

Применение статистических методов моделирования течения газа в канале с металлическим паром

10, октябрь 2012

Никулин Н. К., Шемарова О. А.

УДК. 533.6.011.8

Россия, МГТУ им. Н.Э. Баумана

nkn@bmstu.ru

holga.al@gmail.com

Введение

Целью работы является создание теории на основе статистических методов математического моделирования для расчета пространственно-неоднородных течений разреженного газа в канале, заполненном металлическим паром, а также в разработке алгоритмов для реализации расчета основных параметров течения газа в канале при наличии возмущающих воздействий.

В настоящее время не существует теории, описывающей взаимодействие разреженного газа с потоком металлического пара, давление которого соответствует молекулярно-вязкостному режиму течения, и, несмотря на то, что исследования течения газа в молекулярно-вязкостном режиме ведутся уже длительное время, теории, полноценно описывающей свойственные данному режиму физические процессы, так и не существует, как и универсального метода расчета параметров течения.

На сегодняшний день для определения параметров течения газа в системе с металлическим паром пользуются в основном полуэмпирическими зависимостями на основе уравнения диффузии. Такое описание не является универсальным и может

быть использовано только в некоторых частных случаях, а также не позволяет учесть различные существенные факторы: сорбирующие свойства пара металла и поверхности трубы, наличие градиента температуры в системе, вектора скорости потока металлического пара. Следует учесть, что такое описание применимо только для течений с небольшими скоростями, притом, что в большинстве случаев, скорость пара достаточно высока.

Исследования течения газа в молекулярно-вязкостном режиме ведутся уже длительное время, но универсальной теории так и не существует – большинство методов применимы только для решения частных задач. Существуют уравнения для вычисления потока газа через цилиндрические капилляры с произвольным отношением длины к радиусу, которые охватывают весь диапазон чисел Кнудсена [1, 2] при небольших скоростях истечения, позволяющих пренебречь сжимаемостью газа. Достаточно хорошо исследовано течение сжимаемого газа, включая «критический» режим при значениях числа Кнудсена менее 0,01 [3]. Однако учет сжимаемости газа в области молекулярно-вязкостного режима течения представляет значительные трудности.

В работе [4] предложен достаточно простой алгоритм расчета потока сжимаемого газа во всем диапазоне режимов течения (от молекулярного до вязкостного критического) через цилиндрический капилляр произвольной длины. За основу взято суперпозиционное уравнение [1], в которое вводится поправка на сжимаемость и на входное сопротивление капилляра. Однако суперпозиционный подход физически не совсем корректен. И если для молекулярно-вязкостного режима течения газа, в котором одновременно сказывается влияние внутреннего трения и молекулярного переноса, такой подход понятен, то применение его для вязкостного режима течения, характер которого определяется силами внутреннего трения, носит формальный характер. Следует также отметить, что применение суперпозиционного подхода для решения задачи о течении газа через поток пара вызывает трудности и не дает возможности учесть сорбирующие свойства поверхности канала и частиц самого пара, а также вектора скорости потока пара.

Эти факторы можно учесть, используя представленную в данной работе статистическую математическую модель, позволяющую учесть различные сорбционные процессы, применимую для систем с высокими скоростями течения потока пара и градиентом температур. Метод частиц в ячейках позволяет моделировать течение во всем диапазоне чисел Кнудсена, а разработанная модель относительно проста и довольно точно описывающую процесс течения газа через поток пара. Еще одним достоинством данного подхода является относительно просто реализуемая возможность введения новых факторов и оценки влияния сопутствующих процессов.

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

Очевидно, что в случае, когда технология опережает теорию, увеличиваются затраты при проектировании и эксплуатации, и следовательно предлагаемое исследование может быть полезно при расчете и проектировании следующих систем

- а) *Электрогенерирующие каналы (ЭГК) термоэмиссионного реактора-преобразователя.* Термоэмиссионные реакторы-преобразователи — одно из величайших достижений российской науки и техники. Успех ядерно-энергетической термоэмиссионной установки «Топаз» (рисунок 1) послужил

толчком к разработке ряда проектов реакторов с термоэмиссионными преобразователями [5].

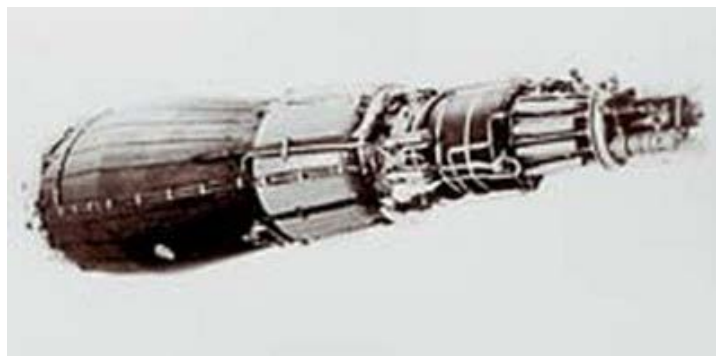
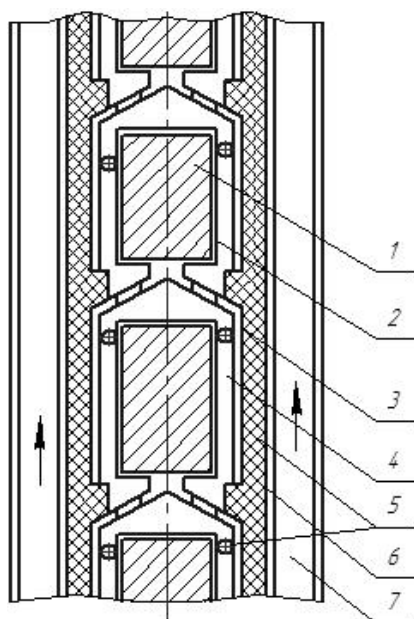


Рисунок 1 - Ядерно-энергетическая термоэмиссионная установка «Топаз»

Основой реактора установки «Топаз» были тепловыделяющие элементы — «гирлянды» (рисунок 2), разработанные и изготовленные группой Малыха. Электрическая мощность установки доходила до 10 кВт. Максимальная плотность тока, генерируемого ТЭП, ограничена эмиссионной способностью эмиттера и может достигать нескольких десятков ампер на 1 см^2 поверхности. Для получения оптимальных величин работы выхода эмиттера (2,5 - 2,8 эв) и коллектора (1,0 - 1,7 эв) и для компенсации объёмного заряда электронов, образующегося вблизи электродов, в зазор между ними обычно вводят легко ионизируемые пары цезия.



