

Шемарова Ольга Александровна

РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ И МЕТОДОВ РАСЧЕТА
ПРОЦЕССА ТЕЧЕНИЯ РАЗРЕЖЕННЫХ ГАЗОВ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ
С НАПРАВЛЕННЫМИ ПОТОКАМИ ЧАСТИЦ

Специальность 05.04.06 – «Вакуумная, компрессорная техника и
пневмосистемы»

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Москва – 2015



Работа выполнена в Московском государственном техническом университете им. Н.Э. Баумана (МГТУ им. Н.Э. Баумана).

Научный руководитель: кандидат технических наук, доцент
Никулин Николай Константинович

Официальные оппоненты: доктор технических наук, профессор
Северцев Семен Алексеевич,
ведущий специалист по вакуумной и
криогенной технике ОАО НПО
«Наука».

кандидат технических наук
Ромочкин Юрий Геннадьевич,
начальника сектора ФГУП
«Всероссийский электротехнический
институт им. В.И. Ленина».

Ведущее предприятие: ОАО «Научно-исследовательский
институт вакуумной техники
им. С.А. Векшинского».

Защита состоится «18» ноября 2015г. в 16 часов 30 минут на заседании
диссертационного совета Д 212.141.16 при МГТУ им. Н.Э. Баумана по адресу:
105005, г. Москва, ул. 2-я Бауманская, 5, стр.1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБОУ ВПО
«МГТУ им. Н.Э. Баумана» и на сайте <http://www.bmstu.ru>.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью
учреждения, просим присылать по адресу: 105005, г. Москва, ул. 2-я
Бауманская, 5, ученому секретарю диссертационного совета Д 212.141.16.

Автореферат разослан «16» октября 2015г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 212.141.16
кандидат технических наук, доцент



М. А. Колосов

Актуальность исследования

Необходимость разработки теории и создания достаточно точной математической модели на ее основе, описывающей течение разреженного газа в потоке металлического пара, определяется многообразием технологических процессов, протекающих при наличии паров легкоплавких металлов, причем увеличение концентрации газообразных продуктов вследствие газовой выделения, 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 металлического пара.

В настоящее время не существует теории, описывающей течение разреженного газа в потоке металлического пара, давление которого соответствует переходному режиму течения. Несмотря на то, что исследования течения газа в этом режиме ведутся уже длительное время, теории, полноценно описывающей свойственные ему физические процессы, так и не разработано, как и универсального метода расчета параметров течения. Существуют различные подходы для решения задачи о течении газа в каналах в переходном режиме, но они дают значительную погрешность и нуждаются в экспериментальной проверке.

На сегодняшний день при описании процесса течения газа в магистральной не учитывается взаимодействие откачиваемого газа с паром металла и используются в основном полуэмпирические зависимости на основе уравнения диффузии. Такое описание может быть использовано только в некоторых частных случаях, а также не позволяет учесть существенные факторы: возможность поглощения газа металлическим паром и поверхностью трубы, наличие градиента температуры в системе, вектор скорости потока металлического пара. Также следует учесть, что такое описание применимо только для течений с небольшими скоростями.

Проведенный литературный обзор научно-технической литературы подтвердил правомерность сделанных предположений и необходимость создания методов расчета процессов вакуумирования систем в присутствии направленного движения потока пара металла. Известных аналогов описания взаимодействия разреженного газа с металлическим паром в переходном режиме течения не обнаружено.

Цель работы, объект и задачи исследования

Цель работы состоит в создании методов расчета и математических моделей пространственно-неоднородных течений разреженного газа в канале, в котором движется поток металлического пара, а также в разработке алгоритмов для реализации расчета основных параметров течения газа в канале с потоком металлического пара.

Объектом исследования является течение газа в канале через поток металлического пара в широком диапазоне давления и процесс откачки различных газов из систем с металлическим паром.

Отношение давления пара к давлению газа в канале примерно равно 10^5 , течение в канале соответствует переходному режиму или началу вязкостного. Это позволяет описать течение пара с помощью законов ламинарного течения, а для разреженного газа применить статистические методы численного моделирования.

Задачи исследования:

1. Создание ММ течения разреженного газа в широком диапазоне чисел Кнудсена в вакуумных системах с геометрией любой сложности и потоком металлического пара с учетом сорбирующих свойств металлического пара и поверхности канала; вектора скорости потока пара; скольжения на стенке канала; нестационарности процесса; возможности простого введения в модель различных возмущающих воздействий.

2. Разработка методов расчета основных параметров таких систем: проводимость U , эффективная быстрота откачки $S_{эф}$, массив векторов скоростей частиц в зависимости от времени t и положения в пространстве $\mathbf{r}$ $\mathbf{C}(t, \mathbf{r})$, давление газа $p(t, \mathbf{r})$, плотность потока молекул газа $\nu(\mathbf{r})$.

