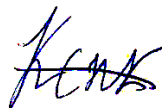


МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА



На правах рукописи

Косьянчук Василий Викторович

**МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ТЕЧЕНИЙ ГАЗА
В РАЗДЕЛИТЕЛЬНЫХ УСТРОЙСТВАХ И МЕМБРАНАХ**

Специальность 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2019

Работа выполнена на кафедре газовой и волновой динамики механико-математического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова

Научные руководители:

Ковалев Валерий Леонидович доктор физико-математических наук, профессор, ФГБОУ «Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова», заведующий кафедрой

Якунчиков Артем Николаевич кандидат физико-математических наук, ФГБОУ «Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова», заместитель заведующего кафедрой

Официальные оппоненты:

Колесников Анатолий Федорович доктор физико-математических наук, ФГБУН «Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН», заведующий лабораторией

Ковалев Олег Борисович доктор физико-математических наук, профессор, ФГБОУ «Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН», заведующий лабораторией

Титарев Владимир Александрович доктор физико-математических наук, ФГБОУ «Вычислительный центр им. Дородницына ФИЦ ИУ РАН», ведущий научный сотрудник

Защита состоится 18.10.2019 г. в 15:00 на заседании диссертационного совета МГУ.01.03 Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова по адресу: 119991, ГСП-1, Москва, Ленинские горы, МГУ, д. 1, Главное здание, механико-математический факультет, аудитория 1610.

E-mail: pelevina.daria@gmail.com

С диссертацией можно ознакомиться в отделе диссертаций научной библиотеки МГУ имени М.В. Ломоносова (Москва, Ломоносовский проспект, д. 27) и на сайте ИАС «ИСТИНА»: <https://istina.msu.ru/dissertations/197200830/>

Автореферат разослан «15» августа 2019 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета МГУ.01.03
кандидат физико-математических наук

Д.А. Пелевина

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Представленная диссертация посвящена теоретическому исследованию эффекта разделения газовых смесей при течениях в микроструктурах с подвижными, изменяющими форму или неизотермическими границами. Рассматриваются задачи о свободномолекулярном течении (1) в микроканале мембраны, колеблющейся с высокой частотой, (2) в микроканале с рядом осциллирующих перегородок, (3) в микроканале, стенки которого вынужденно изгибаются по волновому закону, а также многомасштабная задача (4) о неизотермическом течении в газоразделительном устройстве, содержащем области и с континуальным, и с переходным режимами течения.

Актуальность темы диссертации

Разделение газовой смеси на компоненты является важной технологической задачей во многих отраслях производства. Эффективные технологии газоразделения востребованы при очистке и обработке попутного нефтяного газа, получении азота, кислорода и благородных газов из воздуха, очистке воздуха от углекислого газа, разделении сероводородных смесей, разделении изотопов.

В настоящее время для решения этих задач применяются: криогенная фильтрация, адсорбция под действием давления, хемосорбция, мембранное разделение, центрифугирование, электромагнитное разделение и лазерное обогащение. Данные методы представляют собой компромисс между эффективностью разделения и энергозатратами, поэтому постоянно ведется поиск новых, более дешевых и эффективных технологий.

В последние десятилетия с развитием микротехники появилась практическая возможность разделения смеси газов за счет эффектов, реализующихся при течениях с конечными числами Кнудсена. Данные эффекты основаны на том, что в свободномолекулярном и переходном режимах течения перепады давления и температуры, высокочастотные механические колебания, движение и изменение формы границы по-разному влияют на потоки компонент смеси с разной молекулярной массой. Автором изучается эффективность таких воздействий применительно к задаче газоразделения. Часть изучаемых эффектов обнаружена в рамках настоящей работы впервые.

Цель и задачи работы

Целью работы является изучение влияния внешних воздействий, таких как высокочастотные механические колебания, перепады давления и температуры, на течения газов в микроструктурах и оценка возможности

применения этих воздействий для разделения газовых смесей. Для достижения указанной выше цели были поставлены и решены следующие задачи:

1. О свободномолекулярном течении газа в цилиндрическом канале мембраны, колеблющейся в своей плоскости;
2. О свободномолекулярном течении газа в плоском канале с рядом осциллирующих перегородок;
3. О свободномолекулярном течении газа в плоском канале со стенками, вынужденно изгибающимися по волновому закону;
4. О двумерном неизотермическом течении бинарной смеси газов в прототипе газоразделительного устройства, содержащем области с континуальным и переходным режимами течения.

Научная новизна

В работе получены следующие новые результаты:

1. Впервые исследована задача о свободномолекулярном течении газа в канале (поре) мембраны, колеблющейся с высокой частотой в своей плоскости. Выдвинута и подтверждена расчетами гипотеза о возможности разделения газов с разной молекулярной массой за счет таких колебаний. Определено влияние различных параметров задачи на эффективность разделения.
2. Впервые исследована задача о свободномолекулярном течении газа в микроканале с рядом колеблющихся с высокой частотой перегородок. Выдвинута и подтверждена расчетами гипотеза о возможности разделения газов с разной молекулярной массой, когда движение системы перегородок образует бегущую волну. Определено влияние различных параметров задачи на эффективность разделения при таком движении.
3. Впервые исследована задача о свободномолекулярном течении газа в микроканале со стенками, движущимися по волновому закону. Выдвинута и подтверждена расчетами гипотеза о возможности разделения газов с разной молекулярной массой за счет волнового движения границы. Определен необходимый диапазон параметров для наличия эффекта разделения.
4. Разработан гибридный численный метод для моделирования течений газовых смесей при низких числах Маха ($M < 0.1$) в устройствах, содержащих области и с континуальным, и с переходным режимами течения. Данный метод сочетает решение уравнения МакКормака на микромасштабе, с решением уравнений газовой динамики для многокомпонентной смеси на макромасштабе. С помощью данного метода впервые решена в двумерной постановке задача о течении бинарной смеси

в газоразделительном устройстве с неизотермической мембраной, соединяющей два канала с континуальным режимом течения.

Научная и практическая значимость работы

В задачах (2,3) о течении в микроканалах под воздействием высокочастотных механических колебаний показано, что параметры, при которых наблюдается эффект разделения, достижимы на практике при текущем уровне техники. Данные результаты могут быть использованы для проектирования и создания новых газоразделительных устройств.

