

01;03

Инженерно-физическая модель газовых потоков при среднем вакууме

© Ю.М. Печатников

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
195297 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: yiriy@mail.ru

(Поступило в Редакцию 24 декабря 2002 г.)

Развитие методов моделирования газовых потоков в вакуумных элементах при переходном течении от молекулярного к вязкостному сдерживают существующие представления о физике среднего вакуума. Предлагается инженерно-физическая модель и вероятностный метод моделирования газовых потоков в вакуумных элементах. На базе модели разработан метод моделирования и вычислены значения газовых потоков в молекулярно-вязкостном режиме. Полученные результаты объясняют парадоксы, имеющиеся при молекулярно-вязкостном режиме. Достоверность модели подтверждена экспериментально.

В соответствии со статистическими методами Монте-Карло газовый поток (Q), проходящий через вакуумный элемент, рассчитывается

$$Q = Q_0 P_e, \quad (1)$$

где Q_0 — газовый поток, падающий на входное отверстие; P_e — вероятность прохождения элемента молекулами газа; $P_e = N_2/N$, N — число молекул, движение которых прослеживаем в вакуумном элементе с момента входа в элемент и до момента выхода из него через входные N_1 или выходные отверстия N_2 .

Значение N_2 определяется при вычислительных экспериментах, в которых прослеживается движение молекул с момента входа в элемент и до момента выхода из него. Основная трудность моделирования движения молекул при молекулярно-вязкостном течении разреженного газа методами, непосредственно использующими метод Монте-Карло без обращения на любой стадии к решению кинетических уравнений, является отсутствие общепринятой модели газовых потоков в вакуумных элементах при среднем вакууме [1,2]. Несмотря на это, в настоящее время достаточно хорошо разработаны на концептуальном уровне следующие методы [3,4]: 1) метод моделирования вероятностных направлений при $0.01 < Kn < 100$, где Kn — число Кнудсена [5]; 2) метод прямого моделирования при $0.1 < Kn < 100$ [6].

Результаты расчета используются в конкретных задачах, например [7–10], однако вычислительные эксперименты в вакуумной технике вместо дорогостоящих натуральных измерений применяются ограниченно [11]. Это может быть объяснено тем, что первый метод недостаточно известен и подробно описан [12–14], а второй разработан на концептуальном уровне только для решения специальных задач аэрокосмической техники [6]. Кроме этого, инженерно-физическая модель в [6] имеет существенные ограничения — рассматриваются только парные соударения. При реализации модели возникает неопределенность, связанная с тем, что одновременно моделируется конечное число молекул (N) и разреженный газ не в полной мере подчиняется статистике

Больцмана. В инженерной практике существуют трудности задания физических констант при соударениях молекул для конкретных условий. Отметим, что метод Берда [6] требует значительных затрат вычислительных ресурсов [15].

В отличие от модели Г. Берда модель, которая лежит в основе метода моделирования вероятностных направлений траекторий движения молекул, разработана на основе целостного понимания физических процессов при стационарном течении разреженного газа в вакуумных системах: 1) молекулярно-вязкостное течение подчиняется статистике Больцмана, скорости и длины свободного пути молекул распределяются в соответствии со статистикой Максвелла; 2) траекторию движения отдельной молекулы описываем кусочно-линейной функцией, представляющей собой ломаную линию с отрезками, равными длине свободного пути молекулы; 3) граничные условия распределения скоростей и направлений движения молекул после соударения со стенкой вакуумного элемента из нержавеющей стали диффузные в соответствии с законом косинуса во всем диапазоне молекулярно-вязкостного течения; 4) в соответствии с динамической теорией кинетических уравнений межмолекулярные взаимодействия „внутри“ газового потока определяются коллективным эффектом ансамбля молекул; 5) поскольку число молекул в объеме вакуумного элемента очень велико, то реальным и единственно значимым представляется только вероятностный учет коллективного эффекта взаимодействия молекул „внутри“ газового потока.

Распределение направлений движения молекул после межмолекулярных соударений „внутри“ газового потока представляем как результат коллективного взаимодействия ансамбля молекул на базе следующих представлений о физике среднего вакуума.

