

А.П. Крюков, В.Ю. Левашов, И.Н. Шишкова

Московский энергетический институт (технический университет), Россия

ТЕЧЕНИЯ ПАРОГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ В МИКРО- И НАНОСИСТЕМАХ ПРИ НАЛИЧИИ ИСПАРЕНИЯ-КОНДЕНСАЦИИ

АННОТАЦИЯ

В работе изучается процесс перекоденсации при наличии неконденсируемого компонента, а также в качестве частного случая, задача теплопереноса через плоский слой газа. Вблизи границы раздела фаз, т.е. на расстоянии нескольких длин свободного пробега молекул решение осуществляется с помощью метода прямого численного решения кинетического уравнения Больцмана. За пределами этой области используются уравнения механики сплошной среды. Представлены зависимости плотности, температуры и плотности потока массы для каждого из компонентов газовой смеси.

1. ВВЕДЕНИЕ

Активно ведущиеся в ряде научных центров разработки различных микромашин и микроустройств, бурное развитие нанотехнологий обуславливают интерес к изучению процессов переноса в системах, характерный размер которых имеет порядок микро-, нано-, десятки и сотни нанометров. В этой связи становятся актуальными исследования течений газов и смесей в каналах соответствующих размеров при наличии процессов испарения – конденсации на стенках этих каналов. В представляемой работе на примере задачи о перекоденсации исследуются такого рода течения при числах Кнудсена (Kn), определяемых как отношение средней длины свободного пробега газа или пара к характерному размеру рабочей ячейки или устройства, порядка 0.01. Поскольку при нормальных условиях средняя длина свободного пробега, например, азота составляет $\sim 0.6 \cdot 10^{-7}$ м, водяного пара $\sim 0.4 \cdot 10^{-7}$ м, постольку полученные результаты могут быть применены для описания систем с характерными размерами соответственно 6 мкм и 4 мкм. С увеличением же рабочего давления до 1.0 МПа соответствующие приложения становятся уместными для наноканалов и наноячеек с размерами 600 нм и 400 нм.

Другая цель настоящей работы — изучение общих закономерностей поведения парогазовых смесей при наличии испарения–конденсации различными методами, сопоставление этих методов и определение областей их преимущественного применения. Стремление обеспечить прямое сравнение результатов исследования рассматриваемой проблемы путем решения, с одной стороны, уравнений сохранения механики сплошных сред, а с другой — кинетического уравнения Больцмана привело к необходимости изучения задач именно при $Kn \approx 0.01$. Понятно, что с ростом числа Кнудсена трудности решения уравнения Больцмана уменьшаются, по-

этому при успехе решения рассматриваемых задач вполне можно рассчитывать на получение соответствующих результатов для систем с характерными размерами порядка нанометра.

Следует отметить, что для случая чисел $Kn \leq 0.01$, использование кинетического уравнения во всей расчетной области связано со значительным увеличением объема вычислений, медленной сходимостью итерационного процесса, а также преждевременной его остановкой, как только погрешность метода сравнивается с малой разностью двух последовательных приближений. Один из подходов при решении такого рода задач состоит в следующем. В узких сильнонеравновесных зонах, размер которых составляет несколько средних длин свободного пробега, решается кинетическое уравнение Больцмана (КУБ), а вне этих областей — уравнения механики сплошной среды (МСС). На границе осуществляется процедура «сшивания» полученных решений. При этом результаты решения КУБ используются в качестве граничных условий для уравнений МСС [1].

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ. МЕТОД РЕШЕНИЯ

Рассматривается задача о течении парогазовой смеси в области размером L , ограниченной двумя поверхностями I и II. В настоящей работе величина L составляет 50-100 средних длин свободного пробега молекул газа (пара). Схема задачи представлена на рис.1.