Разработанный гибридный численный метод, объединяющий решение уравнения МакКормака с решением уравнений Навье-Стокса, адаптированный для течений при малых числах Маха, может быть использован для моделирования работы различных газодинамических устройств, объединяющих макро- и микрокомпоненты.

Результаты моделирования прототипа неизотермического газоразделительного устройства (задача 4), позволили выявить способы значительного повышения эффективности таких систем.

Методология и методы исследования

Объектом исследований являлся эффект разделения смеси газов при ее течении в континуальном, переходном и свободномолекулярном режимах в микроустройствах с подвижными, изменяющими форму и неизотермическими границами. В диссертации использовались методы классической механики сплошных сред и динамики разреженного газа.

Для решения задач (1–3) о течениях в каналах с высокочастотными механическими колебаниями потребовалось обобщение существующих методов решения уравнения Больцмана на случай подвижной и изменяющей форму границы. Для решения задачи (4) о течении бинарной смеси в прототипе газоразделительного устройства разработан многомасштабный численный метод, совмещающий решение уравнения МакКормака для моделирования течения смеси газов через поры мембраны, и решение уравнений Навье-Стокса для медленного течения бинарной смеси в макроскопических областях устройства.

Для решения поставленных задач использовались собственные программные реализации описанных выше методов на языке C++.

Положения, выносимые на защиту

1. Свободномолекулярный поток газа через микроканал, колеблющийся перпендикулярно своей оси, зависит от отношения характерной скорости колебаний к характерной тепловой скорости молекул. Колебания

начинают оказывать существенное влияние на поток газа, когда отношение скоростей достигает порядка единицы и выше. Варьируя частоту и амплитуду колебаний канала, можно добиться различия в проводимости канала для газов, различающихся молекулярной массой, то есть получить эффект разделения смеси.

2. При свободномолекулярном течении газа в канале с системой перегородок, движущейся по волновому закону, поток зависит от отношения волновой скорости и характерной тепловой скорости молекул. Эта зависимость проявляется заметнее всего в областях, где отношение скоростей близко к единице. Данный эффект может быть использован для разделения газовых смесей с разной молекулярной массой компонент. Эффект разделения наблюдается уже при частотах механических колебаний перегородок порядка 10 кГц, которые достижимы при текущем уровне техники.
3. При свободномолекулярном течении газа в канале с границами, вынужденно изгибающимися по волновому закону, поток зависит от отношения волновой скорости движения границы и характерной тепловой скорости молекул. Данный эффект может быть использован для разделения газов с разной молекулярной массой. Значения волновой скорости колебаний границы, необходимые для наличия эффекта разделения близки к скоростям распространения поперечных волн в металлах, что позволяет реализовать обнаруженный эффект на практике.
4. Устройство на основе неизотермической мембраны, соединяющей два канала с континуальным режимом течения, позволяет получать концентрацию легкой компоненты в бинарной смеси, близкую к 100%, даже при небольших перепадах температуры на сторонах мембраны (15–30К). Наибольшая эффективность разделения достигается при числах Кнудсена в порах мембраны порядка 0.2–0.5, а также при числах Пекле в макроканалах порядка 10. Эффективность разделения не зависит от числа Маха в макроканалах, линейно зависит от перепада температур на сторонах мембраны и растет с увеличением отношения молекулярных масс компонент. Эффективность устройства линейно возрастает с увеличением длины мембраны.

Достоверность результатов

Достоверность результатов диссертационной работы обеспечена:

1. Использованием классических уравнений механики сплошных сред и динамики разреженного газа; корректными, опирающимися на современные модели механики, постановками задач;
2. Проверкой полученных в задачах (1–3) зависимостей потока газа от длины канала в частном случае неподвижных границ, для которого имеются

- экспериментальные данные и аппроксимирующие их инженерные формулы;
3. Хорошей согласованностью в задаче (4) полученных результатов с теоретическими и экспериментальными результатами научных работ других исследователей.

Апробация работы

Результаты диссертации докладывались на следующих конференциях:

1. 31-ая международная конференция по динамике разреженного газа «31st International symposium on Rarefied Gas Dynamics», Глазго, Великобритания, 23-27 июля 2018 г.;
2. 25-ая Всероссийская научно-техническая конференция с международным участием «Вакуумная Техника и Технологии - 2018», Санкт-Петербург, 5-7 июня 2018 г.;
3. XIII Международная научно-техническая конференция «Вакуумная техника, материалы и технология 2018», Москва, 24-26 апреля 2018 г.
4. Международная конференция «International Conference on Computer Simulation in Physics and beyond», Москва, Россия, 2015 г.;
5. 29-ая международная конференция по динамике разреженного газа «29th International symposium on Rarefied Gas Dynamics», Сиань, Китай, 2014 г.;
6. Конференции «Ломоносовские чтения» в 2014–2018 гг. (Москва, МГУ);
7. XXIV Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов – 2017» (Москва, МГУ – 2017).
8. Конференции-конкурсы молодых ученых НИИ механики МГУ 2016-2017г. (Москва, НИИ механики МГУ).

Результаты работы также докладывались на научных семинарах кафедры газовой и волновой динамики механико-математического факультета МГУ под руководством академика РАН Р.И. Нигматулина, семинарах лаборатории многомасштабного моделирования под руководством профессора В.Л. Ковалева, семинаре по механике сплошных сред НИИ механики МГУ под руководством академика РАН А.Г. Куликовского, профессора В.П. Карликова и члена-корреспондента РАН О.Э. Мельника, семинаре лаборатории наномеханики НИИ механики МГУ под руководством проф. В.Л. Ковалева, семинаре «Физико-химическая кинетика в газовой динамике» НИИ механики МГУ под руководством профессора Ю.В. Туника и профессора А.В. Уварова, на семинаре сектора кинетической теории газов, отдела механики, Вычислительного центра РАН им. А.А. Дородницына под руководством профессора В.В. Аристова, семинаре «Математическое моделирование в механике» института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН под руководством академика РАН В.М. Фомина.

Публикации по теме диссертации

Основные результаты диссертационного исследования изложены в 17 научных публикациях, из них 11 статей опубликованы в изданиях, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus. По результатам работы получен один патент на полезную модель и подана одна заявка на патент на изобретение.

