

МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРАВЛЕНИЯ ПОТОКОМ ЧАСТИЦ В НЕСТАЦИОНАРНОМ РЕЖИМЕ ТЕЧЕНИЯ ГАЗА В ЩЕЛЕВЫХ СИСТЕМАХ

Л.В. Плетнев

*ГУ ВПО «Белорусско-Российский университет»,
г. Могилев, Республика Беларусь;
pletnev@tut.by*

Представлена членом редколлегии профессором Н.Ц. Гапановой

Ключевые слова и фразы: вылет частиц; моделирование; нестационарный режим течения.

Аннотация: Получены временные плотности распределений частиц, вылетевших из систем щелевого типа в вакуум. Распределения получены для различных моделей взаимодействия частиц со стенками систем и интервалов вылета частиц с поверхности конденсированной фазы. Использовался метод прямого моделирования Монте-Карло.

Движение частиц в открытых системах представляет большой интерес как с теоретической, так и с практической точки зрения. Описание процесса переноса газа в таких системах возможно на макроскопическом и микроскопическом уровнях. Проблемы другого характера возникают при переносе частиц в свободномолекулярном режиме течения. При больших числах Кнудсена в потоке частиц возможны большие флуктуации плотности. Движение частиц в системе происходит практически без столкновений друг с другом. Определяющим фактором на движение частиц является взаимодействие частиц со стенками систем. С практической точки зрения такие системы могут быть идеальными объектами для изучения фундаментальных процессов взаимодействия газ – твердое тело.

Как было установлено в ряде работ, вылет частиц с поверхности конденсированной фазы и стенок систем можно считать происходящим по закону косинуса [1–4]. Во всех компьютерных экспериментах использовался этот закон для описания вылета частиц с поверхности конденсированной фазы и стенок систем. В каждом компьютерном эксперименте разыгрывалась эволюция 10 000 000 частиц, вылетающих с поверхности конденсированной фазы. Часть частиц вылетала из системы после нескольких столкновений со стенками системы, а другая часть возвращалась в конденсированную фазу. Вероятности вылетов частиц для нестационарных потоков совпадали с вероятностями вылетов для стационарных потоков [5, 6].

Сначала разыгрывалось положение частицы на поверхности конденсированной фазы. Затем разыгрывались компоненты скорости частицы, и определялась ее траектория движения в системе. Частица могла вылететь из системы без столкновения со стенками или попасть на стенку системы. После того как частица попала на стенку системы, разыгрывались новые компоненты скорости частицы, и определялась ее траектория движения в системе. Для всех компьютерных экспе-

риментов размеры наносистем были одинаковыми – ширина $L = 10^{-8}$ м и высота $H = 10^{-8}$ м. Температура системы $T = 300$ К. Частица считалась вылетевшей из системы, если ее положение совпадало с верхним краем системы.

В первой серии компьютерных экспериментов проведены расчеты для частиц, одновременно вылетающих с поверхности конденсированной фазы. Частицы, попадая на стенки системы, оставались на ней не на фиксированное среднее время адсорбции t_a , как в [6], а на время t , определяемое функцией распределения

$$F(t) = 1 - \exp(-t/t_a). \quad (1)$$

Очевидно, что время нахождения частицы на стенке системы могло быть больше и меньше среднего времени адсорбции частиц на стенках системы. Определяющим параметром для всех распределений является среднее время адсорбции частиц на стенках систем t_a . На рис. 1 представлены временные плотности распределений частиц $p_1(s)$ в зависимости от среднего времени адсорбции частиц на стенках систем. Параметр s в скобках означает, что распределения получены для всех возможных столкновений частиц со стенками систем.

