

Определение проводимости в молекулярном и переходном режимах течения газа методом частиц в ячейках

© Н.К. Никулин, О.А. Шемарова

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, 105005, Россия

Для описания пространственно-неоднородных течений газа в переходном режиме создана математическая модель на основе статистического метода частиц в ячейках и разработан алгоритм для расчета параметров течения разреженного газа в вакуумной системе. В данной работе представлена схема расчета проводимости вакуумных систем в молекулярном и переходном режимах течения для частного случая изотермического течения газа в тонком капилляре без учета сорбционных явлений на его стенках. Основные допущения, принятые в модели: рассматривается идеальный одноатомный газ; столкновение молекул рассматривается как упругий удар жестких сфер; учитываются только бинарные столкновения; молекулы газа движутся хаотически; время столкновения стремится к нулю; распределение скоростей молекул определяется законом Максвелла; при взаимодействии молекул газа со стенкой коэффициент аккомодации равен единице. Данные, полученные в результате численного эксперимента, сопоставлены с расчетом по эмпирическим зависимостям Кнудсена.

Ключевые слова: вакуум, переходный режим, течение, разреженный газ, математическая модель, проводимость, статистические методы, метод частиц в ячейках, алгоритм.

Введение. Полноценной теории, описывающей течение газа в переходном режиме течения $0,01 < Kn < 0,33$ [1], в настоящее время не существует, несмотря на то, что исследования течения газа в этом режиме ведутся уже длительное время. Также пока не разработан метод расчета параметров течения в переходном режиме для систем с геометрией любой сложности и позволяющий учесть скольжение на поверхности и взаимодействие молекул газа со стенкой и между собой.

Существуют уравнения для вычисления потока газа через цилиндрические капилляры с произвольным отношением длины к радиусу, охватывающие весь диапазон чисел Кнудсена [2, 3], при не очень больших скоростях истечения, позволяющих пренебречь сжимаемостью газа. Достаточно хорошо исследовано течение сжимаемого газа, включая «критический» режим при значениях числа Кнудсена менее 0,01 [4]. Однако учет сжимаемости газа в области молекулярно-вязкостного режима течения представляет значительные трудности.

Определенного успеха удалось достичь, используя численные методы решения кинетического уравнения Больцмана [5], однако этот подход очень сложен и подходит только для расчета систем с ограниченным набором условий.

В работе [6] предложен достаточно простой алгоритм расчета потока сжимаемого газа во всем диапазоне режимов течения (от молекулярного до вязкостного критического) через цилиндрический капилляр произвольной длины. За основу взято суперпозиционное уравнение из работы [2], представляющее поток газа G_l через длинный капилляр в молекулярно-вязкостном режиме в виде трех составляющих:

$$G_l = -F_b N_g \frac{dP}{dx} - F_{\text{ск}} N_g \frac{dP}{dx} - F_M N_W \frac{dP}{dx}, \quad (1)$$

где первое слагаемое — вязкостный пуазейлевский поток, второе — поток скольжения, третье — молекулярный поток; N_g и N_W — доли молекул, составляющие вязкостный и молекулярный потоки соответственно; ($N_g + N_W = 1$); $\frac{dP}{dx}$ — градиент давления.

Алгоритм [5] в целом дает хорошее соответствие эксперименту от молекулярного до вязкостного режима течения. Расчет по уравнению из работы [2] дает несколько лучшее совпадение с экспериментом в молекулярном и начале молекулярно-вязкостного режима, затем происходит прогрессирующее нарастание отклонения расчетных данных от экспериментальных. Тем не менее суперпозиционный подход физически не совсем корректен и носит несколько формальный характер, так как в переходном режиме течения газа одновременно сказывается влияние внутреннего трения и молекулярного переноса.

В [7] рассматриваются микротечения разреженного газа в переходном режиме. В простых геометрических структурах такие течения могут моделироваться аналитически (уравнения Навье—Стокса) или полуаналитически (линеаризованное уравнение Больцмана).

