

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО К РАСЧЕТУ ТЕЧЕНИЯ СИЛЬНО РАЗРЕЖЕННОГО ГАЗА В СИСТЕМАХ С ПРОИЗВОЛЬНОЙ КОНФИГУРАЦИЕЙ СТЕНОК

Г. А. ГАРБУЗ, В. П. ИВАНОВ

(Горький)

Описывается метод моделирования соударений молекул газа со стенками системы, геометрия которых задается численно в памяти машины по графическому представлению стенок, например, по их рабочим чертежам. При переходе от расчета одной системы к другой изменяется информация о стенках, программа вычислений остается без изменения. Метод применим к задачам динамики разреженного газа, решаемых способом Монте-Карло; ниже он применяется для вычисления проводимости элементов высоковакуумных магистралей и степени сжатия, создаваемой вакуумными молекулярными насосами, а также для расчета сил, действующих на тело, которое вращается в полости, заполненной сильно разреженным газом.

1. Исходные соотношения для моделирования столкновений молекул газа со стенками. Введем понятие дискретной модели газовой системы. Вплем рассматриваемый газовый объем в трехмерную кубическую решетку. Узлам решетки, находящимся внутри объема, присвоим индекс 0, всем остальным узлам — индекс 1. Рассмотрим молекулу, испытавшую соударение с другой молекулой или со стенкой в точке M_0 , и движущуюся со скоростью v до соударения со стенкой в точке M . В дискретной модели газовой системы этому движению сопоставим шаговое движение изображающей точки по узлам решетки с индексом 0, ближайшим к траектории M_0M . Точкой соударения молекулы со стенкой считается первый узел с индексом 1, в который попадает изображающая точка. Нормаль к стенке определяется по конфигурации ближайших к найденной граничных точек (узлы с индексом 1, ограничивающие пространство узлов с индексом 0).

Дискретная модель газовой системы легко реализуется в вычислительной машине. Пусть трехмерная решетка — куб памяти машины, узлы решетки — двоичные элементы, находящиеся в состоянии 0 или 1. Выберем оси x, y, z вдоль ребер куба, a, b, c — число двоичных элементов соответственно вдоль осей x, y, z . Пусть двоичные элементы вдоль оси x образуют a -разрядные ячейки памяти машины, и эти ячейки перенумерованы от 0 до $(bc - 1)$ вдоль оси y в плоскостях, параллельных xu , причем их номера возрастают вместе с z . Если единица измерения длины равна расстоянию между соседними двоичными элементами, то точке $M(x, y, z)$ соответствует x -й ряд ячейки, номер которой равен $y + bz$.

Следовательно, для задания геометрии системы в памяти машины требуется разбить ее рабочий объем равноотстоящими параллельными плоскостями, и в каждой плоскости провести две системы взаимно перпендикулярных прямых. В узлах этих прямых, расположенных в пределах рабочего пространства, ставятся нули, в остальных узлах — единицы. Полученные строчки — коды переносятся на перфокарты в порядке их нумерации.

При каждом шаге изображающей точки вычисляются ее текущие координаты x, y, z . Если на x -й позиции кода с адресом $y + bz$ стоит 0, то

шаговое движение продолжается, если 1, то x, y, z будут координатами точки соударения.

В данной работе использовано шаговое движение с шагами единичной длины вдоль координатных осей. Шаговое движение можно условно разделить на такты. В процессе каждого k -го такта делается от одного до трех шагов, причем каждая из координат x, y, z изображающей точки изменяется не более чем на единицу. Координаты изображающей точки после первого, второго и третьего шагов соответственно равны

$$(x_k, y_{k-1}, z_{k-1}), \quad (x_k, y_k, z_{k-1}), \quad (x_k, y_k, z_k)$$

При этом

$$\begin{aligned} x_k &= x_0 + [l_1k], & y_k &= y_0 + [m_1k], & z_k &= z_0 + [n_1k] \\ (l_1 &= l/h, & m_1 &= m/h, & n_1 &= n/h) \end{aligned} \quad (1.1)$$

Здесь l, m, n — направляющие косинусы скорости v молекулы, h — наибольшее из $|l|, |m|, |n|$; символы $[l_1k], [m_1k], [n_1k]$ означают ближайшее целое соответственно от l_1k, m_1k, n_1k ; $k = 0, 1, 2 \dots$

При описанном способе шагового движения изображающая точка может попасть либо на плоский участок дискретной модели стенки, где четыре ближайших граничных точки лежат в одной плоскости с найденной точкой, либо на вершину выпуклого двугранного или трехгранного угла. В данной работе принято, что в первом случае нормаль определяется ориентацией плоского участка стенки, во втором случае с равной вероятностью выбирается нормаль к любой из граней двугранного или трехгранного угла.

