

Simulation of Binary Gas Mixture Flow in a Cylindrical Microchannel with Moving Walls

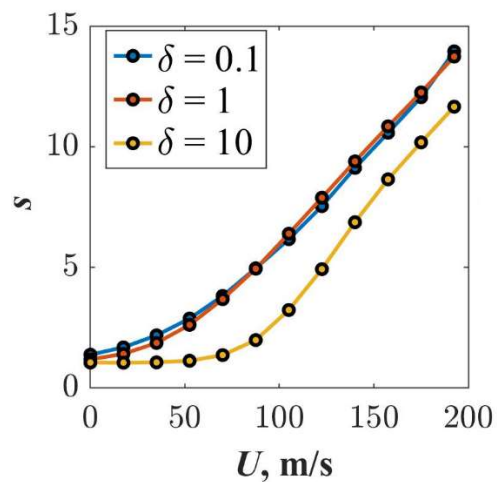
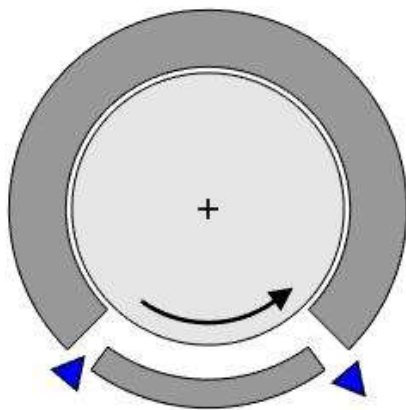
Vasiliy V. Kosyanchuk

*Institute of Mechanics of Lomonosov Moscow State University,
Moscow, 119192, Russia
vasiliy_ksnk@mail.ru*

Abstract

The paper studies the flow of a binary rarefied mixture of gases (neon-argon) in a cylindrical channel under the action of a pressure gradient and in the presence of wall rotation in the direction opposite to the gas flow. The problem is studied numerically using the direct simulation Monte Carlo (DSMC) method. It is shown that combination of pressure gradient and wall rotation leads to the effect of separation of gas mixture in rarefied flow regime. The dependence of separation effect magnitude on the wall rotation speed, gas rarefaction rate, and channel length is investigated.

Keywords: rarefied gas, separation of gas mixtures, direct simulation Monte Carlo (DSMC), molecular pump



Schematic representation of the problem (from the left). Separation factor versus inner cylinder rotation speed at different gas rarefaction rates δ (from the right)

УДК 533.5

Моделирование течения бинарной смеси газов в цилиндрическом микроканале с подвижными стенками

В. В. Косьянчук

*Научно-исследовательский институт механики
Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова,
Россия, Москва, 119192, Мичуринский проспект 1
vasiliy_ksnk@mail.ru*

Аннотация

В работе исследуется течение разреженной смеси газов (неон-аргон) в цилиндрическом канале под действием градиента давления и при наличии вращения стенок в направлении противоположном потоку газа. Задача изучается численно с использованием метода прямого статистического моделирования Монте-Карло (ПСМ). Показано, что комбинация градиента давления и вращения стенок приводит к эффекту разделения газовой смеси при течении в разреженном режиме. Исследована зависимость эффекта разделения от скорости вращения стенок, степени разреженности газа и длины канала.

Ключевые слова: разреженный газ, разделение газовых смесей, метод прямого статистического моделирования Монте-Карло (ПСМ), молекулярный насос

1. Введение

Течения разреженного газа в микроканалах и прочих микроструктурах активно изучаются в последние десятилетия [1–10] в связи с применением в микроэлектромеханических системах (МЭМС) и вакуумной технике [11]. Хорошо известно, что течение Пуазейля при конечных числах Кнудсена в случае даже однокомпонентного газа отличается от течения в континуальном режиме (где известно даже точное аналитическое решение) из-за наличия проскальзывания скорости на стенках. В случае течения **смесей** газов поведение системы еще больше усложняется, что может приводить к появлению различных новых эффектов – например, к эффекту разделения компонент с разными молекулярными массами, также известному как кнудсеновская диффузия [12]. При этом многие исследования, в том числе и работы автора [13–16], показывают, что приложение дополнительных воздействий, например движение границ области, может еще больше усилить эффект разделения смеси в разреженном режиме.

