

MÔ PHỎNG VI DÒNG KHÍ LOÃNG DÙNG MÔ HÌNH TỰA KHÍ ĐỘNG QGD VỚI ĐIỀU KIỆN BIÊN TRƯỢT VẬN TỐC VÀ NHẢY NHIỆT ĐỘ

LOW-SPEED RAREFIED GAS MICROFLOW SIMULATIONS USING THE QGD MODEL WITH NONEQUILIBRIUM BOUNDARY CONDITIONS

Lê Tuấn Phương Nam, Huỳnh Thân Phúc*

Trường Đại học Thủ Dầu Một, Bình Dương¹

*Tác giả liên hệ: phucht@tdmu.edu.vn

(Nhận bài: 14/02/2022; Chấp nhận đăng: 12/5/2022)

Tóm tắt - Thiết kế hiệu quả các vi thiết bị (MEMS) yêu cầu hiểu rõ về cách ứng xử của dòng khí loãng trong các vi thiết bị. Vì vậy cần phải phát triển các công cụ để mô phỏng cách ứng xử của chúng. Trong bài báo này các điều kiện biên trượt vận tốc và nhảy nhiệt độ sẽ được tích hợp vào mô hình tựa khí động (QGD) thông qua bộ giải *QGDfoam* trong phần mềm mã mở OpenFOAM để đạt một bộ giải hoàn chỉnh cho mô phỏng vi dòng khí loãng ở tốc độ thấp trong các vi thiết bị. Hai trường hợp điển hình cho mô phỏng vi dòng khí loãng là vi kênh bậc ngược và vi khoang với nắp truyền dẫn được lựa chọn cho nghiên cứu hiện tại. Các kết quả mô phỏng đạt được chỉ ra rằng, các điều kiện biên trượt vận tốc và nhảy nhiệt độ làm việc tốt với mô hình QGD. Các kết quả dự đoán nhiệt độ và vận tốc trượt dòng khí trên bề mặt bởi mô hình QGD với điều kiện biên thì tiệm cận với các kết quả đạt được từ phương pháp mô phỏng thống kê trực tiếp Monte-Carlo (DSMC).

Từ khóa - Mô hình tựa khí động (QGD); dòng khí loãng; vận tốc trượt; nhảy nhiệt độ; điều kiện biên.

1. Giới thiệu

Mô phỏng dòng khí loãng giữ một vai trò quan trọng trong việc thiết kế các vi thiết bị cơ điện tử (MEMS). Hiểu rõ về sự ứng xử dòng khí loãng trong các vi thiết bị sẽ giúp cho việc thiết kế các MEMS trở nên hiệu quả hơn. Các chế độ khác nhau của dòng khí loãng trong các MEMS có thể được mô tả qua thông số cơ bản Knudsen, Kn. Thông số này được định nghĩa là tỷ số giữa khoảng cách tự do trung bình giữa các hạt khí trước khi va chạm với độ dài đặc trưng của cơ thể. Các vi thiết bị MEMS thường có chiều dài đặc trưng ở mức mi-crô. Khi đó chiều dài đặc trưng trở nên có thể so sánh được với giá trị của khoảng cách trung bình tự do của các hạt khí trong dòng. Dựa trên thông số Kn, có bốn chế độ dòng được phân biệt trong động lực học khí loãng như sau: Chế độ dòng phân tử tự do ($Kn \geq 10$), dòng chuyển tiếp ($0,1 \leq Kn \leq 10$), dòng trượt ($0,01 \leq Kn \leq 0,1$) và chế độ dòng liên tục ($Kn \leq 0,01$). Hai phương pháp tính toán số điển hình dùng để mô phỏng dòng khí loãng là phương pháp mô phỏng thống kê trực tiếp Monte Carlo (DSMC) và phương pháp tính toán số động lực học lưu chất (CFD). Phương pháp DSMC mô phỏng thành công dòng khí loãng cho bốn chế độ nêu trên. Vì vậy, phương pháp DSMC được sử dụng như là tiêu chuẩn để đánh giá các kết quả mô phỏng thực hiện bởi phương pháp CFD. Tuy nhiên, chi phí tính toán của nó rất cao so với phương pháp CFD mà dùng phương trình Navier-Stokes-Fourier (NSF). Các phương trình NSF với điều kiện biên trượt vận tốc và nhảy nhiệt độ có thể mô phỏng các dòng khí loãng trong chế

Abstract - The efficient design of microdevices requires a good understanding of the behavior of rarefied thin gas flows in microdevices. Therefore, it is necessary to develop the tools to simulate their behavior. In this paper, various first-order and second-order slip/jump boundary conditions would be implemented into the Quasi-Gas Dynamic (QGD) model through the solver *QGDfoam* in OpenFOAM to achieve a full solver for low-speed rarefied gas microflow simulations. Two typical cases for rarefied gas microflows the backward-facing step microchannels and microcavity gas flows are adopted for investigation in the present work. The obtained simulation results show that the slip and boundary conditions employ well with the QGD model. The QGD simulation results of the prediction of the surface gas temperature and velocity slip on the surfaces are close to those of the Direct Statistical Monte-Carlo (DSMC) simulations.

Key words – The Quasi-Gas Dynamic (QGD) model; rarefied gas microflows; slip velocity; temperature jump; boundary conditions.

