

УДК 536.244: 533.6.011

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОДИНАМИЧЕСКОЙ ПРОВОДИМОСТИ МИКРОКАНАЛОВ С УЧЕТОМ СТРУКТУРЫ ИХ ПОВЕРХНОСТИ

А. И. Ухов, Б. Т. Породнов, С. Ф. Борисов\*

Уральский государственный технический университет, 620002 Екатеринбург

\* Уральский государственный университет, 620083 Екатеринбург

E-mail: sanek\_uhov@mail.ru

Методом пробной частицы исследовано влияние структуры поверхности микроканалов на свободномолекулярное течение газа. Расчеты выполнены для каналов, поверхность которых либо получена путем статистического моделирования, либо восстановлена по данным атомно-силовой микроскопии реальных поверхностей. Рассмотрены зависимости рассеяния монохроматического молекулярного пучка от угла падения и средней высоты поверхностной микронеровности. Показано, что разработанная методика позволяет получать функцию распределения частиц, отраженных от шероховатой поверхности, и использовать ее в граничных условиях в задачах динамики разреженного газа.

**Ключевые слова:** течение разреженного газа в микроканалах, метод пробной частицы Монте-Карло, взаимодействие газа с поверхностью, индикатрисы рассеяния, атомно-силовая микроскопия.

**Введение.** При решении газодинамических задач, связанных с входением летательных аппаратов в верхние слои атмосферы или с течением газа в устройствах микро- и наномасштаба, необходимо учитывать параметры, характеризующие структуру и химический состав обтекаемой поверхности. Многочисленные экспериментальные исследования показывают, что структура поверхности, ее температура и другие факторы оказывают существенное влияние на рассеяние молекул разреженного газа и как следствие на газодинамическое сопротивление и теплообмен в системе газ — твердое тело [1].

Одной из важнейших составляющих модели динамики газа при внешнем обтекании и внутренних течениях являются граничные условия для уравнения Больцмана, которые предполагают наличие функции распределения газовых молекул, отраженных от поверхности, в аналитическом виде. Данная функция зависит от многих характеристик газа и поверхности, а также от термодинамических параметров системы в целом. Одним из факторов, оказывающих существенное влияние на перенос энергии и импульса в системе газ — твердое тело, является физическая неоднородность (шероховатость) поверхности.

Вследствие недостатка информации о структуре поверхности и ее роли при взаимодействии газа с твердым телом рассматриваются подходы с использованием абсолютно гладких поверхностей или простейших моделей шероховатости [2]. Влияние структуры поверхности на свободномолекулярный поток газа в цилиндрических каналах экспериментально изучено в работах [3, 4].

Развитие методов компьютерного моделирования, а также использование новой экспериментальной техники, в частности сканирующего зондового микроскопа, позволяют достичь некоторого прогресса в численном моделировании рассеяния газа шероховатыми поверхностями и в описании течения разреженного газа в каналах, структура поверхности которых соответствует условиям физического эксперимента [5–7].

Использование атомно-силовой микроскопии позволяет получить трехмерные топограммы высокого разрешения. Полученная таким образом оцифрованная поверхность представляет собой массив, элементы которого содержат координаты каждой точки поверхности исследуемого образца. В данной работе использовались координаты 160 тыс. точек поверхности монокристаллического кремния размером  $20 \times 20$  мкм. В ходе исследования заданной шероховатой поверхности определены ее основные характеристики. Установлено, что распределение элементов микронеровности по высоте подчиняется нормальному закону распределения; средняя высота микронеровностей  $\langle Z \rangle = 1,106$  мкм, среднеквадратичное отклонение  $\sigma = 0,275$  мкм.

**Моделирование поверхностных структур.** Моделирование отдельных элементов (пиков) шероховатости проводилось с использованием статистических методов, которые применяются при разыгрывании высоты  $R_h$  и ширины  $R_w$  микронеровности в соответствии с полученной по данным атомно-силовой микроскопии функцией распределения элементов по высоте в аналитическом виде.

