

## Об анизотропии процессов переноса газа в нано- и микроканалах\*

*В. Я. Рудяк*<sup>1,2,3</sup>, *Е. В. Лежнев*<sup>1,3</sup>, *Д. Н. Любимов*<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет, Российская Федерация, 630008, Новосибирск, ул. Ленинградская, 113

<sup>2</sup> Новосибирский государственный университет, Российская Федерация, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 1

<sup>3</sup> Институт теплофизики СО РАН, Российская Федерация, 630090, Новосибирск, ул. Лаврентьева, 1

**Для цитирования:** *Рудяк В. Я., Лежнев Е. В., Любимов Д. Н.* Об анизотропии процессов переноса газа в нано- и микроканалах // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2022. Т. 9 (67). Вып. 1. С. 152–163.

<https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.115>

Метод стохастического молекулярного моделирования, развитый авторами для расчета коэффициентов переноса разреженного газа в объеме, обобщается для описания процессов переноса в стесненных условиях. Фазовые траектории исследуемой молекулярной системы моделируются стохастически, причем имитация динамики молекулы расщепляется по процессам. Сначала реализуется ее сдвиг в конфигурационном пространстве, а затем разыгрывается возможное соударение с другими молекулами. Вычисление всех наблюдаемых, в частности коэффициентов переноса, проводится усреднением по ансамблю независимых фазовых траекторий. Взаимодействие молекул газа с границей описывается зеркальным или зеркально-диффузным законами. Работоспособность алгоритма демонстрируется на вычислении коэффициента самодиффузии аргона в наноканале. Исследована точность моделирования, ее зависимость от числа частиц и фазовых траекторий, используемых для усреднения. Систематически изучена вязкость разреженных газов в наноканале. Показано, что она неизотропна и ее различие вдоль и поперек канала определяется взаимодействием молекул газа со стенками канала. Меняя материал стенок, можно существенно изменять вязкость газа, причем она может быть как в разы больше, чем в объеме, так и меньше. Указанная неизотропия вязкости фиксируется не только в нано-, но также и в микроканалах.

*Ключевые слова:* вязкость, диффузия, молекулярное моделирование, наноканал, разреженный газ, процессы переноса.

**1. Введение.** Несколько последних десятилетий проходит под знаком опережающего развития микросистемной техники различного назначения (см., например, [1–3]). Это связано не только с ее энергоэффективностью и низкой материалоемкостью, но и с тем, что появляются устройства, где использование такой техники является единственно возможным. Такая ситуация реализуется, например, при создании компьютеров нового поколения, в различных биомедицинских приложениях.

---

\*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 19-01-00399 и № 20-01-00041) и мегагранта Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2021-575).

© Санкт-Петербургский государственный университет, 2022

В большинстве таких устройств имеют место те или иные течения флюидов. Конечно, такие течения типичны и в различных природных объектах и системах.

Сложность экспериментального изучения течений флюидов в микро- и наноканалах вполне очевидна. Естественной альтернативой экспериментальному изучению данных течений является их моделирование. При этом нередко используют стандартные гидродинамические подходы, предполагая, что коэффициенты переноса флюида в микро- и наноканалах такие же, что и в объеме. По понятным причинам вязкость не удастся измерить в таких каналах. Единственным методом ее определения является молекулярное моделирование. К сожалению, хорошо известный метод молекулярной динамики (МД) не применим для моделирования процессов переноса разреженного газа, поскольку требует огромного числа молекул (характерный размер канала должен быть много больше длины свободного пробега молекул газа). Ранее авторами для моделирования коэффициентов переноса разреженного газа был разработан метод стохастического молекулярного моделирования (СММ) [4–6]. Этим методом удалось с высокой точностью моделировать коэффициенты диффузии и вязкости как одноатомных, так и многоатомных разреженных газов. Целью данной работы является моделирование методом СММ вязкости разреженных газов в наноканалах. Для этого метод [4–6] обобщается сначала для моделирования процессов переноса разреженного газа в стесненных условиях. Его применимость продемонстрирована на моделировании самодиффузии молекул разреженного газа в наноканалах.

**2. Метод СММ в стесненных условиях.** Основная идея метода СММ базируется на двух формальных факторах. Первый очевиден — это молекулярная природа вещества. Потрясающие успехи прямого молекулярного моделирования продемонстрировал метод МД, широко использующийся в физике, механике, химии и биологии. Однако метод МД, в основе которого лежит решение уравнений Ньютона для частиц моделируемой системы, не дает истинных фазовых траекторий [7, 8]. В молекулярных системах имеет место динамический хаос. Адекватные данные получаются лишь усреднением по большому числу независимых фазовых траекторий моделируемой системы. Отсюда родился и второй из указанных факторов: моделировать фазовые траектории системы стохастически, а затем расчет любых наблюдаемых выполнять усреднением по большому числу таких траекторий.

Для моделирования процессов переноса в стесненных условиях метод СММ [4–6] должен быть трансформирован. Прежде всего, в стесненных условиях необходимо учитывать взаимодействие молекул газа со стенками канала. По этой причине, несмотря на то что моделируется разреженный газ, коэффициенты переноса которого зависят лишь от скоростей молекул [9], теперь необходимо моделировать эволюцию рассматриваемой системы и в пространстве скоростей, и в конфигурационном пространстве.

