

На правах рукописи

Шевырин Александр Анатольевич

СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ
РАЗРЕЖЕННОГО ГАЗА ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С
ОПТИЧЕСКОЙ РЕШЕТКОЙ

01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Новосибирск 2010

Работа выполнена в Институте теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения РАН.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор
Иванов Михаил Самуилович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук
Новопашин Сергей Андреевич
кандидат физико-математических наук
Рогазинский Сергей Валентинович

Ведущая организация: Научно исследовательский институт
механики МГУ им. М.В. Ломоносова

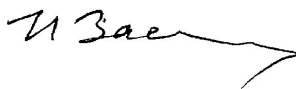
Защита состоится «21» мая 2010 г. в 11 часов на заседании диссертационного совета Д003.035.02 в Институте теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения РАН по адресу:
г. Новосибирск, ул. Институтская, 4/1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИТПМ СО РАН.

Ваш отзыв на автореферат в двух экземплярах, заверенный печатью, просим высылать по адресу:
630090, г. Новосибирск, ул. Институтская, 4/1, ИТПМ СО РАН,
ученому секретарю диссертационного совета Д003.035.02.

Автореферат разослан « 15 » апреля 2010 г.

Ученый секретарь
диссертационного
совета, д.т.н.



Засыпкин И.М.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Оптический захват газа, возникающий при взаимодействии оптической решетки с поляризуемыми молекулами (или атомами), открывает новые возможности для диагностики и управления газовыми потоками. Оптическая решетка создается в области пересечения двух лучей лазера за счет их интерференции.

Первоначальный интерес к оптическому захвату был связан с использованием рассеяния молекул на стоячей оптической решетке с энергией взаимодействия, соответствующей температуре порядка 10 К, для манипуляции молекулярным пучком. Влияние межмолекулярных столкновений при таком процессе мало, и рассеяние молекулярного пучка на оптической решетке хорошо описывается в свободномолекулярном приближении.

Последовавшее широкое распространение мощных источников лазерного излучения, которые обеспечивают взаимодействие оптической решетки и поляризуемых атомов или молекул газа с энергией, соответствующей температуре порядка 100 К, существенно расширило круг возможных приложений. Эффект оптического захвата газа с использованием лазерного излучения высокой интенсивности позволяет проводить локальный нагрев и ускорение газа, индуцировать течение в трубках малого размера, осуществлять измерения, слабо возмущающие поток газа, а также может применяться для создания высокоскоростных пучков нейтральных молекул, охлаждения вещества и других приложений. Однако процесс оптического захвата газа при значительном уровне межмолекулярных столкновений исследован недостаточно. Поэтому для понимания различных режимов процесса оптического захвата газа требуется исследование течения газа при взаимодействии с оптической решеткой с учетом межмолекулярных столкновений.

Действие лазерного излучения при оптическом захвате газа зависит от величины коэффициента поляризуемости молекулы. Возникающая из-за этого селективность действия лазерного излучения позволяет проводить разделение компонентов газовой смеси. Однако оптический захват смеси газов сопровождается выделением тепловой энергии и появлением пондеромоторной силы, действующей на газ. Поэтому возникает изменение давления и температуры газа, которое сопровождается явлениями баро- и термодиффузии. Вклад этих эф-

фффектов в разделение газовой смеси по сравнению с селективным действием оптической решетки может быть значительным. Проведение оценки вклада селективности лазерного излучения, бародиффузии и термодиффузии, возникающих при оптическом захвате газовой смеси, уточнит их роль в разделении и позволит прояснить механизм такого разделения.

Действие оптической решетки на газ приводит к сильному отклонению функции распределения молекул по скоростям от равновесной максвелловской функции распределения. Поэтому рассмотрение процесса оптического захвата газа с учетом межмолекулярных столкновений требует применения кинетического подхода. В настоящее время наиболее мощным численным методом исследования течений разреженного газа является метод прямого статистического моделирования (ПСМ) Монте-Карло, который может рассматриваться как стохастический метод численного решения уравнения Больцмана. Для исследования процесса оптического захвата газа необходимо моделирование нестационарного течения. Метод ПСМ для нестационарных течений газа обладает достаточно высокой вычислительной трудоемкостью, что требует использования наиболее эффективных численных схем и алгоритмов метода ПСМ, а также исследования и применения новых способов оценки точности результатов моделирования.

