

## К ВОПРОСУ ВЕРИФИКАЦИИ МОДЕЛЕЙ И МЕТОДОВ В ВАКУУМНОЙ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКЕ

Ю.М. Печатников

Государственный политехнический университет,  
195297, г. Санкт-Петербург, Россия, E-mail: yiryu@nt.ru, тел. 7-812-51031-10

Феноменологически построено кинетическое уравнение для описания неравновесных течений разреженного газа при среднем вакууме, которое решено для задачи расчета стационарного изотермического течения разреженного газа в каналах в переходной области, лежащей между молекулярной и вязкостной областями.

### ВВЕДЕНИЕ

В Испании в июле 2003 г. состоялась международная конференция по проблемам Vacuum Gas Dynamics, одно из направлений работы которой называлось: «Can we agree on a way to model transition gas flow?». Эта конференция показала, что на современном уровне для вычисления газовых потоков при среднем вакууме, как правило, применяют два подхода.

1. Используются полуэмпирические или оценочные формулы на базе макроскопических параметров: давление, температура.

2. Используются численные приближенные методы на базе микроскопических уравнений движения и законов взаимодействия молекул.

Отметим, что среди численных методов наиболее широко применяется метод прямого моделирования [1]. Данный метод является аппроксимацией уравнения Больцмана первого порядка. В то же время погрешность, с которой реализуется данный метод, определяется ошибкой, вносимой в величину среднего свободного пути молекул, которая асимптотически приближается к значению, даваемому кинетической теорией при приближении числа моделируемых частиц к числу молекул в реальном газе. Точность, с которой задаются законы взаимодействия между молекулами, также вносит погрешность в результаты, получаемые данным методом. То, что Г.Бердом рассматриваются только парные столкновения частиц в расчетной ячейке, в пределах которой свойства газа непостоянны, видимо также является ограничением применения этого метода при числах Кнудсена ниже 0,1. При реализации метода Г.Берда требуются значительные затраты ресурсов вычислительной техники, что затрудняет использование данного метода в инженерной практике.

Совершенствование методов расчета потоков разреженного газа при среднем вакууме в диапазоне чисел Кнудсена от 0,01 до 100 всегда представляло значительный интерес [2, 3].

В данной работе физическая и математическая модель течения разреженного газа представлена на мезоскопическом уровне. Под мезоскопическим уровнем описания движения молекул будем понимать такое приближение, которое дает более подробное описание, чем макроскопическое, поскольку включает в себя описание стохастических (вероятностных, статистических) свойств ансамбля молекул,

однако обрезает микроскопические уравнения движения отдельных молекул с помощью предположения о случайности таких параметров как скорость молекулы, частота соударений, длина свободного пути. При таком рассмотрении ансамбль молекул газового потока заменяем совокупностью подобных статистических групп молекул, которые обладают и отражают некоторые свойства ансамбля молекул, а также описываются одинаковыми уравнениями движения. Такую статистическую группу молекул назовем стохастической (статистической) молекулой. Движение стохастической (статистической) молекулы характеризуется средней скоростью, средней частотой соударений, средней длиной свободного пути в статистической группе молекул. Среди свойств, которыми обладает стохастическая (статистическая) молекула особо отметим то, что уравнения, описывающие ее движение, формируются как результат осреднения микроскопических движений отдельных молекул и их взаимодействия как в группе, так и с поверхностью микрообъема, в котором находится эта группа молекул. Отметим, что мезоскопические уравнения движения стохастической (статистической) молекулы необратимы, а лежащие в их основе микроскопические уравнения обратимы во времени.

### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим задачу расчета изотермического стационарного течения разреженного газа в каналах при малых перепадах давлений в диапазоне чисел Кнудсена от 0,01 до 100, поскольку данный режим течения наблюдается практически в любых вакуумных системах, обеспечивающих процесс откачки вакуумной камеры до низких и средних давлений.

Исходя из положений кинетической теории о неравновесном течении газа построим на мезоскопическом уровне физическую модель движения *стохастической* молекулы, которая включает как парные, так и групповые взаимодействия отдельных молекул в статистической группе.

Газовый поток представляем как совокупность детерминированных стохастических молекул.

Выделим в потоке газа локальный произвольный пространственный микрообъем  $H$ . Предположим, что функция плотности  $f$  молекул в микрообъеме  $H$  изменяется вследствие движения стохастических молекул и при столкновениях. Межмолекулярные

столкновения приводят как к убыли, так и увеличению числа молекул в объеме:

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

где  $\mathbf{r}$  – радиус-вектор стохастической молекулы;  $\mathbf{V}$  – вектор скорости стохастической молекулы;  $t$  – время;  $\mathbf{F}$  – вектор силы, действующий на стохастическую молекулу, принимаем  $\mathbf{F} = \mathbf{F}_g + \Phi$ , где  $\mathbf{F}_g$  – вектор внешней силы,  $F_g = 0$  [1];  $\Phi$  – вектор силы (внутренний «шум»), учитывающий динамику взаимодействия в статистической группе детерминированных молекул и обусловленный несимметричностью флуктуаций движения молекул в статистической группе молекул при неравновесном течении разреженного газа [4, 5];  $m$  – масса молекулы;  $U$  – разность между числом стохастических молекул покинувших и влетевших в микрообъем  $H$  в результате столкновений в единицу времени.

