

01;03

## **Численное моделирование течения в дифференциальной камере газодинамического интерфейса портативного масс-спектрометра**

© *Е.А. Пивоварова, А.А. Смирновский, А.А. Шмидт*

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет  
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург  
E-mail: smirta@mail.ru

*Поступило в Редакцию 10 июня 2013 г.*

Проведено математическое моделирование течения в дифференциальной камере газодинамического интерфейса портативного масс-спектрометра с целью детального изучения структуры течения и выработки рекомендаций по оптимизации газодинамического интерфейса. Для моделирования была использована открытая вычислительная платформа OpenFOAM. Установлены условия оптимального режима работы дифференциальной камеры.

В настоящее время активно ведутся разработки портативных масс-спектрометров, пригодных для эксплуатации в полевых условиях [1,2]. Одной из основных задач при проектировании газодинамического интерфейса квадрупольного портативного масс-спектрометра является получение качественного молекулярного пучка. В используемом для этих целей газодинамическом методе [3] исследуемое вещество в составе несущей среды (воздуха) проходит через газодинамический интерфейс, который в рассматриваемом случае представляет собой систему из подводящей трубки, сопла, дифференциальной (промежуточной) камеры и скиммера. Выделенный скиммером молекулярный пучок попадает в вакуумную камеру, где ионизируется электронным ударом и попадает в квадрупольный масс-спектрометр. Несущий газ в подводящей трубке находится при атмосферном давлении, в промежуточной камере давление на несколько порядков ниже атмосферного, в вакуумной камере давление порядка  $10^{-3}$  Па.

Именно сверхзвуковая струя, формируемая соплом, в большой мере определяет качество и интенсивность молекулярного пучка, по-

этому при создании портативного масс-спектрометра с газодинамическим интерфейсом особенно важно тщательное изучение течения в промежуточной камере. Экспериментальные исследования структуры сверхзвуковой струи представляют большие трудности, что связано с малыми размерами системы (диаметр сопла может достигать до нескольких десятков микрон) и низкой плотностью среды, поэтому для изучения такого рода течений целесообразно использовать численное моделирование.

Течение в промежуточной камере газодинамического интерфейса портативного масс-спектрометра характеризуется относительно низкими числами Рейнольдса, поэтому эффекты вязкости играют важную роль. В частности, при таких низких числах Рейнольдса развивающийся на стенке сопла пограничный слой может иметь довольно значительную толщину (по сравнению с поперечными размерами сопла), что существенным образом сказывается на структуре течения. Поэтому при численном моделировании необходимо использовать расчетную сетку, хорошо разрешающую пристенные слои. Кроме того, в промежуточной камере тракта газ является разреженным: число Кнудсена  $Kn = \lambda/l \sim 0.1$  (где  $\lambda$  — длина свободного пробега молекул,  $l$  — некоторый характерный размер в данной области течения). Анализ, основанный на кинетической теории газов, дает это значение числа Кнудсена в качестве границы применимости модели сплошной среды к описанию течений. Однако неоднократно было показано [4], что приближение сплошной среды может быть использовано в значительно более широком диапазоне чисел Кнудсена (вплоть до 0.5). При этом реализуется так называемое течение с проскальзыванием, которое также описывается уравнением Навье–Стокса, но в граничных условиях учитывается проскальзывание газа и скачок температуры вблизи стенки.

Таким образом, для численного моделирования течения в промежуточной камере можно использовать систему уравнений Навье–Стокса для газа:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{V}) &= 0, \\ \frac{d}{dt}(\rho \mathbf{V}) &= 2\nabla(\mu \dot{S}) - \nabla\left(p + \frac{2}{3}\mu \nabla \mathbf{V}\right), \\ \frac{d}{dt}(\rho E) &= \nabla\left(2\mu \mathbf{V} \dot{S} - p \mathbf{V} + \frac{2}{3}\mu \mathbf{V} \nabla \mathbf{V}\right) + \nabla(\kappa \nabla T), \end{aligned}$$

$$p = \rho RT, \quad E = c_V T + \frac{\mathbf{V}^2}{2}, \quad \dot{S} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{V} + (\nabla \mathbf{V})^T),$$