Взаимодействие молекул газа с границей в данной работе описывается с использованием зеркального или зеркально-диффузного законов отражения [10]. При зеркальном отражении скорость молекулы вдоль поверхности не меняется, а нормальная составляющая скорости меняет свой знак. При диффузном отражении скорость отраженной молекулы разыгрывается по максвелловской функции распределения. При зеркально-диффузном отражении доля молекул  $\theta$  взаимодействует со стенкой диффузно, а  $(1 - \theta)$  — зеркально, где  $\theta$  — так называемый коэффициент аккомодации.

Данная работа посвящена моделированию коэффициентов переноса слабо неравновесного газа, в котором потоки пропорциональны градиентам соответствующих гидродинамических переменных. Они в общем случае определяются флуктуационно-диссипационными теоремами [8, 11], согласно которым коэффициенты переноса являются интегралами от двухвременных корреляционных функций соответствующих динамических переменных. Важным является то обстоятельство, что эти корреляционные функции вычисляются по равновесной функции распределения. Это, в частности, означает, что диссипативные коэффициенты (вязкости, теплопроводности, диффузии и т. д.) определяются равновесными микрофлуктуациями среды. В соответствии с этим для целей данной работы необходимо моделировать равновесное состояние системы. Эквивалентность флуктуационно-диссипационных теорем формулам кинетической теории газов для вычисления коэффициентов переноса доказана в работах [12, 13] (см. также [8]).

В начальный момент времени молекулы распределяются равномерно по объему моделирования в соответствии с заданной плотностью  $n$ . Скорости молекул  $\mathbf{v}_i$  в ячейке моделирования разыгрываются согласно распределению Максвелла при заданной температуре  $T$ . Взаимодействие молекул между собой может описываться произвольным парным потенциалом. В данной статье использовался потенциал Леннарда — Джонса [6–12].

Имитация динамики молекул газа начинается с составления их списка, в который входят координаты и скорости всех молекул системы в некоторый момент времени. Затем время расчета одной фазовой траектории  $t_s$  разбивается на шаги длительностью  $\tau_i = \sigma/v_{i,max}$ , где  $\sigma$  — эффективный размер молекул, а  $v_{i,max}$  — максимальное значение скорости молекул на шаге  $i$ . Пусть в момент времени  $t$  молекулы имеют скорости  $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N$ , координаты  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$  и необходимо сгенерировать соответствующие их значения в момент времени  $(t + \tau_1)$ . Сначала определяется положение молекулы  $i$ , она сдвигается в конфигурационном пространстве в соответствии с ее скоростью:  $\mathbf{r}'_1 = \mathbf{r}_1 + \mathbf{v}_1\tau_1$ . Если молекула достигает стенки, то ее скорость изменяется в соответствии с законом отражения, и с учетом уже этой новой скорости определяется окончательно пространственная координата.

В случае, если молекула  $i$  не достигает стенки, разыгрывается ее соударение с молекулами флюида. Поскольку рассматривается разреженный газ, то вероятность столкновения молекулы  $i$  за время  $\tau_1$  вычисляется на основе кинетической теории [9]:  $P_{c1} = 4\tau_1 n \sigma^2 \sqrt{(\pi kT/m)}$  ( $k$  — постоянная Больцмана, а  $m$  — масса молекулы). Для этого генерируется число  $u$ , равномерно распределенное на отрезке  $[0, 1]$ . Если это число меньше или равно  $P_{c1}$ , то столкновение происходит. Чтобы реализовать его, из оставшихся  $(N - 1)$  молекул случайным образом выбирается молекула  $j$ . Затем скорости молекул  $i$  и  $j$  меняются согласно законам упругого соударения:

$$\mathbf{v}'_i = \mathbf{v}_i + (\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{e})\mathbf{e}, \quad \mathbf{v}'_j = \mathbf{v}_j + (\mathbf{v}_{ji} \cdot \mathbf{e})\mathbf{e}, \quad (1)$$

где  $\mathbf{v}_{ji} = (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i)$  — вектор относительной скорости, а  $\mathbf{e}$  — единичный вектор, направленный от центра молекулы  $j$  к центру молекулы  $i$ .

Реализация соотношения (1) требует определенной аккуратности. Движение данной пары молекул происходит в плоскости, задаваемой векторами  $\mathbf{r}_{ji} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$  и  $\mathbf{v}_{ji}$  и начинается с расстояния  $0 \leq b \leq \sigma/2$  ( $b$  — прицельный параметр). При этом сохраняется момент количества движения  $\mathbf{M} = m(\mathbf{r}_{ji} \times \mathbf{v}_{ji})$ ,  $M = mv_{ji}b$  относительно центра поля и энергия  $E$ , равная  $mv_{ji}^2/2$ . Далее необходимо связать вектор  $\mathbf{e}$  с параметрами рассеяния. Соответствующая процедура подробно описана в [5].

В случае, если генерируемое число  $u$  оказалось больше средней вероятности столкновения, молекула  $i$  в промежутке времени  $\tau_1$  не сталкивается и ее скорость не изменяется. Подобная процедура выполняется последовательно для всех  $N$  молекул. В результате к окончанию времени  $(t + \tau_1)$  формируется полный список фазовых переменных системы: координат и скоростей. После формирования списка на момент времени  $(t + \tau_1)$  выбирается следующий интервал времени — и процедура последовательно повторяется, пока не закончится заданное время расчета  $t_s = \tau_1 + \tau_2 + \dots + \tau_k$ . Результатом расчета является полный набор координат и скоростей всех молекул моделируемой системы в последовательные моменты времени.

