

УДК 533.5

Проводимости сложных элементов вакуумных систем в широком диапазоне давлений

Шемарова О.А.^{1,*}, Никулин Н.К.¹

^{*}holga.al@gmail.com

¹МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

Для описания пространственно-неоднородных течений газа в широком диапазоне чисел Кнудсена создана математическая модель на основе статистического метода частиц в ячейках и разработан алгоритм для расчета параметров течения разреженного газа в вакуумной системе. Основные допущения, принятые в модели: столкновение молекул рассматривается как упругий удар жестких сфер; учитываются только бинарные столкновения; молекулы газа движутся хаотически; время столкновения стремится к нулю; распределение скоростей молекул определяется законом Максвелла. В работе дана схема расчета проводимости вакуумных систем в молекулярном и переходном режимах течения и представлены данные, полученные в результате численного эксперимента.

Ключевые слова: вакуум, статистическое моделирование, метод частиц в ячейках, проводимость, неоднородное течение газа

Введение

Одним из наиболее важных параметров вакуумных системы является проводимость, которая определяется режимом течения и геометрией системы.

Теории, позволяющей описать течение газа в переходном режиме $0,01 < Kn < 0,33$ [1], в настоящее время не существует. Также не разработан и метод расчета параметров течения в переходном режиме, подходящий для систем с геометрией любой сложности и учитывающий взаимодействие молекул газа со стенками канала и между собой.

Методы, которые используются для численного моделирования и расчета параметров газовых потоков, охватывают ряд частных случаев, а границы их применимости зависят от степени разрежения. Для вязкостного режима течения газа численное решение уравнений Навье-Стокса традиционными методами (метод конечных разностей, метод конечных объемов, спектральные методы и т.д.) не представляет сложности. Для режима скольжения $10^{-3} < Kn < 10^{-1}$ данный подход все еще может использоваться, но необходимо учитывать граничные условия скольжения на стенке канала. Karniadakis и Beskok [2] разработали спектральный алгоритм «μflow», позволяющий применять уравнения Навье-Стокса для моделирования газовых потоков в вязкостном режиме и режиме скольжения.

Для моделирования переходного режима течения газа лучше подходят молекулярные методы. Метод прямого моделирования Монте-Карло, разработанный Бердом [3], изначально широко использовался для расчета потоков разреженных газов [4,5]. Тем не менее эти методы не учитывают взаимодействие между частицами, которое свойственно для переходного режима течения.

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

1. Статистический PIC-метод

Методом частиц в ячейках (или PIC-метод), разработанный Ф. Х. Харлоу [6], при правильном задании граничных условий позволяет достаточно точно смоделировать исследуемый процесс. Основой численного эксперимента является расщепление физических процессов межмолекулярных столкновений и движения частиц на временном шаге δt . Моделируемая среда заменяется системой из конечного числа N частиц фиксированной массы, распределенных по ячейкам неподвижной сетки. Процесс эволюции такой совокупности частиц на δt можно разделить на два этапа:

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

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

2. Основные допущения

В модели были приняты следующие основные допущения:

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

3. Математическая модель течения газа и алгоритм определения проводимости

Под столкновением подразумевается случайное событие, в результате которого точка $C = \{c_1, \dots, c_N\}$ мгновенно изменяет свое значение на C' , причем результатом столкновения может быть изменение значений лишь какой-либо одной пары векторов (c_i, c_j) ; но-

вые значения $\mathbf{c}_i', \mathbf{c}_j'$ пары испытавшей столкновение – случайные величины, но $\mathbf{G}_{ig} = (\mathbf{c}_i + \mathbf{c}_j)/2$ и $g_{ig} = |\mathbf{c}_i - \mathbf{c}_j|$ не меняются в результате столкновения.

Эволюция точки $\mathbf{C}(t)$ определяется последовательностью столкновений, разделенных случайными интервалами времени T . Вероятность того, что в ячейке объемом V , в которой находится N частиц, в момент времени t столкнулась пара частиц $(\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j)$ номером $m = 1, 2, \dots, N_{np} \cdot N_n$ (при условии, что данный момент столкновение одной из пар состоялось) равна [7]

$$P_m = \frac{\omega_m}{\lambda},$$

где $\omega_m = \frac{g_{ij}\sigma}{V}$, $\sigma = \frac{\pi}{4} d_g^2$ – 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

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

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. Тогда на каждом интервале времени должно выполняться равенство:

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

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:

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

а соответствующее ей распределение равно:

$$F(T) = \int_0^t f(T) dT = 1 - e^{-\lambda t} \Rightarrow \lambda = \sum_{m=1}^k \omega_m.$$

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.

