

На правах рукописи

Печатников Юрий Михайлович

**Стохастическая мезо-модель стационарного процесса откачки
вакуумных систем и их элементов в молекулярно-вязкостном режиме**

специальность: 05.04.06 - Вакуумная, компрессорная техника
и пневмосистемы

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени доктора технических наук

Санкт-Петербург -2009

Работа выполнена в ГОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный
политехнический университет»

Научный консультант: доктор технических наук, профессор Розанов Л.Н.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор	Эндер Андрей Яковлевич
доктор технических наук, профессор	Саксаганский Георгий Леонидович
доктор технических наук, профессор	Измайлов Рудольф Александрович

Ведущая организация: НИИ ВТ им.С.А.Векшинского, 113105, г.Москва, Нагорный пр., д.7

Защита состоится «_9_» июня_2009_г. в_16_часов на заседании диссертационного совета Д 212.229.09 ГОУ ВПО "Санкт-Петербургский государственный политехнический университет" по адресу: г. С.Петербург, Политехническая ул., д.29, Главное здание, а._____

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке ГОУ ВПО "Санкт-Петербургский государственный политехнический университет"

Автореферат разослан «__»_____2009 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета _____Хрусталева Б.С.

Общая характеристика

Цель и актуальность диссертационной работы

Многие великие ученые внесли весомый вклад в развитие физико-математических методов расчета характеристик течения разреженного газа. Наиболее значительный вклад в развитие методов моделирования откачиваемого газа в молекулярно-вязкостном режиме внесли: **Кнудсен М., Present R.D., Pollard W.G., Демихов К.Е., Саксаганский Г.Л., Нестеров С.Б., Борисов С.Ф., Кеменов В.Н., Бурмистров А.В., Кузьмин В.В., Розанов Л.Н., Породнов Б.Т., Santeler D.J., DeMuth S.F., Watson J.S., Суэтин П.Е., Нусинзон Л.М., Неудачин И.Г., Калинин В.В., Панфилович К.Б., Никулин Н.К., Ершов Б.Е., Sharipov F., G. Scherer-Abreu, Abreu R.A., Васильев В.К., Андросов А.В., Щенев В.В. и другие ученые.**

В 2003г. в Испании и 2007г. в Швеции состоялись международные конференции по современным проблемам «Расчета и моделирования вакуумных систем (*Vacuum Gas Dynamics*)». На этих конференциях обсуждались сложность и актуальность разработки модели течения откачиваемого газа в элементах вакуумных систем (ЭВА) в молекулярно-вязкостном режиме. Вообще говоря, фундаментальная задача построения модели процесса откачки во всем диапазоне молекулярно-вязкостного режима имеет «давние корни». «Очень высокую» научную значимость и практическую ценность ее решения показали **С.Дэшман, В.Гейнце, R.G.Livesey** в своих учебниках и монографиях, посвященных научным основам и базовым понятиям вакуумной техники.

Отсутствие физически ясной имитационной модели течения откачиваемого газа в молекулярно-вязкостном режиме ставит под сомнение достоверность вычислительных методов, которые на них основаны. В связи с этим, в основном, проводится большой объем натуральных экспериментов.

Недостаток существующих знаний о процессе откачки в молекулярно-вязкостном режиме оказывает существенное негативное влияние на развитие эффективных инженерных методов моделирования проводимости при среднем вакууме. Это вызывает необходимость развивать, в первую очередь, теоретическую базу моделирования процесса откачки в молекулярно-вязкостном режиме.

В настоящее время техника получения среднего вакуума приобретает все большее значение в связи с необходимостью развития нано-технологий, водородной энергетики, робототехники, спектрометрии, электронной техники, атмной техники и других отраслей промышленности. Расчет и моделирование проводимости вакуумных систем и их элементов (ЭВА) в зависимости от условий течения откачиваемого газа является фундаментом для

развития вакуумной техники. Возможность достоверно рассчитать и оптимизировать параметры ЭВА позволяет разрабатывать средства откачки или элементы проточной части насосов на новых принципах, создавать более совершенные конструкции ЭВА.

Таким образом, научная задача построения модели молекулярно-вязкостного течения откачиваемого газа **с целью** развития эффективных методов расчета проводимости ЭВА актуальна, имеет существенную научную и практическую ценность.

Объектом научного исследования является процесс откачки в молекулярно-вязкостном режиме.

Предметом научного исследования является стохастическая мезо-модель процесса откачки в молекулярно-вязкостном режиме.

Основные научные проблемы и теоретические задачи исследования.

Цели диссертации предполагается достигнуть путем теоретического обобщения существующих знаний о процессе откачки и проводимости ЭВА в молекулярно-вязкостном режиме, и их *расширения*, изучая динамику процесса откачки, применяя анализ и имитационное моделирование течения откачиваемого газа.

Для построения модели процесса откачки в молекулярно-вязкостном режиме необходимо решить следующие широко известные и научно значимые фундаментальные проблемы:

- теоретически описать динамику процесса откачки и характер изменения проводимости вакуумных систем в молекулярно-вязкостном режиме;
- согласовать модели расчета проводимости ЭВА в молекулярном и вязкостном режимах.

В диссертации решаются эти научные проблемы на базе представлений о молекулярном упорядоченном хаосе, всегда присутствующем на мезо-уровне в молекулярно-вязкостном потоке откачиваемого газа. Такое направление исследований вызывает необходимость решить следующие теоретические задачи:

1. Описать упорядоченные и хаотические процессы в молекулярно-вязкостном потоке откачиваемого газа.
2. Связать (содержательно и математически строго) между собой упорядоченную и хаотическую составляющие молекулярно-вязкостного потока откачиваемого газа.
3. Сформулировать(содержательно и математически строго) критерии упорядоченности хаоса в потоке откачиваемого газа.
4. Увязать проводимость ЭВА, геометрические размеры ЭВА, средние характеристики потока откачиваемого газа на базе критериев упорядоченности хаоса.
5. Сформулировать закономерности, которые преобразовывают вязкостный поток откачиваемого газа в молекулярный.

Научное направление и методы исследования.

Процесс откачки в молекулярно-вязкостном режиме изучается на мезоскопическом уровне на базе представлений о молекулярном упорядоченном хаосе, всегда присутствующем на мезо-уровне в молекулярно-вязкостном потоке откачиваемого газа. В этом случае, динамика процесса откачки моделируется на базе физики открытых систем с диссипативной структурой. Стационарный газовый поток моделируется как *«неравновесный броуновский» упорядоченно-хаотический процесс* на базе принципов кинетической теории флуктуаций на мезоскопическом уровне представления в согласии с динамикой необратимых процессов и гипотезой молекулярного хаоса. *Проводимость ЭВА вычисляется на базе статистики, описывающей упорядоченность хаоса в потоке откачиваемого газа.* Новые явления в процессе откачки устанавливаются при взаимоувязке макро-параметров ЭВА, макро- и мезо-характеристик откачиваемого газа путем «совместного использования анализа и численного компьютерного моделирования».

Применялись методы теории хаоса и теории вероятности, методы статистики и подобия, методы оптимизации и принятия решений в условиях неопределенности.

Методология исследования требует последовательно выполнить следующие этапы:

1. Построить мезо-модель динамики процесса откачки;
2. Математически описать динамику процесса откачки ЭВА;
3. Построить имитационную мезо-модель процесса откачки;
4. Разработать и верифицировать вероятностный метод расчета проводимости ЭВА;
5. Промоделировать и вычислить проводимость ЭВА различных форм и размеров во всем диапазоне молекулярно-вязкостного режима;
6. Проанализировать во взаимосвязи и взаимоувязке макро-параметры ЭВА и средние характеристики (мезо-характеристики) ансамбля молекул откачиваемого газа.

Методология исследования предполагает, что данные по проводимости ЭВА использованы из прецизионных натуральных измерений, а средние характеристики откачиваемого газа (мезо-характеристики) вычисляются при имитационном моделировании.

Теоретические положения и результаты, выносимые на защиту:

Следуя выбранному направлению исследований в диссертации теоретически описана динамика процесса откачки и характер изменения проводимости вакуумных систем при молекулярно-вязкостном режиме на базе кинетической теории флуктуаций и теории хаоса. В результате разработаны следующие теоретические положения:

1. Динамика течения откачиваемого газа в молекулярно-вязкостном режиме в ЭВА моделируется на мезо-уровне как упорядоченно-хаотический процесс с разной степенью

упорядоченности хаоса, от полностью упорядоченного (ламинарного, вязкостного течения) до полного хаоса (молекулярного течения).

2. Эволюция ансамбля молекул откачиваемого газа представляется как последовательность (цепь следующих друг за другом) неравновесных стационарных состояний, каждое из которых имитируется как «*неравновесный броуновский*» процесс.

3. Проводимость ЭВА вычисляется на базе статистики, описывающей упорядоченность хаоса в потоке откачиваемого газа.

Из этих теоретических положений следует, что разная физическая сущность равновесного и неравновесного «перехода от порядка к хаосу», который формируется при переходе от вязкостного режима к молекулярному вводит существенные принципиальные ограничения на применение пространственно-однородного уравнения Больцмана (в том числе аппроксимации Г.Берда) при математическом описании процесса откачки.

