_1. В этом случае можно полагать, что поле течения газа однородно вдоль оси OX, и ограничиться двухмерной постановкой задачи.

В качестве основного расчетного параметра при моделировании течения газа в указанной системе будем рассматривать массовый расход газа Q через канал. Расчетные данные будут представляться в виде $Q^* = Q/Q_0$, где Q_0 — значение расхода газа через щель (канал с $l = 0$) высотой h_1 в свободномолекулярном режиме течения. Величина Q_0 описывается аналитическим выражением $\left(h_1 \cdot P_1\right) \Big/ \left(\sqrt{\pi} \cdot v_1\right)$, где v_1 — наиболее вероятная скорость газовых молекул при температуре T_1. На практике Q и Q_0 соответствуют величинам массового расхода газа через канал и щель с $w >> h_1$ на единицу ширины. Таким образом, чтобы получить величину массового расхода Q [кг/с] через конкретный канал необходимо значение Q^* умножить на $\dfrac{h_1[\text{м}] \cdot w[\text{м}] \cdot P_1[\text{Па}]}{\sqrt{\pi} v_1[\text{м/с}]}$.

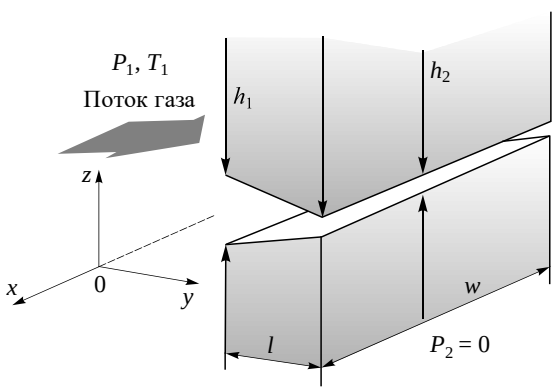

Рис. 1. Конфигурация течения через линейно сужающийся канал и система координат.

Разреженность газа будет характеризоваться параметром $\delta = \left(h_1 \cdot P_1\right)/\left(\mu_1 \cdot v_1\right)$, где μ_1 — вязкость газа при температуре T_1. Для моделирования межмолекулярного взаимодействия применяется модель твердых сфер, закон полностью диффузного рассеяния используется как закон рассеяния газовых молекул поверхностью. Параметр разреженности обратно пропорционален числу Кнудсена — Kn = $\sqrt{\pi}/(2\delta)$, которое для канала задается как Kn = λ_1/h_1, где λ_1 — средняя длина свободного пробега газовых молекул в равновесном газе при давлении P_1 и температуре T_1.

В представленной работе авторы развивают свой программный код, использованный ранее для расчета с высокой точностью течения разреженного газа через канал с внезапным сужением или расширением в поперечном сечении [13]. Как и прежде, будем использовать DSMC-метод, основанный на схеме мажорантной частоты [14], двухуровневую пространственную сетку и специальные DSMC-процедуры, а именно: разбиение ячейки на субъячейки и весовые плоскости. Расчетная область имеет закрытые и открытые границы. На закрытых границах устанавливается закон рассеяния газовых молекул поверхностью. На открытых границах происходит как генерация новых частиц (впрыск в расчетную область), так и удаление частиц из расчетной области, если частица пересекает открытую границу. В стационарном состоянии количество впрыснутых и удаленных частиц примерно одинаково, поэтому число частиц в расчетной области остаётся практически неизменным. Используемые в настоящей работе параметры моделирования и специальные DSMC-процедуры гарантируют вычислительную ошибку не более чем 1 %. Подробности выбора параметров моделирования и оценки вычислительной ошибки можно найти в работе [15].