độ trượt ($0,01 \leq Kn \leq 0,1$). Một cách khác của phương pháp CFD trong mô phỏng dòng khí loãng đó là dùng mô hình QGD [1, 2]. Gần đây, mô hình QGD đã được tích hợp vào phần mềm mã mở OpenFOAM [3] thông qua bộ giải tên *QGDfoam* [4]. Nó đã được ứng dụng để mô phỏng thành công dòng khí loãng tốc độ cao qua các vật thể ứng dụng trong ngành hàng không – không gian để xem xét các hiện tượng sóng xung kích. Hiện tại bộ giải *QGDfoam* chưa được tích hợp các điều kiện biên trượt vận tốc và nhảy nhiệt độ để mô phỏng dòng khí loãng mà có thể dự đoán các đại lượng trên bề mặt của dòng khí như nhiệt độ và vận tốc trượt của dòng khí trên bề mặt cơ thể. Mô hình QGD được phát triển dựa trên lý thuyết động lực học của khí và được biểu diễn qua các phương trình bảo toàn lưu lượng, động lượng và năng lượng như phương trình NSF nhưng mô hình này có thêm các đại lượng tiêu tán [1, 2, 4]. Trong bài báo này mô hình QGD kết hợp với các điều kiện biên trượt vận tốc và nhảy nhiệt độ được dùng lần đầu tiên để mô phỏng dòng khí loãng tốc độ thấp (dưới âm với số Mach từ 0,1 đến 0,2) trong các vi kênh của các thiết bị MEMS, và dự đoán các đại lượng trên bề mặt như nhiệt độ và vận tốc trượt của vi dòng khí loãng. Độ chính xác của mô phỏng CFD phụ thuộc vào các điều kiện biên trượt và nhảy áp dụng trên các bề mặt. Các điều kiện biên trượt và nhảy bậc nhất và bậc hai được sử dụng cho các mô phỏng dòng khí loãng trong phương pháp CFD trước đây trong [5-9] sẽ được lựa chọn để tích hợp vào bộ giải *QGDfoam* để mô phỏng vi dòng trong công việc hiện tại. Hơn nữa, hiện tượng sinh nhiệt

¹ Thu Dau Mot University, Binh Duong (Le Tuan Phuong Nam, Huynh Than Phuc)

nhớt (ma sát trượt) do các hạt khí trượt trên bề mặt cố thể trong điều kiện biên nhảy nhiệt độ cũng được xem xét và đánh giá qua việc dự đoán nhiệt độ khí trên bề mặt cố thể. Vì dòng khí loãng tốc độ thấp trong chế độ trượt ($0,01 \leq Kn \leq 0,1$) được lựa chọn trong nghiên cứu này để kiểm chứng sự làm việc của các điều kiện biên trượt vận tốc và nhảy nhiệt độ với mô hình QGD. Hai loại vi dòng điển hình trong mô phỏng vi dòng khí là dòng trong vi khoảng với nắp khoang truyền dẫn (cavity micro-flow) [10] và vi dòng trong kênh bậc ngược được truyền dẫn bởi sự chênh lệch áp suất [11]. Dự đoán chính xác nhiệt độ khí loãng trên bề mặt giúp các nhà thiết kế hiểu được các đặc tính nhiệt và xác định chiến lược làm mát cho các vi thiết bị. Trong nghiên cứu này, mô hình QGD với các điều kiện biên được dùng để mô phỏng tất cả các trường hợp xem xét như sau vi dòng trong khoang có $Kn = 0,05$ và vận tốc nắp là $\mathbf{u}_w = 200\text{m/s}$, và vi dòng trong kênh bậc ngược cũng có $Kn = 0,05$. Kết quả mô phỏng CFD dùng mô hình QGD kết hợp với các điều kiện biên sẽ được so sánh với kết quả được mô phỏng đạt được bởi phương pháp DSMC trong [10, 11].

2. Phương trình QGD

Trong phần này, các phương trình của mô hình QGD bỏ qua ngoại lực và nguồn nhiệt được trình bày ở dạng véc tơ như sau [4],

- Phương trình liên tục [4]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_m = 0, \quad (1)$$

mà mật độ dòng lưu lượng, $\mathbf{j}_m$, được tính bởi

$$\mathbf{j}_m = \rho \mathbf{u} - \delta (\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) + \nabla p), \quad (2)$$

Trong đó, t là thời gian, ρ là mật độ, $\mathbf{u}$ là vận tốc, p là áp suất, ký hiệu $\cdot$ là tích vô hướng và δ là hệ số tiêu tán và được xác định theo [4],

$$\delta = \frac{\mu}{pSc} + \alpha \frac{\Delta h}{C_s} \quad (3)$$

mà α là một hằng số dương nhỏ để điều chỉnh giải pháp tính toán số, C_s là vận tốc âm thanh, μ là độ nhớt, Sc là số Schmidt, và Δh là bước không gian tính toán [4].

- Phương trình động lượng [4]

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{j}_m \mathbf{u}) + \nabla p = \nabla \cdot \mathbf{\Pi}_{NSF} + \nabla \cdot \mathbf{\Pi}_{QGD}, \quad (4)$$

mà ten-xơ ứng suất NSF, $\mathbf{\Pi}_{NSF}$, được tính

$$\mathbf{\Pi}_{NSF} = \mu \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \mathbf{I} \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{u} \right), \quad (5)$$

Trong đó, chỉ số τ là chuyển vị, và $\mathbf{I}$ là ten-xơ đơn vị, và ten-xơ ứng suất QGD, $\mathbf{\Pi}_{QGD}$ được tính như sau [4],

$$\mathbf{\Pi}_{QGD} = \delta \mathbf{u} \rho \left(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \nabla p \right) + \delta \mathbf{I} (\mathbf{u} \cdot \nabla p + \varepsilon p \nabla \cdot \mathbf{u}), \quad (6)$$

Trong đó, ε là số mũ đoạn nhiệt.