Далее приведен алгоритм реализации математической модели для вычисления проводимости.

На первом этапе моделируются только столкновения частиц:

1. В системе из N частиц в ячейке для каждой частицы разыгрывается с помощью ДСЧ вектор скорости $\mathbf{c}_i(c_i, \theta_i, \psi_i)$ в соответствии с распределением Максвелла [8]. В ячейке объемом V , в которой находится N частиц, выбирается пара $(\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j)$ с номером m в соответствии с условной вероятностью столкновения P_m . Далее ДСЧ генерируется случайное число ξ , равномерно распределенное на участке $[0;1]$, и определяется номер пары m , испытавшей столкновение из неравенства:

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

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

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

Генерируется случайное число ζ и решается уравнение:

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

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

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

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

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

$$f(\psi)d\psi = \frac{d\psi}{2\pi} \text{ и } f(\theta)d\theta = \frac{g_{ij}\sigma(g_{ij}, \theta)}{g_{ij}\sigma(g_{ij})} \sin \theta d\theta.$$

Цикл из шагов 2-3 повторяется s_c раз: $S_{s_c} \leq \Delta t < S_{s_c+1}$.

На втором этапе моделируется смещение частиц пропорционально их скоростям и шагу по времени относительно неподвижной сетки. Перемещение каждой i -ой частицы задается выражением:

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

На этом этапе также моделируется взаимодействие частиц с поверхностью канала. Отражение от стенок канала моделируется по диффузному закону [8]. При диффузном законе распределения молекул при отражении от стенок число молекул dN_θ , попавших в элементарный телесный угол $d\Omega = 2\pi \cdot \sin \theta d\theta$, пропорционально $\cos \theta$:

$$dN_\theta = Nd\Omega \cos \theta,$$

откуда плотность вероятности распределения молекул по углу

$$p(\theta) = A \cdot \sin \theta \cdot \cos \theta.$$

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

$$\int_0^{\theta} p(\theta) d\theta = \xi \Rightarrow \theta = \arcsin \sqrt{\xi},$$

где ξ - случайное число, равномерно распределенное в интервале $[0;1]$.

На заключительном этапе вычисляется проводимость рассматриваемой системы. Численный эксперимент дает большое количество информации об эволюции $C(t)$ каждой частицы рассматриваемой системы. В результате расчета мы имеем информацию о концентрации газа в каждой ячейке эйлеровой сетки (количестве частиц в объеме ячейки). Обладая этой информацией, можно без труда определить давление в любой точке системы и вычислить проводимость для любого режима течения по формуле [1]

$$U = Q / (p_1 - p_2),$$

где Q – поток газа, задаваемый как исходные данные.

На рисунке 1 представлено сравнение полученных в результате расчета методом частиц в ячейках значений проводимости со значениями, полученными по формулам Кнудсена [1], которые по сути являются эмпирическим обобщением экспериментальных исследований.