Внутренний «шум» ( $\Phi$ ) является неотъемлемым свойством самого механизма эволюции состояния статистической группы детерминированных молекул и не может быть отделен от уравнения движения стохастической молекулы. Влияние  $\Phi$  может быть пояснено при рассмотрении динамики взаимодействия группы молекул в микрообъеме и характера движения отдельных молекул в статистической группе в условиях градиента плотности потока газа.

Выделим в микрообъеме  $H$  локальный произвольный пространственный микрообъем  $W$ , в центре которого находится «пробная» молекула. Размеры этого микрообъема в общем случае определяются родом и внутренними свойствами разреженного газа (sort).

«Пробная» молекула свободно блуждает в  $W$ , изменяя направление своего движения только вследствие взаимодействия с другими молекулами газового потока. «Пробная» молекула последовательно соударяется со всеми молекулами внутри этого микрообъема. При каждом соударении на «пробную» молекулу воздействуют ближние ( $\mathbf{F}_a$ ) и, возможно, дальние корреляции ( $\mathbf{F}_{ij}$ ) от группы молекул, находящихся внутри микрообъема  $W$  [6]. Особенности взаимодействия «пробной» молекулы с молекулами, находящимися в слое около границ микрообъема  $W$ , также оказывают влияние на характер движения «пробной» молекулы ( $\mathbf{F}_b$ ).

Малость значений потенциалов межмолекулярного взаимодействия делает возможным описать результат последовательных соударений (динамических взаимодействий) «пробной» молекулы с молекулами, которые найдутся внутри микрообъема  $W$ , в соответствии с принципом суперпозиции:

$$\Phi = \sum_{k=1}^N (\mathbf{F}_a + \mathbf{F}_{ij} + \mathbf{F}_b), \quad (2)$$

где вектор  $\Phi$  – результирующая сила динамического взаимодействия пробной молекулы с группой молекул в микрообъеме  $W$ ;  $N$  – число молекул в микрообъеме  $W$ .

Статистически отдельные молекулы из статистической группы воздействуют на движение «пробной» молекулы случайным образом. Поскольку в условиях равновесия флуктуаций движения молекул симметричны, то  $\Phi = 0$ . В условиях градиента плотности потока газа в микрообъеме  $W$  вследствие несимметричности флуктуаций движения отдельных молекул, находящихся также в микрообъеме  $W$ , среднее значение этих флуктуаций должно быть отлочно от нуля.

Уравнение движения стохастической молекулы формируется в результате осреднения скорости, частоты соударений, длины свободного пути «пробной» молекулы в  $W$ .

Поскольку уравнение движения стохастической молекулы формируется и как результат осреднения динамического взаимодействия «пробной» молекулы в статистической группе молекул, то следует, что движение стохастической молекулы при неравновесном состоянии является предпочтительно направленным. При этом именно под воздействием силы  $\Phi$  стохастическая молекула приобретает преимущественное и предпочтительное направление своего движения вдоль градиента концентрации молекул в потоке газа:

$$\Phi t = m \mathbf{V}_\Phi, \quad (3)$$

где  $\mathbf{V}_\Phi$  – одна из составляющих скорости стохастической молекулы ( $V$ ), возникающая под действием силы  $\Phi$ ;  $m$  – масса молекулы;  $t$  – время движения стохастической молекулы.

Отметим особенность воздействия внутреннего «шума»: сила  $\Phi$  не меняет полный импульс и полную энергию ансамбля молекул в газовом потоке, а преобразовывает равновероятное распределение направлений движения стохастической молекулы при равновесном состоянии в предпочтительно направленное при неравновесном течении.

Поскольку возможны условия, при которых  $\Phi$  может оказывать существенное влияние на движение стохастической молекулы, то, следовательно, в уравнении (1) необходимо учитывать динамику взаимодействия в статистической группе молекул.

Очевидно, что для решения (1) необходим подход соответствующий постановке задачи на мезоскопическом уровне.