На базе вышеперечисленных теоретических положений:

- сформулирован (содержательно и математически строго) критерий упорядоченности хаоса в потоке откачиваемого газа при переходе от вязкостного режима к молекулярному, и наоборот.
- описаны на мезо-уровне и связаны (содержательно и математически строго) между собой вязкостная (упорядоченно-хаотическая) и молекулярная (хаотическая) составляющие молекулярно-вязкостного режима в потоке откачиваемого газа;
- сформулированы на базе «статистики мезо-уровня» (содержательно и математически строго) закономерности, моделирующие динамику процесса откачки от ламинарного (вязкостного) течения к хаосу молекулярного потока откачиваемого газа при плавной непрерывной смене чисел Кнудсена от 0,001 до 100;
- взаимосвязаны (содержательно и математически строго) проводимость ЭВА, геометрические размеры ЭВА, средние характеристики потока откачиваемого газа на базе критерия упорядоченности хаоса.

В результате решена крупная фундаментальная задача: построена и верифицирована стохастическая мезо-модель процесса откачки в молекулярно-вязкостном режиме, которая включает:

1. Мезо-модель динамики процесса откачки в молекулярно-вязкостном режиме, в которой молекулярная и вязкостная составляющие молекулярно-вязкостного потока откачиваемого газа описаны и взаимосвязаны между собой на мезо-уровне в согласии с динамикой необратимых процессов и гипотезой молекулярного хаоса;

2. Описание процесса течения откачиваемого газа в ЭВА в молекулярно-вязкостном режиме на базе вероятностных понятий и «статистики мезо-уровня», которая отражает динамику постепенного преобразования ламинарного (упорядоченного) течения при вязкостном режиме в хаотичное при молекулярном режиме при увеличении чисел Кнудсена от 0,001 до 100;

3. Имитационную мезо-модель и методику имитационного моделирования «неравновесного броуновского» стационарного процесса течения откачиваемого газа и вычисление проводимости в молекулярно-вязкостном режиме на базе:

- стохастических закономерностей при генерации элементарных случайных событий методом Монте-Карло;
- «статистики мезо-уровня», отражающей упорядоченность хаоса в потоке откачиваемого газа во всем диапазоне молекулярно-вязкостного режима.

На базе построенной мезо-модели, применяя анализ и численную компьютерную имитацию для «изучения динамики процесса откачки при молекулярно-вязкостном режиме»:

1. Решена крупная фундаментальная научная проблема: согласованы модели молекулярного и вязкостного режимов.

2. Сделаны крупные научные достижения:

- установлено, что в процессе откачки возникают эффекты коллективного взаимодействия нейтральных молекул, вызывающие хаотические и упорядоченные процессы в потоке откачиваемого газа, протекающего через ЭВА;
- установлена «статистика мезо-уровня», которая описывает изменение степени упорядоченности хаоса при постепенном преобразовании ламинарного течения при вязкостном режиме к хаосу случайного в молекулярном режиме;
- установлены новые закономерности и явления, возникающие в процессе откачки в молекулярно-вязкостном режиме: теоретически установлено и объяснено явление «молекулярной сверхпроводимости», теоретически объяснены парадокс Кнудсена и другие «парадоксы поведения» проводимости ЭВА, наблюдаемые при натурных измерениях.

Научная новизна и научная ценность:

1. Содержит новое направление:

- процесс откачки в молекулярно-вязкостном режиме изучается и моделируется на базе представлений о молекулярном упорядоченном хаосе, всегда присутствующем на мезо-уровне;
- проводимость ЭВА в молекулярно-вязкостном режиме вычисляется на базе критериев упорядоченности хаоса в потоке откачиваемого газа;

2. Сформулированы содержательно и математически строго закономерности, моделирующие непрерывный переход от ламинарного (вязкостного) течения к хаосу молекулярного потока откачиваемого газа при смене критерия упорядоченности хаоса;
3. Математически описаны и связаны между собой упорядоченные и хаотические процессы в потоке откачиваемого газа в молекулярно-вязкостном режиме на базе вероятностных понятий и статистики мезо-уровня;
4. Сформулированы на базе «статистики мезо-уровня» (содержательно и математически строго) закономерности, моделирующие динамику процесса откачки от вязкостного течения к молекулярному потоку откачиваемого газа при плавной непрерывной смене чисел Кнудсена от 0,001 до 100;
5. Взаимоуязваны (содержательно и математически строго) проводимость ЭВА, геометрические размеры ЭВА, средние характеристики потока откачиваемого газа на базе критерия упорядоченности хаоса.

В результате *расширены существующие* теоретические представления о процессе откачки в молекулярно-вязкостном режиме:

1. Дано представление о процессе откачки в молекулярно-вязкостном режиме как о последовательности стационарных состояний потока откачиваемого газа с разной степенью упорядоченности физического хаоса (от полностью упорядоченного (ламинарного, вязкостного течения) до полного хаоса (молекулярного течения));

2. Дано представление о процессе откачки в молекулярно-вязкостном режиме, как о сложным нелинейным процессе в котором, направленное ламинарное (вязкостное) течение откачиваемого газа постепенно преобразуется, при изменении средних характеристик откачиваемого газа, в хаотическое (молекулярное) движение молекул, и в результате образуется хаотический (молекулярной) поток.

3. Представлена целостная модель течения откачиваемого газа в ЭВА и согласованы модели расчета проводимости ЭВА, основанные на представлениях кинетической теории о хаотическом блуждании молекул в молекулярном режиме и континуальной теории о ламинарном течении в вязкостном режиме в ЭВА.

В результате имитационного моделирования и анализа процесса откачки установлены новые закономерности и физические явления:

1. Установлено, при течении откачиваемого газа возникают эффекты коллективного взаимодействия молекул, из-за которых возникают хаотические и упорядоченные явления в молекулярно-вязкостном режиме, зависящие от степени вакуума и влияющие на проводимость ЭВА:

- наглядно, показана, важная роль малых сил коллективных взаимодействий молекул откачиваемого газа и показана необходимость дополнительного учета этого воздействия при моделировании;
 - показано, что именно малые силы коллективных взаимодействий молекул оказывают значительное влияние на характер течения откачиваемого газа в ЭВА и вызывают «парадоксальные» изменения проводимости в ЭВА, наблюдаемые при натуральных измерениях;
2. Установлена «статистика мезо-уровня», описывающая непрерывный переход от ламинарного течения при вязкостном режиме в хаотические блуждания при молекулярном;
 3. Дано теоретическое объяснение такому явлению как «парадокс Кнудсена» и «поведению» проводимости коротких труб, наблюдаемому при натуральных измерениях;
 4. Установлено явление «молекулярной сверхпроводимости».

Отметим, теоретически обоснована эмпирическая зависимость **М.Кнудсена** для расчета проводимости круглого длинного трубопровода.

Достоверность и обоснованность научных результатов и выводов подтверждается:

1. Логической увязкой результатов выполненного исследования с имеющимися результатами в смежных, молекулярной и вязкостной областях, согласованностью с существующими моделями в молекулярном и вязкостном режимах;
2. Теоретической разработкой и обоснованием базовых положений на основе физики открытых систем и молекулярного переноса, кинетической теории, теории диффузии при применении математических методов теории хаоса и статистики;
3. Согласованностью базовых положений с гипотезой молекулярного хаоса и с динамикой необратимых процессов,;
4. Объяснением «парадоксов» проводимости ЭВА, наблюдаемых при натуральных измерениях; совпадением результатов расчетов проводимости с публикуемыми данными прецизионных натуральных измерений в пределах 15%.

Практическая ценность:

1. Появилась возможность расчетов как общей проводимости вакуумных систем, так и их элементов численным (вероятностным) методом в молекулярном и молекулярно-вязкостном режиме как единого целого, что позволяет избежать выполнения сложных, трудоемких и дорогостоящих натуральных измерений на специальном оборудовании в том числе появилась возможность расчетов проводимости трубок малого размера (микро- и нано- трубок), в которых проведение натуральных экспериментов невозможно и режим течения откачиваемого газа априори неизвестен, может быть как молекулярным, так и молекулярно-вязкостным;

2. Знание и представление конструктором зависимости проводимости ЭВА от условий течения откачиваемого газа определяет, в итоге, качество вакуумной техники, вакуумных систем технологических установок, вакуумных устройств, например ясен механизм молекулярной сверхпроводимости, который может быть использован для создания средств эффективной откачки в будущих термоядерных реакторах или течеискании.

Данная диссертация является продолжением диссертации автора «Методы расчета проводимости и функционального проектирования вакуумных систем и их элементов», защищенная в СПбГТУ по специальности «Вакуумная и компрессорная техника» в 1992г.

Общее число статей в научно-технических журналах «Вакуумная техника и технология», «Техническая физика», «Инженерная физика», «Прикладная физика», «Электронная техника», «Инженерно-физический журнал», «Химическое и нефтегазовое машиностроение», «Вестник машиностроения», "Вопросы атомной науки и техники", «Научно-Технические ведомости СПбГПУ», «Известия Тульского Гос.Университета», «Финансы и кредит», **входящих в список ВАК как обязательных для публикации основных положений и результатов докторских диссертаций: 28.**

Общее число научных публикаций по теме диссертации: 72, в том числе: в сборниках СПбГПУ, МИЭМ, Казанского и Тульского университетов, «СПб Университетского вакуумного общества». Из них число научно-методических публикаций по совершенствованию учебного процесса: 12.

Научные исследования апробированы на международных и российских научно-технических конгрессах, конференциях и семинарах: «Вакуумный конгресс» (2003г. Берлин), «Вакуумная наука и техника» (1998г., 2001г., 2002г. Судак, Украина), «Вакуумная техника и технология» (2002г., 2004г., 2008г. С.Петербург), «Современное состояние вакуумной техники» (2001, Харьков), «Инновационные наукоемкие технологии для России» (СПбГТУ, 1995), «Фундаментальные исследования в технических университетах» (1997, С.Петербург), «Технологическая системотехника» (2001, 2002, Тула).