- Phương trình năng lượng [4],

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{j}_m E + \mathbf{u} p) + \nabla \cdot \mathbf{q}_{NS} + \nabla \cdot \mathbf{q}_{QGD} = \nabla \cdot (\mathbf{\Pi}_{NS} \cdot \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\mathbf{\Pi}_{QGD} \cdot \mathbf{u}) \quad (7)$$

mà E là năng lượng tổng, $E = e + 0.5|\mathbf{u}|^2$ với e là nội năng

và thông lượng nhiệt NSF, $\mathbf{q}_{NSF}$, được tính theo định luật Fourier,

$$\mathbf{q}_{NSF} = -k \nabla T, \quad (8)$$

Với k là độ dẫn nhiệt, và thông lượng nhiệt QGD, $\mathbf{q}_{QGD}$, được tính theo [4],

$$\mathbf{q}_{QGD} = -\delta \mathbf{u} \rho \left(\mathbf{u} \cdot \nabla e - p \mathbf{u} \cdot \nabla \left(\frac{1}{\rho} \right) \right). \quad (9)$$

Phương trình QGD trở thành phương trình NSF khi hệ số tiêu tán, δ , tiến đến không. Áp suất dòng khí, p , được tính theo phương trình trạng thái khí lý tưởng,

$$p = \rho RT, \quad (10)$$

Trong đó, R là hằng số riêng của khí, và độ dẫn nhiệt k được tính bằng

$$k = \frac{\mu c_p}{Pr}, \quad (11)$$

Trong đó, Pr là hằng số Prandtl và c_p là nhiệt dung riêng đẳng áp của khí. Độ nhớt $\mu = \mu(T)$ là một hàm của nhiệt độ trong đó $\mu \rightarrow \mu + Sc^{QGD} p \delta$ mà Sc^{QGD} là hệ số điều chỉnh dương [4] và độ nhớt, μ , được tính theo định luật Sutherland [12]

$$\mu = \frac{A_s^{1.5}}{T + T_s}, \quad (12)$$

Trong đó, A_s và T_s là các hằng số của khí [12]. Hệ phương trình QGD nói trên đã được tích hợp vào OpenFOAM qua bộ giải *QGDFoam* [4]. Bộ giải này đã mô phỏng thành công cho dòng khí có độ nhớt ở tốc độ cao không có các điều kiện biên trượt vận tốc và nhảy nhiệt độ trong [4].

3. Điều kiện biên trượt vận tốc và nhảy nhiệt độ

Trong nghiên cứu này, các điều kiện biên trượt vận tốc và nhảy nhiệt độ bậc nhất và bậc hai đối với dòng khí loãng sẽ được tích hợp vào bộ giải *QGDFoam*, để mô phỏng vi dòng khí loãng tốc độ thấp bên trong các vi thiết bị và dự đoán các đại lượng bề mặt như vận tốc trượt và nhiệt độ khí trên bề mặt. Trước hết, các điều kiện biên cổ điển bậc nhất như Maxwell cho vận tốc trượt và Smoluchowski cho nhảy nhiệt độ được trình bày để tích hợp vào bộ giải *QGDFoam*, và điều kiện biên Maxwell tổng quát được biểu thị như sau [5]:

$$\mathbf{u} + \left(\frac{2 - \sigma_u}{\sigma_u} \right) \lambda \nabla_n (\mathbf{S} \cdot \mathbf{u}) = \mathbf{u}_w - \left(\frac{2 - \sigma_u}{\sigma_u} \right) \lambda (\mathbf{S} \cdot (\mathbf{n} \cdot \mathbf{\Pi}_{mc})) - \frac{3}{4} \frac{\mu}{\rho} \frac{\mathbf{S} \cdot \nabla T}{T}, \quad (13)$$

mà $\nabla_n \equiv \mathbf{n} \cdot \nabla$ là thành phần của gra-di-ent vuông góc đối với bề mặt, ten-xơ $\mathbf{S} = \mathbf{I} - \mathbf{nn}$ đảm bảo sự trượt chỉ xảy ra theo phương tiếp tuyến với bề mặt, Trong đó, $\mathbf{n}$ là véc tơ pháp tuyến đơn vị được xác định là dương theo hướng nó đi ra khỏi miền tính toán xem xét. Ten xơ

$\mathbf{\Pi}_{mc} = \mu \left((\nabla \mathbf{u})^T - \mathbf{I} \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{u} \right)$ và $\mathbf{u}_w$ là vận tốc bề mặt. Hệ số

điều tiết động lượng tiếp, σ_u , xác định tỷ lệ các hạt khí phản xạ đều từ bề mặt ($1 - \sigma_u$) hoặc phản xạ khuếch tán σ_u và có giá trị $0 \leq \sigma_u \leq 1$. Khoảng cách tự do trung bình của các hạt khí, λ , được xác định như sau [12],

$$\lambda = \frac{\mu}{\rho} \sqrt{\frac{\pi}{2RT}}, \quad (14)$$

Điều kiện biên nhảy nhiệt độ Smoluchowski cổ điển được phát triển dựa trên sự bảo toàn thông lượng nhiệt theo hướng vuông góc với bề mặt, và được biểu thị bởi [6]:

$$T + \left(\frac{2 - \sigma_T}{\sigma_T} \right) \frac{2\gamma}{\gamma + 1} \frac{\lambda}{Pr} \nabla_n T = T_w \quad (15)$$