Решаем (1) при имитационном моделировании движения стохастической молекулы на базе стохастических законов распределения параметров, описывающих и характеризующих это движение. При решении (1) учтем, что при анализе стационарного потока газа возможно статистически усреднять характеристики молекул по ансамблю молекул в канале вместо среднего по времени, которое непосредственно связано с процессом течения разреженного газа. В этом случае проводимость ( $U$ ) канала с учетом того, что все молекулы из множества одинаковые, вычисляется:

$$U = U_o P_e, \quad (4)$$

где  $U_o$  – проводимость входного отверстия канала, которая возрастает с уменьшением чисел Кнудсена;

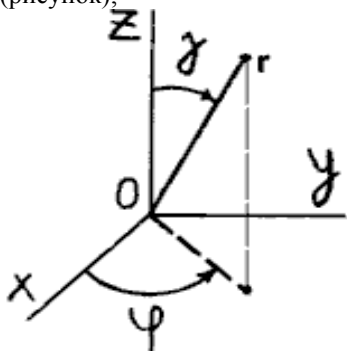
$P_e$  - вероятность прохождения канала от входного к выходному сечению стохастической молекулой,

$$P_e = N_r/N_e, \quad (5)$$

где  $N_e$  - число независимых вычислительных экспериментов (испытаний), в которых прослеживается блуждание стохастической молекулы в канале с момента входа и до момента выхода из него;  $N_r$  - число экспериментов из множества  $N_e$ , в которых стохастическая молекула покинула канал через выходное отверстие.

На значение  $P_e$  влияют:

- 1 - конфигурация канала;
- 2 - средняя длина свободного пути ( $\lambda$ ) и скорость стохастической молекулы ( $V$ );
- 3 - начальные условия: вид стохастических законов, определяющих местоположение и вероятность направления, по которому влетает стохастическая молекула в канал;
- 4 - граничные условия: вид стохастического закона, по которому рассчитывается уравнение движения стохастической молекулы после ее взаимодействия с поверхностью канала:  $P_s(\varphi_1; \gamma_1)$ , где  $\varphi_1$  и  $\gamma_1$  - направляющие движение молекулы углы в локальной сферической системе координат, начало которой в точке ( $O$ ) соударения с поверхностью и осью ( $Oz$ ), направленной внутрь канала по нормали к поверхности (рисунок);



Локальная система координат

5 - вид стохастического закона по которому рассчитывается уравнение движения стохастической молекулы после ее взаимодействия (соударения) с другой молекулой:  $P_b(\varphi_2; \gamma_2)$ , где  $\varphi_2$  - и  $\gamma_2$  - направляющие движение молекулы углы в локальной сферической системе координат, начало которой в точке ( $O$ ) соударения с другой молекулой газового потока и осью ( $Oz$ ), направленной по потоку течения газа;

6 - Количество молекул, пролетевших канал без столкновений ( $v_{nb}$ ); учитывается непосредственно при вычислении  $P_e$ .

Макроскопическому описанию газового потока в виде (4) однозначно соответствует мезосостояние ансамбля молекул (5). Основная трудность при вычислении (5) состоит в том, чтобы выявить вид стохастического закона (распределения вероятности  $P_b(\varphi_2; \gamma_2)$ ), по которому рассчитывается уравнение движения стохастической молекулы после ее взаимодействия (соударения) с другой молекулой.

Для нахождения значений  $P_e$ , во-первых, рассмотрим особенности динамики и характера движения стохастической молекулы в канале, во-вторых, промоделируем физический процесс течения разреженного газа.

Динамика и характер движения стохастической молекулы в канале предопределяются ее взаимодействием со стенкой канала и с ансамблем молекул в потоке газа.

Движение стохастической молекулы в канале, обусловленное взаимодействием с поверхностью канала, является хаотическим. Движение стохастической молекулы в канале, обусловленное взаимодействием между молекулами в потоке газа, имеет предпочтительное направление вдоль градиента концентрации в газовом потоке, особенно в осесимметричных каналах (2). Движение стохастической молекулы около стенки канала имеет ряд особенностей, обусловленных тем, что около стенки канала образуются так называемые кинетические слои [4, 5]. Внутри такого слоя из-за более высокой концентрации молекул статистическая молекула испытывает несколько более значительное воздействие вдоль градиента концентрации молекул в потоке газа, чем около оси канала. Из-за более высокой плотности потока около стенки канала по сравнению с плотностью около оси канала некоторые молекулы диффундируют внутрь потока, и возникает слабое течение от стенки в поперечном направлении к потоку ( $F_d$ ).

