

Н. К. Никулин, О. А. Шемарова

**ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ  
КОНЦЕНТРАЦИИ ГАЗА ПО ДЛИНЕ КАНАЛА  
С ПОТОКОМ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ПАРА**

*Исследовано пространственно-неоднородные течение разреженного газа в канале с потоком металлического пара при молекулярно-вязкостном режиме течения. Предложена статистическая математическая модель для расчета параметров газа на основе метода частиц в ячейках, позволяющая учесть поглощение молекул газа металлическим паром.*

**E-mail: holga.al@gmail.com**

**Ключевые слова:** вакуум, математическая модель, металлический пар, метод частиц в ячейках, метод пробной частицы, статистические методы, молекулярно-вязкостный режим.

Исследования течения газа в молекулярно-вязкостном режиме ведутся уже длительное время, однако как единая теория, описывающая характерные для данного режима физические процессы, так и универсальный метод расчета параметров течения не разработаны. В связи с этим также отсутствует полноценная теория, описывающая взаимодействие разреженного газа с потоком более плотной среды (в данной работе рассматривается поток металлического пара), давление которой соответствует молекулярно-вязкостному режиму течения.

Необходимость разработки такой теории и достаточно точной математической модели (ММ) на ее основе, описывающей взаимодействие разреженного газа с потоком металлического пара, обусловлена многообразием технологических процессов, протекающих при наличии паров легкоплавких металлов; причем увеличение концентрации газообразных продуктов вследствие газовой выделения, сорбционных и различных сопутствующих процессов (например, образование продуктов деления) ведет к уменьшению эффективности рабочих процессов. Для обеспечения допустимой концентрации откачиваемых газов (на уровне высокого и сверхвысокого вакуума) необходимо знать параметры течения газовой среды при наличии металлических паров.

Проведенное в данной работе исследование может быть использовано при расчете и проектировании следующих систем:

– электрогенерирующих каналов (ЭГК) термоэмиссионного реактора-преобразователя. В ЭГК для получения оптимальных значений работы выхода эмиттера и коллектора и для компенсации объемного заряда электронов, образующегося вблизи электродов, в зазор между ними вводят легкоионизируемые пары цезия [1];

– высокотемпературных теплообменников, в которых в качестве теплоносителя используются легкоплавкие металлы;

– диффузионных средств откачки. В этих средствах вместо паров масла используются легкоплавкие металлы, например: в парортутных насосах, применяемых главным образом для откачки систем, пары ртути являются рабочей средой (ртутные выпрямители, лампы);

– в установках, где необходима высокая чистота рабочей среды (масс-спектрометры, сверхвысоковакуумные системы термоядерных установок).

**Математическое моделирование.** Объектом исследования в данной работе является течение газа через поток металлического пара относительно высокой концентрации (отношение давления пара к давлению газа в канале равно примерно  $10^5$ ), поэтому течение в канале будет соответствовать переходному режиму течения или началу вязкостного режима. В связи с этим описание течения пара осуществляется с помощью законов ламинарного течения, а для разреженного газа применяется статистический метод. Такой подход позволяет довольно точно смоделировать процесс течения газа через поток металлического пара, при относительно простой ММ. Для исследования были разработаны две ММ, основанные на методе Монте-Карло численной реализации физического процесса, использующие следующие методы:

