

На правах рукописи

ШИШКОВА Ирина Николаевна

ИЗУЧЕНИЕ ТЕЧЕНИЙ С ИНТЕНСИВНОЙ КОНДЕНСАЦИЕЙ  
ОДНОКОМПОНЕНТНОГО ГАЗА И БИНАРНОЙ СМЕСИ  
НА ОСНОВЕ ПРЯМОГО ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКОГО  
УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА

Специальность 01.04.14 - Теплофизика и молекулярная физика  
Специальность 05.14.05 - Теоретические основы теплотехники

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата технических наук



Москва - 1995

Работа выполнена на кафедре Низких температур Московского энергетического института (технического университета).

Научный руководитель - доктор технических наук, профессор  
КРИКОВ А.П.

Научный консультант - доктор физико-математических наук  
ЧЕРЕМСИН Ф.Г.

Официальные оппоненты - доктор физико-математических наук,  
профессор КОГАН М.Н.

доктор технических наук,  
профессор СОЛОДОВ А.П.

Ведущая организация - Государственный НИИ Вакуумной техники им. С.А.Векшинского (г.Москва)

Защита диссертации состоится "22" декабря 1995 г.  
в 14 часов на заседании диссертационного совета К 053.16.02 в Московском энергетическом институте (техническом университете) по адресу: Москва, Красноказарменная ул., д.17, корп.Т, каф. Инженерной теплофизики, 2-ой этаж, комн.206.

Отзывы на автореферат просим направлять по адресу:  
105935, Москва Е-250, Красноказарменная ул., д. 14, Ученый совет МЭИ.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке МЭИ.  
Автореферат разослан "21" ноября 1995 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета

МИКА В.И.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность работы.** В настоящее время актуальной стала задача получения с помощью бензомасляных средств откачки не только высокого, но и среднего и никакого вакуума. К устройствам, позволяющим достичь этой цели, относятся криоконденсационные и криосорбционные насосы.

Представляет большой интерес изучение процесса интенсивной конденсации на поверхности в системах криовакуумирования. В криовакуумных насосах конденсация может осуществляться при больших скоростях, температуры натекающего потока и криопанели сильно различаются. Это приводит к существенной неравновесности процесса.

Интенсивная конденсация малоизучена, особенно для смеси газов. Практически не исследованы многомерные течения, которые имеют место в криовакуумных устройствах, если газ достаточно разрежен.

Для проектирования наиболее эффективных насосов необходимо иметь зависимости таких свойств струи, как плотность, температура, среднемассовая скорость движения, потоки массы и энергии в различных точках рабочей камеры от параметров газа на входе, условий конденсации, геометрии устройства. Также нельзя обойтись без знания того, как влияет на работу крионасоса присутствие в газовой смеси неконденсируемого компонента.

Существующие методы расчета вакуумных систем приближенны, требуют формального разделения течений на режимы (сплошной, свободно-молекулярный и переходный) по параметру, которым является число Кнудсена ( $Kn = l/L$ , где  $l$  - средняя длина свободного пробега молекулы,  $L$  - характерный линейный размер), с последующим использованием полуэмпирических зависимостей. Такой подход не позволяет выявить действительное влияние столкновений частиц на распределение важнейших макропараметров - плотности, давления, потоков массы, энергии и т.д. - в рабочей камере криовакуумного устройства.

Существенная неравновесность процессов, протекающих в криоконденсационных насосах, требует использования методов молекуляр-

но-кинетической теории, например, численного решения кинетического уравнения Больцмана. Вычисление интеграла столкновений обеспечивает строгий учет межмолекулярного взаимодействия.

Это особенно важно для расчета течений с конденсацией газовой смеси, где возникают дополнительные проблемы, связанные с влиянием различных компонентов друг на друга. Задача об интенсивной конденсации газовой смеси в настоящее время в общем виде не решена. Существующие подходы требуют дополнительных эмпирических допущений, таких как близость процесса к равновесному, отсутствие взаимодействия между компонентами смеси и т.д. Такие предположения далеко не всегда правомерны при расчетах течений в криовакуумных устройствах.

**Цель работы.** Численное исследование течений с конденсацией однокомпонентного газа и бинарной смеси в присутствии неконденсируемого или трудноконденсируемого компонента внутри криовакуумного модуля и выявление основных закономерностей этих процессов.

Определение роли межмолекулярного взаимодействия в разреженном однокомпонентном газе и в смеси при  $Kn=0.1-1$ .

Разработка программ для ЭВМ, позволяющих решать многомерные стационарные и нестационарные задачи о конденсации однокомпонентного газа и бинарной смеси в криовакуумных устройствах.

**Научная новизна.** Впервые методом прямого численного решения кинетического уравнения Больцмана решены двумерная и трехмерная задачи об интенсивной конденсации газа в так называемом переходном режиме течения без дополнительных допущений, кроме общепринятых моделей потенциала межмолекулярного взаимодействия и взаимодействия газа с поверхностью.

Разработан алгоритм для моделирования многомерных течений с интенсивной конденсацией разреженной газовой смеси в криовакуумном устройстве на основе прямого численного решения кинетического уравнения Больцмана, позволяющий осуществить строгий учет межмолекулярного взаимодействия.

