

Ю.М. Печатников

Государственный политехнический университет
195297, Санкт-Петербург, Россия
E-mail: yiry@nm.ru

**Расчет сложных элементов вакуумных систем в молекулярно-
вязкостном режиме течения разреженного газа**

© Ю.М. Печатников, E-mail: yiry@nm.ru, 2002

Данное исследование посвящено анализу переходного, от молекулярного до вязкостного, течения разреженных газов. Приведен обзор существующих моделей и методов моделирования газовых потоков в этом режиме. Вопросы переходного течения разреженных газов в процессе откачки вакуумных систем рассматриваются совместно с достижениями динамики разреженных газов при изотермических потоках в каналах. Предложен вероятностный подход к задаче моделирования переходного течения разреженных газов на базе кинетической теории. На основе данного подхода разработан метод вероятностных направлений. Рассмотрены различные приложения к решению конкретных задач. Проведена верификация данного метода моделирования. Результаты моделирования обобщены и проанализированы при одновременном рассмотрении характеристик газовых потоков на микро- и макро-уровне. Выдвинута гипотеза о физической природе переходного течения разреженного газа.

A theoretical discussion of the transition range between from molecular flow and laminar viscous flow is actually. The transition regime has always presented considerable theoretical difficulty since both the theoretical formalism employed and the physical processes occurring are so different for the two extremes. From the standpoint of modeling, Vacuum Gas Dynamics has been discussed as an isothermal subset of Rarefied Gas Dynamics in duct. Theoretical approaches to gas flow through duct has been considered, with an emphasis on physical interpretation. A new theoretical physical model and method to gas flow has been developed. The theory derivation of the production of a molecular drift velocity from a pressure gradient has been developed. The flow of a gas through ducts of long and finite length at pressures for which the duct radius is greater than the mean free path has been investigated. The intent of the experiments was to confirm a new theoretical approach to gas flow. The results have been discussed. Pechatnikov's model has been verified.

Все замечания и пожелания присылать по адресу E-mail: yiriy@nm.ru

© Ю.М. Печатников, 2002

Содержание

Введение	4
1. СОВРЕМЕННЫЕ МОДЕЛИ И МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЕРЕХОДНОГО ТЕЧЕНИЯ РАЗРЕЖЕННЫХ ГАЗОВ	5
2. ВЕРОЯТНОСТНЫЙ ПОДХОД К ЗАДАЧЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЕРЕХОДНОГО ТЕЧЕНИЯ РАЗРЕЖЕННЫХ ГАЗОВ	15
3. АНАЛИЗ МОЛЕКУЛЯРНО-ВЯЗКОСТНОГО РЕЖИМА ТЕЧЕНИЯ РАЗРЕЖЕННОГО ГАЗА	
Заключение	
Список литературы	

Введение

До настоящего времени, как правило, при оценке значений проводимости в молекулярно-вязкостном диапазоне, как отдельных элементов так и вакуумной системы в целом, ограничиваются использованием эмпирических данных или полуэмпирических коэффициентов теории диффузии в газах. Эти данные, обобщенные в полуэмпирические формулы, постоянно уточняются. Для расчетов проводимости вакуумных элементов при переходном течении вблизи вязкостного режима, при числах Кнудсена в диапазоне от 0,1 до 0,01 и при малых числах Рейнольдса, используются уравнения с эмпирическими коэффициентами теории со скольжением модели механики сплошной среды. Получаемые такими методами результаты оказываются неточными для различных условий и задач [1-3]. При исследовании сложных элементов возникает задача проведения натуральных исследований. Это, из-за особых требований к технике эксперимента в молекулярно-вязкостном режиме, является непростой задачей [4].

Современные возможности компьютерной технологии позволяют вычислять характеристики газовых потоков, протекающих через сложные вакуумные элементы. В настоящее время достаточно хорошо разработаны на концептуальном уровне следующие подходы [19,20]:

1) вероятностный подход к моделированию при $0,01 < Kn < 100$, где Kn - число Кнудсена [5,7,29,31];

2) метод прямого моделирования при $0,1 < Kn < 100$ [33,34].

Результаты расчета используются в конкретных задачах, однако вычислительные эксперименты в вакуумной технике, вместо дорогостоящих натуральных измерений, применяются ограниченно. Возможно из-за того, что метод прямого моделирования сложен в реализации, а вероятностный подход недостаточно описан. Внедрение в практику инженера-вакуумщика вычислительных экспериментов позволит значительно сократить затраты на выполнение исследований.

СОВРЕМЕННЫЕ МОДЕЛИ И МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЕРЕХОДНОГО ТЕЧЕНИЯ РАЗРЕЖЕННЫХ ГАЗОВ

В основе современных представлений о физике молекулярного режима течения разреженного газа и методов расчета проводимости вакуумной трубопроводной арматуры лежат результаты кинетической теории, связанные с моделированием детерминированных молекул. При вязкостном режиме разреженный газ, описывают оперируя показателями усредненными по большому числу молекул. Задача отыскания статистических характеристик детерминированных молекул заменяется рассмотрением некоторой сплошной среды, характеризуемой определенным набором макроскопических параметров.

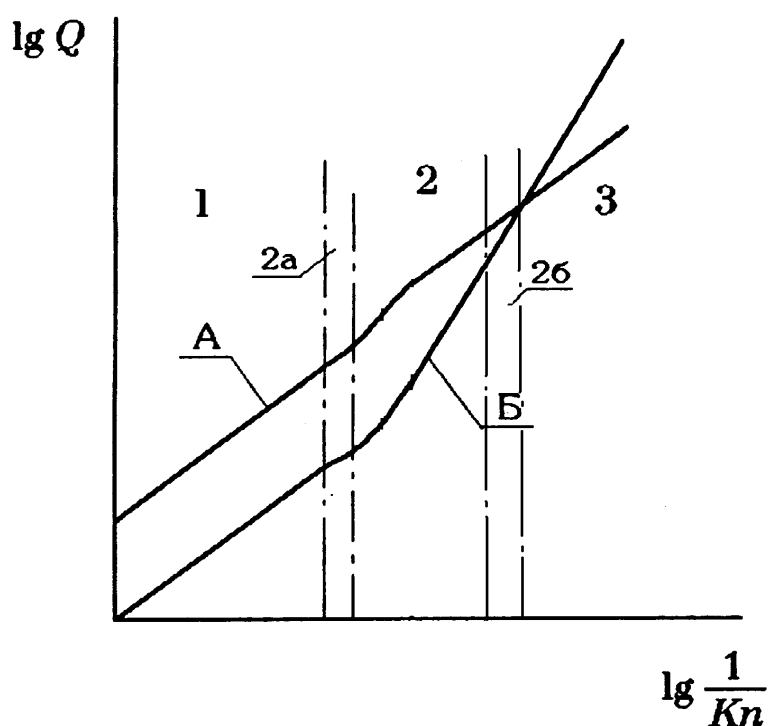


Рис.1 Режимы течения разреженного газа в вакуумных системах: 1 - молекулярный при $Kn > 100$; 2 - молекулярно-вязкостный; 2a - вблизи молекулярного; 2б - вязкостный со скольжением; 3 - вязкостный при $Kn < 0,01$. Газовый поток через отверстие - кривая А и длинный трубопровод - кривая Б.

В зависимости от физики процесса, применяемых моделей и методов исследования газовых потоков (Q) в вакуумных системах различают три основных вида течения разреженного газа: молекулярное, вязкостное, молекулярно-вязкостное (рис1).

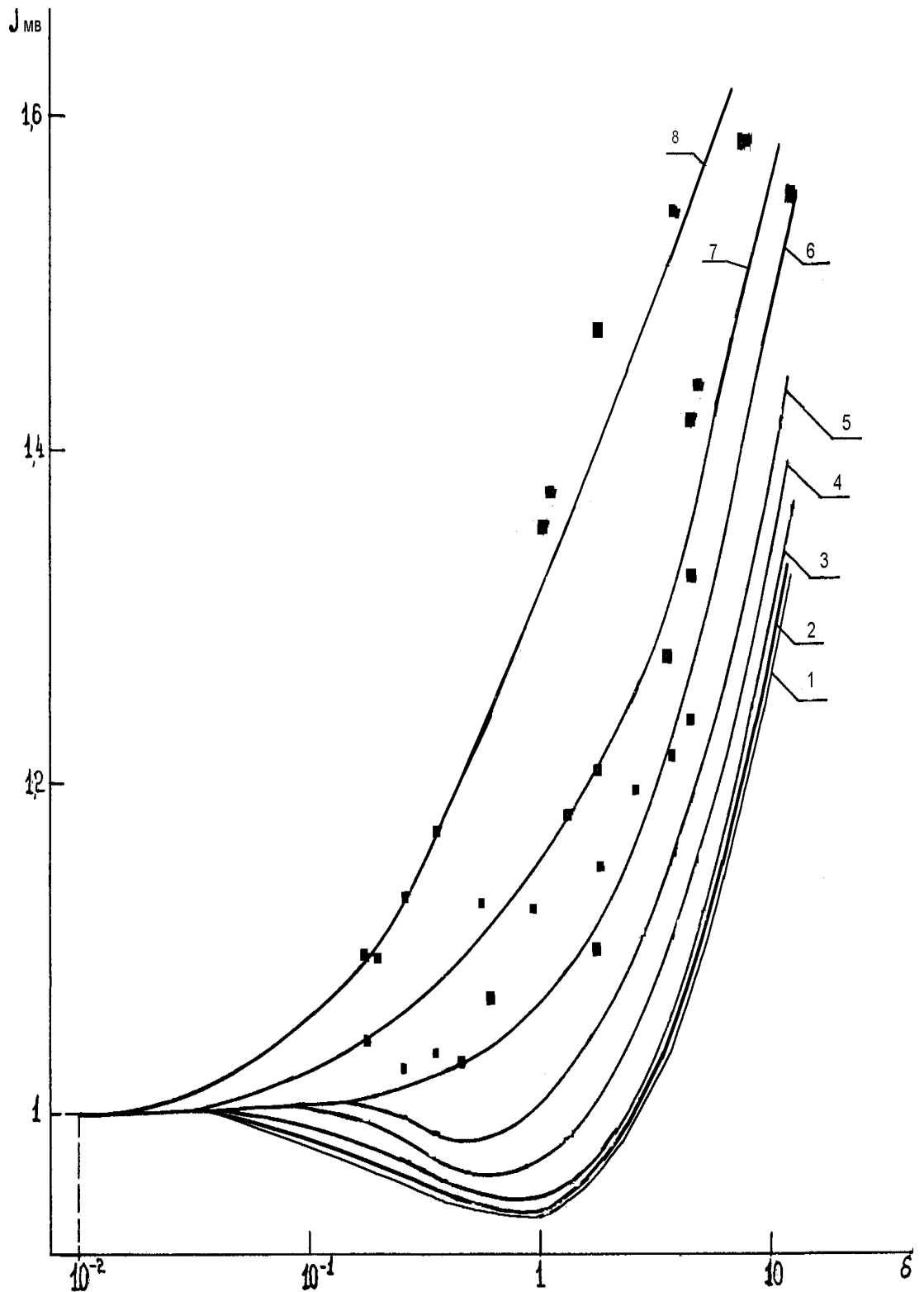


Рис.2 Зависимость безразмерной проводимости (J_{mv}) вакуумных трубопроводов в молекулярно-вязкостном режиме от степени разреженности. Данные, вычисленные методом моделирования вероятностных направлений: кривая 1 - длинный прямоугольный трубопровод; 2 - длинный угловой круглый трубопровод; кривые 3 - 8 - трубопроводы круглого сечения при L/D : 40, 10, 8, 4, 2, 0,1 соответственно. Натурные эксперименты [15,16] отмечены - ■

Представление о характере течения дает число Кнудсена (Kn , $\delta = 1/Kn$). С точки зрения физики, разграничение областей, где наблюдаются данные виды течения разреженного газа достаточно условно (рис.1). Отметим, что модель механики сплошной среды применима при числах Кнудсена значительно меньше 0,01.

