КОМПЬЮТЕРНЫЙ МЕТОД ПРОВЕРКИ КОРРЕКТНОСТИ СПОСОБА МОДЕЛИРОВАНИЯ РАССЕЯНИЯ ГАЗА ПОВЕРХНОСТЬЮ

Сажин О.В.

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, г. Екатеринбург

Для тестирования способа моделирования рассеяния газовых молекул поверхностью разработан программный продукт, с помощью которого возможно моделировать поведение газовых молекул в ограниченном пространстве, изменяя форму ограничивающей поверхности, способ моделирования рассеяния, температуру поверхности и начальное состояние газа. В работе реализована свободномолекулярная версия метода прямого статистического моделирования Монте-Карло (DSMC).

Для решения задач динамики разреженного газа, связанных с обтеканием поверхности газом и теплообменом в системе газ – твёрдое тело, существует общепризнанный теоретический метод для описания рассеяния газовых молекул поверхностью, основанный на построении математических ядер рассеяния [1]. Суть такого метода заключается в расчете плотности вероятности того, что молекула, налетающая на поверхность со скоростью между $\vec{v}'$ и $\vec{v}'+d\vec{v}'$ в точке $\vec{r}$ в момент времени t, вылетает из того же самого элемента поверхности в тот же самый момент времени со скоростью между $\vec{v}$ и $\vec{v}+d\vec{v}$. Математическую запись плотности вероятности $R\left(\vec{v}' \to \vec{v};\vec{r};t\right)$ принято называть ядром рассеяния.

На поверхности твёрдого тела, рассевающей газовые молекулы, граничное условие для функции распределения газовых молекул $f\left(\vec{r};\vec{v}';t\right)$ можно записать в интегральной форме через ядро рассеяния в виде

$$\left|v_n\right| \cdot f\left(\vec{r};\vec{v};t\right) = \int\limits_{v_n'<0} \left|v_n'\right| \cdot R\left(\vec{v}' \to \vec{v};\vec{r};t\right) \cdot f\left(\vec{r};\vec{v}';t\right) d\vec{v}' , \qquad (1)$$

где v_n – нормальная составляющая скорости. Функция $R\left(\vec{v}' \to \vec{v};\vec{r};t\right)$ содержит в себе всю информацию о влиянии физико-химических свойств границы раздела «разреженный газ – твёрдое тело» на процесс рассеяния газовых молекул поверхностью.

Любое ядро рассеяния должно удовлетворять трём условиям. Если поверхность не является адсорбирующей, то должно выполнятся условие нормировки

$$\int\limits_{v_n>0} R\left(\vec{v}' \to \vec{v};\vec{r};t\right) dv = 1 . \qquad (2)$$

Вторым очевидным свойством ядра рассеяния является его неотрицательность

$$R\left(\vec{v}' \to \vec{v};\vec{r};t\right) \geq 0 . \qquad (3)$$

Нетривиальным является условие взаимности:

$$\left|v_n'\right| \cdot exp\left(-\frac{m \cdot v'^2}{2 \cdot k \cdot T_W^2}\right) \cdot R\left(\vec{v}' \to \vec{v};\vec{r};t\right) = \left|v_n\right| \cdot exp\left(-\frac{m \cdot v^2}{2 \cdot k \cdot T_W^2}\right) \cdot R\left(-\vec{v} \to -\vec{v}';\vec{r};t\right), \qquad (4)$$

где m – масса молекулы газа, T_w – температура поверхности, k – постоянная Больцмана. Физическая интерпретация этого условия состоит в том, что если газ находится в равновесии при температуре поверхности, то число молекул, рассеянных из интервала скорости $\left(\vec{v}';\vec{v}'+d\vec{v}'\right)$ в интервал скорости $\left(\vec{v};\vec{v}+d\vec{v}\right)$, равно числу молекул, рассеянных с любой скоростью между $-\vec{v}$ и $-\vec{v}-d\vec{v}$ к любой скорости между $-\vec{v}'$ и $-\vec{v}'-d\vec{v}'$.