кулярного взаимодействия между компонентами в смеси.

Впервые решены многомерные стационарная и нестационарная задачи в общем виде для интенсивной конденсации смеси в присутствии неконденсируемого и трудноконденсируемого компонента. В отличие от существующих в данной области подходов, представленные результаты получены без дополнительных эмпирических допущений, таких как отсутствие взаимодействия между компонентами в смеси, близость процесса к равновесному и т.п.

**Практическая ценность.** Проведенное расчетное исследование выявило основные закономерности течений с конденсацией однокомпонентного газа и бинарной смеси в присутствии неконденсируемого или трудноконденсируемого компонента внутри криовакуумного устройства.

Определено влияние межмолекулярного взаимодействия в разреженном однокомпонентном газе и в смеси при  $Kp=0.1-1$ , оказывающее существенное влияние на эффективность работы насоса.

Разработана программа для ЭВМ моделирования многомерного течения с интенсивной конденсацией однокомпонентного газа на основе прямого численного решения кинетического уравнения Больцмана и программа для моделирования многомерных течений с интенсивной конденсацией разреженной газовой смеси в криовакуумном устройстве на основе прямого численного решения кинетического уравнения Больцмана, позволяющего осуществить строгий учет межмолекулярного взаимодействия между компонентами в смеси. Программы дают возможность проводить расчеты криовакуумных устройств и протекающих в них процессов в широком диапазоне параметров.

**Апробация работы.** Результаты работы изложены и обсуждены на 1-й Российской национальной конференции по теплообмену (Москва, 1994), на 2-ой научно-технической конференции с участием зарубежных специалистов "Вакуумная наука и техника" (Гургауф, 1995). Элементы работы докладывались на 10-й и 11-й всесоюзных конференциях по динамике разреженного газа (Москва, 1989 и Ленинград, 1991), на

международном коллоквиуме "Евромех-235" по кинетической теории и процессам переноса, на 18-й и 19-й международных конференциях по динамике разреженных газов (Ванкувер, и Оксфорд, 1994). Основное содержание диссертации отражено в 12 работах.

**Структура и объем работы.** Диссертация состоит из введения, 5 глав, заключения, библиографического списка из 105 наименований. Общий объем работы 148 страниц, включая 72 рисунка и 3 таблицы.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность, научная новизна и практическая значимость работы, сформулирована цель исследований.

**1-ая глава** содержит обзор работ, посвященных интенсивной конденсации однокомпонентного газа и газовой смеси. К моменту написания работы достаточно подробно исследована проблема конденсации однокомпонентного газа в одномерной постановке. Известны лишь две работы: Нанбу, Ветанейбла, Игарashi, Коленвалнера и Деттлефа (1988г.) и Инамуры (1988г.), в которых задача о конденсации разреженного газа в криовакуумных устройствах решается в двумерной постановке. Решений трехмерной задачи об интенсивной конденсации в литературе обнаружить не удалось.

Еще менее изучена, как экспериментально, так и теоретически, проблема конденсации газовой смеси в присутствии трудноконденсируемого или неконденсируемого газа. Существующие подходы требуют таких дополнительных допущений, как близость процесса к равновесному, малое изменение макропараметров, отсутствие взаимодействия между компонентами в смеси. Только в двух работах: Аоки, Соне, Дои (1992г.) и Понга, Могеса (1986г.), задача решается достаточно строго в одномерной постановке. В общем виде задача об интенсивной конденсации газовой смеси к моменту написания работы не решена.

**2-ая глава** посвящена описанию метода прямого численного ре-

шения кинетического уравнения Больцмана. Этот метод разработан ВИ РАН Черемисиным Ф.Г. и Аристовым В.В., и был выбран автором работы как наиболее строгий.

Кинетическое уравнение Больцмана для однокомпонентного газа имеет вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_x \frac{\partial f}{\partial x} + \xi_y \frac{\partial f}{\partial y} + \xi_z \frac{\partial f}{\partial z} = \mathcal{I} \quad (1)$$

где  $f$  - функция распределения молекул по скоростям,  $\xi_x, \xi_y, \xi_z$  - компоненты вектора скорости частицы,  $t$  - время,  $x, y, z$  - координаты в физическом пространстве,  $\mathcal{I}$  - интеграл столкновений.

$$\mathcal{I} = \iiint_{-\infty}^{+\infty} d\xi_x d\xi_y d\xi_z \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} d\epsilon \int (f' f' - f f) B(\theta, \varphi) d\theta,$$

где  $f_i = f(\vec{\xi}, t, x, y, z)$ ,  $f' = f(\vec{\xi}', t, x, y, z)$ ,  
 $f' = (\vec{\xi}', t, x, y, z)$ ,  $\vec{\xi}, \vec{\xi}'$  - скорости молекул до столкновения,  $\vec{\xi}, \vec{\xi}'$  - после (рассматриваются только парные взаимодействия),  $\epsilon, \theta$  - угловые параметры столкновения,  $\varphi = |\vec{\xi} - \vec{\xi}'|$ .