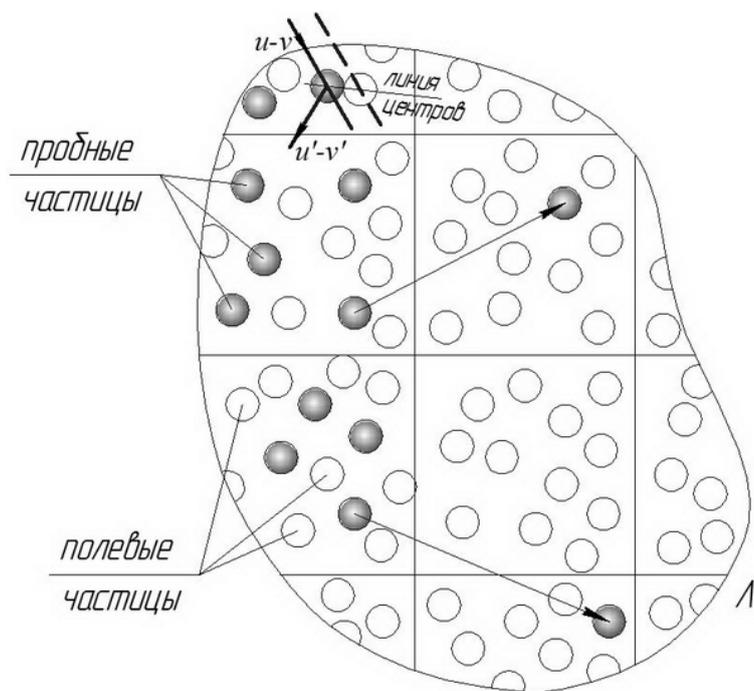
- метод статистических испытаний (метод пробной частицы);
- PIC-метод (метод частиц в ячейках).

ММ на основе метода статистических испытаний [2] не позволяет отобразить развитие процесса во времени и не подходит для моделирования пространственно-неоднородных течений, поэтому была разработана ММ, основанная на методе частиц в ячейках. Сравнение статистических ММ приведено на рис. 1.



**Рис. 1. Сравнение статистических математических моделей**

С помощью статистического метода частиц в ячейках, разработанного Ф.Х. Харлоу, при правильном задании граничных условий можно достаточно точно смоделировать исследуемый процесс. Суть метода заключается в следующем: моделируемая среда заменяется системой, состоящей из конечного числа  $N$  частиц фиксированной массы. Частицы распределены в начальный момент времени по ячейкам неподвижной эйлеровой сетки в координатном пространстве в соответствии с начальными данными (рис. 2). В момент времени  $t_a$  в каждой ячейке  $j$  находится  $N(a, j)$  частиц, обладающих некоторыми значениями скоростей. В методе используется расщепление физических процессов на временном шаге  $\Delta t$ , и процесс эволюции такой совокупности частиц на  $\Delta t$  можно разделить на два этапа.



**Рис. 2. Расчетная сетка для метода частиц в ячейках**

I. Изменение внутреннего состояния совокупности частиц в ячейках при предположении их неподвижности. Частицы только сталкиваются со своими соседями по ячейке (*столкновительная релаксация*).

II. Смещение частиц пропорционально их скоростям и шагу по времени без изменения внутреннего состояния подсистем (*бесстолкновительная релаксация*).

В качестве расчетной схемы принято течение газа в цилиндрическом капилляре, отношение давлений газа и металлического пара в котором составляет примерно  $10^{-5}$ . Режим течения молекулярно-вязкостный.

При разработке ММ были приняты следующие основные допущения:

- рассматривается идеальный одноатомный газ;
- механика столкновений описывается классическим образом;
- учитываются только бинарные столкновения;
- в столкновении всегда участвуют пробная (частица разреженного газа) и полевая (частица металлического пара) частицы;
- молекулы газа движутся хаотически;
- время столкновения стремится к нулю;
- распределение скоростей молекул определяется законом Максвелла;
- при взаимодействии молекул газа со стенкой коэффициент accommodation равен 1;
- распределение скорости потока металлического пара в сечении представляет собой параболический профиль с поправкой на скорость скольжения.

В основе ММ лежат следующие физические предпосылки: столкновения частиц считаются парными и мгновенными, а координаты молекул – случайными величинами, распределенными по объему ячейки. Время между столкновениями рассчитывается в правильном соответствии со статистикой столкновений в идеальном одноатомном газе, т. е. является случайной величиной, распределенной по показательному закону, одинаковому для любой  $m$ -й пары молекул.

