

ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА И МЕХАНИКА

DOI 10.15507/2079-6900.20.201801.64-77

УДК 533.72

Математическое моделирование процессов переноса в цилиндрическом канале© О. В. Гермидер¹, В. Н. Попов²

Аннотация. В рамках кинетического подхода найдено решение задач о тепло- и массопереносе в длинном цилиндрическом канале с использованием зеркально-диффузной модели граничного условия Максвелла. В качестве основного уравнения, описывающего кинетику процесса, использовано уравнение Вильямса в предположении, что в канале поддерживается постоянный продольный градиент температуры. Уравнение Вильямса записано в декартовой системе координат. Решение линеаризованной задачи о неизотермическом течении разреженного газа через канал получено с применением метода характеристик. Показано, что вид граничного условия становится определяющим при построении этого решения. В широком диапазоне изменения значений числа Кнудсена вычислены приведенные потоки тепла и массы газа через поперечное сечение канала в зависимости от коэффициента аккомодации тангенциального импульса. Получены предельные выражения этих потоков для свободномолекулярного и гидродинамического режимов течения. Проведено сравнение с аналогичными результатами, представленными в открытой печати. Полученные результаты могут быть использованы при разработке новых нанотехнологий.

Ключевые слова: кинетическое уравнение Больцмана, уравнение Вильямса, зеркально-диффузное отражение, зеркально-диффузная модель, модель Максвелла, аналитическое решение, число Кнудсена.

1. Введение

Исследование течений в микро- и наноканалах в зависимости от модели взаимодействия молекул газа с обтекаемыми поверхностями имеет большое значение для применения новых технологий [1]. Наиболее известной моделью граничных условий является зеркально-диффузное граничное условие Максвелла. В модели Максвелла функция распределения молекул газа, отраженных от стенок канала, имеет вид [2]:

$$f^+(\mathbf{r}'_\Gamma, \mathbf{v}) = (1 - \alpha)f^-(\mathbf{r}'_\Gamma, \mathbf{v} - 2\mathbf{n}(\mathbf{nv})) + \alpha f_\Gamma(\mathbf{r}'_\Gamma, \mathbf{v}), \quad \mathbf{vn} > 0, \quad (1.1)$$

$$f_\Gamma(\mathbf{r}', \mathbf{v}) = n_\Gamma(\mathbf{r}') \left(\frac{m}{2\pi k_B T_\Gamma(\mathbf{r}')} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{m}{2k_B T_\Gamma(\mathbf{r}')} \mathbf{v}^2 \right), \quad (1.2)$$

¹ Гермидер Оксана Владимировна, аспирант кафедры математики, ФГАОУ ВО «Северный (Арктический) федеральный университет имени М. В. Ломоносова», (163002, Россия, г. Архангельск, наб. Северной Двины, д. 17), ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2112-805X>, o.germider@narfu.ru

² Попов Василий Николаевич, заведующий кафедрой математики, ФГАОУ ВО «Северный (Арктический) федеральный университет имени М. В. Ломоносова», (163002, Россия, г. Архангельск, наб. Северной Двины, д. 17), доктор физико-математических наук, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0803-4419>, v.popov@narfu.ru

где α – коэффициент аккомодации тангенциального импульса молекул газа; $f^-(\mathbf{r}'_\Gamma, \mathbf{v})$ – функция распределения падающих молекул газа на обтекаемую поверхность Γ ; \mathbf{n} – вектор нормали к поверхности Γ , направленный в сторону газа; \mathbf{r}' и \mathbf{v} – радиус-вектор и скорость молекул газа; m – масса молекул газа; k_B – постоянная Больцмана; $T_\Gamma(\mathbf{r}')$; $n_\Gamma(\mathbf{r}')$ – температура и концентрация газа на поверхности соответственно. Коэффициент аккомодации тангенциального импульса в модели зеркально-диффузного отражения Максвелла (1.1) определяет вероятность того, что молекула отразится от стенки диффузно. При $\alpha = 1$ зеркально-диффузное граничное условие переходит в модель диффузного отражения. В случае зеркального отражения коэффициент аккомодации тангенциального импульса принимает нулевое значение.

Другой моделью, описывающей взаимодействие молекул газа с поверхностью, является модель Черчиньини-Лэмпис, в которой учитываются два параметра: коэффициент аккомодации тангенциального импульса и коэффициент аккомодации кинетической энергии α_τ , связанный с компонентой скорости v_n направленной по нормали к поверхности. В рамках этой модели функция распределения молекул газа, отраженных от поверхности канала, имеет вид [3]:

$$f^+(\mathbf{r}'_\Gamma, \mathbf{v}) = \frac{1}{|v_n|} \int_{v'_n < 0} |v'_n| R(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) f^-(\mathbf{r}'_\Gamma, \mathbf{v}') d\mathbf{v}',$$

$$R(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) = \frac{m^2 v_n}{4\pi^2 \alpha_n \alpha_\tau (2 - \alpha_\tau) (k_B T)^2} \int_0^{2\pi} \exp\left(\frac{\sqrt{1 - \alpha_n} m v_n v'_n}{k_B T \alpha_n} \cos \phi\right) d\phi \times \\ \times \exp\left(\frac{m(v_n^2 + (1 - \alpha_n)v'^2_n)}{2k_B T \alpha_n} - \frac{m(\mathbf{v}_\tau + (1 - \alpha_\tau)\mathbf{v}'_\tau)^2}{2k_B T \alpha_\tau (2 - \alpha_\tau)}\right), \quad (1.3)$$

где $R(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v})$ – ядро рассеяния; \mathbf{v}' , \mathbf{v} – векторы скорости падающих и отраженных молекул газа от стенок канала. При $\alpha_\tau = 0$ и $\alpha_n = 0$ отражение является зеркальным, при $\alpha_\tau = 1$ и $\alpha_n = 1$ – диффузным.