1) Как показано в [16], подобие „внутри“ стационарного потока разреженного газа определенного рода в вакуумных системах в пренебрежении процессами теплообмена и рассмотрении только сил межмолекулярного взаимодействия обеспечивается при равенстве числа подобия Кнудсена (Kn).

2) В соответствии с динамической теорией кинетических уравнений поток газа (Q) представляется совокупностью N статистически независимых одинаковых молекул, характеризующихся эффективными диаметрами и массами.

3) Принимаем, что совокупность молекул в пренебрежении квантовыми эффектами представляется сложной механической системой, состоящей из молекул, каждая из которых является сложной механической системой, состоящей из атомов.

4) Рассматриваем стационарное течение, что позволяет, не принимая во внимание фактор времени [5], последовательно проследить траектории движения N отдельных статистически независимых молекул в объеме вакуумного элемента с момента входа в элемент и до момента выхода из него через входные N_1 или выходные отверстия N_2 .

5) Принимаем, что процесс течения разреженного газа в молекулярно-вязкостном режиме по всему полю течения моделирует процесс преобразования хаотичного движения молекул в соответствии со статистикой Больцмана, при молекулярном течении — в ламинарный поток в соответствии с моделью механики сплошной среды при вязкостном течении.

6) Поскольку при молекулярном режиме наблюдается хаотичное движение молекул, а при вязкостном — ламинарное течение, то существует сила (Φ), которая преобразует характер движения молекул в потоке газа и придает направленность движению каждой отдельной молекулы по потоку течения разреженного газа.

7) В соответствии с динамической теорией кинетических уравнений принимаем, что сила (Φ) определяется коллективным эффектом межмолекулярных взаимодействий ансамбля молекул и ее величина зависит от концентрации молекул в газовом потоке $\Phi = \Phi(Kn)$.

8) В соответствии с динамической теорией кинетических уравнений молекулы статистически независимы на расстояниях, больших эффективного радиуса взаимодействия, и, следовательно, коллективный эффект межмолекулярных взаимодействий ансамбля молекул сказывается только в момент соударения, релаксации и перераспределения энергии по степеням свободы.

9) При межмолекулярном соударении первоначально развивается процесс перераспределения энергии по степеням свободы и группового воздействия ансамбля молекул ($\Phi(Kn)$), а далее начинается процесс, при котором молекулы отлетают друг от друга и продолжают свободное движение в вакуумном элементе по траектории, которая в локальной сферической системе координат, имеющей начало в точке соударения, получает вид

$$\frac{x - x_1}{\sin \gamma \cos \varphi} = \frac{y - y_1}{\sin \varphi \sin \gamma} = \frac{z - z_1}{\cos \gamma}, \quad (2)$$

где (x_1, y_1, z_1) и (x, y, z) — координаты места нахождения молекулы и места ее прилета; длина отрезка между точками с координатами (x_1, y_1, z_1) и (x, y, z) — длина свободного пути молекулы; γ — угол, который

образуется с осью системы координат, направленной по потоку, $\gamma \in [0, \pi]$; φ — угол, лежащий в плоскости перпендикулярной направлению потока, $\varphi \in [0, 2\pi]$.

Распределение угла φ принимаем равномерным случайным образом:

$$\varphi = 2\pi R_1, \quad (3)$$

где R_1 — случайное число, равномерно распределенное в диапазоне чисел от 0 до 1.

Распределение угла γ принимаем исходя из следующих рассуждений. Поскольку процесс преобразования хаотичного движения молекул в ламинарный поток рассматриваем при учете влияния межмолекулярного взаимодействия группы молекул ($\Phi(Kn)$) на траекторию движения каждой отдельной молекулы, то связываем вероятностную функцию распределения угла γ в зависимости от $\Phi(Kn)$, $\gamma = \gamma(\Phi(Kn))$.

Влияние сил межмолекулярного взаимодействия группы молекул (Φ) на движение каждой отдельной молекулы после межмолекулярного взаимодействия, обуславливаем углом $\gamma = \gamma(\Phi(Kn))$ [5]. Этот угол количественно рассчитываем на вероятностном уровне применительно к совокупности большого числа молекул путем выявления закона вероятностного распределения направляющего траекторию движения молекулы угла γ после межмолекулярного взаимодействия в зависимости от концентрации молекул в микрообъеме вакуумного элемента, характеризующейся числом Кнудсена.