В настоящей работе предлагается рассмотреть задачу о течении разреженной смеси газов в цилиндрическом канале, образованном вращающимся внутренним цилиндром и неподвижным внешним. С теоретической точки зрения данную задачу можно рассматривать как разреженное течение Пуазейля – Куэтта. С практической точки зрения постановка основана на идее молекулярного насоса, предложенного Гедё [17] еще в 1913 году (рис. 1). Основное отличие от идеи Гёде состоит в том, что мы планируем подавать на стороны системы (вход/выход) перепад давлений, направленный **против** направления работы насоса (рис. 2). Как будет показано в работе, именно такая схема позволяет достигать эффективного разделения смеси.

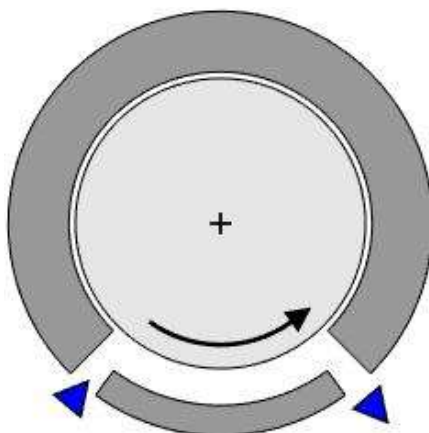


Рис. 1. Схематичное изображение молекулярного насоса Гёде. Черной стрелкой обозначено направление вращения внутреннего цилиндра, синими – направление потока газа

2. Постановка задачи

В работе рассматриваем течение бинарной смеси неон-аргон через изогнутый микроканал, образованный двумя коаксиальными цилиндрическими поверхностями, как показано на рис. 2.

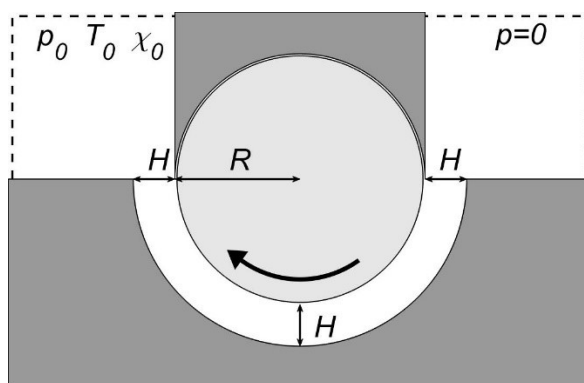


Рис. 2. Постановка задачи

Высота канала H определяется как разность радиусов двух цилиндров, длина канала определяется радиусом R внутреннего цилиндра. Зазор между вращающимся цилиндром и верхней неподвижной частью предполагается пренебрежимо малым и в постановке не учитывается. Канал соединяет два резервуара. Во входном резервуаре на границе (пунктиром) поддерживается некоторое давление p_0 , температура $T_0 = 300$ К, и концентрация неона в смеси $\chi_0 = 0.5$. Выходной резервуар постоянно вакуумируется – на границах (пунктиром) поддерживается нулевое давление. Внутренний цилиндр вращается с некоторой угловой скоростью Ω (скорость на поверхности $U = \Omega R$) **против** направления течения газа, вызванного перепадом давления. Размеры резервуаров были выбраны достаточно большими ($7H \times 7H$), чтобы их дальнейшее увеличение не влияло на целевые параметры расчета. На твердых границах предполагается рассеяние молекул с полной аккомодацией энергии и импульса. Температура стенок считается постоянной и равной T_0 .