Прямое численное решение уравнения Больцмана предполагает введение фиксированной сетки в скоростном и физическом пространстве. Переход от непрерывно меняющихся величин к набору дискретных значений приводит к системе нелинейных интегро-дифференциальных уравнений. При этом структура правой части (1) остается неизменной, и каждое из полученных уравнений имеет свой пятимерный интеграл столкновений с фиксированным угловым значением  $\vec{\xi}^k$ . После вычисления  $\mathcal{I}^k$  для каждой точки  $\vec{\xi}^k$  нелинейная система из  $M$  интегро-дифференциальных уравнений сводится к линейной системе дифференциальных уравнений ( $M$  - число точек в пространстве скоростей). Далее частные производные заменяются их конечно-разностными приближениями. Вычисление пятимерного интеграла столкновений про-

изводится с помощью случайных квадратурных формул.

Такой подход используется в работе для решения задачи о конденсации однокомпонентного газа в криовакуумном устройстве. На основе метода прямого численного решения кинетического уравнения Больцмана в работе разработан алгоритм и программа его реализации на ЭВМ для исследования конденсации газовой смеси в присутствии неконденсируемого или трудноконденсируемого компонента. Особенностью решения задачи для смеси является то, что уравнение (1) распадается на систему двух кинетических уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f_a}{\partial t} + \xi_x \frac{\partial f_a}{\partial x} + \xi_y \frac{\partial f_a}{\partial y} + \xi_z \frac{\partial f_a}{\partial z} = J_{aa} + J_{ab} \\ \frac{\partial f_b}{\partial t} + \xi_x \frac{\partial f_b}{\partial x} + \xi_y \frac{\partial f_b}{\partial y} + \xi_z \frac{\partial f_b}{\partial z} = J_{ba} + J_{bb} \end{array} \right. \quad (2)$$

Индексы "a" и "b" относятся к разным составляющим двухкомпонентной смеси. В (2), кроме интегралов столкновения, описывающих взаимодействие однородных молекул ( $J_{aa}$ ,  $J_{bb}$ ), появляются дополнительные, перекрестные, интегралы ( $J_{ab}$ ,  $J_{ba}$ ), описывающие столкновения частиц разных компонентов в смеси.

В 3-ей главе дан обзор решений многомерных задач для конденсации однокомпонентного газа в криовакуумном устройстве, выполненных при участии автора и опубликованных в работах [2, 3, 4, 8, 9, 10, 11]. Здесь же приведены результаты решения тестовых задач [5], которые сравнивались с экспериментальными данными (отражение ударной волны от наклонной поверхности). Выявлено хорошее согласие, что подтверждает достаточную точность и надежность метода. Экспериментальных данных для течений газа с конденсацией в рассматриваемом диапазоне чисел Кн=0.1-1. в литературе обнаружить не удалось.

4-ая глава посвящена описанию различных постановок задач

для течения газовой смеси и выбору начальных и граничных условий для решения системы (2). Одна из расчетных схем для трехмерной задачи показана на рис.1. Газовая смесь азот-гелий через отверстие поступает в полость крионасоса. Достигнув панели, охлажденной до температуры  $T_s/T = 0.12$  ( $T$  - температура смеси на входе), азот кон-

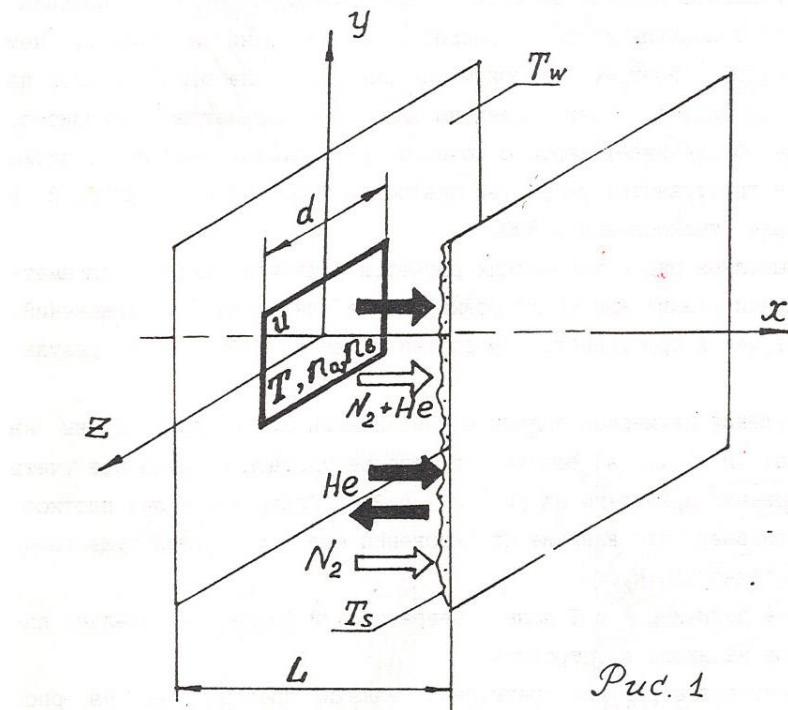


Рис. 1

денсируется полностью или частично, гелий отражается диффузно с температурой  $T_s$ . Рабочая камера может быть бесконечно большой, и газ свободно растекается в направлениях  $y$  и  $z$  (стационарная постановка), или ограниченной в этих направлениях холдными экранами с

температурой  $T_w/T = 0.3$  (нестационарная постановка). Отражение газа от поверхностей предполагается диффузным. Для обоих компонентов смеси на входе задается маковелловское распределение молекул по скоростям. Начальное давление в рабочей камере насоса пренебрежимо мало.