При среднем вакууме при условии, что неравновесное состояние в канале может быть охарактеризовано средней длиной свободного пути молекул ( $\lambda$ ), выражение (3) запишется:

$$\Phi t = m \mathbf{V}_\phi, \quad (6)$$

где  $\Phi = \sum_{k=1}^N (\mathbf{F}_a + \mathbf{F}_{ij} + \mathbf{F}_b + \mathbf{F}_d)$ , где  $\Phi \sim v_b (g/ r_m^s +$

const);  $r_m$  - межмолекулярное расстояние на котором проявляются силы межмолекулярного взаимодействия;  $g, s$  - постоянные в законе межмолекулярного взаимодействия;  $r_m, g, s$  для определенного рода газа принимаем константами [5];  $t = 1/v_b$ ;  $v_b \approx V/\lambda$ ;  $\lambda$  - средняя длина свободного пути в канале;  $\mathbf{V}_\phi$  - одна из составляющих скорости стохастической молекулы ( $V$ ), возникающая под действием силы  $\Phi$ ;  $m$  - масса молекулы;  $t \approx \lambda/V$ ;  $V$  - скорость стохастической молекулы.

При изотермическом течении в соответствии с законом сохранения полного импульса и полной кинетической энергии величина средней скорости молекул  $V$ , находящихся внутри канала, остается неизменной, соответственно остается неизменной и скорость стохастической молекулы  $V$ .

Из (6) следуют важные выводы:

- в объеме канала сила  $\Phi$  будет воздействовать на статистическую молекулу с одним и тем же постоянным усилием по всему объему  $\Phi \sim V/\lambda (g/ r_m^s + \text{const})$ ;
- составляющая скорости стохастической молекулы, характеризующая степень отклонения неравно-

веного течения от равновесного состояния, постоянна:  $V_\phi \approx \Phi \lambda / (V m)$ .

Такое рассмотрение динамики движения стохастической молекулы позволяет сформулировать положения, благодаря которым согласуются на мезоуровне представления кинетической теории о свободном хаотическом блуждании молекул в канале при молекулярном режиме и континуальной теории о ламинарном течении в канале при вязкостном режиме.

1. Физику процесса течения разреженного газа в канале на мезоскопическом уровне в молекулярно-вязкостном режиме моделирует по всему полю течения процесс преобразования хаотического движения стохастической молекулы в молекулярном режиме в направленное движение по потоку течения разреженного газа в вязкостном режиме под действием силы  $\Phi$ , постепенно возрастающей с ростом концентрации молекул.

2. Степень направленности движения стохастической молекулы по потоку течения разреженного газа зависит только от соотношения количества соударений молекул как межмолекулярных в газовом потоке ( $v_b$ ), так и со стенкой канала ( $v_s$ ) в объеме вакуумного канала.

3. При стационарном потоке в соответствии с теорией подобия значение  $P_e$  является зависимостью от числа Кнудсена (Kn):  $P_e = P_e(v_{nb}, v_b/v_s)$  или  $P_e = P_e(v_{nb}, Kn)$ .

Смоделируем физический процесс течения разреженного газа [7, 8]. Конфигурацию канала в математической форме представляем совокупностью связанных отдельных поверхностей в трехмерном пространстве, каждая из которых описывается одним аналитическим уравнением и системой неравенств не выше второго порядка.

Статистическая молекула влетает в канал в соответствии с начальными условиями, которые определяются кинетической теорией, и свободно движется по прямой в направлении выходного сечения до столкновения на длину не более свободного пути ( $\lambda_0$ ). Принимаем, что скорость стохастической молекулы ( $V$ ) является наиболее вероятной скоростью из максвелловского распределения молекул по скоростям. Поскольку более 60% молекул из статистической группы претерпевают соударения, пролетая длину, меньшую средней длины свободного пути, то принимаем [5]:

$$\lambda_0 = \lambda \sqrt{-\ln(R)}, \quad (7)$$

где  $\lambda$  - средняя длина свободного пути молекулы в канале задается в качестве исходных данных при моделировании;  $R$  - случайное число,  $R \in [0; 1]$ , принимаем  $n = 1$  [5], отметим, что в случае  $n = 50$  результаты расчетов изменяются незначительно в пределах 3% [3].

В локальной сферической системе координат, начало которой в точке ( $O$ ) вылета стохастической молекулы (см. рисунок), траектория ее свободного движения между последовательными соударениями имеет вид прямой:

$$\frac{x_2 - x_1}{\sin(\gamma) \cos(\varphi)} = \frac{y_2 - y_1}{\sin(\varphi) \sin(\gamma)} = \frac{z_2 - z_1}{\cos(\gamma)}, \quad (8)$$

где  $(x_1, y_1, z_1)$  и  $(x_2, y_2, z_2)$  - координаты точек вылета и прилета молекулы, длина отрезка между этими точками  $\lambda_0$ ;  $\gamma$  - угол, который образуется между направлением движения стохастической молекулы и осью  $Oz$ ,  $\gamma \in [0; \pi]$ ;  $\varphi$  - угол, лежащий в плоскости  $xu$ ,  $\varphi \in [0; 2\pi]$ .

Вследствие взаимодействия с молекулами газового потока или соударения с поверхностью канала молекула изменяет направление своего движения.