1 - сердечник из окиси обогащённого урана; 2 – катод (молибден, вольфрам); 3 - анод (ниобий); 4 - вакуумный зазор с парами цезия; 5 – изоляция (окись бериллия); 6 - корпус (сталь); 7 - теплоноситель (натрий-калий)

Рисунок 2 - Схема термоэмиссионного электрогенерирующего канала («гирлянды» В.А.Малыха)

б) *Высокотемпературные теплообменники*, в которых в качестве теплоносителя используется легкоплавкие металлы (рисунок 3).



Рисунок 3 – Теплообменники для атомных электростанций

с) *Диффузионные средства откачки*, в которых вместо паров масла используются легкоплавкие металлы. Например, парортутные насосы

(рисунок 4), которые применяют главным образом для откачки систем, в которых пары ртути являются рабочей средой (ртутные выпрямители, лампы), и в установках, где необходима высокая чистота рабочей среды (в масс-спектрометрах, сверхвысоковакуумных системах термоядерных установок).

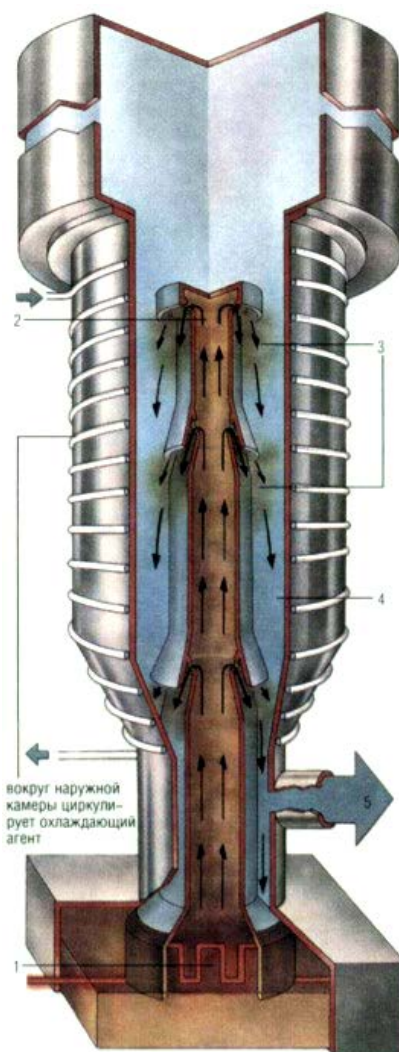


Рисунок 4 – Диффузионный вакуумный насос

В первом разделе «Математическое моделирование» работы дано краткая характеристика статистических методов для моделирования течения газа в капилляре через поток металлического пара. Во втором разделе «Метод статистических испытаний» представлены результаты моделирования: графические зависимости плотности потока падающих частиц по длине канала в зависимости от коэффициента прилипания канала и коэффициента поглощения молекул газа

металлическим паром, а также зависимости вероятности перехода молекул газа через трубу от потока металлического пара. В третьем разделе «Статистический метод частиц в ячейках» дано описание метода, отмечены основные допущения, необходимые для создания математической модели, представлены расчетная схема, алгоритм реализации и результаты моделирования (изменение давления по длине канала, в его сечении и в зависимости от времени).

1 Математическое моделирование

Объектом исследования в данной работе является *течение газа через поток металлического пара* относительно высокой концентрации (отношение давление пара к давлению газа в канале примерно равно 10^5), поэтому течение в канале будет соответствовать переходному режиму течения или началу вязкостного. Это позволяет описать течение пара с помощью законов ламинарного течения, а для разреженного газа применить метод Монте-Карло.

Статистический подход позволяет создать относительно простую математическую модель, позволяющую довольно точно описать процесс течения газа через поток пара металла. Для исследования указанных выше процессов были разработаны две математические модели, основанные на монте-карловском методе численной реализации физического процесса:

- математическая модель на основе метода статистических испытаний (метод пробной частицы);
- математическая модель на основе PIC-метода (метод частиц в ячейках).

2 Метод статистических испытаний

Метод статистических испытаний позволяет создать относительно простую математическую модель [6], довольно точно описывающую процесс течения газа через поток пара металла. Достоинством данного подхода является относительно легко реализуемая возможность введения новых факторов и оценки

влияния сопутствующих процессов (например сорбционных процессов на поверхности канала или в молекулах металлического пара, направление и скорость потока металлического пара, эффект скольжения на поверхности канала [8]).

С помощью данной модели было исследовано влияние коэффициента прилипания трубы β на распределение плотности потока падающих молекул по длине трубы для случаев сонаправленного и встречного движения потоков газа и пара (рис.5), коэффициента прилипания трубы K , а также влияние на вероятность перехода направления и величины потока пара кадмия Q (рис. 6, 7).