3. Разработка программ для реализации расчета основных параметров течения газа.

4. Проведение расчетно-теоретических исследований на базе разработанной ММ: исследование влияние на параметры газового течения величины и скорости потока металлического пара и поглощающих свойств поверхности канала и металлического пара.

5. Практическая реализация.

Методы исследования

Для исследования течения газа в канале, в котором движется поток металлического пара, были разработаны следующие математические модели: математическая модель на основе уравнения нестационарной диффузии; статистические математические модели (математическая модель на основе метода пробной частицы и метода частиц в ячейках).

Каждая из моделей охватывает определенный диапазон Kn и имеет ряд преимуществ и ограничений при решении широкого спектра задач.

Чтобы понять суть протекающих в рассматриваемой системе физических процессов и выявить их закономерности, разработаны математические модели с определенными допущениями. Результаты численных экспериментов, полученных при моделировании течения разреженного газа в системе по разным методикам, сравниваются с экспериментальными данными и на основании этого делаются выводы о применимости указанных методов и значимости различных факторов и процессов.

Научная новизна

Впервые создан комплекс математических моделей течения газа в системе с потоком металлического пара для различных чисел Кнудсена.

Впервые создана математическая модель течения разреженного газа в магистрали с потоком металлического пара на основе уравнения диффузии. Данная модель охватывает вязкостный и начало переходного режимов течения газа и позволяет рассчитать распределение давлений в магистрали и ее проводимость. При $Kn \leq 0,01$ погрешность модели не превышает 4%, при $Kn = 0,01..0,1$ погрешность модели составляет 10..15%.

Впервые создана математическая модель на основе метода пробной частицы, в которой учтены сорбирующие свойства металлического пара и поверхности канала, направление и величина потока металлического пара, и которая позволяет рассчитывать системы с геометрией любой сложности. Данная модель охватывает молекулярный и начало переходного режимов течения газа. При $Kn \geq 0,03$ погрешность модели в пределах 3%, в переходном режиме $Kn = 0,03..0,1$ возрастает до 5..15%.

Впервые создана математическая модель на основе метода частиц в ячейках, в которой учтены следующие факторы: сорбирующие свойства металлического пара и поверхности канала; вектор скорости потока пара; скольжение на стенке канала; процесс нестационарный (модель должна отображать его развитие во времени); возможность простого введения в модель различных возмущающих воздействий.

Данная модель охватывает весь диапазон чисел Кнудсена: при $Kn \geq 0,01$ погрешность не превышает 5%, при $Kn < 0,01$ возрастает до 10..20%.

Практическая ценность работы

Очевидно, что в случае, когда технология опережает теорию, увеличиваются затраты при проектировании и эксплуатации. Следовательно, предлагаемое исследование может быть полезно для расчета параметров течения разреженного газа в системах с потоком металлического пара при проектировании следующих систем:

- Электрогенерирующие каналы термоэмиссионного реактора-преобразователя. Чтобы получить оптимальные величины работы выхода эмиттера и коллектора и компенсировать объёмный заряд электронов, в зазор между эмиттером и коллектором вводят легко ионизируемые пары цезия.
- Высокотемпературные теплообменники, в которых в качестве теплоносителя используются легкоплавкие металлы.
- Диффузионные средства откачки, в которых используются легкоплавкие металлы. Например, парортутные насосы, которые применяют для откачки систем, где пары ртути – рабочая среда (ртутные выпрямители, лампы), и в установках, где необходима высокая чистота рабочей среды (в масс-спектрометрах, сверхвысоковакуумных системах термоядерных установок).

Положения, выносимые на защиту

Методы расчета пространственно-неоднородных течений разреженного газа в канале, в котором движется поток металлического пара и математические модели для реализации расчета основных параметров течения газа в канале с учетом сорбционных свойств и скорости частиц пара и поглощающих свойств поверхностей канала. Результаты теоретических исследований процесса течения разреженного газа в вакуумных системах с металлическим паром.

Достоверность полученных данных

Проведено сравнение результатов численных экспериментов, полученных при моделировании течения разреженного газа в вакуумной системе с помощью разработанного комплекса математических моделей с экспериментальными данными, опубликованными в открытой литературе, и на основании этого сделаны выводы о достоверности полученных результатов. Сравнения результатов моделирования проведено с экспериментальными значениями проводимости каналов.

Работа внедрена для расчета вакуумной системы на ОАО «Красная Звезда», что подтверждено актом. Используются руководящие расчетные материалы вакуумной системы с парами металлов.

Личный вклад автора в работу

Результаты работы получены лично автором. Автором разработан метод расчета течения газа в вакуумной системе с металлическим паром, созданы математические модели, разработаны алгоритмы расчеты и написаны программы, в которых проведены численные эксперименты, и проведен анализ результатов.