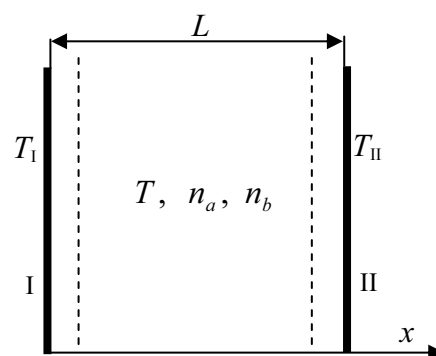


Рис. 1. Схема задачи

Температуры левой (T_I) и правой (T_{II}) поверхности считаются известными, также заданы начальные концентрации каждого компонента (n_a , n_b) и температура смеси (T). В качестве базовых параметров в

работе приняты концентрация пара n_a и температура поверхности T_l .

Для рассматриваемой задачи система кинетических уравнений Больцмана, может быть записана следующим образом [2]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_a}{\partial t} + \xi_x \frac{\partial f_a}{\partial x} &= J_{aa} + J_{ab}; \\ \frac{\partial f_b}{\partial t} + \xi_x \frac{\partial f_b}{\partial x} &= J_{bb} + J_{ba}, \end{aligned} \quad (1)$$

где J_{aa} , J_{ab} , J_{bb} и J_{ba} — интегралы столкновений, описывающие взаимодействие между молекулами соответствующих сортов; f_a и f_b — функции распределения молекул по скоростям компонента «a» и «b».

Как было отмечено выше, система уравнений (1) решается в тонких областях, расположенных на расстоянии нескольких средних длин свободного пробега молекул от границы раздела фаз. Границы этих областей обозначены на Рис.1 штриховыми линиями. Во всей остальной области решение осуществляется на основе системы уравнений сохранения для сплошной среды. В случае одномерной постановки эти уравнения имеют следующий вид [3]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} &= 0; \\ \frac{\partial \rho_b}{\partial t} + \frac{\partial \rho_b u}{\partial x} + \frac{\partial j_b^{\text{диф}}}{\partial x} &= 0; \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2) &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{4}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right); \\ \frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial \rho e u}{\partial x} &= -p \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{4}{3} \mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 - \frac{\partial q}{\partial x}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $\rho = \rho_a + \rho_b$ — плотность смеси; $\rho_b = m_b n_b$, $\rho_a = m_a n_a$ — количество вещества «a» и «b» в единице объема соответственно, p — давление смеси,

$j_b^{\text{диф}} = -\rho D \frac{\partial C_b}{\partial x}$ — диффузионный поток массы,

$C_b = \rho_b / \rho$ — массовая концентрация компонента «b», D — коэффициент взаимной диффузии,

$q = -\lambda_T \frac{\partial T}{\partial x} + (h_b - h_a) j_b^{\text{диф}}$ — поток энергии в бинарной смеси; h_a и h_b — парциальные энтальпии компонентов; λ_T — коэффициент теплопроводности смеси; e — внутренняя энергия смеси; μ — коэффициент вязкости смеси; m_a и m_b — масса молекул компонентов «a» и «b», соответственно.

Представленные уравнения записаны для сжимаемых сред — совершенных газов. Величины коэффициентов вязкости, теплопроводности и взаимной диффузии определяются, исходя из предположения, что молекулы взаимодействуют как твердые упругие шары.

При решении системы (1) за основу был взят метод прямого численного решения кинетического уравнения Больцмана [4], но использовалась другая методика вычисления интегралов столкновений,

предложенная в [5]. В рамках этой методики разработан подход к вычислению интегралов столкновений, обеспечивающий: выполнение законов сохранения и возможность изучать взаимодействие компонентов смеси различной природы, диаметры и массы молекул которых могут сильно отличаться друг от друга.

При построении численной схемы для решения (2) используется принцип расщепления исходных уравнений по физическим процессам [1]. Первоначально рассматривается система уравнений Эйлера, соответствующая невязкому, нетеплопроводному течению. Решение этой системы осуществляется по схеме SHASTA [6], имеющей второй порядок точности по координате и первый по времени. На следующем этапе учитывается влияние вязкости, теплопроводности и наличие диффузионных потоков путем решения следующей системы уравнений:

$$\begin{aligned} \rho c_v \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{4}{3} \mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_T \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left((h_b - h_a) j_b^{\text{диф}} \right); \\ \rho \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{4}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right); \\ \frac{\partial \rho_b}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial C_b}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (3)$$

Для аппроксимации (3) применяется неявная схема. Полученные уравнения решаются методом обычной прогонки. В качестве начальных данных для (3) используются величины, полученные на этапе решения (2).