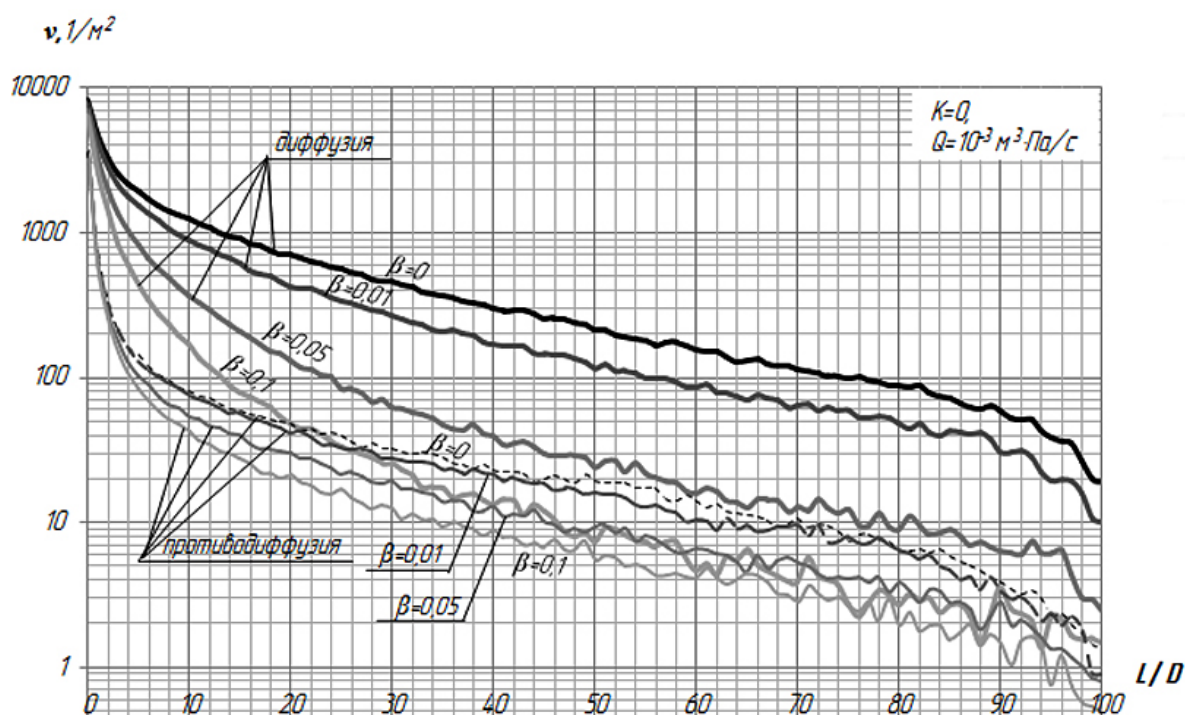


Рисунок 5 - Изменение плотности потока падающих частиц по длине трубы при различных значениях коэффициента прилипания трубы β для случаев диффузии и противодиффузии

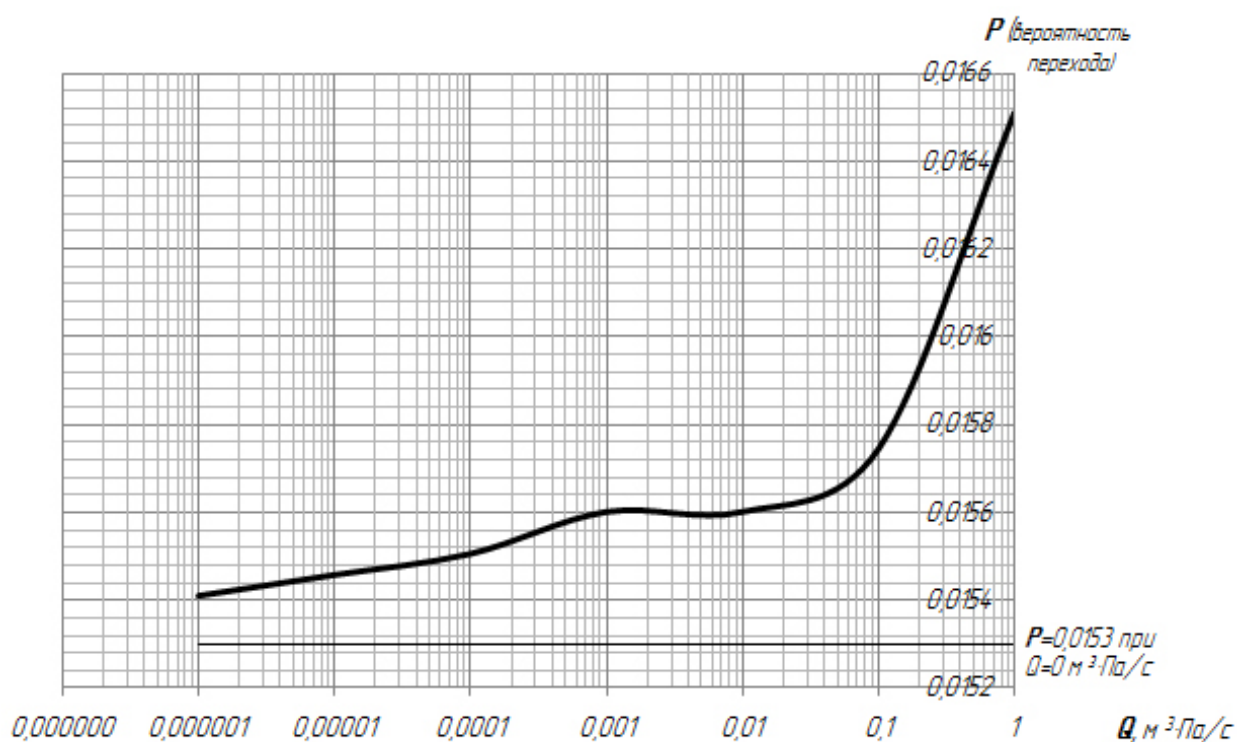


Рисунок 6 – Зависимость вероятности перехода P молекул газа через трубу от потока пара Q в случае сонаправленного движения потоков газа и пара кадмия (диффузия)