Личный вклад автора

Все результаты, представленные в диссертационной работе, получены автором самостоятельно. Научный руководитель принимал участие в формулировке постановок задач и обсуждении полученных результатов. Автором самостоятельно разработаны численные методы и проведены расчеты поставленных задач, выполнена обработка полученных результатов. Автор лично представлял полученные результаты на научных конференциях и готовил к публикации научные статьи.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из списка обозначений, введения, обзора литературы, 4 глав, заключения и списка литературы. Общий объем диссертации – 121 страниц, включая 51 рисунок и 6 таблиц. Список литературы включает 146 наименований на 11 страницах.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во **введении** обоснована актуальность и практическая значимость темы диссертационного исследования, сформулированы цели и задачи работы, аргументирована научная новизна исследования, показана научная и практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту основные положения, приведена структура и кратко изложено содержание работы.

В **обзоре литературы** подробно анализируется степень разработанности темы исследования: приведено описание монографий и статей, посвященных современным методам разделения газов, уделено особое внимание мембранным методам разделения. Затем описываются новые микроразмерные эффекты, открытые в последние годы, которые могут быть использованы для разделения смесей. Отдельное внимание уделено применению высокочастотных колебаний, а также температурным эффектам.

В **главе 1** рассмотрена задача о свободномолекулярном течении газа через канал (пору) колеблющейся с высокой частотой мембраны (рис. 1). Проведено численное моделирование такого течения и исследовано влияние

высокочастотных колебаний на величину потока газа через микроканал.

Изучалась возможность использования таких колебаний для разделения газов с разной молекулярной массой.

При решении задачи существенное упрощение состояло в том, что рассматривался случай свободномолекулярного течения. Поэтому использовался метод пробной частицы и для каждой молекулы траектория прохождения канала

рассчитывалась независимо. Моделирование всей системы представляет собой расчет траекторий большого количества ($N = 10^7$) молекул с заданными распределениями скорости, координаты и времени на входном сечении. Координаты влета молекул предполагались равномерно распределенными по входному сечению. Время влета распределялось равномерно на одном периоде колебаний системы. Распределение скоростей $\vec{v}$ влетающих в канал молекул имеет вид $g(\vec{v}) = \frac{2v_n}{\pi c^4} \exp(-v^2/c^2)$, и получается из равновесного максвелловского распределения в области, прилегающей к торцу канала. Здесь $c = \sqrt{2k_B T/m}$ – характерная тепловая скорость молекул газа, k_B – константа Больцмана, m – масса молекулы газа, T – температура, индекс n обозначает компоненту скорости, нормальную к входному сечению.

Расчетной величиной являлась вероятность P прохождения канала молекулами газа, которая вычисляется как количество молекул, прошедших через канал – N_{pass} , отнесенное к общему числу расчетных молекул N . Числовой поток газа J_N через канал вычисляется по значению P и числовым плотностям n_1, n_2 на торцах канала при температуре T по формуле $J_N = P \cdot \frac{(n_2 - n_1)}{2\sqrt{\pi}} c$. Задача существенно нестационарна, и, чтобы избавиться от временной зависимости величины P , вычислялось её среднее значение на одном периоде колебаний системы.

Задача полностью определяется пятью размерными параметрами (рис. 2): D, L – диаметр и длина канала, A, ω – амплитуда и частота колебаний мембраны, а также c – характерная тепловая скорость молекул газа

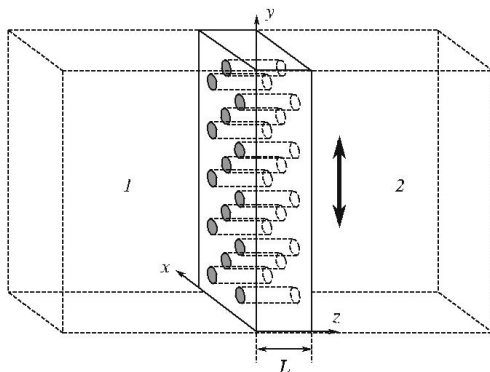


Рис. 1. Схема первой задачи: 1,2 – резервуары, разделенные мембраной. Стрелкой показано направление колебаний мембраны.

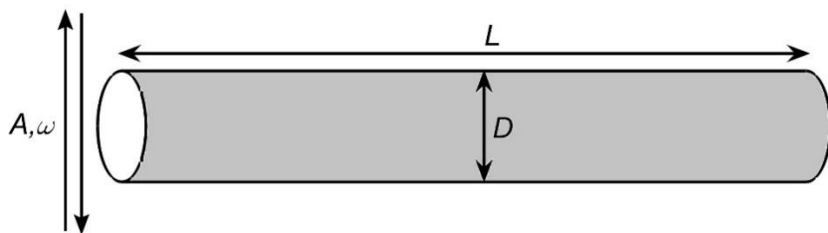


Рис. 2 Микроканал (пора мембраны) с основными параметрами.

С использованием π -теоремы анализ зависимости P от основных определяющих параметров был сведен к трем безразмерным комбинациям: L/D , A/D , u/c – безразмерной длине канала и амплитуде колебаний, а также отношению характерных скоростей колебаний канала ($u = A\omega$) и теплового движения молекул. Путем расчетов величины P для ряда значений u/c (при прочих фиксированных параметрах) были получены зависимости $P(u/c)$, используя которые можно вычислить коэффициент разделения $s(u)$ для любой заданной пары газов (A, B) по следующей формуле:

$$s \equiv \frac{J_A}{J_B} = \sqrt{\frac{m_B}{m_A} \cdot \frac{P(u/c_A)}{P(u/c_B)}}, \quad (1)$$

Численные расчеты подтвердили гипотезу о влиянии колебаний на поток протекающего газа (рис. 3) – вероятность прохождения через канал P снижается с увеличением u/c , и, следовательно, снижается поток газа через канал. Отношение P/P_0 выражает отношение потока газа через канал при наличии колебаний к потоку газа через неподвижный канал.

