

Моделирование течений газовых смесей в микроканалах

Т. А. Кудряшова, В. О. Подрыга, С. В. Поляков

*Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН
Миусская пл., д. 4, Москва, Россия, 125047*

Рассмотрены проблемы моделирования течений разреженных газовых смесей в микроканалах технических систем. Для решения подобных задач предложен подход, сочетающий вычисления по уравнениям квазигазодинамики (КГД) и молекулярно-динамические (МД) расчёты. КГД-уравнения используются для расчёта основных параметров смеси на макроуровне. МД-вычисления используются для коррекции макропараметров в кнудсеновском слое. Для апробации методики проведены расчёты истечения бинарной азотно-водородной смеси в разреженное микропространство. Полученные в расчётах стационарные характеристики течения сравнивались с параметрами, рассчитанными в рамках молекулярно-динамической модели, а также с результатами натуральных экспериментов. Сравнение показало, что в случае микронных размеров технической системы КГД-моделирование даёт качественное согласие с данными эксперимента и МД-модели. Для получения количественного совпадения результатов требуется использование реалистичных уравнений состояния компонента смеси, например, на основе вириальных разложений, согласованных с МД-моделью.

Ключевые слова: математическое моделирование, численные методы, параллельные алгоритмы, газовые смеси, газовая и молекулярная динамика, микроканалы.

1. Введение

Моделирование сверхзвуковых течений газовых смесей в микроканалах технических систем составляет основу многих современных технологий, в том числе связанных с производством новых наноматериалов. Создание математического аппарата, позволяющего исследовать течения смеси газов в случае частичного или полного нарушения гипотезы сплошности среды, является актуальной в настоящее время проблемой. В настоящей работе развивается подход, сочетающий макроскопическое описание течений многокомпонентных газовых сред с описаниями молекулярной динамики, использующимися в кнудсеновском слое вблизи стенок каналов.

В качестве модельной задачи было предложено рассмотреть сверхзвуковое течение бинарной смеси водорода и азота в разреженное микропространство. Эта задача исследовалась многими авторами (см., например, [1–3]). Здесь она рассматривается в приложении к созданию систем сверхзвукового напыления наночастиц на подложку с целью создания новых материалов для наноэлектроники.

При микронных и субмикронных размерах моделируемой системы математическая модель течения не может быть полностью сформулирована в рамках макроскопического подхода. Обычно в такой ситуации для описания течения смеси используют либо уравнения Навье-Стокса со специальными граничными условиями на стенках, либо переходят к решению уравнения Больцмана в том или ином приближении [4]. Оба способа имеют свои преимущества и недостатки. Решение на основе уравнений Навье-Стокса позволяет существенно сократить вычислительные затраты, однако число Кнудсена в рамках такого подхода не может быть больше 0,1. Решение на основе уравнения Больцмана [5–7] получается на порядок более затратным, однако диапазон чисел Кнудсена сверху не ограничен, а снизу ограничен величинами порядка 0,01, поскольку для меньших значений числа Кнудсена вычислительная процедура на базе уравнения Больцмана становится абсолютно неприемлемой с точки зрения временных затрат.

Имеются, однако, и альтернативные подходы. В частности, если задача решается в небольшой пространственной области на малых временах, то имеется возможность применения молекулярно-динамического подхода. Молекулярная динамика является одним из наиболее мощных вычислительных подходов, эффективно применяемых для моделирования физических, химических и биологических процессов. Метод молекулярной динамики (ММД) [5–7] обладает высоким пространственно-временным разрешением и позволяет получить информацию о процессах, происходящих в атомно-молекулярных масштабах и на временах порядка нескольких наносекунд. Использование ММД в полном объеме в принципе уже возможно (см., например, [8–11]), однако для реальных размеров области и конечных промежутков времени оно представляется пока преждевременным, даже при наличии очень мощных суперкомпьютеров.

На наш взгляд, наиболее продуктивным подходом к задачам подобного класса может оказаться комбинация макроскопического подхода (например, на основе уравнений Эйлера, Навье–Стокса или квазигазодинамики), описывающего среднее поле течения, и коррекция характеристик течения с помощью статистических подходов (например, на основе метода крупных частиц, уравнения Больцмана или ММД).

В данной работе представляется макроскопический подход, который базируется на уравнениях квазигазодинамики (КГД) [12], а коррекция параметров течения производится с помощью ММД. Предлагаемый общий алгоритм расчёта представляет собой расщепление по физическим процессам. КГД-система рассматривается в релаксационном приближении и является обобщением квазигазодинамических уравнений на случай смеси газов. Она решается методом конечных объёмов на подходящей сетке. Система уравнений молекулярной динамики используется в качестве подсеточного алгоритма (применяющегося внутри каждого контрольного объёма).