Основной интерес в расчёте для нас представляют две величины: коэффициент разделения смеси s и общий числовой поток газа J через канал, определяемые как:

$$J = \frac{\int_{t_s}^{t_s + \Delta t_{av}} J_{Ne}(t) dt + \int_{t_s}^{t_s + \Delta t_{av}} J_{Ar}(t) dt}{\Delta t_{av}}, \quad (1)$$

$$S = \frac{\int_{t_s}^{t_s+\Delta t_{av}} J_{Ne}(t) dt}{\int_{t_s}^{t_s+\Delta t_{av}} J_{Ar}(t) dt}, \quad (2)$$

где J_{Ne}, J_{Ar} – числовые потоки компонент через выходное сечение канала; t_s – время, когда течение выходит на установившийся режим, а Δt_{av} – выбранный временной интервал осреднения для сбора достаточной статистики.

3. Численный метод

Для моделирования течения разреженного газа использовался классический подход прямого статистического моделирования Монте-Карло [18].

Для расчета динамики межмолекулярных столкновений использовалась модель переменных твердых сфер (Variable hard spheres / VHS) с параметрами из [18] (табл. 1). В соответствии с [18] параметры для столкновений пары неон-аргон взяты как средние значения параметров для неона и аргона. Выбор пар молекул для столкновения производился на основе подхода без счетчика времени (No-Time-Counter).

Таблица 1

Значения параметров модели VHS, используемые в расчетах

Сорт молекул	$d_{ref}, 10^{-10}\text{м}$	ω
Ne	2.72	0.66
Ar	4.11	0.81

Отражение молекул газа от твердых поверхностей происходило на основе диффузной модели рассеяния с полной аккомодацией энергии и импульса. В случае отражения от стенок **вращающегося** цилиндра к касательной компоненте скорости молекул также добавлялась дополнительная скорость $-U$.

При расчете использовалась равномерная квадратная сетка с размером ячейки $\Delta x = H/30$, временной шаг брался равным $\Delta t = \Delta x/4c_0$, где ($c_0 = \sqrt{2kT_0/m}$, k – постоянная Больцмана, $m = (m_{Ar} + m_{Ne})/2$). Количество используемых частиц на ячейку N_{PPC} , соответствующее входному давлению p_0 , составляло около 100. Корректность выбора $\Delta x, \Delta t, N_{PPC}$ была проверена дополнительными тестовыми расчетами (см. табл. 2): было рассмотрено шесть тестовых случаев, соответствующих $R/H = 5$, $\delta = [0.1, 1, 10]$ (определение δ см. в уравнении 4) и $U/c_0 = [0.1, 0.4]$. Сравнение проводилось по значениям числовых потоков неона и аргона – J_{Ne}, J_{Ar} . Результаты в табл. 2 даны в виде абсолютных процентных ошибок, рассчитанных относительно J_{Ne}, J_{Ar} в *референсном* случае ($\Delta x/H = 1/30$, $\Delta t \cdot c_0/\Delta x = 1/4$, $N_{PPC} = 100$):

$$\tilde{e}_{Ne/Ar} = \frac{|J_{Ne/Ar} - J_{Ne/Ar}^{ref}|}{J_{Ne/Ar}^{ref}} \times 100\% \quad (3)$$