Апробация работы

Основные результаты работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях и семинарах:

1. Международный молодежный научный форум-олимпиада по приоритетным направлениям инновационного развития РФ. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010.

2. III Всероссийская научная конференция молодых ученых аспирантов и студентов «Вакуумная, компрессорная техника и пневмоагрегаты». Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010.

3. IV Всероссийская научная конференция молодых ученых аспирантов и студентов «Вакуумная, компрессорная техника и пневмоагрегаты». Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011.

4. Четвертая Всероссийская конференция молодых ученых и специалистов «Будущее машиностроения России». Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011;

5. VI Международная конференция «Вакуумная техника, материалы и технологии». Москва, ВакуумТехЭкспо, 2011.

6. VII Международная конференция «Вакуумная техника, материалы и технологии». Москва, ВакуумТехЭкспо, 2012.

7. Пятая Всероссийская конференция молодых ученых и специалистов «Будущее машиностроения России». Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2012;

8. XIX научно-технической конференции «Вакуумная наука и техника» с участием зарубежных специалистов». Судак, 2012.

9. VIII Международная конференция «Вакуумная техника, материалы и технологии». Москва, ВакуумТехЭкспо, 2013.

10. XX юбилейной научно-технической конференции с участием зарубежных специалистов «Вакуумная наука и техника». Ялта, 2013;

11. IX Международная конференция «Вакуумная техника, материалы и технологии». Москва, ВакуумТехЭкспо, 2014.

Публикации

Основное содержание диссертации отражено в 12 научных работах, из них 3 статьи в перечне журналов, утвержденных ВАК РФ; общим объемом 11,83 п. л.

Структура и объем работы

Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, выводов, списка литературы (86 наименований). Работа изложена на 115 страницах машинописного текста, содержит 36 рисунков, 5 таблиц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении дана общая характеристика работы, обоснована актуальность темы диссертации, определены цели и объект исследования, указаны научная новизна и практическая значимость.

В первой главе дан краткий обзор литературы по теме диссертации. Обоснована практическая ценность исследования. Рассмотрены основные подходы моделирования течения газа в переходном режиме, а также эффект скольжения, свойственный переходному режиму течения, обоснован и выбран подход его для описания.

Сделана постановка целей и задач исследования и отмечены наиболее важные особенности процесса течения газа через поток металлического пара, которые необходимо учесть при разработке методов расчета.

Вторая глава посвящена созданию методов расчета и комплекса математических моделей течения разреженного газа через поток металлического пара.

В первом параграфе второй главы рассмотрена диффузионная математическая модель процесса течения газа в канале с металлическим паром. Отмечены основные допущения, необходимые для создания математической модели, представлена расчетная схема (Рисунок 1), алгоритм реализации и результаты моделирования (изменение концентрации и давления газа по длине канала и в зависимости от времени).

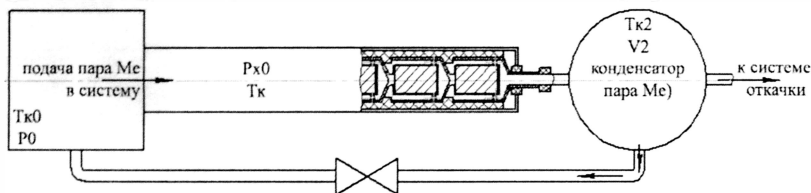


Рисунок 1. Расчетная схема

Метод расчета основан на уравнения диффузии (2-го закона Фика), и процесс течения газа в канале с металлическим паром рассматривается как процесс газовой диффузии:

$$u_i(x,t) = D \cdot u_{xx}(x,t),$$

где $u(x,t)$ – относительная плотность газа в трубопроводе, D – коэффициент диффузии.

Изменение концентрации газа является нестационарным процессом и описывается дифференциальным уравнением в частных производных. Это уравнение не имеет аналитического решения и решается численным методом Галеркина в среде Borland Delphi 7.

Граничные и начальные условия определены из условий протекания процесса.

1. Начальное условие: $u(x,0) = C_1$, где C_1 - начальная относительная плотность газа в трубе;

2. Граничные условия:

а) $u(0,t) = u_{\max}$ - плотность газа на входе в трубопровод,

б) $u_x(rL,t) = D_{rl} \cdot u(rL,t)$ - поток газа на выходе из трубопровода,

где D_{rl} - скорость, с которой молекулы газа пересекают границу выходного сечения трубопровода.

Данных по коэффициентам взаимодиффузии газов с парами легкоплавких металлов недостаточно, поэтому процесс рассматривается сначала как молекулярная диффузия, а затем как самодиффузия, чтобы, сравнивая результаты вычислений, сделать выводы о правомерности использования коэффициентов.