В главе 5 приведены результаты расчета для газовой смеси и их анализа (рис. 2-10).

Численное решение двумерного кинетического уравнения Больцмана требует меньших затрат компьютерного времени и памяти, чем трехмерного, поэтому алгоритм для смеси вначале отрабатывался на двумерной задаче. Были проведены расчеты с параметрами алгоритма, которые обеспечивают хорошую точность результата. Например, число точек в пространстве скоростей бралось  $\sim 5000$ , число разыгрываний в интеграле столкновений  $\sim 500$ .

Выполнен ряд методических расчетов и изучено влияние параметров задачи (таких как число разыгрываний в интеграле столкновений, число точек в пространстве скоростей и шаг по скорости) на результат.

Решения двумерной задачи о конденсации смеси представлены на рис. 2а) и 3а), а соответствующие результаты расчета без учета столкновений приведены на рис. 2б) и 3б). Сравнение полей плотности показывает, что влияние столкновений молекул в смеси существенно, особенно для  $N_2$ .

Все величины  $p$  и  $T$  даны в безразмерной форме относительно параметров на входе в устройство.

Результаты решения трехмерной задачи представлены на рис. 4-10. На рис. 4 показано поле плотности конденсируемого компонента (азота) в сечениях при  $z = 0.25l$  (рис. 4а) и при  $x = 3.5l$  (рис. 4б).

На рис. 5 - продольное и поперечное сечения поля плотности неконденсируемого компонента (гелия). На рис. 6 и 7 даны аналогичные сечения полей температуры азота и гелия, соответственно. Видно качественное отличие полей макропараметров для различных компонентов. Получено установленное течение газовой смеси.

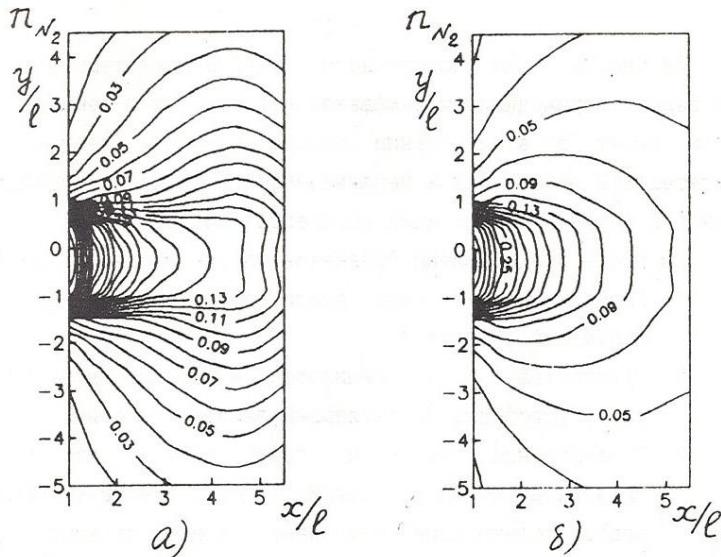


Рис. 2

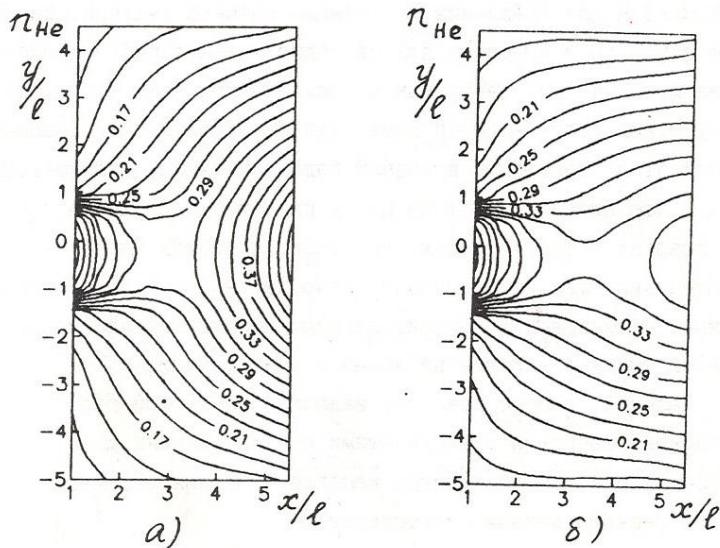


Рис. 3

Из рис.7б) для поперечного сечения поля температуры видно, что гелий, отраженный от межфазной поверхности с температурой  $T_s/T = 0.12$ , имеет в этом сечении температуру  $\sim 0.4$  (азот  $\sim 0.5$ ). Это свидетельствует о сильной неравновесности процесса, проиллюстрированной поверхностями функции распределения (рис.8а, б)).