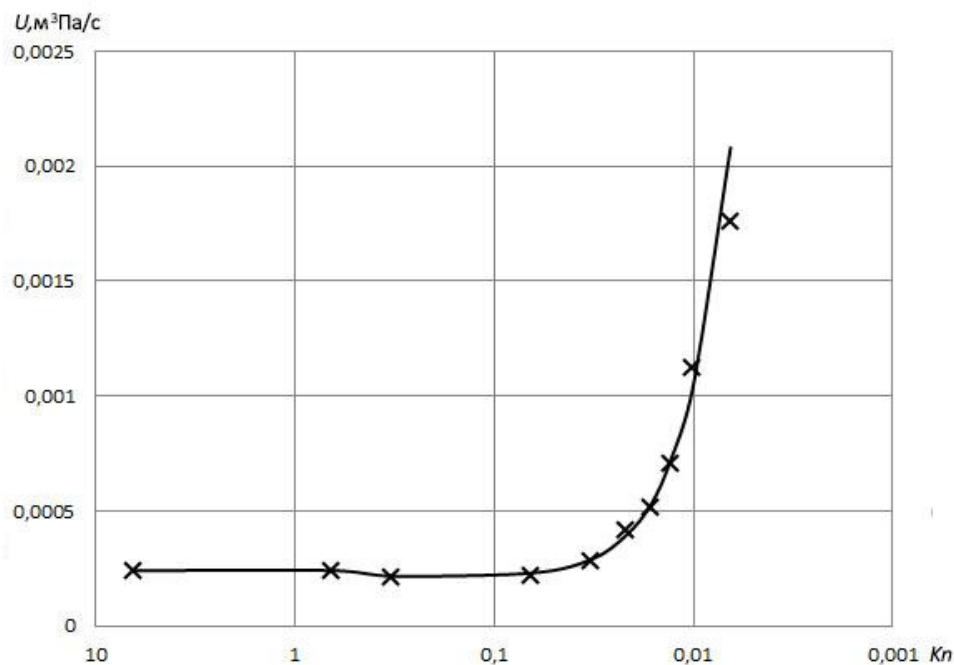


Рис.1. Изменение проводимости U цилиндрического трубопровода ($D=0,01$ м, $l=0,5$ м) в зависимости от числа Кнудсена Kn :

× - метод частиц в ячейках, — - эмпирические зависимости Кнудсена [1]

На рисунке 2 показана оценка погрешности проводимости U_{PIC} вычисленной методом частиц в ячейках относительно проводимости вычисленной по формулам Кнудсена U_{Kn} :

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

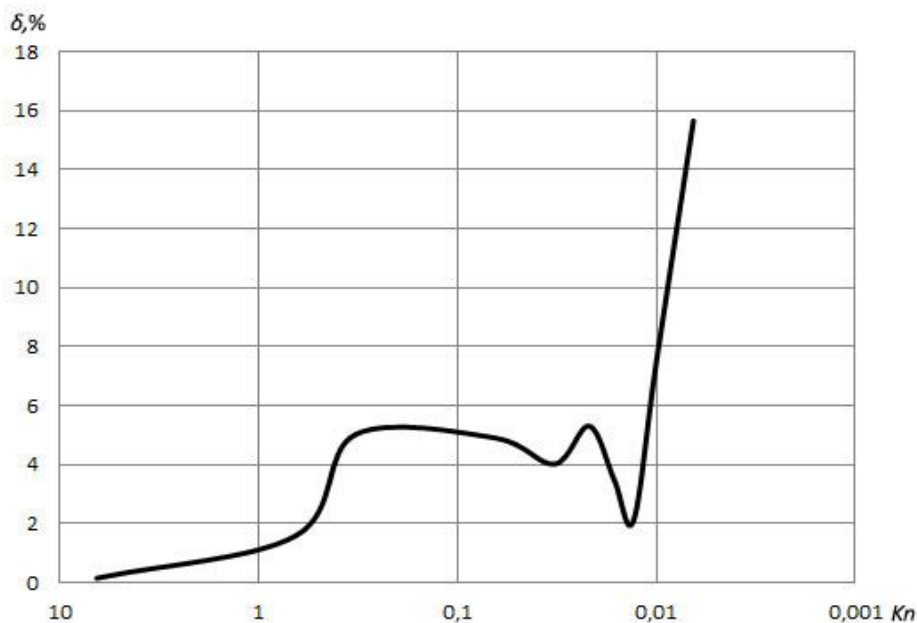


Рис.2. Погрешность δ метода частиц в ячейках в зависимости от Kn

Для молекулярного режима течения вместо проводимости удобно использовать вероятность перехода молекул через вакуумную систему (коэффициент Клаузинга):

$$\alpha = \frac{N_{вых}}{N},$$

где $N_{вых}$ - число молекул, попавших в выходное сечение системы, N - общее число рассматриваемых молекул. Тогда проводимость определяется по формуле

$$U = 36,4F \sqrt{\frac{T}{M}} \cdot \alpha.$$

На рисунке 4 представлено сравнение результатов расчета, которые получены зональным методом, основанным на вычислении осредненных характеристик лучистого теплообмена [9], с результатами расчета методом частиц в ячейках для шевронных экранов (рис.3).