Таблица 2

Проверка корректности выбора параметров метода ПСМ

Размер сетки $\Delta x/H$	Шаг по времени $\Delta t \cdot c_0/\Delta x$	Кол-во частиц, N_{PPC}	$\delta = 0.1,$ $U/c_0 = 0.1$	$\delta = 0.1,$ $U/c_0 = 0.4$	$\delta = 1,$ $U/c_0 = 0.1$	$\delta = 1,$ $U/c_0 = 0.4$	$\delta = 10,$ $U/c_0 = 0.1$	$\delta = 10,$ $U/c_0 = 0.4$
			$\tilde{e}_{Ne}/\tilde{e}_{Ar}$	$\tilde{e}_{Ne}/\tilde{e}_{Ar}$	$\tilde{e}_{Ne}/\tilde{e}_{Ar}$	$\tilde{e}_{Ne}/\tilde{e}_{Ar}$	$\tilde{e}_{Ne}/\tilde{e}_{Ar}$	$\tilde{e}_{Ne}/\tilde{e}_{Ar}$
1/100	1/4	100	0.24/0.27	0.08/0.13	0.35/0.04	0.24/0.01	0.30/0.11	0.22/0.05
1/30	1/10	100	0.27/0.19	0.07/0.42	0.15/0.13	0.51/0.25	0.23/0.20	0.02/0.03
1/30	1/4	300	0.04/0.03	0.29/0.24	0.24/0.37	0.29/0.25	0.12/0.05	0.08/0.25

4. Результаты

Полный набор **безразмерных** параметров задачи состоит из **трех** величин:

$$\frac{U}{c_0}, \delta = \frac{p_0 H}{\mu_0 c_0}, \frac{R}{H} \quad (4)$$

где δ – степень разреженности газа, обратно пропорциональная числу Кнудсена, $\mu_0 = 26.6344$ Па·с – значение динамической вязкости входной смеси при температуре T_0 . Значения потоков J , которые будут представлены в разделе 4.2, будут нормированы на $J_0 = n_0 c_0 H$, где $n_0 = p_0 / k T_0$.

4.1. Эффект разделения

Для объяснения эффекта разделения в данной системе будем отталкиваться от следующего предположения (его справедливость будет обсуждена чуть ниже). Положим, что числовые потоки компонент линейно зависят от скорости вращения цилиндра, и при этом линейный коэффициент не зависит от сорта газа:

$$J_{Ne/Ar}(U) = J_{Ne/Ar}^0 - C \cdot U, \quad (5)$$

где C – линейный коэффициент. Тогда, учитывая, что в разреженном режиме $J_{Ne}^0 > J_{Ar}^0$ (за счет меньшей массы частиц), получаем, что коэффициент разделения зависит от U как

$$s = \frac{J_{Ne}}{J_{Ar}} = 1 + \frac{J_{Ne}^0 - J_{Ar}^0}{J_{Ar}^0 - C \cdot U} \quad (6)$$

С ростом U до J_{Ar}^0 / C знаменатель дроби убывает до нуля, а само выражение (6) растет (в теории до бесконечности), что и представляет собой усиление эффекта разделения (чем выше s , тем сильнее разделение). Несмотря на то, что у формулы (5) есть явные ограничения (например, в реальности поток газа не может стать отрицательным, т.к. выходной резервуар вакуумируется), результаты ниже показывают, что она довольно неплохо описывает реальные результаты.

Обоснованность применения формулы (5) обеспечивается результатами расчетов (рис. 3).

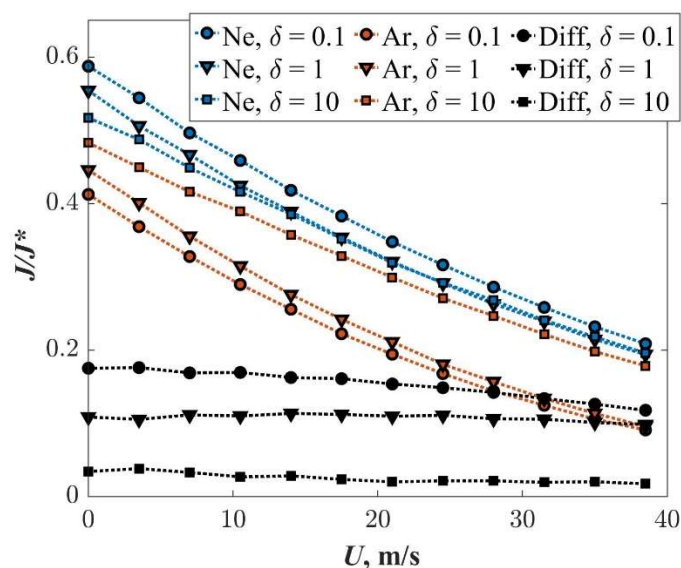


Рис. 3. Результаты расчетов. Изменение потоков компонент (Ar/Ne), а также их разность (diff), с увеличением скорости вращения диска U . Потоки нормированы на J^* – общий поток смеси при том же δ и нулевой скорости вращения диска