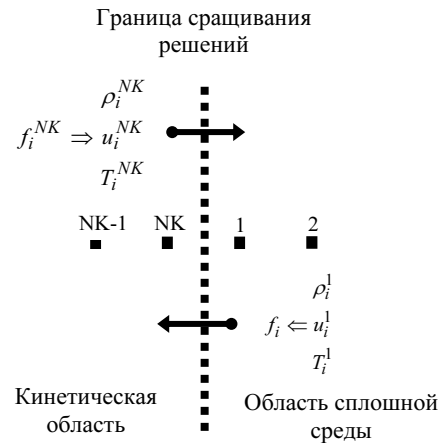


Рис. 2. Процедура сращивания решений

Особенное внимание в работе уделяется вопросу «сшивания» полученных решений. Схематично эту процедуру иллюстрирует рис. 2. При решении (1) необходимо знать функцию распределения молекул, «летающих» внутрь кинетической области — f_i . В качестве такой функции используется функция Чепмена—Энскога с параметрами из первой расчетной точки «области сплошной среды» — ρ_i^1 , u_i^1 , T_i^1 ($i=a,b$), т.е. $f_i = f(\rho_i^1, u_i^1, T_i^1)$. После решения (1) и вычисления макропараметров смеси в каждой расчетной точке «кинетической области»

переходят к системе (2)-(3), причем граничными условиями для этих уравнений служат макропараметры из точки НК. В настоящей работе «граница сращивания решений», изображенная на рис.2. штриховой линией, находится на расстоянии 10 средних длин свободного пробега молекул от ограничивающих поверхностей.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РЕШЕНИЯ И ИХ АНАЛИЗ

Перед использованием предлагаемого подхода к описанию течений парогазовых смесей было проведено его тестирование. В качестве первой задачи рассматривался теплоперенос через слой газа. Схема задачи представлена на рис.1. Исследуемая область заполнена газом со следующими параметрами — $n_a = 1,0$, $T = 1,0$ и $n_b \rightarrow 0$. Последнее условие означает, что второй компонент отсутствует. В момент времени $t = 0$ температура левой поверхности (I) скачком увеличивается ($T_I = 2,0$) и поддерживается постоянной в течение всего процесса, температура правой поверхности (II) также остается постоянной ($T_{II} = 1,0$). Размер области равен 50 длинам свободного пробега молекул газа, рассчитанным по температуре правой поверхности ($L = 50$). Функции распределения для молекул, покидающих межфазную поверхность, задавались в виде полумаксвеллианов с параметрами T_I , n_{al} , T_{II} , n_{aII} и нулевой переносной скоростью. Величины n_{al} , n_{aII} определялись из условия непроницаемости поверхностей I и II.

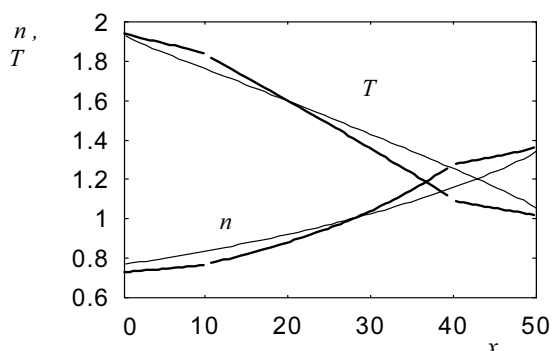


Рис. 3. Результаты решения задачи о теплопереносе

Результаты решения в безразмерном виде (здесь и далее) представлены на рис. 3. На этом рисунке и всех последующих штриховыми линиями показано «кинетическое», а сплошными — «сшивное» решения. Безразмерные n и T связаны с размерными величинами концентрации n^p и температуры T^p соотношениями: $n = n^p/n_a$ и $T = T^p/T_{II}$. Взаимосвязь размерной u^p и безразмерной U скоростей имеет вид: $U = u^p/(RT_{II})^{0.5}$. Безразмерный поток массы $J = nU$.