В рамках модели зеркально-диффузного граничного условия Максвелла в работах [1], [4], [5] проведено вычисление потоков тепла и массы газа в зависимости от значений коэффициента аккомодации тангенциального импульса в канале, образованном двумя бесконечными параллельными плоскостями. Для цилиндрического канала результаты вычислений массового потока с использованием зеркально-диффузного граничного условия Максвелла и S-модели кинетического уравнения Больцмана приведены в [6]; в [7] – на основе БГК. Диффузная модель отражения была использована в работах [8]–[11] для получения значений потоков тепла и массы в прямоугольном канале, в [12] – в канале треугольного сечения, в [13]–[16] в цилиндрическом канале, в [17]–[18] – в канале эллиптического сечения. В работах [8]–[10], [12]–[15], [17] результаты получены с использованием численного интегрирования S-модели кинетического уравнения Больцмана.

Вместе с тем интерес представляет применение точных аналитических методов. Аналитическое решение уравнения Вильямса в задачах о тепловом крипе в прямоугольном, цилиндрическом и эллиптическом каналах получено в [11], [16]–[18] соответственно. Численное моделирование процесса массопереноса с граничным условием Черчиньини-Лэмпис в прямоугольном канале осуществлено в [19]. В представленной работе в отличие от [13]–[16] получены выражения для потоков тепла и массы в цилиндрическом канале в задаче о тепловом крипе на основе кинетического уравнения Вильямса с использованием зеркально-диффузной модели отражения молекул газа поверхностью канала. Решение уравнения

Вильямса было построено с применением метода характеристик [20]. В широком диапазоне изменения числа Кнудсена найдены значения потоков тепла и массы в зависимости от коэффициента аккомодации тангенциального импульса. Проведено сравнение полученных результатов моделирования с экспериментальными данными [21]–[22] значений потока массы газа в канале.

2. Постановка задачи. Построение функции распределения

Рассмотрим установившееся течение газа в длинном цилиндрическом канале радиуса R' . Предположим, что в канале поддерживается постоянный градиент температуры, направленный вдоль его оси Oz' . Изменение состояния газа будем описывать уравнением Вильямса, которое для стационарного режима течения газа в декартовой прямоугольной системе координат имеет вид [11]:

$$v_x \frac{\partial f}{\partial x'} + v_y \frac{\partial f}{\partial y'} + v_z \frac{\partial f}{\partial z'} = \frac{\omega}{\gamma l_g} (f_* - f), \quad (2.1)$$

где $\omega = |\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r}')|$; \mathbf{v} – скорость молекул газа; $\mathbf{u}(\mathbf{r}')$ – массовая скорость газа; \mathbf{r}' – размерный радиус-вектор; l_g – средняя длина свободного пробега молекул газа; $\gamma = 5/2$, T_0 – температура газа в некоторой точке, принятой в качестве начала координат;

$$f_* = n_* \left(\frac{m}{2\pi k_B T_*} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{m}{2k_B T_*} (\mathbf{v} - \mathbf{u}_*)^2 \right). \quad (2.2)$$

Параметры n_* , T^* и \mathbf{u}_* в функции (2.2) выбираем из условия, что модельный интеграл столкновений удовлетворял законам сохранения числа частиц, импульса и энергии [23].

В качестве граничного условия на стенках канала используем модель зеркально-диффузного отражения Максвелла (1.1). В качестве размерного масштаба длины выберем радиус цилиндра R' , при этом соответствующие безразмерные величины длины будем обозначать без штриха. Будем полагать, что безразмерный градиент температуры является малыми по абсолютной величине, т. е.

$$G_T = \frac{1}{T_0} \frac{dT}{dz}, \quad |G_T| \ll 1, \quad (2.3)$$

где $z = z'/R'$, $R = 1$. В линейном приближении температура газа имеет вид

$$T(z) = T_0(1 + G_T z). \quad (2.4)$$

Линеаризуем локально-равновесную функцию распределения (1.2) с параметрами, заданными на стенах канала, относительно абсолютного максвеллиана $f_0(C) = n_0(\beta/\pi)^{3/2} \exp(-C^2)$, где $\beta = m/(2k_B T_0)$, $\mathbf{C} = \beta^{1/2}\mathbf{v}$ – безразмерная скорость молекул газа. Предположим, что давление, поддерживаемое в канале, является постоянным. Учитывая при этом, что $p = n(z)k_B T(z)$, приходим к следующему выражению для $f_\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{C})$:

$$f_\Gamma(z, \mathbf{C}) = f_0(C) \left(1 + G_T \left(C^2 - \frac{5}{2} \right) z \right). \quad (2.5)$$

В силу медленного течения газа и постоянного состояния теплового равновесия со стенками канала проведем линеаризацию функции распределения $f(\mathbf{r}, \mathbf{C})$ относительно $f_\Gamma(z, \mathbf{C})$ и, учитывая выражение (2.5), представляем ее как

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{C}) = f_0(C) \left(1 + G_T \left(C^2 - \frac{5}{2} \right) z + h(x, y, \mathbf{C}) \right). \quad (2.6)$$

Функцию $f_*(\mathbf{r}', \mathbf{C})$ запишем в следующем виде:

$$f_*(\mathbf{r}, \mathbf{C}) = f_0(C)(1 + h_*(\mathbf{r}, \mathbf{C})), \quad (2.7)$$

$$h_*(\mathbf{r}, \mathbf{C}) = \frac{\delta n_*}{n(z)} + 2\mathbf{C}\mathbf{U}_* + \left(C^2 - \frac{3}{2}\right) \frac{\delta T_*}{T(z)}. \quad (2.8)$$

Подставив (2.7) в модельное кинетическое уравнение Вильямса (2.1), получим линеаризованное релаксационное уравнение для определения функции $h(x, y, \mathbf{C})$:

$$\begin{aligned} \left(C_x \frac{\partial h}{\partial x} + C_y \frac{\partial h}{\partial y} + C_z G_T \left(C^2 - \frac{5}{2}\right)\right) \gamma Kn + Ch(x, y, \mathbf{C}) = \\ = \frac{C}{2\pi} \int C' \exp(-C'^2) k(\mathbf{C}, \mathbf{C}') h(x, y, \mathbf{C}') d^3 \mathbf{C}', \end{aligned} \quad (2.9)$$

где $k(\mathbf{C}, \mathbf{C}') = 1 + 3\mathbf{C}\mathbf{C}'/2 + (C^2 - 2)(C'^2 - 2)/2$.