Применение этого правила к расчету вакуумных систем обеспечило совпадение результатов вычислений с имеющимися данными $[1-3]$ в пределах точности метода Монте-Карло, так как при применении изложенного правила определения нормали законы распределения вероятностей скоростей молекул, отраженных стенкой и ее дискретной моделью, отличаются незначительно.

Действительно, любую поверхность можно заменить поверхностью, составленной из достаточно мелких кусочков плоскостей. Рассмотрим часть плоскости с площадью, равной S , ограниченную координатными плоскостями и отсекающую положительные отрезки координатных осей, соответственно равные ξ, η, ζ . При диффузном законе отражения молекул стенками число молекул, отраженных в телесный угол $\Delta\omega$ вокруг направления, определяемого направляющими косинусами l, m, n , равно

$$N_1 = n_0 S \pi^{-1} \cos \gamma \Delta\omega \quad (1.2)$$

Здесь n_0 — число молекул, падающих на единицу поверхности стенки в единицу времени, γ — угол между направлением скорости молекулы, которое определяется направляющими косинусами l, m, n и направлением нормали к стенке, определяемым полярными углами θ_n, φ_n ; при этом имеет место соотношение

$$\cos \gamma = l \sin \theta_n \cos \varphi_n + m \sin \theta_n \sin \varphi_n + n \cos \theta_n \quad (1.3)$$

С учетом равенств

$$\operatorname{tg} \varphi_n = \xi / \eta, \quad \operatorname{tg} \theta_n = \zeta \sqrt{\xi^2 + \eta^2} / \xi \eta, \quad S = \xi \eta / 2 \cos \theta_n$$

формула (1.2) преобразуется к виду

$$N_1 = n_0 (2\pi)^{-1} (\eta \zeta l + \xi \zeta m + \xi \eta n) \Delta\omega \quad (1.4)$$

Запишем теперь аналогичное выражение для дискретной модели стенки. Число граничных точек, нормаль в которых может быть направлена вдоль осей x , y , z , пропорционально соответственно $\eta\zeta$, $\xi\zeta$, $\xi\eta$. Каждая из этих точек отражает в единицу времени одинаковое число молекул, так как хотя выпуклые граничные точки излучают молекулы вокруг двух и трех направлений нормали, изображающие точки приходят на них соответственно вдвое и втрое чаще, чем на плоскую стенку (изображающая точка может попасть в плоскую граничную точку через единственную смежную точку с индексом 0, а выпуклые граничные точки имеют две или три смежные точки с индексом 0). Число молекул, излучаемых дискретной моделью стенки в $\Delta\omega$, равно

$$N_2 = \frac{n}{2\pi}(\eta\zeta l_1 + \xi\zeta m_1 + \xi\eta n_1)\Delta\omega, \quad n = \frac{2n_0S}{\xi\eta + \xi\zeta + \eta\zeta}$$

$$l_1 = l \quad (l > 0), \quad l_1 = 0 \quad (l < 0) \quad (1.5)$$

аналогично для m_1 , n_1 .

Основное отличие (1.5) от (1.4) — наличие случайных скоростей, где $\cos \gamma < 0$. Однако скорости, направленные «внутри» стенки, приводят лишь к небольшим случайным смещениям изображающей точки вдоль дискретной модели стенки и не оказывают влияния на результаты расчета.