Зависимость $\gamma = \gamma(\Phi(Kn))$, характеризующую коллективный эффект взаимодействия группы молекул в процессе преобразования хаотичного движения молекул в ламинарный поток, выявляем на базе постулируемых законов межмолекулярного взаимодействия и релаксации молекул при соударении. Отметим, что поскольку в инженерной практике существуют неопределенность при задании физических констант при взаимодействиях молекул, то зависимость $\gamma = \gamma(\Phi(Kn))$ уточняем экспериментально при подборе соответствия вычисленных и натуральных значений проводимости длинного круглого трубопровода. По результатам эксперимента зависимость $\gamma = \gamma(\Phi(Kn))$ для воздуха может быть представлена в виде

$$\gamma = \pi R_2(1 - P_f(Kn)), \quad (4)$$

где R_2 — случайное число, равномерно распределенное в диапазоне чисел от 0 до 1; $P_f(Kn)$ — вероятность распределения направляющего траекторию движения молекулы угла γ после межмолекулярного взаимодействия от числа $\delta = 1/Kn$ (рис. 1) [5].

Зависимость $P_f(\gamma) = P_f(\gamma(Kn))$ может быть аппроксимирована

$$P_f(Kn) = 0.021\delta^{0.84}, \quad (5)$$

где $\delta = 1/Kn$.

Отметим, наиболее интересные с точки зрения физики течения разреженного газа результаты экспериментов. Первые межмолекулярные соударения наблюдаются при

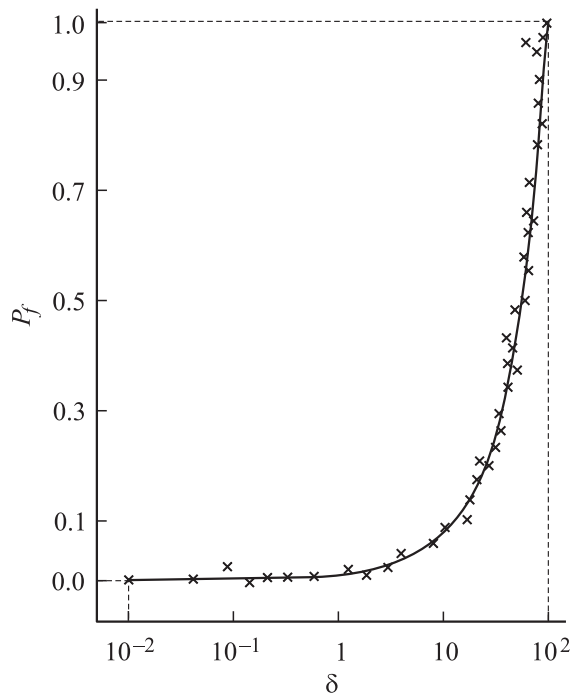


Рис. 1. Распределение направляющего траекторию угла γ после межмолекулярного взаимодействия внутри газового потока.

$\delta \cong 0.01$, где $\delta = 1/\text{Kn}$ (рис. 1). Направление траектории движения молекулы после межмолекулярного столкновения остается равновероятно в полном телесном угле 4π стерadians ($P_f = 0$) при значениях $\delta < 0.5$ (рис. 1). Отметим, что это свидетельствует о том, что коллективный эффект взаимодействия ансамбля молекул (Φ) не оказывает влияния и соударения молекул можно считать парными. По существу эта область является областью применимости модели Г. Берда. При $\delta > 0.5$ на направление движения молекулы дополнительно оказывает влияние силовое поле межмолекулярного взаимодействия группы окружающих молекул, однако при значениях $0.5 < \delta < 10$ данное влияние невелико (P_f изменяется от 0 до 0.1) и модель Г. Берда может быть применена. При более низких числах Кнудсена большинство соударений не являются только парными и коллективный эффект взаимодействия молекул должен быть принят во внимание. При $\delta \cong 100$ направление движения молекулы ориентировано по потоку течения разреженного газа.