( $\mu$ ,  $\kappa$ ,  $c_V$  и  $R$  — коэффициент динамической вязкости, коэффициент теплопроводности, удельная теплоемкость при постоянном объеме и газовая постоянная), используя на стенках для скорости и температуры граничные условия Максвелла–Смолуховского:

$$V_\tau|_w = \frac{2 - \sigma_V}{\sigma_V} \lambda \frac{\partial V_\tau}{\partial n} + \frac{3}{4} \frac{\mu}{\rho T} \frac{\partial T}{\partial s},$$

$$T|_w = T_w + \frac{2 - \sigma_T}{\sigma_T} \frac{2\gamma}{\gamma + 1} \frac{\lambda}{\text{Pr}} \frac{\partial T}{\partial n},$$

где  $\gamma$  и  $\text{Pr}$  — показатель адиабаты и число Прандтля. Значение коэффициента скоростной аккомодации  $\sigma_V$  в соответствии с [5] полагалось равным 0.9. Значение коэффициента температурной аккомодации  $\sigma_T$  можно брать равным 1, поскольку, как показал ряд предварительных расчетов, его изменение в диапазоне 0.9–1 практически не влияет на структуру течения.

Для численного моделирования использовалась открытая вычислительная платформа OpenFOAM версии 2.0. Представляемые ниже результаты получены с помощью решателя rhoCentralFoam, поскольку в нем используется полностью консервативная формулировка уравнений Навье–Стокса сжимаемого газа, приведенная выше. Для аппроксимации потоков на гранях конечного объема используется схема Курганова–Тадмора, имеющая второй порядок аппроксимации на гладких решениях и не использующая решение задачи Римана о распаде разрыва [6]. В решателе rhoCentralFoam используется явный метод продвижения по времени, он ориентирован на решение нестационарных задач, тогда как рассматриваемое в данной работе течение является стационарным, поэтому для ускорения расчета в решатель была добавлена схема продвижения по псевдовремени.

Для верификации математической модели и выбранного решателя были проведены методические расчеты. В частности, исследовано течение Пуазейля в канале с условием проскальзывания на стенке (для данного случая можно получить аналитическое решение), а также проведено сравнение результатов численного моделирования с экспериментальными и численными данными других авторов для течения в микросоплах [7,8]. Показано, что результаты, полученные с помощью OpenFOAM, с большой степенью точности совпадают с экспериментальными, аналитическими и численными решениями.

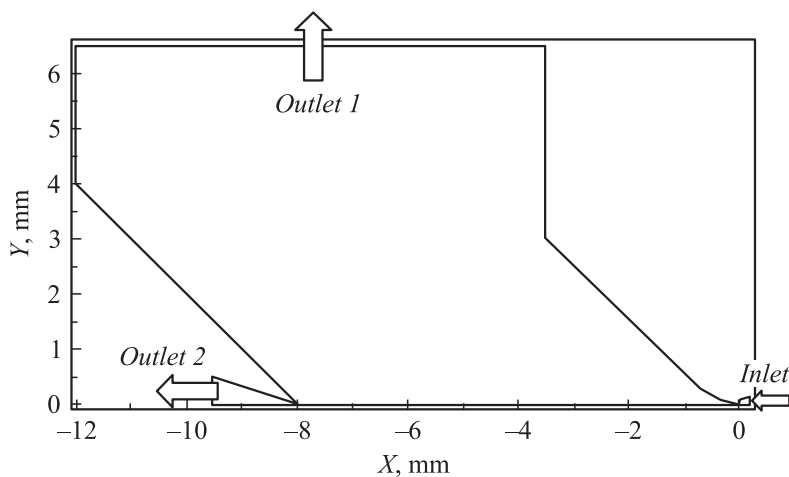
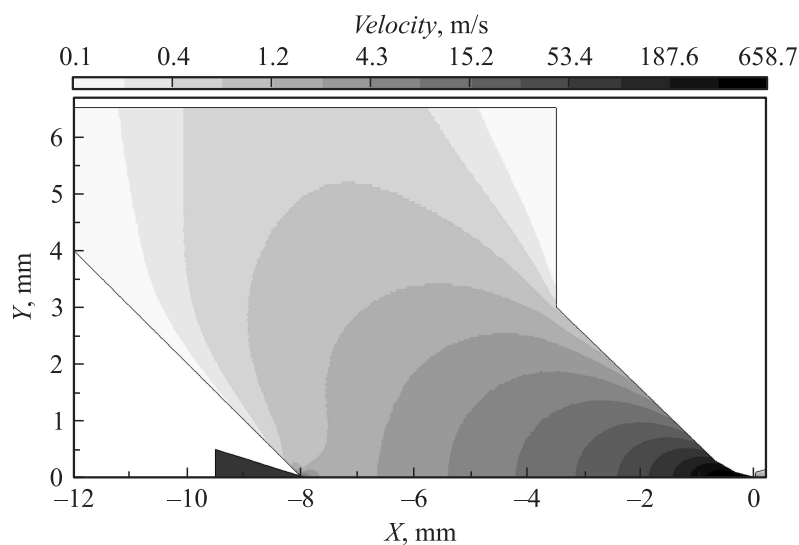


