

## Современные модели и методы моделирования переходного течения разреженных газов

© Ю.М. Печатников

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

(Поступило в Редакцию 11 марта 2003 г. В окончательной редакции 10 июня 2003 г.)

Рассматриваются вопросы переходного от молекулярного до вязкостного изотермического течения разреженных газов в каналах. Анализ и верификация существующих инженерно-физических моделей переходного течения разреженного газа и методов моделирования газовых потоков осуществляются на базе кинетической теории при одновременном рассмотрении характеристик газовых потоков на микро- и макроуровне.

При описании физического процесса откачки вакуумных систем при среднем вакууме, который может рассматриваться как подраздел динамики разреженных газов при изотермическом течении в каналах, возникают значительные трудности. Основная проблема в описании физического процесса переходного течения разреженного газа в вакуумных каналах состоит в необходимости согласовать представления о хаотическом блуждании молекул в молекулярном режиме и ламинарном течении в вязкостном режиме.

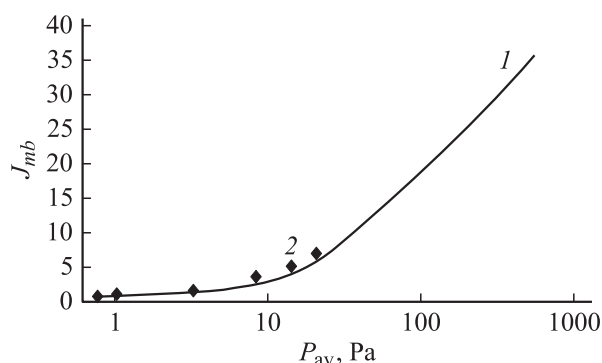
Knudsen М.Н.С. и другие ученые сформулировали проблему качественного и количественного анализа переходного течения разреженного газа для всего диапазона молекулярно-вязкостного режима еще в 1910 г.

Попытки разработать модель переходного течения разреженного газа наиболее часто предпринимались на базе экспериментальных исследований отверстий, длинных прямоугольных щелей или круглых трубопроводов. Данные варианты брались в рассмотрение по следующим причинам: при исследовании отверстий влиянием взаимодействия с металлической поверхностью трубопровода можно было пренебречь; при исследовании длинных каналов могли быть заданы или были известны граничные условия. Численные решения уравнения Больцмана со столкновительным членом, полученные в диапазоне чисел Кнудсена ( $Kn$ ) меньше 100, в этих случаях совпадали с точностью 5% с результатами измерений. Значения проводимости отверстий и коротких трубопроводов монотонно возрастают с увеличением давления  $P_{av}$  во всем диапазоне переходного течения [1–6] от молекулярного до вязкостного режима (рис. 1, где  $J_{mb}$  — отношение значений проводимости в молекулярно-вязкостном к молекулярному режимам). В условиях границы „молекулярно-вязкостный режим — вязкостный режим“ при  $Kn \cong 0.01$  проводимости отверстия, короткого и длинного трубопровода одинаковых диаметров стремятся к одинаковым значениям (рис. 2, 3, где  $\delta = 1/Kn$ ) [6]. Значения проводимости длинных трубопроводов при уменьшении чисел Кнудсена от 100 до 1 уменьшались, а при дальнейшем уменьшении

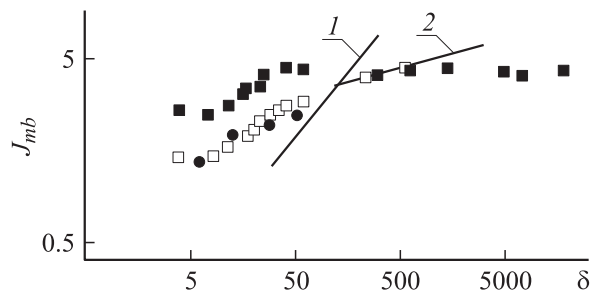
чисел Кнудсена от 1 до 0.01 монотонно возрастали (широкоизвестное явление — парадокс Кнудсена) (рис. 3) [6].