Чтобы рассчитать ядро рассеяния, необходимо построить некую физическую модель рассеяния газовых молекул поверхностью. Впервые такая модель была предложена Максвеллом [2], согласно которой доля молекул ε, падающих на поверхность, приходит в равновесие с поверхностью и затем испускается диффузно, тогда как остальная часть отражается от поверхности зеркально, не изменив величины скорости.

Предположение Максвелла эквивалентно выбору ядра рассеяния в виде:

$$R_M\left(\vec{v}' \to \vec{v};\varepsilon\right) = \left(1-\varepsilon\right)\cdot\delta\left(\vec{v}' - \left(\vec{v} - 2\cdot v_n\cdot\vec{n}\right)\right) + \varepsilon\cdot\frac{m^2\cdot v_n}{2\cdot\pi\cdot\left(k\cdot T_w\right)^2}\cdot exp\left(-\frac{m\cdot v^2}{2\cdot k\cdot T_w}\right), \qquad (5)$$

где ε - коэффициент диффузности $(0 \le \varepsilon \le 1)$, $\vec{n}$ - нормаль к поверхности, $\delta(x)$-дельта функция Дирака.

Несмотря на формальный математический подход к построению ядра рассеяния, более правдоподобными ядрами являются ядра рассеяния Черчиньяни-Лемпис [3] и Эпштейна [4]. Наглядным примером такого формального подхода является трёх параметрическое ядро Черчиньяни-Лемпис, которое было получено так, чтобы математическая запись ядра удовлетворяла основным условиям (2), (3) и (4):

$$R_{CL}\left(\vec{v}' \to \vec{v};p;q;s\right) = R_n\left(v_n' \to v_n;p\right)\cdot R_\tau\left(v_{\tau_1}' \to v_{\tau_1};q\right)\cdot R_\tau\left(v_{\tau_2}' \to v_{\tau_2};s\right), \qquad (6)$$

где $p;\ q;\ s$ –свободные параметры $(0 \le p \le 1;\ -1 \le q \le 1;\ -1 \le s \le 1)$; v_{τ_1} и v_{τ_2} - тангенциальные составляющие скорости газовой молекулы. Как видно, ядро рассеяния Черчиньяни-Лемпис представляет собой произведение независимых ядер рассеяния для каждой из составляющих скорости газовой молекулы. Для нормальной составляющей скорости ядро рассеяния имеет вид:

$$R_n\left(v_n' \to v_n;p\right) = \frac{1}{\left(1-p\right)}\cdot\frac{m\cdot v_n}{k\cdot T_w}\cdot exp\left(-\frac{p}{\left(1-p\right)^2}\cdot\frac{m\cdot v_n^2\cdot v_n'^2}{2\cdot k\cdot T_w}\right)\cdot I_0\left(\frac{\sqrt{p}}{\left(1-p\right)}\cdot\frac{m\cdot v_n\cdot v_n'}{k\cdot T_w}\right) \qquad (7)$$

где $I_0\left(x\right) = (2\pi)^{-1}\cdot\int_0^{2\pi} exp(x\cdot cos\varphi)d\varphi$. Для тангенциальных составляющих скорости ядро рассеяния выглядит следующим образом

$$R_\tau\left(v_{\tau_1}' \to v_{\tau_1};q\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi\cdot(1-q^2)}}\cdot\sqrt{\frac{m}{2\cdot k\cdot T_w}}\cdot exp\left(-\frac{(v_{\tau_1} - q\cdot v_{\tau_1}')^2}{1-q^2}\right). \qquad (8)$$

Следует заметить, что в литературе часто встречается запись ядра рассеяния Черчиньяни-Лемпис через коэффициенты аккомодации [5]. Если предположить изотропное рассеяние в касательной плоскости, то в математической записи ядра можно положить $s = q$. Тогда свободные параметры ядра просто связаны с коэффициентами аккомодации. Параметр p связан с коэффициентом аккомодации, той части кинетической энергии, которая

соответствует движению по нормали к поверхности, выражением $\alpha_n = 1- p$, параметр q связан с коэффициентом аккомодации тангенциального импульса как $\alpha_\tau = 1- q$.