Под столкновением подразумевается случайное событие, в результате которого точка  $\mathbf{C} = \{\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_N\}$  мгновенно изменяет свое значение на  $\mathbf{C}'$ , причем результатом столкновения может быть изменение значений лишь какой-либо одной пары векторов  $(\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j)$ ; новые значения  $\mathbf{c}_i', \mathbf{c}_j'$  пары, испытавшей столкновение, – случайные величины, но  $\mathbf{G}_{ig} = (\mathbf{c}_i + \mathbf{c}_j)/2$  и  $g_{ig} = |\mathbf{c}_i - \mathbf{c}_j|$  не изменяются в результате столкновения.

Эволюция точки  $\mathbf{C}(t)$  определяется последовательностью столкновений, разделенных случайными интервалами времени  $T$ . Вероятность  $P_m$  того, что в ячейке объемом  $V$ , в которой находится  $N_{\text{пр}}$  пробных частиц, в момент времени  $t$  столкнулась пара частиц  $(\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j)$  с номером  $m = 1, 2, \dots, N_{\text{пр}} \cdot N_{\text{п}}$ , при условии, что в данный момент столкновение одной из пар состоялось ( $N_{\text{п}}$  – число полевых частиц):

$$P_m = \frac{\omega_m}{\lambda}, \quad (1)$$

где  $\omega_m = \frac{g_{ij}\sigma}{V}$ ;  $\sigma = \frac{\pi}{4}(d_g + d_{Cs})^2$  – полное сечение столкновений;

$\lambda = \sum_{m=1}^k \omega_m$  – условная частота столкновений пар при фиксированном

наборе  $g_1, \dots, g_k$ .

Время ожидания столкновения имеет распределение

$$F(\tau) = P\{T \leq \tau\} = 1 - e^{-\lambda\tau}, \quad (2)$$

которое не зависит от выбора начала отсчета и от пары  $(c_i, c_j)$ , реализующей это столкновение, и определяемое состоянием  $C$  всей системы в целом до столкновения.

В соответствии с принятыми допущениями  $g\sigma(g) = \text{const}$ . Пусть исследуемый интервал времени  $\Delta t$  равен времени свободного пробега. На каждом интервале времени должно выполняться равенство

$$s_c = \Delta t \lambda = \Delta t \sum_{m=1}^k \omega_m, \quad (3)$$

где  $s_c$  – среднее число столкновений.

Плотность  $f(T)$  распределения слагаемых  $T_i$ , при которой условное среднее число  $s_t$  столкновений удовлетворяет равенству  $s_t = t\lambda$ , имеет вид

$$f(t) = \lambda e^{-\lambda t}, \quad (4)$$

а соответствующее ей распределение

$$F(T) = \int_0^t f(T) dT = 1 - e^{-\lambda t}, \quad (5)$$

причем

$$\lambda = \sum_{m=1}^k \omega_m. \quad (6)$$

Важной особенностью  $F(T)$  является то, что время  $T$  ожидания очередного столкновения определяется состоянием всей системы частиц в ячейке и, следовательно, не зависит от того, столкновение какой пары  $m$  разыгрывается.

**Алгоритм реализации математической модели на основе РС-метода.** Ниже приведен алгоритм моделирования столкновений.

**Этап I.** Пусть исследуемый интервал времени  $\Delta t$  равен времени свободного пробега.

1. В системе из  $N$  частиц в ячейке для каждой частицы разыгрывается вектор скорости (модуль скорости и два угла в сферической системе координат). Разыгрываются скорости  $\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j$  пробной и целевой частиц. Скорость молекул металлического пара определяется для каждой ячейки. Давление металлического пара относительно высокое, что позволяет описать течение потока металлического пара с помощью законов ламинарного течения жидкости. Для решения данной задачи за основу взято течение Пуазейля. Скорость скольжения определяется по методике, основанной на течении Куэтта [3].