Вопрос о существовании минимального значения проводимости для длинного канала и отсутствии такового для отверстия стал ключевым вопросом („камнем преткновения“) при разработке физической модели течения в произвольных конфигурациях вакуумных элементов. Однако при изменении граничных условий, даже в простейших случаях при решении интеграла столкновений интегрально-кинетическими методами, возникали непреодолимые трудности [4–7].

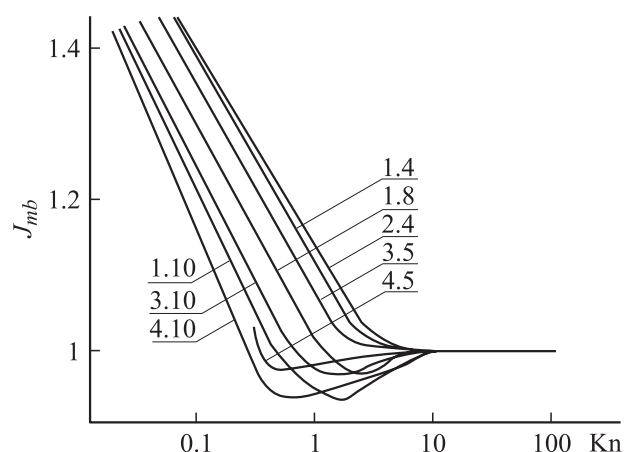
Наибольшее развитие в динамике разреженных газов получили методы моделирования непосредственно физического процесса переноса количества движения детерминированных молекул. В основе представлений о характере движения молекул в разреженных газах лежат случайные процессы, подчиняющиеся законам статистической физики. Для генерирования случайных величин и статистической оценки погрешности вычисления используется метод Монте-Карло.



**Рис. 1.** Зависимость безразмерной проводимости ( $J_{mb}$ ) круглого ступенчатого трубопровода-переходника с входным сечением  $D = 400$  мм и выходным сечением  $D = 25$  мм при длине  $L = 140$  мм в молекулярно-вязкостном режиме от среднего давления ( $P_{av}$ ): 1 — экспериментальные данные, 2 — вычисления методом вероятностных направлений.



**Рис. 2.** Зависимость безразмерной проводимости ( $J_{mb}$ ) трубопроводов и отверстий в области течения со скольжением от степени разреженности ( $\delta$ ). Данные для круглого трубопровода с входным сечением  $D = 25$  mm и длиной  $L = 55$  mm: ● — вычисленные методом моделирования вероятностных направлений, □ — натурные эксперименты, 1 — натурные эксперименты для длинного трубопровода с входным сечением  $D = 25$  mm [2], 2 — теория пограничного слоя модели механики сплошной среды [6], ■ — натурные эксперименты для круглого отверстия  $D = 25$  mm.



**Рис. 3.** Зависимость безразмерной проводимости ( $J_{mb}$ ) вакуумных круглых трубопроводов в молекулярно-вязкостном режиме от степени разреженности ( $Kn$ ). Данные, вычисленные методом моделирования вероятностных направлений: 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 [15]. Расчет: 4.5, 4.10 при  $L/D$ : 5, 10 [15], эксперимент: 2.4 при  $L/D$  3.7 [2,6].

Основной трудностью при моделировании в молекулярно-вязкостном режиме является приближение модели к действительно существующему физическому процессу столкновений молекул как в разреженных потоках, так и в достаточно сплошных, когда уже проявляются эффекты поведения газов мольного масштаба. Дополнительные затруднения возникают из-за приближенных представлений о физике стреднего вакуума, механизме взаимодействия и поведения детерминированных молекул на микроуровне. При моделировании таких случайных величин, как скорость, частота соударений, направление движения молекул, возникает проблема

выявления закономерности или вероятности проявления случайных величин физического процесса, особенно при групповых столкновениях молекул.

Для моделирования течения в околмолекулярной области, если рассматривать не только столкновения с внутренней поверхностью, но и первые межмолекулярные соударения, можно применить метод статистических испытаний (пробных частиц) [4–6]. Однако при значениях чисел Кнудсена, меньших 10, нельзя ограничиваться первыми столкновениями и анализ существенно усложняется [7].