Можно видеть, что при достаточно малых U потоки компонент действительно убывают практически линейно с ростом U и коэффициент линейности не зависит от сорта газа (это подтверждается постоянным уровнем $J_{diff} = J_{Ne} - J_{Ar}$). При больших значениях U зависимость (5) перестает быть линейной, однако J_{diff} все еще изменяется слабо, за счет чего справедливость выражения (6) не изменяется (с условием замены линейного выражения в знаменателе на нелинейное).

4.2. Параметрический анализ

Параметрический анализ был начат с исследования влияния двух основных параметров – U и δ . Результаты на рис. 4 явно свидетельствуют о наличии эффекта разделения (увеличение s с ростом скорости вращения цилиндра). При этом можно отметить, что для наличия эффекта не требуется сильно разреженный режим ($\delta = 0.1$). Более того, переходный режим ($\delta = 1$) является даже более предпочтительным – зависимости $s(U)$ практически идентичны при $\delta = 0.1$ и $\delta = 1$, но в то же время поток газа J при $\delta = 1$ примерно на порядок больше. Дальнейшее увеличение плотности газа ($\delta = 10$) имеет уже неоднозначный эффект – поток газа становится выше, однако разделение заметно ослабевает.

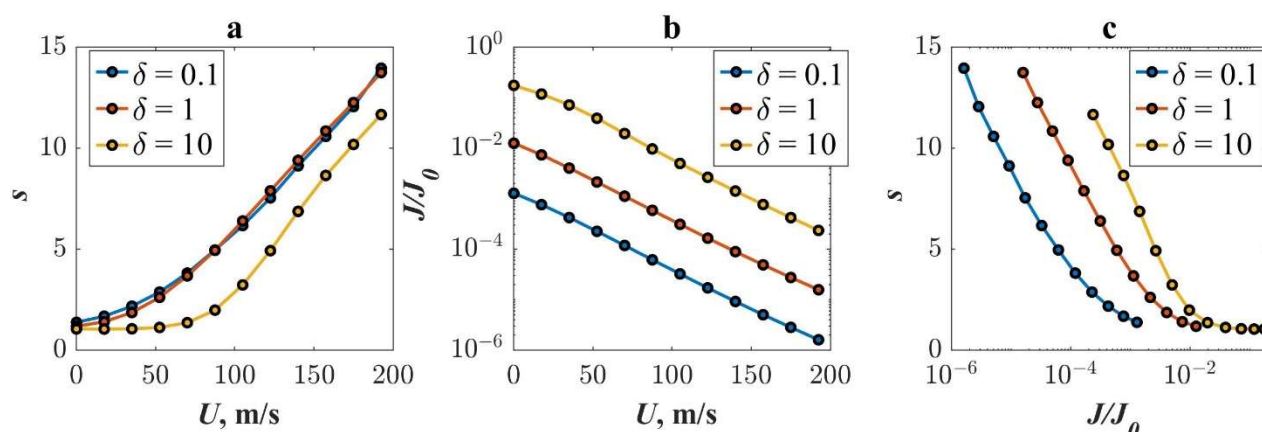


Рис. 4. Результаты расчетов при $R/H = 5$. Зависимость коэффициента разделения s (a) и потока газа J (b) от скорости вращения стенок U при разных δ . (c) данные с рисунков (a) и (b) в осях $J - s$

Выбор оптимального δ в этом случае зависит от наличия ограничений на скорость вращения цилиндра. В случае, если мы считаем скорость условно неограниченным параметром, то большие δ являются предпочтительными с точки зрения практики (рис. 4, c), т.к. позволяют получать более высокие потоки при тех же уровнях s или же более высокие коэффициенты разделения s при тех же величинах потока. В случае же ограничения на скорость вращения, плотные режимы ($\delta \geq 10$) могут оказаться непрактичными – ощутимый эффект усиления разделения наблюдается только при скоростях порядка 100 м/с (рис. 4, a), в то время как для $\delta \leq 1$ эффект наблюдается уже при скоростях порядка 10 м/с.