Учебные аспекты диссертации апробированы на конференциях СПбГПУ, посвященным подготовке студентов к научной деятельности: «Высокие интеллектуальные технологии образования и науки» (1996, 1997), «Неделя науки» (1997, 1998, 2000, 2001, 2002, 2004), «Современные научные школы» (1997, СПбГТУ), а также Российской студенческой конференции «Вакуумная техника и технология» (Казань, 2003г.).

Основные результаты диссертации получены автором лично.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения, выводов, библиографического списка литературы из 91 наименований, двух приложений. Общий объем работы 163 страницы машинописного текста.

Основное содержание работы.

Во введении сформулированы цели диссертации, обоснована их актуальность и значимость для развития вакуумной науки и техники. Выбрано направление и методология научных исследований. Приведены фундаментальные проблемы и задачи исследования. Приведены научная новизна и защищаемые научные положения. Отмечено, что данная диссертация является *теоретической*.

В первой главе проведен анализ существующих методов моделирования вакуумных систем. Этот анализ приводит к идее изучить процесс откачки на мезоскопическом уровне на базе представлений о молекулярном упорядоченном хаосе, всегда присутствующем на мезоуровне в молекулярно-вязкостном потоке откачиваемого газа.

Вторая глава посвящена построению мезо-модели динамики процесса откачки в молекулярно-вязкостном режиме, адекватной физике течения откачиваемого газа.

Особенности течения откачиваемого газа в ЭВА связаны с тем, что

- стационарность неравновесного газового потока обеспечивается вакуумными насосами, компенсирующими диссипацию энергии в процессе откачки,
- процесс течения откачиваемого газа в ЭВА — изотермический процесс, который поддерживается благодаря обмену энергией с окружающей средой.

В соответствии с кинетической теорией поток откачиваемого газа в ЭВА состоит из большого числа нейтральных детерминированных независимых молекул, взаимодействующих при парных соударениях между собой.

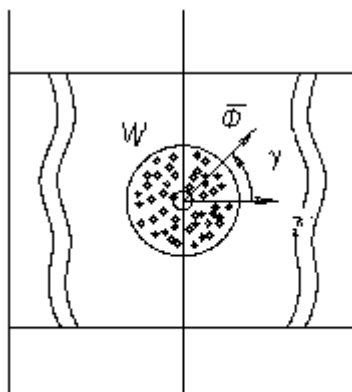


Рис. 1 Направление траектории молекулы после межмолекулярного взаимодействия в статистической группе, определяемое углом γ в W .

Каждая отдельная молекула в потоке газа ведет себя индивидуально. Основная идея моделирования этого потока – это моделирование *динамики* ансамблей нейтральных молекул.

Для этого в потоке газа в объеме ЭВА выделяется локальная произвольная пространственная область W (рис.1), в которой состояние отдельной молекулы определяется ее положением и импульсом. Распределение молекул в W **несимметрично и неравномерно** вследствие неравновесности течения откачиваемого газа; хаотичности, вносимой в поток газа молекулами отраженными от стенки ЭВА; хаотичности молекулярных движений и молекулярных флуктуаций в W .

Анализируя течение откачиваемого газа в молекулярно-вязкостном режиме на базе представлений о коллективных динамических взаимодействиях нейтральных молекул возникает концепция моделирования дрейфового движения («броуновского» движения) «среднестатистических молекул» стохастическими методами. Под «среднестатистической» молекулой (мезо-молекулой) понимается, такая частица, которая сохраняя все физические свойства молекулы в соответствии с молекулярно-кинетической теорией (массы и др.), *приобретает свойство* отражать результат осреднения микроскопических движений отдельных молекул в W . Это может быть пояснено, рассматривая динамику взаимодействия группы молекул в W и характер движения отдельных молекул в статистической группе в условиях градиента концентрации потока газа. Для этого выделяется «пробная» молекула (рис. 1) в W . «Пробная» молекула свободно блуждает в W , изменяя направление своего движения только вследствие парных соударений с другими молекулами газового потока или со стенкой до тех пор, пока не покинет W . При столкновениях молекул протекают процессы релаксации и диссипации. Молекулы расположены в W произвольно из-за случайности и хаотичности движений отдельных молекул из ансамбля, векторы скорости которых ориентированы случайным образом. Импульсы различных молекул неодинаковы по величине и направлению. Это приводит к тому, что отдельные молекулы из ансамбля молекул воздействуют при соударении на направление движения «пробной» молекулы **случайным** образом. Следовательно результирующее направление движения «пробной» молекулы, возникшее после каждого из этих соударений также **случайно**.

Результирующее смещение «пробной» молекулы *вычисляется*, осредняя результат следующих друг за другом соударений «пробной» молекулы (осредняя *сумму* большого числа векторов скорости и импульсов молекул в ансамбле в W). Статистический анализ динамики движения молекул приводит к выводу, что вектор смещения «пробной» молекулы в условиях **неравновесности** течения откачиваемого газа имеет предпочтительное направление по потоку течения откачиваемого газа. Это целенаправленное движение «пробной» молекулы обусловлено эффектом воздействия на «пробную» молекулу коллектива молекул в ансамбле.

Этот результирующий эффект может быть статистически осреднен при осреднении скорости и направления вектора скорости молекул, частоты соударений, длины свободного пути молекул:

$$\Phi(T)t = m\mathbf{v}_v(T) \quad (1),$$

где t — время, m — масса молекулы, \mathbf{v}_v — скорость мезо-молекулы (среднее (наиболее вероятное) направление и молярная скорость молекул), $T \sim \text{const}$, где T — температура откачиваемого газа.

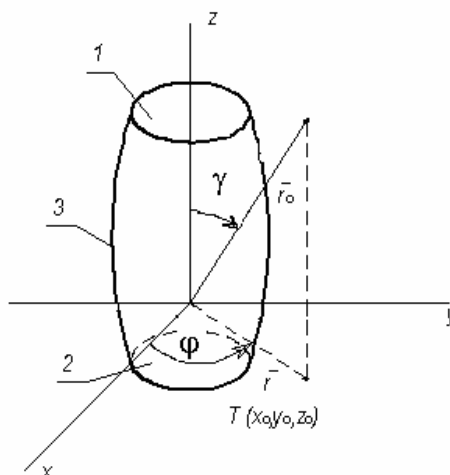


Рис. 2 Координаты (радиус-вектор \mathbf{r}_0) мезо-молекулы $T(\gamma, \phi, r)$ в локальной сферической системе координат

Сила Φ не меняет полный импульс и полную энергию ансамбля молекул в газовом потоке, а постепенно преобразовывает равновероятное распределение направлений движения среднестатистической молекулы (мезо-молекулы) при равновесном состоянии в предпочтительно направленное при откачке, т.е. формирует преимущественное направление движения мезо-молекулы.

Анализ вышеприведенных рассуждений приводит к идее переосмыслить концепцию моделирования молекулярного хаоса на микро-уровне при откачке ЭВА, а ввести понятие детерминированного хаоса как некоей сверхсложной упорядоченности, существующей неявно на мезо-уровне, потенциально могущей проявиться в огромном многообразии упорядоченных структур. *Рассматривая с такой точки зрения процесс откачки заключаем: под воздействием Φ возникает «неравновесный (предпочтительно направленный) броуновский» упорядоченно-хаотический процесс последовательного перемещения мезо-молекул в ЭВА в предпочтительном выделенном направлении по потоку течения откачиваемого газа от входного отверстия к выходному.*

При увеличении силы Φ возрастает *направленность* (упорядоченность хаоса) мезо-молекул по потоку газа в ЭВА. Это влияет на проводимость ЭВА.

Отметим, *мезо-молекулы, сохраняя все свойства молекул, дополнительно*

приобретают новое свойство, связанное с осреднением направлений траекторий движения молекул в ансамбле. Моделирование динамики движения мезо-молекул под усредненным воздействием Φ дает более подробное описание, чем макроскопическое, поскольку включает в себя описание статистических свойств ансамбля молекул и статистику соударений в ансамбле молекул, определяющих результирующее направление движения мезо-молекул. Однако обрезает влияние таких явлений, как молекулярные флуктуации, ближние и дальнедействующие корреляции на микроскопические движения отдельных молекул с помощью предположения о случайности таких характеристик как скорость молекулы, частота соударений, длина свободного пути и направление движения. Назовем такое рассмотрение мезоскопическим. Отметим, рассмотрение процесса откачки на мезо-уровне непротиворечит практическим целям вакуумной техники, связанным с расчетом проводимости ЭВА.

Таким образом,

1. При течении откачиваемого газа возникают эффекты коллективного взаимодействия молекул, из-за которых возникают хаотические и упорядоченные явления в молекулярно-вязкостном режиме, зависящие от степени вакуума и влияющие на проводимость ЭВА;
2. В молекулярно-вязкостном режиме упорядоченный хаос в потоке откачиваемого газа в ЭВА изменяется от полностью упорядоченного (ламинарного, вязкостного течения) до полного хаоса (молекулярного течения);
3. Вязкостный (ламинарный, упорядоченный) поток в ЭВА постепенно преобразуется в молекулярный (хаотичный) из-за ослабления воздействия силы Φ (степени упорядоченности хаоса). Отметим, это положение «срачивает» модели молекулярного и вязкостного течения откачиваемого газа через ЭВА, основанные на представлениях кинетической теории о хаотическом блуждании молекул в молекулярном режиме и континуальной теории о ламинарном течении в вязкостном режиме в ЭВА.;
4. Проводимость ЭВА в молекулярно-вязкостном режиме закономерно зависит от степени упорядоченности хаоса в потоке откачиваемого газа.