В случае пересечения траектории движения молекулы с поверхностью канала моделируется процесс взаимодействия молекулы с группой приповерхностных молекул твердой стенки. Молекула, столкнувшись с поверхностью канала, поглощается стенкой канала, а затем покидает ее в соответствии с граничными условиями, которые определяются в зависимости от рода газа в потоке, от температуры газа, от качества поверхности канала. Для условий течения газа в канале из нержавеющей стали применяют, как правило, диффузное распределение [5]. Диффузное распределение моделируется в локальной системе координат, начало которой в точке соударения с поверхностью канала, плоскость  $xu$  является касательной к поверхности в точке соударения, и ось  $z$  направлена внутрь канала по нормали к плоскости  $xu$ :

$$\varphi_1 = 2\pi R_1, \quad (9)$$

где  $\varphi_1$  - угол, лежащий в плоскости касательной к месту соударения стохастической молекулы о поверхность канала;  $R_1$  - случайное число,  $R_1 \in [0; 1]$ ;

$$\gamma_1 = \arcsin(\sqrt{R_2}), \quad (10)$$

где  $\gamma_1$  - угол, который образуется между осью ( $Oz$ ) и вектором силы воздействия приповерхностных молекул твердой стенки на «пробную» молекулу нормально к поверхности канала в месте соударения стохастической молекулы о поверхность канала;  $R_2$  - случайное число,  $R_2 \in [0; 1]$ ,  $n = 2$ .

В итоге траекторию, по которой молекула вылетает из точки соударения с поверхностью, рассчитываем по (8), разыгрывая величины  $\lambda_0$  по (7),  $\varphi_1$  по (9),  $\gamma_1$  по (10).

Если молекула пролетела длину  $\lambda_0$  и не столкнулась с поверхностью канала, то моделируется процесс столкновения с другой молекулой потока разреженного газа, в результате которого молекула отлетает от места соударения в новом направлении. Новое направление движения молекулы из точки межмолекулярного взаимодействия формируется под воздействием  $\Phi$  функцией  $P_b = P_b(\varphi_2; \gamma_2)$ . С целью упростить процесс моделирования эффектов воздействия  $\Phi$  на направление движения стохастической молекулы локальная сферическая система координат выбирается так, что ее начало в точке вылета молекулы, а оси изменяют свое направление таким образом, чтобы плоскость  $xu$  была перпендикулярна потоку газа, и ось  $Oz$  направлена по потоку газа (см. рисунок). В такой локальной системе координат

угол  $\varphi_2$ , лежащий в плоскости  $xу$ , не зависит от  $\Phi$  и всегда распределяется равномерно:

$$\varphi_2 = 2 \pi R_2. \quad (11),$$

Учитывая (11), делаем важный вывод: распределяя случайным образом угол  $\gamma_2$ , моделируем влияние эффектов парных и групповых взаимодействий ансамбля молекул ( $\Phi$ ) на направление движения молекулы.

Учитывая, что направление наиболее вероятной скорости молекул ( $V$ ) равновероятно в условиях равновесного состояния, закономерность распределения угла  $\gamma_2$  выявляем в виде

$$\gamma_2 = \pi R_3 (1 - P_f(v_b)), \quad (12)$$

где  $\gamma_2 \in [0; \pi]$ ;  $R_3$  - случайное число,  $R_3 \in [0; 1]$ ;  $P_f \in [0; 1]$  - параметр, который рассчитывается в соответствии с (6):  $(1 - P_f) \approx (1 - c v_b)$ , где  $c$  - постоянная, или из (6):

$$P_f \sim V_\Phi / \lambda. \quad (13).$$

Поскольку неравновесное течение в вакуумных каналах при малых перепадах давлений близко к равновесному настолько, что может быть охарактеризовано средней длиной свободного пути молекул [5], то параметр  $P_f$  является постоянным при постоянном среднем давлении ( $\lambda = \text{const}$ ) и не зависит от геометрии канала. В условиях границы с молекулярным режимом при отсутствии межмолекулярных соударений в газовом потоке ( $v_b = 0$ )  $P_f = 0$ . В условиях границы с вязкостным режимом  $P_f = 1$ .

Представляется, что наиболее точное значение параметра  $P_f$  найдено статистическим образом, осредняя параметр  $P_f$  по всему ансамблю молекул в вакуумном канале, при подборе и сопоставлении результатов имитационного моделирования с данными прецизионных измерений при заданном значении средней длины свободного пути ( $\lambda$ ) [4, 5].