Коэффициент молекулярной диффузии может быть рассчитан по формуле:

$$D_m = U / rL,$$

где U - проводимость трубопровода в молекулярном режиме течения газа, rL – длина трубопровода.

Если трубопровод заполнен металлическим паром, молекулы которого близки по свойствам молекулам газа, процесс можно рассмотреть как самодиффузию с коэффициентом:

$$D_s = \frac{8\sqrt{2}}{3} \cdot \left(\frac{k \cdot T_K}{\pi} \right)^{\frac{2}{3}} \cdot \sqrt{\frac{1}{m_r} + \frac{1}{m_{Mc}}} \cdot \frac{1}{P \cdot (\sigma_r + \sigma_{Mc})^2},$$

где σ - сечение столкновения молекул пара металла; m - масса молекулы; P - давление газа.

В результате расчёта получены данные изменения концентрации газа по длине соединительных магистралей в зависимости от времени протекания процесса (Рисунок 2).

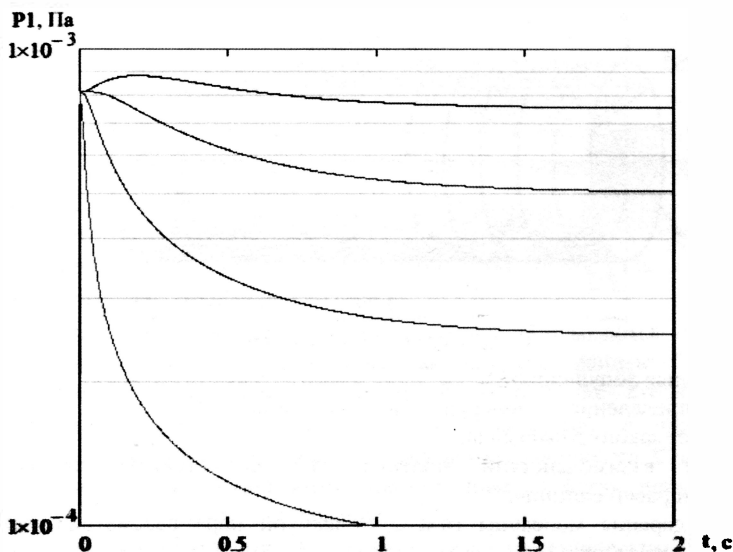


Рисунок 2. Изменение давления $P(t)$ разных сечениях в зависимости от времени процесса при использовании коэффициента молекулярной диффузии:

— $P(0, t)$, — $P(rL/4, t)$, — $P(rL/2, t)$, — $P(3rL/4, t)$, — $P(rL, t)$,
где rL – длина трубопровода

Сравнение полученных графических зависимостей для рассмотренных процессов молекулярной диффузии и самодиффузии показало расхождение в графиках изменения относительной плотности газа по длине трубы. При использовании коэффициента молекулярной диффузии скорость протекания процесса выше. Полученное расхождение объясняется тем, что в модели молекулярной диффузии рассматривается молекулярная среда, а самодиффузии – сплошная.

Второй параграф второй главы посвящен созданию статистических математических моделей течения разреженного газа через поток металлического пара. Дана краткая характеристика статистических методов и особенности их использования для моделирования течения газа в системе с потоком металлического пара.

Представлена математическая модель на основе метода пробной частицы, дана краткая характеристика метода, расчетная схема (Рисунок 3), основные допущения и алгоритм расчета. В среде Matlab 7.9.0 составлена программа для проведения численного эксперимента, по результатам которого определены коэффициенты проводимости, обратного рассеяния, поглощения частиц поверхностью трубы и поглощения газа парами металла, а также построена зависимость изменения плотности потока падающих и поглощенных частиц по длине трубы и зависимость проводимости системы от потока пара.

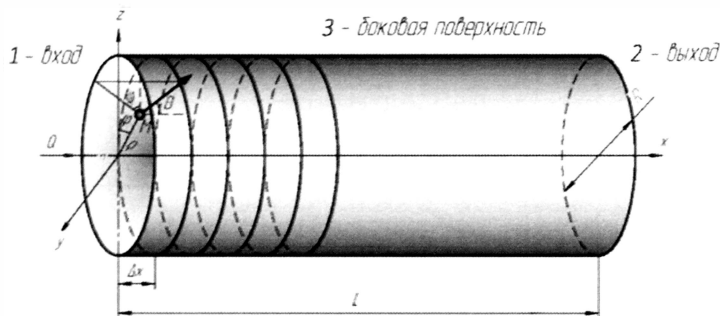


Рисунок 3. Расчетная схема

Основные допущения:

1. Распределение молекул по скоростям теплового движения соответствует закону Максвелла;
2. При взаимодействии молекул газа со стенкой коэффициент аккомодации равен единице;
3. Соударение молекулы газа с молекулой пара рассматривается как упругий удар жестких сфер;
4. Учитываются только бинарные столкновения;
5. Влияние потенциальных полей не учитываются;
6. Распределение скорости потока пара металла в сечении представляет параболический профиль (течение Пуазейля) с поправкой на скорость скольжения;
7. Влиянием газа на пар кадмия можно пренебречь, так как в трубе движется в основном поток пара кадмия (концентрация пара металла существенно превышает концентрацию газовых компонентов);
8. Для учета сорбирующих свойств пара металла и поверхности трубы вводятся коэффициенты сорбции.