Таким же формальным образом было построено ядро Эпштейна, который выбирал свою модель исходя из выполнения условия нормировки (2), условия сохранения поверхностного максвеллиана

$$\left|v_n\right| \cdot exp\left(-\frac{m \cdot v^2}{2 \cdot k \cdot T_W}\right) = \int\limits_{v'_n<0} \left|v'_n\right| \cdot R\left(\vec{v}' \to \vec{v}; \vec{r}; t\right) \cdot exp\left(-\frac{m \cdot v'^2}{2 \cdot k \cdot T_W}\right) d\vec{v}', \qquad (9)$$

являющимся простым следствием условия взаимности (4), и предположения, что коэффициент диффузности ε зависит от скорости газовой молекулы. Общий вид ядра рассеяния Эпштейна выглядит следующим образом:

$$R_{Ep}\left(\vec{v}' \to \vec{v}; \varepsilon(\vec{v}')\right) = \frac{v_n \cdot exp\left(-\frac{m \cdot v^2}{2 \cdot k \cdot T_W}\right) \cdot \varepsilon(\vec{v}) \cdot \varepsilon(\vec{v}')}{\int\limits_{v_n>0} v_n \cdot exp\left(-\frac{m \cdot v^2}{2 \cdot k \cdot T_W}\right) \cdot \varepsilon(\vec{v}) d\vec{v}} + \left(1 - \varepsilon(\vec{v}')\right) \cdot \delta\left(\vec{v}' - \left(\vec{v} - 2 \cdot v_n \cdot \vec{n}\right)\right) \qquad (10)$$

Таким образом, ядро рассеяния Эпштейна является неким обобщением ядра Максвелла, действительно, когда ε постоянен, ядро Эпштейна переходит в ядро Максвелла (5).

Эпштейн предложил к использованию функцию $\varepsilon(\vec{v}')$, качественно описывающую температурную зависимость коэффициента аккомодации энергии, которая выглядит следующим образом:

$$\varepsilon(\vec{v}') = exp\left(-\frac{m \cdot v'^2}{2 \cdot k \cdot A}\right) + C \cdot \left[1 - exp\left(-\frac{m \cdot v'^2}{2 \cdot k \cdot B}\right)\right], \qquad (11)$$

где A, B, C – свободные параметры. Обычно свободные параметры подбираются путём наилучшего описания экспериментально полученной зависимости. Очевидно, что это не единственно возможная функция, необходимым условием для функции $\varepsilon(\vec{v}')$ является чётность и выполнение соотношения $0 \le \varepsilon(\vec{v}') \le 1$.

В литературе можно найти достаточно много способов моделирования рассеяния газовых молекул поверхностью, которые основаны на полуэмпирических представлениях о процессе отражения газовой молекулы от поверхности, зачастую не имеющих под собой достаточного физического обоснования. Поэтому если записать соответствующее ядро рассеяние, то оно, как правило, не удовлетворяет основным требованиям (2-4), которым должны удовлетворять ядра рассеяния. Обычно не выполняется важное условие - условие взаимности (4), накладывающее ограничение на возможный вид ядра рассеяния при описании равновесных состояний газа. Как известно, равновесным состоянием газа принято считать стационарное состояние газа без обмена энергией с окружающей средой. В таких состояниях функция распределения газовых молекул должна быть максвелловской, согласно которой распределение концентрации и температуры не зависит от координат, т.е. является равномерным, а распределение скоростей описывается формулой Максвелла для распределения по скоростям. Невыполнение условия взаимности при расчётах равновесных состояний может приводить к результатам, противоречащим данной общепризнанной концепции о равновесном состоянии газа.