При моделировании формы пика решалась задача ресемплирования (восполнения), возникающая в результате перехода от регулярной сетки с размерами  $m_1 \times n_1$  узлов к сетке с размерами  $m_2 \times n_2$  узлов. В этом случае необходимо вычислить значения функции на новой сетке, используя значения функции на регулярной сетке. Таким образом, узлу с индексом (2,2) исходной сетки размером  $3 \times 3$  присваивается значение  $R_h$ , значения остальных узлов сетки полагаются равными нулю. Затем проводится ресемплирование исходной матрицы на сетке с размерами  $R_w \times R_w$ . Для определения значений функции в узлах новой матрицы (задача восполнения) могут применяться различные методы, например билинейное и бикубическое ресемплирование. При бикубическом восполнении необходимо построить таблицу коэффициентов либо кусочно-линейного сплайна, либо кубического сплайна, либо сплайна Акимы. В данной работе используется ресемплирование сплайном Акимы, выбор которого обусловлен тем, что форма получаемых пиков близка к форме, наблюдаемой при атомно-силовой микроскопии образцов, а также тем, что сплайн Акимы устойчив к выбросам. Заметим, что существенным недостатком кубических сплайнов является их осциллирование в окрестностях точки, существенно отличающейся от соседних. На рис. 1 показаны кубический сплайн и сплайн Акимы, построенные при одних и тех же исходных данных. Видно, что в отличие от кубического сплайна сплайн Акимы менее подвержен влиянию выбросов. На отрезках, граничащих с точкой выброса, практически отсутствуют признаки осцилляции, что определило выбор вида сплайна для моделирования формы шероховатости.

На конечном этапе моделирования полученный пик переносится на моделируемую поверхность. Использование при моделировании структуры поверхности дополнительного параметра  $\rho$  позволяет задавать плотность расположения отдельных элементов шероховатости на моделируемой структуре путем разыгрывания случайной величины  $R_f$ . В случае если разыгранное значение  $R_f$  меньше значения  $\rho$ , пик переносится на поверхность.

В дальнейшем две или несколько поверхностей можно комбинировать в одну более “сложную”. В результате такого комбинирования, основанного на совмещении определенным образом заданных структур, получается новая поверхность. Координата высоты  $Z_{res}$ , на которой расположена каждая точка этой поверхности, определяется путем сложения (вычитания) или путем выбора максимального (минимального) значения из двух координат высоты, на которой расположены точки исходных поверхностей:

$$Z_{res} = \begin{cases} \sum (Z_1 + Z_2), \\ \text{sub} (Z_1 - Z_2), \\ \max (Z_1, Z_2), \\ \min (Z_1, Z_2). \end{cases}$$

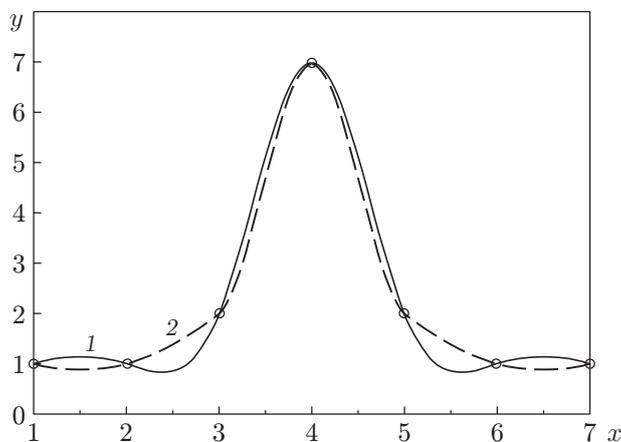


Рис. 1. Кубический сплайн (1) и сплайн Акимы (2), построенные при одних и тех же исходных данных (точки)

Используя функции  $Z_1 = \sin(x)$  и  $Z_2 = 0,3$ , можно построить два профиля поверхности:  $Z_{res} = \max(\sin(x), 0,3)$  или  $Z_{res} = \min(\sin(x), 0,3)$ . Комбинируя различным способом функции, меняя их параметры (например, амплитуду  $\alpha$  или период  $\beta$  у функции  $Z_1 = \alpha \sin(\beta x)$ ) либо используя более сложные функции, можно получить достаточно широкий спектр шероховатых поверхностей.

**Моделирование рассеяния.** В основу моделирования положено рассеяние монохроматического молекулярного пучка шероховатой поверхностью, структура которой восстановлена по данным атомно-силовой микроскопии. Для аналитического поиска точки пересечения траектории частицы поверхность покрывалась триангуляционной сеткой. Моделирование осуществлялось с использованием метода пробной частицы, взаимодействующей с поверхностью при различных углах падения и заданной средней высоте микрошероховатости, для двух значений коэффициента диффузного отражения молекул от элемента поверхности:  $\varepsilon = 1$  (полностью диффузное отражение) и  $\varepsilon = 0$  (полностью зеркальное отражение). В процессе моделирования исследовалось влияние высоты шероховатости на рассеяние частиц путем изменения средней высоты микронеровности за счет изменения множителя высоты  $H = 0 \div 5$ . Значению  $H = 1$  соответствует поверхность, реконструируемая по данным атомно-силовой микроскопии экспериментально исследуемого образца.