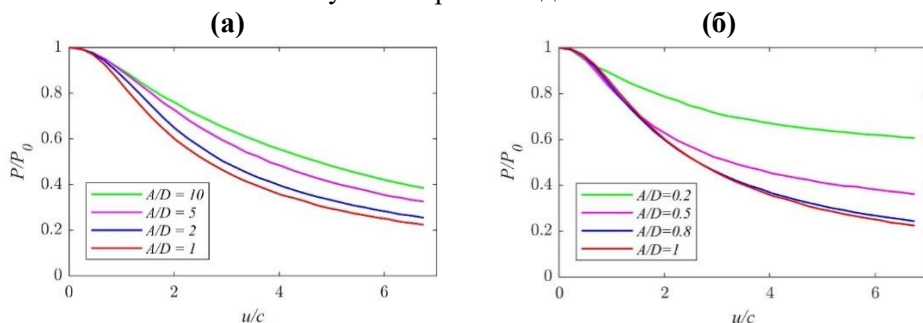


Рис. 3. Результаты расчетов. Зависимость нормированной вероятности прохождения P/P_0 от u/c при $L/D = 5$ и $A/D = 1, 2, 5, 10$ (а); $A/D = 0.2, 0.5, 0.8, 1$ (б)

Данное поведение объясняется диффузным законом рассеяния на стенке: при соударении со стенкой молекула может с равной вероятностью отразиться как

в прямую, так и в обратную сторону, и, таким образом, с увеличением количества соударений вероятность пройти через канал уменьшается, а, значит, в среднем падает и поток газа. Чем выше скорость колебаний, тем больше соударений испытывают молекулы, и тем ниже становится вероятность прохождения P и поток газа J . Сравнение значений коэффициента разделения $s(u)$, полученных по графикам на рис. 3, на примере гелий-аргоновой смеси для различных A/D (рис. 4) показывает, что наличие колебаний действительно приводит к разделению газов и что наиболее эффективное разделение достигается при $A/D = 1$.

Во всех расчетах полученный коэффициент разделения s сравнивался с величиной $s_{Kn} = \sqrt{m_A/m_B}$ (пунктирная линия на рис. 4), отвечающей коэффициенту естественной диффузии Кнудсена, проявляющейся при течениях разреженного газа и обусловленной разностью тепловых скоростей молекул газов с разной молекулярной массой. Практический интерес представляют только случаи, где $s > s_{Kn}$, остальные случаи соответствуют ухудшению эффекта разделения по сравнению с диффузией Кнудсена. Сравнение различных значений L/D показывает (рис. 5), что увеличение длины канала приводит к усилению разделения; в то же время, для получения такого же коэффициента разделения s при больших длинах канала L/D требуются меньшие скорости колебаний u .

Расчеты показали, что эффект не зависит от используемой модели рассеяния (зеркально-диффузная модель Максвелла, модель Черчиньяни-Лэмпис, модель Эпштейна, модель Ямамото), а определяется значением коэффициента аккомодации касательного импульса α_τ . Эффект разделения сильно ослабевает с уменьшением α_τ , и уже при $\alpha_\tau < 0.5$ эффект разделения практически не наблюдается.

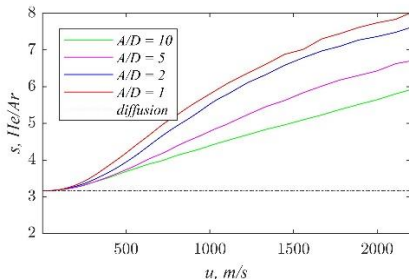


Рис. 4. Графики $s(u)$ для гелий-аргоновой смеси при $L/D = 5$ и $A/D = 0.2, 0.5, 0.8, 1$.

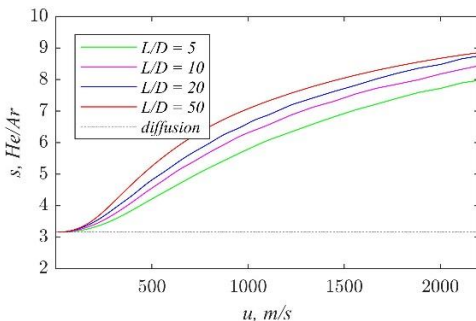


Рис. 5. Графики $s(u)$ для гелий-аргоновой смеси при $A/D = 1$ и $L/D = 5, 10, 20, 50$.

Оценка размерных параметров показала, что для наличия эффекта разделения требуются очень высокие частоты механических колебаний (более 0.1 ГГц), что при текущем уровне техники труднодостижимо.

В **главе 2** с помощью численного метода, описанного в главе 1, проведено моделирование течения разреженного газа в микроканале с рядом осциллирующих затворов (рис. 6). Затворы движутся по гармоническому закону $y_i = 0.5D \cdot \sin(2\pi\omega t + \psi_i)$ где D – толщина канала, ω – частота колебаний, y_i – положение нижней точки i –ого барьера. Фазы ψ_i движения затворов подбираются таким образом, чтобы между крайними затворами укладывалась одна длина волны $\lambda = (N - 1)L$, где N – количество затворов, L – расстояние между ними (рис. 6). Тогда разность фаз движения соседних затворов $\Delta\psi = \frac{2\pi}{(N-1)}$, а волновая скорость такой системы равна $u = \lambda\omega$.

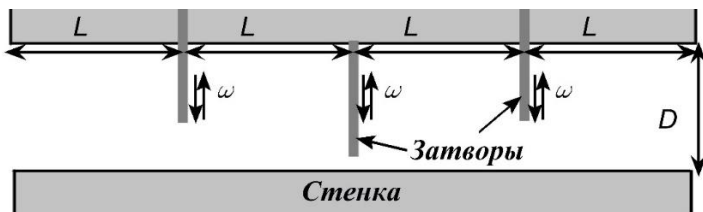


Рис. 6 Микроканал с рядом затворов и основные параметры задачи.

Основные безразмерные параметры задачи: L/D – расстояние между затворами (рис. 6), λ/L – отношение длины волны к длине секции, u/c – отношение волновой скорости к характерной тепловой скорости молекул. Аналогично главе 1, в результате моделирования были получены зависимости $P(u/c)$ и $s(u)$ для случаев зеркального и диффузного рассеяния на стенках.

Зависимости $P(u/c)$, нормированные на $P_{max} \equiv \max_{u/c} P(u/c)$ при различных L/D в системе, содержащей 3 затвора ($\lambda/L = 2$) свидетельствуют о наличии влияния колебаний на поток газа (рис. 7). Вероятность прохождения через канал существенно зависит от отношения u/c , причем сильнее всего это начинает проявляться при значениях $u/c \sim 1$. Яркий выраженный максимум $P(u/c)$ наблюдается в случае зеркального отражения при всех рассмотренных L/D , а в случае диффузного – при $L/D < 1$ (рис. 7).