В рамках ММД-алгоритма взаимодействие частиц описывается с помощью потенциалов, определяющих основные свойства чистых компонент газовой смеси. Для расчёта сил взаимодействия молекул газа используется потенциал Леннарда–Джонса [13, 14], позволяющий получать достаточно точные результаты для систем, характеризующихся парным взаимодействием. Для моделирования взаимодействия частиц газа со стенками канала предложено использовать потенциал Морзе [15].

Основное внимание в данной работе уделено вопросу: работает ли КГД-модель на микронных размерах и какая МД-коррекция при этом требуется?

2. Математическая модель и компьютерная реализация

Основу математической макромодели составляет система КГД уравнений [12], записанная для каждой компоненты газа с индексом отдельно:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l + \sum_{i=1,2,3} \nabla_i \rho_l u_{l,i} = \sum_{i=1,2,3} \nabla_i \tau \left(\sum_{j=1,2,3} \nabla_j \rho_l u_{l,i} u_{l,j} \right) + \sum_{i=1,2,3} \nabla_i \tau (\nabla_i p_l), \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_l u_{l,k} + \sum_{i=1,2,3} \nabla_i \rho_l u_{l,i} u_{l,k} + \nabla_k p_l = \sum_{i=1,2,3} \nabla_i \tau \left(\sum_{j=1,2,3} \nabla_j \rho_l u_{l,i} u_{l,j} u_{l,k} \right) + \\ + \left[\sum_{i=1,2,3} \nabla_i \tau (\nabla_i p_l u_{l,k} + \nabla_k p_l u_{l,i}) + \nabla_k \tau \nabla_i p_l u_{l,i} \right] + S_l^u, \quad (2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} E_l + \sum_{i=1,2,3} \nabla_i u_{l,i} E_l + \sum_{i=1,2,3} \nabla_i u_{l,i} p_l = \sum_{i=1,2,3} \nabla_i \tau \left(\sum_{j=1,2,3} \nabla_j E_l u_{l,i} u_{l,j} \right) + \\ + \sum_{i=1,2,3} \nabla_i \tau \left(\sum_{j=1,2,3} \nabla_j 2p_l u_{l,i} u_{l,j} + \frac{1}{2} \sum_{k=1,2,3} \nabla_i u_{l,k} u_{l,k} p_l \right) + \\ + \frac{\gamma_l}{\gamma_l - 1} \sum_{i=1,2,3} \nabla_i \tau \left(\frac{p_l}{\rho_l} \nabla_i p_l + \text{Pr}_l^{-1} p_l \nabla_i \frac{p_l}{\rho_l} \right) + S_l^E, \quad (3) \end{aligned}$$

$$p_l = \left(E_l - \sum_{i=1,2,3} \frac{\rho_l u_{l,i}^2}{2} \right) (\gamma_l - 1), \quad T_l = \frac{p_l}{\rho_l \mathfrak{R}_l}, \quad l = a, b; \quad (4)$$

$$\begin{aligned} S_{a,i}^u = v_{ab} \rho_a (\overline{u_{a,i}} - u_{a,i}), \quad S_{b,i}^u = v_{ba} \rho_b (\overline{u_{b,i}} - u_{b,i}), \\ S_a^E = v_{ab} (\overline{E_a} - E_a), \quad S_b^E = v_{ba} (\overline{E_b} - E_b). \quad (5) \end{aligned}$$

Здесь $\rho_l, p_l, T_l, E_l, u_{l,i}$ — газодинамические параметры компонент смеси (плотность, давление, температура, плотность энергии, компоненты скорости), $\tau = \frac{\mu}{p}$ — время релаксации газодинамической системы (μ — вязкость смеси, p — давление в смеси), γ_l — показатели адиабат, \mathfrak{R}_l — газовые постоянные, $S_{l,i}^u, S_l^E$ — обменные члены в уравнениях для импульса и энергии, связывающие компоненты газа в единую систему, v_{ab}, v_{ba} — частоты обмена, $\overline{u_{l,i}}, \overline{E_l}$ — скорректированные газодинамические параметры.

Основные параметры смеси как целого находятся по следующим формулам:

$$\begin{aligned} \rho = \rho_a + \rho_b, \quad n = n_a + n_b, \quad p = p_a + p_b, \quad E = E_a + E_b, \\ u_i = \frac{\rho_a u_{a,i} + \rho_b u_{b,i}}{\rho}, \quad i = 1, 2, 3; \quad T = \frac{T_a n_a + T_b n_b}{n}. \quad (6) \end{aligned}$$

Определение других параметров подробно обсуждается в [12].