Для средних времен адсорбции частиц t_a , равных 10^{-12} и 10^{-11} с, плотности распределений представляют распределения, состоящие из одного пика, в которых неразличим вклад от частиц, вылетевших из системы без столкновений, после одного, двух и большего количества столкновений со стенками. Для данных времен адсорбции время движения частиц в системах определяется не средним временем адсорбции t_a , а временем движения частиц между стенками системы. Для среднего времени адсорбции $t_a = 10^{-10}$ с можно отметить разложение одного пика на два. Первый пик обусловлен вылетом частиц из системы без столкновений со стенками системы, а второй пик – частицами, испытавшими несколько столкновений со стенками. С увеличением среднего времени адсорбции разделение на два пика становится более отчетливым.

Преимуществом компьютерного эксперимента является то, что с его помощью можно получить данные, которые очень сложно получить в реальном эксперименте, либо вообще невозможно получить. На рис. 2 представлены результаты

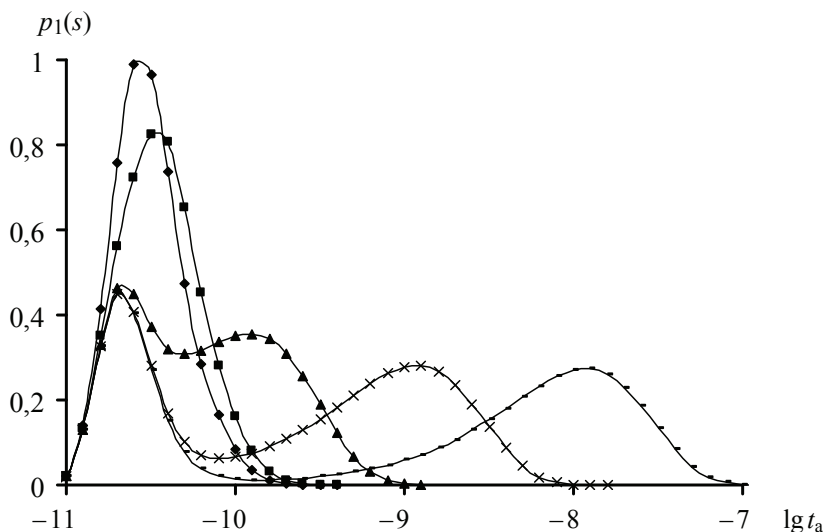


Рис. 1. Временные плотности распределений частиц $p_1(s)$ в зависимости от среднего времени адсорбции частиц на стенках систем t_a , с:

◆ – 10^{-12} , ■ – 10^{-11} , ▲ – 10^{-10} , × – 10^{-9} , – – 10^{-8}

расчетов временных плотностей распределений вылетевших частиц в зависимости от числа столкновений частиц со стенками системы. Проведение таких компьютерных экспериментов позволило понять распределение вылетевших частиц (см. рис. 1). Из сравнения рисунков видно, что первый пик обусловлен частицами, вылетевшими из системы без столкновений со стенками системы и некоторой частью частиц, испытавших одно столкновение, а второй – частицами, испытавшими одно столкновение, и, незначительно, частицами, испытавшими несколько столкновений со стенками. Для систем с другими высотами число частиц, вылетевших без столкновений и после нескольких столкновений, будет другим. Соответственно, и временные плотности распределений вылетов частиц из систем будут другими.

В общем случае, когда частицы не вылетают с поверхности конденсированной фазы одновременно, а в любой момент времени по закону (1) со средним временем, равным среднему времени адсорбции t_a , получены результаты расчетов в компьютерных экспериментах, представленные на рис. 3. Распределения представляют пики, которые с увеличением среднего времени адсорбции уменьшаются по высоте и, начиная со среднего времени адсорбции t_a , равному 10^{-10} с, практически не меняют форму, но положения максимумов коррелируют с величиной t_a . Полученные распределения имеют только один пик, положение которого для малых средних времен адсорбции значительно смещено вправо по сравнению со средним временем адсорбции, и определяются временем движения частиц в системе. Более детальные компьютерные эксперименты по определению временных распределений вылетающих частиц в зависимости от числа столкновений частиц со стенками систем показали, что максимумы распределений для всех средних времен адсорбции находятся близко друг к другу, и поэтому временные распределения для частиц, испытавших все возможные столкновения со стенками, имеют четкие одиночные пики.