В задаче о теплопереносе границы I и II являются непроницаемыми. На следующем этапе рассматривалась одномерная перекоонденсация пара. В этом случае с одной из поверхностей (I) происходит ис-

парение пара, а на другой поверхности (II) — конденсация пара.

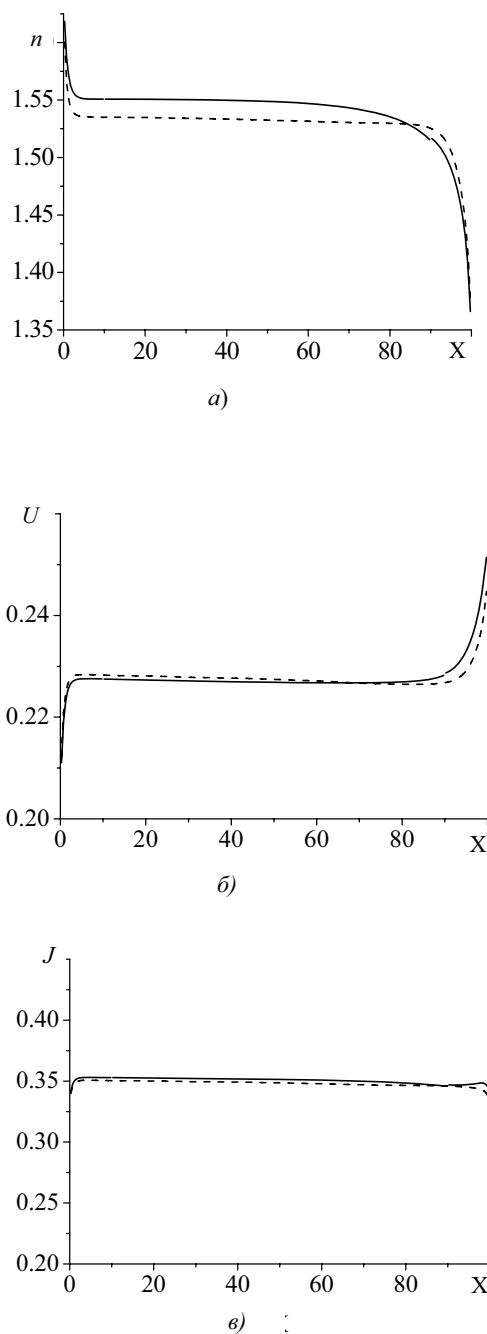


Рис. 4. Зависимости: концентрации (а), скорости (б) и плотности потока массы (в) от координаты x для задачи о перекоонденсации

В начальный момент времени исследуемая область заполнена паром с концентрацией $n_a=1,0$, температурой $T = 1,0$ °С. Как и в первом случае, второй компонент отсутствует, т.е. $n_b \rightarrow 0$. Размер области составляет 100 средних длин свободного пробега ($L=100$). Функции распределения для молекул, покидающих межфазную поверхность, задавались в виде полумаксвеллианов с параметрами T_I , n_{al} , T_{II} , n_{aII} и нулевой переносной скоростью. При этом предполагалось, что $n_{al} = 2n_{aII}$ и $T_I \approx T_{II}$. Результаты решения представлены на рис. 4.

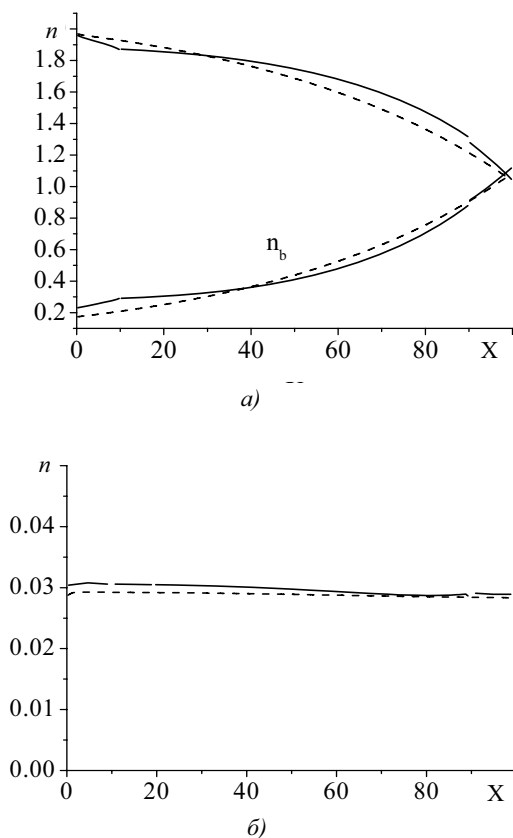


Рис. 5. Результаты решения задачи о переконденсации в присутствии неконденсируемого компонента: (а) концентрации компонент; (б) плотность потока массы