Представим функцию $h(x, y, \mathbf{C})$ в виде:

$$h(x, y, \mathbf{C}) = \gamma Kn G_T C_z \left(C - \frac{5}{2C}\right) Z(x, y, C_x, C_y). \quad (2.10)$$

Подставив (2.10) в (2.9), получим:

$$\left(C_x \frac{\partial Z}{\partial x} + C_y \frac{\partial Z}{\partial y}\right) \gamma Kn + CZ(x, y, C_x, C_y) + C = 0 \quad (2.11)$$

с граничным условием

$$Z(x_\Gamma, y_\Gamma, C_x, C_y) = (1 - \alpha)Z(x_\Gamma, y_\Gamma, C_x^*, C_y^*), \quad x_\Gamma C_x + y_\Gamma C_y < 0,$$

$$\mathbf{C}^* = \mathbf{C} - 2\mathbf{n}(\mathbf{n}\mathbf{C}),$$

где \mathbf{C}^* — безразмерная молекулярная скорость до отражения, а $x_\Gamma^2 + y_\Gamma^2 = 1$. Изменение функции вдоль траектории (характеристики)

$$d\mathbf{r}_\perp = \mathbf{C}_\perp dt, \quad (2.12)$$

определяется уравнением:

$$\frac{\partial Z}{\partial \mathbf{r}_\perp} \mathbf{C}_\perp \gamma Kn \sin \theta + C_\perp Z(x, y, \varphi, \theta) + C_\perp = 0, \quad (2.13)$$

$$\mathbf{C} = (C_\perp \cos \varphi, C_\perp \sin \varphi, C_z), \quad \mathbf{C}_\perp = (C_\perp \cos \varphi, C_\perp \sin \varphi), \quad C_\perp = C \sin \theta,$$

где \mathbf{C}_\perp — вектор проекции \mathbf{C} на плоскость, перпендикулярную оси z' ; $\tilde{Z}(x, y, \varphi, \theta) \equiv Z(x, y, C_x, C_y)$, где углы φ и θ отсчитываются от положительных направлений осей C_x и C_z соответственно. Далее знак тильды будем опускать. Перепишем уравнение (2.13) в виде:

$$dZ = -\frac{1}{\gamma Kn \sin \theta} (C_\perp Z(x, y, \varphi, \theta) + C_\perp) dt. \quad (2.14)$$

Решением уравнения (2.14) является функция

$$Z = A \exp\left(-\frac{C_\perp t}{\gamma Kn \sin \theta}\right) - 1, \quad (2.15)$$

где A – постоянная интегрирования; t – время движения молекулы вдоль траектории от границы, на которой происходит отражение, до точки \mathbf{r}_\perp со скоростью \mathbf{C}_\perp . Значение параметра характеристики в точке n -го отражения обозначим t_n : $t_n > t_{n-1}$. Следуя [24], рассмотрим функцию (2.15) на интервале (t_{n-1}, t_n) . В этом случае $0 \leq t \leq T_n$. Так как траектории движения представляют собой хорды окружности равных длин (Рис. 2.1), то параметр T_n , определяющий время движения молекулы со скоростью \mathbf{C}_\perp от точки $\mathbf{r}_{\perp,\Gamma,n-1}$ до точки $\mathbf{r}_{\perp,\Gamma,n}$, не зависит от выбора номера точки n : $T_n = T$. Заметив, что решением уравнения (2.12) на интервале (t_{n-1}, t_n) является вектор-функция

$$\mathbf{r}_\perp = \mathbf{r}_{\perp,\Gamma,n-1} + \mathbf{C}_\perp t, \quad (2.16)$$

приходим к следующему уравнению для определения T :

$$\mathbf{r}_{\perp,\Gamma,n} = \mathbf{r}_{\perp,\Gamma,n-1} + \mathbf{C}_\perp T. \quad (2.17)$$

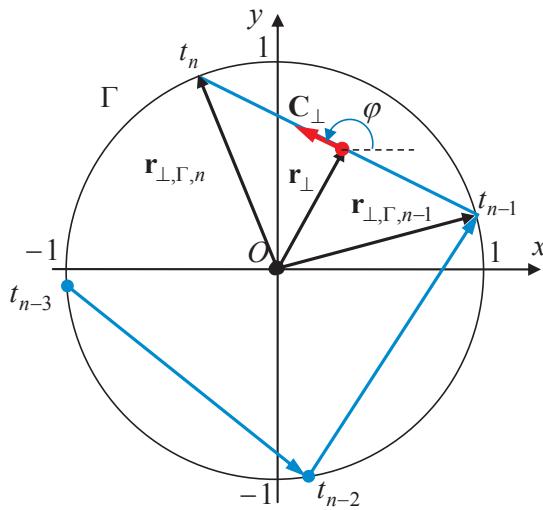


Рисунок 2.1

Траектории движения молекулы на промежутках (t_{n-1}, t_n) , (t_{n-2}, t_{n-1}) и (t_{n-3}, t_{n-2})

В точке отражения $t = t_n$ функция $Z(t) \equiv Z(t(x, y, \varphi, \theta))$ испытывает скачок:

$$Z(t_n + 0) = (1 - \alpha)Z(t_n - 0). \quad (2.18)$$

Знак $+/-$ обозначает предел функции $Z(t)$ в точке отражения t_n справа или слева по времени пролета. В момент начала отсчета времени ($t = 0$)

$$Z(t_{n-1} + 0) = A - 1. \quad (2.19)$$

Из (2.19) находим постоянную интегрирования A :

$$A = Z(t_{n-1} + 0) + 1. \quad (2.20)$$

Учитывая, что $t_n - 0 = t_{n-1} + T$ и выражение (2.20), имеем

$$Z(t_n - 0) = (Z(t_{n-1} + 0) + 1) \exp\left(-\frac{C_\perp T}{\gamma K n \sin \theta}\right) - 1. \quad (2.21)$$