Проведенные компьютерные эксперименты показали, что можно управлять потоками частиц из открытых систем. Меняя материал стенок и температуру сис-

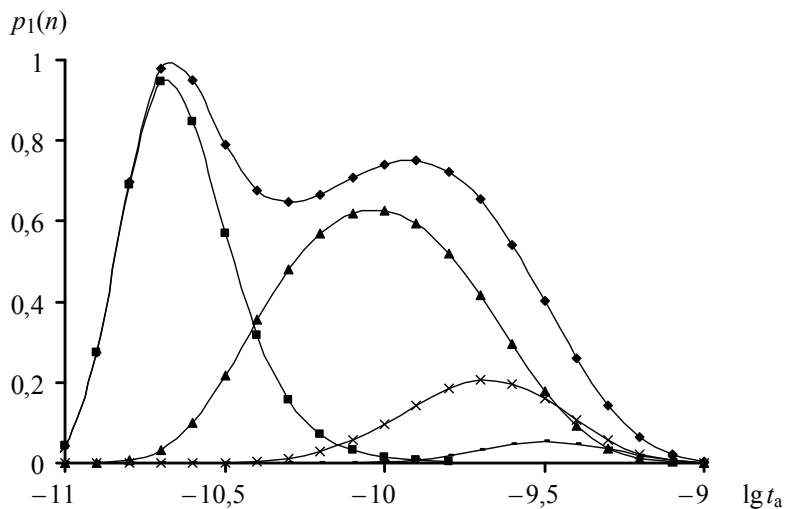


Рис. 2. Временные плотности распределений частиц $p_1(n)$ в зависимости от числа столкновений частиц со стенками систем n ($t_a = 10^{-12}$ с):

◆ – s ; ■ – 0 ; ▲ – 1 ; × – 2 ; □ – 3

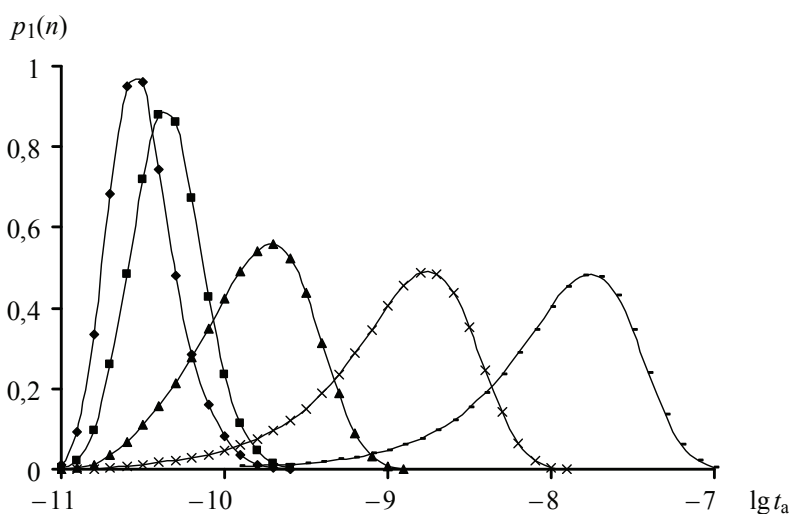


Рис. 3. Временные плотности распределений частиц $p_1(n)$ в зависимости от среднего времени адсорбции частиц на стенках системы и поверхности конденсированной фазы t_a , с:
 ◆ – 10^{-12} ; ■ – 10^{-11} ; ▲ – 10^{-10} ; × – 10^{-9} ; - - 10^{-8}

темы, можно уменьшать или увеличивать среднее время адсорбции частиц на стенках системы и поверхности конденсированной фазы. Меняя высоту стенок системы можно получать заданные потоки частиц.