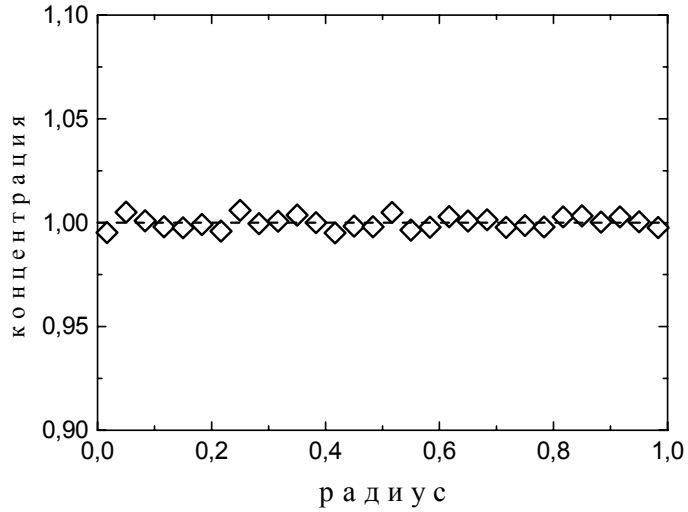

Рис. 1. Результат моделирования распределения концентрации газовых молекул в сфере согласно работе [6].

Кроме того, в ряде работ можно встретить довольно спорные результаты расчётов с применением вполне корректного способа моделирования рассеяния газа поверхностью. Так, например, в работе [6] методом Монте-Карло использовано влияние формы изолированной вакуумной камеры на распределения концентрации газовых молекул в свободномолекулярном режиме для случая полностью диффузного рассеяния газовых молекул поверхностью, что соответствует применению ядра Максвелла (5) с коэффициентом диффузности $\varepsilon=1$. Было показано, что наблюдается существенно неоднородное распределение концентрации газовых молекул в объёмах, ограниченных гладкими криволинейными поверхностями, в отличие от объёмов, ограниченных плоскими поверхностями, где распределение концентрации носит равномерный характер. В частности, в случае сферической поверхности неравномерность распределения концентрации носит самый яркий характер, и разница концентраций вблизи центра и поверхности сферы может достигать *100%*. Как результат, в изолированных от обмена энергией с окружающей средой системах с криволинейными поверхностями стационарное состояние газа не подчиняется равновесной максвелловской функции распределения.

Для тестирования способа моделирования рассеяния газовых молекул поверхностью нами разработан программный продукт, с помощью которого возможно моделировать поведение невзаимодействующих между собой газовых молекул в ограниченном пространстве, изменяя форму ограничивающей поверхности и способ моделирования рассеяния. В качестве объекта моделирования выбран процесс достижения некого стационарного состояния газа в объёме различной формы при искусственном выводе системы из положения равновесия. В работе реализована свободномолекулярная версия метода прямого статистического моделирования Монте-Карло (DSMC) [7].

В начальном состоянии газ находится в равновесии с поверхностью при температуре T_0. Для решения задачи в общем виде использовались относительные параметры состояния газа и поверхности, приведённые к их начальным значениям, в частности:

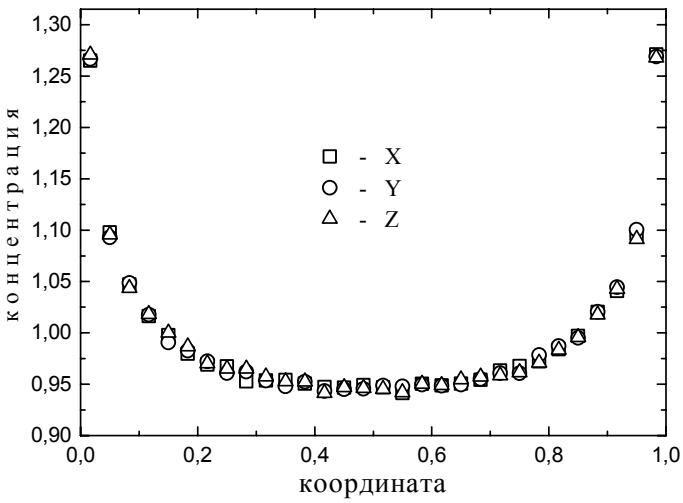

Рис. 2. Стационарное распределение концентрации в кубе при использовании способа моделирования рассеяния, предложенного в работе [7].