**3. Моделирование коэффициента самодиффузии в наноканале.** Тестирование описанного алгоритма СММ в общем случае — непростая задача, поскольку реальных надежных экспериментальных данных по измерению коэффициентов переноса нет и трудно надеяться их получить. В данной статье для этой цели моделировался коэффициент самодиффузии  $D$  разреженного аргона при атмосферном давлении и температуре 273 К. Тестирование возможно, поскольку значение коэффициента самодиффузии вдоль достаточно длинного канала должно соответствовать его значению в объеме.

Ячейка моделирования выбиралась в виде прямоугольного параллелепипеда, вдоль оси которого использовались периодические граничные условия. Межмолекулярное взаимодействие описывалось потенциалом Леннарда — Джонса, эффективный диаметр молекулы  $\sigma$  равнялся 0.311 нм, а глубина потенциальной ямы  $\epsilon/k$  — 116 К [14]. Коэффициент самодиффузии  $D$  вычислялся на основе флуктуационно-диссипационной теоремы [8, 11], которая связывает его с автокорреляционной функцией скорости (АКФС)  $\chi_{vv}$  молекул соотношением

$$D = \frac{1}{3} \int_0^\tau \chi_{vv}(0, t) dt, \quad \chi_{vv}(t) = \frac{1}{Nl} \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^l [\mathbf{v}_i(t) \cdot \mathbf{v}_i(t + \alpha \Delta t)], \quad (2)$$

где  $\tau$  — так называемое платовое значение времени вычисления интеграла (2), а  $l$  — число временных интервалов, на которых вычислялась АКФС,  $\Delta t$  — шаг интегрирования по времени.

Эволюция АКФС согласно (2) целиком и полностью определяет коэффициент самодиффузии. Для разреженного газа все корреляционные функции, включая АКФС (2), должны затухать экспоненциально со временем релаксации порядка времени свободного пробега его молекул [8]. В наноканале ситуация иная. Взаимодействие молекул газа со стенками канала приводит к тому, что у АКФС поперек канала появляется отрицательная ветвь, глубина и размер которой зависит от высоты канала. Таким образом, диффузия молекул газа в канале не изотропна. Вдоль канала она должна проходить так же, как и в объеме; здесь среда не ограничена. И действительно, расчеты показывают, что вдоль канала АКФС молекул газа экспоненциально быстро затухает.

В объеме измеряемое в эксперименте значение коэффициента диффузии получается лишь при выходе функции (2) на платовое значение. Время выхода на платовое значение соответствует затуханию АКФС. Эволюция коэффициента самодиффузии аргона вдоль канала с квадратным сечением, равным  $100\sigma^2$  (около 10 нм<sup>2</sup>), представлена на рис. 1, а. Здесь взаимодействие молекул газа со стенкой описывалось зеркальным законом, а время здесь и везде ниже нормировано на время свободного

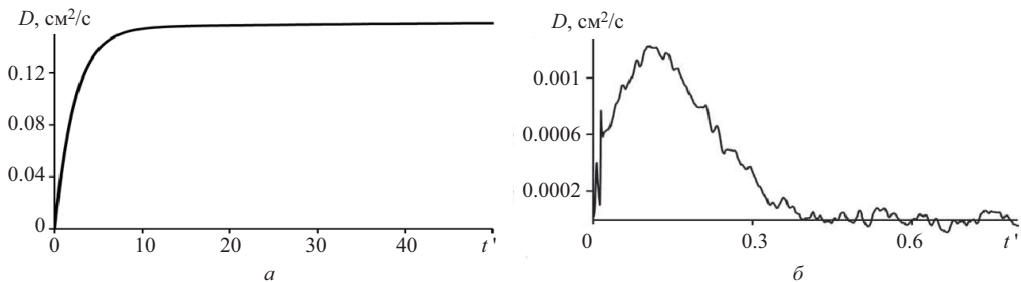


Рис. 1. Эволюция коэффициента самодиффузии вдоль канала (а) и поперек канала (б).

пробега молекул. Усреднение коэффициента самодиффузии выполнялось по тысяче фазовых траекторий. Коэффициент (2) вдоль канала выходит на платовое значение за время порядка 15–20 времен свободного пробега молекул. Напротив, эволюция коэффициента диффузии поперек канала (см. рис. 1, б) много сложнее — сначала наблюдается его некоторый рост, а затем он монотонно уменьшается и стремится к нулю. Причем это происходит достаточно быстро, соответствующее время будет определяться высотой канала.

Коэффициент самодиффузии молекул можно определить и с помощью соотношения Эйнштейна для среднеквадратичного смещения молекул:

$$R^2(t) = \frac{1}{Nl} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{l-1} [\mathbf{r}_i(j\Delta t) - \mathbf{r}_i(t + j\Delta t)]^2 = 6Dt. \quad (3)$$

Отсюда очевидным образом получаются соответствующие соотношения, определяющие среднеквадратичные смещения вдоль каждой из осей. На рис. 2, а, представлена эволюция  $Y^2$  (диффузия вдоль канала). Она протекает в соответствии с законом (3),  $Y^2$  растет линейно со временем. С другой стороны, среднеквадратичное смещение поперек канала ( $X^2$ ) представлено на рис. 2, б, для каналов разной высоты: пунктирная линия соответствует каналу высотой  $50\sigma$ , а штриховая —  $30\sigma$ . Среднеквадратичное смещение поперек канала перестает зависеть от времени, а это означает, что соответствующий коэффициент диффузии стремится к нулю.