2. В ячейке объемом  $V$ , в которой находится  $N_{\text{пр}}$  пробных частиц, выбирается пара  $(\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j)$  с номером  $m$  в соответствии с условной вероятностью столкновения  $P_m$ . Далее датчиком случайных чисел генерируется случайное число  $\xi$ , равномерно распределенное на участке  $[0;1]$ , и определяется номер пары  $m$ , испытавшей столкновение, из следующего неравенства:

$$\sum_{i=1}^{r-1} P_{mi} < \xi < \sum_{i=1}^r P_{mi}. \quad (7)$$

3. Разыгрывается время  $T$  ожидания столкновения данной пары в соответствии с распределением по показательному закону

$$F(T) = 1 - e^{-\lambda T}. \quad (8)$$

Генерируется случайное число  $\zeta$  и решается уравнение

$$\zeta = 1 - e^{-\lambda T} \Rightarrow T = -\frac{\ln(1 - \zeta)}{\lambda}. \quad (9)$$

Время накапливается в счетчике:

$$\sum_{i=1}^n T_i = S_n. \quad (10)$$

4. Если  $S_n \leq \Delta t$ , то скорости  $\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j$  заменяются на скорости  $\mathbf{c}'_i, \mathbf{c}'_j$  после столкновения. Так как при моделировании твердыми сферами вектор относительной скорости  $\mathbf{g}'$  ориентирован случайным образом, то, предполагая сохранение количества движения, можно получить следующие выражения для скорости молекулы газа после столкновения:

$$\mathbf{c}'_i = \frac{1}{2} [(\mathbf{c}_i + \mathbf{c}_j) + g_{ij} \mathbf{n}], \quad (11)$$

где  $\mathbf{n}$  – единичный вектор, сферические координаты которого выбираются случайным образом в соответствии с распределениями

$$f(\psi)d\psi = \frac{d\psi}{2\pi}; \quad (12)$$

$$f(\theta)d\theta = \frac{g_{ij}\sigma(g_{ij}, \theta)}{g_{ij}\sigma(g_{ij})} \sin \theta d\theta, \quad (13)$$

где  $\psi, \theta$  – азимутный и зенитный углы сферической системы координат;  $\sigma$  – полное сечение столкновений

Цикл из шагов 2–4 повторяется ровно  $s_c$  раз, т. е.

$$S_{s_c} \leq \Delta t < S_{s_c+1}. \quad (14)$$

**Этап II.** Алгоритм сдвига можно представить выражением смещения каждой  $i$ -й частицы:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{c}_i \Delta t, \quad (15)$$

где  $\mathbf{r}$  – радиус-вектор сферической системы координат.

На этом этапе также моделируется взаимодействие частиц с поверхностью канала.

**Результаты моделирования.** Численный эксперимент дает большое количество информации об эволюции  $\mathbf{C}(t)$  каждой частицы рассматриваемой системы. На рис. 3 и 4 представлены изменения давления