Knudsen М.Н.С. и др. ученые сформулировали проблему качественного и количественного анализа всего диапазона молекулярно-вязкостного течения разреженного газа еще в 1910г.[1,2]. При анализе переходного течения разреженного газа возникают значительные трудности связанные с описанием физического процесса откачки вакуумных систем. Данная проблема затрагивает, на фундаментальном уровне, основы теории со скольжением, теории диффузии газов, статистики Больцмана [1-14]. Основная трудность описания физического процесса переходного течения разреженного газа в вакуумных элементах, который может рассматриваться как подраздел динамики разреженных газов при изотермическом течении в каналах, состоит в необходимости согласовать представления о хаотическом блуждании молекул в молекулярном режиме и ламинарном течении в вязкостном режиме.

Попытки разработать модель переходного течения разреженного газа наиболее часто предпринимались на базе экспериментальных исследований отверстий, длинных прямоугольных щелей или круглых трубопроводов [1-19]. 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.

Сопоставление данных натуральных измерений и результатов вычислительных экспериментов, реализующих ту или иную физическую модель, должно проводиться на базе одних и тех же критериев и чисел подобия.

В связи с тем, что практически невозможно достичь равенства всех критериев подобия, пользуются приемами приближенного моделирования для определения основных критериев подобия. Таким определяющим критерием подобия при молекулярно-вязкостном режиме в условиях стационарного изотермического течения разреженного газа определенного рода, исходя из положений как кинетической теории [9], рассматривающей течение газа в виде детерминированных молекул, так континуальной теории [8], рассматривающей интегральные характеристики потока разреженного газа, является, для геометрически подобных конструкций, имеющих лишь одну характерную длину, число Кнудсена. Отметим, что данный факт подтверждается также многочисленными натурными экспериментами. Физические показатели, характеризующие род газа, являются постоянными

величинами. Их влияние необходимо учитывать при пересчете параметров, полученных для одного газа для характеристик другого.

Зависимость безразмерной проводимости ($J_{мв}$) для геометрически подобных элементов от характеристик потока разреженного газа в молекулярно-вязкостном режиме может быть представлена следующим образом:

$$J_{мв} = J_{мв}(A, Kn, sort), \quad (1)$$

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

Например, для вакуумной трубопроводной арматуры:

$$J_{мв} = J_{мв}(A, L/D, Kn, sort), \quad (2)$$

где L/D - отношение эффективной длины к эффективному диаметру вакуумного элемента.

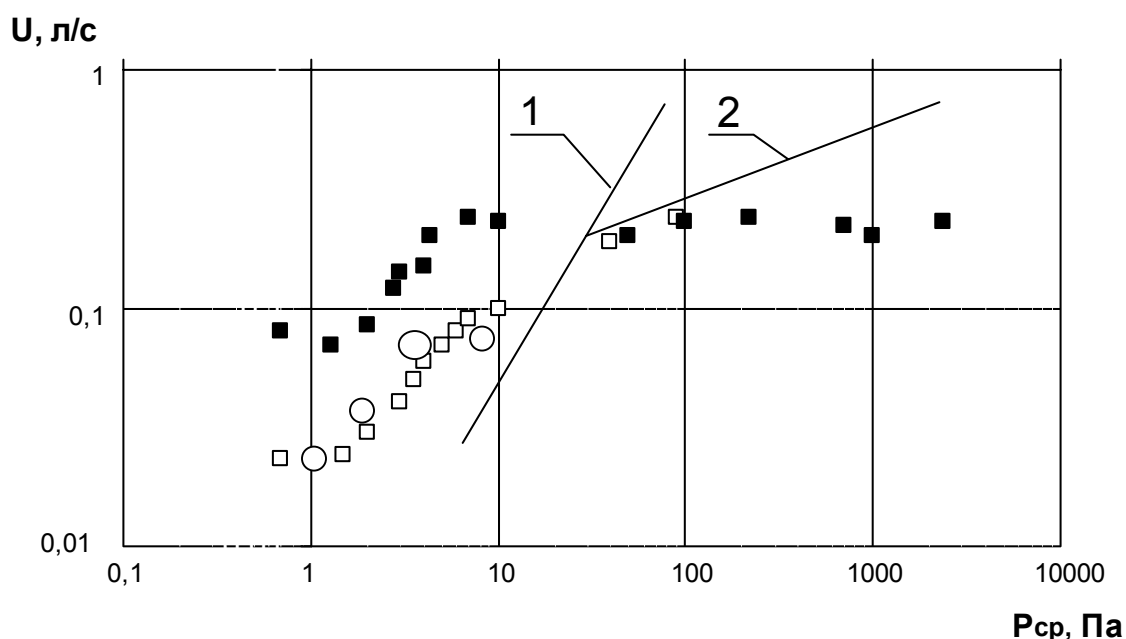


Рис.3 Зависимость проводимости (U) трубопроводов и отверстий в области течения со скольжением от среднего давления ($p_{ср}$). Данные для круглого трубопровода $D = 25$ мм, $L = 55$ мм: \circ - вычисленные методом моделирования вероятностных направлений [5]; \square - натурные эксперименты; кривая 2 - рассчитанные по (7). Натурные эксперименты для круглого отверстия $D = 25$ мм отмечены \blacksquare . Кривая 1 - длинный трубопровод при $D = 25$ мм.

При натуральных экспериментах наблюдаются следующие явления. Значения проводимости отверстий монотонно возрастают во всем диапазоне переходного течения, от молекулярного до вязкостного режима (рис.2). Значения проводимости длинных трубопроводов при уменьшении чисел Кнудсена от 100 до 1 уменьшались, а далее при уменьшении чисел Кнудсена от 1 до 0,01 монотонно возрастали (рис.2). Это широко

известное явление - парадокс Кнудсена [1-14]. В условиях границы «молекулярно-вязкостный режим - вязкостный режим» при $Kn \cong 0,01$ проводимости отверстия и длинного трубопровода одинаковых диаметров стремились к одинаковым значениям (рис.3) [14-16].

Вопрос о существовании минимального значения проводимости для длинного канала и отсутствие такого для отверстия стал ключевым вопросом («камнем преткновения») при разработке физической модели течения в произвольных конфигурациях вакуумных элементов. Опираясь только на макропараметры, теоретически обосновать, с точки зрения кинетической или континуальной теории, получаемые данные не удалось.

На современном уровне, в соответствии с положениями кинетической теории, для математического описания макроскопических характеристик течения разреженного газа используются сложные интегро-дифференциальные уравнения Больцмана. Уравнение Больцмана обладает громадным физическим содержанием и сложной математической структурой. Применение интегрально-кинетических методов для численного решения уравнения Больцмана в диапазоне чисел Кнудсена (Kn) меньше 100 вызывает большие сложности при нахождении решений даже в простейших случаях из-за сложности решения интеграла столкновений [17-20]. Численные решения уравнения Больцмана для отверстий и длинных трубопроводов, полученные в данном диапазоне чисел Кнудсена (Kn) в этих случаях совпадали с точностью 5% с результатами измерений. Однако, при изменении граничных условий, даже в простейших случаях при решении интеграла столкновений интегрально-кинетическими методами возникали непреодолимые трудности [8-10].

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

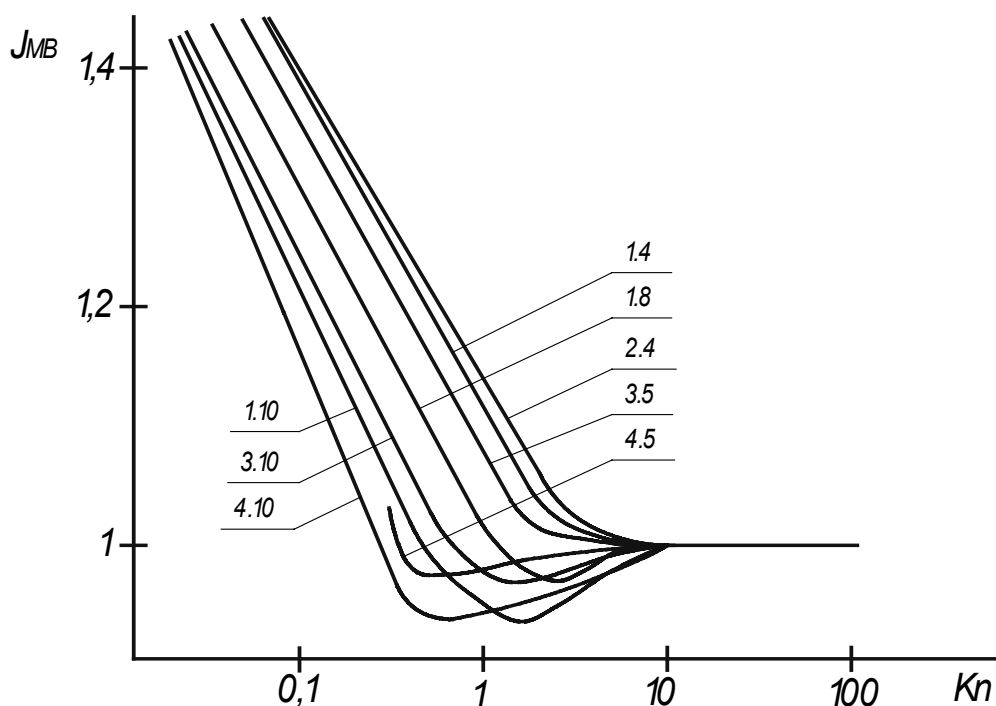


Рис.4 Зависимость безразмерной проводимости ($J_{мв}$) вакуумных трубопроводов в молекулярно-вязкостном режиме от степени разреженности (Kn). Данные, вычисленные методом моделирования вероятностных направлений [32]: кривые 1.4, 1.8, 1.10 при L/D 4, 8, 10 соответственно. Данные, вычисленные при решении линеаризованного уравнения Больцмана: кривые 3.5, 3.10 при L/D 5, 10 [37]; Данные, вычисленные методом прямого моделирования: кривые 4.5, 4.10 при L/D : 5, 10 [37].
Натурные эксперименты: кривая 2.4 при L/D 3.7 [16].