В работе [8] на концептуальном уровне предложена модификация метода статистических испытаний (пробных частиц), в которой прослеживается траектория движения одной частицы через поле течения с учетом парных упругих соударений с другими частицами, распределенными по полю течения. Основной недостаток метода заключается в неопределенности распределения полевых молекул во всем поле течения. Например, в [9] при реализации данного алгоритма вычисляется проводимость коротких трубопроводов при  $Kn > 0.3$  при течении гелия и аргона по стеклянным капиллярам в предположении зеркально-диффузного отражения молекул от твердых стенок. Приведены значения газовых потоков для стеклянных коротких капилляров и отмечено, что увеличение числа межмолекулярных столкновений приводит к менее интенсивному увеличению проводимости при увеличении доли молекул, зеркально отраженных от стенок капилляра. Отметим, что данное замечание согласуется с выводами из [10] о необходимости более строго рассмотреть теорию скольжения [11]. В [9,12] получено удовлетворительное качественное соответствие вычислительных и натурных экспериментов для предельных случаев (отверстие и длинный трубопровод). Отличие может объясняться неточностью используемого метода и вычислительной схемы, что хорошо иллюстрирует решение задачи о самодиффузии газа в коротком канале [12,13].

Широко применяется метод прямого моделирования для расчетов при значениях чисел Кнудсена от 100 до 0.1 [14–16]. Метод верифицирован для широкого класса задач [17,18]. Анализируя границы применения метода Г. Берда, отметим, что область, в которой принципиально возможно использовать данный метод, ограничивается диапазоном чисел Кнудсена ( $Kn$ ), при котором наблюдаются только парные соударения. В [10] показано, что при значениях  $0.01 < \delta < 0.5$ , где  $\delta = 1/Kn$ , межмолекулярные соударения, как правило, парные. По существу эта область является областью применимости модели Г. Берда. При  $\delta > 0.5$  не все соударения между молекулами являются только парными, однако при значениях  $0.5 < \delta < 10$  число групповых соударений невелико (менее 10% от общего числа межмолекулярных соударений) и модель Г. Берда может быть применена с допустимой для инженерных расчетов степенью точности. При более низких числах Кнудсена большинство соударений не являются только парными и

коллективный эффект взаимодействия молекул должен быть принят во внимание. Отметим, что в настоящее время обсуждение и развитие прямого статистического моделирования как вычислительного метода практически остановились, несмотря на то, что вопросы о степени его приближения к решению уравнения Больцмана, а также о границах его использования при решении задач динамики разреженных газов остались неразрешенными.

В [13] на концептуальном уровне предложен вероятностный подход (метод вероятностных направлений) к моделированию переходного течения разреженного газа. Принципиальным преимуществом инженерно-физической модели переходного течения, положенной в основу данного метода, является то, что предлагаемая модель согласуется с представлениями о хаотическом блуждании молекул в молекулярном режиме и ламинарном течении в вязкостном режиме. Эта модель основана на положении: процесс стационарного течения разреженного газа в молекулярно-вязкостном режиме, как предполагается, состоит в том, что на хаотическое движение молекул вследствие групповых взаимодействий молекул дополнительно накладывается составляющая движения в направлении, определяемом градиентом концентрации, в результате образуется направленный поток [19]. Газовый поток в данном методе рассматривается как совокупность движения статистически независимых одинаковых детерминированных материальных молекул (учитываются масса и эффективный диаметр молекул). Число молекул, участвующих в процессе переноса количества движения между входным и выходным сечениями канала, возрастает с увеличением отношения диаметра трубопровода ( $D$ ) к средней длине свободного пути молекулы ( $\lambda$ ). Интегральные характеристики потока газа вычисляются при последовательном отслеживании блуждания отдельных пробных молекул в канале. Из общего количества молекул в газовом потоке рассматривается случайная выборка, которая обеспечивает требуемую точность вычислений при статистической обработке по методу Монте-Карло. Траектория движения отдельной молекулы описывается кусочно-линейной функцией, представляющей собой ломаную линию с отрезками равными длине свободного пути молекулы ( $\lambda_0$ ),

$$\lambda_0 = -\lambda \ln(R),$$

где  $\lambda$  — средняя длина свободного пути молекулы;  $R$  — случайное число, генерируемое по методу Монте-Карло в диапазоне  $R \in [0, 1]$ .