На рис.9 представлено сравнение следующих результатов.

1. Расчет выполнен для смеси азот-гелий без дополнительных допущений (рис.9а)).
2. Предполагается, что взаимодействие между частицами отсутствует (свободно-молекулярный разлет) (рис.9б)).
3. Столкновения есть, но смесь состоит из механически идентичных молекул, имеющих массу и сечение столкновения азота, только один компонент конденсируемый, а другой нет (рис.9в)).

Видно, что рисунки 9б) и 9в) очень близки и качественно совпадают, но отличны от рис.9а). Это свидетельствует о сильном влиянии легкого быстрого компонента (гелия) в смеси. На рис.10 показаны плотности потока массы на криопанель для перечисленных случаев (+ -1, ● -2, ○ -3 и для сравнения Δ - данные расчета течения однокомпонентного газа). Потоки массы для свободно-молекулярного движения и течения механически идентичных молекул практически совпадают. Однако присутствие гелия в смеси дает следующий результат. Взаимодействие компонентов приводит в данной задаче к такому формированию струи пара, что плотность потока массы на криопанель возрастает вдвое. Это говорит о том, что даже при больших числах Кнудсена, когда режим течения газа традиционно относят к свободно-молекулярному, редкие столкновения с очень легкими и быстрыми частицами способны оказать сильное влияние на процесс криооткачки.

Далее в работе решалась задача, в которой расчетная область ограничена твердыми поверхностями в направлениях  $u$  и  $z$ . В этом случае происходит постоянное накопление гелия в камере, и стационарное решение задачи отсутствует.