2. Расчет вакуумных систем. Вакуумные системы характеризуются значениями коэффициентов проводимости (трубы, ловушки и т. п.) и степени сжатия (вакуумные насосы). Как показано в [1-3], расчет этих коэффициентов сводится к задаче вычисления вероятностей прохода молекулы газа с входа на выход вакуумной системы и с выхода на ее вход. Применение метода Монте-Карло к расчету этих вероятностей в случае отсутствия соударений между молекулами газа (молекулярный поток) описано в ряде работ [1-5]. Укажем некоторые особенности применения предлагаемой методики моделирования случайного движения молекул газа к расчету вероятностей прохода.

При кодировке стенок поверхности входа и выхода вакуумной системы тоже записываются как стенки. Граничные точки, соответствующие входной и выходной поверхностям, записываются в отдельные массивы памяти машины по тем же правилам, что и для стенок.

После каждого шага точки, изображающей движение молекулы, производится проверка попадания ее на стенку. Если изображающая точка попала на стенку, проводится проверка принадлежности найденной граничной точки поверхностям входа и выхода. Движение изображающей точки начинается с шага вдоль нормали, выбранной в данной граничной точке, а затем изображающая точка движется вдоль выбранного направления случайной скорости молекулы.

С применением изложенной методики был произведен расчет ряда вакуумных систем. Результаты вычислений в пределах случайных ошибок метода Монте-Карло совпадают с результатами, полученными для тех же систем в других работах [1-3]. Расчеты проводились на ЦВМ с 45-разрядными кодами; объем памяти, где была записана информация о стенках системы и ее входе и выходе, не превышал 6000 кодов.

Расчет цилиндрической трубы. Вычисления вероятности прохода молекулы через цилиндрическую трубу были проведены при различной ориентации оси цилиндра при его записи в кубе памяти машины. Вначале ось трубы была параллельна оси z системы координат, выбранной в п. 1 для куба памяти машины. Значение вероятности прохода, вычисленное для трубы с отношением длины к радиусу, равным 4, и с той же случай-

ной ошибкой, что и в работе [3], равно $p = 0.353$. Затем труба была вписана в куб памяти наклонно. Значение вероятности оказалось равным $p = 0.367$. В работе [3] для той же вероятности приведено значение $p = 0.3589$, вычисленное с точностью, характеризуемой дисперсией $\sigma = 0.005$.

Расчет канала между двумя коаксиальными цилиндрами. В работе [3] для вероятности прохода через канал между двумя коаксиальными цилиндрами приведено значение $p = 0.203$, вычисленное с точностью, характеризуемой величиной дисперсии $\sigma = 0.006$ (отношение длины цилиндров к радиусу внешнего цилиндра равно 4, отношение радиусов цилиндров равно 0.5).

Вероятность прохода, вычисленная предлагаемым методом с той же случайной ошибкой, оказалась равной $p = 0.199$ (цилиндры были вписаны в куб памяти наклонно).

Расчет степени сжатия канавки, одна из стенок которой движется. Описанный метод был применен для расчета степени сжатия, создаваемого канавкой длиной l , прямоугольного поперечного сечения со сторонами a , b , причем одна из стенок шириной a движется вдоль канавки со скоростью v . Пусть v_0 — средняя скорость теплового движения молекул газа. При $a = 0.4$ см, $b = 0.3$ см, $l = 1$ см, $v = v_0$ значение степени сжатия K , вычисленной с относительной ошибкой¹ порядка 6%, оказалось равным $K = 5.7$, если $l = 2$, то при остальных тех же данных $K = 5.7$. При $a = 0.4$ см, $b = 0.3$ см, $l = 2$ см, $K = 23.5$.

В работе [1] для тех же систем получены значения степени сжатия, равные соответственно $K = 5.6$ и $K = 21$.

В работе [1] на примере расчета канавки с движущейся стенкой было показано, что приближенный способ [9] расчета молекулярных насосов применим лишь при скоростях ротора, малых по сравнению со средней скоростью движения молекул газа. Было показано также, что недостатки приближенного метода не состоят только в неучете прямого пролета молекул с выхода на вход насоса без столкновения с его стенками.