Методы статистических испытаний, непосредственно использующие метод Монте-Карло, широко применяются для расчетов стационарных потоков разреженного газа в вакуумных элементах при молекулярном режиме [21]. При вычислительных экспериментах прослеживается движение отдельных пробных молекул с момента входа в элемент и до момента выхода из него, при этом рассматриваются только соударения со стенками вакуумного элемента.

При более низком вакууме при числах Кнудсена от 100 до 0,01 в условиях, когда длина свободного пути молекулы сравнима с диаметром трубопровода, необходимо дополнительно рассматривать межмолекулярные соударения. В связи с этим задача моделирования движения молекул существенно осложняется.

Затруднения возникают из-за приближенных представлений о физике среднего вакуума. 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 появляются эффекты поведения газов мольного масштаба. Затруднения возникают из-за приближенных представлений о механизме взаимодействия и поведения детерминированных

молекул на микро-уровне. 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. Дополнительные затруднения вызывает решение задач, связанных с реализацией того или иного подхода.

Для моделирования течения в околмолекулярной области, если рассматривать не только столкновения с внутренней поверхностью канала, но и первые межмолекулярные соударения можно применить метод статистических испытаний (пробных частиц) [21-23]. Однако при значениях чисел Кнудсена меньших 10 нельзя ограничиваться первыми столкновениями и анализ существенно усложняется.

Для моделирования процесса переноса в переходном режиме К.Е.Демихов предложил модифицировать метод статистических испытаний путем использования в расчетах поправочных эмпирических коэффициентов. В [24] приводятся такие коэффициенты для расчета двухмерной модели турбомолекулярных насосов. Метод включают эмпирические коэффициенты, которые применимы только для конкретных условий и задач.

Ж.К. Naviland, на концептуальном уровне, предложил модификацию метода статистических испытаний (пробных частиц) [25], в которой прослеживается траектория движения одной частицы через поле течения с учетом парных упругих соударений с другими частицами, распределенными по полю течения. Количество соударений рассматриваемой частицы с полевыми частицами, распределение которых задается из априорных соображений, уточняется на каждом последующем шаге итерационного процесса. Основным недостатком метода заключается в неопределенности распределения полевых молекул во всем поле течения. Например, в [26], при реализации данной вычислительной схемы, рассчитывается 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 [27-29] о необходимости более строго рассмотреть теорию скольжения [11]. В данной работе получено удовлетворительное качественное соответствие вычислительных и натуральных экспериментов для предельных случаев (отверстие и длинный трубопровод). Отличие может объясняться не точностью используемого метода и вычислительной схемы, что хорошо иллюстрирует решение задачи о самодиффузии газа в коротком канале [30].

Широко применяется метод прямого моделирования для расчетов при значениях

чисел Кнудсена от 100 до 0,1 [33-37], разработанный на концептуальном уровне знаменитым австралийским ученым Г.Бердом только для решения специальных задач аэрокосмической техники. Метод верифицирован для широкого класса задач (рис.4).

Метод Берда требует значительных затрат вычислительных ресурсов [34]. При реализации метода возникает неопределенность, связанная с тем, что одновременно моделируется конечное число молекул (N) и разреженный газ не в полной мере подчиняется статистике Больцмана и распределению по скоростям Максвелла. В инженерной практике существует неопределенность при задании физических констант в законах межмолекулярных взаимодействий и релаксационных процессах при соударениях молекул.

Инженерно-физическая модель течения разреженного газа Г.Берда имеет существенные ограничения - рассматриваются только парные соударения частиц. Анализируя границы применения метода отметим, что область в которой принципиально возможно использовать данный метод ограничивается диапазоном чисел Кнудсена (Kn) при котором наблюдаются только парные соударения. В [29] 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 $\delta > 0,5$ соударения между молекулами не 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 остановилось, 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 [31], на концептуальном уровне, предложен вероятностный подход к моделированию течения разреженного газа (метод вероятностных направлений). Поток газа рассматривается как совокупность движения отдельных детерминированных материальных молекул (учитывается масса и эффективный диаметр молекул). Число молекул, участвующих в процессе переноса между входным и выходным сечениями, увеличивается с уменьшением чисел Кнудсена.

Основное преимущество инженерно-физической модели межмолекулярных соударений, которая лежит в основе метода вероятностных направлений [5,7] перед моделью

Г.Берда [31], состоит в том, что дополнительно рассматриваются групповые соударения и **коллективные эффекты** взаимодействия молекул газового потока при более строгом соблюдении статистики Больцмана. В области преимущественно парных соударений молекул направление движения отдельной статистической молекулы после соударения принимается равновероятным в полном телесном угле 4π стерадиан [29,31]. В области, в которой проявляются групповые соударения молекул, направление движения отдельной молекулы после соударения принимается в полном телесном угле 4π стерадиан в соответствии с выявленной, в [29,31], вероятностной моделью распределения. Принятая вероятностная модель теоретически обоснована и уточнена при согласовании с экспериментальными данными при течении воздуха в длинных круглых трубопроводах при комнатной температуре. Эта модель - количественная оценка влияния коллективного эффекта взаимодействия молекул на вероятностное распределение направление движения отдельной молекулы после соударения.

Результаты, получаемые методом вероятностных направлений на макро-уровне подтверждаются натурными измерениями при исследовании отверстий, длинных и коротких трубопроводов, прямоугольных щелей (рис.2-4). Результаты, получаемые методом вероятностных направлений на микро-уровне, проясняют природу физических явлений и процессов, наблюдающихся на макро-уровне [5,7].

Достоинством данного метода является то, что из общего количества молекул в газовом потоке рассматривается случайная выборка, которая обеспечивает требуемую точность вычислений при статистической обработке по методу Монте-Карло. Это позволяет достаточно легко реализовать данный метод, используя ординарную вычислительную технологию. Модель и метод продолжают уточняться и совершенствоваться [38,39].

2. ВЕРОЯТНОСТНЫЙ ПОДХОД К ЗАДАЧЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЕРЕХОДНОГО ТЕЧЕНИЯ РАЗРЕЖЕННЫХ ГАЗОВ

Рассматриваем стационарное течение, что позволяет, не принимать во внимание фактор времени [32]. Движения молекул имеют вероятностный характер. Отметим, что основная трудность при вероятностном подходе к моделированию течения разреженного газа состоит в приписывании вероятностей элементарным событиям.

Благодаря целостному пониманию физических процессов переноса количества движения в вакуумных системах построена вероятностная инженерно-физическая модель стационарного течения разреженного газа во всем диапазоне молекулярно-вязкостного режима при $0,01 < Kn < 100$.

Вероятностная модель построена в предположении, что молекулярно-вязкостное течение подчиняется статистике Больцмана. Скорости и длины свободного пути молекул (λ_0) распределяются в соответствии со статистикой Максвелла [41]:

$$\lambda_0 = -\lambda \ln(R), \quad (3)$$

где λ - средняя длина свободного пути молекулы, $R \in [0,1]$.

Локальная средняя длина свободного пути (λ) является функцией от значений макропараметров и микропараметров газа: давления, температуры, рода газа: массы и эффективного диаметра молекулы.

В соответствии с динамической теорией кинетических уравнений поток газа (Q) представляется совокупностью N статистически независимых одинаковых молекул, характеризующихся эффективными диаметрами и массами. Совокупность молекул представляется сложной механической системой, состоящей из молекул, каждая из которых является сложной механической системой, состоящей из атомов.

Вероятностная модель построена в согласии с представлениями о хаотическом случайном блуждании молекул в молекулярном режиме и ламинарном течении в вязкостном режиме. Принимается, что при стационарном течении разреженного газа в молекулярно-вязкостном режиме на хаотическое движение молекул, в следствии групповых соударений, накладывается дополнительно постепенно возрастающая при увеличении концентрации молекул, составляющая движения в направлении, определяемым градиентом концентрации и в результате образуется направленный поток. Характер течения через вакуумный элемент, имеющий характерный размер (D), представляется числом Кнудсена (Kn). Число молекул, участвующих в процессе переноса, увеличивается с увеличением отношения характерного размера элемента (D) к средней длине свободного пути молекулы (λ). При уменьшении

числа Кнудсена доля групповых межмолекулярных взаимодействий возрастает, в том числе около стенки трубопровода, в общем числе межмолекулярных соударений.

В соответствии с вероятностным подходом, последовательно моделируются случайные блуждания отдельных статистически независимых молекул в объеме вакуумного элемента и вычисляются интегральные характеристики потока газа с точностью по фактическому числу (N) прослеженных молекул в соответствии со статистическими методами.

Газовый поток (Q), проходящий через вакуумный элемент, рассчитывается:

$$Q = Q_0 P_{\text{э}}, \quad (4)$$

где Q_0 - газовый поток, падающий на входное отверстие, $P_{\text{э}}$ - вероятность прохождения элемента молекулами газа, $P_{\text{э}} = N_2/N$, N - число молекул, движение которых прослеживаем в вакуумном элементе с момента входа в элемент и до момента выхода из него через входные или выходные отверстия, N_2 - число молекул, покинувших элемент через выходные отверстия, N_1 - число молекул, покинувших элемент через входные отверстия.

Начальные условия при моделировании движения каждой молекулы задаются соответствии с кинетической теорией. Траекторию блуждания отдельной «пробной» молекулы в элементе описываем кусочно-линейной функцией, представляющей собой ломанную линию с отрезками равными длине свободного пути молекулы (λ_0) (рис.5). Молекула, столкнувшись с поверхностью элемента, отражается от нее в соответствии с диффузным распределением. В молекулярно-вязкостном режиме возникают условия $\lambda \approx D$, и становится возможным вариант, когда молекула пролетела длину λ_0 и не столкнулась с поверхностью канала. В этом случае моделируется процесс столкновения с другой молекулой. В результате столкновения меняется направление движения молекулы. Новое направление вычисляется случайным образом в соответствии с вероятностной моделью межмолекулярных соударений. Далее, после взаимодействия молекул, моделируется процесс свободного движения молекулы в выбранном направлении. Моделирование блужданий молекулы повторяется до тех пор пока молекула не вылетит через входное или выходное отверстие.