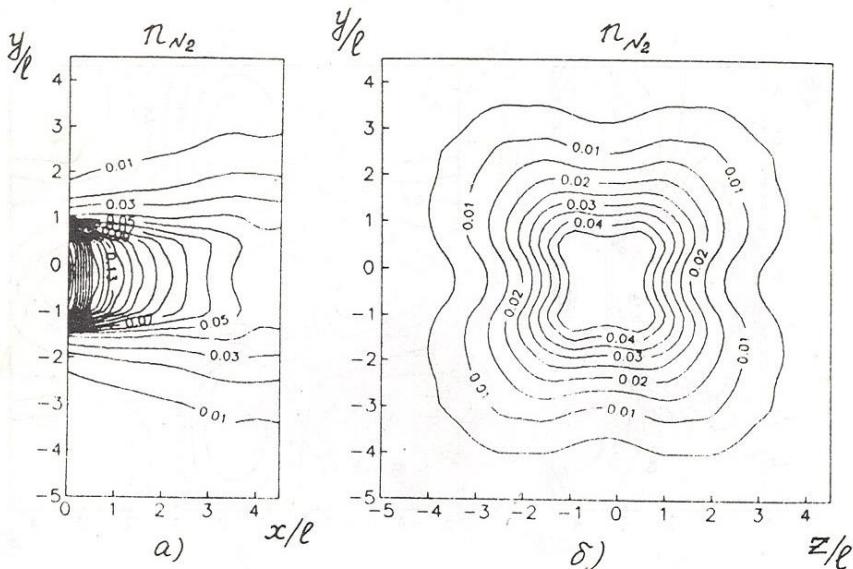


Рис. 4

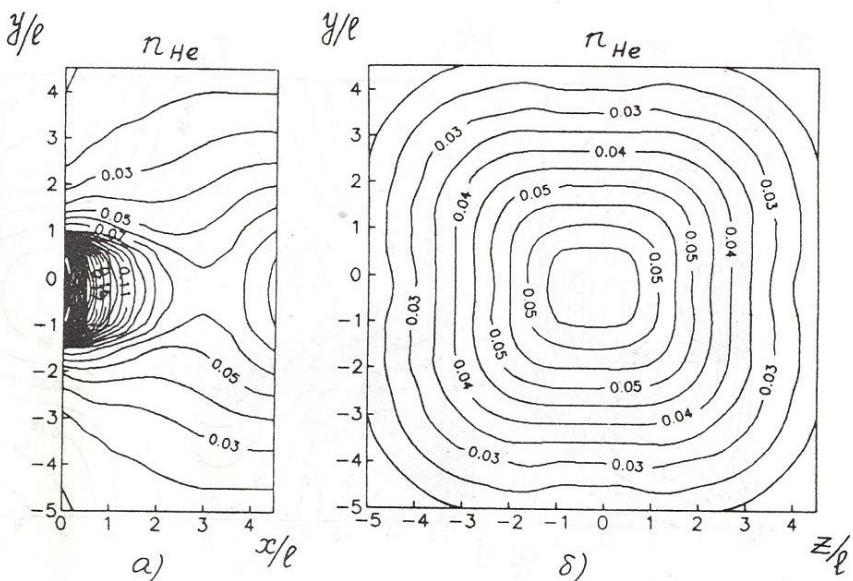


Рис. 5

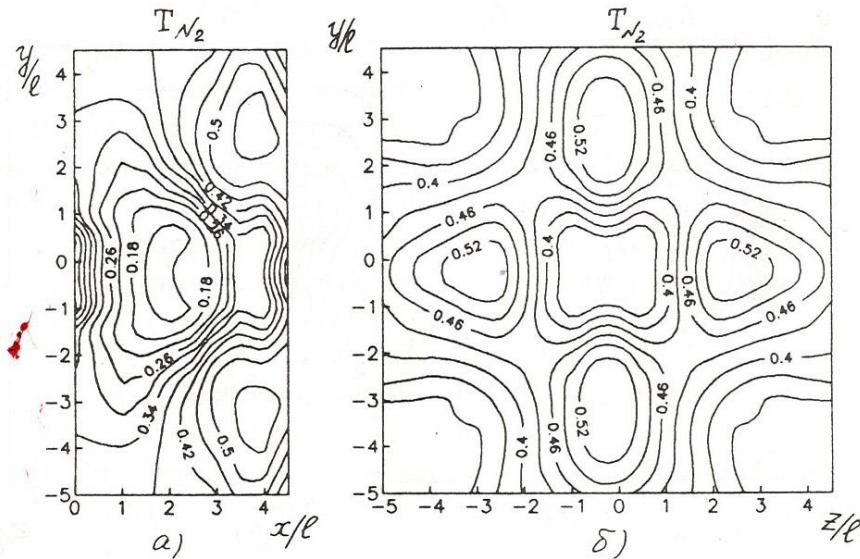


Рис. 6

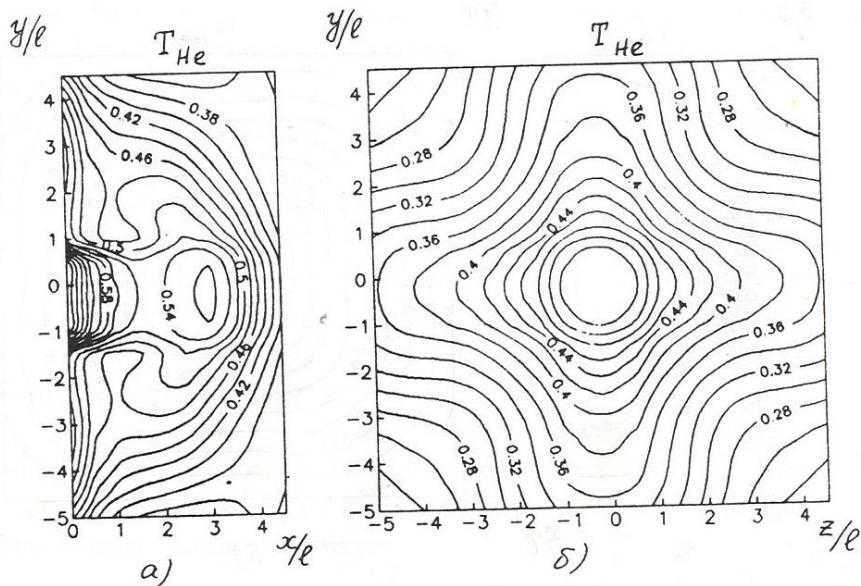


Рис. 7

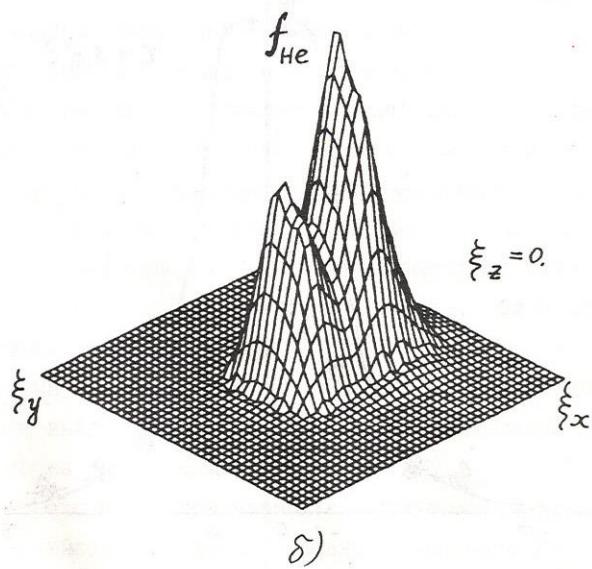
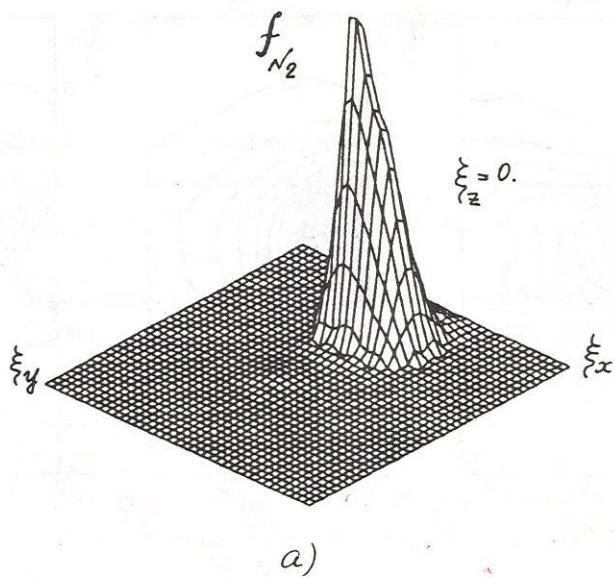