Молекула, столкнувшаяся с поверхностью канала, поглощается стенкой канала, а затем покидает ее в соответствии с диффузным распределением. Если молекула пролетела длину  $\lambda_0$  и не столкнулась с поверхностью канала, то моделируется процесс столкновения с другой молекулой. В результате столкновения молекул друг с другом изменяется направление их движения в соответствии с моделью межмолекулярных взаимодействий.

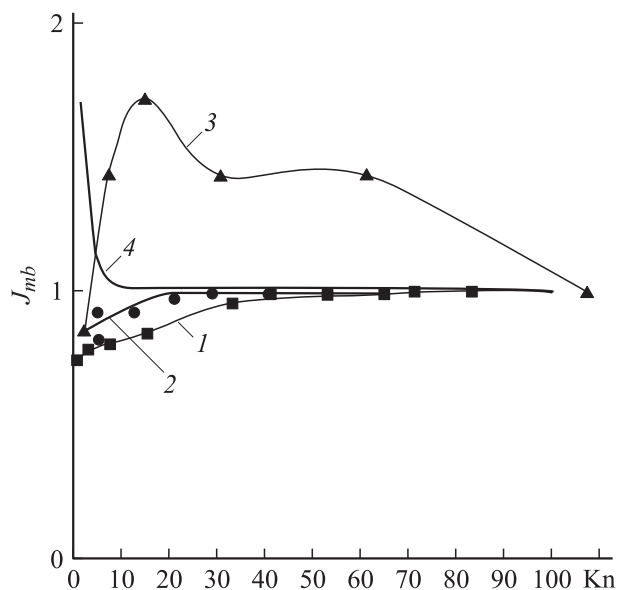
Модель межмолекулярного взаимодействия статистического ансамбля молекул при столкновениях строится на базе теории вероятности применительно к совокупности большого числа молекул [20]. При ее построении используются следующие допущения: малость значений потенциала парного взаимодействия делает возможным описать результат взаимодействия ансамбля молекул, применяя принцип суперпозиции как линейную комбинацию парных взаимодействий, а длина корреляций парных межмолекулярных сил в „столкновительной“ области течения разреженных газов с учетом влияния коллективных движений группы молекул способна достигать больших значений, превышающих длину среднего свободного пути молекул.

В результате вероятностного подхода к моделированию межмолекулярных взаимодействий принимаем, что направление движения каждой молекулы после соударения выбирается случайным образом: в области  $0.01 < \delta < 0.5$ , в которой наблюдаются, как правило, парные соударения молекул, направление движения отдельной статистической молекулы принимаем равновероятным в полном телесном угле  $4\pi$  стерадиан [13]; в области  $0.5 < \delta < 100$  выявлена вероятностная закономерность, которая определяет направление движения отдельной молекулы в полном телесном угле  $4\pi$  стерадиан после соударения [10]. Эта закономерность учитывает групповые соударения молекул [20], регулирует процесс преобразования хаотического движения молекул в ламинарный поток и определяет степень направленности движения молекулы по потоку после межмолекулярного столкновения в зависимости от концентрации молекул в микрообъеме вакуумного элемента при уменьшении чисел Кнудсена ( $Kn$ ) [21–23].

Определив направление движения молекулы после соударения, моделируем процесс ее свободного движения в выбранном направлении. Моделирование блужданий молекулы повторяется до тех пор, пока молекула не вылетит через входное или выходное отверстие вакуумного элемента.

Результаты вычислений течения разреженного газа на макроуровне подтверждаются натурными измерениями при исследовании круглых и прямоугольных длинных и коротких трубопроводов, прямоугольных щелей, угловых и ступенчатых переходников (рис. 1–4) [19–22]. Проведенные эксперименты показали, что при значительном снижении требований к вычислительным ресурсам компьютера машинное время, затрачиваемое на имитационное моделирование при вероятностном подходе, экономится более чем в 100 раз по сравнению с методом прямого моделирования (Г. Берда) [24–27].