Одна из актуальных задач динамики разреженного газа (RGD) заключается в исследовании газовых потоков в неравновесной системе «газ – твердое тело» [16], поэтому в качестве основной расчетной величины рассматривается массовый расход газа через канал с перепадом давления на его концах. При течении разреженного газа в каналах существенную роль играет его длина. Так, длинный канал за счет вязкости газа практически «запирается», что существенно уменьшает расход газа через него. В DSMC-методе каналы по длине можно условно разделить на очень короткие ($l/h_1 = 0{,}1$), короткие ($l/h_1 = 1$), средние ($l/h_1 = 5$) и достаточно длинные ($l/h_1 = 10$). Такое разделение проводится по уровню статистического шума в результатах моделирования. Чем выше уровень статистического шума, тем сложнее достичь необходимого уровня вычислительной ошибки (обычно 1 %). При расчете DSMC-методом очень длинных каналов ($l/h_1 >> 1$) уровень статистического шума настолько высок, что добиться вычислительной ошибки на уровне 1 % практически невозможно. В таком случае необходимо использовать другие методы кинетической теории газов, в частности, гибридный метод расчета на основе совместного решения уравнений Навье – Стокса и кинетического уравнения [17]. В этом исследовании моделирование течения газа выполнялось через короткие линейно расширяющиеся и сужающие каналы, где влияние вязкости еще не сказывается, однако и уровень статистического шума достаточно низкий. Отметим, что DSMC-метод остается эффективным и для достаточно длинных каналов, когда $l/h_1 = 10$.

На рис. 2 представлены результаты расчета безразмерного массового расхода газа Q^* через линейно сужающийся ($h_2/h_1 = 0{,}5$), линейно расширяющийся ($h_2/h_1 = 2$) и прямой ($h_2/h_1 = 1$) каналы как функция параметра разреженности δ для отношения длины к высоте $l/h_1 = 1$. С целью верификации полученных результатов был дополнительно

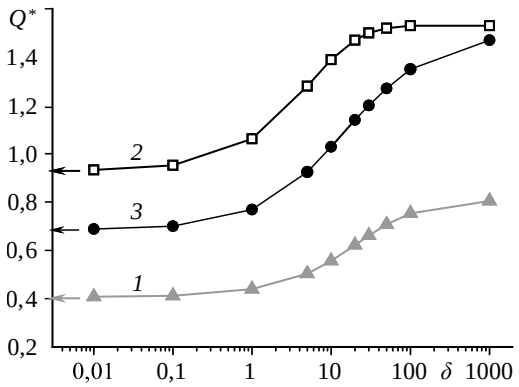

Рис. 2. Безразмерный массовый расход газа Q^* через линейно сужающийся (*1*), линейно расширяющийся (*2*) и прямой (*3*) каналы, как функция параметра разреженности δ для отношения длины к высоте $l/h_1 = 1$.

1 — $h_2/h_1 = 0{,}5$, *2* — $h_2/h_1 = 2$, *3* — $h_2/h_1 = 1$; стрелками показан свободномолекулярный предел $Q^*(= 0)$.

подготовлен достаточно простой программный код для расчета величины вероятности прохождения канала с использованием метода пробной частицы Монте – Карло (TPMC — Test Particle Monte – Carlo). Результаты расчета показаны на рисунке стрелками. Действительно, в случае свободномолекулярного режима ($\delta = 0$) безразмерный расход газа Q^* равен величине вероятности прохождения канала. Как видно из рисунка, результаты DSMC- и TPMC-расчетов согласуются друг с другом, что позволяет надеяться на корректность полученных результатов.

Также из рис. 2 вполне ожидаемо следует, что величина массового расхода газа существенным образом зависит от геометрии канала. Сужение канала в поперечном сечении ($h_2/h_1 = 0{,}5$) увеличивает сопротивление течению газа и приводит к заметному уменьшению расхода по сравнению с расходом через прямой канал ($h_2/h_1 = 1$), а расширение ($h_2/h_1 = 2$), наоборот, уменьшает сопротивление и увеличивает расход.

Для линейно расширяющегося канала, начиная с $\delta = 30$ и выше, величина расхода остается практически неизменной. Действительно, расход Q^* со значения 1,50 при $\delta = 30$ вырастает только до 1,53 при $\delta = 1000$. В физическом смысле это означает, что в случае течения газа через достаточно короткий линейно расширяющийся канал массовый расход довольно быстро, начиная уже с $\delta = 30$, достигает значения так называемого гидродинамического предела, который соответствует величине Q^* при $\delta >> 1$. Ранее в работе [15] нами было обнаружено такое же поведение разреженного газа при течении его через щель (канал с $l = 0$), и как аналитически, так и численно было рассчитано значение этого предела для щели: $Q^*_{щ}(\delta >> 1) = 1{,}55$.