Одним из новых способов оценки точности численных результатов метода ПСМ для течений разреженного газа может стать подсчет числа повторных столкновений моделирующих молекул. Для моделирования течений разреженного газа методом ПСМ используется конечное число моделирующих молекул. Поэтому вероятность повторного столкновения двух столкнувшихся молекул может быть значительной, при этом скорости молекул нельзя считать статистически независимыми. Наличие статистических корреляций между сталкивающимися молекулами при моделировании методом ПСМ связано с нарушением гипотезы о молекулярном хаосе, которая используется при выводе уравнения Больцмана. Большое число повторных столкновений может указывать на необходимость увеличения числа моделирующих молекул. Исследование связи числа повторных столкновений и сходимости результатов моделирования позволяет создать новый индикатор точности метода ПСМ.

Моделирование течений разреженного газа в околоконтинуальном режиме, когда влияние межмолекулярных столкновений очень велико, традиционно представляет трудности для метода ПСМ. Одной из перспективных схем метода ПСМ является схема Монте-Карло с временной релаксацией. Схема имеет ряд особенностей, которые могут повысить эффективность метода для течений с большим числом столкновений. Поэтому анализ схемы Монте-Карло с временной релаксацией представляется актуальным вопросом для применения метода ПСМ в численных исследованиях течений разреженного газа.

Цель работы. Анализ особенностей оптического захвата газа с учетом межмолекулярных столкновений и механизма разделения смеси газов.

На защиту выносятся следующие положения, составляющие научную новизну работы:

1. Исследование индикаторов точности численных результатов метода ПСМ, основанных на оценке доли повторных столкновений и числа моделирующих молекул в области с линейными размерами, равными локальному значению средней длины свободного пробега.

2. Модификация схемы Монте-Карло с временной релаксацией метода ПСМ и результаты исследования замены реализации столкновений перераспределением скорости молекул согласно равновесной функции распределения.

3. Результаты исследования влияния межмолекулярных столкновений и интенсивности лазерного излучения на процесс оптического захвата газа.

4. Результаты численного исследования развития оптического захвата при различном уровне межмолекулярных столкновений; влияние столкновительного обмена между группами захваченных и незахваченных молекул на особенности процесса оптического захвата.

5. Результаты исследования разделения смеси газов под действием оптической решетки; оценка вклада баро- и термодиффузии в разделение.

6. Результаты для течения смеси газов под действием импульсной оптической решетки внутри трубки с закрытыми торцами.

Достоверность результатов диссертационной работы обеспечивается методическими исследованиями, сравнением с точными реше-

ниями, согласованием результатов с экспериментальными данными, а также оценками, полученными с использованием других методов.

Практическая ценность. Представленные результаты способствуют значительному углублению понимания особенностей течения разреженного газа при оптическом захвате. Результаты исследований имеют большое значение для широкого круга приложений, в которых может применяться эффект оптического захвата газа: в аэрокосмической технике, для разделения смесей газов и изотопов, при создании микроэлектромеханических систем (МЭМС) и в методах аэрофизических измерений.

Апробация работы. Результаты работы докладывались и обсуждались на семинарах ИТПМ СО РАН, семинаре ИТ СО РАН, семинарах Университета г. Катания (Италия), а также следующих научных конференциях: международных научных студенческих конференциях (Новосибирск, 2002, 2003, 2006); Международной конференции по методам аэрофизических исследований (ICMAR, Новосибирск, 2008); 41-й конференции по термофизике Американского института авиации и астронавтики (Сан-Антонио, США, 2009); 24-м, 25-м и 26-м международных симпозиумах по динамике разреженного газа (Бари, Италия, 2004, Санкт-Петербург, Россия, 2006, Киото, Япония, 2008).