Результаты, полученные методом вероятностных направлений на макроуровне, проясняют природу физических явлений и процессов, наблюдающихся на макроуровне [24,25]. Отметим, что при увеличении  $\delta$  доля групповых взаимодействий возрастает, в том числе около стенки трубопровода, в общем числе межмолекуляр-



**Рис. 4.** Зависимость безразмерной проводимости ( $J_{mb}$ ) прямоугольного щелевого канала в молекулярно-вязкостном режиме от степени разреженности ( $Kn$ ): 1, 4 — натурные эксперименты [1] и [3] соответственно; 2 — метод вероятностных направлений; 3 — метод прямого моделирования [14,15].

ных соударений. В [10] показано, что при  $\delta \cong 0.5$  начинает проявляться тенденция формирования направленного движения (дрейфового движения) в молекулярно-вязкостном режиме.

При рассмотрении процесса движения молекул на микроуровне становится ясным вопрос о природе такого явления, как увеличение значений проводимости отверстий и коротких трубопроводов ( $L/D < 4$ , где  $L$  — длина трубопровода,  $D$  — диаметр трубопровода) во всем диапазоне переходного течения от молекулярного до вязкостного режима (рис. 3). На микроуровне наблюдается увеличение числа молекул, проходящих через вакуумный элемент по сравнению с молекулярным режимом: увеличивается число молекул, участвующих в процессе переноса; число молекул, проходящих через вакуумный элемент без соударений со стенкой или межмолекулярных столкновений, достаточно велико и значительно преобладает над числом молекул, испытывающих соударения. При уменьшении чисел Кнудсена от 1 до 0.01 значения проводимости продолжают возрастать, но более интенсивно. На микроуровне это объясняется тем, что течение все более преобразуется из хаотичного в ламинарное.

При рассмотрении процесса движения молекул на микроуровне становится ясным вопрос о природе такого широко известного явления, как парадокс Кнудсена: уменьшение значений проводимости для длинных трубопроводов при уменьшении чисел Кнудсена от 100 до 1 и рост их значений при уменьшении чисел Кнудсена от 1 до 0.01 (рис. 3). На микроуровне наблюдается значительное увеличение числа межмолекулярных парных

соударений, что приводит к дополнительным затруднениям при перемещении молекул вдоль трубопровода. Такая ситуация приводит к уменьшению числа молекул, которые проходят через элемент, несмотря на то, что увеличивается число молекул, участвующих в процессе переноса. При уменьшении чисел Кнудсена от 1 до 0.01 значения проводимости монотонно возрастают по двум причинам: увеличивается количество молекул, участвующих в процессе переноса; течение становится все более направленным [20–22].

При рассмотрении вышеописанных процессов движения молекул на микроуровне становится ясно, что из-за уменьшения числа межмолекулярных парных соударений по сравнению с длинным трубопроводом при уменьшении отношения длины к диаметру ( $L/D$ ) трубопроводов от 40 до 5 зависимость проводимости от числа Кнудсена постепенно сглаживается (рис. 3), значения минимума становятся все менее выраженными и смещаются в направлении увеличения чисел Кнудсена (рис. 3), а для трубопроводов, имеющих  $L/D < 4$ , зависимость становится гладкой, монотонной, экстремальные значения отсутствуют (рис. 3).

При рассмотрении процесса движения молекул на микроуровне становится ясным вопрос о природе явления, наблюдаемого в условиях границы молекулярно-вязкостный режим–вязкостный режим при  $Kn \cong 0.01$ : проводимости отверстия короткого и длинного трубопровода, имеющие одинаковый диаметр, стремятся к одинаковым значениям (рис. 2). На микроуровне наблюдаем, что большинство молекул, падающих на входное сечение вакуумного элемента, проходят его из-за того, что течение становится практически ламинарным.

Метод вероятностных направлений продолжает уточняться и совершенствоваться [23–25].