Результаты таких экспериментов, проведенных при различных значениях  $\lambda$  во всем диапазоне молекулярно-вязкостного режима, целесообразно в соответствии с теорией подобия представить в виде зависимости  $P_f = P_f(v_b/v_s)$  при единичном характерном размере круглого канала. При течении воздуха в осесимметричных каналах при комнатной температуре зависимость  $P_f = P_f(v_b/v_s)$  или  $P_f = P_f(Kn)$  может быть представлена

$$P_f(Kn) = x (\delta)^y, \quad (14)$$

где  $\delta = 1/Kn$ ;  $y$  и  $x$  - постоянные [4, 5].

Таким образом, функция распределения вероятности  $P_b(\varphi_2; \gamma_2)$  определена по (11) и (12). Эта функция отражает на мезоскопическом уровне характер неравновесного течения в канале при различных числах Кнудсена. Отметим, параметр  $P_f$  является «внутренним» свойством ансамбля молекул в потоке газа в канале, который характеризует влияние пограничных кинетических слоев на перенос молекул в поперечном направлении к потоку газа от стенки канала к оси канала.

В итоге траекторию, по которой молекула отлетает из точки межмолекулярного соударения, рассчитываем по (8), варьируя величину  $\lambda_0$  по (7),  $\varphi_2$  по (11),  $\gamma_2$  по (12) и (14).

Определив новое направление движения молекулы, далее моделируем ее свободное движение до следующего соударения. Повторяем эти вычислительные процедуры до тех пор, пока молекула не покинет канал. После завершения эксперимента по моделированию блужданий стохастической молекулы в канале траектория ее движения выглядит в виде ломаной линии.

Повторяя такие эксперименты  $N_e$  раз, фиксируем  $N_e$ . По (5) и (4) вычисляем  $P_e$  и  $Q$ . Число экспериментов (испытаний)  $N_e$ , которые обеспечат требуемую точность вычислений  $P_e$ , рассчитывается по методу Монте-Карло.

## ВЕРИФИКАЦИЯ ПОДХОДА

Выполнены многочисленные эксперименты по моделированию течения разреженного газа через короткие и длинные каналы круглого и прямоугольного сечения, щели, круглые ступенчатые трубы (переходники), сложные составные трубопроводы.

Результаты этих экспериментов хорошо согласуются с публикуемыми данными натуральных измерений [8], качественно совпадают с результатами, полученными при решении линеаризованного уравнения Больцмана и методом прямого моделирования [2]. Наиболее ярко показывает действенность вероятностного подхода тот факт, что результаты, полученные на мезо- и макроуровне, выявили механизмы газодинамических процессов и прояснили природу явлений, наблюдаемых при переходном течении разреженного газа [6].

## МЕТОДЫ ИНЖЕНЕРНЫХ РАСЧЕТОВ

Результаты вычислительных экспериментов обобщены в соответствии с теорией подобия в виде зависимости безразмерной проводимости ( $J_{MB}$  - отношения значений, вычисленных в молекулярно-вязкостной области, к значению, вычисленному в молекулярной области) от числа Кнудсена ( $Kn$ ). Приведем такие зависимости для расчета проводимости при среднем вакууме при откачке воздуха при комнатной температуре.

1. Для круглых каналов произвольной длины

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

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

$l$  - длина канала;  $d$  - диаметр канала.

2. Для прямоугольных каналов произвольной длины

$$J_{MB} = \frac{1 + 202(2 - a/b)G + 2653(2 - a/b)G^2}{1 + 236(2 - a/b)G};$$

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

$Kn = 4,7 \cdot 10^{-3} (1+a/b)/(2ap)$ ;  $p$  - среднее давление в канале;  $a$  - меньшая сторона прямоугольного сечения канала;  $b$  - большая сторона прямоугольного сечения канала;  $l$  - длина канала.

## АНАЛИЗ ПЕРЕХОДНОГО ТЕЧЕНИЯ

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

Первые межмолекулярные соударения при переходе от молекулярного к молекулярно-вязкостному течению наблюдаются при  $Kn \approx 100$ .

При переходе течения от молекулярного к молекулярно-вязкостному при уменьшении чисел Кнудсена от 100 до приблизительно 1 наблюдаем: значения безразмерной проводимости ( $J_{mv}$ ) могут как увеличиваться, так и уменьшаться в зависимости от таких параметров канала, как конфигурация и длина. Это объясняется двумя противоречивыми процессами, происходящими одновременно.

1. Поскольку сила  $\Phi$  не помогает движению молекул вдоль канала ( $P_f \approx 0$ ), а значительно увеличивающееся число межмолекулярных парных соударений затрудняет перемещение молекул вдоль канала, то число молекул проходящих канал ( $P_e(\lambda)$ ), уменьшается по сравнению с молекулярным течением в процентном соотношении. Степень уменьшения  $P_e(\lambda)$  определяется числом межмолекулярных парных соударений, которые претерпевает стохастическая молекула, прежде чем вылетит из канала. Чем сложнее конфигурация и больше длина канала, тем больше межмолекулярных соударений претерпевает молекула, тем более трудно ей, молекуле, перемещаться вдоль канала по сравнению с молекулярным течением, тем меньше значение  $P_e(\lambda)$ .