Анализ вышеперечисленных теоретических положений приводит к выводу, который является определяющим для, адекватного физике процесса откачки, моделирования газового потока в ЭВА во всем диапазоне молекулярно-вязкостного режима:

1. Динамика процесса откачки моделируется на базе физики открытых систем с диссипативной структурой;
2. Процесс изменения проводимости ЭВА в молекулярно-вязкостном режиме моделируется как последовательность (цепь следующих друг за другом) стационарных состояний потока откачиваемого газа с разной степенью упорядоченности хаоса;
3. Стационарный процесс течения откачиваемого газа моделируется как «неравновесный

броуновский» упорядоченно-хаотический процесс на базе кинетической теории флуктуаций на мезоскопическом уровне представления;

4. Стационарный поток откачиваемого газа моделируется совокупностью детерминированных однородных подобных независимых мезо-молекул, каждая из которых блуждает в ЭВА по своей вполне "целенаправленной", от входного к выходному патрубку, траектории.

Отметим:

1. Необратимость процесса течения откачиваемого газа в ЭВА моделируется необратимыми траекториям мезо-молекул, из которых состоит газовый поток.

2. Гипотеза молекулярного хаоса соблюдается путем моделирования двух сосуществующих взаимосвязанных процессов:

- случайного процесса взаимодействия мезо-молекул только с поверхностью ЭВА, который традиционно называется молекулярным;
- случайного «*неравновесного броуновского*» процесса *последовательного* блуждания мезо-молекул в потоке откачиваемого газа в ЭВА, который в дальнейшем называется вязкостным.

3. При моделировании стационарного потока принимаем, что область W (рис.2) постоянна во времени, однако ее объем различен при разных стационарных потоках в зависимости от степени разреженности откачиваемого газа и ограничен размерами ЭВА.

Таким образом исходным пунктом моделирования процесса откачки во-всем диапазоне молекулярно-вязкостного режима принимаются представления о молекулярном упорядоченном хаосе, всегда присутствующем на мезо-уровне. Построенная мезо-модель позволяет заменить задачу прямого моделирования движений всех молекул задачей моделирования случайного процесса перемещения мезо-молекул в ЭВА на базе статистики, описывающей упорядоченность хаоса в потоке откачиваемого газа. Отметим, здесь нет «новой» физики, а фактически новой является именно мезо-модель процесса откачки и постановка задачи моделирования стационарного процесса течения откачиваемого газа как случайного «*неравновесного броуновского*» упорядоченно-хаотического процесса.

Третья глава посвящена постановке задачи расчета проводимости ЭВА на базе статистики, описывающей упорядоченность хаоса в потоке откачиваемого газа. Динамика процесса течения откачиваемого газа в ЭВА при среднем вакууме (гл.2) математически описывается на базе вероятностных понятий. Рассмотрим газовый поток в фазовом объеме ЭВА (рис.2). Вместо того, чтобы рассматривать огромное количество дискретных молекул, можно ввести непрерывное распределение молекул в фазовом пространстве ЭВА. Для этого в ЭВА выделяется локальная произвольная пространственная фазовая область H (рис.2),

распределение молекул в котором **несимметрично и неравномерно** вследствие неравновесности течения откачиваемого газа; хаотичности молекулярных блужданий и молекулярных флуктуаций. Каждая область фазового пространства ЭВА может содержать различное количество молекул. Их плотность служит мерой вероятности найти рассматриваемую молекулу в данной области ЭВА. Эволюция во времени молекулы будет соответствовать траектория в фазовой области. Отметим, при таком подходе траектория молекулы в фазовой области соответствует описанию ее «динамического» поведения (гл.2). Осредняем эти траектории в соответствии с построенной в гл.2 динамической мезо-моделью. Это позволяет рассматривать распределение мезо-молекул в фазовой области как пространственно-однородное.

Предположим, что функция плотности вероятности $(f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t))$, определенная в пространстве координат (\mathbf{r}) и скоростей (\mathbf{v}) в фазовом мезо-объеме H , изменяется со временем (t) вследствие движения мезо-молекул и при их столкновениях. Предположим, функция f непрерывна и дифференцируема. Межмолекулярные столкновения приводят как к убыли, так и увеличению числа мезо-молекул в мезо-объеме. Балансовое уравнение, отражающее процесс изменения в единичном фазовом мезо-объеме H в единицу времени числа мезо-молекул, запишется:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{1}{m} \mathbf{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = U, \quad (2)$$

где \mathbf{r} - радиус вектор мезо-молекулы, \mathbf{v} - вектор скорости мезо-молекулы, t - время, F - сила, действующая на мезо-молекулу, принимаем $\mathbf{F} = \mathbf{F}_g + \mathbf{\Phi}_n$, где F_g - гравитационная сила, $\mathbf{\Phi}_n$ - сила, учитывающая флуктуации и корреляции молекул при неравновесном течении разреженного газа в статистической группе, m - масса молекулы, U - изменение числа мезо-молекул вследствие их движения, которое равно разности между числом мезо-молекул покинувших и влетевших в мезо-объем H за счет столкновений в единицу времени, градиенты функции $(f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t))$ в пространстве координат (\mathbf{r}) и скоростей (\mathbf{v}) обозначены соответственно $\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}}$

и $\frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}}$, где r - радиус-вектор мезо-молекулы, v - вектор скорости мезо-молекулы.

Описание нестационарного течения откачиваемого газа в молекулярно-вязкостном режиме через ЭВА сводится к эволюции во времени неравновесных состояний ансамбля молекул, которое описывается (2). Особенностью процесса откачки является то, что процесс изменения газовой нагрузки - обратимый процесс. Это открывает возможность, в рамках концепции моделирования «ансамблей молекул на мезо-уровне», строгого сочетания

кинетического уравнения и законов динамики процесса течения откачиваемого газа.

Анализ (1) и (2) приводит к выводу: моделировать эволюцию неравновесных состояний ансамбля молекул в потоке откачиваемого газа возможно как последовательность неравновесных стационарных состояний газового потока в ЭВА, которые различаются степенью упорядоченности хаоса. Более того, поскольку стационарное состояние ансамбля молекул откачиваемого газа характеризуется $\Phi(v_b, \lambda)$, то моделирование эволюции состояний ансамбля молекул откачиваемого газа в ЭВА сводится к моделированию различных состояний стационарного потока откачиваемого газа при постепенно сменяющихся друг друга λ .

Для расчета стационарного ($v_b = \text{const}$, $\lambda = \text{const}$, $\Phi(v_b, \lambda) = \text{const}$) молекулярно-вязкостного потока откачиваемого газа примем во внимание эргодическую гипотезу статистической физики, согласно которой *средние* по времени значения физических величин, характеризующих систему молекул газа, равны их средним статистическим значениям и эргодическую теорему, согласно которой поток молекул газа эргодичен, если траектории молекул будут целиком находиться в области фазового пространства ЭВА.

Отметим, эргодическая гипотеза имеет теоретико-вероятностное обоснование для стационарных плотностей вероятности. Это дает возможность в условиях стационарной откачки при $v_b = \text{const}$, $\lambda = \text{const}$, $\Phi(v_b, \lambda) = \text{const}$ статистически усреднять характеристики мезо-молекул по всему ансамблю в ЭВА, вместо среднего по времени, которое непосредственно связано с процессом течения откачиваемого газа.

Применим метод статистических испытаний к задаче вычисления перенесенной мезо-молекулами массы от входного отверстия ЭВА к выходному. В этом случае интегральные характеристики стационарного потока газа вычисляются с точностью по фактическому числу прослеженных мезо-молекул:

$$U = U_o P_e, \quad (3)$$

где U - проводимость ЭВА в молекулярно-вязкостном режиме; U_o - проводимость входного отверстия ЭВА, которая монотонно возрастает в молекулярно-вязкостном режиме с уменьшением чисел Кнудсена; P_e - вероятность прохождения ЭВА от входного к выходному сечению мезо-молекулой (рис.3).

Факт, что проводимость входного отверстия в молекулярно-вязкостном режиме изменяется, экспериментально подтвержден и теоретически обосновывается на базе динамики процесса откачки (гл.2). Это обоснование основывается на том, что мезо-молекула влетая во входное отверстие ЭВА по законам кинетической теории, после соударения с другой мезо-молекулой в потоке откачиваемого газа, продолжает двигаться в ЭВА под воздействием силы (Φ). Это ведет к тому, что число продолжающих двигаться внутрь ЭВА мезо-молекул из

общего числа, по сравнению с молекулярным режимом ($\Phi = 0$) выше. Чем сильнее воздействие Φ , тем большее число мезо-молекул продолжает движение внутрь ЭВА. Отметим, поскольку Φ монотонно возрастает с уменьшением чисел Кнудсена, то число мезо-молекул, продолжающих движение внутрь ЭВА, также монотонно возрастает, и следовательно также монотонно возрастает проводимость отверстия.

Согласно методу статистических испытаний последовательно имитируются блуждания отдельных мезо-молекул в объеме вакуумного элемента с применением метода Монте-Карло для генерации случайных чисел (рис.3).

Вероятность прохождения ЭВА мезо-молекулой P_e численно вычисляется:

$$P_e = N_r/N, \quad (4)$$

где N - число независимых вычислительных экспериментов (испытаний), в которых прослеживается блуждание одной мезо-молекулы в ЭВА с момента входа и до момента выхода из него, N_r - число экспериментов, из множества N , в которых мезо-молекула покинула ЭВА через выходное отверстие.

Число испытаний (N) определяется исходя из оценки точности, которую необходимо обеспечить при расчете проводимости конкретного ЭВА.