Обобщая вышеприведенные исследования, можно сделать вывод о том, что проблема качественного и количественного анализа переходного течения разреженного газа является настолько сложной, что любое продвижение в ее решении является ценным. Данная проблема затрагивает физические основы теории со скольжением, теории диффузии газов, статистики Больцмана. Отметим, что в Испании в июле 2003 г. организуется Международная конференция по проблемам „Vacuum Gas Dynamic“. Одно из направлений ее работы называется: „Can we agree on a way to model transition gas flow?“.

Верификация моделей и методов в динамике разреженных газов, выполненная в [17,18], показала, что при вычислениях во всем диапазоне молекулярно-вязкостного режима наиболее широко применяется методика сращения решений уравнений модели механики сплошной среды с эмпирическими коэффициентами теории со скольжением [11] и прямого статистического моделирования [14]. Такой подход является формальным, так как не имеет физической интерпретации. Физические модели, положенные в основу этих методов, никак не согласуются.

Сопоставление методов прямого моделирования и вероятностных направлений выполняем при сравнении результатов экспериментов, представленных в виде зависимости безразмерной проводимости  $J_{mb}$  от числа Кнудсена ( $Kn$ ) (рис. 3). Такое представление объясняется требованиями теории подобия к верификации результатов и сравнению экспериментальных данных из различных литературных источников [17]. Отметим, что число подобия ( $Kn$ ) является определяющим критерием при молекулярно-вязкостном режиме в условиях стационарного изотермического течения разреженного газа определенного рода для геометрически подобных конструкций, имеющих лишь одну характерную длину, исходя из положений как кинетической теории [17], рассматривающей течение газа в виде детерминированных молекул, так и континуальной теории [9], рассматривающей интегральные характеристики потока разреженного газа. Отметим, что данный факт подтверждается также многочисленными натурными экспериментами. Физические показатели, характеризующие род газа, являются постоянными величинами. Их влияние необходимо учитывать при пересчете характеристик, полученных для одного газа для условий другого. Поэтому зависимость безразмерной проводимости  $J_{mb}$  для геометрически подобных элементов от характеристик потока разреженного газа в молекулярно-вязкостном режиме может быть представлена следующим образом:

$$J_{mb} = J_{mb}(A, Kn, \text{sort}),$$

где  $J_{mb}$  — отношение значений проводимости в молекулярно-вязкостном к молекулярному режимам,  $A$  — площадь входного сечения,  $Kn$  — число Кнудсена;  $\text{sort}$  — константы для определенного рода газа (эффективный диаметр молекулы и др.).

Например, для вакуумной трубопроводной арматуры

$$J_{mb} = J_{mb}(A, L/D, \delta, \text{sort}),$$

где  $L/D$  — отношение эффективной длины к эффективному диаметру вакуумного элемента,  $\delta = 1/Kn$ .

Совпадение на качественном уровне (рис. 2–4) экспериментальных данных, полученных при измерениях методами вероятностных направлений, прямого моделирования и при решении линеаризованного уравнения Больцмана, показало, что метод вероятностных направлений, так же как и метод прямого моделирования, обеспечивает получение достаточно надежных результатов. Отличие в частных решениях от натуральных измерений (рис. 3, кривая 4, 5; рис. 4, кривая 3) может объясняться степенью точности аппроксимации уравнения Больцмана данными методами вычислительных экспериментов, используемыми методиками реализации данных методов и особенностями вычислительных процедур в зависимости от типа процессора ЭВМ, погрешностью вычислительных и натуральных экспериментов.

## Заключение

Модель, лежащая в основе метода вероятностных направлений, представляется наиболее достоверной при описании природы физического процесса переходного течения разреженного газа [24,25], поскольку основана на базе фундаментальных положений кинетической теории динамики газов и согласуется с диффузионной теорией газов; согласуется на макро- и микроуровне с моделями молекулярного и вязкостного течения; учитывает не только парные, но и групповые соударения молекул, а также массу и эффективный диаметр молекул; объясняет парадокс Кнудсена и факт сближения значений проводимости вакуумных элементов с одинаковыми входными сечениями в условиях границы молекулярно-вязкостный режим–вязкостный режим.