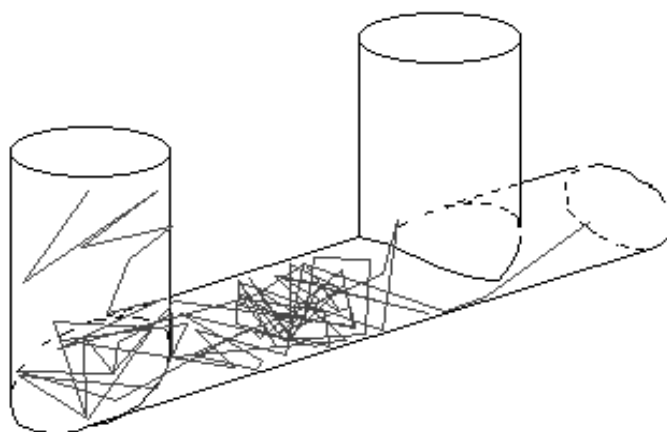


Рис.5 Траектория движения молекулы в вакуумном элементе

Решаем задачу построения вероятностной модели сил межмолекулярного взаимодействия путем построения зависимости вероятностного распределения направляющего движения угла γ (рис.б) после межмолекулярного взаимодействия от числа подобия газового потока (Kn).

При построении вероятностной модели взаимодействия статистического ансамбля молекул при столкновениях используются следующие допущения:

1) Принято, что после межмолекулярного столкновения «пробные» молекулы приобретают случайную скорость, которая имеет локально-максвелловское распределение и направление которой определяется взаимодействием ансамбля молекул;

2) В соответствии с динамической теорией кинетических уравнений малость значений потенциала парного взаимодействия делает возможным описать результат взаимодействия ансамбля молекул, применяя принцип суперпозиции, как линейную комбинацию парных взаимодействий;

3) 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;

Общая потенциальная энергия взаимодействия молекул может быть представлена, в соответствии с принципом суперпозиции, в виде суммы парных потенциалов $u(r_{ij})$, каждый из которых зависит только от расстояния между двумя молекулами. Предполагаем, что существует характерный пространственный масштаб (r) и микрообъем, в общем случае определяемый внутренними свойствами разреженного газа, за пределами которого эффективный потенциал взаимодействия двух молекул практически обращается в нуль. В момент парного соударения,

взаимодействие между рассматриваемой молекулой и группой окружающих молекул находящихся в микроскопическом объеме математически описывается [41]:

$$\phi(\bar{r}_0) = \sum_{j=1}^N F_{ij} \left(|\bar{r}_0 - \bar{r}_j| \right) \quad (5)$$

$$\Phi = \phi + F_i, \quad (6)$$

где $N+2$ – количество молекул в микрообъеме элемента; \bar{r}_j - радиус вектор j -ой молекулы; \bar{r}_0 - радиус вектор рассматриваемой пробной i -ой молекулы, F_i - сила парного взаимодействия рассматриваемой пробной i -ой молекулы и ближайшей к ней, F_{ij} - сила парного взаимодействия окружающих их молекул на i -ю пробную молекулу.

Рассматриваем систему молекул, которые взаимодействуют между собой с силой F_{ij} , имеющей вид:

$$F_{ij} = \frac{g}{r_{ij}^S},$$

где \bar{r}_{ij} - межмолекулярное расстояние или длина корреляции; g и S – физические константы, зависящие от рода молекул.

Рассмотрим реальную физическую систему, в которой молекулы взаимодействуют друг с другом. Рассуждая, что в случае если две молекулы расположены в "цилиндре соударений" на расстоянии, превышающем длину свободного пути и, с геометрической точки зрения, парное соударение неизбежно, и все же оно может не произойти, так как другие молекулы (частицы) газа столкнутся с ними (частицами) прежде, чем они успеют про-взаимодействовать между собой. Эти "другие молекулы" будут экранировать дальние корреляции, и при моделировании течения разреженного газа должно учитываться влияние конечных значений длины корреляций, поскольку, в соответствии с динамической теорией кинетических уравнений, в пространстве есть выделенные направления, вдоль которого корреляции сохраняются даже в том случае, если они превосходят среднюю длину свободного пути.

Описанная экранировка является коллективным эффектом ансамбля молекул, она должна при рассмотрении влияния на поведение молекулы коллективных движений других молекул, находящихся на расстояниях и временах, превышающих длину и время свободного пути, а не только парные взаимодействия.

Учитывая, что вследствие разности концентраций молекул по потоку течения разреженного газа в пространстве возникает выделенное направление, вдоль которого влияние результирующей парных функций взаимодействия между молекулами может сохраняться даже на расстояниях, превосходящих среднюю длину свободного пути, примем, что молекула под воздействием данных сил приобретает дополнительный импульс вдоль градиента концентрации молекул в потоке газа.

Как результат вышеизложенных рассуждений принимаем, что *направленность движения отдельной молекулы после межмолекулярного столкновения формируется под воздействием сил межмолекулярного взаимодействия и в соответствии с принципом суперпозиции по (б).*

Учитывая вышеизложенное видится логичным при соударении молекул на первом этапе приближенно реализовать процесс столкновительной релаксации и перераспределения кинетической энергии молекулы в потенциальную при этом статистически учесть механизм межмолекулярного группового взаимодействия, а на втором реализовать случайный процесс, аппроксимирующий свободное движение молекул в элементе.

Последуем данной схеме вычислительного эксперимента.

При соударении, молекулы под влиянием межмолекулярных сил приобретают некоторый дополнительный импульс по потоку течения разреженного газа:

$$m V_{\phi} = \phi t_m \quad (7),$$

где \vec{V}_{ϕ} - вектор скорости, направляющий движение молекул по потоку течения газа, возникающий под действием силы ϕ , проявляющейся в микроскопическом объеме; m – масса молекулы; t_m – временной параметр.

Направление траектории движения отдельной молекулы после межмолекулярного соударения определяем при сложении вектора скорости $\vec{V}_{\text{ТП}}$, возникающего при межмолекулярном парном соударении одинаковых молекул, направленного равновероятно в полном телесном угле 4π стерадиан случайным образом, возникающего под действием F_i и вектора скорости \vec{V}_{ϕ} , возникающего под действием ϕ при взаимодействии групп окружающих молекул, направленного по потоку течения разреженного газа:

$$\vec{V} = \vec{V}_{\phi} + \vec{V}_{\text{ТП}}, \quad (8)$$

где \vec{V} - направляющий вектор скорости молекулы.

$$\vec{V}_{\text{ТП}} = \frac{\vec{V}_{\text{T}}}{b},$$

где V_T - вектор скорости теплового поступательного движения молекул в соответствии с функцией распределения Максвелла; b – коэффициент перераспределения энергии.

Для этого, учитывая, что при сложении векторов складываются их соответствующие координаты, уравнение (8), описывающее траекторию движения отдельной молекулы после межмолекулярного соударения в локальной декартовой системе координат записываем в каноническом виде:

$$t = \frac{x_2}{\cos \alpha} = \frac{y_2}{\cos \beta} = \frac{z_2}{\cos \xi}, \quad (9)$$

где $x_2 = x_2' + x_2''$; $y_2 = y_2' + y_2''$; $z_2 = z_2' + z_2''$; $\bar{r}_2'(x_2'; y_2'; z_2')$ - единичный безразмерный радиус вектор возможного перемещения молекулы при направляющем векторе скорости $\bar{V}_{\text{ТП}}$; $\bar{r}_2''(x_2''; y_2''; z_2'')$ - радиус вектор возможного перемещения молекулы при направляющем векторе скорости \bar{V}_ϕ ; $\bar{r}_2(x_2; y_2; z_2)$ - радиус-вектор действительного перемещения молекулы при направляющем векторе \bar{V} ; α, β, ξ - направляющие траекторию движения молекулы углы; $\cos \alpha, \cos \beta, \cos \xi$ - компоненты единичного направляющего вектора (направляющие косинусы),

$$\cos \alpha = \frac{x_2}{\sqrt{x_2^2 + y_2^2 + z_2^2}};$$

$$\cos \beta = \frac{y_2}{\sqrt{x_2^2 + y_2^2 + z_2^2}};$$

$$\cos \xi = \frac{z_2}{\sqrt{x_2^2 + y_2^2 + z_2^2}};$$

$t = t_m$ - временной параметр.

Преобразовывая значения в декартовой системе координат в сферическую по правилам аналитической геометрии запишем:

$$\gamma = f(\alpha, \beta, \xi) \quad (10).$$

Моделируем направление траектории движения молекулы.

В области парных соударений молекул ($\Phi \approx \text{Fi}$ по (6)) принимаем, что после того как пробная молекула свободно пролетела внутри элемента расстояние λ_0 ее направление движения молекулы меняется случайным образом равновероятно в телесном угле 4π стерадиан.

В области, в которой проявляются групповые соударения молекул, дополнительно рассматриваются **коллективные эффекты** взаимодействия ансамбля молекул. В этом случае, после того как молекула свободно пролетела внутри элемента расстояние λ_0 , направление движения отдельной молекулы меняется в телесном угле 4π стерадиан случайным образом при распределении направления движения, определяемым теоретически по (5) и уточненным экспериментально на базе следующих положений

Межмолекулярные взаимодействия «внутри» газового потока определяются коллективным эффектом взаимодействия ансамбля молекул. Поскольку число молекул в объеме вакуумного элемента очень велико $\sim 10^{16}$, то реальным и единственно значимым представляется только **вероятностный** учет взаимодействия молекул «внутри» газового потока. Результат **коллективного эффекта** межмолекулярного взаимодействия представляется на уровне его вероятностного статистического учета применительно к совокупности большого числа молекул в соответствии с теорией вероятности. Отметим, что основная трудность при вероятностном подходе к моделированию **коллективного эффекта** взаимодействия ансамбля детерминированных молекул состоит в приписывании вероятностей элементарным событиям.

Решение данной вероятностной задачи видится в том, чтобы выявить вероятностное распределение направлений движения молекул после межмолекулярных соударений «внутри» газового потока, как результат коллективного взаимодействия ансамбля молекул.