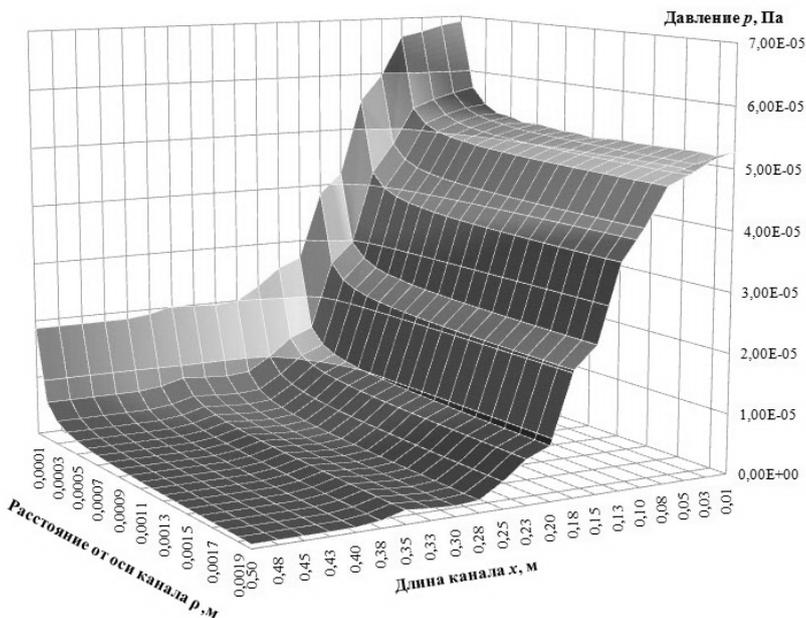


Рис. 3. Изменение давления в канале по длине и радиусу

в канале по длине и радиусу в зависимости от времени. Изменения давления по длине канала в фиксированный момент времени и в зависимости от времени в фиксированном сечении канала представлены на рис. 5 и 6 соответственно.