Trong đó, T_w là nhiệt độ bề mặt, γ là tỷ lệ nhiệt dung riêng, và σ_T là hệ số điều tiết trao đổi nhiệt và có giá trị thay đổi từ 0 đến 1. Trao đổi nhiệt hoàn hảo giữa dòng khí và bề mặt tương ứng với $\sigma_T = 1$, và không có sự trao đổi nhiệt là $\sigma_T = 0$. Gần đây, các điều kiện biên nhảy nhiệt độ được hiệu chỉnh để xem xét đến quá trình sinh nhiệt nhót trong thông lượng nhiệt trên bề mặt [8, 13]. Quá trình sinh nhiệt nhót lần đầu tiên đã được Maslen đưa ra trong [14], và nó được tích hợp vào trong điều kiện biên nhảy nhiệt độ Patterson trong [8] mà được phát triển dựa trên phương pháp mô men Grad. Điều kiện biên nhảy nhiệt độ Patterson hiệu chỉnh được phát triển trong [8] dự đoán nhiệt độ khí ở bề mặt tốt hơn so với điều kiện biên nhảy nhiệt độ Smoluchowski hiệu chỉnh có tích hợp quá trình sinh nhiệt nhót [13] trong mô phỏng dòng khí loãng ở tốc độ cao siêu âm và siêu vượt âm. Do đó, điều kiện biên nhảy nhiệt độ Patterson hiệu chỉnh trong [8] được chọn để tích hợp vào bộ giải *QGDFOAM* để mô phỏng các trường hợp hiện tại của nghiên cứu này và cũng xem xét ảnh hưởng của quá trình sinh nhiệt nhót trong mô hình QGD. Điều kiện biên nhảy nhiệt độ Patterson hiệu chỉnh được trình bày như sau [8],

$$T + \left(\frac{2 - \sigma_T}{2\sigma_T} \right) \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{T_w}{T} \frac{\lambda}{Pr} \nabla_n T = T_w - \left(\frac{2 - \sigma_T}{2\sigma_T} \right) \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{T_w}{T} \frac{\lambda}{\mu c_v} (\mathbf{S} \cdot (\mathbf{n} \cdot \mathbf{\Pi}_{NSF}) \cdot \mathbf{u}), \quad (16)$$

Trong đó, c_v là nhiệt dung riêng đẳng tích. Số hạng thứ hai bên phải của phương trình (16) là biểu thị cho quá trình sinh nhiệt nhót tại bề mặt của dòng khí khi có sự trượt của các hạt khí trên bề mặt.

Một cách khác trong việc dự đoán các đại lượng bề mặt đó là sử dụng các điều kiện biên trượt vận tốc và nhảy nhiệt độ bậc hai. Điều kiện biên trượt vận tốc bậc hai đối với bề mặt phẳng có thể được biểu thị như sau [9]

$$\mathbf{u} = -A_1 \lambda \nabla_n (\mathbf{S} \cdot \mathbf{u}) - A_2 \lambda^2 \nabla_n^2 (\mathbf{S} \cdot \mathbf{u}) + \mathbf{u}_w, \quad (17)$$

Trong đó, A_1 và A_2 là các hệ số bậc nhất và bậc hai. Trong nghiên cứu trước, nhóm tác giả đã đề xuất một dạng mới của điều kiện biên nhảy nhiệt độ bậc hai trong [7], và đưa ra dự đoán tốt về nhiệt độ khí ở bề mặt đối với các dòng khí loãng,

$$T = -\frac{2\gamma}{\gamma + 1} \frac{1}{Pr} (C_1 \lambda \nabla_n T + C_2 \lambda^2 \nabla_n^2 T) + T_w, \quad (18)$$

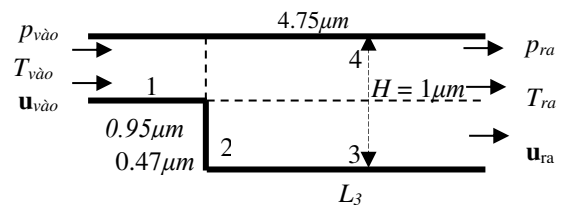
Trong đó, C_1 và C_2 là các hệ số bậc nhất và bậc hai. Trong trường hợp các giá trị $A_2 = 0$ và $C_2 = 0$ khi đó các điều kiện biên bậc hai vận tốc trượt và nhảy nhiệt độ trong các phương trình (17) và (18) sẽ trở thành các điều kiện biên bậc nhất Maxwell và Smoluchowski tương ứng. Các điều kiện bậc nhất và bậc hai trong các phương trình trên sẽ được tích hợp vào bộ giải *QGDFOAM* để hoàn thành một bộ giải hoàn chỉnh đầy đủ cho mô phỏng dòng khí loãng. Cách thức để tích hợp các điều kiện biên trượt và nhảy vào trong bộ giải *QGDFOAM* tương tự như tích hợp vào trong bộ giải *rhoCentralFoam* trong phần mềm mã mở OpenFOAM đã được trình bày chi tiết trong [12].