Параметры с чертой являются свободными. Их можно определить либо из уравнений баланса импульса и энергии с учётом дополнительных предположений о свойствах смеси, либо прямым вычислением с помощью ММД. В рамках макромодели в одножидкостном приближении [12] они вычисляются по формулам:

$$\begin{aligned} \overline{u_{a,i}} = \overline{u_{b,i}} = \frac{\rho_a u_{a,i} + \rho_b u_{b,i}}{\rho_a + \rho_b}, \quad i = 1, 2, 3; \\ \overline{T_a} = \overline{T_b} = \left(\frac{\rho_a \mathfrak{R}_a}{\gamma_a - 1} + \frac{\rho_b \mathfrak{R}_b}{\gamma_b - 1} \right)^{-1} \times \\ \times \left(\frac{\rho_a \mathfrak{R}_a T_a}{\gamma_a - 1} + \frac{\rho_b \mathfrak{R}_b T_b}{\gamma_b - 1} + \frac{1}{2} \sum_{i=1,2,3} \frac{\rho_a \rho_b (u_{b,i} - u_{a,i})^2}{(\rho_a + \rho_b)} \right), \quad (7) \\ \overline{E_l} = \frac{1}{2} \sum_{i=1,2,3} \rho_l \overline{u_{l,i}^2} + \frac{\rho_l \mathfrak{R}_l \overline{T_l}}{\gamma_l - 1}, \quad l = a, b. \end{aligned}$$

Также свободные параметры можно определить методом молекулярной динамики ММД. Использование ММД уже предлагалось нами в работах [16, 17].

Опуская общее описание данной методики, отметим только, что в рамках развиваемого подхода потенциалы взаимодействия молекул смеси в потоке (вдали от стенок) брались в форме потенциала Леннарда–Джонса с параметрами, зависящими от состава смеси и предложенными в работе [14].

Система уравнений (1)–(7) дополняется соответствующими начальными и граничными условиями. Они будут понятны из последующего рассмотрения.

Общий алгоритм решения задачи базируется на расщеплении по физическим процессам. Фактически он представляет собой схему типа предиктор–корректор, записанную на фиксированной пространственной сетке.

На каждом шаге по времени производится сначала предикторный расчёт по сеточным аналогам КГД уравнений без учёта обменных членов. В результате расчёта определяются новые макропараметры компонент и смеси в целом в каждом контрольном объёме пространственной сетки. Затем производится расчёт с целью вычисления обменных членов.

Расчёт обменных членов осуществляется либо по формулам (7), либо с помощью ММД (фактически имеется параметр, который отвечает за реализацию этой альтернативы и задаётся пользователем в начале вычислений). В первом случае мы остаёмся в рамках макромодеи. Во втором случае мы переходим на микроуровень и осуществляем подсеточные вычисления.

В случае МД-вычислений расчёт обменных членов производится с существенно более мелким шагом по времени, связанным с эволюцией молекулярной подсистемы в каждом контрольном объёме (ячейке). Критерием останова МД-расчёта является либо достижение характерного времени эволюции молекулярной системы (которое связано с линейным размером ячейки и средней скоростью молекул: $\Delta t \sim l/v$), либо изменение (на 1–2%) одного или нескольких макропараметров молекулярной системы (средний импульс, средняя кинетическая или средняя потенциальная энергии). Фактически если сильных изменений макропараметров не происходит, то расчёт производится до достижения некоторого заданного интервала Δt пропорционального времени максвеллизации молекулярной системы.

Возврат к макродинамическому расчёту осуществляется путём вычисления обменных членов в каждой точке сетки и коррекцией газодинамических параметров по КГД уравнениям с учётом обменных членов.

Параллельная компьютерная реализация данного алгоритма предполагает использование кластера (или суперкомпьютера) с гибридной архитектурой, имеющего на каждом узле несколько многоядерных центральных и возможно несколько графических процессоров (ЦПУ и ГПУ). Распараллеливание алгоритма производится на принципах геометрического параллелизма и разделения областей. В частности, основной газодинамический расчёт производится по дискретным КГД уравнениям на сетке, распределённой между узлами кластера с помощью техники «domain decomposition» (см., например, [18]). Внутри узла КГД-вычисления распределяются между потоками ЦПУ. Вычисление обменных членов возлагается на графические процессоры при их наличии (в противном случае эти вычисления также производятся потоками ЦПУ). Распараллеливание КГД-вычислений между потоками ЦПУ также производится геометрическим способом. Распараллеливание МД-вычислений производится путём разбиения всего множества молекул, относящихся к одному узлу сетки, на группы примерно одинаковой мощности. В итоге каждый блок (варц) ГПУ обрабатывает одну или несколько молекулярных групп, относящихся к одному или нескольким узлам сетки.