Перед началом моделирования процесса рассеяния для всех частиц в зависимости от угла падения задаются вектор скорости и случайное положение на плоскости, находящейся над исследуемой поверхностью и параллельно ей. Точка пересечения траектории частицы с элементами поверхности находится с помощью широко используемого в компьютерной графике метода “оболочек”, который заключается в следующем. Исследуемая область поверхности представляется в виде прямоугольных параллелепипедов с одинаковой площадью основания и высотой, равной локальной максимальной высоте элемента шероховатости, находящегося на данной площади. Каждый параллелепипед имеет определенный набор треугольников в основании. В случае если при перемещении частица пересекает одну из оболочек (параллелепипед), рассматривается возможность столкновения частицы только с теми треугольниками, которые принадлежат этой оболочке. Использование данного метода позволяет значительно сократить время поиска точки пересечения траектории частицы с поверхностью. Для этого необходимо найти точку пересечения прямой с плоскостью, построенной в основании треугольника, затем определить принадлежность точки пересечения данному треугольнику: в случае если точка находится внутри треугольника, частица пересекла поверхность, в случае если точка находится вне треугольника,

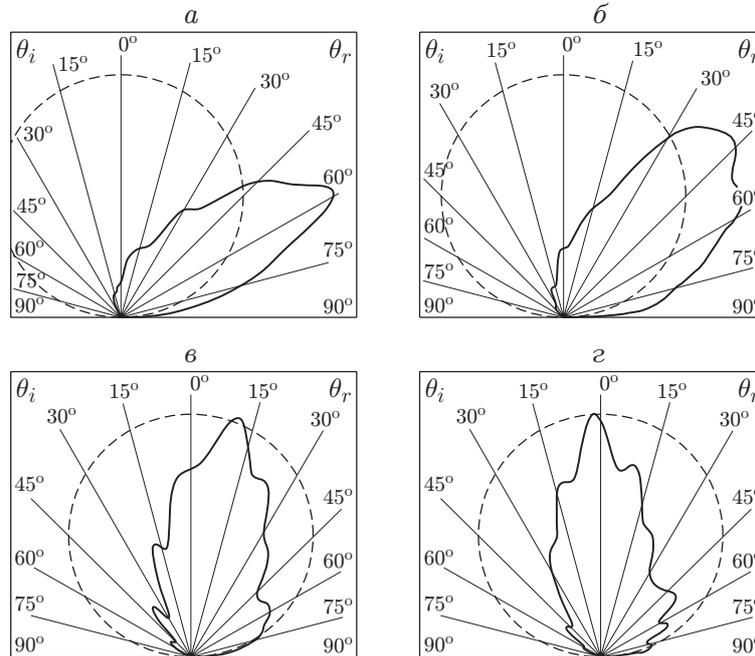


Рис. 2. Индикатрисы рассеяния отраженных ( $\varepsilon = 0$ ) от поверхности частиц при  $H = 1$  и различных углах падения:  
 а —  $\theta_i = 75^\circ$ , б —  $\theta_i = 45^\circ$ , в —  $\theta_i = 15^\circ$ , г —  $\theta_i = 0$ ; штриховые линии — косинусоидальное распределение

частица не столкнулась с поверхностью. Моделирование движения частицы прекращается в тот момент, когда частица вылетает за границы расчетной области после столкновения с поверхностью. По завершении движения информация о компонентах скорости частицы и количестве ее столкновений с поверхностью сохраняется. Также определяется количество частиц, попавших в заданные углы отражения от поверхности, по которым в дальнейшем строятся индикатрисы рассеяния.

До начала моделирования были проведены тестовые расчеты, в которых рассматривалось рассеяние частиц на абсолютно гладкой поверхности при полностью диффузном и полностью зеркальном вариантах взаимодействия и угле падения частиц  $\theta_i = 45^\circ$ . В первом случае получены индикатрисы рассеяния, удовлетворяющие закону косинуса, во втором —  $\delta$ -функция с углом отражения  $\theta_r = 45^\circ$ .