Режим скольжения $10^{-3} < Kn < 10^{-1}$ [7] изучен достаточно подробно, а для его описания разработана довольно простая математическая модель на основе уравнений Навье — Стокса с соответствующими граничными условиями. Таким образом, важной особенностью течения со скольжением является возможность описать его аналитической моделью или полуаналитически рассчитать скорость и проводимость для локального установившегося изотермического течения между параллельными плоскими пластинами [8] или в цилиндрическом канале постоянного сечения (круговом [8], кольцевом [9],

прямоугольном [9, 10]). Эти модели являются достаточно точными только для ограниченного диапазона чисел Кнудсена, примерно до 0,1 [11–14]. Для $Kn > 0,1$ экспериментальное исследование [15] или прямое численное моделирование методом Монте-Карло [16] показывают существенное расхождение с результатами моделирования, где были использованы граничные условия 1-го порядка, а условия скольжения 2-го порядка представляют довольно громоздкие выражения [17–19]. Основной сложностью при использовании данной модели является определение коэффициентов аккомодации. Также следует отметить, что решение уравнений Навье — Стокса с граничными условиями 2-го порядка может быть весьма проблематичным для сложных геометрических структур, причем сложности вызывают как поиск аналитического, так и численного решения.

Методы, которые используются для численного моделирования газовых потоков, зависят от степени разрежения газа. Таким образом, для вязкостного режима течения (сплошная среда) численное решение уравнений Навье — Стокса традиционными методами (метод конечных разностей, метод конечных объемов, спектральные методы и т. д.) не представляет сложностей. Для режима скольжения $10^{-3} < Kn < 10^{-1}$ данный подход все еще действителен, но необходимо учитывать граничные условия скольжения на стенке канала. Karniadakis и Beskok [17] разработали спектральный алгоритм «μflow», позволяющий применять уравнения Навье — Стокса для моделирования газовых потоков в вязкостном режиме и режиме скольжения.

Для моделирования переходного режима течения газа лучше подходят молекулярные методы. Метод прямого моделирования Монте-Карло, разработанный Бердом [20], изначально широко использовался для расчета потоков разреженных газов [21–23]. Принцип численного эксперимента состоит в расщеплении физических процессов межмолекулярных столкновений и движения частиц на временном шаге δt . Моделируемая среда заменяется системой из конечного числа W частиц, распределенных по ячейкам неподвижной сетки [24].

Рассмотренные методики расчета подтвердили необходимость разработки методики расчета параметров газа в переходном режиме течения, подходящей для систем с геометрией любой сложности, дающей возможность учесть взаимодействие газа со стенкой и не накладывающей ограничений на скорость течения.

Статистический метод частиц в ячейках. Метод частиц в ячейках, разработанный Ф.Х. Харлоу [25], при правильном задании граничных условий позволяет достаточно точно смоделировать исследуемый процесс. Суть метода заключается в следующем: моделируемая среда заменяется системой из конечного числа N частиц фиксированной массы (молекул исследуемого газа). Частицы распреде-

лены в начальный момент времени по ячейкам неподвижной эйлеровой сетки в координатном пространстве в соответствии с начальными координатами.

В данный 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 Δt , и процесс эволюции такой совокупности частиц на Δt можно разделить на два этапа.

I. Изменение внутреннего состояния совокупности частиц, находящихся в ячейках, в предположении их неподвижности (*столкновительная релаксация*).

II. Смещение частиц пропорционально их скоростям и шагу по времени без изменения внутреннего состояния подсистем. Частицы только смещаются и взаимодействуют с границей контрольного объема и поверхностью канала (*бесстолкновительная релаксация*).

В модели были приняты следующие основные допущения:

- 1) рассматривается идеальный одноатомный газ;
- 2) столкновение молекул рассматривается как упругий удар жестких сфер;
- 3) учитываются только бинарные столкновения;
- 4) молекулы газа движутся хаотически;
- 5) время столкновения стремится к нулю;
- 6) распределение скоростей молекул определяется законом Максвелла;
- 7) при взаимодействии молекул газа со стенкой коэффициент accommodation равен единице.