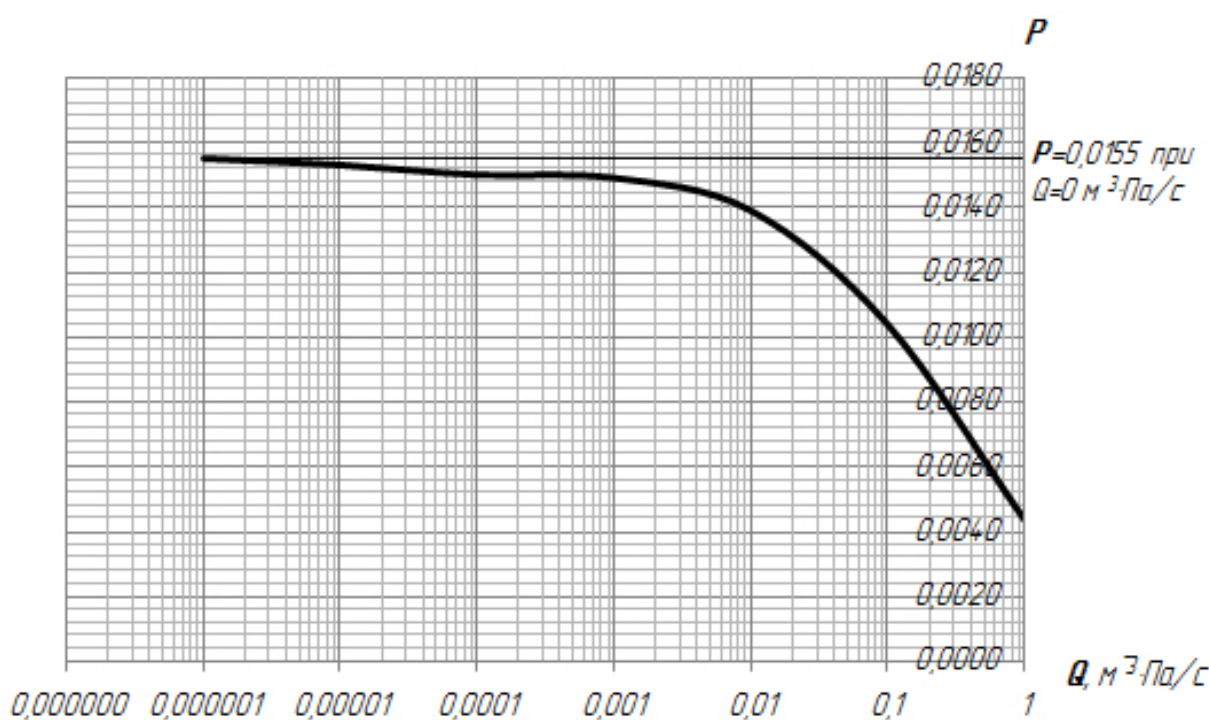


Рисунок 7 – Зависимость вероятности перехода P молекул газа через трубу от потока пара Q в случае встречного движения потоков газа и пара кадмия (противодиффузия)

Однако данная модель не отображает развитие процессов во времени, не подходит для моделирования пространственно-неоднородных течений (различные возмущающие воздействия, сложная конфигурация канала, высокая скорость потока пара), поэтому была разработана еще одна математическая модель, основанная на методе частиц в ячейках. Сравнительная таблица этих моделей приведена в приложении А.

3 Статистический метод частиц в ячейках

Статистическим методом частиц в ячейках, разработанным Ф. Х. Харлоу, при правильном задании граничных условий можно достаточно точно смоделировать исследуемый процесс. Суть метода заключается в следующем: моделируемая среда заменяется системой из конечного числа N частиц фиксированной массы. Частицы распределены в начальный момент времени по ячейкам неподвижной эйлеровой сетки в координатном пространстве в соответствии с начальными данными (рисунок 8). В данный момент времени t_a в каждой ячейке j находится $N(a, j)$ частиц, обладающих некоторыми значениями скоростей. В методе используется расщепление физических процессов на временном шаге Δt , и процесс эволюции такой совокупности частиц на Δt можно разделить на два этапа

- 1) Изменение внутреннего состояния совокупности частиц в ячейках в предположении их неподвижности. Частицы только сталкиваются со своими соседями по ячейке (*столкновительная релаксация*).
- 2) Смещение частиц пропорционально их скоростям и шагу по времени без изменения внутреннего состояния подсистем (*бесстолкновительная релаксация*).

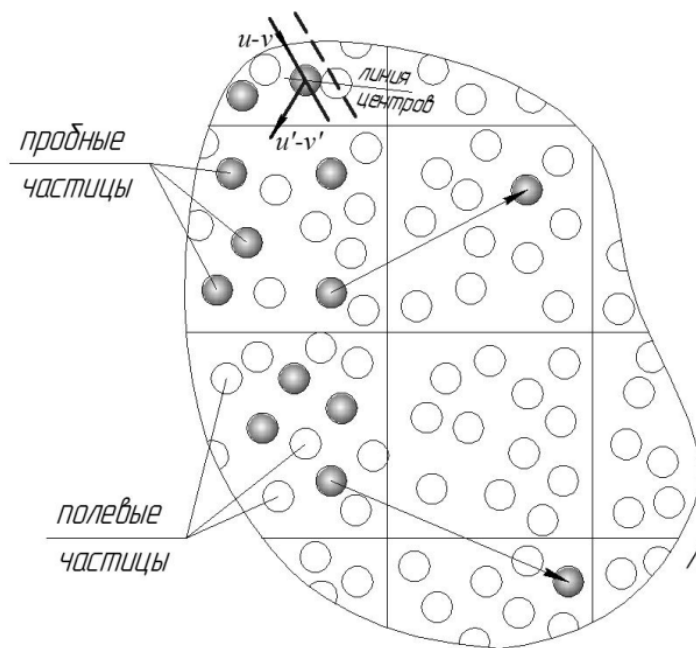


Рисунок 8 – Расчетная сетка для метода частиц в ячейках

3.1 Основные допущения

В модели были приняты следующие основные допущения:

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

3.2 Расчетная схема

В качестве расчетной схемы принято течение газа в цилиндрическом капилляре (рисунок 9).