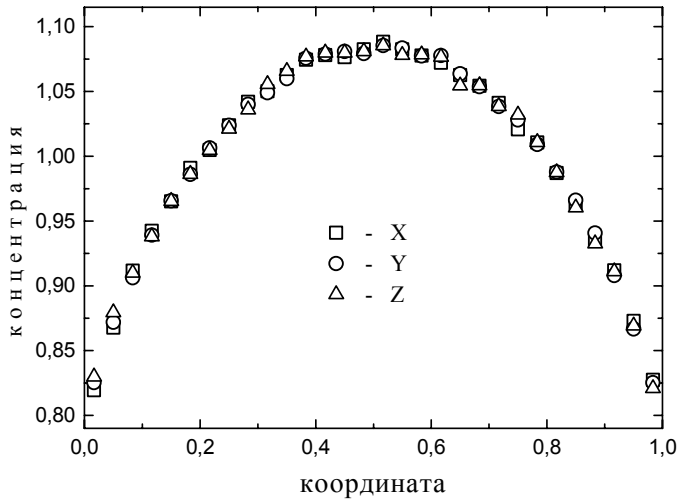

Рис. 3. Стационарное распределение концентрации в кубе при использовании способа моделирования рассеяния, предложенного в работе [8].

$$n^* = n/n_0, \quad T^* = T/T_0, \quad T_w^* = T_w/T_0, \quad t^* = t \cdot \left(l/v_0 \right)^{-1}, \tag{12}$$

где n – газовая концентрация, T- температура газа, t –время, n_0 , v_0 - начальные значения концентрации и наиболее вероятной скорости газовых молекул, l –характерный размер объёма. С целью искусственного вывода системы из положения равновесия в некоторый момент времени температура поверхности мгновенно становилась отлична от температуры газа (температурное возмущение), для удобства $T_w^* = 2$. В дальнейшем поведение газовых молекул прослеживалось до момента достижения некого стационарного состояния.

Следуя работе [6] рассмотрено поведение газовых молекул без температурного возмущения для случая полностью диффузного рассеяния. На рисунке 1 представлено распределение концентрации газовых молекул внутри сферы вдоль радиуса в момент времени $t^*=10$ после начала моделирования. Как видно из рисунка 1, распределение

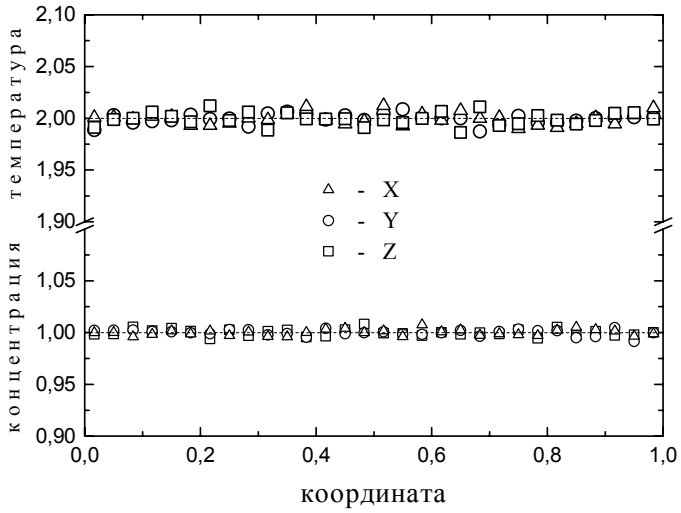

Рис. 4. Стационарное распределение температуры и концентрации в кубе при использовании ядра рассеяния Черчиньяни-Лемпис.

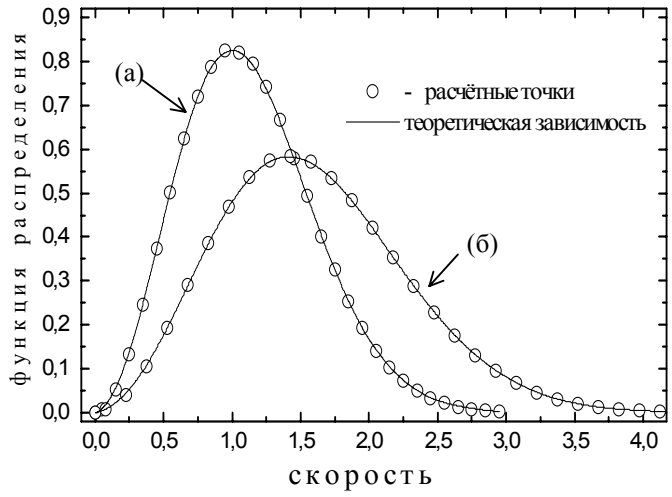

Рис. 5. Функция распределения по скоростям в стационарных состояниях до (а) и после (б) температурного возмущения.

