01;03

Взаимодействие ансамбля микрочастиц со свободномолекулярным потоком газа, истекающего из отверстия

© *Д.В. Садин, В.Ю. Алексашов, В.М. Варварский, А.Н. Добролюбов*

Военно-космическая академия им. А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург
E-mail: vka@mil.ru, sadin@yandex.ru

Поступило в Редакцию 17 марта 2014 г.

Проведено численное моделирование движения и взаимодействия микрочастиц со свободномолекулярным потоком с учетом его асимптотических свойств. Изучены особенности коллективных свойств ансамбля микрочастиц и эволюции неопределенности в начальных условиях одиночной частицы.

Совершенствование современных газоаналитических методов и приборов эксперимента требует теоретического обоснования физических явлений, положенных в основу их работы. Например, с целью детального изучения структуры течения и выработки рекомендаций по оптимизации газодинамического интерфейса проведено математическое моделирование течения в дифференциальной камере портативного масс-спектрометра [1]. В настоящее время разрабатывается альтернативная технология течеискания в условиях среднего вакуума. В ее основе лежит определение места течи путем визуализации линий тока частиц или отклонения волокнистого индикатора при взаимодействии их с молекулярным потоком [2–4]. В проведенных авторами экспериментах в барокамере в условиях высокого и среднего вакуума $10^{-2} < p_2 < 1$ Pa предлагаемый метод надежно регистрировал течи с парциальным давлением молекулярного потока значительно меньше фонового давления. Для сравнения использовался магниторазрядный датчик давления с диапазоном измерения до 10^{-8} Pa. В условиях среднего вакуума датчик давления позволял обнаруживать только существенно более интенсивные течи, в которых ее парциальное давление превышает фоновое давление на величину погрешности прибора.

Физическая сущность явления заключается в следующем: индикаторная частица испытывает силовое воздействие от молекул газа окружающей среды (фонового давления) $\mathbf{F}_2$, в частности, для покоящейся частицы средняя сила $\langle \mathbf{F}_2 \rangle = 0$. В результате столкновений молекул потока газа из течи с поверхностью частицы создается неуравновешенная осредненная сила $\langle \mathbf{F}_1 \rangle$, приводящая к ее отклонению от положения равновесия или от невозмущенной траектории движения. Исследуются случаи, когда в окрестности частицы радиусом R реализуются свободномолекулярный режим взаимодействия частицы с газом окружающей среды $\mathrm{Kn}_2 = l_2/R > 1$ и с потоком газа из течи $\mathrm{Kn}_1 = l_1/R > 1$ (где l_1, l_2 — соответствующие средние длины свободного пробега молекул). А также полагается, что эффекты диффузии относительно характерных линейных x_0 и скоростных v_0 масштабов явления несущественны $2D_k/(x_0|v_0|) \ll 1$. Здесь D_k — коэффициент диффузии, вычисляемый по формуле Каннингэма–Милликена для частиц μm-размеров и с учетом суммарного потенциала взаимодействия для наночастиц [5]. В этом случае общее осредненное силовое воздействие на частицу есть суперпозиция сил $\langle \mathbf{F}_1 \rangle + \langle \mathbf{F}_2 \rangle$. Этот режим характерен для практически важных случаев малых течей характерного размера a в дальнем следе при $\overline{x} = x/a \gg 1$ (где x — осевая координата струи) в условиях среднего вакуума.

Для определения осредненного силового воздействия на индикаторную частицу от молекулярного потока течи необходимо определять ее макроскопические газодинамические параметры. Для этого в общем случае требуется применение уравнения Больцмана и методов динамики разреженного газа, например, основанных на прямом статистическом моделировании [6,7], аналитических оценках методом моментов параметров свободной струи [8], аппроксимации опытных и расчетных данных [9,10].

Из математической постановки задачи и общих соображений теории подобия и размерностей следует, что осредненные газодинамические параметры молекулярного потока в дальнем следе являются функциями λ/x, $\mathrm{Kn}_a = l_a/a$, $\overline{c}_a$, γ_1 [2,10]. Здесь приняты следующие обозначения: $\lambda = \sqrt{y^2 + z^2}$ — координата вдоль произвольной прямой, перпендикулярной оси симметрии; l_a — средняя длина свободного пробега молекул газа на выходе из отверстия; $\overline{c}_a = c_a/\sqrt{8R_1T_1/\pi}$ — безразмерная макроскопическая скорость в выходном сечении отверстия; T_1, R_1, γ_1 —

равновесные температура, газовая постоянная и показатель адиабаты газа в камере, откуда происходит истечение.

