

РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ТЕЧЕНИЯ ГАЗА В КАНАЛАХ С ШЕРОХОВАТОЙ СТЕНКОЙ

М.А. Кузнецов

Научный руководитель: профессор, д.т.н. В.И. Токманцев

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,

Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19, 620002

E-mail: maxbsp@mail.ru

COMPUTATION OF GAS FLOW PARAMETERS IN CHANNELS WITH ROUGH WALL

M.A. Kuznetsov

Scientific Supervisor: Prof., Dr. V.I. Tokmantsev

Ural Federal University, Russia, Yekaterinburg, Mira str., 19, 620002

E-mail: maxbsp@mail.ru

***Abstract.** In this paper gas flow parameters in channels with rough wall are calculated. Computation was performed using direct simulation Monte Carlo method. Effect of wall microstructure on flow parameters is considered. Simulation of gas relaxation process in channel with pressure difference is carried out.*

Введение. Определение параметров газового потока в микроканалах, имеющих сложную геометрию, является актуальной задачей молекулярной физики. Решение данной задачи может быть применимо при проектировании летательных аппаратов, систем охлаждения, микроэлектромеханических систем (MEMS) и приборов точного измерения давления.

Учет геометрии канала и микроструктуры его поверхности имеет особое значение в свободномолекулярном и промежуточном режимах течения, поскольку в этих режимах течения вероятность столкновения между частицами относительно мала. Частицы в большинстве случаев передвигаются беспрепятственно от одной стенки системы до другой. В таких условиях существенное влияние на параметры течения оказывает взаимодействие частиц с поверхностью [1].

Математическая модель. В данной работе проводится трехмерное моделирование свободномолекулярного течения газа в микроканале с учетом шероховатости стенки. Расчет производится методом прямого статистического моделирования по методике, предложенной Бердом [2] с некоторыми изменениями для учета микрошероховатой поверхности. В расчете использовалось 10^7 модельных частиц. В начале численного эксперимента на концах канала устанавливается заданная разница давлений и температур. Затем ведется расчет на пространственной сетке с шагом по времени Δt . Внутри канала, а также, первой и второй зон строится трехмерная прямоугольная сетка, в каждой ячейке которой вычисляются осредненные за время Δt макроскопические параметры потока – числовая плотность и макроскопическая скорость. Температура на стенке в ходе всего расчета поддерживается при заданном значении. В зоне 1 температура задается как T_1 , в зоне 2 – T_2 . На поверхности канала поддерживается линейный градиент температуры от значения T_1 до значения T_2 .

Моделируемая система условно делится на три зоны (рис. 1): зона 1 (входная зона), зона 2 (выходная зона), зона канала. В каждой зоне выделяются поверхности, с которыми может происходить столкновение. На рисунке 1 номерами обозначены поверхности: 1 - цилиндрическая поверхность,

ограничивающая зоны 1 и 2; 2 и 3 – левая и правая стенки зоны 1 и 2 соответственно; 4 и 5 – правая и левая стенки с отверстием зон 1 и 2 соответственно; 6 – поверхность канала.

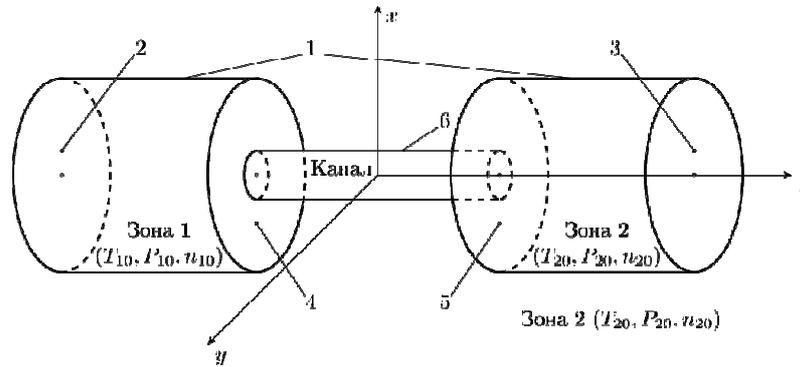


Рис. 1. Геометрия модельной системы

В начальный момент времени частицы в каждой из зон распределяются равномерно по всему объему зоны, в соответствии со значением числовой плотности в данной зоне. Скорости частиц разыгрываются как случайные векторные значения, удовлетворяющие функции распределения Максвелла. Компоненты скоростей частиц подчиняются вероятностному закону с функцией плотности вероятности вида:

$$f(v_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \exp\left[-\frac{mv_i^2}{2kT}\right]$$

В качестве характеристики шероховатости канала использовалась относительная высота микронеровности $h = \bar{h} / R$, где \bar{h} - средняя высота неровностей образца, R - радиус цилиндрического канала [3].