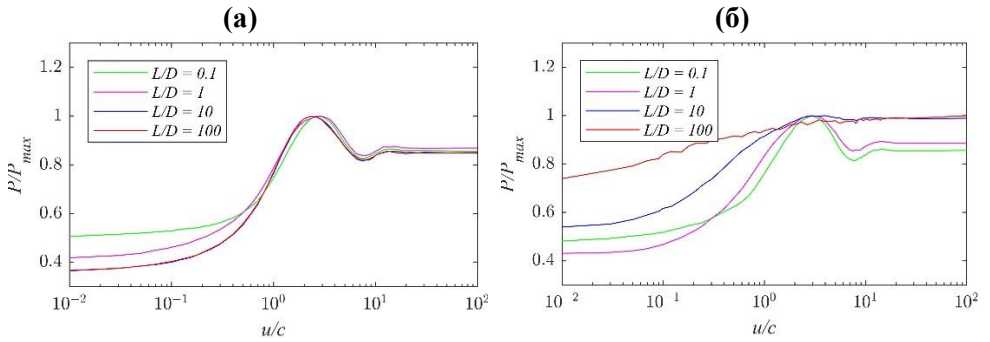


Рис. 7. Зависимость нормированной вероятности прохождения P/P_{max} от u/c при $L/D = 0.1, 1, 10, 100$ для зеркального (а) и диффузного (б) законов отражения на стенках

Исследование зависимости эффективности разделения s (на примере гелий-аргоновой смеси) от длины секции L/D в случае канала с двумя секциями и диффузного отражения (рис. 8а) показало, что положительный эффект может достигаться только при $L/D \leq 1$. Показано, что увеличение длины волны λ за счет добавления барьеров и уменьшения разности фаз между соседними барьерами позволяет получить эффект разделения даже при больших L/D (рис. 8б). Таким образом, показано, что, в отличие от первой задачи, данное устройство не требует высоких частот колебаний, т.к. отношения $u/c \sim 1$ можно добиться за счет увеличения количества затворов.

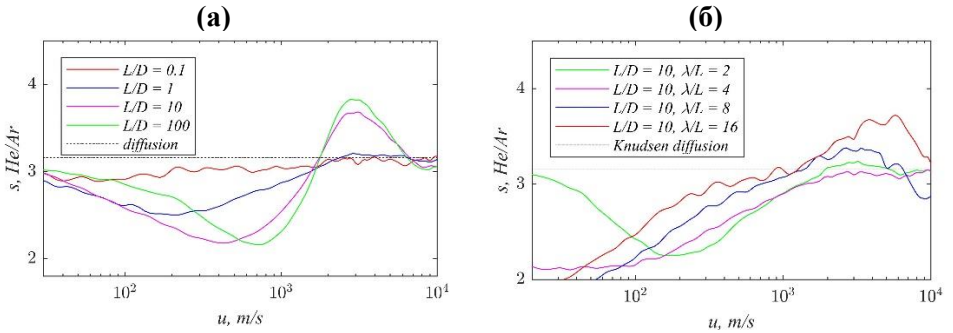


Рис. 8. Результаты расчетов. Зависимость коэффициента разделения s от $u = \lambda\omega$ при $\lambda/L = 2$ и различных L/D (а); при $L/D = 10$ и различных λ/L (б).

В главе 3 с помощью численного метода, описанного в главе 1, проведено моделирование течения разреженного газа в микроканале со стенками, вынужденно изгибающимися по волновому закону $y_{\pm} = \pm \frac{D}{2} + A \sin(\frac{2\pi}{\lambda}(x - ut) + \psi_{\pm})$ (Рис. 9), где D – ширина канала при отсутствии

колебаний стенок, A – амплитуда колебаний, λ – длина волны, u – волновая скорость.

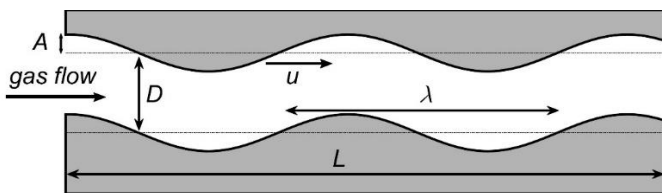


Рис. 9 Схематическое изображения микроканала с изгибающимися стенками.

Основные безразмерные параметры задачи: L/D – длина канала (рис. 9), A/D – амплитуда колебаний, λ/A – отношение длины волны к её амплитуде, u/c – отношение волновой скорости к характерной тепловой скорости молекул. Аналогично главе 1, в результате моделирования были получены зависимости $P(u/c)$ и $s(u)$.

В работе дано объяснение немонотонной зависимости $P(u/c)$ при различных A/D и λ/A (рис. 10) через наложение эффектов: (1) “резонанса” (молекулы, имеющие скорость вдоль оси x , близкую к волновой скорости движения поверхности, могут двигаться вместе с волной не испытывая столкновений) и (2) “прокачки” (поверхность за счет изогнутого профиля и диффузного закона отражения при своем движении сообщает сталкивающимся с ней молекулам импульс в направлении распространения волны).

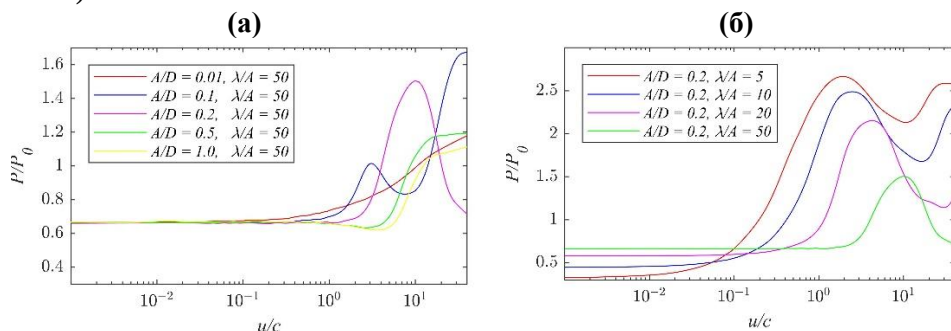


Рис. 10. Результаты расчетов. Зависимость нормированной вероятности прохождения P/P_0 от u/c при $\lambda/A = 50$ и различных A/D (а) и при $A/D = 0.2$ и различных λ/A (б)

Показано, что наиболее эффективного разделения можно добиться при значениях амплитуды колебаний $A/D \sim 0.2 - 0.3$ (рис. 11а). Увеличение длины волны приводит к усилению разделения (рис. 11б), но вместе с этим

возрастает и необходимая для получения разделения волновая скорость u . Данный факт стоит учитывать в практических приложениях, т.к. скорость распространения волн является характеристикой материала стенок канала.