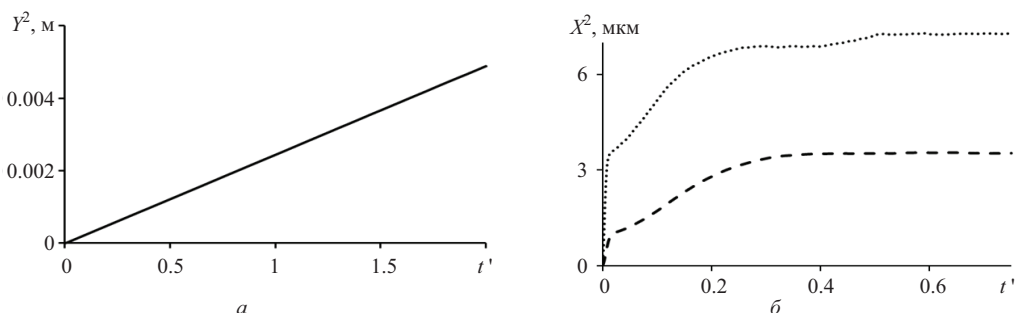


Рис. 2. Эволюция среднеквадратического смещения молекул газа вдоль канала (а) и поперек (б).

Описанное выше отсутствие изотропии коэффициента самодиффузии молекул аргона в наноканале вполне ожидаемо. Метод СММ дает качественно физически

вполне разумный результат. Однако его использование требует внятного понимания, насколько точно алгоритм позволяет вычислять коэффициенты переноса разреженных газов. Это удастся установить. Коэффициент самодиффузии вдоль канала должен соответствовать значению в объеме, и его можно сопоставить с экспериментальными данными. Ясно, что точность моделирования будет зависеть от длины канала, а значит, и от числа молекул в ячейке. В качестве примера изучения этой зависимости в табл. 1 сопоставлены данные расчета коэффициента самодиффузии аргона в канале с квадратным сечением  $100\sigma^2$  при нормальных условиях. Здесь в первой строке указано число молекул в ячейке, во второй — длина канала, в третьей — вычисленное значение коэффициента самодиффузии, а в последней — относительная ошибка в сравнении с экспериментальным значением. Длина канала  $L$  менялась от  $1000\sigma$  до  $32000\sigma$  (т. е. примерно от 0.3 до 100 мкм). В последнем случае уже можно было ожидать, что коэффициент самодиффузии будет близок к соответствующему значению в объеме. Это действительно оказалось так. Экспериментальное значение коэффициента самодиффузии в объеме равно  $0.156 \text{ см}^2/\text{с}$  [15], и точность моделирования при максимальной длине канала оказалась около одного процента (см. табл. 1). Подобный результат получается и для каналов любого другого сечения.

*Таблица 1. Относительная погрешность расчета коэффициента самодиффузии при различной длине канала  $L$*

| $N$                        | 100   | 200   | 300   | 3200   |
|----------------------------|-------|-------|-------|--------|
| $L, \sigma$                | 1000  | 2000  | 3000  | 32 000 |
| $D, \text{ см}^2/\text{с}$ | 0.192 | 0.175 | 0.168 | 0.158  |
| $\Delta, \%$               | 22.95 | 12.36 | 7.46  | 1.23   |

Ясно, что в общем случае при стохастическом моделировании фазовых траекторий точность должна существенно зависеть от числа используемых для усреднения независимых фазовых траекторий  $l$ . Выполненные систематические расчеты показали, что точность моделирования здесь, как и в объеме, неплохо описывается соотношением  $\Delta \sim 1/\sqrt{l}$ .

**4. Моделирование коэффициента вязкости в наноканале.** Рассмотрим теперь моделирование вязкости аргона при атмосферном давлении и температуре 273 К. Канал имеет квадратное сечение, его высота варьировалась от  $20\sigma$  до  $1607\sigma$ . Усреднение коэффициента вязкости выполнялось по тысяче независимых фазовых траекторий. Коэффициент вязкости определяется соотношением ( $V$  — объем системы)

$$\eta = \frac{1}{3VkT} \int_0^\tau \langle \sigma(0) : \sigma(t) \rangle dt, \quad \sigma(t) = \frac{1}{Nl} \sum_{j=1}^l \sum_{i=1}^N m[\mathbf{v}_i(j\Delta t)\mathbf{v}_i(j\Delta t)]. \quad (4)$$

Наноканал — существенно неізотропная система. Поэтому перенос импульса вдоль и поперек канала, определяющий соответствующие вклады в коэффициент вязкости, также должен быть разным. Значение коэффициента вязкости (4) определяется интегралом от соответствующей корреляционной функции. Эволюция этой нормированной на начальные значения корреляционной функции  $\chi_n$  вдоль и поперек канала представлена на рис. 3, а. Корреляционная функция поперек канала имеет характерный отрицательный хвост, обусловленный взаимодействием молекул