Может возникнуть предположение, что возможная причина этого — невыполнение при больших скоростях движения одной из стенок канавки исходной гипотезы приближенной теории [9] о постоянстве давления в поперечном сечении канавки. Чтобы исключить эту причину, была рассмотрена канавка, все стенки которой движутся вдоль нее с одинаковой скоростью. При расчете этой канавки предлагаемым методом был запрещен прямой пролет с выхода на вход канавки, что не учитывается в приближенной теории, и подсчитывалось значение среднего числа ударов молекулы о стенки канавки при переходе с выхода на вход.

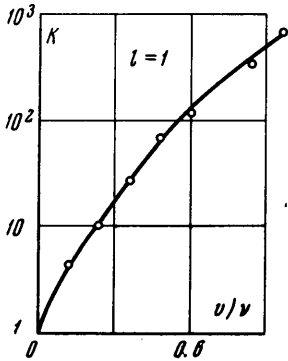
Результаты расчета показали (фиг. 1), что и в этом случае степень сжатия возрастает медленнее, чем по экспоненте, как это предсказывает приближенная теория, причем $n \rightarrow 1$ при $v \rightarrow \infty$ (фиг. 2). Последнее означает, что при больших скоростях движения стенок обратный поток в основном определяется молекулами, проходящими через канавку за одно-два соударения с ее стенками. Следовательно, и без учета прямого пролета степень сжатия определяется молекулами, испытывающими минимальное взаимодействие со стенками, что в приближенной теории не учитывается (там все молекулы рассматриваются испытывающими одинаковое усредненное взаимодействие со стенками).

При расчете молекулярных насосов методом Монте-Карло большая часть машинного времени затрачивается на вычисление вероятности прохода молекул с выхода на вход насоса. Эти затраты можно уменьшить, если учесть, что обратный поток газа через насос определяется молекулами, испытывающими минимальное взаимодействие с его стенками.

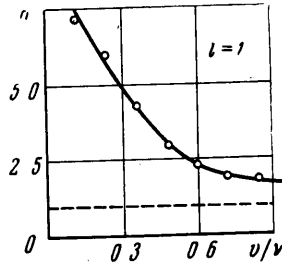
¹ Под относительной ошибкой понимали отношение дисперсии случайной величины вероятности к ее вычисленному значению, выраженное в процентах.

Для этого движение каждой молекулы с выхода на вход насоса достаточно проследить в течение не более чем n соударений со стенками. Если в течение n первых соударений молекула не вышла из насоса, можно считать, что она не пройдет через насос, и переходить к моделированию движения следующей молекулы.

Расчет дискового молекулярного насоса. В работе [2] приведены значения степени сжатия, измеренные экспериментально и вычисленные теоретически для двух молекулярных дисковых насосов при разных скоростях ротора. Предлагаемый в данной работе метод был применен сначала к вычислению степени сжатия одного из этих насосов, обладающего сле-



Фиг. 1



Фиг. 2

дующими параметрами: $r_1 = 2.2$ см, $r_2 = 6.2$ см, $i_0 = 6$, $m = 0.24$, $\mu = 0.88$, $b_1 = 1.7$ см, $b_2 = 0.32$ см, $\varepsilon = 0.45$ см, $Q = 0$, $f = 1000$ об/сек.

Значение степени сжатия оказалось равным $K = 6.2$. Значение степени сжатия для того же насоса, вычисленное теоретически и измеренное экспериментально в работе [2], равно $K = 6.8$, что в пределах ошибок совпадает с результатом, полученным описанным методом.

В работе [2] рассчитана оптимальная геометрия дискового молекулярного насоса, характеризующаяся следующими параметрами: $i_0 = 7$, $m = 0.4$, $\mu = 0.9$, $r_1 = 2.8$ см, $b_1 = 2$ см, $b_2 = 1.3$ см при $r_2 = 7$ см, $f = 1300$ об/сек, $\varepsilon = 0.5$ мм, $v_0 = 470$ м/сек, $Q/p_2 = 10$ л/сек. Значение степени сжатия, рассчитанное методом [2] с точностью порядка 15%, оказалось равным $K = 6.1$. С применением предлагаемого метода моделирования случайного движения молекул газа значение степени сжатия с той же случайной ошибкой было равно $K = 6.4$, что в пределах случайных ошибок совпадает со значением, полученным методом [2].