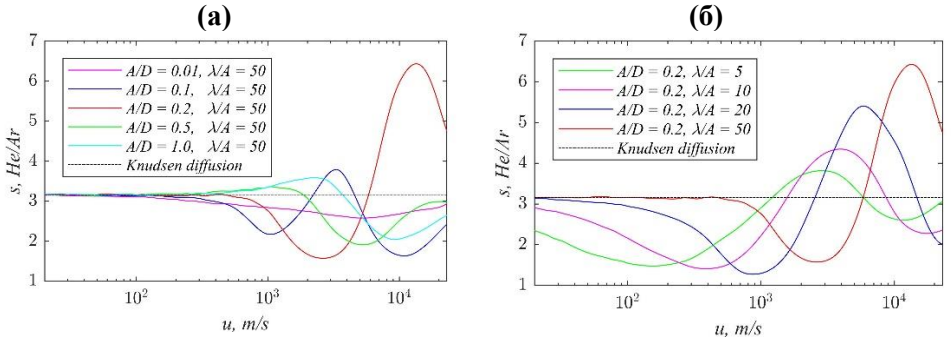


Рис. 11. Результаты расчетов. Зависимость коэффициента разделения s от u при $\lambda/A = 50$ и различных A/D (а) и при $A/D = 0.2$ и различных λ/A (б)

Получено, что с увеличением длины канала L/D эффект разделения усиливается (рис. 12а). Важную роль также играет разность фаз движения нижней и верхней поверхностей $\Delta\psi = \psi_+ - \psi_-$ (рис. 12б). При движении в одной фазе получен максимальный эффект разделения, но при движении с разной фазой эффекта разделения можно добиться при существенно меньших волновых скоростях. Как и в предыдущих задачах, важным фактором является значение коэффициента аккомодации касательного импульса α_τ на стенке – при уменьшении α_τ эффект разделения становится заметно слабее.

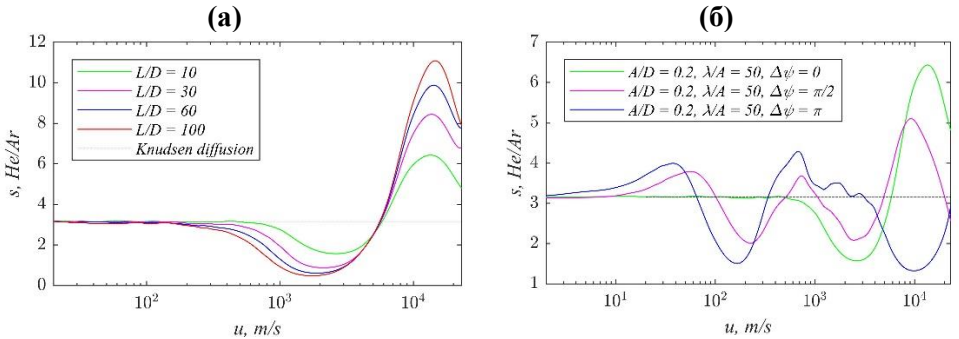


Рис. 12. Зависимость коэффициента разделения s от u при различных длинах канала L/D (а) и при изменении разности фаз $\Delta\psi$ движения нижней и верхней стенок (б)

В главе 4 проведено численное моделирование течения бинарной смеси газов в газоразделительном устройстве, прототип которого экспериментально исследовался в (Nakaye S. et al., 2015). Схема данного устройства представлена на рис. 14. Система состоит из двух каналов, поддерживаемых при постоянных температурах T_H и T_C . Между каналами установлена мембрана. Исходная смесь газов подается на левый торец верхнего канала и выходит из левого торца нижнего канала, правые торцы каналов соединены между собой. Отбор продукта производится в правой части системы. Давление при отборе и переходе газа из верхнего канала в нижний падает на величину p_D .

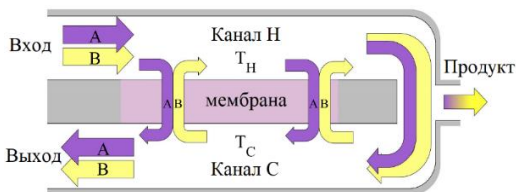


Рис. 14. Схема разделительного устройства

Устройство совмещает рабочие части с сильно различающимися характерными размерами (от 0.1 мкм в порах мембраны, до 1 см в основных каналах), и для корректного решения задачи был разработан

многомасштабный численный метод. Данный метод сочетает (1) решение уравнения МакКормака для моделирования течения в порах мембраны и (2) решение системы уравнений Навье-Стокса для бинарной смеси вязких газов при постоянной температуре, адаптированное для малых чисел Маха, с помощью которого моделируется течение во внешней части устройства.

Полученные результаты показывают хорошее качественное соответствие с экспериментальными данными Японских ученых (Рис. 15).

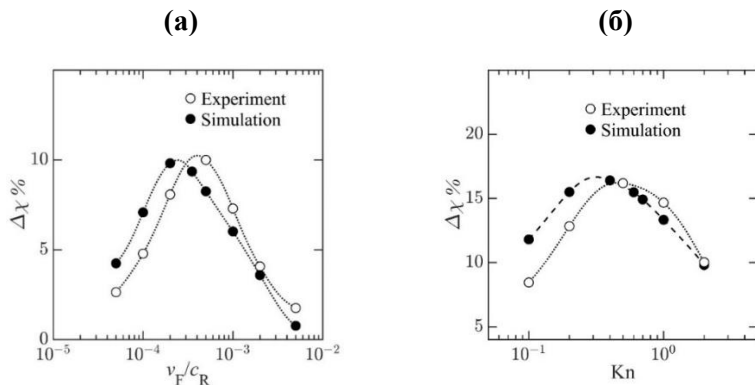


Рис. 15. Результаты расчетов. Зависимость приращения концентрации $\Delta\chi$ скорости потока в канале (а) и от числа Кнудсена в порах мембраны (б)

Зависимость эффективности устройства (определяемая разностью $\Delta\chi$ молярной концентрации легкой компоненты в исходной смеси и продукте) от скорости потока в канале, и от числа Кнудсена в порах мембраны имеет выраженный локальный максимум.