Программная реализация алгоритма основана на гибридной технологии MPI + OpenMP + CUDA, представленной нами в [19].

3. Результаты моделирования

На данном этапе разработки компьютерной модели были проведены две калибровки алгоритма. Первая касалась молекулярно-динамической части и приведена в работе [16]. Суть калибровки состояла в том, чтобы убедиться, что в

условиях свободного истечения газа в разрежённое пространство МД-алгоритм и КГД-система дают близкие значения макропеременных при расчёте течения каждого из компонент смеси по отдельности.

В настоящей работе было проведено подробное исследование КГД-модели, записанной в одножидкостном приближении [12]. Основной задачей было повторение в расчётах результатов натуральных экспериментов, представленных в работе [3]. Для этого были проведены расчёты течения чистых компонент, а также их смеси с параметрами, указанными на рис. 1 и в табл. 1–3. Для простоты анализа расчёт проводился только в зоне свободного распространения газа (без учёта стенок). Сопло Ловалья считалось идеальным, то есть предполагалось, что энергия газа сохраняется при перемещении по соплу, давление газа на выходе совпадает с давлением в среде, а скорость течения максимальна [20].

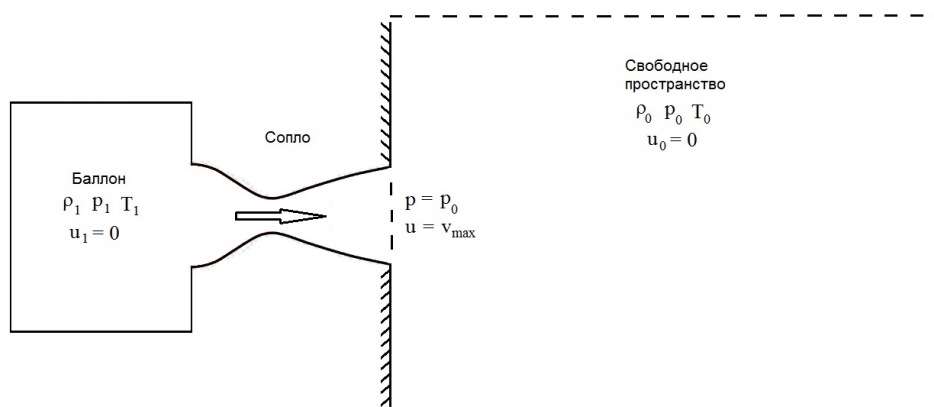


Рис. 1. Геометрия вычислительного эксперимента и расчётная область (справа, выделена прерывистой линией)

Таблица 1

Основные параметры расчётов

Размеры расчётной области, мкм	Диаметр сопла на выходе, мкм	Давление в баллоне, Па	Температура в баллоне, К	Начальное давление в среде, Па	Начальная температура в среде, К
60 × 30	6	10 ⁵	295	10 ³	295

Таблица 2

Варианты расчётов

№ варианта расчёта	Объёмное отношение водорода к азоту в баллоне	Плотность водорода в баллоне, кг/м ³	Плотность азота в баллоне, кг/м ³	Начальная плотность водорода в среде, кг/м ³	Начальная плотность азота в среде, кг/м ³
1	1:1	4,09 × 10 ⁻²	5,73 × 10 ⁻¹	4,09 × 10 ⁻⁴	5,73 × 10 ⁻³
2	2:1	5,47 × 10 ⁻²	3,83 × 10 ⁻¹	5,47 × 10 ⁻⁴	3,83 × 10 ⁻³
3	1:2	2,73 × 10 ⁻²	7,63 × 10 ⁻¹	2,73 × 10 ⁻⁴	7,63 × 10 ⁻²
4	1:0	8,22 × 10 ⁻²	—	8,22 × 10 ⁻⁴	—
5	0:1	—	1,14	—	1,14 × 10 ⁻²

Таблица 3

Параметры газов

Газ	d , м	m , кг	R , Дж/(кг·К)	γ	Pr	ω	μ_{ref} , Па·с
H ₂	$2,97 \times 10^{-10}$	$3,32 \times 10^{-27}$	$4,124 \times 10^3$	1.410	0,74	0,66	$1,865 \times 10^{-4}$
N ₂	$3,68 \times 10^{-10}$	$4,65 \times 10^{-26}$	$2,968 \times 10^2$	1,404	0,74	0,85	$2,107 \times 10^{-4}$

*) Здесь приняты традиционные обозначения: d и m — диаметр и масса молекулы газа, R — газовая постоянная, γ — показатель адиабаты, Pr — Число Прандтля, ω — показатель степени в зависимости вязкости от температуры, μ_{ref} — референсное значение вязкости при температуре 273 К.