Процедура вычисления конкретных молекулярных характеристик описана для вычисления коэффициента проводимости (вероятности перехода молекул через вакуумную систему) $P = N_1 / N$, где N_1 – число молекул, попавших в выходное сечение, N – общее число рассматриваемых молекул.

В соответствии с законом распределения молекул на входе в систему, используя датчик случайных чисел, выбираются координаты старта и траектории молекул, влетающих в систему.

Далее осуществляется выбор поверхности, на которую попала молекула газа и вычисляются координаты точки столкновения с поверхностью или координаты столкновения молекулы с частицей металлического пара.

Плотность вероятности столкновения частицы разреженного газа с частицей металлического пара равна

$$p(r_{cm}) = \frac{e^{-\frac{r_{cm}}{\bar{\lambda}}}}{\bar{\lambda}},$$

где $\bar{\lambda}$ - средняя длина свободного пробега.

Расстояние r_{cm} , пролетев которое молекула газа столкнется с частицей пара $r_{cm} = -\bar{\lambda} \cdot \ln(1 - \xi)$, где ξ - случайное число, равномерно распределенное на участке $[0, 1]$, генерируемое ДСЧ.

Если расстояние пройденное молекулой газа меньше r_{cm} , то столкновение не произойдет, если больше – молекула газа столкнется с частицей металлического пара, пройдя расстояние r_{cm} .

Поглощающие свойства поверхности трубы учитываются с помощью коэффициента захвата $\beta > 0$, задаваемого как исходные данные. С помощью ДСЧ генерируется случайное число μ . Если в точке столкновения с поверхностью $\mu \leq \beta$ молекула считается захваченной, а при $\mu > \beta$ - отраженной. Аналогичным образом, с помощью коэффициента K захвата газа металлическим паром учитываются сорбирующие свойства металлического пара: $\mu \leq K$ - захват, $\mu > K$ - отражение.

Влияние коэффициента K захвата газа металлическим паром на проводимость вакуумной системы показано на Рисунке 4.

Данная модель позволяет учесть процессы сорбции газа металлическим паром и поверхностью канала, а также направление движение потока металлического пара. Еще одним достоинством данного подхода является относительно просто реализуемая возможность введения новых факторов и оценки влияния сопутствующих процессов. Моделирование течения пара основано на газодинамических методах сплошной среды, газа – на статистическом методе пробной частицы.

Представленная математическая модель течения газа через поток металлического пара используется для определения молекулярных характеристик: вероятности перехода частицы через вакуумную систему с металлическим паром (коэффициент проводимости), коэффициент обратного рассеяния, коэффициент поглощения молекул газа поверхностью канала, коэффициент поглощения молекул газа частицами металлического пара, а также для определения плотности потоков падающих и отраженных частиц по длине канала. Данный метод обеспечивает повышенную точность расчета, менее 3%, при минимальных затратах машинного времени. Однако эта 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 математическая модель, основанная на методе частиц в ячейках.

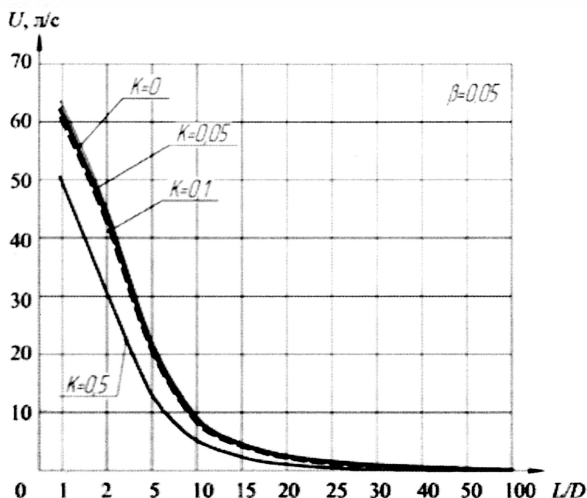


Рисунок 4. Проводимость трубы с паром металла при различных значениях коэффициента захвата K

Представлена математическая модель на основе метода частиц в ячейках.

Дана краткая характеристика метода, расчетная схема (Рисунок 5), введены основные допущения для создания математической модели, дан алгоритм расчета. В среде Matlab 7.9.0 составлена программа для проведения численного эксперимента, результаты которого представлены в графическом виде (изменение давления по длине канала, в его сечении и в зависимости от времени).