Подставляя (2.18) в (2.21), получим следующее рекуррентное соотношение для нахождения $Z(t_n + 0)$:

$$Z(t_n + 0) = (1 - \alpha) \left(Z(t_{n-1} + 0) \exp \left(-\frac{C_\perp T}{\gamma K n \sin \theta} \right) + \exp \left(-\frac{C_\perp T}{\gamma K n \sin \theta} \right) - 1 \right). \quad (2.22)$$

Согласно (2.22) запишем для функции $Z(t_{n-1} + 0)$ следующее выражение:

$$Z(t_{n-1} + 0) = (1 - \alpha) \left(Z(t_{n-2} + 0) \exp \left(-\frac{C_\perp T}{\gamma K n \sin \theta} \right) + \exp \left(-\frac{C_\perp T}{\gamma K n \sin \theta} \right) - 1 \right). \quad (2.23)$$

Подставим (2.23) в (2.22). Затем с помощью соотношения (2.22), выражая $Z(t_{n-2} + 0)$ через $Z(t_{n-3} + 0)$ и т. д., получим:

$$\begin{aligned} Z(t_n + 0) &= (1 - \alpha) \left(\exp \left(-\frac{C_\perp T}{\gamma K n \sin \theta} \right) - 1 \right) + \\ &+ (1 - \alpha)^2 \left(\exp \left(-\frac{C_\perp T}{\gamma K n \sin \theta} \right) - 1 \right) \exp \left(-\frac{C_\perp T}{\gamma K n \sin \theta} \right) + \\ &+ (1 - \alpha)^3 \left(\exp \left(-\frac{C_\perp T}{\gamma K n \sin \theta} \right) - 1 \right) \exp \left(-\frac{2C_\perp T}{\gamma K n \sin \theta} \right) + \dots \end{aligned} \quad (2.24)$$

Учитывая, что выражение (2.24) представляет собой сумму бесконечно убывающей геометрической прогрессии со знаменателем $(1 - \alpha) \exp(-C_\perp T / (\gamma K n \sin \theta))$, найдем постоянную A из равенства (2.20):

$$A = 1 + \frac{(1 - \alpha) \left(\exp \left(-\frac{C_\perp T}{\gamma K n \sin \theta} \right) - 1 \right)}{1 - (1 - \alpha) \exp \left(-\frac{C_\perp T}{\gamma K n \sin \theta} \right)}. \quad (2.25)$$

Таким образом, для того чтобы соотношения (2.15) и (2.25) полностью определяли функцию $Z(x, y, \varphi, \theta)$ в случае зеркально-диффузного отражения молекул от внутренней поверхности канала, необходимо получить явный вид параметров t и T через x, y, φ .

Для определения параметра t рассмотрим уравнение (2.16), из которого следует, что

$$r_{\perp, \Gamma, n-1}^2 = r_\perp^2 - 2\mathbf{C}_\perp \mathbf{r}_\perp t + C_\perp^2 t^2. \quad (2.26)$$

Учитывая, что $r_{\perp, \Gamma, n-1} = R = 1$ и $\mathbf{C}_\perp \mathbf{r}_{\perp, \Gamma, n-1} < 0$, из уравнения (2.26) найдем t :

$$\begin{aligned} t &= \frac{\mathbf{C}_\perp \mathbf{r}_\perp t + \sqrt{C_\perp^2 (1 - r_\perp^2) - (\mathbf{C}_\perp \mathbf{r}_\perp)^2}}{C_\perp^2} = \\ &= -\frac{x \cos \varphi + y \sin \varphi + \sqrt{1 - (y \cos \varphi - x \sin \varphi)^2}}{C_\perp}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Скалярно умножая левую и правую части векторного уравнения (2.16) на \mathbf{C}_\perp , выразим t из полученного равенства. Сравнение данного выражения для t с (2.27) позволяет сделать следующий вывод:

$$\mathbf{C}_\perp \mathbf{r}_{\perp, \Gamma, n-1} = -\sqrt{C_\perp^2 (1 - r_\perp^2) - (\mathbf{C}_\perp \mathbf{r}_\perp)^2} = -\mathbf{C}_\perp \sqrt{1 - (y \cos \varphi - x \sin \varphi)^2}. \quad (2.28)$$

Параметр T найдем из уравнения (2.17), учитывая при этом (2.28):

$$T = -\frac{2\mathbf{C}_\perp \mathbf{r}_{\perp, \Gamma, n-1}}{C_\perp^2} = \frac{2\sqrt{1 - (y \cos \varphi - x \sin \varphi)^2}}{C_\perp}. \quad (2.29)$$

Таким образом, при подстановке полученных выражений (2.25), (2.27) и (2.29) в (2.15) функция $Z(x, y, \varphi, \theta)$ принимает вид:

$$Z(x, y, \varphi, \theta) = \frac{\alpha \exp\left(-\frac{x \cos \varphi + y \sin \varphi + \sqrt{1 - (y \cos \varphi - x \sin \varphi)^2}}{\gamma K n \sin \theta}\right)}{1 - (1 - \alpha) \exp\left(-\frac{2\sqrt{1 - (y \cos \varphi - x \sin \varphi)^2}}{\gamma K n \sin \theta}\right)} - 1. \quad (2.30)$$

Для того чтобы получить выражение для функции (2.30), записанное в цилиндрических системах координат в конфигурационном пространстве и пространстве скоростей, выполним замену переменных в (2.30) по формулам $x = \rho \cos \phi$, $y = \rho \sin \phi$, $\rho = r_\perp$; $C_\rho = C_\perp \cos \psi$, $C_\xi = C_\perp \sin \psi$. Учитывая при этом, что $\psi = \varphi - \phi$, запишем:

$$Z(\rho, \psi, \theta) = \frac{\alpha \exp(-\xi_1(\rho, \psi, \theta))}{\exp(\xi_2(\rho, \psi, \theta)) - (1 - \alpha) \exp(-\xi_2(\rho, \psi, \theta))} - 1, \quad (2.31)$$

$$\xi_1(\rho, \psi, \theta) = \frac{\rho \cos \psi}{\gamma K n \sin \theta}, \quad \xi_2(\rho, \psi, \theta) = \frac{\sqrt{1 - \rho^2 \sin^2 \psi}}{\gamma K n \sin \theta}. \quad (2.32)$$

Выражение (2.31) совпадает с результатом, полученным в работе [25] при моделировании течения в канале на основании уравнения Вильямса, записанного в цилиндрической системе координат.