Далее мы переходим к анализу влияния соотношения размеров цилиндра и ширины канала. Результаты для разных R/H и U представлены на рис. 5. Как видно, увеличение радиуса цилиндра (и, соответственно, эффективной длины канала) имеет вполне ожидаемый эффект – с ростом R/H увеличивается эффект разделения, т.к. растет среднее время нахождения молекул в канале, и вместе с этим эффективная длина зоны, где проявляется эффект. В то же время более длинные каналы характеризуются более низкими потоками газа, что также вполне ожидаемо. С точки зрения практики, выбор R/H , как и выбор δ , не совсем однозначен. С одной стороны, большие R/H позволяют получать эффект при более низких скоростях вращения цилиндра (рис. 5, a). С другой стороны, при отсутствии ограничений на скорость вращения, короткие каналы дают выигрыш по паре параметров (s, J) по сравнению с длинными (рис. 5, c).

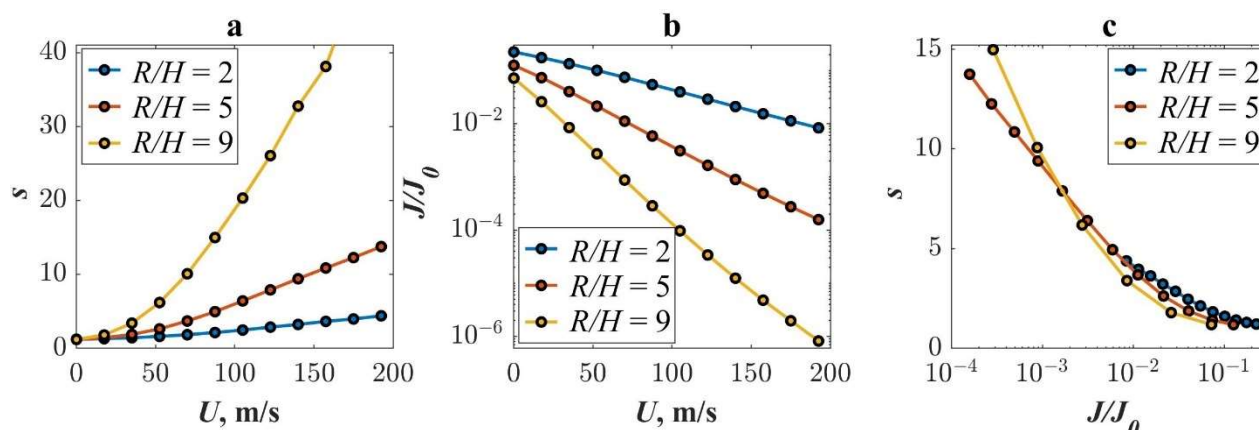


Рис. 5. Результаты расчетов при $\delta = 1$. Зависимость коэффициента разделения s (а) и потока газа J (б) от скорости вращения стенок U при разных R/H . (с) данные с рисунков (а) и (б) в осях $J - s$

5. Заключение

В работе проведено численное исследование течения неон-аргоновой смеси газов в цилиндрическом канале, образованном двумя коаксиальными цилиндрами. Показано, что вращение внутреннего цилиндра против потока газа может приводить к эффекту разделения смеси при течении газа в разреженном режиме. Получено, что для наличия эффекта не обязательно наличие высокого уровня разрежения газа и больших скоростей вращения. Оптимальные с практической точки зрения значения радиуса цилиндра и степени разреженности газа зависят от наличия ограничений на скорость вращения стенок. При низких скоростях вращения (10 м/с и меньше) предпочтительными являются большие отношения радиуса цилиндра к ширине канала, а также более высокие степени разреженности. При отсутствии жестких ограничений на скорости вращения, наоборот – предпочтительнее малые радиусы цилиндра и более плотные режимы течения, т.к. они дают лучшее соотношение коэффициента разделения и потока газа.