В результате проводимость ЭВА вычисляется на базе статистики, описывающей упорядоченность хаоса в потоке откачиваемого газа.

Отметим, математическая постановка (4) задачи расчета вероятности прохождения ЭВА для условий стационарной откачки в молекулярно-вязкостном режиме аналогична для условий молекулярного течения. Это позволяет использовать единое software для расчетов в этих режимах.

В четвертой главе описывается методика имитации *«неравновесного броуновского»* процесса последовательного перемещения мезо-молекулы в ЭВА в молекулярно-вязкостном режиме в условиях стационарного потока откачиваемого газа (рис.3). Конфигурация ЭВА (рис.3) в математической форме представляется совокупностью связанных отдельных поверхностей в трехмерном пространстве, каждая из которых описывается одним аналитическим уравнением и системой неравенств не выше второго порядка.

Анализ динамики процесса откачки (гл.2 и гл.3), особенно положений, которые согласовывают модели молекулярного и молекулярно-вязкостного режима, приводит к выводам: имитировать сложное нелинейное движение мезо-молекул в ансамбле в условиях стационарной откачки следует статистически на уровне средних, вводя изменения только в начальные условия моделирования.

Для имитационного моделирования процесса отражения мезо-молекулы от поверхности ЭВА необходимо математически описать эффект коллективного воздействия атомов

поверхности ЭВА на мезо-молекулу откачиваемого газа при ее соударении с поверхностью ЭВА. Процесс отражения мезо-молекулы от поверхности ЭВА имитируем в виде двух последовательных независимых процессов: процесса генерации нового случайного направления движения мезо-молекулы, отраженной от поверхности ЭВА в соответствии со статистикой диффузного рассеяния молекул; процесса перемещения мезо-молекулы внутрь ЭВА на длину свободного пути молекул (λ_0), $\lambda_0 = \lambda_0(\lambda)$.

Распределение длины свободного пути мезо-молекул принимается в соответствии с кинетической теорией молекулярных флуктуаций:

$$\lambda_0 = -\lambda \ln(R), \quad (5)$$

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

Отметим, наиболее вероятным направлением движения является направление, перпендикулярное к поверхности. Вероятность уменьшается по мере отклонения от нормали и становится равной нулю для касательных к поверхности. Стохастический закон, определяющий направление движения мезо-молекул, отраженных от поверхности ЭВА в пространстве записывается в локальной системе координат (рис.2). Эта система координат выбирается так, что ее начало в точке вылета мезо-молекулы, а оси изменяют свое направление таким, образом, чтобы плоскость (xy) была касательной к поверхности ЭВА и ось (Oz) направлена перпендикулярно к этой плоскости внутрь ЭВА (рис. 2). Тогда:

$$\varphi = 2\pi R_2,$$

где $\varphi \in [0; 2\pi)$, R_2 - случайное число, $R_2 \in [0; 1]$.

$$\gamma = \arcsin \sqrt[n]{R_1},$$

где $\gamma \in [0; \pi]$, R_1 - случайное число, $R_1 \in [0; 1]$, n зависит от шероховатости поверхности.

Для имитационного моделирования упорядоченного хаоса в потоке откачиваемого газа (вязкостной составляющей молекулярно-вязкостного режима (гл.2)) необходимо описать в математической форме коллективный эффект взаимодействия молекул в потоке откачиваемого газа без учета молекулярной составляющей (гл.3). Исходя из этого, процесс случайного блуждания мезо-молекулы в потоке откачиваемого газа имитируем в виде двух последовательных независимых процессов: процесса **смещения** мезо-молекулы на длину свободного пути молекул (λ_0), $\lambda_0 = \lambda_0(\lambda)$, рассчитываемую по (5); процесса генерации нового случайного направления движения мезо-молекулы.

При такой имитации траектория блуждания отдельной мезо-молекулы в потоке откачиваемого газа аппроксимируется кусочно-линейной функцией, представляющей собой ломаную линию с отрезками равными длине свободного пути мезо-молекулы (λ_0) (рис.3).

В результате анализа динамики процесса откачки (гл.2) математическая форма

стохастического закона, генерирующего новое направление движения мезо-молекулы после ее перемещения на длину λ_0 , принимается в виде равномерного закона с варьируемой областью определения в зависимости от средней длины пути молекул (λ) (рис.4). Это позволило согласовать модели равновесного и неравновесного течения, и придать мезо-молекуле динамику в предпочтительном направлении по потоку течения откачиваемого газа.

Стохастический закон, генерирующий новое направление движения мезо-молекулы записывается в локальной сферической системе координат (рис.2). Эта система координат выбирается так, что ее начало в точке вылета мезо-молекулы, а оси изменяют свое направление таким, образом, чтобы плоскость (xy) была перпендикулярна градиенту концентрации молекул и ось (Oz) направлена по потоку газа (рис. 2). В такой локальной системе координат угол φ , лежащий в плоскости (xy) всегда распределяется равномерно:

$$\varphi = 2 \pi R_2, \quad (6),$$

где $\varphi \in [0; 2\pi)$, R_2 - случайное число, $R_2 \in [0; 1]$.

Учитывая (6), закономерность распределения угла γ выявляем в виде:

$$\gamma = \pi R_3 (1 - P_{f0}), \quad (7)$$

где $\gamma \in [0; \pi]$, R_3 - случайное число, $R_3 \in [0; 1]$, $P_{f0} \in [0; 1]$ — является локальным «внутренним» свойством ансамбля молекул, $P_{f0} = P_{f0}(\lambda)$.

Отметим, что направление движения мезо-молекулы однозначно определяется углами γ и φ . Принимаем, что математическая форма (6) и (7) стохастического закона, генерирующего направление движения мезо-молекулы не зависит от температуры откачиваемого газа и поверхности ЭВА.

Для моделирования процесса откачки в молекулярно-вязкостном режиме остается связать молекулярную (хаотическую) и вязкостную (упорядоченно-хаотическую) составляющие. Такая связка обеспечивается математической логикой, которая упорядочивает последовательность моделирования молекулярной и вязкостной составляющих молекулярно-вязкостного режима (рис.3):

1. Мезо-молекула перемещается в потоке откачиваемого газа на λ_0 ;
2. Если мезо-молекула переместилась на длину λ_0 и не столкнулась с поверхностью ЭВА, то вновь моделируется процесс перемещения мезо-молекулы в потоке откачиваемого газа;
3. Если мезо-молекула столкнулась с поверхностью ЭВА, то мезо-молекула отражается от нее во внутрь ЭВА в соответствии с диффузным распределением., перелетая на λ_0 ;
4. Если мезо-молекула переместилась на длину λ_0 и не столкнулась с поверхностью ЭВА, то вновь моделируется процесс перемещения мезо-молекулы в потоке откачиваемого

газа.

Моделирование блужданий мезо-молекулы в ЭВА повторяется до тех пор, пока молекула не вылетит через входное или выходное сечение ЭВА.

При такой имитации траектория блуждания отдельной мезо-молекулы в ЭВА аппроксимируется кусочно-линейной функцией, представляющей собой ломаную линию с отрезками равными длине свободного пути мезо-молекулы (λ_0) (рис.3). В локальной системе координат, начало которой в точке (O) вылета мезо-молекулы (рис. 2), длина ее перемещения имеет вид:

$$\lambda_0 = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2} \quad ,$$

где (x_1, y_1, z_1) и (x_2, y_2, z_2) - координаты точек вылета и прилета мезо-молекулы, длина отрезка между этими точками - λ_0 ; γ - угол, который образуется между направлением движения мезо-молекулы и осью (Oz), $\gamma \in [0; \pi]$; φ - угол, лежащий в плоскости (xy), $\varphi \in [0; 2\pi)$.

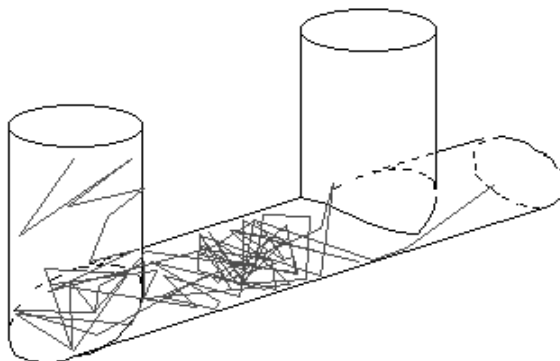


Рис.3 Траектория движения «среднестатистической» молекулы в ЭВА

Отметим, что в построенной имитационной мезо-модели блуждания мезо-молекулы:

- сохраняются все свойства молекулы (массы и др.) в соответствии с молекулярно-кинетической теорией;
- априорно строго вычисляется средняя длина свободного пути молекул в соответствии с кинетической теорией;
- независимо стохастически моделируются два параметра, определяющих движение мезо-молекулы: моделируется направление движения молекулы и приращение пути мезо-молекулы в ЭВА (λ_0).

Анализ имитационной мезо-модели приводит к следующим выводам:

- степень упорядоченности хаоса в ЭВА определяется при осредненных по всему ансамблю молекул в ЭВА значениях λ и $P_f(\lambda)$;

- стационарный процесс откачки на мезо-уровне в фазовом пространстве ЭВА характеризуется точкой на графике зависимости $P_f = P_f(\lambda)$ (статистики мезо-уровня);
- в качестве начальных параметров вычисления проводимости ЭВА по (3) при имитационном моделировании принимаются λ и $P_f(\lambda)$.