4. Mô hình tính toán số

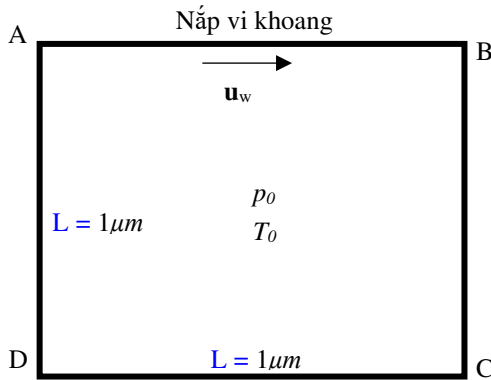
Mô hình tính toán số cho hai trường hợp vi dòng trong vi khoang với nắp truyền dẫn và trong vi kênh bậc ngược được truyền dẫn bởi sự chênh lệch áp suất giữa hai đầu vào và ra của vi kênh được trình bày trong hai Hình 1 và 2. Lưới hình chữ nhật được dùng cho cả hai trường hợp và kích thước lưới đã được chứng minh hội tụ trong các nghiên cứu công bố trước [7, 11] với $\Delta x = \Delta y = 0,015 \mu m$ cho trường hợp vi kênh và $\Delta x = \Delta y = 0,005 \mu m$ cho trường hợp vi khoang được lựa chọn trong các mô phỏng dùng mô hình QGD hiện tại. Các điều kiện biên trượt vận tốc và nhảy nhiệt độ được áp dụng tại tất cả các bề mặt cho cả hai trường hợp. Điều kiện biên zero-gradient được áp dụng cho nhiệt độ tại đầu ra, vận tốc tại đầu vào và đầu ra. Điều kiện biên này cũng được dùng cho áp suất tại các bề mặt trong cả hai trường hợp. Dòng trong vi kênh được truyền dẫn bởi sự chênh lệch áp suất giữa đầu vào và đầu ra. Kết quả nghiên cứu trong [11] cho thấy sự thay đổi của tỉ lệ áp suất vào ra sẽ ảnh hưởng đến tốc độ dòng chất. Tuy nhiên, khi tỉ lệ này lớn hơn 4, không có bất kỳ ảnh hưởng nào đến tốc độ dòng chất vì dòng khí tiếp cận điều kiện lưu lượng tới hạn. Vì vậy, cơ sở để chọn hai áp suất đầu vào và đầu ra ở đây là dựa trên tỉ lệ áp suất vào ra là 2 và số $Kn = 0,05$, bởi vì chúng quyết định cách ứng xử của dòng trong vi kênh. Thông số đầu vào và ra của dòng khí ni-tơ trong vi kênh bậc ngược là $p_{vào} = 150736 Pa$, $T_{vào} = 330 K$, và $p_{ra} = 64972 Pa$ và được giữ cố định trong suốt quá trình tính toán. Thông số dòng khí argon ban đầu của trường hợp vi khoang với nắp truyền dẫn là $p_0 = 142072 Pa$, $T_0 = 300 K$ và vận tốc nắp dẫn là $\mathbf{u}_w = 100 m/s$. Nhiệt độ bề mặt $T_w = 300 K$ cho tất cả các bề mặt của cả hai trường hợp. Kích thước hình học của vi kênh và vi khoang được thể hiện trong Hình 1 và 2 tương ứng. Thông số Kn cho cả hai trường hợp trên là 0,05, được tính dựa trên các chiều dài đặc trưng của nắp vi khoang và độ cao của vi kênh đều là $L = H = 1 \mu m$.

5. Kết quả mô phỏng

Trong các mô phỏng CFD dùng mô hình QGD, các thông số σ_u và σ_T trong các điều kiện biên trượt vận tốc và nhảy nhiệt độ được chọn là 1,0 để có cùng với giá trị của chúng ở các mô phỏng dùng phương pháp DSMC. Các giá trị của các hệ số của điều kiện biên bậc hai được chọn dựa trên các kết quả đạt được từ các nghiên cứu trước [7, 9] $A_1 = 1,0$, $A_2 = 0,5$, $C_1 = 1,0$ và $C_2 = 0,5$. Các kết quả mô phỏng các đại lượng bề mặt (T , $\mathbf{u}$) trên các bề mặt 3 (xem Hình 1) của vi kênh và nắp của vi khoang sẽ được trình bày và so sánh với các kết quả DSMC [10, 11]. Cuối cùng là các trường vận tốc của mô phỏng CFD được trình bày và so sánh với trường vận tốc của mô phỏng DSMC [10, 11].



Hình 1. Mô hình tính toán số cho vi kênh



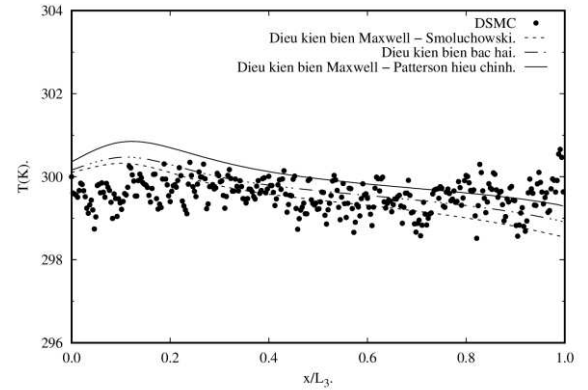
Hình 2. Mô hình tính toán số cho vi khoang

5.1. Vi kênh bậc ngược

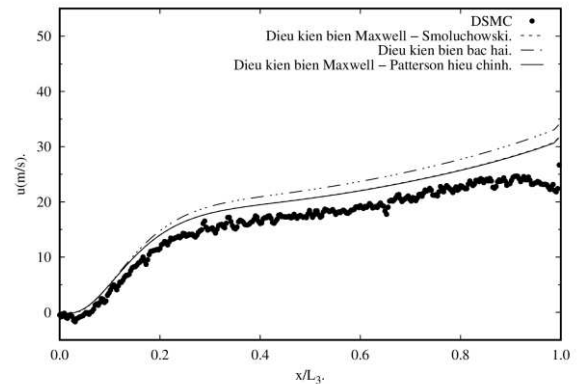
Trong nghiên cứu này, chỉ trình bày các kết quả mô phỏng tính toán các đại lượng (T , u) trên bề mặt 3 của vi kênh bởi sự tách dòng xảy ra trên bề mặt này. Tách và gắn lại dòng là hai đặc điểm quan trọng của dòng khí loãng bên trong vi kênh do sự thay đổi tiết diện. Những đặc điểm này có ảnh hưởng quan trọng đến đặc tính của dòng khí như tốc độ dòng lưu lượng và đặc tính truyền nhiệt [11]. Vi kênh bậc ngược là một dạng hình học điển hình được sử dụng trong các vi thiết bị. Ứng xử của dòng khí trong vi kênh sẽ được điều chỉnh bởi sự tách và gắn lại dòng. Kết quả tính toán mô phỏng được vẽ dưới dạng hàm của khoảng cách chuẩn hoá x/L_3 dọc theo bề mặt 3 của vi kênh. Trong đó, L_3 là chiều dài của bề mặt 3 và x là khoảng cách chạy dọc bề mặt 3 từ trái sang phải. Ở gần vị trí đầu của bề mặt 3, nhiệt độ khí tăng đến nhiệt độ đỉnh và sau đó giảm dần dọc theo bề mặt 3, như được trình bày trong Hình 3. Trong các mô phỏng CFD, nhiệt độ được dự đoán bởi điều kiện biên bậc nhất Smoluchowski đạt giá trị thấp nhất và nhiệt độ dự đoán bởi điều kiện biên Patterson hiệu chỉnh đạt giá trị cao nhất do ảnh hưởng của sự sinh nhiệt nhớt của dòng trên bề mặt. Từ kết quả mô phỏng nhiệt độ trên Hình 3 ta thấy các kết quả mô phỏng CFD gần với kết quả mô phỏng DSMC [11].