Благодарности и ссылки на гранты

Представленная работа выполнена в соответствии с планом научных исследований научно-исследовательского института механики МГУ при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-71-10057).

Литература

1. Sazhin O. Pressure-driven flow of rarefied gas through a slit at a various pressure ratios // *Journal of Vacuum Science & Technology A*. 2012. Vol. 30, issue 2. <https://doi.org/10.1116/1.3682457>
2. Taheri P., Struchtrup H. Poiseuille flow of moderately rarefied gases in annular channels // *International journal of heat and mass transfer*. 2012. Vol. 55, issue 4. Pp. 1291–1303.
3. Varoutis S., Day C., Sharipov F. Rarefied gas flow through channels of finite length at various pressure ratios // *Vacuum*. 2012. Vol. 86, issue 12. Pp. 1952–1959. DOI: 10.1016/j.vacuum.2012.04.032
4. Sharipov F. Transient flow of rarefied gas through a short tube // *Vacuum*. 2013. Vol. 90. Pp. 25–30. <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2012.09.021>
5. Подрыга В. О. Многомасштабный подход к трехмерному расчету течений газов и их смесей в микроканалах технических систем // *Доклады Академии Наук*. 2016. Т. 469. № 6. С. 656–658.
6. Титарев В. А., Шахов Е. М. Кинетический анализ изотермического течения в длинном микроканале прямоугольного поперечного сечения // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2010. Т. 50. № 7. С. 1285–1302. <https://doi.org/10.1134/S0965542510070110>

7. Конопелько Н. А., Титарев В. А., Шахов Е. М. Нестационарное течение разреженного газа в микроканале из-за распада разрыва давления // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2016. Т. 56. № 3. С. 476–489. <https://doi.org/10.7868/S0044446691603011X>
8. Иванов И. Э., Крюков И. А., Тимохин М. Ю. Применение системы уравнений R13 для моделирования течений в микроканалах // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2013. Т. 14, вып. 2. <http://chemphys.edu.ru/issues/2013-14-2/articles/388/>
9. Ларина И. Н., Рыков В. А. Численное исследование нестационарных течений двухатомного разреженного газа в плоском микроканале // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2014. Т. 54. № 8. С. 1332–1344. <https://doi.org/10.7868/S00444466914080080>
10. Jousten K. (ed.). Handbook of vacuum technology. John Wiley & Sons. 2016. 512 p.
11. Kalempa D., Sharipov F. Flows of rarefied gaseous mixtures with a low mole fraction. Separation phenomenon // European Journal of Mechanics-B/Fluids. 2011. Vol. 30. № 4. Pp. 466–473. <https://doi.org/10.1016/j.euromechflu.2011.03.004>
12. Ковалев В. Л., Косьянчук В. В., Якунчиков А. Н. Свободномолекулярное течение газа через колеблющуюся мембрану // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. 2014. № 4. С. 119–124.
13. Косьянчук В. В., Якунчиков А. Н. Свободномолекулярное течение газа в канале с изгибающейся границей // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. 2018. № 3. С. 87–97. DOI: 10.7868/S056852811803009X
14. Kosyanchuk V. V. Separation of binary gas mixture in a microchannel with oscillating barriers // Physics of Fluids. 2022. Vol. 34. № 10. <https://doi.org/10.1063/5.0117665>
15. Kosyanchuk V. V. Numerical study of microdevice with surface acoustic waves for separation of gas mixtures // Physics of Fluids. 2023. Vol. 35. № 8. <https://doi.org/10.1063/5.0157497>
16. Gaede W. The external friction of gases and a new principle for vacuum pumps: The molecular pump // Phys. 1912. Vol. 13. P. 864.
17. Bird G. A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. Oxford university press, 1994, 416 p.

