

03

Применимость метода крупных частиц для сквозного расчета струйных течений в широком интервале давлений газа

© С.Н. Кольцов¹, Л.Н. Галль², Н.Р. Галль^{2,3}

¹ НИУ Высшая школа экономики, Санкт-Петербург

² Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург

³ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

E-mail: skoltsov@hse.ru

Поступило в Редакцию 24 августа 2015 г.

Проводится исследование границ применимости метода крупных частиц (МКЧ) для расчета струйных газодинамических течений в условиях изменения давлений на 4–5 порядков. Рассмотрены три подхода, позволяющие определить реальные пределы адекватности модели со стороны низких давлений. На основе анализа результатов показано, что метод крупных частиц адекватно работает в диапазоне давлений $5\text{--}10^5$ Па, несмотря на то что формально МКЧ работает и при более низких давлениях.

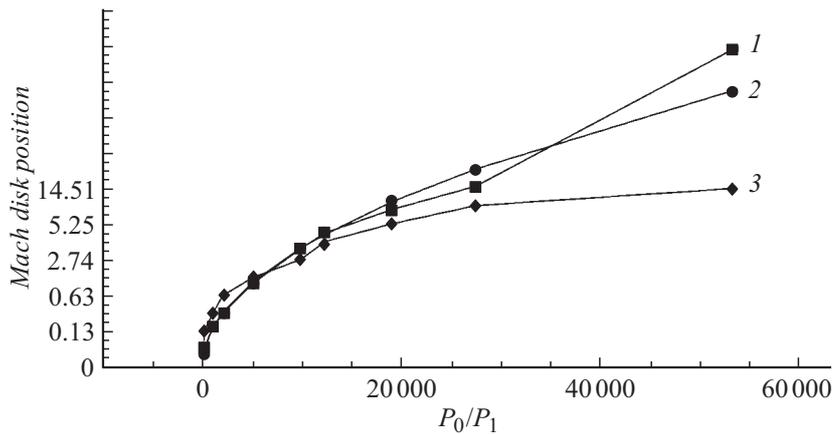
Газодинамические интерфейсы являются важнейшими компонентами современных масс-спектрометров, обеспечивая доставку заряженных частиц из области ионизации на атмосферном давлении в высоковакуумную область [1]. Для оптимизации их работы применяются численные модели, в основе которых лежат уравнения Навье–Стокса или нестационарные уравнения Эйлера. Однако различные численные схемы, применяемые для анализа течений газа, обладают своими возможностями и ограничениями. Как правило, моделирование газодинамических интерфейсов основано на модификациях метода конечных объемов. Альтернативой этой методике выступает метод крупных частиц (МКЧ), особенностью которого является способ дискретизации пространства в виде набора частиц. Каждая частица является носителем атрибутов окружающей среды, таких как плотность, скорость, кинетическая энергия и пространственные координаты [2].

На данный момент метод крупных частиц активно используется в различных научных направлениях, таких как моделирование работы

двигателя внутреннего сгорания, исследование течений газозвесей, исследование аэрогазодинамических характеристик головных обтекателей ракет, моделирование плазмы, моделирование течения крови в сердечно-сосудистой системе, расчет газодинамических интерфейсов в масс-спектрометрии [3,4] и другие. Однако, несмотря на обилие публикаций по теме крупных частиц, в литературе слабо освещена проблема границ применимости данного метода. Особенно это актуально при разработке газодинамических интерфейсов в масс-спектрометрии. Давление в таких интерфейсах меняется от атмосферного до высокого вакуума со свободно-молекулярным течением, что приводит к сложностям, так как единая модель для расчета движения газа в таком диапазоне давлений на данный момент отсутствует. Целью данной работы является оценка ограничений метода крупных частиц на примере расчета осесимметричных газодинамических интерфейсов типа ЭРИАД [1] с точки зрения совпадения данных наших численных экспериментов с тремя различными тестами. В МКЧ результатом расчета является серия массивов, содержащих стационарное решение задачи истечения. Массивы содержат пространственные распределения газодинамических параметров газа (скорость, плотность, давление, температура, энергия). Соответственно эти распределения использовались для определения положения диска Маха, пространственного распределения чисел Кнудсена и локального числа Маха.