В основе модели 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 — 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 $\mathbf{G}_{ig} = \frac{\mathbf{c}_i + \mathbf{c}_j}{2}$ и $g_{ig} = |(\mathbf{c}_i - \mathbf{c}_j)|$ не меняются в результате столкновения.

Эволюция точки $\mathbf{C}(t)$ определяется последовательностью столкновений, разделенных случайными интервалами времени T . Вероятность того, что в ячейке объемом V , в которой находится N частиц, в момент времени t столкнулась пара частиц $(\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j)$ номером $m = 1, 2, \dots, N_{\text{пр}} N_{\text{п}}$ (при условии, что в данный момент столкновение одной из пар состоялось), равна [26]

$$P_m = \frac{\omega_m}{\lambda}, \quad (2)$$

где $\omega_m = \frac{g_{ij}\sigma}{V}$; $\sigma = \frac{\pi}{4}(d_g + d_{C_s})^2$ — 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

$$F(\tau) = P\{T \leq \tau\} = 1 - e^{-\lambda\tau}, \quad (3)$$

которое не зависит от выбора начала отсчета и от пары $(\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j)$, реализующей это столкновение, и определяется состоянием \mathbf{C} всей системы в целом до столкновения.

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

$$s_c = \Delta t \lambda = \Delta t \sum_{m=1}^k \omega_m, \quad (4)$$

где s_c — среднее число столкновений.

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

$$f(T) = \lambda e^{-\lambda T}, \quad (5)$$

а соответствующее ей распределение

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

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

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

Алгоритм реализации математической модели.

Этап I. Алгоритм моделирования столкновений

Пусть исследуемый интервал времени Δt порядка 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). В ячейке объемом V , в которой находится N 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 ξ , равномерно распределенное на участке $[0; 1]$, и определяется номер пары m , испытавшей столкновение, из неравенства

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

2. 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 ζ и решается уравнение

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

Время накапливается в счетчике: $\sum_{i=1}^n T_i = S_n$.

3. Если $S_n \leq \Delta t$, то скорости $\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j$ заменяют 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 выражения для скорости молекулы газа после столкновения:

$$\mathbf{c}'_i = \frac{1}{2} [(\mathbf{c}_i + \mathbf{c}_j) + g_{ij} \mathbf{n}], \quad (10)$$

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

$$f(\psi) d\psi = \frac{d\psi}{2\pi},$$

$$f(\theta) d\theta = \frac{g_{ij} \sigma(g_{ij}, \theta)}{g_{ij} \sigma(g_{ij})} \sin \theta d\theta. \quad (11)$$

Цикл из шагов 2 и 3 повторяется ровно s_c раз:

$$S_{s_c} \leq \Delta t < S_{s_c+1}. \quad (12)$$

Этап II. Алгоритм сдвига

Алгоритм сдвига можно представить выражением смещения каждой i -й частицы:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{c}_i \Delta t. \quad (13)$$

На этом этапе также моделируется взаимодействие частиц с поверхностью канала. Отражение от стенок канала моделируется по диффузному закону [27].

При диффузном законе распределения молекул при отражении от стенок число молекул dN_θ , попавших в элементарный телесный угол $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$, пропорционально $\cos \theta$, т. е.

$$dN_\theta = Nd\Omega \cos \theta, \quad (14)$$

откуда плотность вероятности распределения молекул по углу

$$p(\theta) = A \sin \theta \cos \theta. \quad (15)$$

Из условия нормировки $\int_0^{\pi/2} p(\theta) d\theta = 1$ коэффициент $A = 2$. Угол θ определяется по формуле:

$$\int_0^\theta p(\theta) d\theta = \tau, \quad (16)$$

следовательно, $\theta = \arcsin \sqrt{\tau}$.