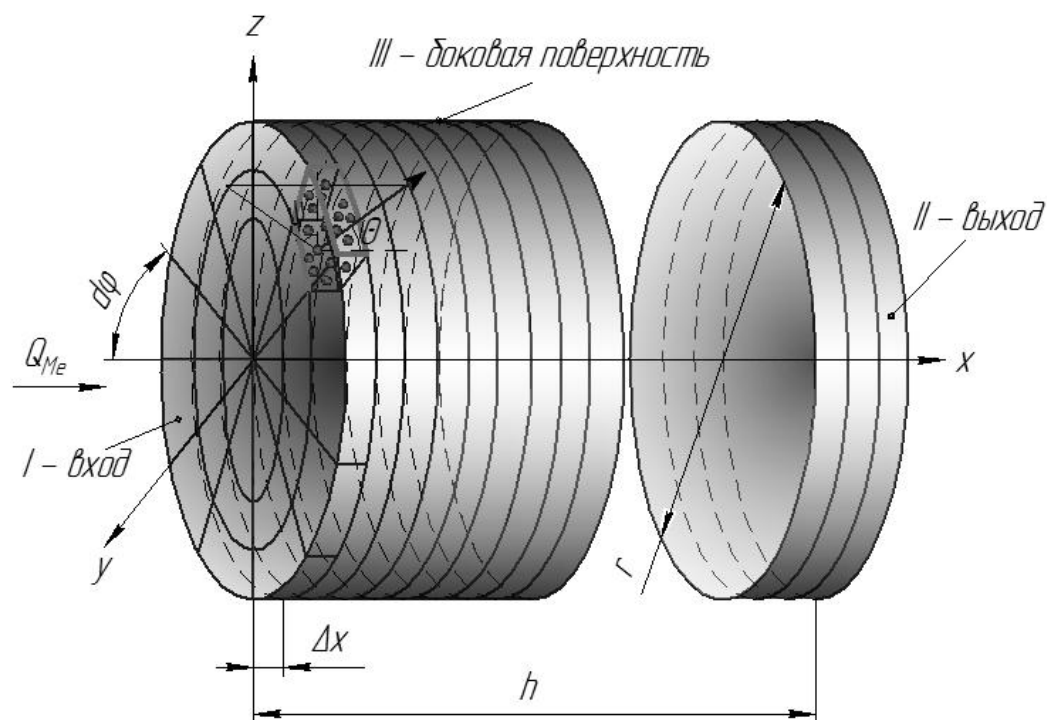


Рисунок 9 – Расчетная схема течения газа через капилляр длиной h и радиуса r

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

Под столкновением подразумевается случайное событие, в результате которого точка $\mathbf{C} = \{\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_N\}$ мгновенно изменяет свое значение на $\mathbf{C}'$, причем результатом столкновения может быть изменение значений лишь какой-либо одной пары векторов $(\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j)$; новые значения $\mathbf{c}_i', \mathbf{c}_j'$ пары испытавшей столкновение –

случайные величины, но $G_{ig} = (\mathbf{c}_i + \mathbf{c}_j) / 2$ и $g_{ig} = |\mathbf{c}_i - \mathbf{c}_j|$ не меняются в результате столкновения.

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

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

где $\omega_m = \frac{g_{ij}\sigma}{V}$, $\sigma = \frac{\pi}{4}(d_g + d_{cs})^2$ - полное сечение столкновений, $\lambda = \sum_{m=1}^k \omega_m$ - условная частота столкновений пар при фиксированном наборе $g_1, \dots, g_k$.

Время ожидания столкновения имеет распределение

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

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

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

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

где s_c - среднее число столкновений.

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

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

а соответствующее ей распределение равно

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

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

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

3.3 Алгоритм реализации математической модели

Этап I. Алгоритм моделирования столкновений. Пусть исследуемый интервал времени Δt порядка времени свободного пробега.

- 1) В системе из N частиц в ячейке для каждой частицы разыгрывается вектор скорости (модуль скорости и два угла в сферической системе координат). Разыгрываются $\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j$ пробной и полевой частиц. Скорость молекул цезия определяется для каждой ячейки. Давление цезия относительно высокое, что позволяет описать течение потока пара металла с помощью законов ламинарного течения жидкости. Для решения данной задачи за основу взято течение Пуазейля. Скорость скольжения определяется по методике, основанной на течении Куэтта [8]. В ячейке объемом V , в которой находится N_{np} пробных частиц, выбирается пара $(\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j)$ с номером m в

соответствии с условной вероятностью столкновения P_m . Далее датчиком случайных чисел генерируется случайное число ξ , равномерно распределенное на участке $[0;1]$, и определяется номер пары m , испытавшей столкновение из неравенства

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

2) Разыгрывается время T ожидания столкновения данной пары в соответствии с распределением по показательному закону

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

Генерируется случайное число ζ и решается уравнение

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

Время накапливается в счетчике

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

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

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

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

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

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

Цикл из шагов 2-4 повторяется ровно s_c раз:

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

Этап II. Алгоритм сдвига можно представить выражением смещения каждой i -ой частицы:

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

На этом этапе также моделируется взаимодействие частиц с поверхностью канала.

3.4 Результаты моделирования

Численный эксперимент дает большое количество информации об эволюции $\mathbf{C}(t)$ каждой частицы рассматриваемой системы.

На рисунках 10 и 11 показано изменение давления в сечении и по длине канала в зависимости от времени. Профили падения давления по длине канала в фиксированный момент времени и в зависимости от времени в фиксированном сечении канала представлены на рисунках 12 и 13 соответственно.