В результате проведённых экспериментов было показано (см. ниже), что качественно основные параметры течения (распределения плотности, давления и температуры на оси симметрии расчётной области) повторяют полученные в эксперименте [3]. Количественное сравнение выполнить не удалось по причине отсутствия полных данных об экспериментальной установке, в частности, параметрах сопла, времени измерения характеристик течения и др.

Перейдём к обсуждению результатов. На рис. 2 показаны распределения основных параметров течения: плотности, давления, температуры, модуля скорости, — вдоль оси симметрии расчётной области. Плотность, давление и температура нормированы на параметры воздуха при нормальных условиях. Модуль скорости нормирован на скорость водорода при выходе из сопла. Представленные данные показывают, что в чистых газах устанавливается почти гауссовы профили плотности, давления и температуры. Кривые для разных газов отличаются фактически только абсолютной величиной, определяющейся в основном массой молекулы.

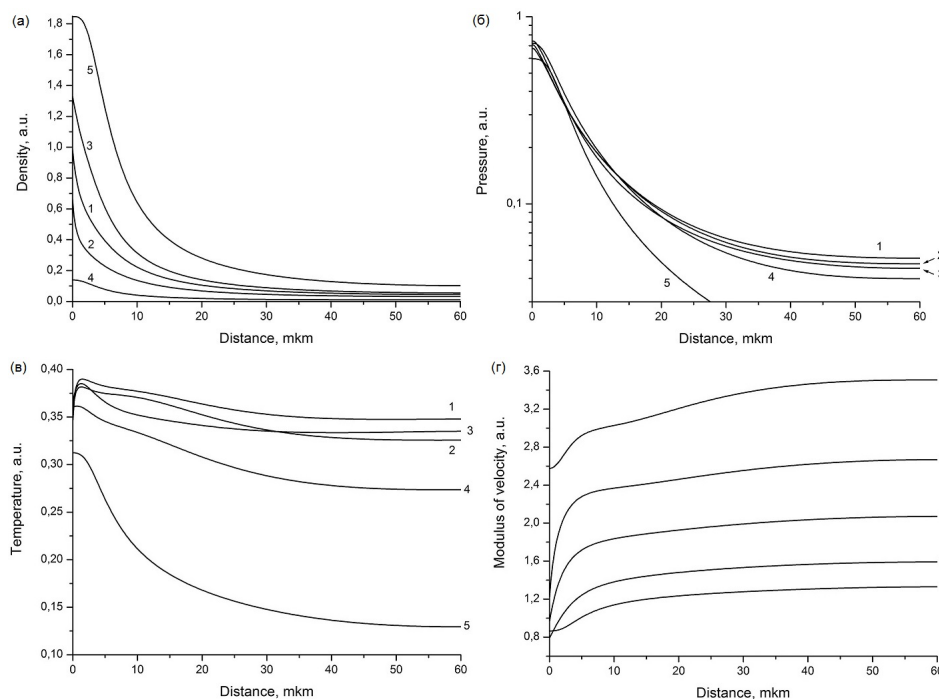


Рис. 2. Распределения основных параметров течения: плотности (а), давления (б), температуры (в), модуля скорости (г), — вдоль оси симметрии расчётной области. Цифрами 1, 2, 3, 4, 5 обозначены кривые, соответствующие вариантам расчёта 1, 2, 3, 4, 5

В случае смеси газов формирование профиля начинается ещё в диффузоре сопла и в данном расчёте не воспроизводится. Температурные кривые имеют более сложную форму и отличаются вследствие различия в соотношениях газов в смеси. Профили модуля скорости, напротив, имеют сложный рельеф для чистых газов, а для смеси просто выходят на насыщение в конце трассы распространения.

На рис. 3 приведены распределения массовой и объёмной долей водорода в смеси для вариантов расчёта 1–3. Они показывают, что водород накапливается вблизи сопла, а также в конце трассы. Первое связано с постоянным притоком водорода из сопла, который тормозится атомами азота. Второе связано с тем, что молекулы водорода движутся почти в 4 раза быстрее и к концу трассы приходят в большем количестве.