3. Вычисление потоков тепла и массы газа в канале. Анализ полученных результатов

Построенная функция (2.6) позволяет восстановить безразмерные z -компоненты вектора потока тепла $q_z(x, y)$ и массовой скорости газа $U_z(x, y)$ в канале:

$$q_z(x, y) = \frac{\gamma K n G_T}{\pi^{3/2}} \int \exp(-C^2) \frac{C_z^2}{C} \left(C^2 - \frac{5}{2}\right)^2 Z(x, y, \varphi, \theta) d^3 \mathbf{C} = -\frac{3G_T \gamma K n}{2\sqrt{\pi}} \times \\ \times \left(1 - \frac{3\alpha}{2\pi} \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta \int_0^\pi \frac{\exp\left(-\frac{x \cos \varphi + y \sin \varphi + \sqrt{1 - (y \cos \varphi - x \sin \varphi)^2}}{\gamma K n \sin \theta}\right)}{1 - (1 - \alpha) \exp\left(-\frac{2\sqrt{1 - (y \cos \varphi - x \sin \varphi)^2}}{\gamma K n \sin \theta}\right)} d\varphi\right), \quad (3.1)$$

$$U_z(x, y) = \frac{\gamma K n G_T}{\pi^{3/2}} \int \exp(-C^2) \frac{C_z^2}{C} \left(C^2 - \frac{5}{2}\right) Z(x, y, \varphi, \theta) d^3 \mathbf{C} = -\frac{2}{9} q_z(x, y), \quad (3.2)$$

где $q_z(x, y)$ и $U_z(x, y)$ в (3.1) и (3.2) связаны с размерными величинами соотношениями [2]:

$$q_z(x, y) = \frac{\beta^{1/2}}{p_0} q'_z(x, y), \quad q'_z(x, y) = \frac{m}{2} \int (v_z - u_z(\mathbf{r})) |\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{r})|^2 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v}, \quad (3.3)$$

$$U_z(x, y) = \beta^{1/2} u_z(x, y), \quad u_z(x, y) = \frac{1}{n(z)} \int v_z f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3 \mathbf{v}. \quad (3.4)$$

Согласно [1], определим приведенные потоки тепла J_Q и массы газа J_M в канале как

$$J_Q = \frac{8}{\pi} \int_0^1 dy \int_0^{\sqrt{1-y^2}} q_z(x, y) dx, \quad J_M = \frac{8}{\pi} \int_0^1 dy \int_0^{\sqrt{1-y^2}} U_z(x, y) dx. \quad (3.5)$$

В случае полной аккомодации молекул газа стенками канала ($\alpha = 1$) выражение (3.1) примет вид:

$$q_z(x, y) = -\frac{3G_T\gamma Kn}{2\sqrt{\pi}} \times \\ \times \left(1 - \frac{3}{2\pi} \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta \int_0^\pi \exp \left(-\frac{x \cos \varphi + y \sin \varphi + \sqrt{1 - (y \cos \varphi - x \sin \varphi)^2}}{\gamma Kn \sin \theta} \right) d\varphi \right). \quad (3.6)$$

В таблице 1 приведены значения величины $J_{T,M}/G_T$, вычисленные по формуле (3.5) с использованием системы компьютерной алгебры Maple 18, в сравнении результатами, полученными в [21]–[22] на основе экспериментальных данных массового потока нестационарным методом для He , Ne и Ar . Относительная погрешность измерений в ходе экспериментов составила 2 %. Анализ результатов, представленных в таблице 1, показал, что при $Kn = 1/2$ и $Kn = 1/3$ отличие значений $J_{T,M}/G_T$, найденных по формуле (3.5) для $\alpha = 0.895$, 0.925 и 0.927, от соответствующих значений массового потока в [22] и [21] для He и Ne не превышает 7 %, а для Ar составляет 6 % [21]. С уменьшением числа Кнудсена различие увеличивается, поскольку при переходе к гидродинамическому пределу уравнение Вильямса приводит к значению числа Прандтля, которое отличается от соответствующего значения для одноатомного газа [26].

Таблица 1: Значения $J_{T,M}/G_T$ в сравнении с экспериментальными данными [21]–[22]

Kn^{-1}	$\alpha = 0.895$ (3.5)	He		$\alpha = 0.925$ (3.5)	Ne		$\alpha = 0.927$ (3.5)	Ar [22]
		[22]	[21]		[22]	[21]		
2	0.2839	0.282	0.2906	0.2801	0.274	0.2859	0.2798	0.283
3	0.2138	0.227	0.2314	0.2118	0.221	0.2304	0.2117	0.225
4	0.1712	0.191	0.1907	0.1700	0.187	0.1899	0.1698	0.188
5	0.1425	0.164	0.1607	0.1417	0.161	0.1605	0.1416	0.162
6	0.1220	0.143	0.1384	0.1214	0.139	0.1382	0.1214	0.142
7	0.1065	0.125	0.1217	0.1061	0.122	0.1210	0.1061	0.120
8	0.0946	0.111	0.1091	0.0942	0.108	0.1076	0.0942	0.113
9	0.0850	0.0995	0.0982	0.0847	0.0972	0.0969	0.0847	0.101
10	0.0772	0.0908	0.0896	0.0770	0.0889	0.0887	0.0769	0.0913
20	0.0401	0.0486	0.0618	0.0401	0.0471	0.0615	0.0400	0.0497
30	0.0271	0.0328	0.0473	0.0270	0.0317	0.0475	0.0270	0.0336

В таблице 2 для сравнения приведены результаты работы [6] при $\alpha = 1$, 0.8 и 0.6, полученные с использованием S-модели методом дискретных ординат. Анализ данных, представленных в таблице 2, показал, что уменьшение коэффициента аккомодации тангенциального импульса приводит к увеличению массового потока в канале. При этом наблюдается уменьшение различий значений $J_{T,M}/G_T$, найденных в рамках S-модели и уравнения Вильямса, при $Kn < 0.5$. При приближении к свободномолекулярному режиму происходит в целом увеличение различий, которое не превосходит 1 % при $Kn = 1000$ и 6 % при

$Kn = 100$. Отличие приведенных значений потока массы газа от [6] не превышает 8 % при $Kn > 10$.