Рис. 1. Геометрия расчетной области ( $X$  — ось симметрии).

Геометрия рассматриваемой системы — осесимметричный газодинамический интерфейс — представлена на рис. 1. Рабочая среда (воздух) поступает справа через границу, обозначенную на рисунке „inlet“, проходит через сопло (критическое сечение которого находится при  $X = 0$ ) и попадает в промежуточную камеру. Носик скиммера располагается в сечении  $X = -8$  mm. Истечение газа из расчетной области происходит через выходную границу, обозначенную на рис. 1 как „outlet 1“, и через выходную границу „outlet 2“ за скиммером. Форма и размеры области непосредственно за скиммером и перед соплом не играют существенной роли при рассмотрении течения в промежуточной камере, поэтому эти параметры выбраны условно для упрощения и ускорения расчета.

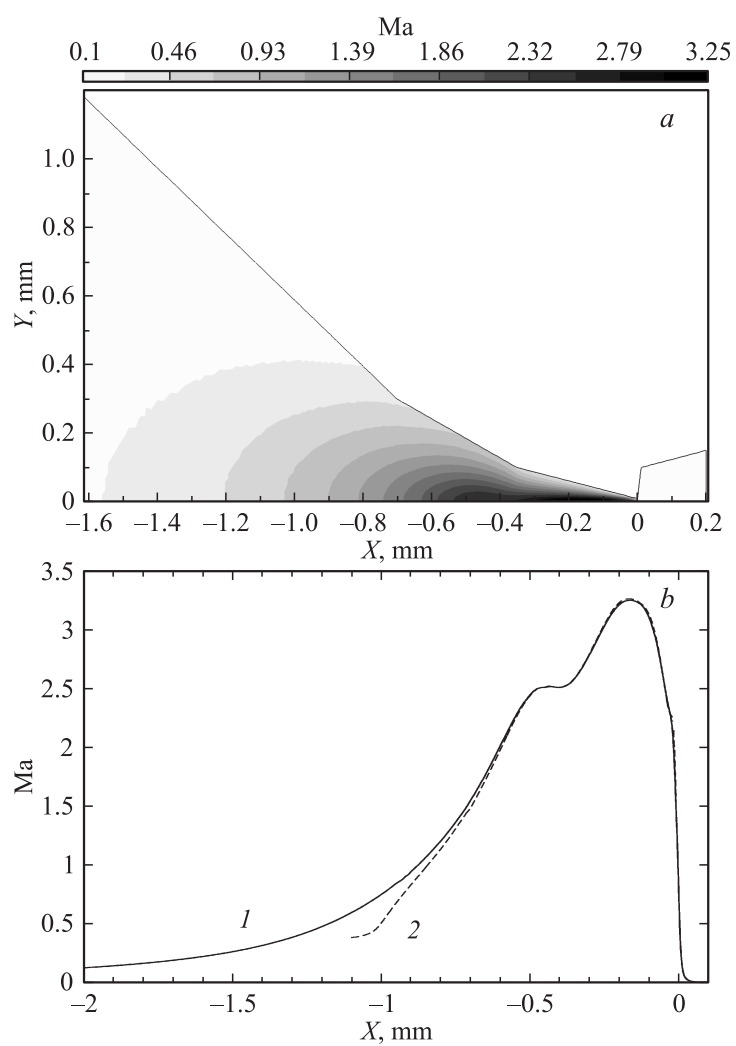
В расчете используется неструктурированная сетка с неравномерным распределением узлов. Сетка сгущается в областях, требующих детального разрешения структуры потока, в частности к стенкам сопла (для хорошего разрешения пограничного слоя). Во входной области и выходной области за скиммером, а также вблизи сопла, используется сетка с регулярной структурой, в остальной области — с нерегулярной (общее количество ячеек равно 69 000). Выбранные параметры сетки основаны на исследовании сеточной сходимости.