В пятой главе предполагается расширить знания и представления о процессе откачки в молекулярно-вязкостном режиме путем применения анализа и численной компьютерной имитации на базе построенной мезо-модели динамики процесса откачки при сопоставлении данных вычислительных экспериментов и натуральных измерений, опубликованных **Кнудсенем М., Породновым Б.Т., Santeler D.J., DeMuth S.F., Watson J.S., R.G.Livesey**. В качестве данных для анализа процесса откачки предполагается использовать *макро-параметры ЭВА, макро- и мезо- характеристики откачиваемого газа*.

Теоретические положения, разработанные ранее, позволяют перейти к изучению процесса откачки при синергетическом подходе в направлении научного познания:

- процессов самоорганизации, в процессе течения откачиваемого газа в вакуумных системах, от хаоса в упорядоченные структуры на мезо-уровне;
- динамики взаимопереходов через границы «полный хаос — упорядоченный хаос» и «порядок - упорядоченный хаос».

Такой подход, ориентированный на переоткрытие принципов или закономерностей процесса откачки, обусловлен такими особенностями процесса течения откачиваемого газа как нелинейность, неравновесность, открытость по отношению к внешней среде. Такой подход требует переосмысления в первую очередь и прежде всего процессов становления (возникновения) качественно новых форм (упорядоченного хаоса) в поведении откачиваемого газа в ЭВА, фокусировки внимания на особых критических точках, в окрестности которых характер изменения проводимости ЭВА в молекулярно-вязкостном режиме становится «парадоксальным» из-за влияния самых незначительных воздействий, или флуктуаций.

Анализ мезо-модели процесса откачки приводит к важным выводам:

1. Пусть $P_f = 1$, тогда $P_e = 1$, из (2), (3), (7) следует, что при этих условиях проводимости отверстия, короткого и длинного трубопровода одинаковых диаметров равны. Назовем это явление **«молекулярной сверхпроводимостью»**.

2. Из (2), (3), (6), (7) следует проводимость ЭВА изменяется в молекулярно-вязкостном режиме при постепенно сменяющих друг друга λ . Этот вывод подтверждается при измерениях круглых отверстий и длинных труб. Из (2), (3), (7) можно записать:

$$L = L(D, P_e(D, L, P_f(\lambda), U)), \quad (8)$$

где L — эффективная длина ЭВА, D - диаметр входного патрубка (отверстия) ЭВА. Эта теоретическая зависимость (8) обосновывает вид эмпирической зависимости **М.Кнудсена** для расчета проводимости круглого длинного трубопровода во всем диапазоне молекулярно-вязкостного режима.

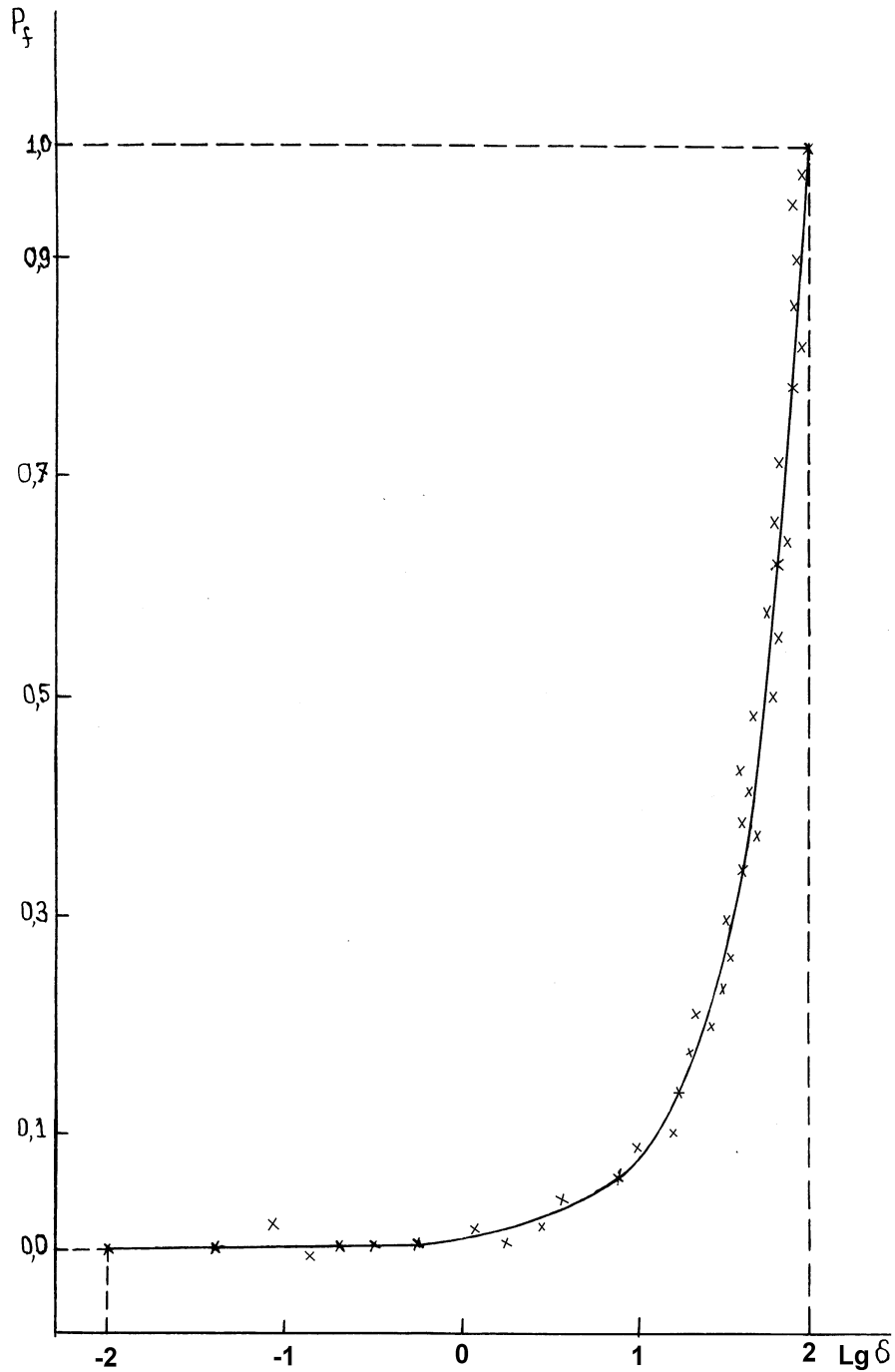


Рис. 4. Степень упорядоченности хаоса при откачке в молекулярно-вязкостном режиме, $\delta =$

$$l/Kn.$$

3. Степень упорядоченности хаоса и средняя длина свободного пути молекул в ЭВА однозначно позволяют вычислить значение проводимости ЭВА (гл.2, 3, 4).

Эти выводы приводят к заключению о необходимости выявления «статистики мезо-уровня» ($P_f(\lambda)$) для того, чтобы математически строго установить непрерывный переход от ламинарного течения при вязкостном режиме в хаотические блуждания при молекулярном *специально* для имитации процесса откачки через ЭВА различных форм и размеров.

Концепция установления этой статистики состоит в том, чтобы построить ее через измеренные макропараметры: температуру, газовый поток (проводимость), давления на концах длинного трубопровода, сопоставляя их с результатами моделирования (8). Методику установления «статистики мезо-уровня» представим: при $\lambda = \text{const}$ вычисляется по (3) значение проводимости U_v круглого длинного трубопровода и сопоставляется с соответствующими данными прецизионных измерений проводимости U_n . Если эти значения U_v и U_n совпадают с точностью 5%, то фиксируем значения λ и P_f . В случае отсутствия совпадения между этими значениями, изменяется параметр P_f и вычислительный эксперимент повторяется до тех пор, пока вычисленные данные не совпадут с измеренными. После этого изменяем λ , вычислительные эксперименты повторяются.

Результаты вычислительных экспериментов во всем диапазоне молекулярно-вязкостного режима, целесообразно, в соответствии с теорией подобия, представить в виде зависимости $P_f = P_f(D/\lambda)$ при единичном характерном размере круглого канала (D). При течении воздуха в осесимметричных каналах при комнатной температуре зависимость $P_f = P_f(D/\lambda)$ или $P_f = P_f(Kn)$ представлена (рис. 4). Отметим, при необходимости применить значения $P_f(D/\lambda)$ (рис.4) для других условий течения откачиваемого газа пересчет λ , рассчитанного для воздуха при комнатной температуре осуществляется по законам кинетической теории.

«Статистика мезо-уровня» отражает механизм преобразования ламинарного течения при вязкостном режиме в хаотические блуждания при молекулярном и изменение функции распределения плотности вероятности f ансамбля молекул. Эта статистика показывает вес и влияние молекулярной и вязкостной составляющих при различных числах Кнудсена.

Моделирование процесса откачки через трубы различных форм и размеров показало.

Молекулярное течение наблюдается при моделировании длины свободного пути (λ_0) молекулы значительно превосходящей характерный размер ЭВА ($Kn > 100$), вследствие чего соударения молекул наблюдаются, как правило, с поверхностью ЭВА.

При $Kn \cong 100$ кроме соударений со стенкой, дополнительно наблюдаются первые межмолекулярные соударения, $\delta = 1/Kn$.