Fig. 8

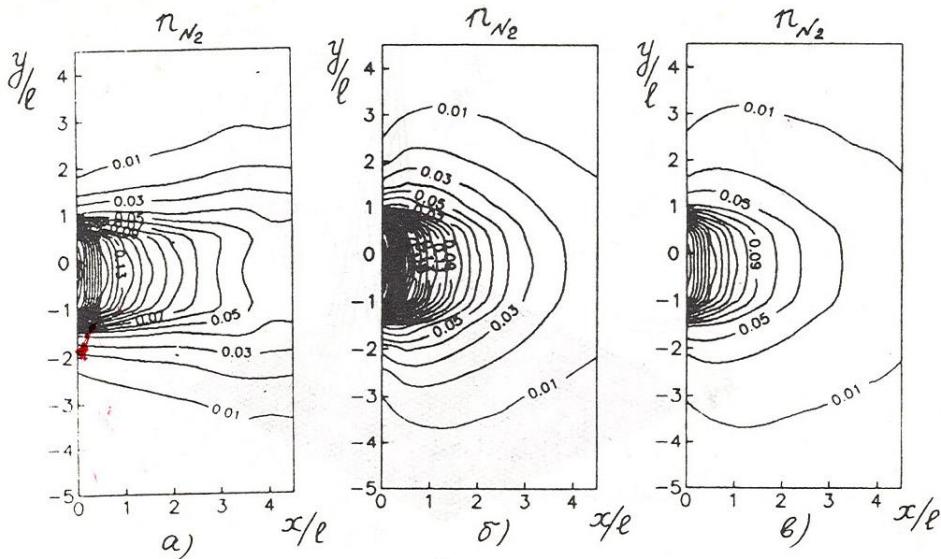


Рис. 9

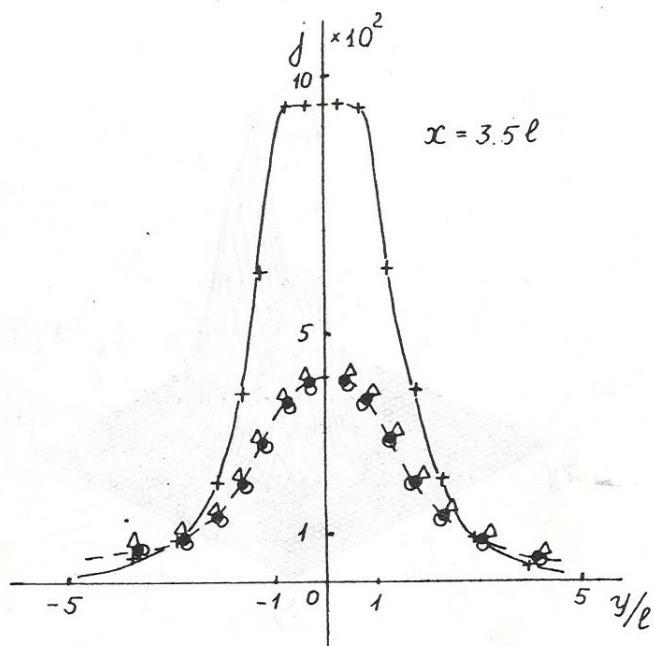


Рис. 10

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработан алгоритм моделирования многомерного течения с интенсивной конденсацией однокомпонентного газа на основе прямого численного решения кинетического уравнения Больцмана.

2. Впервые этим методом решены двумерная и трехмерная задачи об интенсивной конденсации пара в так называемом переходном режиме течения без дополнительных допущений, кроме общепринятых моделей потенциала межмолекулярного взаимодействия и взаимодействия газа с поверхностью.

3. Показано, что в существенно неравновесных условиях, возникающих при интенсивной конденсации и испарении, для сильно разреженного газа могут наблюдаться эффекты, характерные для газодинамического течения.

4. Разработан алгоритм для моделирования многомерных течений с интенсивной конденсацией разреженной газовой смеси в криовакуумном устройстве на основе прямого численного решения кинетического уравнения Больцмана, позволяющий осуществить строгий учет межмолекулярного взаимодействия между различными компонентами.

5. Впервые решены многомерные стационарная и нестационарная задачи в общем виде для интенсивной конденсации смеси в присутствии неконденсируемого и трудноконденсируемого компонента. В отличие от существующих в данной области подходов, представленные результаты получены без дополнительных эмпирических допущений, таких как отсутствие взаимодействия между компонентами, близость процесса к равновесному и т.п.

6. Изучаемый процесс является сильно неравновесным, о чем свидетельствуют найденные функции распределения молекул по скоростям для каждого из составляющих смеси.