В соответствии с принятой моделью течения разреженного газа разработан метод, который условно назван „методом моделирования вероятностных направлений“ [5].

1) Конфигурацию элементов вакуумного агрегата в математической форме представляем совокупностью связанных отдельных поверхностей в трехмерном пространстве, каждая из которых описывается одним аналитическим уравнением и системой неравенств.

2) Координаты молекулы во входном сечении элемента определяем случайным образом равновероятно распределенными по входному сечению.

3) Траекторию движения отдельной молекулы между соударениями описываем в локальной сферической системе координат, имеющей начало в точке соударения и оси, меняющие свое направление в зависимости от места соударения молекулы: „внутри“ или „на границе“ потока, а также от направления „внутреннего“ потока.

4) При соударении молекул разреженного газа „на границе“ газового потока с поверхностью вакуумного элемента траекторию движения определяем по (2), при этом локальная сферическая система координат имеет начало в точке соударения; γ — угол, который образуется с осью системы координат, направленной перпендикулярно касательной плоскости к поверхности вакуумного элемента в точке соударения, $\gamma \in [0, \pi]$; φ — угол, лежащий в касательной плоскости к поверхности вакуумного элемента в точке соударения, $\varphi \in [0, 2\pi]$, $\varphi = 2\pi R_1$, $\gamma = \arcsin \sqrt{R_2}$.

5) При соударении молекул разреженного газа „внутри“ газового потока траекторию движения молекулы после межмолекулярного соударения определяем по (2) в локальной сферической системе координат, имеющей начало в точке соударения, а направляющие углы φ , γ рассчитываем по (3) и (4) соответственно.

6) Число независимых экспериментов N , которое необходимо провести для обеспечения достаточной для инженерных расчетов точности, определяем исходя из нормального закона распределения случайной величины при оценке математического ожидания.

В соответствии с методом моделируем блуждания отдельной молекулы в вакуумном элементе на базе вероятностных представлений о распределении направлений их траекторий и наблюдаем, какое число молекул вышло через выходное отверстие (N_2) в N отдельных экспериментах. Далее в соответствии с (1) определяем газовый поток. Результаты экспериментов представлены в безразмерных координатах в виде зависимости $J_{MB} = J_{MB}(L/D; \delta)$, где J_{MB} — отношение вычисленного значения проводимости вакуумного трубопровода к проводимости этого же элемента в молекулярном режиме (рис. 2, 3). Отметим, что экспериментальная проверка и оценка затрачиваемых ресурсов при вычислении P_e дает возможность утверждать, что при ординарной вычислительной технологии данный метод без затруднений может быть применен в инженерной практике.

Анализируя данные, представленные на рис. 2, 3, можно сделать вывод о том, что минимум значения проводимости при уменьшении отношения длины к диаметру (L/D) сглаживается и смещается в направлении увеличения чисел Кнудсена. При значениях $L/D < 4$ зависимость $J_{MB}(L/D; \delta)$ не имеет минимума (рис. 2, 3). Наличие минимального значения проводимости (парадокса Кнудсена) для длинных трубопроводов (при значениях $L/D > 8$) может быть объяснено тем, что значительно увеличивается число межмолекулярных парных со-