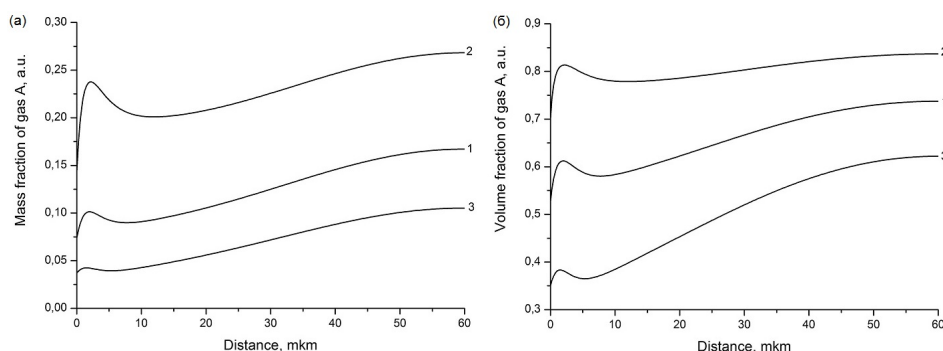


Рис. 3. Распределения массовой (а) и объёмной (б) доли водорода в смеси вдоль оси симметрии расчётной области. Цифрами 1, 2, 3 обозначены кривые, соответствующие вариантам расчёта 1, 2, 3

Одной из целей работы было выяснение вопроса, необходима ли молекулярно-динамическая коррекция параметров течения внутри потока (вне кнудсеновского слоя). Для этого был приведён следующий расчёт. Стационарный профиль параметров смеси вдоль оси симметрии был принят за входной для молекулярно-динамической процедуры. Теоретически после МДМ-пересчёта можно было ожидать нескольких результатов: (1) характеристики течения не изменятся; (2) характеристики течения изменятся, но не существенно; (3) характеристики течения изменятся кардинально. Результаты расчётов, показанные частично на рис. 4, показывают, что на практике реализуется ситуация (2), а именно: а) распределение плотности и модуля скорости практически не изменяются (поскольку при МД-расчёте плотность и суммарный импульс в каждой расчётной ячейке сетки мы считаем постоянными), б) распределения давления и температуры отличаются фактически только величиной. Последнее вызвано тем, что на молекулярном уровне учитывается взаимодействие молекул друг с другом. На макроуровне это соответствует уравнению состояния в форме Ван-дер-Ваальса или Вириального разложения [21]. В итоге можно сказать, что МД-коррекция газодинамических переменных внутри потока не требуется, если использовать уравнение состояния согласованное с МД-моделью.

4. Заключение

В заключение сформулируем основные выводы работы.

Во-первых, проведённые расчёты течения на основе макроскопической КГД-модели показали, что при микронных размерах расчётной области гипотеза сплошности в потоке не нарушается и получаемые численные результаты качественно согласуются с результатами натуральных экспериментов. Поэтому, вычисление обменных членов можно производить на макроуровне в одножидкостном приближении. Однако это не касается стенок микроканала, где точный ответ ещё предстоит выяснить.

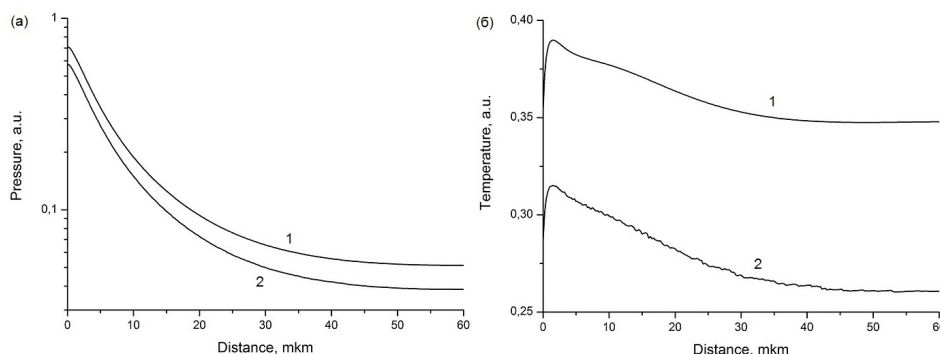


Рис. 4. Распределения давления (а) и температуры (б) смеси вдоль оси симметрии расчётной области, рассчитанные для варианта 1 по макромодели (кривые 1) и пересчитанные методом молекулярной динамики (2)

Во-вторых, для достижения количественного совпадения численных результатов, получаемых с помощью КГД-модели, с результатами натурных экспериментов следует использовать уравнение состояния для компонент смеси в виде вириальных разложений, коэффициенты которых либо взяты из таблиц свойств веществ, либо (что точнее) вычислены по одной из известных методик (см., например, [22]) на основе параметров используемых потенциалов межмолекулярного взаимодействия.