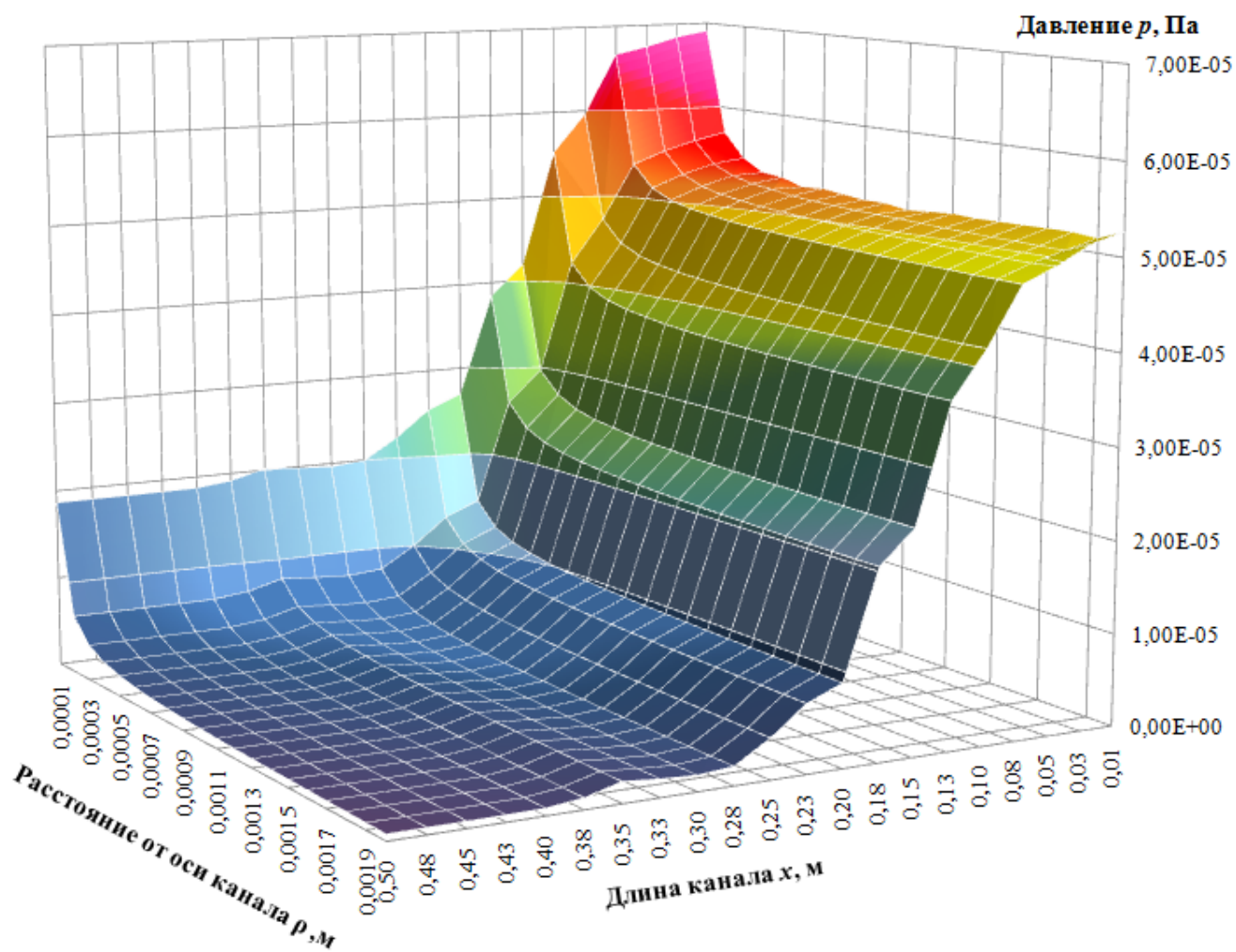


Рисунок 10 – Изменение давления в канале по длине и радиусу

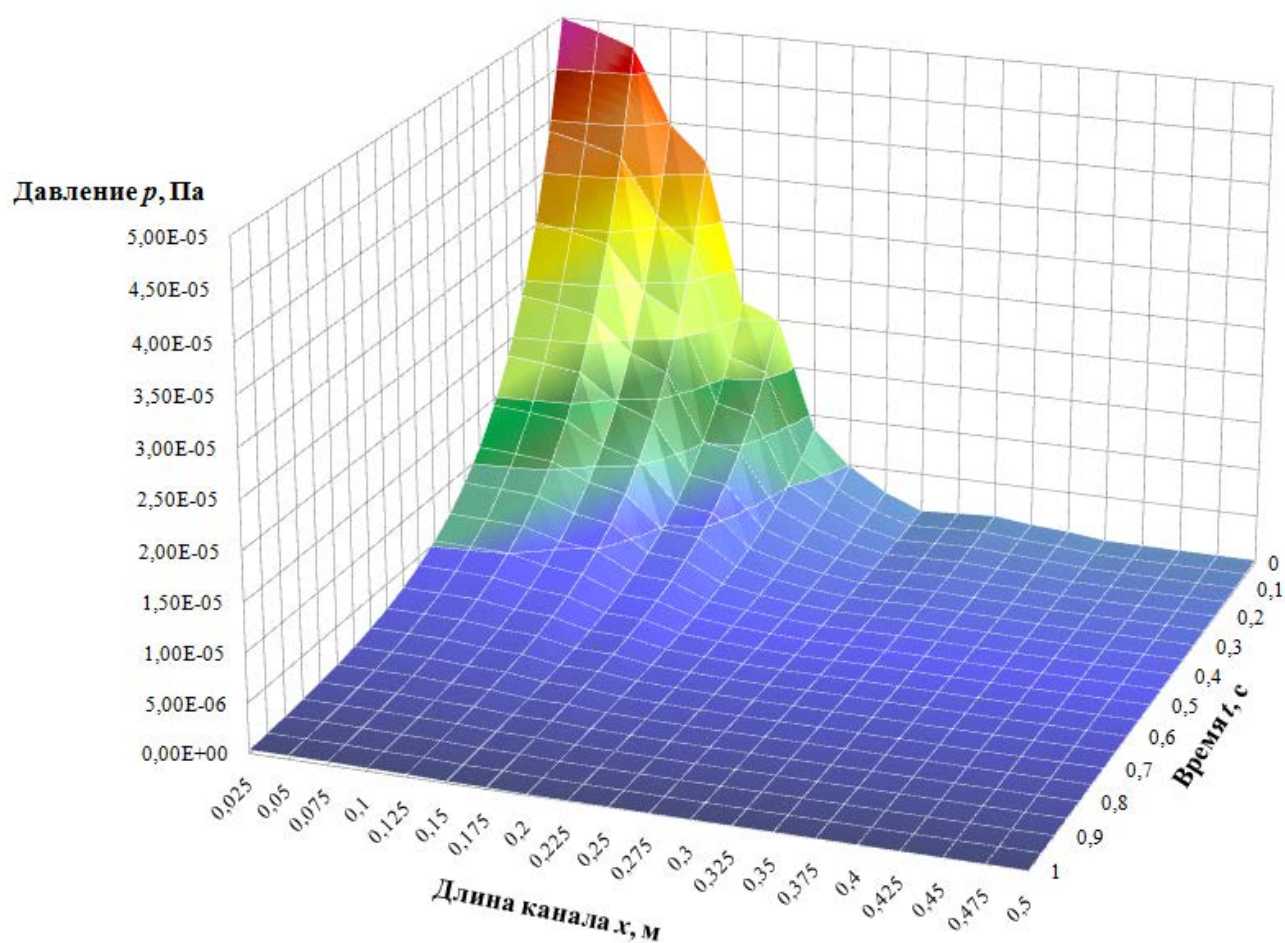


Рисунок 11 – Изменение давления по длине канала в зависимости от времени

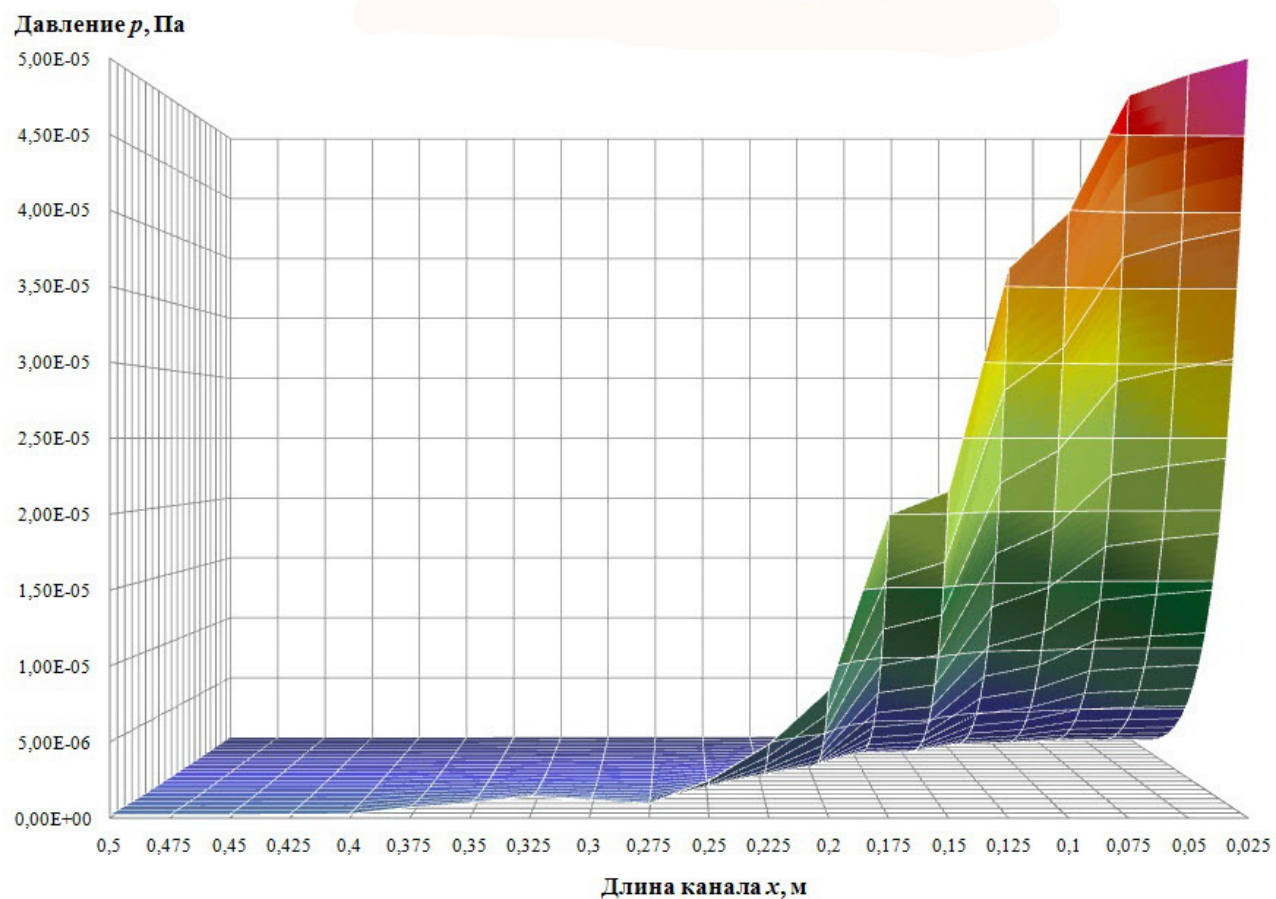


Рисунок 12 – Изменение давления по длине канала в фиксированный момент времени

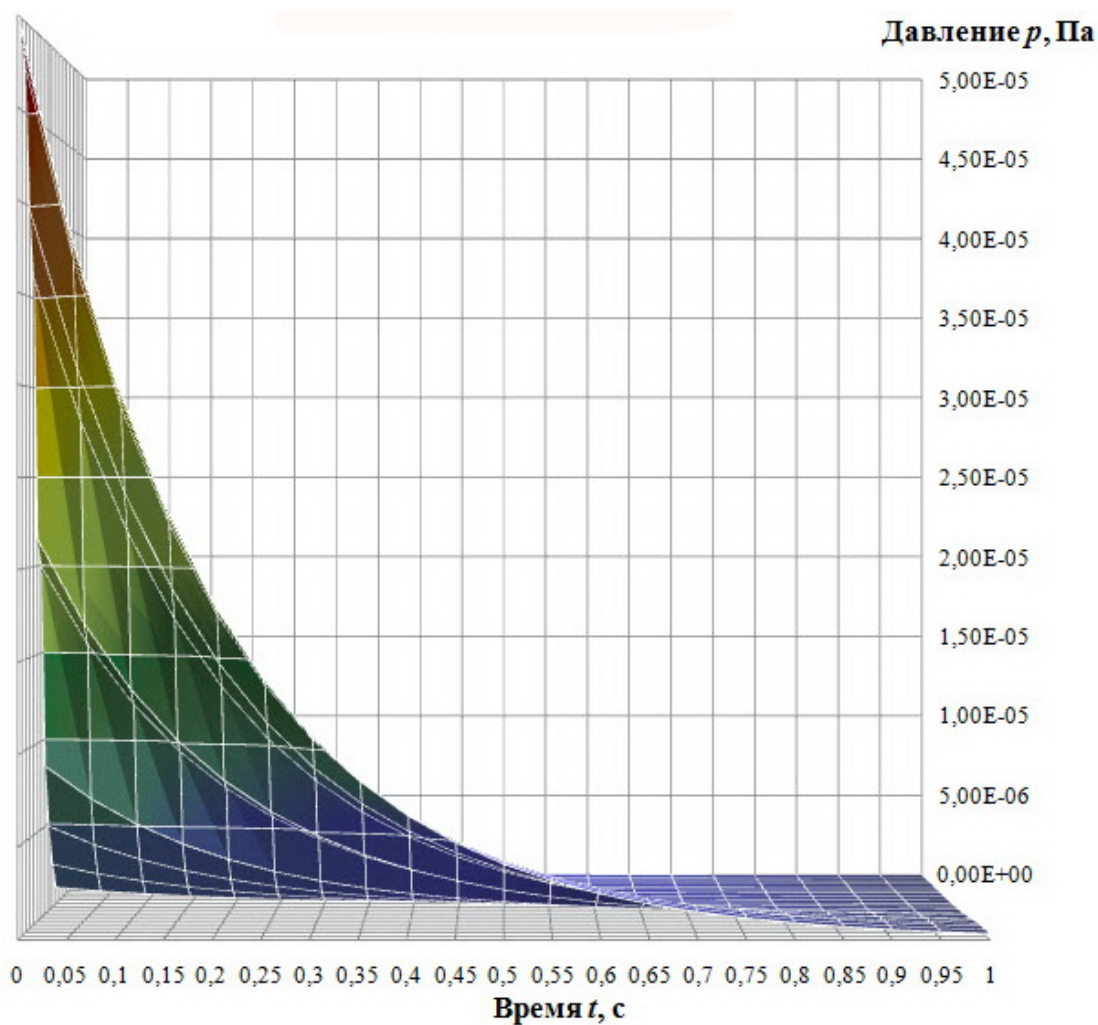


Рисунок 11 – Отображение во времени процесса падения давления в фиксированном сечении канала

Заключение

Модель на основе РИС-метода достаточно точно описывает поведение газовой среды, в системе с движущимся потоком металлического пара и может быть использована для расчета систем с большой скоростью потока пара, а также для каналов и профилей с геометрией любой сложности. Вообще говоря, данная модель подходит и для расчета систем, в которых присутствуют пары масла, при дополнительном исследовании поведения сложных органических молекул масла, взаимодействующих с молекулами газа.

Стоит отметить, что целью данного исследования являлась не только необходимость разработать метода для расчета частных практических задач, но создание математической модели, открытой для изменений и удобной для введения новых факторов (например, возмущающих воздействий, или иных сопутствующих процессов), что позволит оценить значимость, степень влияния, различных физических процессов, протекающих в исследуемой системе. Таким образом, в перспективе планируется создать исследовательский инструмент, дающий возможность понять суть реальных газодинамических процессов.