Показано, что значение числа Маха в канале не влияет на эффективность $\Delta\chi$, и $\Delta\chi$ линейно зависит от перепада температур на мембране (Рис. 16а). Получено, что максимальный эффект достигается при некоторых промежуточных значениях диффузионного числа Пекле ($Pe \sim 10$), выражающего отношение скорости процессов переноса и диффузии (Рис. 16б). Также эффект разделения усиливается с уменьшением толщины мембраны (l/d), т.к. растет градиент термодинамических параметров в порах, и, соответственно, поток газа через мембрану (Рис. 16в). Максимальные значения $\Delta\chi$ в устройстве также достигаются при некоторых промежуточных числах Кнудсена в порах мембраны $Kn \sim 0.2$ (Рис. 16г). Это вызвано тем, что эффект разделения внутри мембраны, обусловленный градиентами температуры, давления и концентрации, также имеет максимум при данных числах Кнудсена.

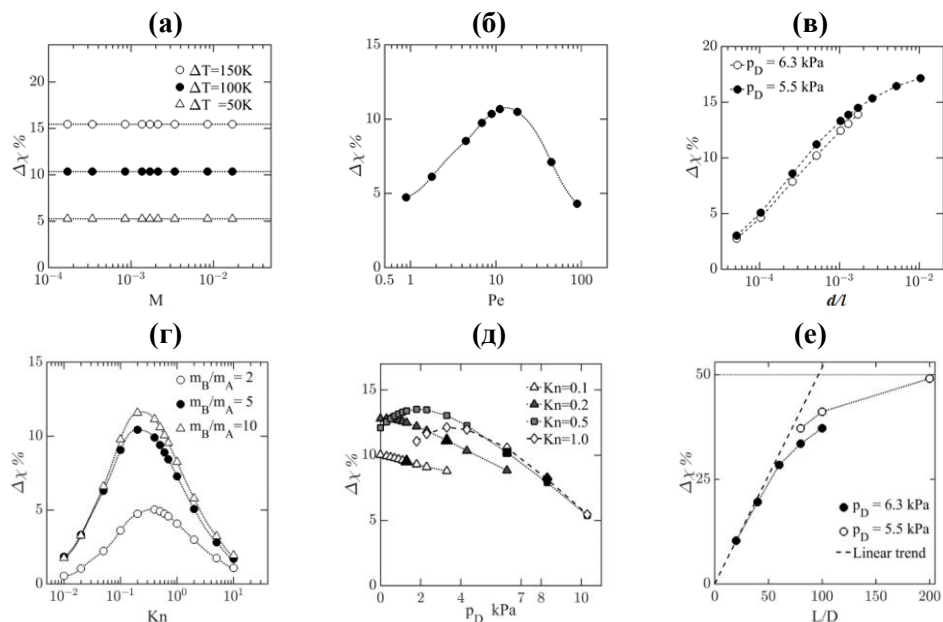


Рис. 16. Влияние различных параметров на эффективность устройства: (а) Числа Маха в основных каналах и перепада температур на сторонах мембраны; (б) диффузионного числа Пекле; (в) толщины мембраны; (г) числа Кнудсена в порах и соотношения масс компонент смеси; (д) перепада давлений на сторонах мембраны; (е) длины мембраны

Показано, что наибольший выигрыш в эффективности дает увеличение длины мембраны – эффект практически линейный (Рис. 16е). При этом существуют ограничения на длину мембраны – если общий поток частиц через мембрану не равен нулю, то он влияет на скорость потока внутри канала. При больших длинах мембраны это может привести к тому, что скорость в канале упадет до нуля, т.е. устройство не может работать при таких параметрах. Показано, что добиться нулевого потока через мембрану можно правильным подбором перепада давлений на сторонах мембраны (Рис. 16д) – по графикам для разных Kn видны диапазоны значений перепада давлений p_D , при которых существует решение, а также значения p_D при которых достигается максимальный эффект разделения.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ РАБОТЫ

1. Проведено исследование течения газа в свободномолекулярном режиме сквозь цилиндрический канал (пору) мембраны, колеблющейся с высокой частотой. Получено, что поток газа через канал зависит от соотношения характерных скоростей колебания мембраны и тепловой скорости молекул, и эта зависимость становится существенной, когда отношение скоростей достигает порядка единицы. Показано, как этот эффект может быть использован для разделения газов с разной молекулярной массой. Получено, что наиболее эффективной для разделения является амплитуда колебаний, совпадающая с диаметром канала, и что увеличение длины канала усиливает эффект разделения. Также показано, что эффективность разделения падает с уменьшением коэффициента аккомодации. Получено, что для наличия эффекта разделения необходимы частоты колебаний порядка МГц-ГГц, которые пока труднодостижимы на практике.
2. Проведено исследование течения газа в свободномолекулярном режиме сквозь плоский канал с системой затворов, движущейся по волновому закону. Показано, что поток газа зависит от соотношения волновой скорости движения системы затворов и характерной тепловой скорости молекул, причем сильнее всего эта зависимость начинает проявляться при отношении скоростей близком к единице. Показано, как этот эффект может быть использован для разделения газовых смесей с разной молекулярной массой. Получено, что эффективность разделения падает с увеличением расстояния между затворами, но за счет добавления затворов и уменьшения разности фаз между ними можно получить эффект разделения даже при больших расстояниях между затворами. Также показано, что устройство не требует высоких частот колебаний, т.к. за счет увеличения количества затворов можно добиться волновых скоростей,

сопоставимых с тепловой скоростью молекул. Получено, что эффект разделения проявляется сильнее при малых значениях коэффициента аккомодации.