Vận tốc trượt dòng khí trên bề mặt bao gồm các thành phần phân âm và dương được thể hiện trong Hình 4. Các thành phần phân âm của vận tốc thể hiện vùng tách dòng và khoảng cách vùng tách dòng được biểu thị bởi vận tốc âm. Trong mô phỏng DSMC, các hạt khí gia nhiệt có nhiều năng lượng hơn để nhảy qua vùng gắn lại dòng, dẫn đến tăng chiều dài của vùng tách dòng [11]. Vì vậy, vận tốc của kết quả DSMC là cao nhất trong vùng phân tách. Ngoài vùng này, vận tốc trượt của mô phỏng CFD dùng điều kiện bậc nhất Maxwell là thấp hơn vận tốc tính toán với điều kiện biên vận tốc bậc hai và nó gần với kết quả DSMC [11]. Rõ ràng với sự thêm số hạng bậc hai của gra-di-ent pháp tuyến vận tốc tại bề mặt qua giá trị của A_2 , sẽ làm tăng vận tốc trượt dọc theo bề mặt 3 như thể hiện trong Hình 4. Điều này cũng xảy ra tương tự cho điều kiện biên nhảy nhiệt độ bậc hai trong việc dự đoán kết quả nhiệt độ dòng khí trên bề mặt như thể hiện trong Hình 3. Tại vị trí biên đầu ra của vi kênh $x/L_3 = 1$, sự khác biệt kết quả trong tính toán vận tốc có thể đến từ việc áp đặt các điều kiện biên khác nhau trong mỗi phương pháp. Trong tính toán với mô hình QGD thì điều kiện biên zeroGradient được dùng cho vận tốc u , và phương pháp DSMC trong [11]

u được tính toán ở biên này dùng điều kiện biên “Calculated” để tính toán u từ phương trình sóng đặc trưng mà nó là một hàm của áp suất ra p_{out} .

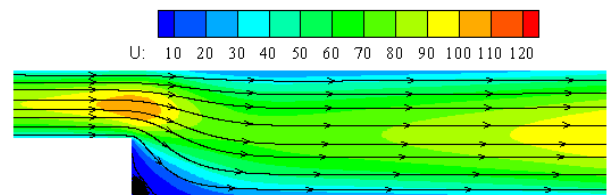


Hình 3. Sự phân bố nhiệt độ trên bề mặt 3

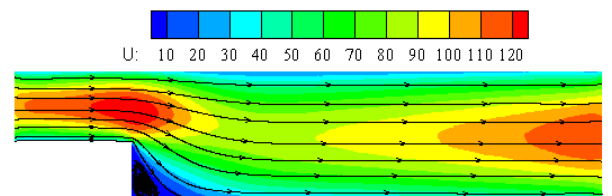


Hình 4. Sự phân bố vận tốc trên bề mặt 3

Cuối cùng là hai trường vận tốc và đường dòng của mô phỏng CFD với các điều kiện biên bậc nhất Maxwell - Smoluchowski và mô phỏng DSMC được trình bày trong các Hình 5a và 5b tương ứng. Kết quả mô phỏng chỉ ra rằng, vận tốc của mô phỏng DSMC lớn hơn vận tốc của mô phỏng CFD xảy ra ở gần các đầu vào và đầu ra của vi kênh. Ứng xử của dòng khí trong vi kênh giữa hai phương pháp CFD và DSMC tương đồng nhau. Các đường dòng cũng thể hiện được vùng phân tách xảy ra ngay góc giữa hai bề mặt 2 và 3 của vi kênh.



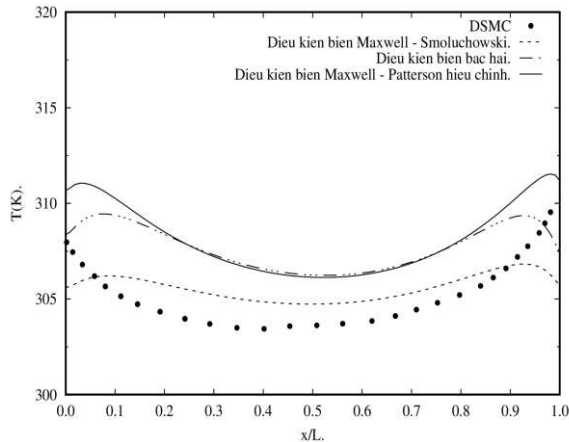
Hình 5a. Trường vận tốc CFD trong vi kênh