Литература

1. Barrer R.M., Nicholson D. Flow in capillary system.II. Low pressure transition flow of gases in short capillaries rectangular slits, beds of spheres and parallel capillary bundles// British Journal of Applied Physics. Vol. 17. N 8. P. 1091 – 1098.
2. Lund L.M., Berman A.S. Flow and self-deffusion of gases in capillaries// Journal of Applied Physics. 1966. Vol. 37. N 6. P. 2489 – 2495.
3. Абрамович Г.Н. Прикладная газовая динамика. – М.: Наука, 1969.
4. Дмитриевская Е.В., Сорокин С.И. Алгоритм расчета потока сжимаемого газа через цилиндрический капилляр при произвольных значениях числа Кнудсена// Вопросы атомной науки и техники. Серия: Ядерно-физические исследования (теория и эксперимент). 1990, вып.4(12), 1 – 100. с. 19 – 23.
5. Стависский Ю.Я. В космос на атомной тяге. Мечты и реальность // «Наука и жизнь», 2003, №10.
6. Никулин Н. К., Шемарова О. А. Исследование течения газа в канале при направленном движении потока пара металла методом пробной частицы // «Вестник МГТУ имени Н.Э. Баумана», серия «Машиностроение», 2011, специальный выпуск 2.
7. Вакуумная техника: справочник/ Демихов К.Е., Панфилов Ю.В., Никулин Н.К. и др.– М.: Машиностроение, 2009.- 590с.

8. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. – М.: Мир, 1976.-556с.
9. Ильичева Г.М., Корсоюцкая П.Я. и др. Вычислительные методы в динамике разреженных газов: сборник. – М.: Мир, 1968.- 278с.