Таблица 2: Значения $J_{T,M}/G_T$ в зависимости от $\alpha = 1, 0.8$ и 0.6

Kn	α					
	1		0.8		0.6	
	(3.5)	[6]	(3.5)	[6]	(3.5)	[6]
0.0001	0.0001	—	0.0001	—	0.0001	—
0.0010	0.0008	—	0.0008	—	0.0008	—
0.0100	0.0083	—	0.0083	—	0.0083	—
0.1000	0.0765	0.1014	0.0778	0.0962	0.0792	0.0908
0.5000	0.2705	0.3016	0.2965	0.3118	0.3238	0.3230
1.0000	0.3881	0.3959	0.4529	0.4372	0.5264	0.4865
2.0000	0.4977	0.4779	0.6209	0.5648	0.7742	0.6769
5.0000	0.6080	0.5675	0.8165	0.7244	1.1066	0.9435
10.000	0.6632	0.6210	0.9266	0.8297	1.3166	1.1341
100.00	0.7376	0.7243	1.0919	1.0530	1.6687	1.5775
1000.0	0.7502	0.7486	1.1230	1.1166	1.7525	1.7237
10000	0.7520	—	1.1267	—	1.7513	—

Для режима течения, близкого к свободномолекулярному, выражение (3.5) для приведенного потока массы может быть представлено в виде ряда по малому параметру Kn^{-1} . В этом случае, ограничиваясь членами разложения порядка Kn^{-1} , получим:

$$\frac{J_{T,M}}{G_T} = \frac{4 \cdot (2 - \alpha)}{3\alpha\sqrt{\pi}} - \frac{2 \cdot (\alpha^2 - 6\alpha + 6)}{5\alpha^2\pi Kn} (\ln 2 + 2 \ln Kn - 2). \quad (3.7)$$

Первое слагаемое в (3.7) определяет приведенный поток массы газа в свободномолекулярном режиме в рамках зеркально-диффузной модели отражения и совпадает с выражением [1]. В случае полной аккомодации молекул газа стенками канала выражение (3.7) становится равным $J_{T,M} = 4G_T/(3\sqrt{\pi})$. При $Kn \geq 100$ значения, полученные на основе асимптотической формулы (3.7), согласуются с результатами, представленными в таблице 2, для каждого из приведенных значений α . Так, для $Kn = 100$ и $\alpha = 0.6, 0.8$ приведенные потоки массы газа согласно (3.7) принимают значения $J_{T,M} = 1.6781G_T, 1.0994G_T$, которые превышают аналогичные значения $J_{T,M} = 1.6687G_T, 1.0919G_T$, вычисленное по (3.5) не более чем на 0.7 % как и в случае диффузной модели отражения.

Для режимов течения, близких к гидродинамическому, выражение (3.2) приближается к значению $U_{T,z}(x, y) = G_T\gamma Kn/(3\sqrt{\pi})$. Приведенный поток массы (3.5) в этом случае имеет предел $J_{T,M} = 5G_TKn/6$. Таким образом, для режимов, близких к гидродинамическому режиму, приведенные потоки тепла и массы не зависят от коэффициента аккомодации тангенциального импульса.

4. Заключение

В работе в рамках кинетического подхода с применением метода характеристик решена задача о переносе тепла и массы газа в цилиндрическом канале под действием постоянного градиента температуры. Получены выражения для приведенных потоков тепла и массы газа как линейные функции от градиента температуры и вычислены значения этих

потоков для режимов течения от свободномолекулярного до гидродинамического. Показано существенное влияние коэффициента аккомодации тангенциального импульса молекул газа на величину потока массы газа, причем наибольшее отклонение значений массового потока при неполной аккомодации молекул газа на стенках от соответствующих значений для диффузной модели отражения, наблюдалось при приближении к свободномолекулярному режиму. Для других режимов течения значения потока массы также возрастают при уменьшении коэффициента аккомодации тангенциального импульса, но более медленно, достигая асимптотического предела в гидродинамическом режиме течения. Проведен сравнительный анализ с результатами, полученными в рамках S-модели кинетического уравнения Больцмана с постоянной частотой столкновения, а также с экспериментальными данными. Получены простые формулы для определения приведенных потоков в режимах течения, близких к свободномолекулярному. Рассмотренный метод построения решения модельного уравнения Вильямса, удовлетворяющего зеркально-диффузной модели молекул газа стенками канала, может быть также применен к каналам с другой конфигурацией сечения.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-302-00001.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ф. М. Шарипов, В. Д. Селезнев, *Движение разреженных газов в каналах и микроканалах*, УрО РАН, Екатеринбург, 2008, 230 с.
2. М. Н. Коган, *Динамика разреженного газа. Кинетическая теория*, Наука, М., 1967, 440 с.
3. C. Cercignani, M. Lampis, “Kinetic models for gas-surface interactions”, *Transport Theory and Statist. Phys.*, **1** (1971), 101–114.
4. С. В. Гулакова, В. Н. Попов, “Аналитическое решение уравнения Вильямса в задаче о течении Пуазейля с использованием зеркально-диффузной модели взаимодействия молекул газа со стенками канала”, *Журнал технической физики*, **85**:4 (2015), 1–6.
5. C. E. Siewert, “The Linearized Boltzmann Equation: Concise and Accurate Solutions to Basic Flow Problems”, *Zeitschrift fur Angewandte Mathematic und Physik*, **54** (2003), 273–303.
6. F. Sharipov, “Rarefied gas flow through a long tube at any pressure ratio”, *J. Vac. Sci. Technol. A.*, **12**:5 (1994), 2933–2935.
7. M. Hadj-Nacer, *Tangential momentum accommodation coefficient in microchannels with different surface materials (measurements and simulations)*, these de doctoraten Energetique, Universite d'aix Marseille, 2012, 210 с.
8. M. T. Ho, I. Graur, “Rarefied gas flow through a long rectangular channel of variable cross section”, *Vacuum*, **101** (2014), 328–332.
9. F. M. Sharipov, “Rarefied gas flow through a long rectangular channel”, *J. Vac. Sci. Technol. A: Vacuum, Surfaces, and Films*, **17**:5 (1999), 3062–3066.