Этап III. Расчет проводимости системы

Численный эксперимент дает большое количество информации об эволюции $C(t)$ каждой частицы рассматриваемой системы. В результате расчета мы имеем информацию о концентрации газа в каждой ячейке эйлеровой сетки (количестве частиц в объеме ячейки). Обладая этой информацией, можно без труда определить давление в любой точке системы и вычислить проводимость по формуле [8]

$$U = \frac{Q}{p_1 - p_2}, \quad (17)$$

где Q — поток газа, задаваемый как исходные данные.

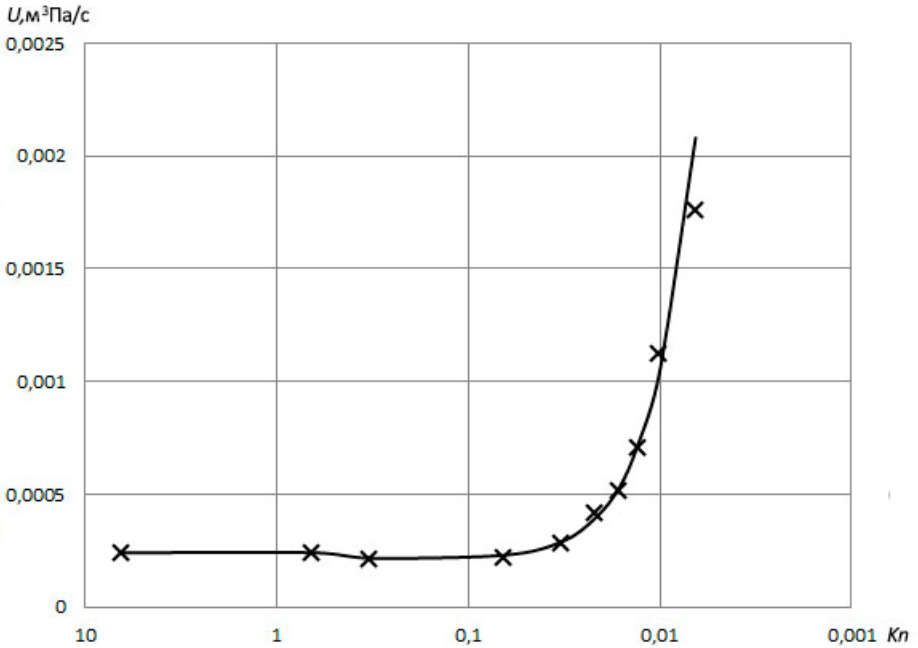


Рис. 1. Изменение проводимости U цилиндрического трубопровода ($D = 0,01$ м, $l = 0,5$ м) в зависимости от числа Кнудсена (Kn):
 x — метод частиц в ячейках, — эмпирические зависимости Кнудсена [1]

На рис. 1 представлено сравнение полученных в результате расчета методом частиц в ячейках значений проводимости со значениями, полученными по формулам Кнудсена [1], которые, по сути, являются эмпирическим обобщением экспериментальных исследований. Представлена оценка погрешности проводимости U_{PIC} , вычисленной методом частиц в ячейках, относительно проводимости, вычисленной по формулам Кнудсена U_{Kn} :

$$\delta = \frac{|U_{Kn} - U_{PIC}|}{U_{Kn}} \cdot 100\%.$$

В молекулярном и переходном режимах течения данный метод дает высокую точность. В вязкостном режиме точность метода снижается, так как уже начинается область сплошной среды (рис. 2).