Представим вероятностную модель **коллективного эффекта** взаимодействия ансамбля детерминированных молекул:

1) В соответствии с теорией подобия подобие «внутри» стационарного потока разреженного газа в пренебрежении процессами теплообмена и рассмотрении только сил межмолекулярного взаимодействия обеспечивается при равенстве эффективных диаметров молекул при одинаковых числах подобия Кнудсена (Kn) [9];

2) Поскольку при молекулярном режиме наблюдается хаотичное движение молекул, а при вязкостном - ламинарное течение, то существует результирующая сила (Φ) взаимодействия отдельных молекул [41] и ее величина зависит от концентрации молекул в газовом потоке $\phi = \phi(Kn)$;

3) Принимаем, что сила (ϕ), которая определяется коллективным эффектом межмолекулярных взаимодействий ансамбля молекул, преобразует характер движения молекул в потоке газа и придает направленность движению каждой отдельной молекулы по потоку течения разреженного газа;

4) В соответствии с динамической теорией кинетических уравнений молекулы статистически независимы на расстояниях, больших эффективного радиуса взаимодействия [9] и следовательно коллективный эффект межмолекулярных взаимодействий ансамбля молекул сказывается только в момент соударения и перераспределения энергии по степеням свободы;

5) 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 (рис.6), начало которой в точке соударения, будет иметь вид:

$$\frac{x - x_1}{\sin \gamma \cos \varphi} = \frac{y - y_1}{\sin \varphi \sin \gamma} = \frac{z - z_1}{\cos \gamma}, \quad (11)$$

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

Вероятностное распределение угла φ принимаем равномерным случайным образом:

$$\varphi = 2\pi R_1,$$

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

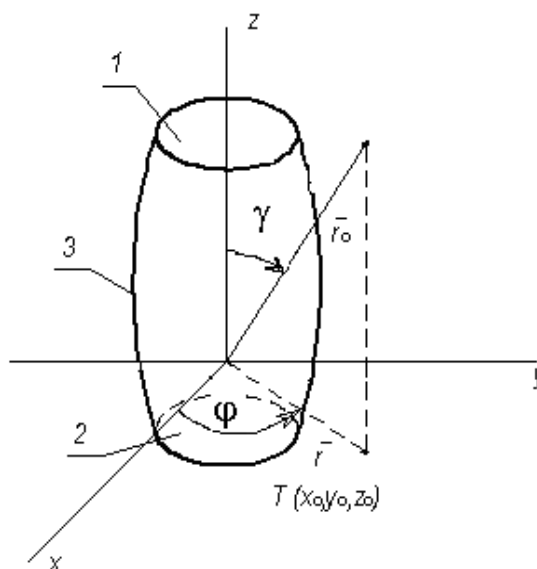


Рис.6. Координаты (радиус-вектор r_0) молекулы $T(\gamma, \varphi, r)$ в локальной сферической системе координат

Вероятностное распределение угла γ выявляем 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 эффекта межмолекулярного взаимодействия группы молекул (Φ) на движение каждой отдельной молекулы после межмолекулярного взаимодействия, который обуславливаем углом $\gamma = \gamma(\Phi(Kn))$, 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 (Kn).

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 соударениях в виде:

$$\gamma = \pi R_2(1 - Pf(Kn)), \quad (12)$$

где R_2 - случайное число, равномерно распределенное в диапазоне чисел от 0 до 1, $Pf(Kn) = Pf(\gamma(\Phi(Kn)))$ - зависимость, характеризующая коллективный эффект взаимодействия группы молекул в процессе преобразования хаотичного движения молекул в ламинарный поток от числа $\delta = 1/Kn$ (Kn - число Кнудсена), $Pf(Kn) \in [0,1]$.

Поскольку в инженерной практике существует неопределенность при задании физических констант при взаимодействиях молекул [41], то зависимость $\gamma = \gamma(\Phi(Kn))$ уточняем экспериментально при подборе соответствия вычисленных значений методом вероятностных направлений (U_v) с относительной погрешностью 5% и данных, которые получены в вакуумных прецизионных измерениях ($U_{из}$). В качестве результата прецизионных вакуумных измерений выбраны данные по проводимости длинных круглых трубопроводов при течении воздуха при комнатной температуре.

Алгоритм выявления коллективного эффекта взаимодействия молекул в зависимости от их концентрации в объеме вакуумного элемента предусматривает дополнительно, в качестве исходных данных при проведении вычислительных экспериментов, варьирование и подбор $Pf(Kn)$ до согласованности с прецизионными данными натуральных экспериментов с точностью 5%.

Вычислительные эксперименты в молекулярно-вязкостном режиме проводятся в соответствии со следующим алгоритмом (рис. 7):

P_1 - ввод исходных данных: давления во входном и выходном сечении элемента и формирование исходных уравнений конфигурации внутренней поверхности элемента; P_2 - преобразование уравнений, задающих конфигурацию внутренней поверхности элемента из локальной системы координат в глобальную; P_3 - организация цикла по числу испытаний N ; P_4 - определение координат молекулы на плоскости входного сечения и направления траектории движения молекулы при входе в элемент; P_5 - определение длины свободного пути молекулы; P_6 - определение местоположения молекулы при межмолекулярном соударении или соударении с внутренней поверхностью элемента; P_7 - проверка условия выхода молекулы из элемента; P_8 - вычисление нового направления траектории движения молекулы; P_9 - проверка окончания цикла по числу испытаний; P_{10} - вывод результатов: вероятности прохождения, проводимости элемента, погрешности вычислительного эксперимента.

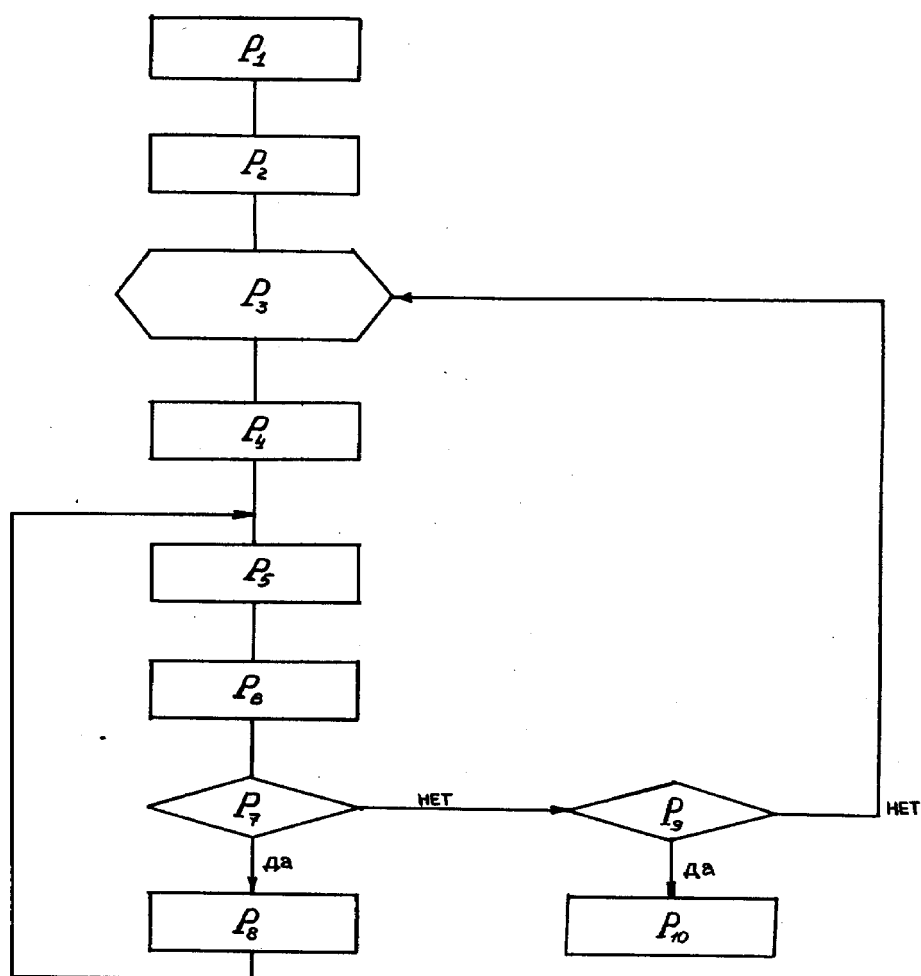


рис. 7. Алгоритм эксперимента по вычислению проводимости методом вероятностных направлений в молекулярном и молекулярно-вязкостном режиме

Отметим, что по данному алгоритму может рассчитываться проводимость и в молекулярном режиме. В этом случае значение N_2 определяется при вычислительных экспериментах (рис.5), в которых прослеживается движение молекул с момента входа в элемент и до момента выхода из него, при этом рассматриваются только соударения со стенками вакуумного элемента, поскольку λ_0 значительно больше характерного размера элемента (D).

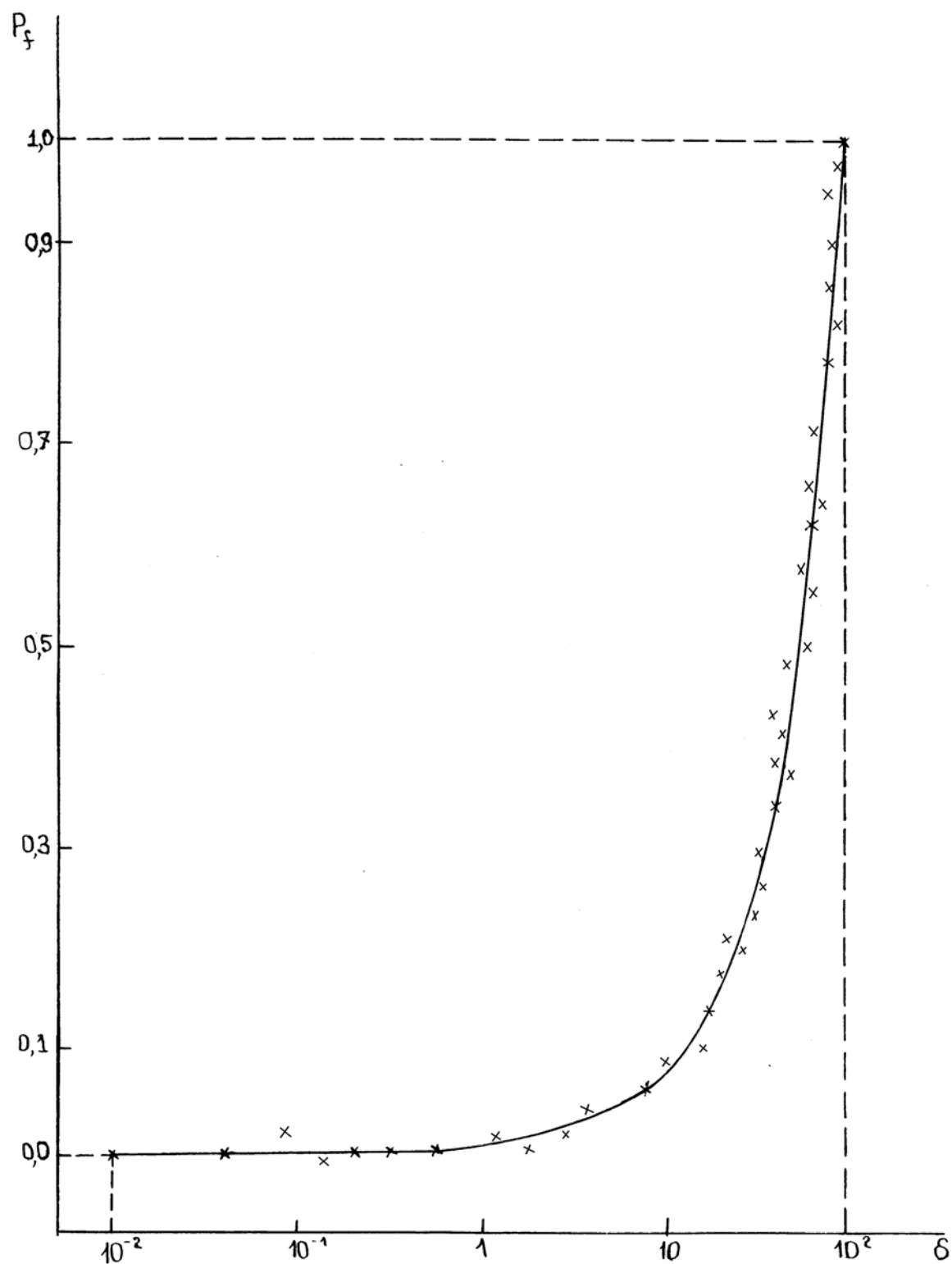


Рис.8 Количественная оценка влияния коллективного эффекта взаимодействия молекул ($P_f = P_f(\delta)$) на вероятностное распределение направляющего траекторию угла γ [29].