После получения тестовых результатов в задачах с различными типами граничных условий (непроницаемые поверхности и межфазные границы, на которых происходят процессы испарения-конденсации) была рассмотрена переконденсация в присутствии неконденсируемого компонента. Схема этой задачи показана на рис. 1. Исследуемая область заполнена парогазовой смесью. Начальные концентрации пара $n_a = 1,0$, газа $n_b = 0,5$. Температура смеси $T = 1,0$ °С.

Следует отметить, что с точки зрения постановки граничных условий, переконденсация в парогазовой смеси является комбинацией рассмотренных ранее задач о теплопереносе и переконденсации в паре. С одной стороны, на межфазных поверхностях I и II осуществляется испарение-конденсация пара, а с другой — поверхности I и II непроницаемы для газа, находящегося в области. Функции распределения для молекул, покидающих межфазные поверхности, как и в предыдущих задачах, задавались в виде полумаксвеллианов с параметрами $T_I, n_{aI}, n_{bI}, T_{II}, n_{bI}, n_{bII}$ для левой и правой поверхности, соответственно. Как и ранее $n_{aI} = 2n_{aII}$, а величины n_{bI} и n_{bII} определялись из условия непроницаемости. Пред-

полагалось также, что $T_I \approx T_{II}$. Результаты представлены на рис. 5. Вычисления были проведены для случая механически идентичных молекул: $m_a = m_b$ и $d_a = d_b$.

Основным преимуществом предлагаемого «сшивного» метода является то, что область использования КУБ составляет несколько длин свободного пробега молекул газа (пара). Это, в свою очередь, приводит к существенному (в 5-8 раз) сокращению времени вычислений.

Предложенный подход может быть использован для расчета не только парогазовых смесей, но и систем при наличии пыли.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект №04-02-16449 и частично №06-08-81013.

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

f_a – функция распределения молекул компонента «а» по скоростям; f_b – функция распределения молекул компонента «b» по скоростям; $\vec{\xi}$ – скорость молекулы в лабораторной системе координат; x – координата в физическом пространстве; J – интеграл столкновений; t – время, n_a – концентрация молекул сорта «а», n_b – концентрация молекул сорта «b», T – температура; p – давление; e – внутренняя энергия; μ – коэффициент динамической вязкости; λ_T – коэффициент теплопроводности смеси; ρ_a – количество вещества «а» в единице объема; ρ_b – количество вещества «b» в единице объема; C_b – массовая концентрация компонента «b»; h_a и h_b – парциальные энтальпии компонентов; D – коэффициент взаимной диффузии.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Попов С.П., Черемисин Ф.Г.** Совместное численное решение уравнения Больцмана и Навье-Стокса // Вычислительная динамика разреженного газа. М.: Вычислительный центр РАН. 2000.
2. **Коган М.Н.** Динамика разреженного газа. – М.: Наука, 1967. 440 с.
3. **Лабунцов Д.А., Ягов В.В.** Механика двухфазных систем: учеб. пособие для вузов. М.: Издательство МЭИ, 2000. 374 с.
4. **Аристов В.В., Черемисин Ф.Г.** Прямое численное решение кинетического уравнения Больцмана. М.: Вычислительный Центр РАН, 1992.
5. **I.N. Shishkova, S.S. Sazhin** A numerical algorithm for kinetic modeling of evaporation processes. // J. Comput.Phys (in press, 2006).
6. **Boris J.P., Book D.L.** Flux-corrected transport. 1.SHASTA, a fluid transport algorithm that work //J. Comput.Phys. 1973. Vol. 11. N.1 P.38—69.