В рассмотренной модели на основе статистического метода частиц в ячейках точность описания поведения газовой среды в большой степени зависит от точности задания граничных условий. Данная модель может быть использована для расчета газовых течений в

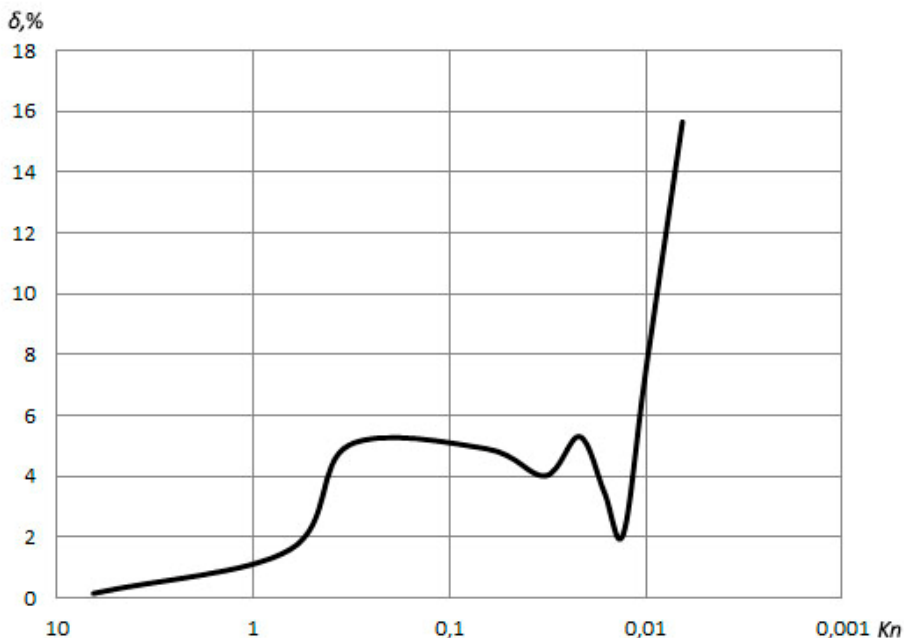


Рис. 2. Погрешность δ метода частиц в ячейках в зависимости от Kn

системах с большими потоками (нет ограничений по величине скорости потока), а также для каналов и профилей с геометрией любой сложности, позволяет учесть процессы сорбции газа на поверхности канала и градиент температуры в системе.

Работа выполнена в рамках гранта НШ-6131.2012.8 и по государственному заданию высшим учебным заведениям на 2013 и на плановый период 2014 и 2015 гг. в части проведения научно-исследовательских работ и отчетах о научной деятельности за 2012 г. (№ 7.803.2011).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Демихов К.Е., Панфилов Ю.В., Никулин Н.К. и др. *Вакуумная техника: справочник*. Москва, Машиностроение, 2009, 590 с.
- [2] Barrer R.M., Nicholson D. Flow in capillary system. II. Low pressure transition flow of gases in short capillaries rectangular slits, beds of spheres and parallel capillary bundles. *British Journal of Applied Physics*, 1966, vol. 17, no 8, p. 1091–1098.
- [3] Lund L.M., Berman A.S. Flow and self-diffusion of gases in capillaries. *Journal of Applied Physics*, 1966, vol. 37, no 6, p. 2489–2495.
- [4] Абрамович Г.Н. *Прикладная газовая динамика*. Москва, Наука, 1969.
- [5] Cercignani C. Transitional regime and boltzman equation. *Rarefied Gas Dyn. Pap. 11 th. Int. Symp. Cannes*, 1978, Paris, 1979, vol. 1, p. 141–164.