По результатам эксперимента вероятностное распределение направляющего траекторию движения молекулы угла γ после межмолекулярного взаимодействия представляем в виде (рис.8):

$$Pf(Kn) = 0,021 \delta^{0,84}, \quad (13)$$

где $Pf(Kn) \in [0,1]$.

Зависимость $Pf = Pf(Kn)$ является качественной и количественной оценкой переходного течения с точки зрения кинетической теории. Может быть интерпретирована как вероятностная интегральная функция распределения направлений векторов скорости молекул в потоке разреженного газа при формировании направленной скорости течения при различных числах Кнудсена во всем диапазоне молекулярно-вязкостного режима при переходе от молекулярного характера течения к ламинарному потоку. Выявленное распределение регулирует процесс преобразования хаотичного движения молекул в ламинарный поток. Эта модель распределения определяет степень направленности движения молекулы по потоку после межмолекулярного взаимодействия в зависимости от концентрации молекул в микрообъеме вакуумного элемента, характеризующейся числом Кнудсена (Kn).

Отметим, наиболее интересные, с точки зрения физики процесса переноса количества движения детерминированными молекулами, результаты экспериментов. При значениях $Kn > 100$ длина свободного пути молекулы значительно больше размеров вакуумного элемента и поэтому соударения молекул наблюдаются только со стенкой этого элемента. При $\delta \cong 0,01$, где $\delta=1/Kn$ (рис.8), кроме соударений со стенкой, дополнительно наблюдаются первые межмолекулярные соударения. При значениях $0,01 < \delta < 0,5$ межмолекулярные соударения, как правило, парные, поскольку направление траектории движения молекулы после межмолекулярного столкновения остается равновероятным в полном телесном угле 4π стерадиан ($Pf = 0$) (рис. 8). Это свидетельствует о том, что коллективный эффект взаимодействия ансамбля окружающих молекул (ϕ) не оказывает влияние на движения отдельных молекул. Таким образом, при значениях $0,01 < \delta < 0,5$ направления движения отдельных молекул изменяются «внутри» потока в основном в результате парных соударений молекул. По существу эта область является областью применимости модели Г.Берда. При $\delta > 0,5$ начинают проявляться эффекты, вызванные групповыми соударениями молекул (ϕ). При групповых соударениях на направление движения молекулы дополнительно оказывает влияние силовое поле межмолекулярного взаимодействия группы окружающих молекул. Однако при значениях $0,5 < \delta < 10$ доля групповых соударений общем числе межмолекулярных соударений невелика до 10% (Pf изменяется от 0 до 0,1) 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 при моделировании. Распределение направлений движения после межмолекулярного столкновения должно вычисляться или для упрощения задачи моделирования приниматься в соответствии с рис.8.

Отметим, что 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 (рис.6):

$$\gamma = \arcsin \sqrt{R_2} \quad , \quad (14)$$

где $R_2 \in [0,1]$

КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ И КАЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ ПЕРЕХОДНОГО ТЕЧЕНИЯ РАЗРЕЖЕННОГО ГАЗА

Проанализируем течение разреженного газа, на качественном и количественном уровне, во всем диапазоне молекулярно-вязкостного режима. Видится, что анализ переходного течения разреженного газа должен осуществляться при одновременном рассмотрении характеристик газовых потоков на микро- и макро-уровне. В качестве наиболее надежных опубликованных данных, примем данные проводимости коротких трубопроводов и щелей, соединяющих два бесконечно больших объема для воздуха при 293К, полученные при натуральных [12-16] и вычислительных экспериментах.

При моделировании наблюдаются следующие процессы.

Движение молекул на микро-уровне согласуется с процессом преобразования хаотичного движения молекул при $Kn > 100$ в ламинарный поток при $Kn < 0,01$. Число молекул, участвующих в процессе переноса между входным и выходным сечениями увеличивается с увеличением отношения диаметра трубопровода D к средней длине свободного пути молекулы (λ), $\delta = D/\lambda$. При $D/\lambda > 0,5$ распределение направления движения после соударения равновероятно. При увеличении D/λ доля групповых взаимодействий увеличивается в общем числе межмолекулярных соударений, в том числе около стенки трубопровода. При $D/\lambda > 0,5$ начинает проявляться тенденция формирования направленной скорости в молекулярно-вязкостном режиме (рис.8).

При рассмотрении процесса движения молекул на микро-уровне 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) с уменьшением значений чисел Кнудсена во всем диапазоне переходного течения, от молекулярного до вязкостного режима (рис.2-4). При отношении длины (L) коротких трубопроводов к диаметру (D) меньше 1 ($L/D < 4$) в условиях $L < \lambda$, $D > \lambda$ наблюдаются следующие явления. На микро-уровне 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. Соответственно, проводимость отверстия или коротких трубопроводов ($L/D < 4$) монотонно возрастает по сравнению с молекулярным режимом (рис.2,4). При уменьшении чисел Кнудсена от 1 до 0,01 значения проводимости продолжают возрастать, но более интенсивно.

На микро-уровне это объясняется тем, что течение, все более преобразуется из хаотичного в ламинарное (рис.9).

При рассмотрении процесса движения молекул на микро-уровне 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.2-4). Вышеназванное явление (парадокс Кнудсена) вызвано тем, что при $D > \lambda$, при $L/D \Rightarrow \infty$ на микро-уровне наблюдается значительное увеличение числа межмолекулярных парных соударений. Это приводит к дополнительным затруднениям при перемещении молекул вдоль трубопровода. значительное межмолекулярных парных соударений,. Такая ситуация приводит к уменьшению числа молекул, которые проходят через элемент, несмотря на то, что увеличивается число молекул, участвующих в процессе переноса. Соответственно, на макро-уровне значения проводимости длинных трубопроводов уменьшаются при изменении чисел Кнудсена от 100 до 1. 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.

Продолжим анализ молекулярно-вязкостного режима при тех же условиях, но при конечных числах L/D ($L/D < 10$). При рассмотрении вышеописанных процессов движения молекул на микро-уровне становится ясно, почему при уменьшении отношения длины к диаметру (L/D) трубопроводов от 40 до 5 зависимость проводимости от числа Кнудсена постепенно сглаживается, значения минимума становятся все менее выраженными и смещаются в направлении увеличения чисел Кнудсена, а для трубопроводов, имеющих $L/D < 4$ - зависимость становится гладкой монотонной, экстремальные значения отсутствуют (рис.2-4). В этом случае при уменьшении длины L молекулы испытывают меньшее число столкновений со стенкой и межмолекулярных соударений при перемещении вдоль трубопровода, чем в длинном трубопроводе. Число молекул, проходящих через вакуумный элемент без соударений также увеличивается. Количество молекул, протекающих через трубопровод возрастает (по сравнению с длинным трубопроводом). При уменьшении отношения длины к диаметру (L/D) трубопроводов от 40 до 8 зависимость проводимости от числа Кнудсена сглаживается и значения минимума смещаются в направлении увеличения чисел Кнудсена. При уменьшении L/D до 4 значения проводимости элемента практически перестают уменьшаться. При значениях $L/D < 4$ зависимость $J_{mv}(L/D; \delta)$ не имеет минимума и является монотонно возрастающей (рис.2, 4).

Обратим внимание, что при $\delta \cong 100$ направление движения молекул ориентировано по потоку течения разреженного газа. Это значение δ и есть граница «молекулярно-вязкостный вязкостный» режим наблюдаемый на микро-уровне.

При рассмотрении процесса движения молекул на микро-уровне становится ясным вопрос о природе явления, наблюдаемого в условиях границы «молекулярно-вязкостный режим - вязкостный режим» при $Kn \cong 0,01$: влияние длины (L) на проводимость вакуумных элементов ослабевает, а проводимости отверстия, короткого и длинного трубопровода, имеющие одинаковый диаметр, стремятся к одинаковым значениям (рис.1,3). Это объясняется, в соответствии с предлагаемой моделью, тем, что поскольку при $\delta \cong 100$ ($Kn = 0,01$) $Pf = 1$ (рис.9), молекулы при межмолекулярном соударении направлены по потоку ($\gamma = 0$) в соответствии с (12), поэтому $N_2 \Rightarrow N$ (кроме межмолекулярных соударений, определяемых по (12) имеются соударения молекул со стенкой (распределяемые диффузно по (14)), откуда $Re \Rightarrow 1$ и, следовательно, $Q \Rightarrow Q_0$ в соответствии с (4). На микро-уровне наблюдаем, что большинство молекул падающих на входное сечение вакуумного элемента проходят его, из-за того что течение становится практически ламинарным. При уменьшении чисел Кнудсена от 1 до 0,01 проводимость длинных и коротких круглых трубопроводов ($J_{mv}(L/D; \delta)$) монотонно возрастает (рис.2, 4) по двум причинам: увеличивается количество молекул, участвующих в процессе переноса; течение становится все более направленным. Вблизи границы «молекулярно-вязкостный вязкостный» режим движение молекул становится практически направленным. Большинство молекул, падающих на входное сечение и участвующих в процессе переноса, проходят элемент независимо от длины элемента. На макро-уровне, значения проводимости коротких и длинных трубопроводов сближаются.

При течении разреженного газа через щель при $L/D \Rightarrow \infty$ (рис.9) при уменьшении чисел Кнудсена от 100 до 1 возникают условия $D < \lambda$, здесь D - наименьшее расстояние между параллельными поверхностями, $Kn = \lambda/(2D)$. С уменьшением Kn на микро-уровне наблюдаются следующие процессы: число молекул, проходящих элемент без соударений, практически равно 0; количество соударений с поверхностью значительно больше, чем межмолекулярных соударений; число молекул, участвующих в процессе переноса между поверхностями увеличивается. Проводимость элемента практически не изменяется до тех пор пока не возникнут условия $D > \lambda$ (рис.9). В условиях $Kn < 1$ наблюдается рост проводимости, который объясняется в том числе и формированием направленности течения.