В данном исследовании проводился расчет при помощи осесимметричной схемы и использовалось пространство размером 0.02 (длина области) $\times 0.02$ m (радиус области). Пространство было разделено на 1000×2000 ячеек. Входная грань области была реализована в виде сопла с внутренним диаметром $D = 1 \cdot 10^{-4}$ m. Натекание газа определяется постоянным граничным условием на срезе сопла со следующими параметрами: давление $P_0 = 101\,325$ Pa, температура $T = 273$ K. Анализировались положение диска Маха, пространственное распределение чисел Кнудсена и локального числа Маха при истечении газа из сопла в область с пониженным давлением P_1 . В качестве буферного газа использовался газ N_2 (28 amu) с начальной температурой 273 K, диаметр молекулы азота принимался равным $1.38 \cdot 10^{-23}$ m. Давление P_1 варьировалось в диапазоне 1–1000 Pa. На остальных гранях расчетной области были использованы граничные условия „открытая граница“ [2].

При истечении потока газа в область с пониженным давлением образуется прямой скачок уплотнения, получивший название диска



Расстояние от сопла до диска Маха (в логарифмическом масштабе) в зависимости от отношения давления на срезе сопла P_0 и давления в камере P_1 : 1 — расчеты в МКЧ, 2 — модель Ашкенази–Шермана, 3 — модель Эвана–Моуди.

Маха, за которым скорость течения становится дозвуковой [5]. Экспериментальные исследования диска Маха в диапазоне 10–1000 Pa показали, что расстояние L от сопла до диска Маха целиком определяется диаметром сопла и отношением давлений на срезе сопла и в вакуумной камере [5]:

$$L = 0.67D(P_0/P_1)^{1/2}, \quad (1)$$

где D — диаметр отверстия, P_0 — давление газа на выходе сопла, которое мы полагали равным давлению во внешней среде (модель Ашкенази–Шермана). Однако при более низких давлениях модель Ашкенази–Шермана дает завышенное значение положения диска Маха [6]. Эван и Моуди [6], также на основе экспериментальных данных, предложили скорректированную формулу расчета его положения в области пониженного давления:

$$L = 0.77D + 0.068(D^{1.35})(P_0/P_1)^{1/2}. \quad (2)$$

Таким образом, обе модели, описывающие положения диска Маха, можно использовать для верификации МКЧ. Следует отметить, что

Таблица 1. Максимальное число Кнудсена в области расчета в зависимости от среднего значения давления буферного газа

Среднее значение давления буферного газа, Па	Максимальное число Кнудсена в области расчета
5.3	0.75
1.9	1.67

сравнение МКЧ с моделями Ашкенази–Шермана, Эвана–Моуди не проводилось ранее. Сравнение расчетов по трем вышеназванным моделям приведено на рисунке. Расчетные значения положения диска Маха совпадают в пределах порядка 3–5% с экспериментальными значениями для двух моделей в диапазоне 5.3–1000 Па. Граница 5.3 Па соответствует отношению $P_0/P_1 = 19\,118$. В области более низкого давления, менее 5 Па, результаты расчета методом МКЧ и с помощью эмпирических формул [5,6] существенно, более чем на 18%, расходятся.

Данное расхождение обусловлено тем, что уравнения Эйлера получаются при решении уравнения Больцмана методом последовательных приближений Чепмена–Энскога, суть которого заключается в разложении решения по малому параметру (числу Кнудсена) в ряд. Нулевое решение соответствует уравнениям Эйлера, решение в первом приближении приводит к уравнениям Навье–Стокса. Это означает, что как только число Кнудсена становится больше единицы, гидродинамические уравнения для описания движения потока газа не могут быть использованы. Для того чтобы проиллюстрировать данное ограничение, были проведены исследования пространственного распределения чисел Кнудсена, полученного в ходе численного моделирования, при разных величинах давления буферного газа.

Число Кнудсена (Kn) характеризует степень разреженности газа: $Kn = \lambda/L$ [7], где λ — средняя длина пробега и L — характерный размер течения. В рамках данного теста в качестве характерного размера течения был использован диаметр диска Маха. Средняя длина пробега рассчитывается по следующим формулам: $\lambda = \frac{1}{\pi n d^2 \sqrt{2}}$, где n — плотность газа; $n = \frac{P}{kT}$, где P — давление газа (Па), T — температура (К), k — постоянная Больцмана, $k = 1.38 \cdot 10^{-23}$ и d — диаметр молекулы [7]. Если

Таблица 2. Максимальная величина числа Маха в области расчета для различных средних давлений в вакуумной камере

Среднее значение давления, Pa	Максимальная величина числа Маха в области расчета
10.4	18
5.7	20
3.85	22
1.97	26

$Kn > 1$, то в газе реализован свободно-молекулярный режим [7,8]. Наше моделирование показывает, что максимальная величина числа Кнудсена в области расчета до давления порядка 5 Pa не превышает единицы (см. табл. 1). При уменьшении давления ниже 5 Pa число Кнудсена становится больше единицы, соответственно уравнения Эйлера в этой области давления буферного газа уже неприменимы, что и отражено в тестах по определению положения диска Маха.