## Список литературы

- [1] Porodnov B.T., Suetin P.E., Borisov S.F., Akinshin N.D. // J. Fluid Mechanics. 1974. Vol. 64. Pt 3. P. 417–437.
- [2] Santeler D.J. // J. Vac. Sci. Technol. 1994. Vol. A12 (4). P. 1744–1749.
- [3] Livesey R.G. // J. Vac. Sci. Technol. 2001. Vol. A19 (4). Jul/Aug. P. 1674–1678.
- [4] Кошмаров Ю.А., Рыжов Ю.А. Прикладная динамика разреженного газа. М.: Машиностроение. 1977. 184 с.
- [5] Черчиньяни К. Теория и приложения уравнения Больцмана. М.: Мир, 1976. 496 с.
- [6] Печатников Ю.М. // Вакуумная техника и технология. 1996. Т. 6. № 2. С. 5–14.
- [7] Печатников Ю.М. // Инженерная физика. 2003. № 3. С. 50–52.
- [8] Haviland J.K. // Methods in Computational Physics. 1965. Vol. 4. P. 109–209.
- [9] Породнов Б.Т., Нусинзон Л.М., Неудачин И.Г., Калинин В.В. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика и техника высокого вакуума. Харьков: ХФТИ, 1977. Вып. 2 (8). С. 82–83.
- [10] Печатников Ю.М. // Инженерно-физический журнал. 1992. № 6. С. 673–676.
- [11] Kennard E.H. Kinetic Theory of Gases with an Introduction to Statistical Mechanics. New York, 1938. 245 p.
- [12] Нусинзон Л.М., Породнов Б.Т., Суетин П.Е. // Механика жидкости и газа. 1977. № 1. С. 187–190.
- [13] Печатников Ю.М. // Электронная техника. Сер. 4. Электровacuумные и газоразрядные приборы. МЭП СССР, 1991. Вып. 4. С. 67–69.
- [14] Bird G.A. Molecular Gas Dynamics. Oxford: Clarendon Press, 1976. 238 p.
- [15] Godela Scherer-Abreu, Raul A Abreu. // Vaccum. 1995. N 8–10. P. 863–866.
- [16] Ерофеев А.И., Коган М.Н., Фрилендер О.Г. // Механика жидкости и газа. 1999. № 5. С. 193–204.
- [17] Гусев В.Н., Егоров И.В., Ерофеев А.И., Провоторов В.П. // Механика жидкости и газа. 1999. № 2. С. 128–137.
- [18] Ребров А.К. Динамика расширения газа в вакуум // Современное состояние вакуумной техники: Сб. докт. семинара. Харьков: ИПЦ „Контраст“, 2001. С. 6–15.

- [19] *Печатников Ю.М.* Расчет сложных элементов вакуумных систем в молекулярно-вязкостном режиме течения газа. СПб.: ООО „Типография–Светлана“, 2002. 40 с.
- [20] *Печатников Ю.М.* // Вакуумная наука и техника. Докл. науч.-техн. конф. М.: МИЭМ, 2002. С. 51–54.
- [21] *Печатников Ю.М.* // Инженерная физика. 2003. № 2. С. 32–36.
- [22] *Печатников Ю.М.* // ЖТФ. 2003. Т. 73. Вып. 8. С. 40–45.
- [23] *Печатников Ю.М.* // Докл. межд. науч.-техн. конф. Вакуумные технологии и оборудование. Харьков: ИПЦ Контраст, 2003. С. 64–67.
- [24] *Печатников Ю.М.* // Вакуумная техника и технология. Сб. докл. семинара. СПб.: УНИВАК, 2003. С. 32–37.
- [25] *Pechatnikov Yu.* // Vacuum Science and Technology. Berlin. EVC. 2003. 50 p.
- [26] *Печатников Ю.М.* // Вакуумная техника и технология. Сб. докл. семинара. СПб.: УНИВАК, 2003. С. 38–43.
- [27] *Pechatnikov Yu.* // Vacuum Technologies and Equipment. Kharkov, 2001. P. 128–129.