На первом этапе численного эксперимента рассматривалось полностью зеркальное взаимодействие частиц пучка с поверхностью ( $\varepsilon = 0$ ). Моделирование проводилось при значениях  $H = 1, 2, 3, 4, 5$  и углах падения  $\theta_i = 0, 15, 45, 75^\circ$ . На рис. 2 показаны индикатрисы в плоскости падения пучка, полученные при его рассеянии на “реальной” поверхности ( $H = 1$ ) при различных углах падения  $\theta_i$ . Согласно рис. 2 при уменьшении угла падения  $\theta_i$  угол отражения  $\theta_r$  также уменьшается. Установлено, что при увеличении множителя высоты от значения  $H = 1$  до значения  $H = 5$  форма индикатрис рассеяния меняется от лепестковых (при  $H = 1, 2$ ) до косинусоидальных, характерных для диффузного рассеяния частиц при  $H > 2$ .

На следующем этапе численного эксперимента рассматривался случай полностью диффузного взаимодействия ( $\varepsilon = 1$ ). Исследовалось рассеяние молекулярного пучка при углах падения  $\theta_i = 0, 15, 45, 75^\circ$  на поверхностях с множителем высоты  $H = 1, 3, 5$ . На рис. 3, а–г показано распределение компоненты скорости  $v_y$ , полученное при указанных углах падения и множителе высоты  $H = 3$ . На рис. 3, д–з представлены соответствующие

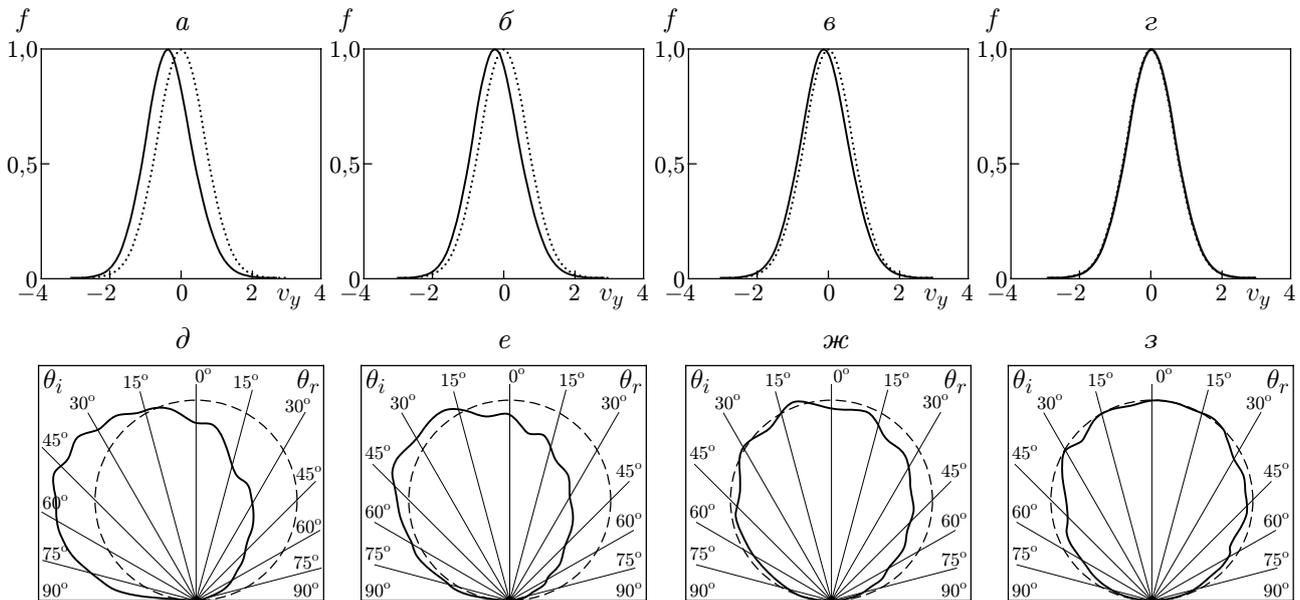


Рис. 3. Распределение компоненты скорости  $v_y$  отраженных от поверхности частиц ( $\varepsilon = 1$ ) (а–г) и соответствующие индикатрисы рассеяния (д–з) при  $H = 3$  и различных углах падения:

а, д —  $\theta_i = 75^\circ$ , б, е —  $\theta_i = 45^\circ$ , в, ж —  $\theta_i = 15^\circ$ , г, з —  $\theta_i = 0$ ; пунктирные линии — максвелловское распределение компоненты скорости; штриховые — косинусоидальное распределение

индикатрисы, построенные в плоскости падения пучка, и косинусоидальное распределение.