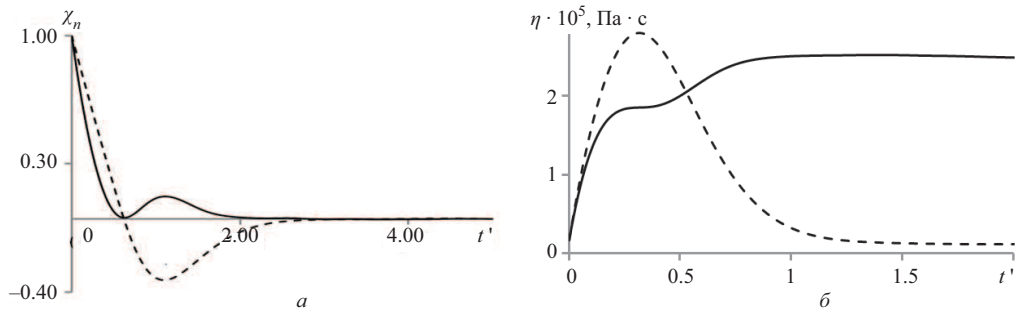


Рис. 3. Эволюция нормированной корреляционной функции (а) и коэффициента вязкости (б) аргона вдоль (сплошная линия) и поперек (штриховая линия) наноканала.

со стенкой. В данном примере взаимодействие со стенкой описывалось зеркальным законом, а высота канала равнялась  $50\sigma$ . Наличие отрицательного хвоста приводит к тому, что вклад в коэффициент вязкости молекул поперек канала оказывается почти в двадцать раз меньше, чем вдоль. Соответствующие значения приведены на рис. 3, б. Таким образом, полный коэффициент вязкости газа в канале почти втрое ниже, чем в объеме.

Закон взаимодействия молекул газа со стенкой будет определяющим образом менять перенос импульса в системе. Так, например, в канале высотой  $50\sigma$  при  $\theta = 0$  (зеркальное отражение) коэффициент вязкости равен  $0.82 \cdot 10^{-5}$  Па·с, при  $\theta = 0.5$  —  $2.76 \cdot 10^{-5}$  Па·с, а при  $\theta = 1$  (чисто диффузное отражение) —  $5.07 \cdot 10^{-5}$  Па·с. Соответствующее значение коэффициента вязкости в объеме равно  $2.14 \cdot 10^{-5}$  Па·с. Таким образом, при изменении коэффициента аккомодации от нуля до единицы коэффициент вязкости газа меняется более чем в шесть раз.

Таблица 2. Сопоставление коэффициентов вязкости газов в наноканале

|                            | Ar    | Kr    | Ne    | Xe    |
|----------------------------|-------|-------|-------|-------|
| $\eta_a \cdot 10^5$ , Па·с | 2.1   | 2.35  | 2.93  | 2.12  |
| $\eta_e \cdot 10^5$ , Па·с | 2.12  | 2.39  | 2.98  | 2.15  |
| $\Delta$ , %               | 1.08  | 1.39  | 1.71  | 1.16  |
| $\eta_a/\eta_e$            | 17.39 | 15.56 | 24.33 | 12.74 |

Анизотропия вязкости, естественно, универсальное свойство и имеет место для любых газов. В данной работе помимо аргона изучалась вязкость криптона, ксенона и неона. Параметры потенциалов межмолекулярного взаимодействия для этих газов достаточно заметно разнятся: Kr —  $\sigma = 0.36$  нм,  $\epsilon/k = 171$  К, Ne —  $\sigma = 0.279$  нм,  $\epsilon/k = 35.7$  К, Xe —  $\sigma = 0.41$  нм,  $\epsilon/k = 221$  К [14]. В табл. 2 сопоставлены расчетные и экспериментальные данные по вязкости в канале с квадратным сечением и зеркальными стенками, его высота равнялась 17 нм, а длина — 390 нм. Здесь в первой строке даны значения коэффициента вязкости вдоль канала  $\eta_a$ , во второй — экспериментальные значения [16], в третьей — относительная ошибка моделирования, а в последней — отношение коэффициента вязкости вдоль канала к его значению поперек канала  $\eta_e$ . Наибольшая анизотропия фиксируется для неона. Данные табл. 2 показывают, что анизотропия растет с уменьшением глубины ямы потенциала Леннарда — Джонса и увеличением характерного размера молекул  $\sigma$ . Последнее в стесненных условиях вообще является достаточно важным фактором, поскольку

ку при поддержании заданных давления и температуры будет существенно менять числовую плотность. Действительно, характерный объем молекул, например неона и ксенона, отличается более, чем в три раза.

**5. Заключение.** Кинетическая теория Больцмана принципиально дает метод расчета коэффициентов переноса разреженного газа. Метод этот, однако, не тривиален и требует последовательного решения системы интегральных уравнений [9]. Ситуация существенно усложняется для многоатомных газов и в случае, когда необходимо учитывать внутренние степени свободы (см., например, [17–19]). Традиционная кинетическая теория вообще не позволяет вычислить коэффициенты переноса газа в наноканале. Для этого необходимо использовать кинетическое уравнение с источником членом, описывающим взаимодействие молекул газа со стенкой [20].

В данной работе метод СММ обобщен для моделирования коэффициентов переноса разреженного газа в стесненных условиях и, в частности, в наноканалах. Его работоспособность продемонстрирована на примере расчета коэффициента самодиффузии разреженного аргона. Показано, что точность метода растет с увеличением числа молекул в ячейке и числа используемых для усреднения фазовых траекторий. В объеме относительная ошибка моделирования такова:  $\Delta \sim 1/\sqrt{lN}$  [4–6]. Однако в стесненных условиях ситуация сложнее. Для достижения заданной точности следует при определенном поперечном сечении канала брать его длину не меньше некоторой. Иначе необходимое платовое значение соответствующего коэффициента переноса просто не будет достигнуто.