При переходе от молекулярного к молекулярно-вязкостному течению на макро-уровне наблюдаем, что степень увеличения или уменьшения значений проводимости ЭВА находится в зависимости от таких параметров ЭВА как конфигурация и длина. Это объясняется двумя противоречивыми процессами, происходящими одновременно:

1) Поскольку на начальной стадии формирования направленной скорости течения сила Φ , обусловленная межмолекулярными соударениями, приблизительно равная нулю ($P_f \cong 0$), не помогает движению молекул вдоль ЭВА, а значительно увеличивающееся число межмолекулярных парных соударений затрудняет перемещение молекул вдоль ЭВА, то число молекул проходящих ЭВА в процентном соотношении (P_e) уменьшается по сравнению с молекулярным течением. Степень уменьшения P_e определяется числом межмолекулярных парных соударений, которое претерпевает молекула, прежде чем вылетит из ЭВА. Чем длиннее ЭВА и сложнее его конфигурация, тем больше межмолекулярных соударений, и тем более трудно молекуле перемещаться вдоль ЭВА по сравнению с молекулярным течением, и тем меньше P_e .

2) Увеличивается число молекул, участвующих в процессе переноса.

Результаты этих противоречивых процессов наблюдаются на макро-уровне в любых конфигурациях ЭВА. Например, при переходе от молекулярного к молекулярно-вязкостному течению значения проводимости круглых труб, с соотношением длины (L) к диаметру (D) больше 5-ти, уменьшаются, а значения проводимости отверстий и коротких труб, с соотношением длины (L) к диаметру (D) меньше 4-х, монотонно возрастают.

При уменьшении чисел Кнудсена приблизительно от 2 до 0,1 доля групповых взаимодействий возрастает, в том числе около стенки трубопровода, в общем числе межмолекулярных соударений до 10%. Начинает проявляться тенденция формирования дрейфового движения молекул, направленного к выходному сечению ЭВА, P_f монотонно увеличивается от 0 до, приблизительно, 0,1 (рис.4). Этот эффект частично компенсирует трудности стохастической молекулы перемещаться вдоль ЭВА из-за соударений. Как следствие, P_e первоначально замедляет свое падение, а затем, начинает монотонно увеличиваться.

При уменьшении чисел Кнудсена от 0,1 до 0,01 проводимости ЭВА любых конфигураций монотонно возрастают благодаря тому, что:

1) Формируется течение, в значительной степени направленное к выходному сечению ЭВА, P_f монотонно увеличивается до значения приблизительно 1.

2) Увеличивается число молекул, участвующих в процессе переноса.

При приближении к границе “молекулярно-вязкостный режим вязкостный режим” при уменьшении чисел Кнудсена от 0,02 до 0,01 наблюдается, что значения проводимости круглых и квадратных отверстий, коротких и длинных ЭВА с одинаковой площадью входного сечения стремятся к одинаковым значениям (рис. 4). Это объясняется следующим. При $Kn \cong 0,01$ направленность движения молекул в ЭВА произвольной конфигурации формируется в основном под действием силы Φ и ориентировано по потоку течения разреженного газа $P_f \cong 1$. Поскольку кроме межмолекулярных соударений имеются соударения молекул с поверхностью ЭВА, благодаря которым молекулы могут покинуть ЭВА через входное сечение, то при $N \neq N_r$, но $N_r \Rightarrow N$, откуда $P_e \Rightarrow 1$ и, следовательно, $U \Rightarrow U_0$. В условиях границы “молекулярно-вязкостный режим вязкостный режим” на макро-уровне возникает впечатление ее размытости в диапазоне чисел Кнудсена от 0,01 до 0,001 в зависимости от конфигурации и длины ЭВА. Это объясняется следующим. Мезо-молекулы кроме межмолекулярных соударений, которые обеспечивают направленное движение к выходному сечению ЭВА, претерпевают соударения с поверхностью ЭВА. Более того, после соударения с поверхностью часть молекул покидает ЭВА через входное сечение. Чем короче ЭВА, тем большая часть молекул покинет ЭВА через входное сечение. Например, при $Kn \cong 0,01$ при изменении соотношения длины к диаметру ЭВА от 0,1 до 10 вероятность P_e монотонно уменьшается от 0,95 до 0,8.

Границей можно считать условие: все мезо-молекулы, падающие на входное отверстие, будут вылетать через выходное отверстие, $P_e = 1$, $U = U_0$. Для отверстия это условия выполняется при $Kn \cong 0,01$, (рис.4), для разных ЭВА все стохастические молекулы, падающие на входное отверстие, будут вылетать через выходное отверстие при более низких и отличных друг от друга числах Кнудсена. Таким образом, граничные значения, в зависимости от конфигурации ЭВА, различны. Это подтверждено при измерениях.

В результате теоретически установлено и экспериментально подтверждено явление «молекулярной сверхпроводимости».

Анализ результатов приводит к выводу, что именно малые силы коллективных взаимодействий молекул, которые ранее считалось возможным не принимать во внимание, оказывают значительное влияние на характер течения откачиваемого газа в ЭВА и вызывают «парадоксальные» изменения проводимости в ЭВА, наблюдаемые при натуральных измерениях.

В шестой главе представлены эффективные инженерные методики расчета проводимости ЭВА в условиях среднего вакуума на базе методов иерархических экспертных оценок и множителей Лагранжа.

В заключении подчеркивается, что диссертация существенно развивает теорию вакуумной газовой динамики в молекулярно-вязкостном режиме. Разработанная совокупность

теоретических положений делает возможным квалифицировать данную диссертацию как новое крупное достижение в развитии, как знаний о процессе откачки, так и методов моделирования процесса откачки в молекулярно-вязкостном режиме. Полученные результаты были использованы на производственных предприятиях. Сформулированы актуальные, для вакуумной техники, задачи дальнейших научных исследований в новом научном направлении.

В приложении №1 приведены сведения, подтверждающие, что результаты диссертации используются разработчиками вакуумных систем и вакуумной техники для решения практических задач.

В приложении № 2 приведены мнения специалистов о научной значимости диссертации.

Основные результаты и выводы диссертации.

Диссертационная работа является **теоретической**. Совокупность научных положений диссертации развивает теоретические основы в дисциплине «Расчет и моделирование вакуумной техники».

Диссертация **содержит новое теоретическое направление** исследований:

1. Процесс откачки моделируется на базе физики открытых систем с диссипативными структурами и статистической неравновесной динамики на мезоскопическом уровне представления в согласии с гипотезой молекулярного хаоса и теорией необратимых процессов.
2. Вычисления проводимости ЭВА осуществляются на основе характеристик упорядоченности хаоса в потоке откачиваемого газа в ЭВА.
3. Новые явления в процессе откачки установлены благодаря взаимоувязке макро-параметров ЭВА и мезо-характеристик откачиваемого газа путем «совместного использования анализа и численного компьютерного моделирования».

Следуя этому направлению в диссертации теоретически описана динамика процесса откачки и характер изменения проводимости вакуумных систем при молекулярно-вязкостном режиме на базе кинетической теории флуктуаций:

1. Динамика течения откачиваемого газа в молекулярно-вязкостном режиме в ЭВА моделируется на мезо-уровне как упорядоченно-хаотический процесс с разной степенью упорядоченности хаоса, от полностью упорядоченного (ламинарного, вязкостного течения) до полного хаоса (молекулярного течения) (рис.4).
2. Эволюция ансамбля молекул откачиваемого газа представляется как последовательность (цепь следующих друг за другом) неравновесных стационарных состояний, каждое из которых имитируется как «*неравновесный броуновский*» процесс.

3. Проводимость ЭВА вычисляется на базе статистики, описывающей упорядоченность хаоса в потоке откачиваемого газа.

Из этих теоретических положений следует, что разная физическая сущность равновесного и неравновесного «перехода от порядка к хаосу», который формируется при переходе от вязкостного режима к молекулярному вводит существенные принципиальные ограничения на применение пространственно-однородного уравнения Больцмана (в том числе аппроксимации Г.Берда) при математическом описании процесса откачки.

На базе вышеперечисленных теоретических положений построена и верифицирована стохастическая мезо-модель процесса откачки в молекулярно-вязкостном режиме, при этом решены крупные научные задачи:

1. Сформулирован (содержательно и математически строго) критерий упорядоченности хаоса в потоке откачиваемого газа при переходе от вязкостного режима к молекулярному, и наоборот.
2. Описаны и связаны (содержательно и математически строго) между собой вязкостная (упорядоченно-хаотическая) и молекулярная (хаотическая) составляющие молекулярно-вязкостного режима в потоке откачиваемого газа.
3. Сформулированы на базе «статистики мезо-уровня» (содержательно и математически строго) закономерности, моделирующие динамику преобразования в процессе откачки ламинарного (вязкостного) течения к хаосу молекулярного потока при плавной непрерывной смене чисел Кнудсена от 0,001 до 100 .
4. Взаимоуязваны (содержательно и математически строго) проводимость ЭВА, геометрические размеры ЭВА, средние характеристики потока откачиваемого газа на базе критерия упорядоченности хаоса.

Благодаря этим достижениям решена **крупная проблема в научной дисциплине**: «Расчет и моделирование вакуумной техники» - теоретически «сращены» модели молекулярного и вязкостного течения откачиваемого газа.

Практически эта мезо-модель может быть использована для имитации осесимметричного течения в приборах дозированного напуска газа, микро-течений через нано-трубки и мембраны в течеискании, спектрометрии и др. областях вакуумной техники. Практически, построенная мезо-модель, была использована на двух производственных предприятиях НИИ АП АН РФ, г.С.Петербург, завод «Светлана», г.С.Петербург.