Из рис. 3 следует, что при уменьшении угла падения  $\theta_i$  величина отклонения полученного распределения компоненты  $v_y$  от гауссовой кривой уменьшается, а при  $\theta_i = 0$  две функции совпадают. Соответственно форма индикатрисы меняется от лепестковой к распределенной по закону косинуса. При  $H = 1$  величина отклонения полученного распределения компоненты скорости  $v_y$  от гауссовой кривой, а также наклон индикатрис меньше, чем при  $H = 5$ . Уменьшение отклонения распределения компоненты скорости  $v_y$  от нормальной кривой, так же как и уменьшение угла наклона индикатрисы рассеяния при уменьшении угла падения молекулярного пучка, можно объяснить следующим образом. Если частицы летят под углом падения  $\theta_i > 15^\circ$ , то после столкновения с пиками шероховатости часть из них отражается, что оказывает влияние на форму индикатрисы и величину смещения функции распределения компоненты скорости  $v_y$ . Если падение частиц происходит под углом  $\theta_i < 15^\circ$ , то первые столкновения частиц с поверхностью происходят на большей по сравнению с предыдущим случаем глубине, вследствие чего количество отраженных частиц уменьшается и индикатриса приобретает вид косинусоидального распределения. Распределение компоненты скорости  $v_y$  приобретает такую же форму, как в случае диффузного рассеяния на гладкой поверхности.

При обработке данных численного эксперимента используется методика определения функции распределения компонент скорости отраженных частиц, которую можно представить в виде комбинации экспонент с соответствующими коэффициентами:

$$f(v_j) = \sum_{i=1}^n h_i \exp\left(-\frac{(v_j - a_i)^2}{2\sigma_i^2}\right), \quad j = x, y, z. \quad (1)$$

На основе данных о скорости каждой частицы после ее взаимодействия с поверхностью функция распределения компонент скорости отраженных частиц (1) ищется в аналитиче-

ском виде путем определения значений коэффициентов  $a_i$ ,  $\sigma_i$ ,  $h_i$  с использованием нелинейного метода наименьших квадратов. При таком выборе вида искомой функции экспериментальные данные описываются наиболее точно. Выбор значения  $n$  определяет точность аппроксимации экспериментальных данных с помощью эмпирической формулы (1). Используя алгоритм моделирования заданного распределения, можно разыгрывать компоненты скорости рассеянных частиц, определив для каждой из них коэффициенты  $h_i$ ,  $a_i$ ,  $\sigma_i$ . Полученные функции распределения можно использовать в дальнейших расчетах при моделировании компонент скорости отраженных частиц для структуры поверхностей подобного типа.

**Моделирование течения газа в каналах.** Поверхность исследуемых каналов либо моделировалась с помощью описанной выше методики, либо восстанавливалась по данным атомно-силовой микроскопии. Для определения проводимости канала (величины, обратной вероятности прохождения) использовался метод пробной частицы [8]. Вероятность прохождения  $w$  равна отношению числа частиц, прошедших через канал, к общему числу частиц на входе в канал. Рассматривался случай полностью диффузного взаимодействия ( $\varepsilon = 1$ ).

При моделировании стенка канала покрывается триангуляционной сеткой. Каждый треугольник сетки принадлежит определенному мини-цилиндру, совокупность которых образует стенку канала. Для поиска точки пересечения со стенкой канала на каждом этапе перемещения путь частицы разбивается на отрезки одинаковой длины. Затем проверяется принадлежность точки начала каждого отрезка одному из мини-цилиндров. В дальнейшем для определения точки пересечения траектории частицы со стенкой канала рассматриваются только треугольники, принадлежащие пересеченным цилиндрам. Если траектория пересекает поверхность канала в нескольких местах, то необходимо выбрать точку пересечения, ближайшую к точке начала. Заметим, что данная процедура ускоряет поиск точки пересечения в 10–12 раз по сравнению с последовательной проверкой каждого треугольника для определения возможности пересечения с траекторией частицы. После столкновения с поверхностью согласно заданному закону взаимодействия разыгрывается новый вектор скорости. Процедура перемещения молекулы продолжается до тех пор, пока частица не пересечет входное или выходное отверстие канала.