10. Белоцерковский О.М. Численное моделирование в механике сплошных сред. – М.: Физико-математическая литература, 1994.-448с.
11. Клейнен Дж. Статистические методы в имитационном моделировании. Выпуск 1. – М.: Статистика, 1978.-224 с.
12. Клейнен Дж. Статистические методы в имитационном моделировании. Выпуск 2. – М.: Статистика, 1978.-336 с.
- 13.

Приложение А

Сравнение статистических математических моделей

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ	
Монте-Карловский метод численной реализации физических процессов	
Метод РС	Метод пробной частицы
<u>Используется расщепление физических процессов на временном шаге Δt.</u> В данный момент времени $t\alpha$ в каждой ячейке j неподвижной сетки находится $N(\alpha, j)$ частиц, обладающих некоторыми значениями скоростей. Процесс эволюции такой системы на шаге Δt можно разделить на два этапа: I. Столкновительная релаксация. II. Бесстолкновительная релаксация.	В системе прослеживают большое число траекторий движения молекул от момента «старта» с входного сечения до момента, когда частица покинет систему, либо будет сорбирована поверхностью трубы или паром металла.
<u>Ограничения:</u> подходит для моделирования процессов в свободном молекулярном и молекулярно-вязкостном режимах течения.	<u>Ограничения:</u> • Не отображает развитие процесса во времени; • не подходит для описания пространственно-неоднородных течений (различные возмущающие воздействия, сложная конфигурация канала, высокая скорость потока пара); • молекулярный режим течения.