В методе используется расщепление физических процессов на временном шаге Δt , и процесс эволюции такой совокупности частиц на Δt можно разделить на два этапа:

- 1). Частицы только взаимодействуют со своими соседями по ячейке;
- 2). Смещение частиц пропорционально их скоростям и шагу по времени без изменения внутреннего состояния подсистем, а также взаимодействие со стенкой канала.

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 молекул по скоростям теплового движения соответствует закону Максвелла;
6. При взаимодействии молекул газа со стенкой коэффициент аккомодации равен единице.

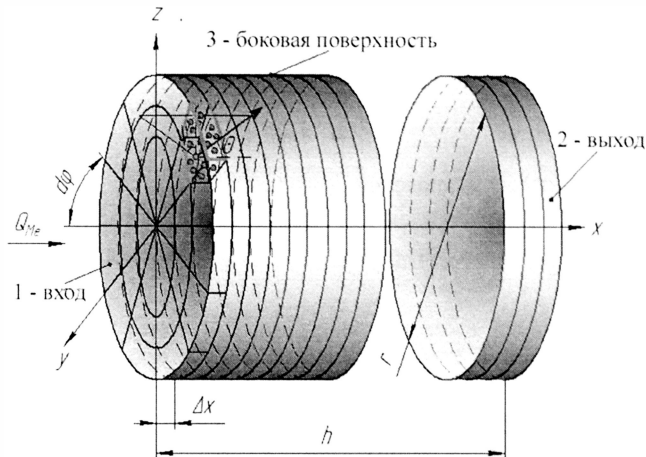


Рисунок 5. Расчетная схема течения газа через капилляр длиной h и радиуса r

Под столкновением подразумевается случайное событие, в результате которого массив векторов скоростей частиц до столкновения $\mathbf{C} = \{\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_N\}$ мгновенно изменяет свое значение на $\mathbf{C}'$, причем результатом столкновения может быть изменение значений лишь какой-либо одной пары векторов скоростей $(\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j)$ на новые значения $(\mathbf{c}'_i, \mathbf{c}'_j)$, причем $\mathbf{G}_{ij} = (\mathbf{c}_i + \mathbf{c}_j)/2$ и $g_{ij} = |\mathbf{c}_i - \mathbf{c}_j|$ не меняются в результате столкновения.

Изменение $\mathbf{C}(t)$ 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 $m = 1, 2, \dots, N_{np} \cdot N_n$ (при условии, что данный момент столкновение одной из пар состоялось) равна

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

где $\omega_m = g_{ij}\sigma/V$ - частота столкновения молекулярных пар в объеме V ,

$\sigma = \frac{\pi}{4}(d_g + d_{cs})^2$ - полное сечение столкновений, g_{ij} - модуль вектора

относительной скорости i -ой и j -ой частиц, $\lambda = \sum_{m=1}^k \omega_m$ - 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 массива векторов скоростей частиц S всей системы в целом до столкновения.

Принимаем исследуемый интервал времени Δt равным времени свободного пробега. 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_i удовлетворяет равенству $s_i = \lambda$, имеет вид:

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

Время ожидания T очередного столкновения определяется состоянием всей системы частиц в ячейке, и, следовательно, оно не зависит от того, столкновение какой пары m разыгрывается.

Алгоритм реализации математической модели

1. Моделирования столкновений:

1). Разыгрываются $\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j$ пробной и полевой частиц. 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 ДСЧ генерируется случайное число ξ , равномерно распределенное на участке $[0;1]$, и определяется номер пары m из условия равномерности, 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

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

ДСЧ генерируется случайное число ζ , равномерно распределенное на участке $[0;1]$, и T определяется из условия $F(T) = \zeta$

$$T = -\ln(1 - \zeta) / \lambda.$$

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.

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

2. Моделирование сдвига можно представить выражением смещения каждой i -ой частицы $\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{c}_i \Delta t$. На этом этапе также моделируется взаимодействие частиц с поверхностью канала.

Численный эксперимент дает большое количество информации об эволюции $C(t)$ каждой частицы рассматриваемой системы. На Рисунке 6 показано изменение давления по длине канала в зависимости от времени.