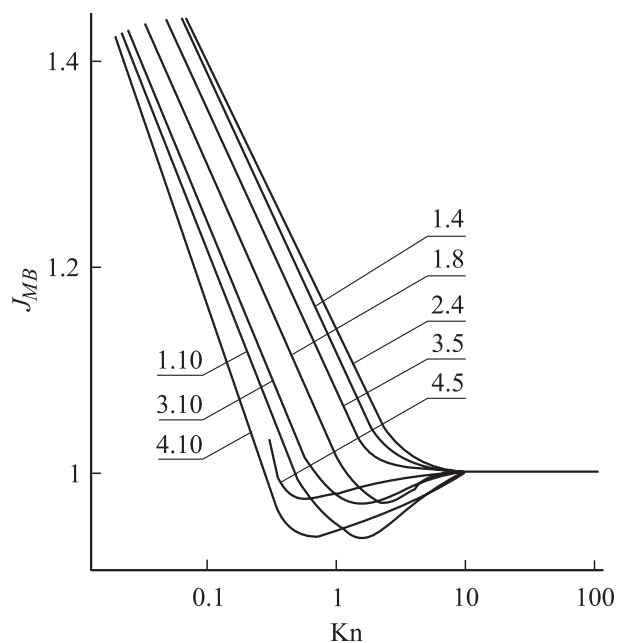


Рис. 2. Данные, вычисленные методом моделирования вероятностных направлений [5] (цифры у кривых): 1.4, 1.8, 1.10 при $L/D = 4, 8, 10$ соответственно. Данные, вычисленные при решении линеаризованного уравнения Больцмана: 3.5, 3.10 при $L/D = 5, 10$. Данные, вычисленные методом прямого моделирования: 3.5, 3.10 при $L/D = 5, 10$ [9]. Натурные эксперименты: 2.4 при $L/D = 4$ [3].

ударений при уменьшении чисел Кнудсена от 100 до 1 не компенсируется величиной коллективного эффекта сил межмолекулярного взаимодействия на начальной стадии формирования направленной скорости течения, которая в данном диапазоне чисел Кнудсена близка нулю. Такая ситуация приводит к дополнительным затруднениям при перемещении молекул вдоль трубопровода и, следовательно, уменьшению значений вероятности прохождения через элемент, которое не компенсируется увеличением проводимости входного сечения и ведет к уменьшению значений проводимости трубопроводов, имеющих геометрические размеры $L/D > 8$, при уменьшении чисел Кнудсена от 100 до 1.

Обратим внимание и на такой факт, что при приближении к границе молекулярно-вязкостного и вязкостного течения (рис. 2) от молекулярного режима влияние длины (L) на проводимость каналов ослабевает. Объяснение этого факта в соответствии с предлагаемой моделью видится в том, что при $Kn = 0.01$ $P_f = 1$ (рис. 1), все молекулы направлены по потоку, $\gamma = 0$ в соответствии с (5), поэтому $N_2 \Rightarrow N$, откуда $P_e \Rightarrow 1$ в соответствии с (2) и, следовательно, $Q \Rightarrow Q_0$ в соответствии с (1). Объяснение этого факта также может быть дано на базе теории пограничного слоя модели сплошной среды. Поскольку скорости течения разреженного газа в реальных вакуумных системах невелики, то вязкость разреженного газа и значения чисел Рейнольдса на границе

молекулярно-вязкостного и вязкостного режимов в условиях, когда длина свободного пути молекулы сравнима с диаметром трубопровода, не оказывают влияния на проводимость элемента. При этих условиях на границе молекулярно-вязкостного и вязкостного режимов вакуумные трубопроводы с соотношением L/D от 0.01 до 40 одинакового диаметра можно рассчитывать как длинный без учета дополнительной поправки, что подтверждают результаты исследований в вязкостном режиме [3].

Таким образом, предлагаемая модель согласуется с моделями молекулярного и вязкостного течения, объясняет парадокс Кнудсена и факт отсутствия влияния длины на проводимость вакуумных элементов в условиях границы „молекулярно-вязкостный — вязкостный“ режим. Отметим, что результаты данной работы дают основание более строго рассмотреть существующие представления о влиянии твердой стенки в условиях, когда длина свободного пути молекулы сравнима с диаметром трубопровода

В заключение отметим, что достоверность предлагаемой инженерно-физической модели течения разреженного газа и метода вероятностных направлений базируется на обоснованности научных положений, подтверждается при сравнении значений, вычисленных методом вероятностных направлений, со значениями, вычисленными методом прямого моделирования, и при решении линеаризованного уравнения Больцмана (рис. 2), подтверждается совпадением с данными натурных измерений, как полученных автором, так и другими исследователями (рис. 3).