Метод СММ генетически связан с известным методом прямого статистического моделирования (ПСМ) Бёрда (G. Bird) [21], который с успехом используется несколько последних десятилетий для расчета течений разреженных газов. В настоящее время известно много различных реализаций этого метода [22–24]. В ПСМ моделируется неравновесное состояние, а для расчета коэффициентов переноса достаточно (и необходимо!) изучать равновесное состояние. Если методом ПСМ решается пространственно однородная задача, то реализация динамики соударений может строиться различными, но идеологически близкими способами. В алгоритме СММ используется один из самых простых. Пространственно неоднородные задачи, включая задачи внутреннего и внешнего обтекания, методом ПСМ решаются принципиально иначе. Фактически используется еще и некоторый сеточный метод. Наконец можно добавить, что метод СММ, строго говоря, к методу Монте-Карло не имеет отношения. Здесь не строится стохастический процесс, который являлся бы решением кинетического уравнения. Для метода ПСМ такие подходы известны.

Изучение вязкости газа в наноканале показывает, что процессы переноса импульса, а значит и вязкость, в таких каналах также не изотропны. Варьируя материал стенок, можно управлять средней вязкостью газа в канале. Реальные каналы обычно имеют шероховатости. Их наличие приводит к увеличению площади поверхности канала. Это означает, что не изотропия переноса импульса в газе в таких каналах будет выражена сильнее, чем в канале с гладкими стенками. Поэтому наличие шероховатостей может приводить как к увеличению вязкости, так и к ее уменьшению. Все зависит от характера взаимодействия молекул газа с поверхностью.

Наконец важно иметь ответ на вопрос, когда процессы переноса импульса становятся практически изотропными. Косвенный ответ на этот вопрос дает рис. 4, где показана зависимость отношения коэффициента вязкости аргона вдоль канала к его значению поперек канала ( $\eta_r = \eta_a/\eta_c$ ), от высоты канала. В расчетах использовался



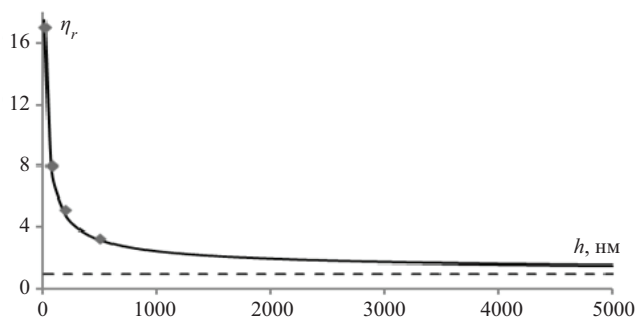


Рис. 4. Зависимость отношения коэффициента вязкости аргона вдоль и поперек канала от его высоты.

зеркальный закон взаимодействия молекул со стенками. Здесь точки соответствуют данным моделирования, по ним построена аппроксимация (непрерывная кривая), так что  $h_r \sim h^{-0.59}$ . Штриховая линия на рис. 4 соответствует изотропной вязкости ( $h_r = 1$ ). Анализ представленной зависимости показывает, что неизотропия вязкости может наблюдаться не только в нано-, но и в микроканалах.

Характер течений в стесненных условиях определяется соответствующими процессами переноса, экспериментальное изучение которых по понятным причинам затруднено. Удаётся получать лишь некоторую интегральную информацию, интерпретация которой выполняется с использованием классических гидродинамических представлений. В результате указывается, что в таких течениях, с одной стороны, может существенно возрастать длина скольжения, а с другой, наблюдается значительный рост коэффициента вязкости (см., например, [1–3, 24]). Эти два вывода взаимно противоречивы: первый фиксирует значительное снижение гидравлического сопротивления, а второй — его увеличение. Исследование вязкости газа, представленное в данной работе, показывает, что на практике действительно может реализоваться и тот, и другой результат.

## Литература

1. Li D. (ed.) *Encyclopedia of Microfluidics and Nanofluidics*. Springer Science+Business Media (2008).
2. Michaelides E. E. *Thermodynamic and Transport Properties*. Switzerland, Springer (2014).
3. Рудяк В. Я., Минаков А. В. *Современные проблемы микро- и наноплюидики*. Новосибирск, Наука (2016).
4. Рудяк В. Я., Лежнев Е. В. Стохастический метод моделирования коэффициентов переноса разреженного газа. *Мат. моделирование* **29** (3), 113–122 (2017).
5. Rudyak V. Ya., Lezhnev E. V. Stochastic Algorithm for Simulating Gas Transport Coefficients. *J. Comp. Physics* **355**, 95–103 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2017.11.001>
6. Rudyak V. Ya., Lezhnev E. V. Stochastic Molecular Modeling the Transport Coefficients of Rarefied Gas and Gas Nanosuspensions. *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics* **11** (3), 285–293 (2020). <https://doi.org/10.17586/2220-8054-2020-11-3-285-293>
7. Норман В. В., Стегайлов В. В. Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики. *Мат. моделирование* **24** (3), 305–333 (2012).
8. Рудяк В. Я. Статистическая аэрогидромеханика гомогенных и гетерогенных сред. В: *Гидромеханика*. Т. 2. Новосибирск, НГАСУ (2005).
9. Chapman S., Cowling T. G. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Cambridge, Cambridge University Press (1990).