концентрации n^* носит равномерный характер. Такое же распределение получено внутри цилиндра и куба. В конечном итоге установлено, что для любого момента времени не наблюдается отклонения от равномерного распределения концентрации газовых молекул в объёме независимо от формы ограничивающей поверхности.

Как уже было упомянуто, существуют работы, в которых предлагается к использованию некоторые способы моделирования рассеяния газа поверхностью. Например, в работах [8,9] предлагается использовать абсолютно случайное отражение газовых молекул от поверхности и рассеяние с некой постоянной индикатриссой в виде лепестка. Нетрудно показать, что физический смысл, соответствующий этим способам моделирования, не удовлетворяют физической интерпретации условия взаимности (4), которое должно выполняться, когда газ находится в равновесии с поверхностью. Для выяснения, к какому результату может привести невыполнение данного условия, было проведено тестирование данных способов моделирования на основе созданного программного продукта. Для этого моделировалось стационарное состояние газа без энергетического обмена с поверхностью, которое должно являться равновесным. На рисунках 2 и 3 представлены установившиеся распределения концентрации в кубе при использовании данных способов моделирования рассеяния. Как

видно из рисунков наблюдается существенно неравномерное распределение концентрации газовых молекул, что противоречит общепризнанной концепции о равновесном состоянии газа. Данный пример расчётов показывает насколько важно выполнение условия взаимности при расчётах равновесных состояний газа.

В качестве другого примера на рисунке 4 представлено установившееся распределение температуры и концентрации в кубе при использовании ядра рассеяния Черчиньяни-Лемпис с параметрами $p=0.1;\ s=0.2;\ q=0.3$ после температурного возмущения поверхности. Кроме того, на рисунке 5 показана функция распределения по скоростям в стационарных состояниях до (а) и после (б) температурного возмущения, при этом теоретические кривые получены при использовании формулы Максвелла. Как видно этих рисунков, полученные распределения полностью подчиняются равновесной максвелловской функции распределения. Таким образом, после искусственного вывода из положения равновесия газ перешёл в новое положение равновесия, соответствующее температуре поверхности. Аналогичный результат был получен при использовании ядра Эпштейна.

На основе предложенного программного продукта получены результаты, не противоречащие основным постулатам кинетической теории газов, что позволяет использовать его как основу для дальнейших исследований эффектов в разреженных газах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования РФ в форме грантов PD02-1.2-172 и T02-1.2-3355.

Литература

1. *Черчиньяни К.* Теория и приложения уравнения Больцмана. М.: Мир, 1978.
2. *Maxwell J.C.* On the Stresses in Rarefied Gas // The Scientific Papers. 1890. v.2.
3. *Cercignani C. and Lampis M.* Kinetic model for gas-surface interaction // Transp. J. Theory and Stat. Phys. 1971. V. 1. P.101-114.
4. *Epstein M.* A model of the wall boundary condition in kinetic theory // AIAA. 1967. V. 5(10). P.1797-1800.
5. *Sharipov F.* Application of the Cercignani–Lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. I. Plane flow between two parallel plates. // Eur. J. Mech. B/Fluids. 2002. V. 4. P.113–123.
6. *Nesterov S.B., Vassiliev Yu.K and. Kryukov A.P.* Influence of the chamber shape on the non-uniformity of gas distribution // Vacuum. 1999. V. 53 (1-2). P.193-196.
7. *Bird G.A.* Molecular Gas Dinamics and Direct Simulation of Gas Flows. Oxford University Press, 1996.
8. *Nishizawa S.-I., Hirata M.* DSMC analysis of thermal transpiration of capacitance diaphragm gauge // Vacuum. 2002. V.67. P.301–306.
9. *Нестеров С.Б., Васильев Ю.К., Андросов А.В.* Расчёт сложных вакуумных систем. М.: Издательство МЭИ, 2001.