В данном исследовании применяется диффузно-зеркальная модель рассеяния на стенке. Модель принимает допущение, что некоторая часть из всех отраженных частиц рассеивается диффузно, остальные – зеркально. Вводится параметр ϵ – доля диффузно рассеянных частиц. Значение ϵ задается перед началом расчета и может находиться в пределах от 0 до 1. Модуль новой скорости при отражении от стенки разыгрывается случайно, в соответствии с законом распределения Максвелла по модулю скорости [4].

Микроструктура поверхности стенки канала моделируется на основе данных, полученных экспериментальным путем методами атомно-силовой микроскопии с реальных образцов кремния. В работе были использованы данные атомно-силовой микроскопии кремниевого образца размером (20×20) мкм с высотой микронеровностей от 0 до ~2000 нм.

Результаты. При помощи метода прямого статистического моделирования были получены профили числовой плотности вдоль оси z при перепаде температуры на концах цилиндрического канала. Значения входных параметров представлены в таблице 1. На рисунке 2 приведен график изменения числовой плотности вдоль оси цилиндра при релаксации системы в трех временных точках. Относительная погрешность приведенных данных составляет 5%. На рисунке изображены 3 графика, по которым можно проследить процесс релаксации системы. Поскольку система не обменивается частицами с внешней средой, в первой и второй зонах происходит постепенное выравнивание давления.

Из графика видно, что процесс выравнивания имеет определенный предел, что является следствием эффекта термомолекулярной разности давлений.

Таблица 1

Модельные параметры для изучения процесса релаксации системы

| Параметр | Значение | Единица измерения |
|---------------------|------------------------|-------------------|
| N | $5 \cdot 10^7$ | шт. |
| T_{10} | 500 | К |
| $P_{10}=P_{20}$ | $1 \cdot 10^{-3}$ | мм рт. ст. |
| T_{20} | 100 | К |
| ε | 1 | - |
| m | 4,0026 | а.е.м. |
| r | $0,2 \cdot 10^{-9}$ | м |
| Δt | $6,009 \cdot 10^{-6}$ | с |
| λ | $72,84 \cdot 10^{-3}$ | м |
| $R_{\text{канала}}$ | $0,7284 \cdot 10^{-3}$ | м |
| $L_{\text{канала}}$ | $2,914 \cdot 10^{-3}$ | м |

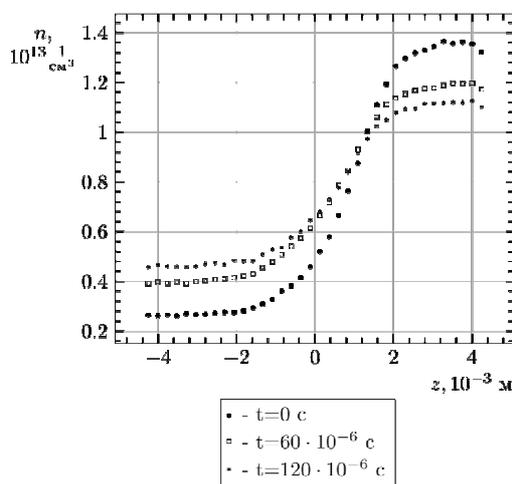


Рис. 2. График изменения числовой плотности вдоль оси канала при релаксации системы в трех временных точках

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Саксаганский Г.Л. Молекулярные потоки в сложных вакуумных структурах / Г.Л. Саксаганский. – М.: Атомиздат, 1980. – 216 с.
2. Берд, Г. Молекулярная газовая динамика / Г. Берд – М.: Мир, 1981. 319с.
3. Породнов, Б.Т. Разработка пакета прикладных программ расчёта проводимостей и распределений газодинамических параметров в различных элементах вакуумных систем при произвольном режиме течения / Б.Т. Породнов и др – Екатеринбург: УГТУ-УПИ. Отчет по НИР № 52/16/3226, 2004. 40с.
4. Ухов А.И., Породнов Б.Т., Борисов С.Ф. Аккомодация энергии гелия на чистой и частично заполненной адсорбатом поверхности вольфрама // Перспективные материалы. Специальный выпуск №8. Февраль 2010. С. 42-48.