Рассмотрим стационарное истечение газа через отверстие площадью A в вакуум при больших числах Кнудсена $\mathrm{Kn}_a \gg 1$. Начало координат поместим в центр выходного сечения отверстия, ось X направим по потоку перпендикулярно к плоскости отверстия. Эволюция ансамбля из N сферических твердых частиц при их взаимодействии со свободномолекулярным потоком газа описывается системой уравнений Ньютона:

$$M\ddot{\mathbf{r}}_i = \langle \mathbf{F}_1 \rangle + \langle \mathbf{F}_2 \rangle \quad (i = 1, 2, \ldots, N), \tag{1}$$

где $\ddot{\mathbf{r}}_i$ — вторая производная радиус-вектора (ускорение) i-й частицы массой M.

Для случая, когда скорости частиц много меньше средней тепловой скорости молекул $|\dot{\mathbf{r}}_i| \ll \sqrt{8R_1T_1/\pi}$, уравнение (1) приводится к виду [2]:

$$\overline{x}_i^2 \ddot{\overline{\mathbf{r}}}_i = \frac{3}{8} C_x \frac{\overline{R}^2}{\overline{M}} \frac{\overline{\mathbf{v}} - \dot{\overline{\mathbf{r}}}_i}{|\overline{\mathbf{v}} - \dot{\overline{\mathbf{r}}}_i|} \left(\overline{\rho}\overline{x}_i^2 \dot{\overline{\mathbf{r}}}_i^2 - 2\overline{\rho\mathbf{v}}\overline{x}_i^2 \dot{\overline{\mathbf{r}}}_i + \overline{\rho\mathbf{v}^2}\overline{x}_i^2 \right). \tag{2}$$

Здесь $\overline{\mathbf{r}}_i$, $\overline{x}_i$ — радиус-вектор i-й частицы и его проекция на ось симметрии X молекулярной струи газа, отнесенные к характерному размеру отверстия a; точка означает дифференцирование по времени $\overline{t} = t/a\sqrt{8R_1T_1/\pi}$; $\overline{\rho} = \rho/\rho_1$ — плотность молекулярного потока, отнесенная к плотности газа в камере; $\overline{\mathbf{v}} = \mathbf{v}/\sqrt{8R_1T_1/\pi}$ — вектор безразмерной макроскопической скорости молекулярного потока; C_x — коэффициент сопротивления частицы; $\overline{M} = 3M/4\pi a^3\rho_1$ — безразмерная масса частицы и ее радиус $\overline{R} = R/a$.

Система уравнений движения вида (2) позволяет для практически важных случаев $x/a \gg 1$ использовать асимптотические распределения осредненных газодинамических параметров $\overline{\rho}\overline{x}^2$, $\overline{\rho\mathbf{v}}\overline{x}^2$, $\overline{\rho\mathbf{v}^2}\overline{x}^2$ молекулярного потока вдоль произвольной прямой, перпендикулярной оси симметрии X [2]. На оси струи при истечении из отверстия произвольной формы площадью A имеются следующие предельные значения: $\overline{\rho}\tilde{x}^2$, $\overline{\rho\mathbf{v}}\tilde{x}^2$, $\overline{\rho\mathbf{v}^2}\tilde{x}^2 \to 1/4\pi$, где $\tilde{x} = x/\sqrt{A}$. Величина коэффициента сопротивления частиц для случаев зеркального и диффузного отражения молекул принимает асимптотические значения соответственно [2]: $C_x^{(0)} = 3\pi/4$ и $C_x^{(1)} = 3\pi/4(1 + 4\sqrt{T_\omega/T_1}/9)$, здесь T_w — температура на поверхности частиц.