Кроме того, для линейно расширяющегося канала и такой же расширяющейся трубы (см. табл. 1 в работе [5]) величины безразмерных расходов Q^* имеют довольно близкие значения. Напомним, что величина безразмерного расхода определяется как $Q^* = Q/Q_0$, где Q_0 соответствует свободномолекулярному массовому расходу через прямоугольную щель для канала или через круглое отверстие для трубы. Для сужающихся каналов и труб соответствующие величины Q^* различаются уже существенно. На наш взгляд, в достаточно коротких расширяющихся каналах и трубах величину расхода определяют главным образом характеристики входящего в канал (трубу) потока газа и в меньшей степени — геометрия стенок канала (трубы). Доказательством этого является то, что для щели и отверстия, совсем не имеющих продольных стенок, соответствующие величины Q^* практически одинаковы (см., например, для сравнения данные табл. 1 и 3 в обзоре [16]).

Кроме величины массового расхода газа, интерес представляет также распределение его макроскопических параметров. На рис. 3 представлены двумерные картины поля

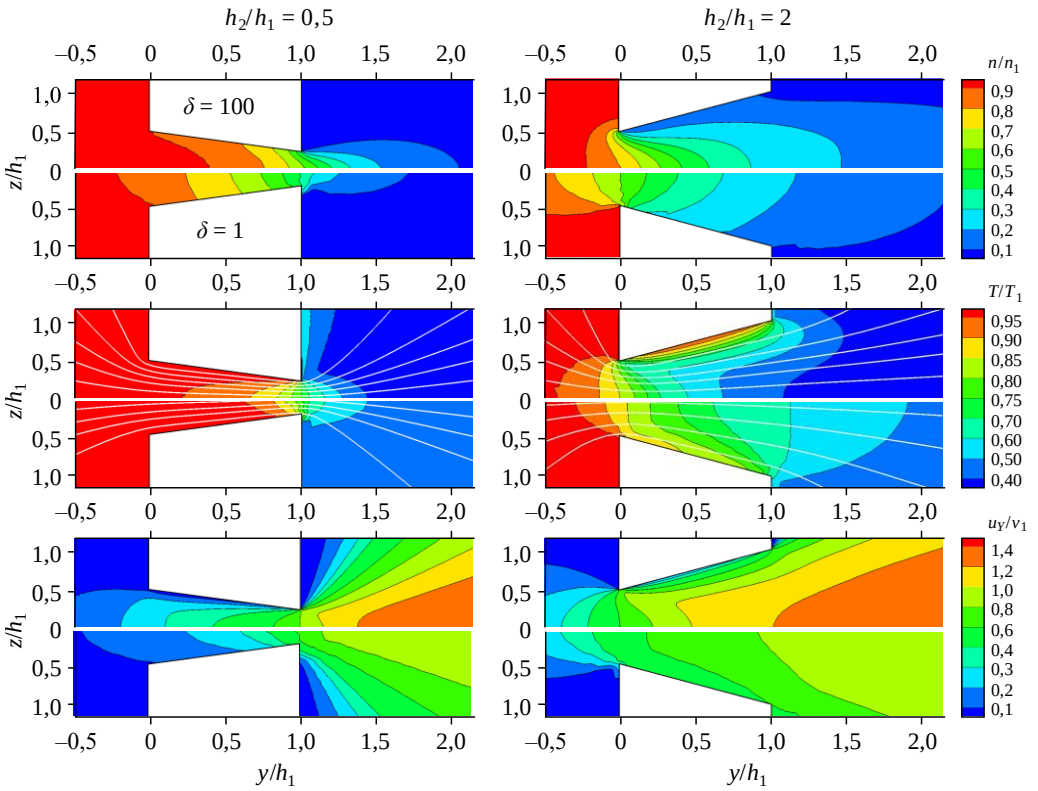

Рис. 3. Безразмерные плотность n/n_1, температура T/T_1 и продольная массовая скорость u_y/v_1 в yz-плоскости как внутри, так и за пределами линейно сужающегося ($h_2/h_1 = 0{,}5$) и расширяющегося ($h_2/h_1 = 2$) каналов с отношением длины к высоте $l/h_1 = 1$ при значениях параметра разреженности $\delta = 1$ и 100.
На рисунке с температурой также приведены линии тока газа.