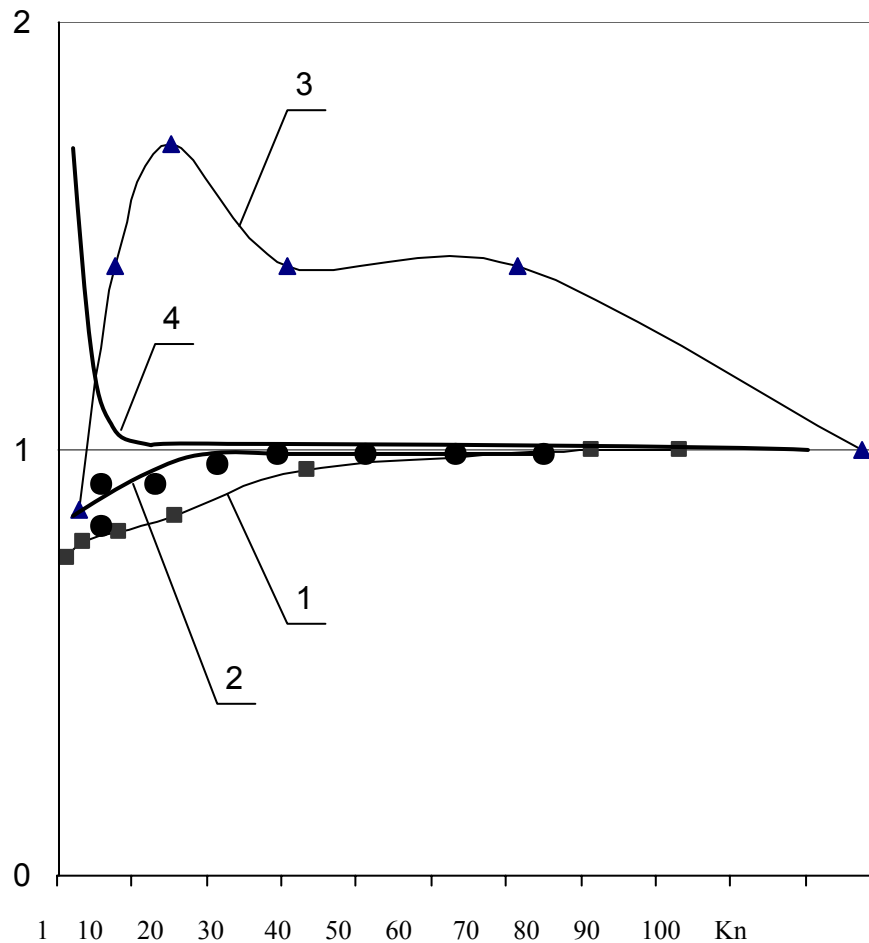


Рис. 9 Зависимость безразмерной проводимости (J_m) вакуумных щелей в молекулярно-вязкостном режиме от степени разреженности (Kn): 1 - натурные эксперименты [12]; 2 - метод вероятностных направлений, 3 - метод прямого моделирования [36,37], 4 - полуэмпирическая формула [14].

Отметим, объяснение факта, что в области границы молекулярно-вязкостного и вязкостного течения (рис.3) влияние длины (L) на проводимость каналов ослабевает так же может быть дано на базе теории пограничного слоя модели сплошной среды следующим образом. Запишем выражение для расчета длинного цилиндрического трубопровода (U_d) при вязкостном режиме, которое впервые было получено О.Е.Майером в 1866г. методами механики сплошной среды и экспериментально подтверждено для трубопроводов при соотношении длины (L) к диаметру (D) большем 300, в виде [1]:

$$U_d = 1,36 \cdot 10^3 \cdot p \cdot D^4 / L \quad (7),$$

где p - среднее давление в трубопроводе.

Выражение для расчета проводимости коротких ($L/D < 300$) цилиндрических вакуумных трубопроводов (U_k) были получены С.Дешманом при применении результатов

моделирования течения несжимаемой жидкости на основе теории пограничного слоя, которое запишем в виде [2]:

$$U_k = (1,36 \cdot 10^3 \rho D^4 / L) / K, \quad (8)$$

где $K = 1 + a Q/L$, a - постоянная, зависящая от рода газа.

Поделив (7) на (8) получим:

$$U = (1 + a Q / L), \quad (9)$$

где U - безразмерная величина проводимости в вязкостном режиме, которую определяем как отношение значений проводимости длинного трубопровода к значению проводимости короткого трубопровода.

Поскольку $Re = b Q/D$, где b - постоянная, зависящая от рода газа, то (9) запишется:

$$U = (1 + c Re D/L), \quad (10)$$

где c - постоянная, зависящая от рода газа.

В области вышеназванной границы возникают условия, когда длина свободного пути молекулы сравнима с диаметром трубопровода. Это приводит к тому, что при тех значениях потоков, которые имеются в реальных вакуумных системах, вязкость разреженного газа мала и числа Рейнольдса (Re) стремятся к нулю. Из (10) следует, что при числах Рейнольдса (Re) стремящихся к нулю, $U \Rightarrow 1$ и, следовательно, длина не оказывает влияние на проводимость элемента.

Измерения проводимости круглых коротких трубопроводов при откачке воздуха при комнатной температуре, проведенные в вязкостном режиме, подтверждают существование зависимости (10) [19], где

$$G = \frac{10^3 * L}{Re * D},$$

Как показывают результаты исследований при значениях $G = G(L/D, Re)$ больше 100 для трубопроводов с соотношением L/D от 0,1 до 40 значения U близко к единице (рис.4). Следовательно, в этих условиях ($G > 100$) вакуумные трубопроводы с соотношением L/D от 0,1 до 40 можно рассматривать как длинный без учета дополнительной поправки.

Таким образом, объяснение факту, что в области границы вязкостного и молекулярно-вязкостного течения длины трубопроводов можно не принимать во внимание при вакуумных расчетах, вытекает из результатов натурных и теоретических исследований, полученных при приближении к вышеназванной границе со стороны как молекулярно-вязкостного, так и вязкостного режимов.

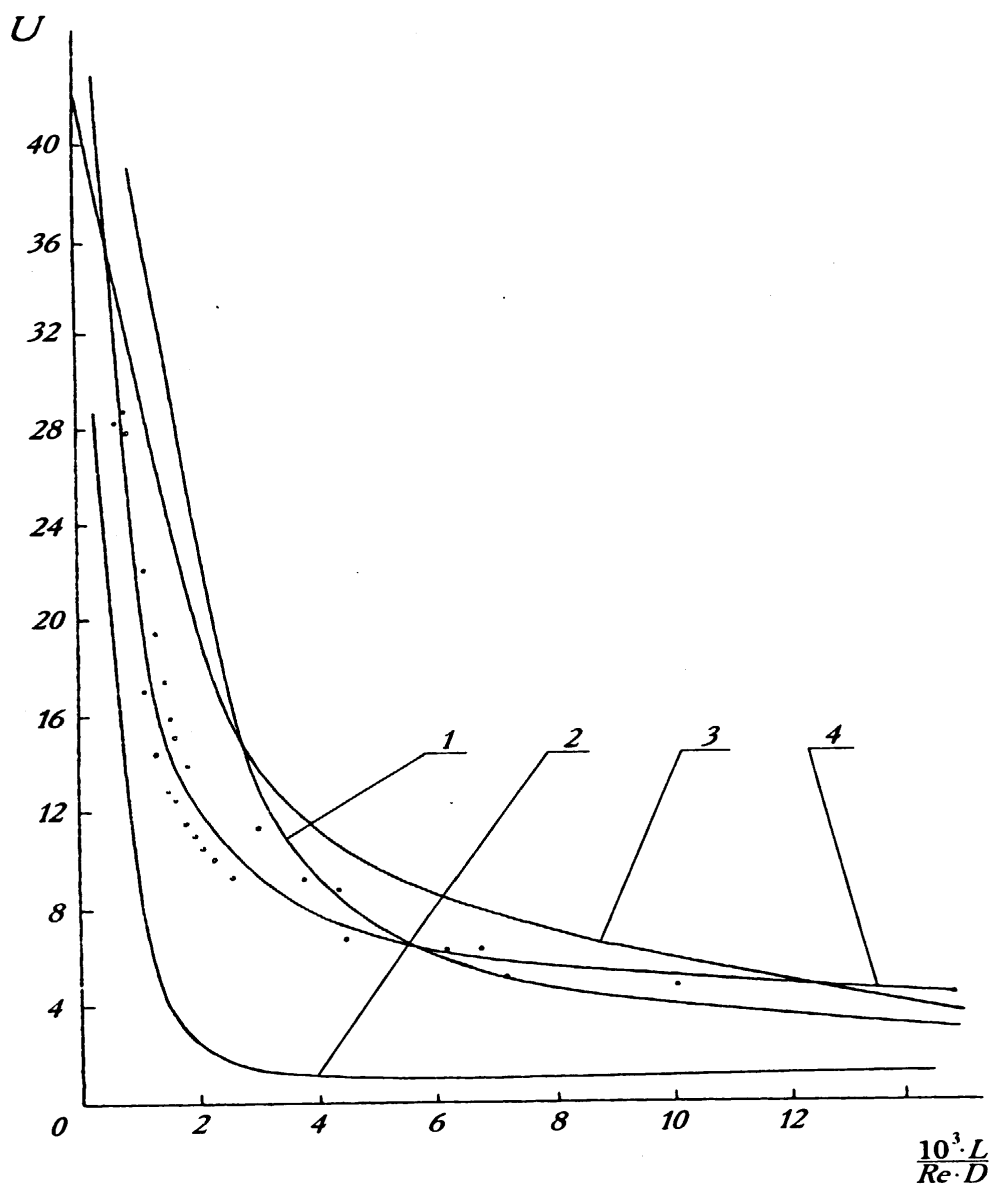


рис. 4. Проводимость короткого трубопровода в вязкостном режиме: кривые 1,2 - из теории пограничного слоя для несжимаемой жидкости[2]; 3,4 - из натуральных экспериментов для разреженного газа[19].

Отметим, что по результатам натуральных экспериментов коэффициенты «а» и «с» в формуле (8) и (10) уточнены; $c = 0,05$ [19].

Заключение

Проблема разработки модели переходного течения во всем диапазоне молекулярно-вязкостного режима, которая будет принята вакуумным сообществом, является по-прежнему нерешенной актуальной проблемой.

Проблема качественного и количественного анализа переходного течения разреженного газа затрагивает физические основы теории со скольжением, теории диффузии газов, статистики Больцмана. Любое продвижение в ее решении является ценным.