При проектировании молекулярных насосов цилиндрического и дискового типа важной задачей будет выбор наиболее выгодной формы канавки, при которой обеспечивается наивысшая степень сжатия. В работе исследовано три формы поперечного сечения канавки: прямоугольная, треугольная и полукруглая (поперечное сечение дна канавки — окружность с диаметром, равным ширине канавки). При этом все канавки имеют равные по площади поперечные сечения и одинаковую ширину у поверхности статора, обращенной к ротору.

Расчеты показали, что форма дна канавки мало влияет на величину сжатия, создаваемую насосом. Рассчитывался упомянутый выше оптимальный молекулярный насос. Значения степени сжатия, вычисленные со случайной ошибкой порядка 8%, соответственно равны: 1) $K = 6.4$ для насоса с канавками прямоугольного поперечного сечения, 2) $K = 6.8$ для насоса с «треугольными» канавками, 3) $K = 6.6$ для насоса с «полукруглыми» канавками.

3. Расчет газовых сил, действующих на вращающееся тело. Рассмотрим тело, вращающееся в полости, заполненной сильно разреженным газом. Движение молекулы газа в процессе ее соударения с телом описывается уравнением

$$m\dot{v}(t) = F(t) \quad (3.1)$$

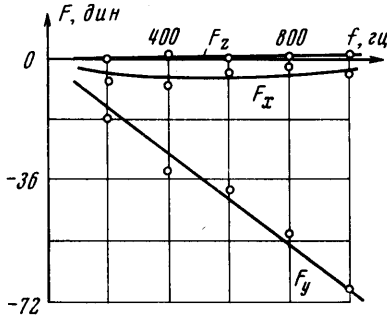
Здесь m , $v(t)$, $F(t)$ — соответственно масса, мгновенная скорость молекулы и сила, действующая на молекулу. Момент сил, действующих на тело, равен

$$M(t) = -[r \times F(t)] \quad (3.2)$$

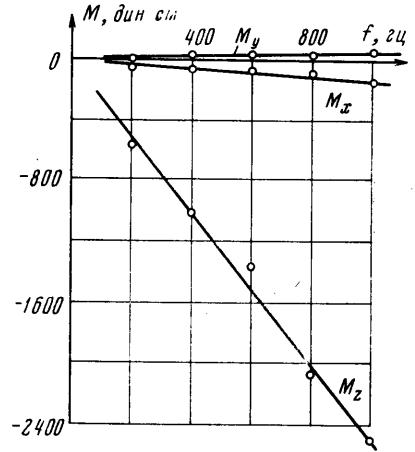
¹ В работе [2] приведено несколько завышенное значение $K = 8$ вследствие меньшей точности расчета.

где \mathbf{r} — радиус-вектор точки соударения молекулы с поверхностью тела относительно его центра масс.

В технически достижимом диапазоне давлений столкновения молекул с ротором происходят настолько часто, что удары отдельных молекул сливаются в непрерывное воздействие. При молекулярном режиме течения газа движение каждой отдельной молекулы протекает независимо от остальных, поэтому при расчете не-

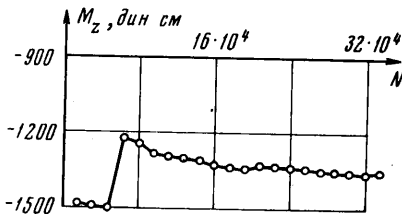


Фиг. 3



Фиг. 4

прерывного воздействия газа на тело удобно усреднить по времени воздействие одной молекулы, и результаты умножить на общее число молекул в полости. Пусть в течение времени T данная молекула N раз столкнулась с поверхностью тела. Средняя сила и средний момент сил, действующие на тело со стороны одной рассматриваемой молекулы в течение времени T , соответственно равны



Фиг. 5

$$F_0(t) = -\frac{m}{T} \sum_{i=1}^N \int_{t_i}^{t_i+T_i} \mathbf{v}_i(t) dt =$$

$$= -\frac{m}{T} \sum_{i=1}^N (\mathbf{v}_i' - \mathbf{v}_i) \quad (3.3)$$

$$M_0(t) = -\frac{m}{T} \sum_{i=1}^N [\mathbf{r}_i \times (\mathbf{v}_i' - \mathbf{v}_i)] \quad (3.4)$$

где \mathbf{v}_i и \mathbf{v}_i' — скорости молекулы соответственно до и после i -го соударения с ротором, t_i , T_i — соответственно момент начала i -го соударения и его длительность.