2. Увеличивается число молекул, участвующих в процессе переноса.

Результаты этих противоречивых процессов наблюдаются на макроуровне в любых конфигурациях каналов. Например, при уменьшении чисел Кнудсена от 100 до приблизительно 2 значения безразмерного газового потока, протекающего через круглые трубы с соотношением длины ( $l$ ) к диаметру ( $d$ ) больше 5, уменьшаются, а значения безразмерного газового потока, протекающего через круглые отверстия и короткие трубы с соотношением длины ( $l$ ) к диаметру ( $d$ ) меньше 4, монотонно возрастают [6].

В этих условиях наблюдаем, как статистическая молекула отлетает практически ( $P_f \approx 0$ ) в произвольном направлении после соударения с другой молекулой.

Анализируя результаты, полученные при меньших числах Кнудсена, заметим, что эффект коллективных взаимодействий ансамбля молекул ( $\Phi$ ) начинает проявляться при  $Kn \approx 2$ . Наблюдаем, как вследствие именно этого эффекта протекает процесс преобразования движения стохастической молекулы из хаотического в направленное. Этот процесс происходит при уменьшении чисел Кнудсена приблизительно от 2 до 0,01 вследствие следующих эффектов: 1) монотонно непрерывно увеличивается от 0 до 100% часть статистически независимых молекул, которые в динамике взаимодействуют, как ста-

тистическая группа, и в результате этого взаимодействия получают импульс под действием силы  $\Phi$  по потоку течения разреженного газа; 2) монотонно непрерывно увеличивается величина  $\Phi$  ( $P_f$  непрерывно увеличивается от 0 до 1).

Отметим, что поскольку эти процессы наблюдаются одновременно, то они вызывают нелинейное возрастание значений потока газа при уменьшении чисел Кнудсена от 2 до 0,01.

Импульс, полученный стохастической молекулой под действием  $\Phi$ , придает направленность ее движению к выходному сечению канала. Поэтому при меньших значениях  $\lambda$  значения  $P_e$  первоначально замедляют свое падение, а затем начинают монотонно увеличиваться. Наблюдается минимум ( $P_{e*}$ ) для любых конфигураций каналов. Величина  $P_{e*}$  и число Кнудсена, при котором наблюдается  $P_{e*}$ , изменяются в зависимости от конфигурации канала. Например, для канала в виде куба значение  $P_{e*}$  приблизительно 0,25 при числе Кнудсена 0,02.

При уменьшении чисел Кнудсена приблизительно от 0,8 до 0,02 на макроуровне наблюдаем: значения безразмерной проводимости каналов любых конфигураций монотонно возрастают. Объяснение этому факту находим, наблюдая на мезоуровне за происходящими процессами: 1) увеличивается число молекул, участвующих в процессе переноса; 2) коллективный эффект взаимодействия молекул оказывает заметное влияние на характер движения молекул, значительно компенсируя трудности стохастической молекулы перемещаться вдоль канала из-за соударений: при уменьшении чисел Кнудсена до 0,02  $P_f \approx 0,6$ .

При приближении к границе «молекулярно-вязкостный режим–вязкостный режим» при уменьшении чисел Кнудсена от 0,02 до 0,01 наблюдается стремление значений проводимости круглых и квадратных отверстий, коротких и длинных каналов с одинаковой площадью входного сечения к одинаковым значениям. Это объясняется тем, что при  $Kn \approx 0,01$  значение  $\gamma \approx 0$ , т.е. движение статистической молекулы в основном ориентировано по потоку течения разреженного газа в любых каналах. Поскольку кроме межмолекулярных соударений имеются соударения молекул с поверхностью канала, благодаря которым молекулы могут покинуть канал через входное сечение, то при  $\gamma \approx 0$   $N_e > N_r$ , но  $N_r \Rightarrow N_e$ , откуда по (4 и 5)  $P_e(\lambda) \Rightarrow 1 Q \Rightarrow Q_0$  в канале произвольной конфигурации и длины.