Hình 5b. Trường vận tốc DSMC trong vi kênh

5.2. Vi khoang với nắp truyền dẫn

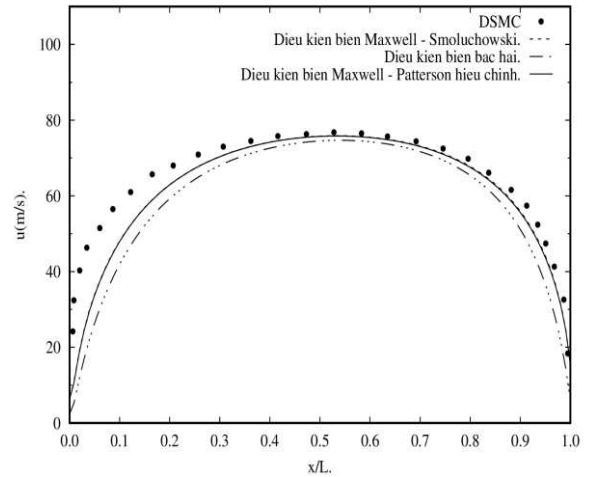
Dòng khí loãng được truyền dẫn chuyển động bởi nắp phía trên dịch chuyển. Nắp chuyển động với vận tốc không đổi theo phương ngang với chiều từ trái sang phải, trong khi ba bề mặt còn lại của vi khoang đứng yên. Khi đó dòng khí sẽ được đẩy vào thành bên phải và nó đi xuống trước khi di chuyển ngược lên phía bên trái của vi khoang. Chuyển động này tạo ra một dòng xoáy ở trung tâm của vi khoang. Mặc dù, có sự đơn giản về mặt hình học nhưng dòng trong vi khoang với nắp truyền dẫn có thể gặp phải các tính năng dòng khí rất phức tạp như ảnh hưởng nén và xoáy ở các góc. Kết quả tính toán mô phỏng cho nhiệt độ và vận tốc được vẽ dưới dạng hàm của khoảng cách chuẩn hoá x/L dọc theo bề mặt nắp vi khoang. Trong đó, L là chiều dài của nắp và x là khoảng cách chạy dọc bề mặt nắp từ trái sang phải. Trong trường hợp vi khoang nắp truyền dẫn, các kết quả mô phỏng của vận tốc và nhiệt độ của dòng khí trên bề mặt nắp được trình bày. Phân bố nhiệt độ khí dọc theo bề mặt nắp của vi khoang được trình bày trong Hình 6. Các kết quả CFD và DSMC [10] cho thấy rằng nhiệt độ tại gần vị trí hai biên của nắp, là nơi xảy ra sự tách và gắn lại dòng, cao hơn nhiệt độ khí ở vị trí giữa nắp. Mô phỏng QGD với điều kiện nhảy nhiệt độ Smoluchowski dự đoán nhiệt độ khí trên bề mặt đạt giá trị thấp nhất trong số các mô phỏng QGD và gần với kết quả DSMC dọc theo bề mặt của nắp và tốt hơn so với hai mô phỏng QGD với điều kiện biên nhảy nhiệt độ bậc hai và Patterson hiệu chỉnh có xem xét sự sinh nhiệt nhớt. Sự ảnh hưởng của các số hạng bậc hai và sinh nhiệt nhớt đã làm cho nhiệt độ khí trên bề mặt cao hơn so với nhiệt độ dự đoán bởi điều kiện biên Smoluchowski, và chúng không tiệm cận với kết quả DSMC [10].



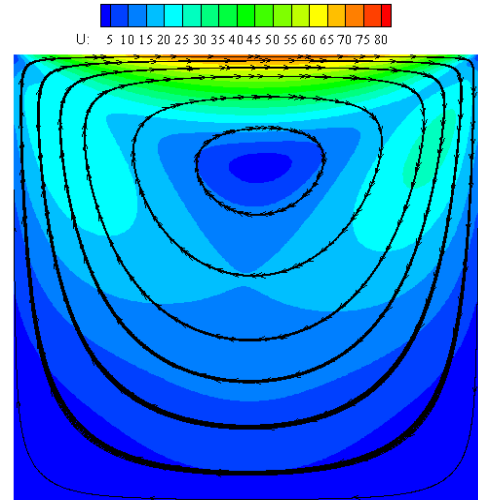
Hình 6. Sự phân bố nhiệt độ trên bề mặt nắp

Vận tốc trượt dòng khí dự đoán bởi các phương pháp CFD và DSMC trên bề mặt nắp được so sánh trong Hình 7. Kết quả vận tốc trượt dự đoán bởi phương pháp DSMC thì cao hơn tất cả các kết quả dự đoán bởi phương pháp CFD. Kết quả mô phỏng chỉ ra rằng, kết quả CFD dùng mô hình QGD lệch khỏi kết quả DSMC khi dòng khí tiếp cận ở các góc trên của vi khoang (tại gần các vị trí $x/L = 0$ và $x/L = 1$). Các kết quả CFD và DSMC tiệm cận với nhau ở khoảng giữa của bề mặt nắp. Sự khác biệt giữa kết quả tính toán của mô hình QGD và DSMC khi dòng tiếp cận góc trên cùng của vi khoang ($x/L = 1$) là do ảnh hưởng của sự nén và sự bất cân bằng của dòng làm điều kiện biên vận tốc trượt không dự đoán được vận tốc ở các vùng gần các góc trên cùng một cách chính xác