3. Проведено исследование течения газа в свободномолекулярном режиме в микроканале с границами, вынужденно изгибающимися по волновому закону. Показано, что поток газа через канал при движении границы зависит от отношения волновой скорости к характерной тепловой скорости молекул. Получено, что эта зависимость качественно изменяется при разных отношениях амплитуды колебаний к диаметру канала, и дано теоретическое обоснование такому поведению. Показано, как данный эффект может быть использован для разделения газовых смесей с разной молекулярной массой. Получено, что эффект разделения сильнее при отношении амплитуды колебаний к диаметру канала порядка 0.2 – 0.3, и возрастает с увеличением длины волны колебаний. Также получено, что эффект сильнее при отсутствии разности фаз движения верхней и нижней стенок, а также ослабевает с уменьшением коэффициента аккомодации. Показано, что необходимые для разделения волновые скорости близки к скоростям распространения поперечных волн в некоторых металлах, что позволяет реализовать обнаруженный эффект на практике.
4. Разработан многомасштабный численный метод, объединяющий решение уравнений Навье-Стокса для бинарной смеси, адаптированное для малых чисел Маха, с решением уравнения МакКормака для моделирования течения смеси газов в микроканалах. С помощью данного метода проведено моделирование работы прототипа газоразделительного устройства, на основе неизотермической мембраны, соединяющей два канала с континуальным режимом течения.
5. Показано, что устройство (из пункта 4) потенциально позволяет получать газ любой чистоты даже при очень небольших перепадах температуры на сторонах мембраны (15 – 30 К). Получено, что наибольшая эффективность разделения достигается при числах Кнудсена в порах мембраны порядка 0.2 – 0.5, а также при числах Пекле в каналах порядка 10. Также показано, что эффективность разделения не зависит от числа Маха в каналах, линейно зависит от перепада температур на сторонах мембраны, и увеличивается с увеличением отношения молекулярных масс компонент в разделяемой смеси. Получено, что зависимость эффективности устройства от длины мембраны близка к линейной. Показано, что за счет увеличения диаметра каналов и снижения скорости потока (с сохранением числа Пекле) можно решить проблему, связанную с ограничениями на длину рабочей части устройства.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus

1. 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 IF: 0.96**
2. Kosyanchuk V. V., Yakunchikov A. N. Simulation of gas separation effect in microchannel with moving walls // Microfluidics and Nanofluidics. – 2018. – Т. 22 – № 60. **DOI: 10.1007/s10404-018-2079-8 IF: 2.87**
3. Kosyanchuk V., Yakunchikov A. Numerical study of rarefied gas flows in microchannels with oscillating elements // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. — Vol. 387. — IOP Publishing Ltd, 2018. — P. 012042. **DOI: 10.1088/1757-899X/387/1/012042 SJR: 0.19**
4. Kosyanchuk V., Kovalev V., Yakunchikov A. Multiscale modeling of a gas separation device based on effect of thermal transpiration in the membrane // Separation and Purification Technology. – 2017. – Т. 180. – С. 58–68. **DOI: 10.1016/j.seppur.2017.02.0388 IF: 4.20**
5. Kosyanchuk V., Yakunchikov A., Bryukhanov I., Konakov S. Numerical simulation of novel gas separation effect in microchannel with a series of oscillating barriers // Microfluidics and Nanofluidics. – 2017. – Т. 21 – № 7. **DOI: 10.1007/s10404-017-1947-y IF: 2.87**
6. Yakunchikov A., Kovalev V., Kosyanchuk V. Free-molecular gas flow through the high-frequency oscillating membrane // Journal of Physics: Conference Series. — Vol. 681 of Conference Series. —2016. **DOI: 10.1088/1742-6596/681/1/012034 SJR: 0.22**
7. Yakunchikov A., Kovalev V., Kosyanchuk V. Free-molecular gas flow through the oscillating membrane // Microfluidics and Nanofluidics. – 2015. – Т. 18 – № 6. – С. 1039–1043. **DOI: 10.1007/s10404-014-1493-9 IF: 2.87**
8. Kovalev V., Yakunchikov A., Kosiantchouk V. Study of gas separation by the means of high-frequency membrane oscillations // Acta Astronautica. – 2015. – Т. 116. – С. 282–285. **DOI: 10.1016/j.actaastro.2015.07.021 IF: 2.27**
9. Ковалев В. Л., Косьянчук В. В., Якунчиков А. Н. О разделении газовых смесей при свободномолекулярном течении через колеблющуюся мембрану // Вестник Московского университета. Серия 1: Математика. Механика. – 2015. – № 5. – С. 62–65. **DOI: 10.3103/S0027133015050040 IF: 0.09**
10. Yakunchikov A., Kovalev V., Kosyanchuk V. Free-molecular gas flow through the high-frequency oscillating membrane // AIP Conference Proceedings. —

Vol. 1628. — AIP Publishing, 2014. — P. 836–840. DOI: 10.1063/1.4902680
SJR: 0.18

11. 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. DOI: 10.1134/S0015462814040127 IF: 0.96

Другие научные труды

12. Косьянчук В. В., Якунчиков А. Н. Моделирование течения разреженного газа в устройствах с быстро осциллирующими элементами // Коллективная монография "Вакуумная техника, материалы и технология". Материалы XIII Международной научно-технической конференции. Под редакцией д.т.н., проф. С.Б. Нестерова. — НОБЕЛЛА Москва, 2018. — С. 73–77.
13. Косьянчук В.В., Якунчиков А.Н. Численное исследование течений разреженного газа в микроканалах с осциллирующими элементами // Труды 25-й Всероссийской научно-технической конференции с международным участием "Вакуумная Техника и Технологии - 2018". — СПбГЭТУ "ЛЭТИ" Санкт-Петербург, 2018. — С. 162–165.
14. Косьянчук В.В. Новые методы разделения газовых смесей с использованием микроструктур и мембран с осциллирующей границей// Материалы XXIV Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых "Ломоносов-2017", серия Математика и механика
15. Косьянчук В.В., Якунчиков А.Н. Эффект разделения газовых смесей в микроканале с подвижной границей // Ломоносовские чтения. Тезисы докладов научной конференции. Секция наномеханики. 17–26 апреля 2017. г. Москва: изд-во Московского университета, 2017.
16. Косьянчук В.В., Якунчиков А.Н. Многомасштабное моделирование устройства для разделения газов на основе эффекта температурной транспирации // Ломоносовские чтения. Тезисы докладов научной конференции. Секция наномеханики. 18–27 апреля 2016. г. Москва: изд-во Московского университета, 2016.
17. Ковалев В.Л., Косьянчук В.В., Якунчиков А.Н. Исследование влияния высокочастотных колебаний мембраны на свободномолекулярное течение газа // В сборнике Сборник статей: К 85-летию со дня рождения профессора Г.А. Тирского. Под редакцией академика В.А. Левина, место издания Издательство Московского университета Москва, с. 175-187

Патенты

18. Косьянчук В.В., Конаков С.А., Черемухин В.В. Пористая перегородка для разделения газов // Патент России № RU178119U1 23.03.2018.