10. Cercignani C. *Theory and Application of the Boltzmann Equation*. Edinburgh, London, Scottish Academic Press (1975).
11. Зубарев Д. Н. *Неравновесная статистическая термодинамика*. Москва, Наука (1971).
12. Ernst M. H. Formal Theory of Transport Coefficients to General Order in the Density. *Physica* **32** (2), 209–243 (1966). [https://doi.org/10.1016/0031-8914\(66\)90055-3](https://doi.org/10.1016/0031-8914(66)90055-3)
13. Хонькин А. Д. Уравнения для пространственно-временных и временных корреляционных функций и доказательство эквивалентности результатов методов Чепмена — Энского и временных корреляционных функций. *ТМФ* **5** (1), 125–135 (1970).
14. Hirschfelder J. O., Curtiss Ch. F., Bird R. B. *Molecular Theory of Gases and Liquids*. New York, London, John Wiley and Sons, Chapman and Hall (1954).
15. Григорьев И. С., Мейлихова Е. З. (ред.) *Физические величины*. Москва, Энергоатомиздат (1991).
16. Рыско С. Я. (ред.) *Теплофизические свойства неона, аргона, криптона и ксенона*. Москва, Изд-во стандартов (1967).
17. Алексеев И. В., Кустова Е. В. Расчет структуры ударной волны в CO<sub>2</sub> с учетом объемной вязкости. *Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия* **4** (62), вып. 4, 642–653 (2017). <https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2017.412>
18. Нагнибеда Е. А., Пашина К. В. Неравновесная колебательная и химическая кинетика в потоках воздуха в соплах. *Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия* **5** (63), вып. 2, 287–299 (2018). <https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2018.209>
19. Корниенко О. В., Кустова Е. В. Влияние переменного диаметра молекул на коэффициент вязкости в поуровневом приближении. *Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия* **3** (61), вып. 3, 457–467 (2016). <https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2016.314>
20. Рудяк В. Я. *Статистическая теория диссипативных процессов в газах и жидкостях*. Новосибирск, Наука (1987).
21. Bird G. A. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford, Clarendon Press (1994).
22. Иванов М. С., Рогазинский С. В. *Метод прямого статистического моделирования в динамике разреженного газа*. Новосибирск, ВЦ СО РАН (1988).
23. Ivanov M. S., Rogasinsky S. V., Rudyak V. Ya. Direct Statistical Simulation Method and Master Kinetic Equation. *Progr. Astro. Aero.* **117**, 171–181 (1989).
24. Roohi E., Stefanov S. Collision Partner Selection Schemes in DSMC: From Micro/Nano Flows to Hypersonic Flows. *Physics Reports* **656** (1), 1–38 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2016.08.002>

Статья поступила в редакцию 30 марта 2021 г.;  
доработана 23 июня 2021 г.;  
рекомендована к печати 2 сентября 2021 г.

#### Контактная информация:

*Рудяк Валерий Яковлевич* — д-р физ.-мат. наук, проф.; [valery.rudyak@mail.ru](mailto:valery.rudyak@mail.ru)

*Лежнев Евгений Васильевич* — канд. техн. наук; [lionlev@yandex.ru](mailto:lionlev@yandex.ru)

*Любимов Даниил Николаевич* — магистрант; [daniilch@mail.ru](mailto:daniilch@mail.ru)

## On the anisotropy of gas transfer processes in nano- and microchannels\*

V. Ya. Rudyak<sup>1,2,3</sup>, E. V. Lezhnev<sup>1</sup>, D. N. Lubimov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering,

113, ul. Leningradskaya, Novosibirsk, 630008, Russian Federation

<sup>2</sup> Novosibirsk State University, 1, ul. Pirogova, Novosibirsk, 630090, Russian Federation

<sup>3</sup> Institute of Thermophysics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences,

1, ul. Lavrenteva, Novosibirsk, 630090, Russian Federation

---

\*The work was partially supported by the Russian Foundation for Basic Research (grants no. 19-01-00399 and no. 20-01-00041) and the megagrant of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (agreement no. 075-15-2021-575).

**For citation:** Rudyak V. Ya., Lezhnev E. V., Lubimov D. N. On the anisotropy of gas transfer processes in nano- and microchannels. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy*, 2022, vol. 9 (67), issue 1, pp. 152–163.  
<https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.115> (In Russian)

The method of stochastic molecular modeling, developed by the authors for calculating the transport coefficients of rarefied gas in a free medium, is generalized to describe transport processes in confined conditions. The phase trajectories of the studied molecular system are simulated stochastically, and the simulation of the dynamics of the molecule is split into processes. First, its shift in the configuration space is realized, and then a possible collision with other molecules is played out. The calculation of all observables, in particular, the transport coefficients is carried out by averaging over an ensemble of independent phase trajectories. The interaction of gas molecules with the boundary is described by mirror or mirror-diffuse laws. The efficiency of the algorithm is demonstrated by calculating the self-diffusion coefficient of argon in the nanochannel. The accuracy of modeling is investigated, its dependence on the number of particles and phase trajectories used for averaging. The viscosity of rarefied gases in the nanochannel has been systematically studied. It is shown that it is non-isotropic, and its difference along and across the channel is determined by the interaction of gas molecules with the channel walls. By changing the material of the walls, it is possible to significantly change the viscosity of the gas, and it can be several times greater than in volume, or less. The indicated anisotropy of viscosity is recorded not only in nano-, but also in microchannels.