В условиях границы «молекулярно-вязкостный режим – вязкостный режим» на макроуровне возникает впечатление «размытости» границы в диапазоне чисел Кнудсена от 0,01 до 0,001 в зависимости от конфигурации и длины канала. Это объясняется следующим. При  $Kn \approx 0,01$ ,  $\gamma \approx 0$  статистическая молекула кроме межмолекулярных соударений, которые обеспечивают направленное дрейфовое движение к выходному сечению канала, претерпевает соударения с поверхностью канала. Более того, после соударения с поверхностью часть молекул покидает канал через входное сечение. Чем короче канал, тем

большая часть молекул покинет канал через входное сечение. Например, при изменении соотношения длины к диаметру трубы от 0,1 до 10 вероятность  $P_e$  монотонно уменьшается от 0,95 до 0,8. Границей можно считать условие: все молекулы, падающие на входное отверстие, будут вылетать через выходное отверстие, т.е.  $P_e = 1$ ,  $Q = Q_0$ . Для отверстия это условие выполняется при  $Kn \cong 0,01$ . Для различных каналов это условие выполняется при более низких различающихся числах Кнудсена в зависимости от конфигурации и длины канала.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для вычисления газовых потоков в молекулярном и молекулярно-вязкостном режиме течения применение (1) и (4) позволяет использовать ординарную, для инженерной практики, вычислительную технологию [10].

При расчете потоков разреженного газа благодаря математической постановке задачи в виде (1) и (4) удалось учесть влияние вязкостной (дрейфовой, гидродинамической) составляющей более точно, чем в приближенных методах решения уравнения Больцмана:

1) дана физически очень наглядная интерпретация важной роли малых сил динамики коллективных взаимодействий молекул,

2) показано, что именно малые силы динамики коллективных взаимодействий молекул, которые ранее считалось возможным не принимать во внимание, оказывают значительное влияние на характер движения молекул;

3) удалось учесть динамику и эффекты взаимодействия ансамбля молекул как статистической группы статистическим образом.

Отметим достижения, которые позволили развить представления о природе явлений, наблюдаемых при молекулярно-вязкостном режиме течения:

1) выявлены принципы и механизмы, которые определяют природу газодинамических процессов;

2) согласованы на мезоуровне, представления кинетической теории о свободном хаотическом блуждании молекул в канале при молекулярном режиме

и континуальной теории о ламинарном течении в канале при вязкостном режиме.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Bird G.A. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford: Clarendon Press, 1994, 458 p
2. Y.Pechatnikov, Transition Flow of Rarefied Gases: Current Models and Methods of Simulation // *Technical Physics*, 2003, v. 48, №12, p. 1522-1526.
3. Б.С. Нестеров, Т.С.Строгова, Ю.К.Васильев. Проблемы расчета параметров сложных вакуумных систем в переходном режиме течения // *Вакуумная техника и технология*. 2003, №4, с. 237 - 242.
4. Ю.М.Печатников. Инженерно-физическая модель газовых потоков при среднем вакууме // *Журнал технической физика*. 2003, в.8, с. 40-45
5. Ю.М.Печатников. Инженерно-физическая модель процесса откачки в вакуумных системах при молекулярно-вязкостном режиме // *Вакуумная техника и технология*. 2003, № 3, с. 135 - 140.
6. Ю.М.Печатников. Физические явления и процессы переходного течения разреженного газа // *Прикладная физика*. 2004, № 2, с. 34 - 41
7. Ю.М.Печатников. Вероятностная модель и метод моделирования газовых потоков через вакуумные элементы при молекулярно-вязкостном режиме // *Инженерная физика*. 2003, № 2. с. 32-36
8. Ю.М.Печатников. Статистическое моделирование стационарного течения разреженного газа через вакуумную трубопроводную арматуру при молекулярно-вязкостном режиме // *Инженерно-физический журнал*. 1992, № 6, с. 673-676.
9. Ханнанов Р.Б. *Экспериментальное исследование откачных параметров и разработка метода расчета двухроторного вакуумного насоса в условиях низкого вакуума*: Автореферат дис. к.н. Казань, 2001, 20 с.
10. Ю.М.Печатников. Современные методы вычислительных экспериментов в молекулярно-вязкостном режиме // *Инженерная физика*. 2003, № 3, с. 50-52.

## ДО ПИТАННЯ ВЕРИФІКАЦІЇ МОДЕЛЕЙ І МЕТОДІВ У ВАКУУМНІЙ ГАЗОВІЙ ДИНАМІЦІ

Ю.М. Печатніков

Феноменологічно побудовано кінетичне рівняння для опису нерівноважного перебігу розрідженого газу при середньому вакуумі, який вирішений для задачі розрахунку стаціонарного ізотермічного перебігу розрідженого газу в каналах в перехідній області, що лежить між молекулярною і в'язкістю областями.

## PHYSICAL MODEL OF TRANSITION GAS FLOW

Yu.M.Pechatnikov

The transition regime has always presented considerable theoretical difficulty since both the theoretical formalism employed and the physical processes occurring are so different for the two extremes. From the standpoint of modeling, Vacuum Gas Dynamics has been discussed as an isothermal subset of Rarefied Gas Dynamics in duct. Theoretical approaches to gas flow through duct has been considered, with an emphasis on physical interpretation. A new theoretical physical model and probably method for simulation of to gas flow has been developed and verified.