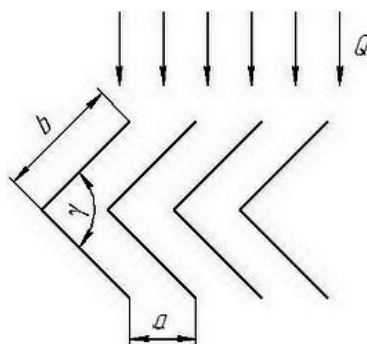


Рис.3. Схема экрана шевронного типа

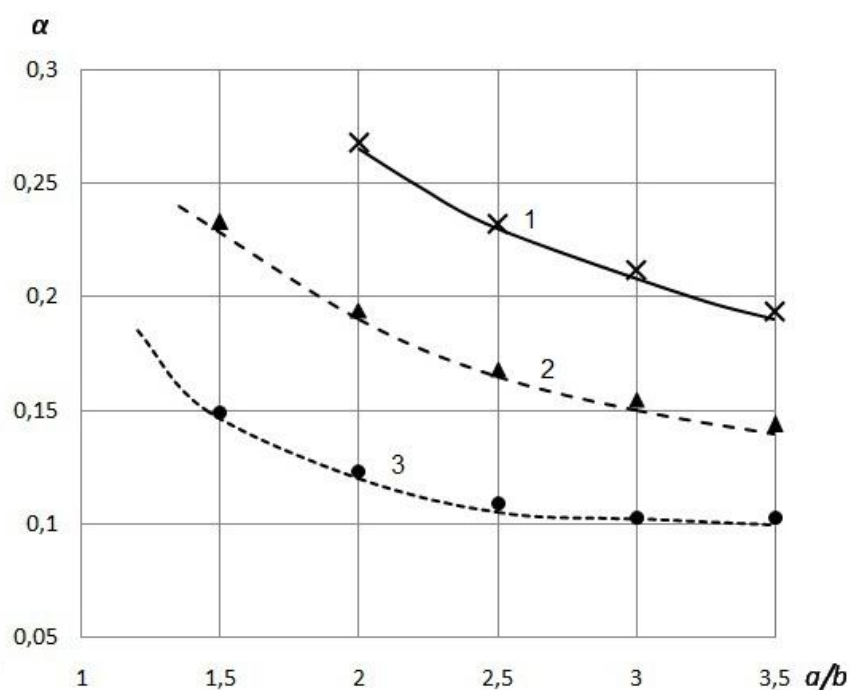


Рис.4. Зависимость пропускной способности от геометрических размеров шевронного экрана:

1 – $\gamma=120^\circ$; 2 – $\gamma=90^\circ$; 3 – $\gamma=60^\circ$

Точками на кривых отмечены результаты расчета методом частиц в ячейках.

Заключение

В рассмотренной модели на основе статистического метода частиц в ячейках точность описания поведения газовой среды в большой степени зависит от точности задания граничных условий.

В молекулярном и переходном режимах течения данный метод определения проводимости дает высокую точность. В вязкостном режиме точность метода снижается, так как начинается область сплошной среды.

Данная модель может быть использована не только для определения проводимости вакуумных систем, а так же для расчета параметров газовых течений в системах с боль-

шими потоками (нет ограничений по величине скорости потока), для каналов и профилей с геометрией любой сложности. Важной особенностью является то, что она позволяет учесть процессы сорбции газа на поверхности канала и градиент температуры в системе.

Список литературы

1. Демихов К.Е., Панфилов Ю.В., Никулин Н.К., Автономова И.В. Вакуумная техника: справочник. М.: Машиностроение, 2009. 590 с.
2. Karniadakis G.E., Beskok A., Aluru N. Microflows. Fundamentals and Simulation. New York, Springer-Verlag, 2002.
3. Bird G.A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Oxford, Clarendon Press, 1998.
4. Muntz E.P. Rarefied gas dynamics // Annual Review of Fluid Mechanics. 1989. Vol. 21. P. 387-417. DOI: [10.1146/annurev.fl.21.010189.002131](https://doi.org/10.1146/annurev.fl.21.010189.002131)
5. Cheng H., Emmanuel G. Perspectives on hypersonic nonequilibrium flow // AIAA Journal. 1995. Vol. 33, no. 3. P. 385-400. DOI: [10.2514/3.12446](https://doi.org/10.2514/3.12446)
6. Харлоу Ф.Х. Численный метод частиц в ячейках для задач гидродинамики // Вычислительные методы в гидродинамике: сб. / Под ред. Б. Олдер, С. Фернбах, М. Ротенберг. М.: Мир, 1967. С. 316-342.
7. Белоцерковский О.М. Численное моделирование в механике сплошных сред. М.: Физматлит, 1994. 448 с.
8. Никулин Н.К., Шемарова О.А. Исследование течения газа в канале при направленном движении потока пара металла методом пробной частицы // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Машиностроение. 2011. Спец. вып. № 2. С. 41-52.
9. Болгаров Л.Н. Пропускная способность шевронных экранов криогенных вакуумных камер // Физика и техника вакуума: сб. ст. Казань: Изд-во Казанского ун-та, 1974. С. 82-86.