Вероятность прохождения  $w$  вычислена для цилиндрических каналов трех типов: 1) канала, структура которого восстановлена согласно данным атомно-силовой микроскопии на основе “экспериментальной” поверхности (рис. 4); 2) канала, полученного сов-

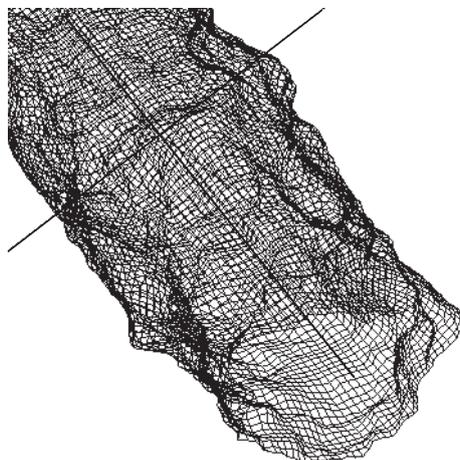


Рис. 4. Шероховатый канал при  $L/R = 6$  согласно данным атомно-силовой микроскопии

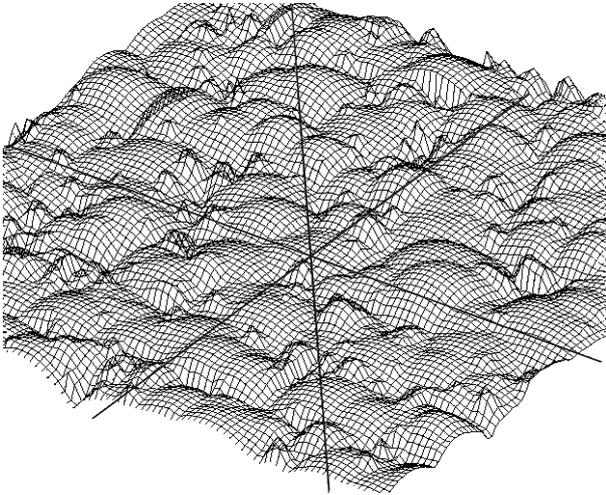


Рис. 5

Рис. 5. “Статистическая” поверхность

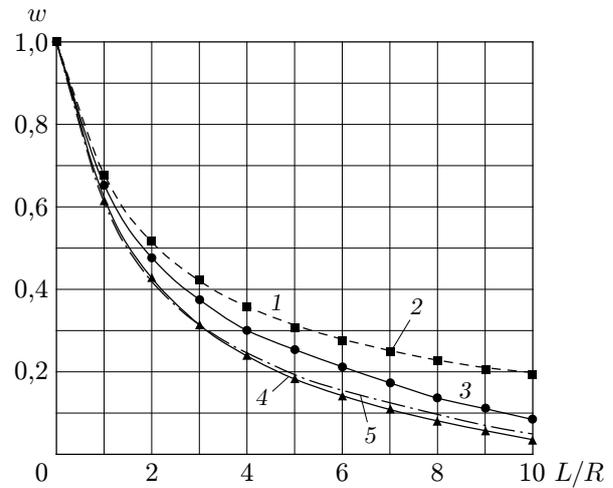


Рис. 6

Рис. 6. Вероятность  $w$  прохождения цилиндрических каналов:

1 — данные П. Клаузинга; 2 — “гладкая” структура; 3 — “реальная” структура; 4 — “статистическая” структура; 5 — “регулярная” структура