Переход от вязкостного к свободно-молекулярному режиму можно также характеризовать распределением температуры вдоль потока или величиной поступательной скорости газового потока. С уменьшением плотности потока происходит уменьшение частоты столкновения молекул, что приводит к „замораживанию“ распределения температуры по степеням свободы. Соответственно при этом останавливается перевод энергии из различных степеней свободы в направленное движение струи, т.е. скорость газа перестает изменяться. Этот эффект экспериментально исследовали Fen и Andersen [9,10], которые определили так называемое терминальное число Маха: $M_T = 1.17 \cdot Kn_0^{(1-\gamma)/\gamma}$, где Kn_0 — число Кнудсена на срезе сопла, γ — показатель адиабаты (для воздуха $\gamma = 1.401$). Терминальное число Маха M_T показывает максимальное значение скорости потока газа, которое достигается, когда останавливается переход термальной энергии в кинетическую энергию потока [9,10]. В нашем случае для воздуха терминальное число Маха $M_T = 27$. Таким образом, терминальное число Маха является одним из хороших индикаторов, характеризующих переход течения в область свободномолекулярного течения, и может быть использовано для тестирования численных газодинамических моделей. Скорость в

терминах числа Маха (V_{mach}) может быть рассчитана альтернативным способом на основе распределений давления и плотности в области расчета: $V_{\text{mach}} = \frac{V_{\text{gas}}}{c}$, $c = \sqrt{\frac{\gamma P}{\rho}}$, где, V_{gas} — скорость газа (m/s), c — локальная скорость звука. В табл. 2 приведены расчеты максимальной величины локального числа Маха в виде функции от средних значений давления буферного газа. Таким образом, на основании данного теста можно сказать, что переход в свободномолекулярный режим осуществляется при давлении буферного газа меньше 5 Па. Соответственно на основании данного текста также можем сказать, что МКЧ непригоден при давлениях меньше 5 Па.

Таким образом, наше исследование показывает, что МКЧ работает в очень широком диапазоне давлений от атмосферного до ~ 5 Па, при этом численная схема не ломается даже при давлениях существенно ниже минимального значения за счет автоматического учета критерия Куранта–Фридрихса–Леви. Однако при давлениях меньше 5 Па в наших тестах, расчет методом МКЧ показывает физически неверные результаты. Это обусловлено тем, что уравнения Эйлера уже неприменимы для расчета газового потока при малых величинах давлений: в самом их выводе заложены предположения о малых величинах числа Кнудсена. Поскольку в тестовых расчетах использовались реалистичные размерные параметры (диаметр сопла), можно констатировать, что МКЧ позволяет адекватно моделировать основные газодинамические характеристики струйных течений при расширении газа из области атмосферного давления в вакуум для практически важного диапазона давлений $5\text{--}10^5$ Па. Это делает его ценным инструментом для сквозного расчета многокамерных устройств, в которых давление газа ступенчато понижается на 4–5 порядков от атмосферного.

Список литературы

- [1] Галль Л.Н., Баженов А.Н., Шкургов В.А., Бабаин В.А., Галль Н.Р. // Масс-спектрометрия. 2007. Т. 4. № 1. С. 11.
- [2] Белоцерковский О.М., Опарин А.М., Четкин В.М. Турбулентность. Новые подходы / Информатика: неограниченные возможности и возможные ограничения. М.: Наука, 2003. 288 с.
- [3] Крыгин Г.Б., Ежов В.Ф., Рябов В.Л., Ящук В.В. // ЖЭТФ. 1988. Т. 24. С. 16.
- [4] Sandilya Garimella, Xiaoyu Zhou, Zheng Ouyang // J. Am. Soc. Mass Spectr. 2013. V. 24. Iss. 12. P. 1890–1899H.

- [5] *Ashkenas, Sherman F.S.* // Proceedings of the International Symposium on Rarefied Gas Dynamics. Toronto: Academic Press, 1964, 1966. V. II. P. 84.
- [6] *Ewan B.C.R., Moodie K.* // Combust. Sci. Technol. 1986. V. 45. P. 275–288.
- [7] *O'Hanlon J.F.* A User's Guide to Vacuum Technology / 3 edition. Wiley — Interscience, 2003.
- [8] Jeerasak Pitakarnnop, Rugkanawan Wongpitayadisai // Acta IMEKO. 2014. V. 3. N 2. Article 14. Identifier: IMEKO-ACTA-03 (2014)-02-14.
- [9] *Fen J.B.* // Int. J. Mass Spectrometry. 2000. V. 200. P. 459–478.
- [10] *Anderson J.B., Fen J.B.* // Phys. Fluids. 1965. V. 8. P. 780.