References

1. Sazhin O., Pressure-driven flow of rarefied gas through a slit at a various pressure ratios, *Journal of Vacuum Science & Technology A*, 2012, vol. 30, issue 2. <https://doi.org/10.1116/1.3682457>
2. Taheri P., Struchtrup H., Poiseuille flow of moderately rarefied gases in annular channels, *International journal of heat and mass transfer*, 2012, vol. 55, issue 4. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2011.09.012>
3. Varoutis S., Day C., Sharipov F., Rarefied gas flow through channels of finite length at various pressure ratios, *Vacuum*, 2012, vol. 86, issue 12. <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2012.04.032>
4. Sharipov F., Transient flow of rarefied gas through a short tube, *Vacuum*, 2013, vol. 90. <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2012.09.021>
5. Podryga V. O., Multiscale approach to three-dimensional calculation of gas flows and their mixtures in microchannels of technical systems, *Doklady Akademii Nauk*, 2016, vol. 469, issue 6 [in Russian].
6. Titarev V. A., Shakhov E. M., Kinetic analysis of the isothermal flow in a long rectangular microchannel, *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2010, vol. 50, issue 7. <https://doi.org/10.1134/S0965542510070110>
7. Konopel'ko N. A., Titarev V. A., Shakhov E. M., Unsteady rarefied gas flow in a microchannel driven by a pressure difference, *Comput. Math. Math. Phys.*, 2016, vol. 56, issue 3, pp. 470–482. <https://doi.org/10.1134/S0965542516030106>

8. Ivanov I. E., Kryukov I. A., Timohin M. Yu., Application of the R13 system of equations to modeling flows in microchannels, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2013, vol. 14, issue 2 [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2013-14-2/articles/388/>
9. Larina I. N., Rykov V. A., Numerical study of unsteady rarefied diatomic gas flows in a plane microchannel, *Comput. Math. Math. Phys.*, 2014, vol. 54, issue 8. <https://doi.org/10.1134/S0965542514080065>
10. Jousten K. (ed.), *Handbook of vacuum technology*, John Wiley & Sons, 2016, 512 p.
11. Kalempa D., Sharipov F., Flows of rarefied gaseous mixtures with a low mole fraction. Separation phenomenon, *European Journal of Mechanics-B/Fluids*, 2011, vol. 30, issue 4. <https://doi.org/10.1016/j.euromechflu.2011.03.004>
12. Kovalev V. L., Kos'yanchuk V. V., Yakunchikov A. N., Free-molecular gas flow through an oscillating membrane, *Fluid Dynamics*, 2014, vol. 49, pp. 524–529 <https://doi.org/10.1134/S0015462814040127>
13. Kosyanchuk V. V., Yakunchikov A. N., Free-Molecular Gas Flow in a Channel with Curving Boundary, *Fluid Dynamics*, 2018, vol. 53, issue 3, pp. 417–427. <https://doi.org/10.1134/S0015462818030114>
14. Kosyanchuk V. V., Separation of binary gas mixture in a microchannel with oscillating barriers, *Physics of Fluids*. 2022. Vol. 34. issue 10. <https://doi.org/10.1063/5.0117665>
15. Kosyanchuk V. V., Numerical study of microdevice with surface acoustic waves for separation of gas mixtures, *Physics of Fluids*, 2023, vol. 35, issue 8. <https://doi.org/10.1063/5.0157497>
16. Gaede W., The external friction of gases and a new principle for vacuum pumps: The molecular pump, *Phys.*, 1912, vol. 13.
17. Bird G. A., *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*. Oxford university press, 1994, 416 p.

Статья поступила в редакцию 1 ноября 2024 г.