10. В. А. Титарев, Е. М. Шахов, “Кинетический анализ изотермического течения в длинном микроканале прямоугольного поперечного сечения”, *Журнал вычислительной математики и математической физики*, **50**:7 (2010), 1285–1302.
11. О. В. Гермидер, В. Н. Попов, “Математическое моделирование процесса переноса тепла в прямоугольном канале в зависимости от числа Кнудсена”, *Журнал Средневолжского математического общества*, **18**:2 (2016), 85–93.
12. S. Naris, D. Valougeorgis, “Rarefied gas flow in a triangular duct based on a boundary fitted lattice”, *European Journal of Mechanics B/Fluids*, **27**:6 (2008), 810–822.
13. C. E. Siewert, D. Valougeorgis, “An analytical discrete-ordinates solution of the S-model kinetic equations for flow in a cylindrical tube”, *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, **72** (2002), 531–550.
14. P. Taheri, M. Bahrami, “Macroscopic description of nonequilibrium effects in thermal transpiration flows in annular microchannels”, *Physical Review*, **86** (2012), 1–9.
15. C. H. Kamphorst, P. Rodrigues, L. B. Barichello, “A closed-form solution of a kinetic integral equation for rarefied gas flow in a cylindrical duct”, *Applied Mathematics*, **5** (2014), 1516–1527.
16. О. В. Гермидер, В. Н. Попов, А. А. Юшканов, “Математическое моделирование процесса теплопереноса в длинном цилиндрическом канале”, *Журнал Средневолжского математического общества*, **17**:1 (2015), 22–29.
17. I. Graur, F. Sharipov, “Gas flow through an elliptical tube over the whole range of the gas rarefaction”, *European Journal of Mechanics B/Fluids*, **27**:3 (2008), 335–345.
18. О. В. Гермидер, В. Н. Попов, А. А. Юшканов, “Процесс переноса тепла в эллиптическом канале”, *Математическое моделирование*, **29**:1 (2017), 84–94.
19. S. Pantazis, S. Varoutis, V. Hauer, C. Day, D. Valougeorgis, “Gas-surface scattering effect on vacuum gas flows through rectangular channels”, *Vacuum*, **85**:12 (2011), 1161–1164.
20. Р. Курант, *Уравнения с частными производными*, Мир, М., 1964, 830 с.
21. А. Н. Кулев, *Экспериментальное исследование неизотермического течения газов в капиллярах*, дисс. ... канд. физ.-матем. наук, Свердловск, 1977, 172 с.
22. B. T. Porodnov, P. E. Suetin, S. F. Borisov, V. D. Akinshin, “Experimental investigation of rarefied gas flow in different channels”, *J. Fluid Mech.*, **64**:3 (1974), 417–438.
23. К. Черчиньяди, *Математические методы в кинетической теории газов*, Мир, М., 1973, 245 с.
24. А. Г. Лесскис, А. А. Юшканов, Ю. И. Яламов, “Магнитное дипольное поглощение инфракрасного излучения мелкой металлической частицей”, *Поверхность*, **11** (1987), 115–121.
25. O. V. Germider, V. N. Popov, “Mathematical simulation of heat and mass transfer in a cylindrical channel versus the tangential momentum accommodation coefficient”, *Technical Physics*, **62**:11 (2017), 1605–1610.

26. А. В. Латышев, А. А. Юшканов, *Кинетические уравнения типа Вильямса и их точные решения: монография*, Издательство МГОУ, М., 2004, 271 с.

Поступила 20.12.2017

MSC2010 35F30

Mathematical modeling of transport processes in a cylindrical channel

© O. V. Germider³, V. N. Popov⁴

Abstract. In the framework of the kinetic approach, a solution of heat and mass transfer problems in a long cylindrical channel is found using a mirror-diffuse model of the Maxwell boundary condition. The Williams equation is used as the main equation describing the kinetics of the process, assuming that a constant longitudinal temperature gradient is maintained in the channel. The Williams equation is written in the Cartesian coordinate system. The solution of the linearized problem of nonisothermal flow of the rarefied gas through the channel is obtained using the method of characteristics. It is shown that the type of the boundary condition becomes decisive in the construction of this solution. In a wide range of the Knudsen numbers, the reduced heat and gas mass flows through the cross-section of the channel are calculated depending on the accommodation coefficient of the tangential pulse. Limiting expressions of these flows for the free molecular and hydrodynamic flow regimes are obtained. The comparison with similar results presented in the open press is carried out. The obtained results can be used in the development of new nanotechnology.

Key Words: kinetic Boltzmann equation, Williams equation, mirror-diffuse reflection, mirror-diffuse model, Maxwell model, analytic solution, Knudsen number.