мещением шести “статистических” поверхностей, функция распределения микронеровностей по высоте которого близка к функции распределения шероховатости канала 1 (рис. 5); 3) канала с регулярной структурой поверхностной шероховатости (вырожденный случай), полученного в результате равномерного распределения одинаковых пиков на его поверхности. Все каналы имеют одинаковую среднюю высоту поверхностной микронеровности  $H_{ave} = 1,1$  мкм. В процессе моделирования отношение радиуса канала  $R$  к средней высоте поверхностной микронеровности  $H_{ave}$  менялось, при этом длина канала  $L$  оставалась постоянной. Для проверки корректности разработанной схемы проведены серия тестовых вычислений для определения вероятности прохождения гладких цилиндрических каналов и сравнение результатов тестовых расчетов с данными П. Клаузинга [9], полученными аналитически. На рис. 6 представлены данные о вероятности прохождения гладких цилиндрических каналов при различных значениях  $L/R$  для перечисленных выше каналов. Видно, что во всем рассмотренном диапазоне  $L/R$  результаты тестовых вычислений практически совпадают с данными [9]. Небольшое различие обусловлено, вероятно, тем, что по всей длине канала его сечение имеет форму ломаной, изогнутой по периметру окружности. В работе [9] сечение канала имеет форму идеального круга. Некоторое различие данных о “статистической” и “регулярной” поверхностной шероховатости для каналов с  $L/R < 4$  обусловлено тем, что в случае сравнительно коротких каналов влияние взаимодействия газа с поверхностью на поток незначительно. В то же время результаты, полученные для поверхности канала, смоделированной с использованием статистических методов, и для “экспериментальной” поверхности, полученной на основе данных атомно-силовой микроскопии, существенно различаются, несмотря на то что и в том и в другом случае поверхностные структуры имеют близкие функции распределения неровностей по высоте. Можно предположить, что такое различие обусловлено формой отдельных элементов микронеровности рассматриваемых поверхностей.

Таким образом, средняя высота микронеровности, как и функция распределения неровностей структуры по высоте, не является единственным фактором, определяющим свободномолекулярное течение газа в канале с шероховатыми стенками.

**Заклучение.** Разработанная методика позволяет построить шероховатую поверхность, функция распределения которой практически совпадает с функцией распределения по высоте элементов шероховатости поверхности, получаемой с использованием атомно-силовой микроскопии.

В результате моделирования рассеяния молекулярных пучков получена функция распределения частиц, отраженных от шероховатой поверхности, в аналитическом виде. Эту функцию можно использовать при задании граничных условий для газодинамического описания полей течения вблизи поверхности, имеющей заданный уровень шероховатости.

Анализ результатов численного моделирования потока разреженного газа в канале с учетом структуры его поверхности показывает, что шероховатость поверхности оказывает значительное влияние на газодинамическую проводимость канала на всем приведенном интервале значений  $L/R$ .

Показано, что средняя высота микронеровности поверхности и функция распределения элементов шероховатости по высоте не являются единственными факторами, влияющими на вероятность прохождения молекул газа через цилиндрический канал.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **Borisov S. F.** Progress in gas/surface interaction study // Proc. of the 24th Intern. symp. on rarefied gas dynamics, Monopoli (Bari), Italy, 10–16 July 2004. Mellville; N. Y.: Amer. Inst. of Phys., 2005. V. 762. P. 933–940.
2. **Sawada T., Horie B. Y., Sugiyama W.** Diffuse scattering of gas molecules from conical surface roughness // J. Vacuum. 1996. V. 47. P. 795–797.
3. **Davis D. H., Levenson L. L., Milleron N.** Effect of “Rougher-than-Rough” surfaces on molecular flow through short ducts // J. Appl. Phys. 1964. V. 35. P. 529–532.
4. **Porodnov B. T., Suetin P. E., Borisov S. F., Akinshin V. D.** Experimental investigation of rarefied gas flow in different channels // J. Fluid Mech. 1974. V. 64, N 3. P. 417–437.
5. **Gerasimova O. E., Borisov S. F., Boragno C., Valbusa U.** Modeling of the surface structure in gasdynamic problems with the use of the data of atomic force microscopy // J. Engng Phys. Thermophys. 2003. V. 76, N 2. P. 413–416.
6. **Aksenova O. A., Khalidov I. A.** Fractal and statistical models of rough surface interacting with rarefied gas flow // Proc. of the 24th Intern. symp. on rarefied gas dynamics, Monopoli (Bari), Italy, 10–16 July 2004. Mellville; N. Y.: Amer. Inst. of Phys., 2005. V. 762. P. 993–998.
7. **Gimelshein N., Duncan J., Lilly T., et al.** Surface roughness effects in low Reynolds number channel flows // Proc. of the 25th Intern. symp. on rarefied gas dynamics, Saint-Petersburg, Russia, 21–28 July 2006. Novosibirsk: Publ. House of the Sib. Branch of the Russ. Acad. of Sci., 2007. P. 695–702.
8. **Bird G. A.** Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. N.Y.: Oxford Univ. Press, 1994.
9. **Clausing P.** The flow of highly rarefied gases through tubes of arbitrary length // J. Ann. Phys. 1932. V. 12. P. 961–989.

*Поступила в редакцию 7/XI 2008 г.*