Литература

1. Wu Y., Lee C. H. Kinetic Theory of Shock Tube Problems for Binary Mixtures // Phys. Fluids. — 1971. — Vol. 14, No 2. — Pp. 313–322.
2. Garzo V., Santos A., Brey J. J. A Kinetic Model for a Multicomponent Gas // Phys. Fluids A. — 1989. — Vol. 1, No 2. — Pp. 380–383.
3. Nonequilibrium Processes in Supersonic Jets of N₂, H₂, and N₂ + H₂ Mixtures: (I) Zone of Silence / A. Ramos, G. Tejada, J. M. Fernandez, S. Montero // J. Phys. Chem. A. — 2009. — Vol. 113, No 30. — Pp. 8506–8512.
4. Гиршфельдер Д., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. — М.: Издательство иностранной литературы, 1961.
5. Коган М. Н. Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967.
6. Бёрд Г. Молекулярная газовая динамика. — М.: Мир, 1981.
7. Bird G. A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flow. — New York: Oxford University Press, Inc., 1994.
8. Мирный В., Фрэнер М. Об одной программе моделирования молекулярной динамики газа с элементами распараллеливания алгоритма // Вычислительные технологии. — 2001. — Т. 6, № 3. — С. 32–50.
9. Ковалев В. Л., Сазонова В. Ю., Якунчиков А. Н. Моделирование взаимодействия струи разреженного газа с преградой методами молекулярной динамики // Вестн. Моск. ун-та. Серия 1: Матем. Механ. — 2008. — № 2. — С. 56–58.
10. Ковалев В. Л., Якунчиков А. Н. Исследование течения и теплообмена в микро- и наноканалах методами молекулярной динамики // Вестн. Моск. ун-та. Серия 1: Матем. Механ. — 2008. — № 5. — С. 67–70.
11. Подрыга В. О. Моделирование процесса установления термодинамического равновесия методом молекулярной динамики // Математическое моделирование. — 2010. — Т. 22, № 11. — С. 39–48.
12. Елизарова Т. Г. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. Лекции по математическим моделям и численным методам в динамике газа и жидкости. — М.: Научный Мир, 2007.

13. *Lennard-Jones J. E.* Cohesion // Proceedings of the Physical Society. — 1931. — Vol. 43, No 5. — Pp. 461–482.
14. *Фокин Л. Р., Калашников А. Н.* Транспортные свойства смеси разреженных газов N₂-H₂ в базе данных ЭПИДИФ // Теплофизика высоких температур. — 2009. — Т. 47, № 5. — С. 675–687.
15. *Morse P. M.* Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels // Phys. Rev. — 1929. — Vol. 34. — Pp. 57–64.
16. *Карамзин Ю. Н., Кудряшова Т. А., Поляков С. В.* Моделирование течений смесей разреженных газов в микроканалах технических систем // Сеточные методы для краевых задач и приложения. Материалы Девятой Всероссийской конференции. — 2012. — С. 208–217.
17. *Kudryashova T. A., Polyakov S. V.* A Model of Supersonic Binary Gas Flow // Mathematica Montisnigri. — 2012. — Vol. XXIV. — Pp. 120–127.
18. Sourcebook of Parallel Computing / J. Dongarra, I. Foster, J. Fox et al. — San Francisco: Morgan Kaufman, 2003.
19. Гибридная суперкомпьютерная платформа и разработка приложений для решения задач механики сплошной среды сеточными методами / С. В. Поляков, Ю. Н. Карамзин, О. А. Косолапов и др. // Известия ЮФУ. Технические науки. — 2012. — № 6(131). — С. 105–115.
20. *Дорофеев А. А.* Основы теории тепловых ракетных двигателей. Теория, расчёт и проектирование. — М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010.
21. *Майер Д., Генперт-Майер М.* Статистическая механика. — М.: Мир, 1980.
22. *Мейсон Э., Сперлинг Т.* Виримальное уравнение состояния. — М.: Мир, 1982.

UDC 519.624.2 004.942

Simulation of Gas Mixture Flows in Microchannels

T. A. Kudryashova, V. O. Podryga, S. V. Polyakov

*Keldysh Institute of Applied Mathematics RAS
4, Miusskaya sq., Moscow, Russian Federation, 125047*

Problems of simulation of flows of the rarefied gas mixes in micro-channels of technical systems are considered. For decision of such problems a new approach is offered. This approach combines calculations on the quasi-gasdynamics (QGD) equations and molecular dynamic (MD) calculations. The QGD equations are used for calculation of main parameters of mix at macro-level. MD-calculations are used for correction of macro-parameters in the Knudsen layer. For approbation of a technique calculations of the expiration of binary nitrogen-hydrogen mix are carried out to the rarefied microspace. The stationary characteristics of a current received in calculations were compared to the parameters calculated within molecular and dynamic model, and also to results of natural experiments. Comparison showed that in case of the micron sizes of technical system QGD-modeling gives a qualitative consent with experiment and MD-model data. Receiving quantitative coincidence of results requires use of the realistic state equations of a mix component, for example, on a basis of the Virial decomposition coordinated with MD-model.