- [6] Дмитриевская Е.В., Сорокин С.И. Алгоритм расчета потока сжимаемого газа через цилиндрический капилляр при произвольных значениях числа Кнудсена. *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерно-физические исследования (теория и эксперимент)*, 1990, вып. 4(12), 1—100, с. 19–23.
- [7] Stéphane Colin, Lucien Baldas. Effets de raréfaction dans les micro-écoulements gazeux. *Comptes Rendus Physique*, 5 (2004), 521–530.
- [8] Kennard E.H. *Kinetic Theory of Gases, first ed.* McGraw-Hill, New York, 1938.
- [9] Ebert W.A., Sparrow E.M. Slip flow in rectangular and annular ducts. *J. Basic Engrg*, 87 (1965), 1018–1024.
- [10] G.L. Morini, M. Spiga. Slip flow in rectangular microtubes. *Microscale Thermophys. Eng.*, 2 (4) (1998), 273–282.
- [11] Arkilic E.B., Breuer K.S., Schmidt M.A. Mass flow and tangential momentum accommodation in silicon micromachined channels. *J. Fluid Mech*, 437 (2001), 29–43.
- [12] Harley J.C., Huang Y., Bau H.H., Zemel J.N. Gas flow in micro-channels. *J. Fluid Mech*, 284 (1995), 257–274.
- [13] Shih J.C., Ho C.-M., Liu J., Tai Y.-C. *Monatomic and polyatomic gas flow through uniform microchannels, vol. DSC-59*, ASME, New York, 1996, pp. 197–203.
- [14] Liu J., Tai Y.-C., Ho C.-M. MEMS for pressure distribution studies of gaseous flows in microchannels, in: *An Investigation of Micro Structures, Sensors, Actuators, Machines, and Systems*, 8th Ann. Int. Workshop MEMS, IEEE, Amsterdam, 1995, pp. 209–215.
- [15] Sreekanth A.K. Slip flow through long circular tubes, in: L. Trilling, H.Y. Wachman (Eds.). *6th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, Academic Press, New York, 1969, pp. 667–680.
- [16] Piekos E.S., Breuer K.S. Numerical modeling of micromechanical devices using the direct simulation Monte Carlo method. *J. Fluids Engrg.* 118 (1996), 464–469.
- [17] Karniadakis G.E., Beskok A. *Microflows: Fundamentals and Simulation*. Springer-Verlag, New York, 2002.
- [18] Chapman S., Cowling T.G. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. University Press, Cambridge, 1952.
- [19] Deissler R.G. An analysis of second-order slip flow and temperature-jump boundary conditions for rarefied gases. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 7 (1964), 681–694.
- [20] Bird G.A. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Clarendon Press, Oxford, 1998.
- [21] Muntz E.P. Rarefied gas dynamics. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 21 (1989), 387–417.
- [22] Cheng H., Emmanuel G. Perspectives on hypersonic nonequilibrium flow. *AIAA J*, 33 (1995), 385–400.
- [23] Bird G., Monte Carlo simulation of gas flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 10 (1978), 11–31.
- [24] Oran E.S., Oh C.K., Cybyk B.Z. Direct Simulation Monte Carlo: recent advances and applications. *Annu. Rev. Fluid Mech*, 30 (1998), 403–441.
- [25] Харлоу Ф.Х. *Численный метод частиц в ячейках для задач гидродинамики. Вычислительные методы в гидродинамике*. Москва, Мир, 1967, 460 с.
- [26] Белоцерковский О.М. *Численное моделирование в механике сплошных сред*. Москва, Физико-математическая литература, 1994, 448 с.
- [27] 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.

Статья поступила в редакцию 31.05.2013

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Никулин Н.К., Шемарова О.А. Определение проводимости в молекулярном и переходном режимах течения газа методом частиц в ячейках. *Инженерный журнал: наука и инновации*, 2013, вып. 5. URL: <http://engjournal.ru/catalog/machin/vacuum/753.html>

Никулин Николай Константинович родился 1946 г., окончил МГТУ им. Н.Э. Баумана в 1970 г. Канд. техн. наук, доцент кафедры «Вакуумная и компрессорная техника» МГТУ им. Н.Э. Баумана. Работает в области вакуумной техники более 32 лет. Автор более 100 научных трудов. e-mail: nkn@bmstu.ru

Шемарова Ольга Александровна окончила МВТУ им. Н.Э. Баумана в 2010 г. Аспирантка кафедры «Вакуумная и компрессорная техника» МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор 3 научных работ в области вакуумной техники. e-mail: holga.at@gmail.ru