течения разреженного газа через линейно сужающийся ($h_2/h_1 = 0{,}5$) и расширяющийся ($h_2/h_1 = 2$) каналы соответственно. Безразмерные плотность n/n_1, температура T/T_1 и продольная массовая скорость газа u_y/v_1 изображены в yz-плоскости как внутри, так и за пределами канала с отношением длины к высоте $l/h_1 = 1$ при значениях параметра разреженности $\delta = 1$ и 100 (для $\delta = 100$ изображения имеют прямой вид, а для $\delta = 1$ они являются зеркальными отображениями относительно центральной линии канала). На фрагментах с температурой также показаны линии тока газа. Можно видеть, что поле течения газа, как и ожидалось, существенно зависит от геометрии канала и разреженности газа. В целом картина течения в каналах достаточно предсказуема, макропараметры газа монотонно изменяются от равновесных значений в области вверх по течению относительно канала до вакуумных условий вниз по течению. Распределение линий тока находится в соответствии с зависимостью массового расхода газа от разреженности и геометрии канала: чем больше расход газа, тем выше пространственная насыщенность линиями, особенно в области перед входом в канал.

Заканчивая обсуждение, представим распределения макроскопических параметров газа вдоль центральной линии канала. На рис. 4 приведены распределения давления газа P/P_1 ($P = nkT$) и локального числа Маха, которое можно определить как $\mathrm{Ma} = \sqrt{\frac{2}{\gamma}} \cdot \frac{u_\gamma/v_1}{\sqrt{T/T_1}}$, где γ — показатель адиабаты (5/3 для одноатомного газа). На каждой

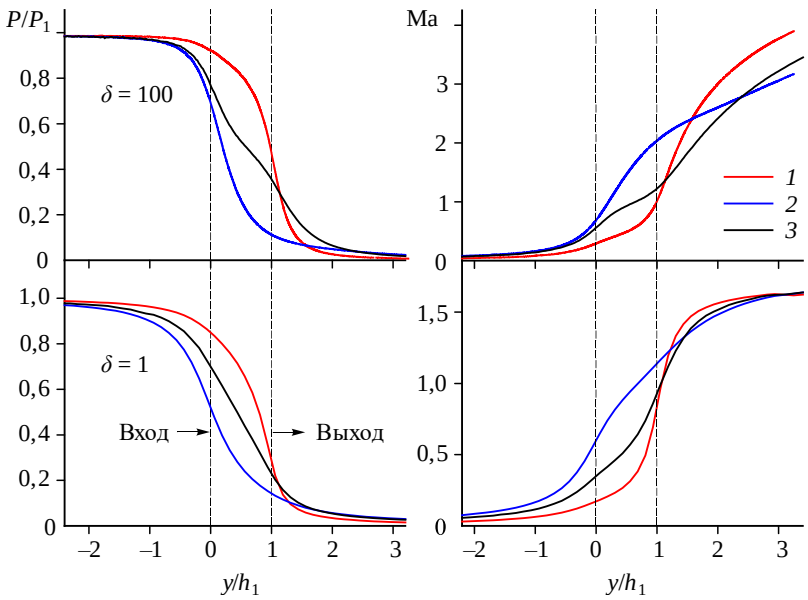

Рис. 4. Распределения давления газа P/P_1 и локального числа Маха Ma вдоль центральной линии линейно сужающегося (*1*), линейно расширяющегося (*2*) и прямого (*3*) каналов с отношением длины к высоте канала $l/h_1 = 1$ при значениях параметра разреженности $\delta = 1$ и 100. Обозначения см. на рис. 2.

части рисунка распределения представлены для линейно сужающегося ($h_2/h_1 = 0{,}5$), линейно расширяющегося ($h_2/h_1 = 2$) и прямого ($h_2/h_1 = 1$) каналов с отношением длины к высоте канала $l/h_1 = 1$ при значениях параметра разреженности $\delta = 1$ (нижние части рисунка) и 100 (верхние части рисунка). Из рисунка видно, что давление изменяется от значения P_1 для равновесного газа в области вверх по течению относительно канала до нуля вниз по течению ($P_2 = 0$, см. рис. 1). Давление газа непосредственно на входе и выходе канала существенно отличается от равновесных значений P_1 и P_2. Это еще раз подтверждает (как было указано и в работе [18]), что неявные граничные условия для давлений на входном и выходном сечениях канала необходимо использовать всегда с осторожностью, внимательно оценивая их влияние на достоверность результатов.