На базе построенной мезо-модели разработан вероятностный метод расчета проводимости ЭВА в молекулярной и молекулярно-вязкостной области при числах Кнудсена от 0,01 и выше, который учитывает как молекулярную, так и вязкостную составляющие. Практически этот метод может быть использован при расчете проводимости зазоров откачных

средств и других осесимметричных конструкций. Практически был использован при расчете газовых потоков в зазорах двухроторных (Завод «Оптических станков», г.Сморгонь, Беларусь) и молекулярных насосов (ЦКБМ «Энергонасос»). Отметим, результаты вычислительных и натуральных экспериментов обобщены в виде инженерных формул для расчета коротких труб во всех режимах течения. Эти формулы использованы в учебной САПР вакуумных систем (каф.ИМТ СПбГПУ), при расчете вакуумной системы робота-стенохода (каф. Автоматы СПбГПУ), вакуумной системы масс-спектрометра (СКБ АП, г.С.Петербург).

В диссертации вероятностный метод применен к фундаментальной задаче: изучению динамики процесса откачки в молекулярно-вязкостном режиме. В результате имитационного моделирования процесса течения откачиваемого газа в ЭВА и анализа макро-параметров ЭВА, макро- и мезо-характеристик откачиваемого газа на базе вычислительных и натуральных экспериментов сделаны **крупные научные достижения**, которые расширяют знания и научные представления о процессе откачки:

- установлено, при течении откачиваемого газа возникают эффекты коллективного взаимодействия молекул, из-за которых возникают хаотические и упорядоченные явления в молекулярно-вязкостном режиме, зависящие от степени вакуума и влияющие на проводимость ЭВА;
- установлены критерий $P_f(\lambda)$ для характеристики степени упорядоченности хаоса в потоке откачиваемого газа, протекающего через ЭВА и «статистика мезо-уровня», которая описывает изменение степени упорядоченности хаоса при постепенном преобразовании ламинарного течения при вязкостном режиме к хаосу случайного в молекулярном режиме;
- дано теоретическое объяснение такому явлению как «парадокс Кнудсена» и другим «парадоксам поведения» проводимости ЭВА, наблюдаемым при натуральных измерениях;
- установлено явление «молекулярной сверхпроводимости».

Эти явления эффективно использовать, например, в технологических процессах, в которых постепенно меняется газовая нагрузка (спектрометрия, течеискание) или при разработке принципиально новых «мембранных» средств откачки, например в вакуумных системах «термоядерных установок, строимся ИТЕРе и пост-итеровских реакторах, водородной энергетике».

Расширение знаний и научных представлений специалистов-вакуумщиков о процессе откачки, в итоге, способствует повышению эффективности и качеству вакуумной техники, вакуумных систем технологических установок, вакуумных устройств. Например, проведенные специальные исследования позволяют выявить неудовлетворенные потребности потребителей вакуумной техники.

Результаты исследования РЕКОМЕНДУЮТСЯ К ПРИМЕНЕНИЮ В ПРОМЫШЛЕННОСТИ как разработчикам вакуумных агрегатов технологического оборудования применяемого в различных отраслях промышленности, так и изготовителям вакуумных насосов и вакуумной арматуры и способствуют решению крупной отраслевой проблемы - повышению эффективности и конкурентоспособности агрегатов для среднего вакуума. Результаты диссертации использовались при обучении студентов кафедр «Автоматы», ИМТ, «Вакуумная и компрессорная техника» СПбГТУ. Отметим, что результаты диссертации, частично, включены в учебник **Розанова Л.Н.** «Вакуумная техника», 2003г., 2007г.

Публикации по теме диссертации.

Основное содержание и результаты диссертации опубликованы в журналах, входящих в список ВАК:

1. *Печатников Ю.М.* Расчет проводимости вакуумных систем (Обзор) // Вакуумная техника и технология. 1996. т.6. №2. С.5-14
2. *Печатников Ю.М.* Современные методы расчета характеристик вакуумных агрегатов для среднего вакуума (Обзор) // Вакуумная техника и технология. 2002. т.12. №4. С.227-234.
3. *Печатников Ю.М.* Современные методы вычислительных экспериментов в молекулярно-вязкостном режиме // Инженерная физика. 2003. №3. С.50-52
4. *Печатников Ю.М.* Современные модели и методы моделирования переходного течения разреженных газов // Журнал технической физика. 2003. вып.12. С.20-25
5. *Печатников Ю.М.* Концепция моделирования молекулярно-вязкостного течения разреженного газа в вакуумных системах // Вакуумная техника и технология. 2006. №1. С.27-28
6. *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
7. *Печатников Ю.М.* Инженерная модель течения разреженного газа // Техническая физика. 2003. Вып.8. С.40-45
8. *Печатников Ю.М.* Вероятностная модель течения разреженного газа // Инженерная физика. 2003. №2. С.32–36
9. *Печатников Ю.М.* Уравнение Больцмана и стохастическая модель потока разреженного газа // Прикладная физика. 2005. № 1. С.15-21.
10. *Печатников Ю.М.* Уравнение Больцмана и динамическая модель взаимодействия молекул в потоке разреженного газа // Инженерная физика. 2005. № 1. С.45-49.

11. *Печатников Ю.М.* Инженерно-физическая модель процесса откачки в вакуумных системах при молекулярно-вязкостном режиме // Вакуумная техника и технология. 2003. т.12. № 3. С.135-140.
12. *Печатников Ю.М.* К вопросу о проводимости круглых трубопроводов при низком вакууме // Вакуумная техника и технология. 1991. №3. С.25-28
13. *Печатников Ю.М.* К вопросу верификации моделей и методов в вакуумной газовой динамике // Вопросы атомной науки и техники. 2004. №6 С.58-62
14. *Печатников Ю.М.* Анализ молекулярно-вязкостного течения разреженного газа в вакуумных системах // Научно-технические ведомости С.ПбГТУ. 2003. № 4. С.63-71.
15. *Печатников Ю.М.* Физические явления и процессы переходного течения разреженного газа // Прикладная физика. 2004. № 2. С.19-25
16. *Печатников Ю.М.* Статистическое моделирование течения разреженного газа вблизи молекулярного режима // Электронная техника. Электровacuумные и газоразрядные приборы. 1991. вып.4. С.67-69
17. *Печатников Ю.М.* Вычислительно-эвристический подход к расчету и проектированию вакуумных систем // Научно-технические ведомости С.ПбГТУ. 2002. №1. С.80-87
18. *Печатников Ю.М.* Анализ проводимости вакуумных систем и их элементов в молекулярно-вязкостном режиме // Вакуумная техника и технология. 2008. №1. С.23-26
19. *Печатников Ю.М.* Концепция проектирования структуры вакуумных систем // Вакуумная техника и технология. 2001. №4. С.175-178
20. *Печатников Ю.М. и др.* К вопросу внедрения САПР в машиностроение // Вестник машиностроения. 2002. №9. С.64-66
21. *Печатников Ю.М.* Вероятностная оценка акционерного капитала на фондовом рынке // Финансы и Кредит. 2008. №6. С.31-34
22. *Печатников Ю.М., Розанов Л.Н.* Расчет и проектирование вакуумных систем // Известия Тульского гос. университета 2000. вып.6. С.137-139
23. *Розанов Л.Н., Печатников Ю.М., Солодилова Н.А.* Автоматизация проектирования структурной вакуумной схемы. // Вакуумная техника и технология. 1997. №3. С.65-68
24. *Розанов Л.Н., Никитков Н.В., Дзельтен Г.П., Печатников Ю.М.* Автоматизация проектирования в машиностроении // Научно-технические ведомости СПбГТУ. 1996. № 3. С.168-171
25. *Розанов Л. Н., Дзельтен Г.П., Печатников Ю. М.* Автоматизация проектирования вакуумных схем // Вакуумная техника и технология, 1991. №1. С.8-11

26. *Мещеряков С.В., Печатников Ю.М.* Информационная система вакуумного оборудования и материалов // Вакуумная техника и технология. 1995. №1/2. С.16-22.
27. *Розанов Л.Н., Донская М.М., Печатников Ю.М., Петров В.Г.* Программное и техническое обеспечение автоматизированного проектирования принципиальных вакуумных схем // Химическое и нефтегазовое машиностроение. 1991. №11. С.14
28. *Печатников Ю.М., Мещеряков С.В., Донская М.М.* Учебная САПР вакуумных систем // Вакуумная техника и технология. 1996. №3. С.26-31

Наиболее значимые монографии, статьи и публикации тезисов докладов конференций и отчетов о НИР в журналах и сборниках, не входящих в список ВАК, содержащих результаты диссертации:

1. *Pechatnikov Y.* A new physical model of vacuum gas dynamics of transition flow / Abstract of EVC on Vacuum Science and Technology. Berlin. 2003. P.50
2. *Печатников Ю.М., Щенев В.В.* К вопросу расчета проводимости радиальных и профильных зазоров в двухроторных насосах. // Вакуумная наука и техника: докл.науч.техн.конф. М.: МИЭМ. 2002. С.48-51
3. *Розанов Л.Н., Печатников Ю.М., Миронова Т.Н.* Расчет молекулярных ступеней гибридного вакуумного насоса // Отчет по НИР. УНИВАК. 2003. 39с
4. *Печатников Ю.М.* Методы расчета проводимости и функционального проектирования вакуумных агрегатов и их элементов. Автореферат диссертации. СПб.:ЛГТУ 1991. 18с.
5. *Печатников Ю.М.* Расчет сложных элементов вакуумных систем в молекулярно-вязкостном режиме течения газа. СПб.: Фундаментальная библиотека СПбГПУ: Электронный ресурс <URL:ftp://unilib.neva.ru/403.pdf> [свободный доступ из сети Интернет], 2002. 84с
6. *Розанов Л.Н., Донская М.М., Печатников Ю.М., Мещеряков С.В.* Программное обеспечение курсового проектирования по дисциплине "Вакуумная техника" // Аннотированный каталог программных средств. СПб: СПбГТУ, 1995