REFERENCES

1. F. M. Sharipov, V. D. Seleznev, *Dvizhenie razrezhennyh gazov v kanalah i mikrokanalah* [Rarefied Gas Flows in Channels and Microchannels], Ural Branch of the Russian Academy of Sciences Publ., Yekaterinburg, 2008 (In Russ.), 230 p.
2. M. N. Kogan, *Dinamika razrezhennogo gaza Kineticheskaya teoriya* [Rarefied Gas Flows in Channels and Microchannels], Nauka Publ., Moscow, 1967 (In Russ.), 440 p.
3. C. Cercignani, M. Lampis, “Kinetic model for gas-surface interaction”, *Transport theory statist. Phys.*, **1** (1971), 101–114.
4. S. V. Gulakova V. N. Popov, “[An analytic solution of the Williams equation in the problem of Poiseuille flow using a mirror-diffuse model interaction of gas molecules with channel walls]”, *Technical Physics*, **85**:4 (2015), 1–6 (In Russ.).
5. C. E. Siewert, “The linearized Boltzmann Equation: Concise and Accurate Solutions to Basic Flow Problems”, *Zeitschrift fur Angewandte Mathematic und Physik*, **54** (2003), 273–303.

³ Оксана В. Гермидер, Postgraduate Student, Northern (Arctic) Federal University named after M. V. Lomonosov (17 Severnaya Dvina Emb., Arkhangelsk 163002, Russia), ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2112-805X>, o.germider@narfu.ru

⁴ Василий Н. Попов, Head of Mathematics Chair, Northern (Arctic) Federal University named after M. V. Lomonosov, (17 Severnaya Dvina Emb., Arkhangelsk 163002, Russia), Ph.D. (Physics and Mathematics), ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0803-4419>, v.popov@narfu.ru

6. F. Sharipov, “Rarefied gas flow through a long tube at any pressure ratio”, *J. Vac. Sci. Technol. A.*, **14**:4 (1996), 2627–2635.
7. M. Hadj-Nacer, *Tangential momentum accommodation coefficient in microchannels with different surface materials (measurements and simulations)*, These de doctorat, Universite d'aix Marseille, 2012, 210 p.
8. M. T. Ho, I. Graur, “Rarefied gas flow through a long rectangular channel of variable cross section”, *Vacuum*, **101** (2014), 328–332.
9. F. M. Sharipov, “Rarefied gas flow through a long rectangular channel”, *J. Vac. Sci. Technol. A.*, **17**:5 (1999), 3062–3066.
10. V. A. Titarev, E. M. Shakhov, “[Kinetic analysis of an isothermal flow in a long microchannel with rectangular cross section]”, *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.*, **50**:7 (2010), 1285–1302 (In Russ.).
11. O. V. Germider, V. N. Popov, “[Mathematical modeling of the heat transfer process in a rectangular channel depending on Knudsen number]”, *Zhurnal SVMO*, **18**:2 (2016), 85–93 (In Russ.).
12. S. Naris, D. Valougeorgis, “Rarefied gas flow in a triangular duct based on a boundary fitted lattice”, *European Journal of Mechanics B/ Fluids*, **27** (2008), 810–822.
13. C. E. Siewert, D. Valougeorgis, “An analytical discrete-ordinates solution of the S-model kinetic equations for flow in a cylindrical tube”, *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, **72** (2002), 531–550.
14. P. Taheri, M. Bahrami, “Macroscopic description of nonequilibrium effects in thermal transpiration flows in annular microchannels”, *Physical Review*, **86** (2012), 1–9.
15. C. H. Kamphorst, P. Rodrigues, L. B. Barichello, “A Closed-Form Solution of a Kinetic Integral Equation for Rarefied Gas Flow in a Cylindrical Duct”, *Applied Mathematics*, **5** (2014), 1516–1527.
16. O. V. Germider, V. N. Popov, A. A. Yushkanov, “[Mathematical modeling of the process heat transfer in a long cylindrical channel]”, *Zhurnal SVMO*, **17**:1 (2015), 22–29 (In Russ.).
17. I. Graur, F. Sharipov, “Gas flow through an elliptical tube over the whole range of the gas rarefaction”, *European Journal of Mechanics B/Fluids*, **27** (2008), 335–345.
18. O. V. Germider, V. N. Popov, A. A. Yushkanov, “[Heat transfer process in an elliptic channel]”, *Matem. Mod.*, **29**:1 (2017), 84–94 (In Russ.).
19. C. Day, V. Hauer, S. Pantazis, S. Varoutis, D. Valougeorgis, “Gas-surface scattering effect on vacuum gas flows through rectangular channels”, *Vacuum*, **85** (2011), 1161–1164.
20. R. Courant, *Uravneniya s chastnymi proizvodnymi [Partial Differential Equations]*, Mir Publ., Moscow, 1964 (In Russ.), 830 p.
21. V. D. Akinshin, B. T. Porodnov, P. E. Suetin, S. F. Borisov, “Experimental investigation of rarefied gas flow in different channels”, *J. Fluid Mech.*, **64** (1974), 417–437.

22. A. N. Kulev, *Ehksperimentalnoe issledovanie neizotermicheskogo techeniya gazov v kapillyarakh* [Experimental study of nonisothermal gas flow in capillaries], Diss. kand. fiz.-mat. nauk [PhD phys. and math. sci. diss.], Sverdlovsk, 1977 (In Russ.), 177 p.
23. C. Cercignani, *Matematicheskie metody v kineticheskoy teorii gazov* [Mathematical methods in the kinetic theory of gases], Mir Publ., Moscow, 1973 (In Russ.), 245 p.
24. A. G. Lesskis, A. A. Yushkanov, Yu. I. Yalamov, “[Magnetic dipole absorption of infrared radiation by a fine metal particle]”, *Surface*, **11** (1987), 115–121 (In Russ.).
25. O. V. Germider, V. N. Popov, “Mathematical Simulation of Heat and Mass Transfer in a Cylindrical Channel versus the Tangential Momentum Accommodation Coefficient”, *Technical Physics*, **62**:11 (2017), 1605–1610.
26. A. V. Latyshev, A. A. Yushkanov, *Kineticheskie uravneniya tipa Vilyamsa i ikh tochnye resheniya monografiya* [Kinetic equations of Williams type and their exact solutions: monograph], MGOU Publ., Moscow, 2004 (In Russ.), 271 p.

Submitted 20.12.2017