Предполагая, что конденсированная фаза состоит из смеси двух летучих компонент, можно подобрать соответствующие геометрические размеры системы и физические условия (температуру системы и материал стенок), и получать потоки отдельно вылетающих частиц компонент смеси.

Список литературы

1. Берд, Г. Молекулярная газовая динамика / Г. Берд. – М. : Мир, 1981. – 319 с.
2. Pletnev, L.V. Monte Carlo Simulation of Evaporation Process into the Vacuum / L.V. Pletnev // Int. J. Monte Carlo Methods and Applications. – 2000. – V. 6, No. 3. – P. 191–203.
3. Pletnev, L.V. The Knudsen Layer by the Evaporation of the Monatomic Condensed Phase / L.V. Pletnev, N.I. Gamayunov, V.M. Zamyatin // Int. Conf. on Theoretical Physics, Paris, France, July 22–27 2002 / Book of Abs. – Paris, 2002. – P. 235.
4. Pletnev, L.V. Simulation of Evaporation of a Monatomic Condensed Phase into a Knudsen Layer by Monte Carlo and Molecular Dynamics Methods / L.V. Pletnev // Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics – 24, Bari, Italy, July 10–16 2004 / Book of Abs. – Bari, 2004. – P. 63.
5. Плетнев, Л.В. Компьютерное моделирование стационарного переноса частиц в цилиндрических наносистемах / Л.В. Плетнев // Тр. Ин-та систем. анализа Рос. акад. наук. – 2008. – Т. 33 : Динамика неоднородных систем. – С. 121–130.
6. Pletnev, L.V. Computer Modeling of Nonstationary Particles Transfer in Open Slotted Systems / L.V. Pletnev // Международная научная конференция «Моделирование нелинейных процессов и систем», Москва, 14–18 октября 2008 г. : сб. тез. / Ун-т СТАНКИН. – Москва, 2008. – С. 43.

Modeling of Control over Particles Flow in Non-Stationary Mode of Gas Flow in Slit Systems

L.V. Pletnev

*Belarus-Russian University, Mogilev, Belarus;
pletnev@tut.by*

Key words and phrases: particles escaping; modeling; non-stationary flow mode.

Abstract: The timing of frequency distributions of particles emitted from the slit-type systems into vacuum is obtained. The distributions are produced for different models of particle interactions with the walls of systems and the timing of departure of particles from the surface of the condensed phase. The Monte Carlo method of direct simulation has been used.

Modellierung der Steuerung vom Teilchenstrom im unstationären Regime des Gasfließens in den Schlitzsystemen

Zusammenfassung: Es sind die Zeitdichten der Verteilung der Teilchen, die aus den Systemen des Schlitztypus ins Vakuum ausgeflogen sind, erhalten. Die Verteilungen sind für verschiedene Modelle des Zusammenwirkens der Teilchen mit den Systemenwänden und für die Intervalle des Teilchenausfluges von der Oberfläche der kondensierten Phase erhalten. Es wurde die Methode der direkten Modellierung von Monte-Karlo benutzt.

Modélage de la commande du flux des particules dans le régime non stationnaire de l'écoulement du gaz dans les systèmes à fente

Résumé: Sont obtenues les densités temporaires de la répartition des particules qui s'envolent dans le vide à partir des systèmes à fente. Les répartitions sont obtenues pour de différents modèles de l'interaction des particules avec les parrois des systèmes et des intervalles de la sortie des particules à partir de la surface de la phase condensée. A été utilisée la méthode du modélage direct de Monte Carlo.

Автор: *Плетнев Леонид Владимирович* – кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой «Высшая математика», Белорусско-Российский университет, г. Могилев, Республика Беларусь.

Рецензент: *Коптев Андрей Алексеевич* – кандидат технических наук, профессор кафедры «Техника и технологии производства нанопродуктов», ГОУ ВПО «ТГТУ».