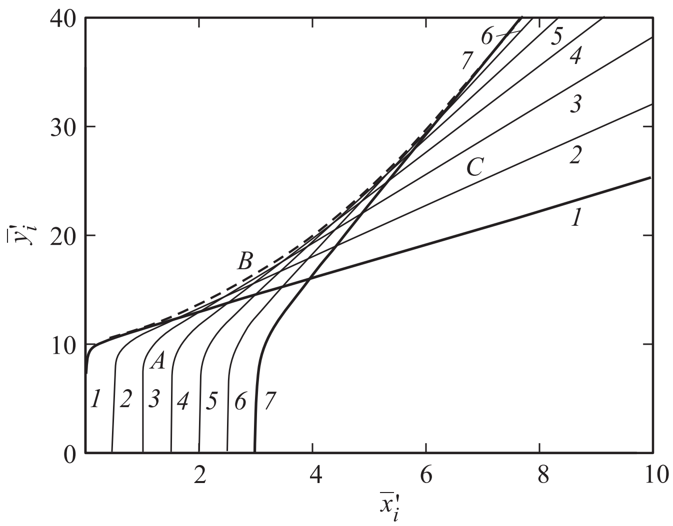

Рис. 1. Семейство траекторий частиц.

Начальные условия задачи эволюции ансамбля частиц задают их положения и скорости в момент времени $\bar{t} = 0$:

$$\bar{\mathbf{r}}_{i0} = [\bar{x}_{i0}, \bar{y}_0, 0]^T, \quad \dot{\bar{\mathbf{r}}}_{i0} = [0, \dot{\bar{y}}_0, 0]^T. \tag{3}$$

В начальный момент времени частицы равномерно распределены по сечению $1000 \leqslant \bar{x}_i \leqslant 4000$, $\bar{y}_0 = -10^4$ и имеют одинаковую скорость $\dot{\bar{y}}_0 = 0.001$, направленную перпендикулярно оси симметрии молекулярной струи, истекающей из квадратного отверстия со стороной $2a$. Коэффициент сопротивления частиц задан для случая диффузного отражения молекул $C_x^{(1)} = 13\pi/12$ при $T_\omega/T_1 = 1$. Безразмерные величины массы и радиуса частиц приняты следующими: $\overline{M} = 1000$, $\overline{R} = 1$.

Система уравнений (2) с начальными условиями (3) интегрировалась численно методом Рунге–Кутта четвертого порядка точности. На рис. 1 представлены траектории частиц в системе координат, связанной с начальным положением точки вылета частицы $i = 1$: $\bar{x}_i' = (\bar{x}_i - \bar{x}_{10})/\bar{x}_{10}$, $\bar{y}_i' = (\bar{y}_i - \bar{y}_{10})/\bar{x}_{10}$. На этом рисунке можно выделить 3 характерные области: A — упорядоченное движение ансамбля