Локальное число Маха, как следует из рис. 4, увеличивается от нулевого значения для равновесного газа в области вверх по течению до значений, соответствующих вакуумным условиям в области вниз по течению относительно канала. Увеличение числа Маха в области вниз по течению более существенно в достаточно плотном газе ($\delta = 100$), чем в разреженном ($\delta = 1$). Действительно, увеличение u_Y/v_1 и падение T/T_1 в плотном газа более значимо (см. рис. 3). Из рис. 4 также видно, что течение газа внутри канала может быть как дозвуковым (Ma < 1), так и сверхзвуковым (Ma > 1). В частности, в линейно расширяющемся ($h_2/h_1 = 2$) канале течение является сверхзвуковым как в разреженном ($\delta = 1$), так и в достаточно плотном ($\delta = 100$) газе.

Список литературы

1. Kleinstreuer C. Microfluidics and nanofluidics: theory and selected applications. John Wiley & Sons, 2013. 456 p.

2. Prakash S., Yeom J. Nanofluidics and microfluidics: systems and applications. William Andrew, 2014. 312 p.

3. Rudyak V.Y., Aniskin V.M., Maslov A.A., Minakov A.V., Mironov S.G. Micro- and nanoflows: modeling and experiments // Berlin/Heidelberg, Germany: Springer, 2018. Vol. 18. 241 p.

4. Sharipov F., Seleznev V. Data on internal rarefied gas flows // J. of Physical and Chemical Reference Data. 1998. Vol. 27, No. 3. P. 657–706.

5. Titarev V.A., Shakhov E.M., Utyuzhnikov S.V. Rarefied gas flow through a diverging conical pipe into vacuum // Vacuum. 2014. Vol. 101. P. 10–17.

6. Ebrahimi A., Shahabi V., Roohi E. Pressure-driven nitrogen flow in divergent microchannels with isothermal walls // Applied Sci. 2021. Vol. 11, No. 8. P. 3602-1–3602-15.

7. Varade V., Duryodhan V.S., Agrawal A., Pradeep A.M., Edrahimi A., Roohi E. Low Mach number slip flow through diverging microchannel // Computers & Fluids. 2015. Vol. 111. P. 46–61.

8. Varade V., Agrawal A., Pradeep A.M. Slip flow through a converging microchannel: experiments and 3D simulations // J. of Micromechanics and Microengineering. 2015. Vol. 25, No. 2. P. 025015-1–025015-23.

9. Hemadri V., Varade V.V., Agrawal A., Bhandarkar U.V. Investigation of rarefied gas flow in microchannels of non-uniform cross section // Physics of Fluids. 2016. Vol. 28, No. 2. P. 022007-1–022007-10.

10. Hemadri V. Varade V.V., Agrawal A., Bhandarkar U.V. Rarefied gas flow in converging microchannel in slip and early transition regimes // Physics of Fluids. 2017. Vol. 29, No. 3. P. 032002-1–032002-10.

11. Milićev S.S., Stevanović N.D. Gas flow in microchannels and nanochannels with variable cross section for all Knudsen and all Mach number values // J. of Fluids Engng. 2021. Vol. 143, No. 2. P. 021203-1–021203-13.

12. Bird G.A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. Oxford University Press, 1994.

13. Sazhin O. Rarefied gas flow into vacuum through a channel with sudden contraction or expansion // Microfluidics and Nanofluidics. 2020. Vol. 24, No. 10. P. 76-1–76-9.

14. Иванов М.С., Рогазинский С.В. Сравнительный анализ алгоритмов метода прямого статистического моделирования в динамике разреженного газа // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1988. Т. 28, № 7. С. 1058–1070.

15. Sazhin O. Gas flow through a slit into a vacuum in a wide range of rarefaction // J. of Experimental and Theoretical Physics. 2008. Vol. 107. P. 162–169.

16. Sharipov F. Benchmark problems in rarefied gas dynamics // Vacuum. 2012. Vol. 86, No. 11. P. 1697–1700.

17. Титарев В. А., Шахов Е. М. Гибридный метод расчета струи разреженного газа при истечении через очень длинный канал в вакуум // Журн. вычисл. математики и матем. физики. 2020. Т. 60, № 11. С. 1998–2011.

18. Tatsios G., Valougeorgis D., Stefanov S.K. Reconsideration of the implicit boundary conditions in pressure driven rarefied gas flows through capillaries // Vacuum. 2019. Vol. 160. P. 114–122.

Статья поступила в редакцию 21 апреля 2023 г.,
после доработки — 2 июля 2023 г.,
принята к публикации 17 августа 2023 г.