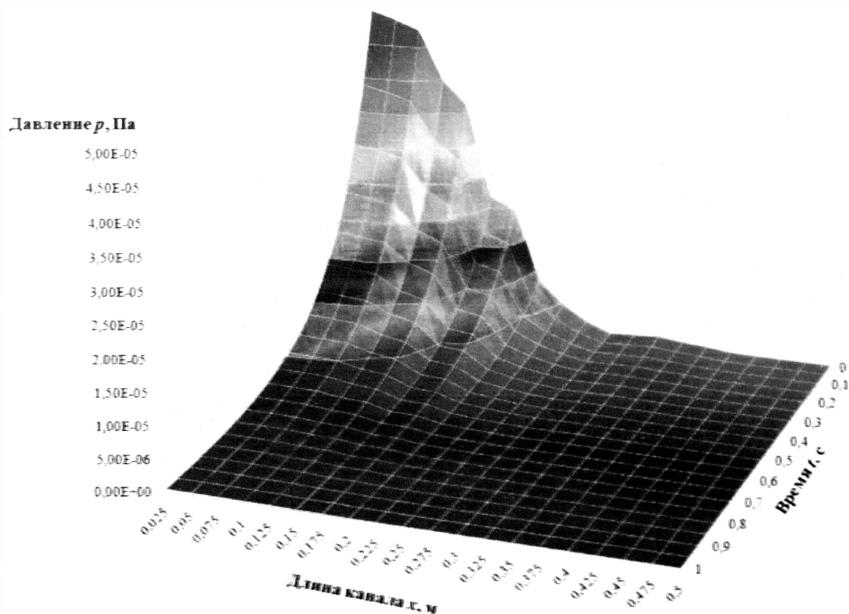


Рисунок 6. Изменение давления разреженного газа по длине канала с потоком металлического пара в зависимости от времени

В рассмотренной модели на основе статистического метода частиц в ячейках точность описания поведения газовой среды в большой степени зависит от точности задания граничных условий. Данная модель может быть использована для расчета газовых течений в системах с движущимся потоком металлического пара во всем диапазоне чисел Кнудсена, а также для каналов и профилей с геометрией любой сложности. Она может быть использована и для расчета систем, в которых присутствуют пары масла, при дополнительном исследовании взаимодействия молекул углеводородов с молекулами газа.

В третьей главе представлена оценка адекватности разработанных математических моделей. Проведено сравнение результатов численных экспериментов по определению проводимости, полученных с помощью разработанного комплекса математических моделей с экспериментальными

данными Клаузинга, опубликованными в открытой литературе, и на основании этого сделаны выводы о достоверности полученных результатов.

Представлена апробация и результаты внедрения разработанного комплекса математических моделей, что подтверждено актом о внедрении.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ РАБОТЫ

1. Впервые создан комплекс математических моделей, позволяющих рассчитать параметры потока разреженных газов в присутствии других потоков (в том числе металлического пара) в каналах повышенной сложности.

Данные модели могут быть использованы при условии существования различных течений разреженного газа: молекулярного $Kn > 0,33$, переходного $0,33 > Kn > 0,01$, вязкостного $Kn < 0,01$.

Комплекс разработанных ММ позволил охватить широкую область применения и спектр решаемых задач. Учтены сорбирующие свойства металлического пара и поверхности канала; вектор скорости потока пара; эффект скольжения на стенке канала; нестационарность процесса; возможность простого введения в модель различных возмущающих воздействий и отображает развитие процесса во времени.

Проведена проверка адекватности моделей при расчете приводимости различных каналов вакуумных систем в сравнении с экспериментальными данными, опубликованными в открытой литературе, в широком диапазоне давлений.

2. Разработаны программы для расчета основных параметров течения газа в вакуумной системе с металлическим паром в среде Borland Delphi 7 и среде Matlab 7.9.0.

3. Разработаны методы расчета основных параметров систем с потоком металлического пара:

- быстроты откачки системы $S_{эф}$ с учетом поглощающих свойств поверхности канала и пара,
- изменения поля скоростей молекул газа в пространстве и времени $C(t, r)$,
- изменения концентрации и давления частиц в пространстве и времени $u(t, r), p(t, r)$,
- плотностей потоков молекул $v_{nad}(r)$ и $v_{noz}(r)$,
- молекулярных характеристик: вероятность перехода молекул через вакуумную систему, коэффициенты обратного рассеяния, захвата поверхностью канала, сорбции газа металлическим паром,
- времени заполнения объема газом.

4. Исследовано влияние на параметры газового течения:

- величины, направления и поглощающих свойств потока металлического пара на вероятность перехода молекул РГ через вакуумную систему. Обратная проводимость снижается на 50% для потока пара с коэффициентом захвата $K=0$ от $U=0,01$ м³/с, до $U=0,005$ м³/с при $K=0,5$ для $L/D=10$. Прямая проводимость снижается на 50% с увеличением коэффициента захвата от $K=0$ до $K=0,5$ с $U=0,019$ м³/с до $U=0,0095$ м³/с при $L/D=10$. С увеличением потока Q

металлического пара от 10^{-3} м³Па/с до 1 м³Па/с прямая проводимость возрастает на 6,5% с 0,0016 м³/с до 0,0018 м³/с, обратная проводимость уменьшается на 74% с 0,0016 м³/с до 0,00042 м³/с при $L/D=100$;

• поглощающих свойств поверхности канала на вероятность перехода молекул РГ через вакуумную систему. При увеличении коэффициента захвата частиц поверхностью канала с $\beta=0$ до $\beta=0,5$ проводимость уменьшается на 80%, с 0,0187 м³/с до 0,00375 м³/с, для $L/D=10$.