Верификация моделей и методов в динамике разреженных газов, выполненная в [8,35], 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 и прямого статистического моделирования. Такой подход является формальным, т.к. не имеет физической интерпретации. Физические модели, положенные в основу этих методов никак не согласуются.

Сравнение данных из различных литературных источников (рис.2-4) показало, что имеется основание считать модель и метод вероятностных направлений верифицированными:

- согласуется с кинетической и континуальной теорией на макро-уровне;
- модель и метод вероятностных направлений обоснован на базе фундаментальных положений кинетической теории динамики газов, соответствует статистике Больцмана и согласуется с диффузионной теорией газов;
- физическая модель, лежащая в основе метода, согласуется с моделями молекулярного и вязкостного течения на микро-уровне;
- учитываются не только парные, но и групповые соударения молекул;
- объясняет парадокс Кнудсена и факт отсутствия влияния длины на проводимость вакуумных элементов в условиях границы «молекулярно-вязкостный вязкостный» режим;
- результаты, полученные методом вероятностных направлений совпадают, на качественном уровне, с данными, полученными методом прямого моделирования и при решении линеаризованного уравнения Больцмана, согласуются с натурными экспериментами с точностью 15%.

Данный метод целесообразен для внедрения в практику инженера-вакуумщика.

Для инженерных вакуумных расчетов результаты экспериментов (рис.2-4) по вычислению безразмерной проводимости круглых коротких трубопроводов в молекулярно-вязкостном режиме (J_{mv} - отношение вычисленного значения проводимости вакуумного

трубопровода к проводимости этого же элемента в молекулярном режиме) для воздуха при комнатной температуре могут быть обобщены в виде формулы:

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

, где

$$G = \frac{4,7 \cdot 10^{-3}}{Kn} \left(1 + 2,1Kn^{0,25} \frac{D}{L} \right)$$

Обратим внимание, что при проведении вычислительных экспериментов применялся диффузный закон отражения от стенок, который не согласуется с теорией со скольжением. Поскольку результаты прецизионных вакуумных измерений, проводимых с погрешностью 5% и вычислительных экспериментов, проводимых с погрешностью 5% по определению проводимости металлических коротких круглых трубопроводов удовлетворительно совпали, то это дает основание более строго рассмотреть существующие представления [11] о влиянии твердой стенки в условиях, когда длина свободного пути молекулы сравнима с диаметром трубопровода при числах Кнудсена от 0,1 до 0,01.

Видится, что физический процесс откачки в вакуумных системах наиболее реалистично моделировать по методу вероятностных направлений, поскольку представляется, что положенная в основу данного метода инженерно-физическая модель, объясняет **природу** физического процесса переходного течения разреженного газа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Гейнце В.** Физические основы вакуумной техники.-М.-Л.: Государственное энергетическое издательство. -1960.- 511 с.
2. **Дэшман С.** Научные основы вакуумной техники.-М.: Мир, 1964.-873 с.
3. **Livesey R.G.** Foundations of Vacuum Science and Technology, New York: Wiley (edited by J.M.Lafferty), 1998, p.213.
4. **Кузьмин В.В.** Физика вакуума. СПб.: Изд-во СПбГТУ, 2000. 36с.
5. **Печатников Ю.М.** Инженерно-физическая модель газовых потоков при среднем вакууме // Журнал технической физики. 2003. 8. С.40-45
6. **Pollard W.G., Present R.D.** On Gaseous Self-Diffusion in Long Capillary Tubes // Physical Review. 1948. V.73, N.7, P.762-774.
7. **Печатников Ю.М.** Вероятностная модель и метод моделирования газовых потоков через вакуумные элементы при молекулярно-вязкостном режиме // Инженерная физика. 2003. 2. С.32-36
8. **Гусев В.Н., Егоров И.В., Ерофеев А.И., Провоторов В.П.** Верификация моделей и методов в динамике разряженных газов. // Механика жидкости и газа.1999, № 2, с.128-137.
9. **Черчиньяни К.** Теория и приложения уравнения Больцмана М.: Мир, 1976.- 496 с.
10. **Кошмаров Ю.А., Рыжов Ю.А.** Прикладная динамика разреженного газа. М.: Машиностроение, 1977.- 184 с.
11. **Kennard E.H.,** Kinetic Theory of Gases with an Introduction to Statistical Mechanics, New York, 1938 245p.
12. **Porodnov B.T., Suetin P.E., Borisov S.F., Akinshin N.D** Experimental investigation of rarefied gas in different channels // Journal of fluid Mechnics.-1974.-v. 64, part 3.- P. 417-437
- 13 **Santeler D.J.** Gas-flow experiments in the transition region // Journal of Vacuum Science and Technology A 12(4), 1994, p.1744-1749
14. **Livesey R.G.** Method for calculation of gas flow in the whole pressure regime through ducts of any length. // J.Vac.Sci.Technol. 2001. A 19, (4), Jul/Aug, P.1674-1678
15. **Беляев Л.А.** К расчету N-компонентных вакуумных систем. // Вакуумная техника и технология. 2002. т.12, №4, С. 215-224.
16. **Ханнанов Р.Б.** Экспериментальное исследование откачных параметров и разработка метода расчета двухроторного вакуумного насоса в условиях низкого вакуума// Автореферат диссертации на соискание ст. к.т.н..-Казань, 2001, 20с

17. **Ануфриев В.И., Маркеев Б.Н.** Проводимость длинного канала при конечных числах Кнудсена // Физика и техника высокого вакуума. Тез. докл. Всесоюзн. науч.-техн. конф.-Л., 1985.- с. 74
18. **Демихов К.Е., Никулин Н.К.** Математическая модель течения газа в проточной части молекулярновязкостного вакуумного насоса// Вакуумная наука и техника: Докл.науч.техн.конф. М.-: МИЭМ. 2001. С.325-326
19. **Печатников Ю.М.** Расчет проводимости вакуумных систем (Обзор) // Вакуумная техника и технология. 1996. т.6, №2 С. 5-14.
20. **Печатников Ю.М.** Современные методы расчета характеристик вакуумных агрегатов для среднего вакуума (Обзор) // Вакуумная техника и технология. 2002. т.12, №4, С. 227-234.
21. **Davis D.H.** Monte Carlo calculation of molecular flow rates through cylindrical elbow and pipes of othershops // Journal of Applied Physics.-1960,v. 31, N. 7.-P. 1169-1176
22. **Haviland J.K., Lavin M., Trilling L.** Application of the Monte-Karlo method to rarefied gas flows, Arch.mech.stosowaney, 1962, vol.14, No.3-4, p.538-591.
23. **Иванов В.П., Неймарк Ю.И.** Некоторые методы расчета стационарного движения разреженного газа // Механика жидкости и газа "Механика жидкости и газа "Известия АН СССР".-1967.- N 4.-С. 9-18.
24. **Демихов К.Е., Бойков Л.В.** Теоретическая модель процесса переноса молекул газа каналом молекулярного вакуумного насоса в молекулярно-вязкостном режиме течения газа // Состояние и перспективы развития вакуумной техники: Тез. докл. Всесоюзн. научн.-техн. конф.- Казань, 1991.-с. 47
25. **Haviland J.K.** The solution of two molecular flow problems by the Monte - Carlo method.// Methods in Computational Physics.-1965, v.4. - P. 109-209.
26. **Породнов Б.Т., Нусинзон Л.М., Неудачин И.Г., Калинин В.В.** Расчет проводимости коротких труб в свободномолекулярном и промежуточном режимах течения газа // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика и техника высокого вакуума .- Харьков: ХФТИ, 1977.-вып.2(8).-С.82-8320.
27. **Лойцанский Л.Г.** Механика жидкости и газа. - М.: Наука, 1987. - 840 с.
28. **Булыга А.В.** Элементы релаксационной теории переноса в разреженных газах // Физика и техника вакуума: сб. Казанского гос. унив.- Казань, 1974 .- С. 14-19
29. **Печатников Ю.М.** Статистическое моделирование стационарного течения разреженного газа через вакуумную трубопроводную арматуру при молекулярно-вязкостном режиме // Инженерно-физический журнал, 1992, 6, с.673-676

30. **Нусинзон Л.М., Породнов Б.Т., Суетин П.Е.** Решение задач о течении газа по цилиндрическим капиллярам в промежуточном режиме методом Монте-Карло // *Механика жидкости и газа.*- 1977.- N 1.- с.187-190
31. **Печатников Ю.М.** Статистическое моделирование течения разреженного газа вблизи молекулярного режима // *Электронная техника. Сер.4. Электровакуумные и газоразрядные приборы, МЭП СССР, 1991, вып.4.- С.67-69*
32. **Печатников Ю.М.** Вычислительно-эвристический подход к расчету и проектированию вакуумных систем // *Научно-технические ведомости С.ПбГТУ.-2002, N1, с.80-87*
33. **Мосс Дж.Н., Берд Г.А.** Расчет методом Монте-Карло течения во входном канале масс-спектрометра, установленного на КЛАМИ <СПЕЙС-ШАТТЛ> // *Аэрокосмическая техника. 1989. 3. С.11-19*
34. **Захаров В.В., Лукьянов Г.А., Ханларов Г.О.** Параллельные алгоритмы прямого моделирования Монте-Карло в молекулярной газовой динамике. СПб. Из-во Институт высокопроизводительных вычислений и баз данных. 1999. 21с.
35. **Ребров А.К.** Динамика расширения газа в вакуум // *Современное состояние вакуумной техники: Сб.докл.семинара. Харьков: ИПЦ «Контраст», 2001 С.6-15.*
36. **Godela Scherer-Abreu, Raul A Abreu** Numerical modelling of the molecular and transitional flow regimes in vacuum components.// *Vacuum. 1995. N.8-10. P.863-866*
37. **Ерофеев А.И., Коган М.Н., Фрилендер О.Г.** Течение разреженного газа сквозь пористый слой // *Механика жидкости и газа.- 1999.- N 5.- с.193-204.*
38. **Печатников Ю.М.** Расчет проводимости сложных элементов при среднем и низком вакууме. // *Вакуумная наука и техника: Докл.науч.техн.конф. М.-: МИЭМ. 2002.С.51-54.*
39. **Ю.М. Печатников** Вероятностная модель и метод расчета потоков разреженного газа при молекулярно-вязкостном режиме // *Современное состояние вакуумной техники: Сб.докл.межд.конф. Харьков: ИПЦ «Контраст», 2003, С.6-15*
40. **Bird G.A.** *Molecular Gas Dynamics Oxford: Clarendon Press, 1976. 238 p.*
41. **Грошковский Я.** *Техника высокого вакуума.-М.:Мир, 1975.-620 с*

Ю.М. Печатников Расчет сложных элементов вакуумных систем в
молекулярно-вязкостном режиме течения разреженного газа. СПб: Типография
Светлана 40с

© Ю.М. Печатников, E-mail: yiry@nm.ru, 2002

СПб: Типография Светлана