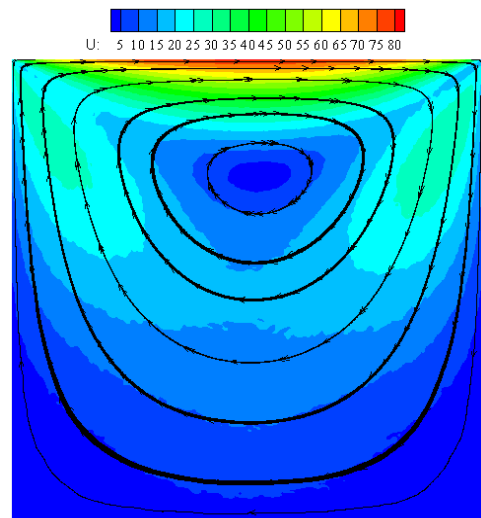
[10]. Cuối cùng là trường vận tốc và đường dòng của hai phương pháp CFD với điều kiện biên Maxwell - Smoluchowski và DSMC được trình bày trong Hình 8a và 8b tương ứng. Kết quả mô phỏng chỉ ra rằng, sự phân bố của vận tốc CFD đối xứng nhiều hơn so với kết quả DSMC, và giá trị vận tốc lớn nhất của chúng đạt ở gần giữa bề mặt nắp.



Hình 7. Sự phân bố vận tốc trên bề mặt nắp



Hình 8a. Trường vận tốc CFD trong vi khoang



Hình 8b. Trường vận tốc DSMC trong vi khoang

6. Kết luận

Các điều kiện biên vận tốc trượt và nhảy nhiệt độ bậc nhất và bậc hai của đã được tích hợp vào bộ giải *QGDFOAM* trong phần mềm mã mở OpenFOAM, và đã mô phỏng thành công các vi dòng khí loãng ở tốc độ thấp trong hai trường hợp điển hình là vi kênh bậc ngược và vi khoang với nắp truyền dẫn. Trong đó, các đại lượng trên bề mặt của dòng khí như $(T, \mathbf{u})$ đã được tính toán và dự đoán thông qua các điều kiện biên. Kết quả mô phỏng chỉ ra rằng, các điều kiện biên bậc hai không tốt hơn nhiều các điều kiện bậc nhất khi dùng với mô hình QGD. Một bộ giải hoàn chỉnh dùng mô hình QGD có tích hợp các điều kiện biên đã được phát triển trong nghiên cứu này như là một sự lựa chọn thay đổi khác trong tính toán mô phỏng dòng khí loãng so với các bộ giải CFD đã có sẵn trước đây giải với phương trình Navier-Stokes, Burnett...

Lời cảm ơn: Nghiên cứu này được tài trợ bởi Trường Đại học Thủ Dầu Một trong đề tài mã số DT.21.4-003.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] T. G. Elizarova, and Y. V. Sheretov, "Theoretical and numerical analysis of quasi-gas dynamic and quasi-hydrodynamic equations", *Journal of Computational Mathematics and Mathematical Physics*, Vol. 41, 2001, pp. 219–234.
- [2] T. G. Elizarova, *Quasi-gas dynamic equations*, Springer, 2009.
- [3] OpenFOAM, <http://www.openfoam.org>, 01/2022.
- [4] V. M. Kraposhin, E. V. Smirnova, T. G. Elizarova, and M. A. Istomina, "Development of a new OpenFOAM solver using regularized gas dynamic equations", *Computers and Fluids*, Vol. 166, 2018, pp. 163–175.
- [5] J. C. Maxwell, "On stresses in rarefied gases arising from inequalities of temperature", *Philosophical Transactions of the Royal Society*, Part 1, Vol. 170, 1897, pp. 231–256.
- [6] M. von Smoluchowski, "Über wärmeleitung in verdünnten gasen", *Annalender Physik und Chemie*, Vol. 64, 1898, pp. 101–130.
- [7] N. T. P. Le and E. Roohi, "A new form of the second order temperature jump boundary condition in the low-speed nano/microscale and hypersonic rarefied gas flow simulations", *International Journal of Thermal Sciences*, Vol. 98, 2015, pp. 51 – 59.
- [8] N. T. P. Le, N. H. Tran, and T. N. Tran, "Modified Patterson temperature jump condition considering viscous heat generation", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 126, 2018, pp. 1267–1274.
- [9] N. T. P. Le, C. J. Greenshields, and J. M. Reese, "Evaluation of nonequilibrium boundary condition in simulating hypersonic gas flows", *Progress in Flight Physics*, Vol. 3, 2012, pp. 217 – 230.
- [10] A. Mohammadzadeh, E. Roohi, H. Niazmand, and S. K. Stefanov, "Detailed investigation of thermal and hydrodynamic flow behaviour in micro/nano cavity using DSMC and NSF equations", *Proceedings of the ASME 2011 9th International Conference on Nanochannels, Microchannels and Minichannels*, 2011, ICNMM2011- 58108.
- [11] A. M. Mahdavi, N. T. P. Le, E. Roohi, and C. White, "Thermal rarefied gas flow investigations through micro/nano backward-facing step: comparison of DSMC and CFD subject to hybrid slip and jump boundary conditions", *Numerical Heat Transfer, Part A: Application*, Vol. 66, 2014, pp. 733 – 755.
- [12] N. T.P. Le, C. White, J. M. Reese, and R. S. Myong, "Langmuir-Maxwell and Langmuir-Smoluchowski boundary conditions for thermal gas flow simulations in hypersonic aerodynamics", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 55, 2012, pp. 5032 – 5043.
- [13] N. T. P. Le, N. A. Vu, and L. T. Loc, "New type of Smoluchowski temperature jump condition considering the viscous heat generation", *AIAA Journal*, Vol. 55, 2017, pp. 474 – 483.
- [14] S. H. Maslen, "On heat transfer in slip flow", *Journal of Aerospace Sciences*, Vol. 25, 1958, pp. 400 – 401.