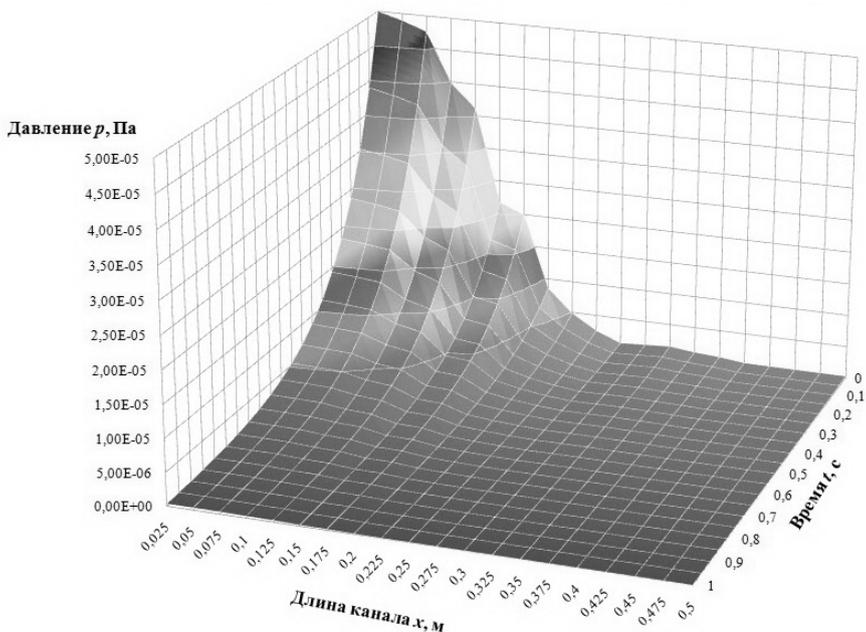


Рис. 4. Изменение давления по длине канала в зависимости от времени

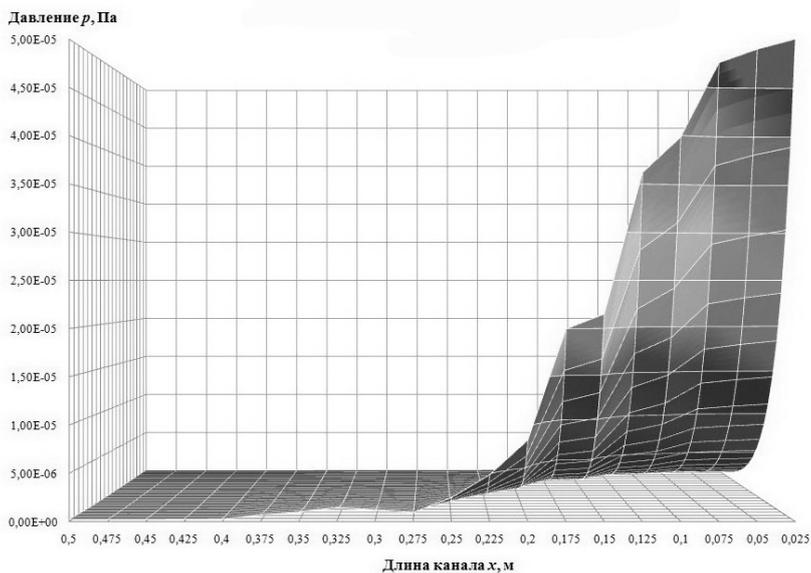
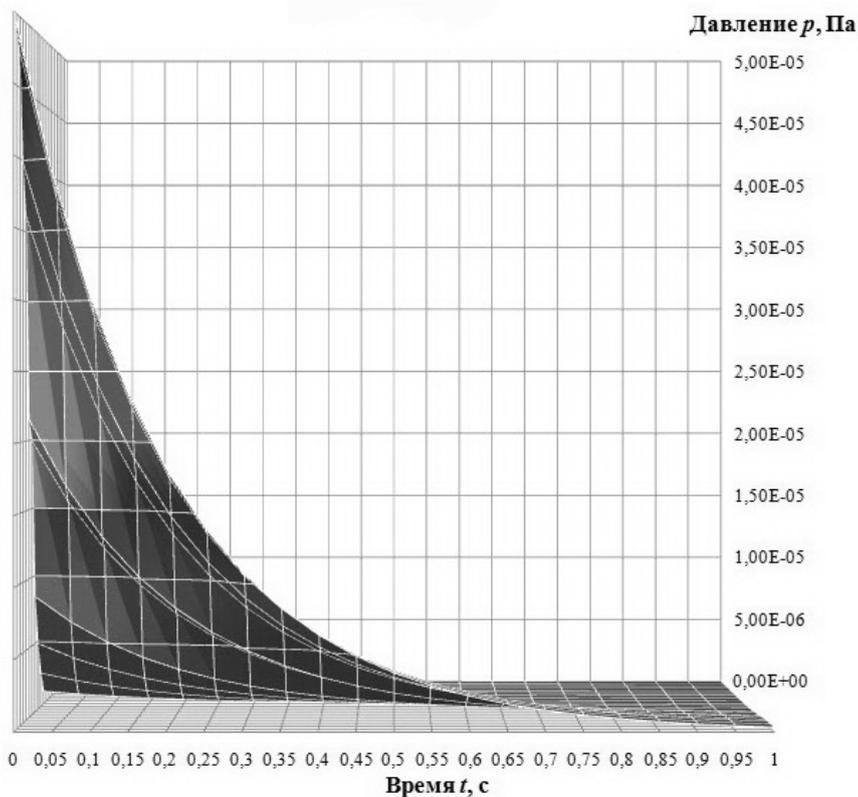


Рис. 5. Изменение давления по длине канала в фиксированный момент времени



**Рис. 6. Изменение во времени процесса падения давления в фиксированном сечении канала**

Резюмируя, можно сказать, что в рассмотренной ММ на основе статистического метода частиц в ячейках (РС-метода) точность описания поведения газовой среды в большой степени зависит от точности задания граничных условий. Данная модель может быть использована для расчета газовых течений в системах с движущимся потоком металлического пара (без ограничений по скорости потока), а также для каналов и профилей любой сложности. Модель подходит и для расчета систем, в которых присутствуют пары масла, при дополнительном исследовании поведения сложных органических молекул масла, взаимодействующих с молекулами газа.

Следует отметить, что целью данного исследования является не только необходимость разработки метода для расчета частных практических задач, но создание ММ, открытой для изменений и удобной для введения новых факторов (например, возмущающих воздействий или иных сопутствующих процессов), что даст возможность оценить значимость и степень влияния различных физических процессов, протекающих в исследуемой системе. В перспективе планируется создать исследовательский инструмент, позволяющий понять суть реальных газодинамических процессов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Стависский Ю. Я. В космос на атомной тяге. Мечты и реальность // Наука и жизнь – 2003. – № 10.
2. Никулин Н. К., Шемарова О. А. Исследование течения газа в канале при направленном движении потока пара металла методом пробной частицы // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Машиностроение. 2011. Спец. вып. № 2.
3. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. – М.: Мир, 1976. – 556 с.

Статья поступила в редакцию 14.09.2012