7. При переходе от одномерной к многомерным задачам и рассмотрении взаимодействия молекул, сильно различающихся по массе (азот и гелий в данной работе), обнаруживается следующая особен-

ность конденсации смесей. При определенном отношении концентраций компонентов на входе в откачивающее устройство наличие гелия способствует такому формированию течения, что плотность потока массы азота на криопанель возрастает по сравнению с данными, полученными для механически идентичных ( $N_2$ ) молекул и для течения без столкновений. Таким образом, добавление в смесь некоторого количества легкого неконденсируемого компонента позволяет формировать струю заданной структуры, что имеет важное значение для создания слоев криосадка или напыления на поверхности ограниченных размеров в микрэлектронике.

8. Проведена серия расчетов, выявляющая области различного влияния компонентов смеси друг на друга. При этом обнаруживается, что взаимодействие составляющих смеси существенно.

9. Анализ полученных результатов позволяет утверждать, что несмотря на разреженность среды влияние столкновений молекул газа может быть значительным. В этой связи использование в анализе многомерных задач простых критериев не всегда правомерно, и должно дополняться более строгим молекулярно-кинетическим исследованием.

**Основной материал диссертации опубликован  
в следующих работах:**

1. А.П.Крюков, И.Н.Шишкова. Конденсация смесей при наличии трудноконденсируемого компонента//Труды 1-ой Российской национальной конф. по теплообмену. Испарение и конденсация.- Москва, 1994.-Т.5.-С.90-96.
2. В.В.Аристов, А.П.Крюков, Ф.Г.Черемисин, И.Н.Шишкова. Решение уравнения Больцмана для плоского струйного течения с конденсацией на криопанели//ЖВМ и МФ, 1991.- Т. 30.- N 7.- С.1093-1099.

3. В.В.Аристов, А.П.Крюков, Ф.Г.Черемисин, И.Н.Шишкова. Внутренние задачи для уравнения Больцмана с конденсацией на криопанели//18-ая Междунар. конф. по Динамике разреженных газов: Тез. докл. - Ванкувер, Канада, 1992.- PL2. (на англ. яз.)
4. В.В.Аристов, А.П.Крюков, Ф.Г.Черемисин, И.Н.Шишкова, А.В.Воронин. Изучение течений внутри некоторых моделей криовакуумных устройств на основе решения уравнения Больцмана //Междунар. коллоквиум "Евромех-235" по Кинетической теории процессов переноса с испарением и конденсацией: Тез.докл. - Минск, 1991. - С.21-23. (на англ. яз.)
5. В.В.Аристов, Ф.Г.Черемисин, И.Н.Шишкова. Решение уравнения Больцмана для изучения отражения ударной волны от клина//Динамика разреженных газов: Экспериментальная техника и физические системы, под ред. Б.Д.Шиагала и Д.Р.Вейвера.- Т.158. Прогресс Астронавтики и Аэронавтики.- Вашингтон, США, 1994.- С.448-461. (на англ. яз.)
6. И.Н.Шишкова, А.П.Крюков. Криовакуумирование в присутствии неконденсируемого газа//2-ая научно-техническая конф. с участ. зарубеж. специалистов "Вакуумная наука и техника": Тез. докл. - Гурзуф, Россия, 1995. - С.92.
7. А.П.Крюков, И.Н.Шишкова. Сильная конденсация в присутствии трудноконденсируемого газа//19-ая Международная конф. по Динамике разреженных газов: Тез. докл.- Оксфордский университет, Англия. 1994. (на англ. яз.)
8. А.П.Крюков, А.В.Млынский, А.В.Воронин, И.Н.Шишкова, Ф.Г.Черемисин. Проектирование криовакуумных систем на основе расчета течений разреженного газа/Труды 4-ой Междунар. конф. "Компьютерные методы и экспериментальные средства, компьютеры и эксперименты в механике". Капри, Италия. 1989. С.105-116. (на англ. яз.)
9. В.В.Аристов, А.П.Крюков, Ф.Г.Черемисин, И.Н.Шишкова. Расчет течения разреженного газа при конденсации на криопанели// 10-ая Всесоюз. конф. по Динамике разреженных газов: Тез. докл.- Москва, 1989.- С. 142.
10. В.В.Аристов, А.П.Крюков, Ф.Г.Черемисин, И.Н.Шишкова. Числен-

ное исследование течений в криовакуумном модуле на основе прямого численного решения кинетического уравнения Больцмана// 11-ая Всесоюз. конф. по Динамике разреженных газов: Тез. докл.- Ленинград, 1991.- С.19.

11. И.Н.Шишкова. Численное исследование процессов в криоконденсационном модуле//Материалы Международной школы-семинара "Кинетическая теория процессов переноса при испарении и конденсации".- Минск, 1991. - С.93.

12. В.В.Аристов, А.В.Воронин, Ф.Г.Черемисин, И.Н.Шишкова. Программный комплекс для решения кинетического уравнения Больцмана// Всесоюз. совещание "Компьютерные методы небесной механики": Тез. докл. - С.-Петербург, 1991.- С.17.

Подписано к печати  
Печ. л. 125

Л—  
Тираж 100

Заказ 839

Типография МЭИ, Красноказарменная, 13.