*Keywords:* viscosity, diffusion, molecular modeling, nanochannel, rarefied gas, transfer processes.

## References

1. Li D. (ed.) *Encyclopedia of Microfluidics and Nanofluidics*. Springer Science+Business Media (2008).
2. Michaelides E. E. *Thermodynamic and Transport Properties*. Switzerland, Springer (2014).
3. Rudyak V. Ya., Minakov A. V. *Modern Problems of Micro- and Nanofluidics*. Novosibirsk, Nauka Publ. (2016). (In Russian)
4. Rudyak V. Ya., Lezhnev E. V. Stochastic Method for Modeling Rarefied Gas Transport Coefficients. *Math. Modeling* **29** (3), 113–122 (2017). (In Russian)
5. Rudyak V. Ya., Lezhnev E. V. Stochastic Algorithm for Simulating Gas Transport Coefficients. *J. Comp. Physics* **355**, 95–103 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2017.11.001>
6. Rudyak V. Ya., Lezhnev E. V. Stochastic Molecular Modeling the Transport Coefficients of Rarefied Gas and Gas Nanosuspensions. *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics* **11** (3), 285–293 (2020). <https://doi.org/10.17586/2220-8054-2020-11-3-285-293>
7. Norman G. E., Stegailov V. V. Stochastic Theory of the Classical Molecular Dynamics Method. *Math. Modeling* **24** (3), 305–333 (2012). (In Russian)
8. Rudyak V. Ya. Statistical Aerohydrodynamics of Homogeneous and Heterogeneous Media. In: *Hydrodynamics*. Vol. 2. Novosibirsk, NSUACE Publ. (2005). (In Russian)
9. Chapman S., Cowling T. G. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Cambridge, Cambridge University Press (1990).
10. Cercignani C. *Theory and Application of the Boltzmann Equation*. Edinburgh, London, Scottish Academic Press (1975).
11. Zubarev D. N. *Neravnovesnaia statisticheskaya termodinamika*. Moscow, Nauka Publ. (1971). (In Russian) [Eng. transl.: Zubarev D. N. *Nonequilibrium Statistical Thermodynamics*. New York, New York Consultants Bureau (1974)].
12. Ernst M. H. Formal Theory of Transport Coefficients to General Order in the Density. *Physica* **32** (2), 209–243 (1966). [https://doi.org/10.1016/0031-8914\(66\)90055-3](https://doi.org/10.1016/0031-8914(66)90055-3)
13. Khon'kin A. D. Equations for Space-Time and Time Correlation Functions and Proof of the Equivalence of the Results of the Chapman — Enskog Methods and Time Correlation Functions. *Theoret. and Math. Phys.* **5** (1), 125–135 (1970).

14. Hirschfelder J. O., Curtiss Ch. F., Bird R. B. *Molecular Theory of Gases and Liquids*. New York, London, John Wiley and Sons, Chapman and Hall (1954).
15. Grigor'ev I. S., Meilikhov E. Z. (eds) *Physical Quantities: Handbook*. Moscow, Energoatomizdat Publ. (1996). (In Russian)
16. Rysko S. Ya. (ed.) *Thermophysical properties of neon, argon, krypton and xenon*. Moscow, Izdatel'stvo standartov Publ. (1967).
17. Alekseev I. V., Kustova E. V. Shock wave structure in CO<sub>2</sub> taking into account bulkviscosity. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy* **4** (62), iss. 4, 642–653 (2017). <https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2017.412> (In Russian)
18. Nagnibeda E. A., Papina K. V. Non-equilibrium vibrational and chemical kinetics in air flows in nozzles. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy* **5** (63), iss. 2, 287–299 (2018). <https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2018.209> (In Russian)
19. Kornienko O. V., Kustova E. V. Influence of variable molecular diameter on the viscosity coefficient in the state-to-state approach. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy* **3** (61), iss. 3, 457–467 (2016). <https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2016.314> (In Russian)
20. Rudyak V. Ya. *Statistical Theory of Dissipative Processes in Gases and Liquids*. Novosibirsk, Nauka Publ. (1987). (In Russian)
21. Bird G. A. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford, Clarendon Press (1994).
22. Ivanov M. S., Rogazinsky S. V. *Direct Statistical Model Method Dynamics in the Dynamics of a Rarefied Gas*. Novosibirsk, Computing Center SB RAS Publ. (1988). (In Russian)
23. Ivanov M. S., Rogazinsky S. V., Rudyak V. Ya. Direct Statistical Simulation Method and Master Kinetic Equation. *Progr. Astro. Aero.* **117**, 171–181 (1989).
24. Roohi E., Stefanov S. Collision Partner Selection Schemes in DSMC: From Micro/Nano Flows to Hypersonic Flows. *Physics Reports* **656** (1), 1–38 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2016.08.002>

Received: March 30, 2021

Revised: June 23, 2021

Accepted: September 2, 2021

Authors' information:

Valery Ya. Rudyak — [valery.rudyak@mail.ru](mailto:valery.rudyak@mail.ru)

Evgeny V. Lezhnev — [lionlev@yandex.ru](mailto:lionlev@yandex.ru)

Daniil N. Lubimov — [danillch@mail.ru](mailto:danillch@mail.ru)