**Рис. 2.** Распределение модуля скорости в расчетной области (логарифмический масштаб).

На входе в сопло задаются полное давление воздуха  $10^5$  Па и фиксированная температура 300 К. На границе „outlet 1“ ставится статическое давление 50 Па, на границе „outlet 2“ — неотражающее граничное условие выхода „waveTransmissive“ со статическим давлением 0.001 Па. На твердых стенках задано условие проскальзывания Максвелла–Смолуховского. При задании граничного условия на стенке для температуры принималось во внимание то обстоятельство, что время работы масс-спектрометра может быть достаточно большим (до нескольких часов), поэтому приближенно можно считать, что все стенки имеют температуру окружающей среды (т. е. около 300 К).

Получено стационарное течение, в котором дисбаланс входного и выходного массовых расходов составляет менее 0.3%. На рис. 2 представлено распределение модуля скорости в расчетной области. Как следует из рис. 2, в большей части промежуточной камеры течение происходит с относительно малыми скоростями: около скиммера скорости не превосходят 5 м/с, а основной поток поступает в камеру за скиммером за счет „всасывания“ через горло скиммера.



**Рис. 3.** Распределение числа Маха вблизи сопла: *a* — карта уровней, *b* — распределение вдоль оси (*1* — рассматриваемая геометрия, *2* — носик скиммера приближен на расстояние 1 mm от горла сопла).

Если рассмотреть течение около сопла (рис. 3, *a*), то можно увидеть, что сверхзвуковая струя, выходящая из сопла, практически сразу тормозится и быстро становится дозвуковой, причем без образования ударно-волновых структур. На рис. 3, *b* показано распределение числа Маха вблизи сопла вдоль оси. Отсутствие ударно-волновой структуры связано с сильным влиянием вязкости: при диаметре критического сечения сопла в  $20\ \mu\text{m}$  число Рейнольдса, построенное по диаметру сопла, максимальной скорости и средней плотности в сверхзвуковой части струи, составляет около 70. При этом растущий на стенке пограничный слой практически смыкается при  $X \approx -0.3\ \text{mm}$ , что приводит к довольно сильному замедлению потока и подавлению ударно-волновой структуры.

Таким образом, можно отметить, что, поскольку интенсивность молекулярного пучка тем выше, чем выше число Маха струи, попадающей в скиммер, рассмотренные форма и размеры промежуточной камеры не позволяют получить качественный молекулярный пучок. Следовательно, необходимо приближать носик скиммера к области с большими числами Маха. На рис. 3, *b* под номером 2 представлена кривая для случая, когда носик скиммера расположен при  $X = -1\ \text{mm}$ . В этом случае структура течения в сопле практически не меняется, однако интенсивность молекулярного пучка увеличивается на порядок по сравнению с исходной геометрией.

## Список литературы

- [1] Cheung K., Velasquez-Garcia L.F., Akinwande A.I. // J. Microelectromechanical Systems. 2010. V. 19. Iss. 3. P. 469–483.
- [2] Коган В.Т., Лебедев Д.С., Павлов А.К., Чичагов Ю.В., Антонов А.С. // Приборы и техника эксперимента. 2011. № 3. С. 105–112.
- [3] Кудрявцев Н.Н., Мазяр О.А., Сухов А.М. // УФН. 1993. Т. 163. № 6. С. 75–93.
- [4] Головачев Ю.П. Численное моделирование течений вязкого газа в ударном слое. М.: Наука, Физматлит, 1996.
- [5] Graur I.A., Perrier P., Ghazlani W., Meolans J.G. // Physics of Fluids. 2009. V. 21. P. 102004.
- [6] Kurganov A., Tadmor E. // J. Computational Physics. 2000. V. 160. P. 241–282.
- [7] Hao P.-F., Ding Y.-T., Yao Z.-H., He F., Zhu K.-Q. // J. Micromechanics and Microengineering. 2005. V. 15. Iss. 9. P. 2069–2073.
- [8] San O., Bayraktar I., Bayraktar T. // International Communications in Heat and Mass Transfer. 2009. V. 36. P. 402–411.