5. Практическая реализация. Комплекс разработанных математических моделей был использован при расчете распределения давления по тракту термоэмиссионного реактора-преобразователя в зависимости от времени протекания рабочего процесса, что подтверждено актом внедрения. Результаты исследования подтверждены апробацией моделей в организации ОАО «Красная звезда», где было проведено экспериментальное исследование распределения давления газообразных продуктов во времени. Были определены координаты места нахождения и параметры резкого повышения давления в вакуумной системе ТЭП, что позволило устранить резкое повышение давления, приводившее к прекращению функционирования ЭГК.

СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

В рецензируемых журналах и изданиях:

1. Шемарова О.А., Никулин Н.К. 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. С. 41-52. (0,7 п.л./ 0,7 п.л.).

2. Шемарова О.А., Никулин Н.К. Исследование распределения концентрации газа по длине канала с потоком металлического пара // Вестник МГТУ имени Н.Э. Баумана. Серия: Машиностроение. 2012. Специальный выпуск. С. 25-34. (0,6 п.л./ 0,6 п.л.).

3. Шемарова О.А., Никулин Н.К. Проводимости сложных элементов вакуумных систем в широком диапазоне давлений // Наука и образование. 2014. №12. С. 232-241. (0,6 п.л./ 0,6 п.л.).

В других изданиях:

4. Шемарова О.А., Никулин Н.К. Течение разреженных газов в магистральных при наличии паров металлов // Сборник трудов II Всероссийской студенческой научно-практической конференции «Вакуумная и компрессорная техника и пневмоагрегаты». М.: МГТУ, 2009. С. 166-167. (0,12 п.л./ 0,11 п.л.).

5. Шемарова О.А., Никулин Н.К. Статистический расчет систем заполненных парами металлов// Сборник трудов III Всероссийской студенческой научно-практической конференции «Вакуумная и компрессорная техника и пневмоагрегаты». М.: МГТУ, 2012. С. 56-65. (0,6 п.л./ 0,6 п.л.).

6. Шемарова О.А., Никулин Н.К. Математическая модель течения газа в канале при направленном движении потока пара металла // Вакуумная техника,

материалы и технология: Материалы VI Международной научно-технической конференции / Под ред. С.Б.Нестерова. М.: НОВЕЛЛА, 2011. С. 121-125. (0,3 п.л./ 0,3 п.л.).

7. Шемарова О.А., Никулин Н.К. Применение статистических методов для расчета параметров газа в магистральных с парами металлов // Вакуумная техника, материалы и технология: Материалы VII Международной научно-технической конференции / Под ред. С.Б.Нестерова. М.: НОВЕЛЛА, 2012. С. 47-54. (0,46 п.л./ 0,46 п.л.).

8. Шемарова О.А., Никулин Н.К. Математическое моделирование течения разреженного газа в канале с металлическим паром методом частиц в ячейках // Вакуумная наука и техника: Материалы XIX научно-технической конференции с участием зарубежных специалистов. Судак. 2012. С.40-43. (0,23 п.л./ 0,23 п.л.).

9. Шемарова О.А., Никулин Н.К. Применение статистических методов моделирования течения газа в канале с металлическим паром [Электронный ресурс] // Молодежный научно-технический вестник: электрон. журн. 2012. №10. Режим доступа: <http://sntbul.bmstu.ru/doc/491989.html> (дата обращения: 25.10.2012). (1,54 п.л./ 1 п.л.).

10. Шемарова О.А., Никулин Н.К. Математическое моделирование течения разреженного газа при наличии возмущающих воздействий // Вакуумная техника, материалы и технология: Материалы VIII Международной научно-технической конференции / Под ред. С.Б.Нестерова. М.: НОВЕЛЛА, 2013. С. 105-111. (0,4 п.л./ 0,4 п.л.).

11. Шемарова О.А., Никулин Н.К. Определение проводимости в переходном режиме течения газа PIC-методом // Вакуумная наука и техника: Материалы XX юбилейной научно-технической конференции с участием зарубежных специалистов. М.:МИЭМ НИУ ВШЭ, 2013. С. 60-64. (0,29 п.л./ 0,29 п.л.).

12. Шемарова О.А., Никулин Н.К. Определение проводимости сложных элементов вакуумных систем в широком диапазоне давлений методом частиц в ячейке // Вакуумная техника, материалы и технология: Материалы IX Международной научно-технической конференции / Под ред. С.Б.Нестерова. М.: НОВЕЛЛА, 2014. С. 138-143. (0,35 п.л./ 0,35 п.л.).