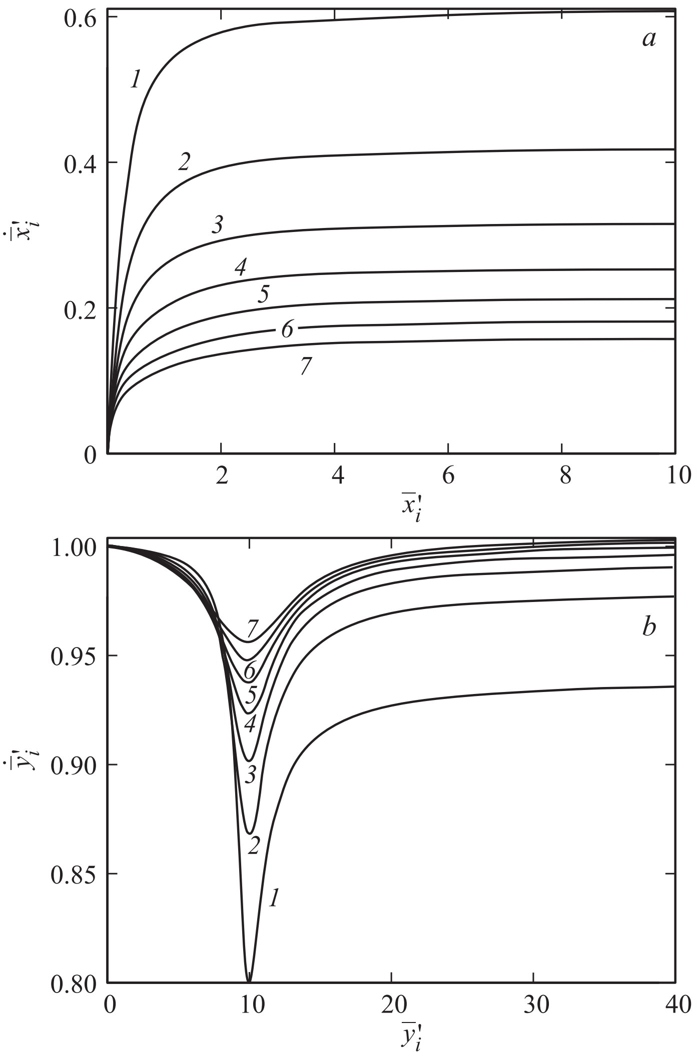

Рис. 2. Фазовая плоскость: осевая координата — осевая скорость частиц (a) и поперечная координата — поперечная скорость частиц (b).

частиц; B — область пересечения, ограниченная траекториями крайних частиц *1* и *7* (жирные линии) и огибающей к семейству траекторий (штриховая линя); C — здесь упорядоченное распределение частиц меняется на противоположное по отношению к начальному и становится неравномерным: бóльшая плотность частиц смещена к огибающей.

В области B траектории частиц пересекаются и возможны их столкновения, вероятность которых для разреженного ансамбля частиц невелика. Это можно объяснить следующими обстоятельствами. Во-первых, при точном задании начальных условий частицы, лежащие ближе к отверстию молекулярной струи газа, испытывают более интенсивное силовое взаимодействие, что приводит к их отставанию в направлении оси Y. Это иллюстрируется траекториями в фазовых плоскостях (рис. 2). Во-вторых, даже небольшой случайный разброс параметров в начальных условиях является причиной рассеяния траекторий, превосходящего размеры частиц [11]. Например, для рассматриваемой задачи это условие выполняется при ошибке задания начальной скорости, превышающей 0.1%.

Результаты решения задачи могут иметь также следующую интерпретацию [11]. Пусть начальное положение одиночной частицы задано неточно $\bar{x}_0 \leqslant \bar{x} \leqslant \bar{x}_0 + \Delta\bar{x}$, т.е. с погрешностью, не превышающей $\Delta\bar{x}$. Тогда приведенные на рис. 1 результаты можно трактовать как эволюцию неопределенности состояния частицы. Интересно отметить, что изменение во времени начальной погрешности положения частицы $\Delta\bar{x}$ не является монотонным. Вначале она уменьшается в несколько раз до $\bar{y}_i^7 \cong 15$, а затем неограниченно возрастает.

Таким образом, численный анализ взаимодействия ансамбля микрочастиц со свободномолекулярным потоком газа, истекающим из отверстия, позволил выявить характерные области и эволюцию неопределенности в начальных условиях движения частицы.

Список литературы

[1] *Пивоварова Е.А., Смирновский А.А., Шмидт А.А.* // Письма в ЖТФ. 2013. Т. 39. В. 21. С. 30–36.

[2] *Садин Д.В., Алексашов В.Ю., Алексеев К.В., Варварский В.М., Лебедев Е.Л.* // ПМТФ. 2012. Т. 53. № 6. С. 41–48.

[3] *Садин Д.В., Добролюбов А.Н.* Патент на изобретение RUS 2321835 01.11.2006.

[4] *Садин Д.В., Добролюбов А.Н.* Патент на изобретение RUS 2343439 05.03.2007.
[5] *Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л.* // ЖТФ. 2002. Т. 72. В. 7. С. 13–20.
[6] *Захаров В.В., Лукьянов Г.А.* // ММ. 2001. Т. 13. № 6. С. 70–75.
[7] *Лукьянов Г.А., Мимакова О.И., Быков Н.Ю.* // ЖТФ. 2008. Т. 78. В. 1. С. 27–33.
[8] *Лазарев А.В., Застенкер Н.Н., Трубников Д.Н.* // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 2003. Т. 44. № 4. С. 238–242.
[9] *Герасимов Ю.И., Ярыгин В.Н.* // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2012. Т. 13. http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2012-07-13-001.pdf
[10] *Садин Д.В., Алекашов В.Ю., Варварский В.М.* // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2013. Т. 14. http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2013–03–18–001.pdf
[11] *Cercignani C.* Theory and Application of the Boltzman Equation. Edinburgh and London: Scottish Academic Press, 1975. 415 p.