Key words and phrases: mathematical modeling, numerical methods, parallel algorithms, gas mixtures, fluid and molecular dynamics in micro-channels.

References

1. Y. Wu, C. H. Lee, Kinetic Theory of Shock of Tube Problems for Binary Mixtures, Phys. Fluids 14 (2) (1971) 313–322.
2. V. Garzo, A. Santos, J. J. Brey, A Kinetic Model for a Multicomponent Gas, Phys. Fluids A 1 (2) (1989) 380–383.
3. A. Ramos, G. Tejada, J. M. Fernandez, S. Montero, Nonequilibrium Processes in Supersonic Jets of N₂, H₂, and N₂ + H₂ Mixtures: (I) Zone of Silence, J. Phys. Chem. A 113 (30) (2009) 8506–8512.

4. J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, R. B. Bird, *Molecular Theory of Gases and Liquids*, Foreign Languages Publishing House, Moscow, 1961, in Russian.
5. M. N. Kogan, *Dynamics of Rarefied Gas*, Nauka, Moscow, 1967, in Russian.
6. G. A. Bird, *Molecular Gas Dynamics*, Mir, Moscow, 1981, in Russian.
7. G. A. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flow*, Oxford University Press, Inc., New York, 1994.
8. V. Mirniy, M. Frohner, On One Computer Program for Modelling of Molecular Dynamics of Gas with Elements of Algorithm Parallelization, *Computational Technologies* 6 (3) (2001) 32–50, in Russian.
9. V. L. Kovalev, V. Y. Sazonova, A. N. Yakunchikov, Simulation of Interaction Between a Rarefied Gas Jet and an Obstacle by the Methods of Molecular Dynamics, *Moscow University Mechanics Bulletin* 63 (2) (2008) 44–46.
10. V. L. Kovalev, A. N. Yakunchikov, A Study of Flow and Heat Transfer in Micro- and Nanochannels by the Methods of Molecular Dynamics, *Moscow University Mechanics Bulletin* 63 (5) (2008) 129–132.
11. V. O. Podryga, Molecular Dynamics Method for Simulation of Thermodynamic Equilibrium, *Mathematic Modeling* 22 (11) (2010) 39–48, in Russian.
12. T. G. Elizarova, *Quasi-Gas Dynamic Equations and Methods for Viscous Flow. Lectures on Mathematical Models and Numerical Methods in the Dynamics of Gas and Liquid*, Scientific World, Moscow, 2007, in Russian.
13. J. E. Lennard-Jones, Cohesion, *Proceedings of the Physical Society* 43 (5) (1931) 461–482.
14. L. R. Fokin, A. N. Kalashnikov, The Transport Properties of an N₂-H₂ Mixture of Rarefied Gases in the EPIDIF Database, *High Temperature* 47 (5) (2009) 643–655.
15. P. M. Morse, Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels, *Phys. Rev.* 34 (1929) 57–64.
16. Y. N. Karamzin, T. A. Kudryashova, S. V. Polyakov, Simulation of Flow of Mixtures of Rarefied Gas Flows in Microchannels of Technical Systems, *Mesh Methods for Boundary Value Problems and Applications. Proc. of the 9th All-Russian Conference* (2012) 208–217 In Russian.
17. T. A. Kudryashova, S. V. Polyakov, A Model of Supersonic Binary Gas Flow, *Mathematica Montisnigri* (2012) 120–127.
18. J. Dongarra, I. Foster, J. Fox, W. Gropp, K. Kennedy, L. Torczon, A. White, *Sourcebook of Parallel Computing*, Morgan Kaufman, San Francisco, 2003.
19. S. V. Polyakov, Y. N. Karamzin, O. A. Kosolapov, T. A. Kudryashova, S. A. Soukov, Hybrid Supercomputer Platform and Applications Programming for the Solution of Continuous Mechanics Problems by Grid Methods, *Izvestiya SFedU. Engineering Sciences* (6(131)) (2012) 105–115, in Russian.
20. A. A. Dorofeev, *Fundamentals of the Theory of Thermal Rocket Engines. Theory, Calculation and Design*, Bauman MSTU, Moscow, 2010, in Russian.
21. J. E. Mayer, M. Goeppert Mayer, *Statistical Mechanics*, Mir, Moscow, 1980, in Russian.
22. E. A. Mason, T. H. Spurling, *The Virial Equation of State*, Mir, Moscow, 1982, in Russian.