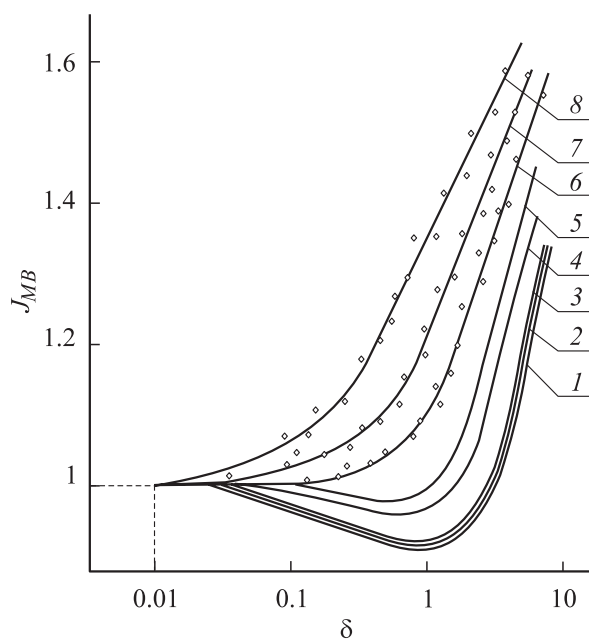


Рис. 3. Данные, вычисленные методом моделирования вероятностных направлений [5]: 1 — длинный прямоугольный трубопровод; 2 — длинный угловой круглый трубопровод; 3–8 — трубопроводы круглого сечения при $L/D = 40, 10, 8, 4, 2, 0.1$ соответственно. ■ — натурные эксперименты [3].

Для инженерных вакуумных расчетов результаты экспериментов для воздуха при комнатной температуре могут быть обобщены в виде формулы

$$J_{MB} = \frac{1 + 202G + 2653G^2}{1 + 236G},$$

где

$$G = \frac{4.7 \cdot 10^{-3}}{\text{Kn}} \left(1 + 2.1 \text{Kn}^{0.25} \frac{D}{L} \right).$$

Внедрение метода вероятностных направлений в инженерную практику позволит значительно сократить затраты на дорогостоящие эксперименты.

Список литературы

- [1] Кузьмин В.В. Физика вакуума. СПб.: Изд-во СПбГТУ, 2000. 36 с.
- [2] Livesey R.G. Foundations of Vacuum Science and Technology / Ed. by J.M. Lafferty. New York: Wiley, 1998. 213 p.
- [3] Печатников Ю.М. // Вакуумная техника и технология. 1996. Т. 6. № 2. С. 5–14.
- [4] Гусев В.Н., Егоров И.В., Ерофеев А.И., Провоторов В.П. // Механика жидкости и газа. 1999. № 2. С. 128–137.
- [5] Печатников Ю.М. // Инженерно-физический журнал. 1992. № 6. С. 673–676.
- [6] Мосс Дж.Н., Берд Г.А. // Аэрокосмическая техника. 1989. № 3. С. 11–19.
- [7] Дьяченко В.А., Краснослободцев В.Я., Скворцов В.Ю. // Вакуумная техника и технология. 1996. № 2. С. 34–37.
- [8] Scherer-Abreu Godela, Abreu Raul A. // Vacuum. 1995. N 8–10. P. 863–866.
- [9] Ерофеев А.И., Коган М.Н., Фрилендер О.Г. // Механика жидкости и газа. 1999. № 5. С. 193–204.
- [10] Печатников Ю.М., Щенев В.В. // Вакуумная наука и техника. Докл. науч.-техн. конф. М.: МИЭМ, 2002. С. 48–51.
- [11] Печатников Ю.М. // Научно-технические ведомости СПбГТУ, 2002. № 1. С. 80–87.
- [12] Печатников Ю.М. // Вакуумные технологии и оборудование. Докл. межд. симпозиума. Харьков, 2001.
- [13] Печатников Ю.М. // Вакуумная техника и технология-2002. Тез. докл. к научн.-техн. семинару. СПб.: УНИВАК, 2002. С. 18–21.
- [14] Печатников Ю.М. // Вакуумная наука и техника. Докл. науч. техн. конф. М.: МИЭМ, 2002. С. 51–54.
- [15] Захаров В.В., Лукьянов Г.А., Ханларов Г.О. Параллельные алгоритмы прямого моделирования Монте-Карло в молекулярной газовой динамике. СПб.: Изд-во Института высокопроизводительных вычислений и баз данных, 1999. 21 с.
- [16] Печатников Ю.М. Расчет сложных элементов вакуумных систем в молекулярно-вязкостном режиме течения газа. СПб.: ООО Типография „Светлана“, 2002. 84 с.