Предлагаемый метод моделирования случайного движения молекулы газа был применен к вычислению зависимости главного вектора сил и момента сил, действующих на цилиндр, вращающийся в цилиндрической полости, от скорости вращения f цилиндрического ротора (фиг. 3, 4). Здесь F_x , F_y , F_z , M_x , M_y , M_z — проекции главного вектора сил и главного момента сил на оси декартовой системы координат. Начало этой системы находится в центре ротора, ось z совпадает с осью вращения цилиндра и направлением его угловой скорости.

Ось цилиндрической полости не совпадает с осью ротора, ее направление в системе x, y, z определяется полярными углами, которые при расчете были взяты равными $\varphi = 90^\circ$, $\theta = 10^\circ$. Размеры ротора: $R_1 = 10$ см, $h_1 = 22.5$ см, размеры полости: $R_2 = 15$ см, $h_2 = 30$ см. Центры ротора и полости не совпадали, координаты центра полости в системе x, y, z были взяты равными $(-1, -1, 1.4)$.

Среднее давление газа (воздуха), находящегося в системе при комнатной температуре, при расчете было взято равным 10^{-4} мм рт. ст. Точность расчета характеризуется временем усреднения воздействия одной молекулы на ротор, каждое значение величины силы и момента, приведенное на фиг. 3, 4, вычислено при $N \geq 2 \cdot 10^5$ ударов молекулы о ротор. На фиг. 5 приведена типичная зависимость величины момента M_z от времени усреднения (числа ударов молекулы о ротор), полученная в процессе вычислений для $f = 600$ об/сек.

Результаты расчета показали, что на цилиндр, вращающийся в цилиндрической полости, действуют газовые силы, стремящиеся совместить центр цилиндра с центром полости и его ось с осью полости.

В заключение авторы выражают благодарность Ю. И. Неймарку за постановку задачи и обсуждение полученных результатов.

Поступило 21 XI 1968

ЛИТЕРАТУРА

1. Иванов В. П., Неймарк Ю. И. Некоторые методы расчета стационарного движения разреженного газа. Изв. АН СССР, МЖГ, 1967, № 4.
2. Иванов В. П., Неймарк Ю. И. Расчет молекулярных насосов. Изв. АН СССР, МЖГ, 1968, № 3.
3. Davis D. N. Monte-Carlo calculation of molecular flow. Rates through cylindrical elbow and pipes of other shapes, J. Appl. Phys., 1960, vol. 31, No. 7, p. 1169.
4. Levenson L. L., Milleron N., Davis D. N. The optimization of molecular flow conductance. Trans. VII Nat. Sympos. Vacuum Technol., Trans. Cleveland, Ohio, 1960, New York — London, Pergamon Press, 1961, p. 372. (Рус. перев.: Выбор оптимальной проводимости вакуумной системы в режиме молекулярного течения. В сб.: «Современная вакуумная техника», М., Изд-во иностр. лит., 1963.)
5. Levenson L. L., Milleron N., Davis D. N. Conductance en écoulement moléculaire. Vide, No. 103, Jonvier — Fevriir, 1963, pp. 42—54.
6. Haviland J. K., Lavin M. L. Application of the Monte-Carlo method to heat transfer in a rarefied gas. Phys. Fluids, 1962, vol. 5, No. 11, pp. 1399—1405.
7. Haviland J. K., Lavin M., Trilling L. Application of the Monte-Carlo method to rarefied gas flows. Arch. mech. stosowaney, 1962, vol. 14, No. 3—4, pp. 538—591.
8. Богачева А. А., Перепухов В. А., Рухман Э. Е. Применение метода Монте-Карло к расчету аэродинамических характеристик тел сложной формы в свободномолекулярном потоке. Ж. вычислит. матем. и матем. физ., 1968, т. 8, № 6.
9. Jacobs R. B. The design of molecular pumps. J. Appl. Phys., 1951, vol. 22, No. 2, p. 217.