Conduction of Complex Elements of Vacuum Systems in a Wide Range of Pressures

O.A. Shemarova^{1,*}, N.K. Nikulin¹

[*holga.al@gmail.com](mailto:holga.al@gmail.com)

¹Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia

Keywords: vacuum, statistical modeling, the method of particles in cells, conductivity, inhomogeneous flow of gas

The article presents a statistical mathematical model of a rarefied gas flow based on the method of particles in cells. This approach enables to define basic parameters of gas flow and vacuum systems in a wide range of pressures, including such an important parameter as conductivity of the vacuum system.

Key assumptions in designing a mathematical model are: describing the collision of the molecules as hard spheres of elastic collision; considering the collisions to be paired and instant; the molecules velocity distribution corresponding to the Maxwell distribution. The essential feature is simulation of waiting time for the next collision. It depends on the state of the entire system of particles and is independent of what pair is involved in collision.

The paper presents a detailed algorithm for implementation of a mathematical model to calculate conductivity. It includes three main stages. The first stage simulates only collisions of particles within the fixed cell of grid. The second stage simulates displacement of particles in accordance with their speed and time step, as well as interaction with the internal surfaces of the vacuum system. The final stage determines system conductivity.

As an example, numerical experiments were conducted to determine conductivity of the long cylindrical channel in a wide range of pressures and conductivity of chevron screens too. Obtained data are compared with experimental data, and an error is evaluated. In molecular and transient conditions of gas flow the method of particles in cells gives high accuracy. In the viscous conditions the accuracy decreases because of originating region of continuous medium.

This model can be used not only to determine conductivity of vacuum systems, but also to calculate gas flow parameters in systems with large flows (no restrictions for the flow rate value) for the channels and profiles with geometry of any complexity. An important feature is that it allows taking into account the sorption of gas on the channel surface and the temperature gradient in the system.

Model based on the method of particles in cells can be used to calculate such systems as power generating channels of thermionic converter-reactors used in space vehicles, where it is necessary to know the parameters of a rarefied gas through a vapor flow of low-melting metal.

References

1. Demikhov K.E., Panfilov Yu.V., Nikulin N.K., Avtonomova I.V. *Vakuumnaya tekhnika: spravochnik* [Vacuum technology: Handbook]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 2009. 590 p. (in Russian).
2. Karniadakis G.E., Beskok A., Aluru N. *Microflows: Fundamentals and Simulation*. New York, Springer-Verlag, 2002.
3. Bird G.A. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford, Clarendon Press, 1998.
4. Muntz E.P. Rarefied gas dynamics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 1989, vol. 21, pp. 387-417. DOI: [10.1146/annurev.fl.21.010189.002131](https://doi.org/10.1146/annurev.fl.21.010189.002131)
5. Cheng H., Emmanuel G. Perspectives on hypersonic nonequilibrium flow. *AIAA Journal*, 1995, vol. 33, no. 3, pp. 385-400. DOI: [10.2514/3.12446](https://doi.org/10.2514/3.12446)
6. Harlow F.H. The Particle-in-Cell Computing Method for Fluid Dynamics. In: Alder B., Fernbach S., Rotenberg M., eds. *Methods in Computational Physics. Vol. 3. Fundamental Methods in Hydrodynamics*. New York, Academic Press, 1964, pp. 319-343. (Russ. ed.: Harlow F.H. Chislennyy metod chastits v yacheykakh dlya zadach gidrodinamiki. In: Alder B., Fernbach S., Rotenberg M., eds. *Vychislitel'nye metody v gidrodinamike: sb.* Moscow, Mir Publ., 1967, pp. 316-342.).
7. Belotserkovskiy O.M. *Chislennoe modelirovanie v mekhanike sploshnykh sred* [Numerical simulation in continuum mechanics]. Moscow, Fizmatlit Publ., 1994. 448 p. (in Russian).
8. Nikulin N.K., Shemarova O.A. Study of Gas Flow in Channel with Directed Motion of Metal-Vapor Flow Using Method of Trial Particle. *Vestnik MGTU im. N.E. Baumana. Ser. Mashinostroenie = Herald of the Bauman MSTU. Ser. Mechanical Engineering*, 2011, spec. is. no. 2, pp. 41-52. (in Russian).
9. Bolgarov L.N. Throughput of chevron screens of cryogenic vacuum chambers. In: *Fizika i tekhnika vakuuma: sb. st.* [Physics and technology of vacuum: collected papers]. Kazan', KSU Publ., 1974, pp. 82-86. (in Russian).