Публикации. Основные результаты опубликованы в 15 работах, список которых приведен в конце автореферата.

Личный вклад автора. При выполнении работ по теме диссертации диссертант принимал активное участие в постановке задач, обсуждении результатов, подготовке печатных работ и докладов на конференциях. Основные результаты диссертации получены автором, им произведены расчеты для всех рассмотренных в работе задач. Результаты совместных работ представлены в диссертации с согласия соавторов.

Структура и объем диссертации. Работа состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы из 76 наименований. Объем диссертации 122 страницы, включая 46 рисунков.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Введение. Обоснована актуальность рассматриваемых в диссертации вопросов, сформулированы цель и задачи диссертационной работы, перечислены представленные в диссертации новые результаты, их практическая ценность и положения, выносимые на защиту, описана структура диссертации.

Глава 1 носит методический характер. В ней проводится сравнение различных алгоритмов и численных схем метода ПСМ и рассматриваются вопросы, касающиеся применения этого метода для численного исследования течений разреженного газа при взаимодействии с оптической решеткой.

В первой части главы приводятся основные положения, связанные с применением метода ПСМ для исследования течений разреженного газа, дано подробное описание классической схемы Г. Бёрда и схемы мажорантной частоты.

В конце первой части главы представлены исследования, связанные с использованием гипотезы о молекулярном хаосе, применяемой при выводе уравнения Больцмана, для оценки точности численных результатов метода ПСМ для течений разреженного газа, взаимодействующего с оптической решеткой. Для проверки выполнения условия о молекулярном хаосе используется число повторных столкновений. Влияние повторных столкновений на отклонение численного решения исследовано на примере классических задач: теплопередача между пластинами, плоское течение Куэтта и задача о структуре плоской ударной волны. Проведенные расчеты показывают, что число повторных столкновений может быть использовано в качестве индикатора отклонения численных результатов от решения уравнения Больцмана. Использование числа моделирующих молекул в области течения, имеющей размеры порядка средней длины свободного пробега (лямбда-ячейка), позволяет определить число моделирующих молекул, необходимое для низкого уровня повторных столкновений и, следовательно, высокой точности результатов ПСМ.

Во второй части главы рассматривается применение метода ПСМ для решения задач о течении разреженного газа без объемной силы (течение Куэтта) и с объемной силой (плоское течение Пуазейля). Для течения Куэтта представлено сравнение результатов расчетов схемой мажорантной частоты и прецизионных данных, имеющихся для схе-

мы Г. Бёрда. Показано хорошее совпадение проведенных расчетов и эталонного решения. Результаты ПСМ для плоского течения Пуазейля сравниваются с решением уравнений Навье – Стокса. Исследование этой задачи на уровне функции распределения позволило детально изучить особенности течения, не описываемые в рамках приближения уравнений Навье – Стокса: минимум температуры в центре между пластинами и течение внутри слоя Кнудсена около поверхности пластин.

Третья часть главы посвящена исследованию схемы Монте-Карло с временной релаксацией метода ПСМ (Time Relaxed Monte-Carlo method, TRMC, L. Pareschi, G. Russo, 2001). Преимущество схемы TRMC по сравнению с классическими схемами ПСМ состоит в возможности выделения группы молекул, распределение которых близко к равновесной функции распределения. Замена процедуры столкновений между молекулами на перераспределение скорости этих молекул согласно равновесной максвелловской функции распределения может существенно повысить эффективность метода ПСМ.

Проведенный в работе анализ схемы TRMC с использованием представления последовательностей столкновений между моделирующими молекулами в виде графов позволил провести модификацию этой схемы, позволяющую применять схему TRMC при большей величине шага по времени. Применимость схемы TRMC установлена на примере пространственно-однородных и неоднородных течений разреженного газа. Представлены исследования критериев для замены реализации столкновений на перераспределение согласно максвелловской функции распределения. Исследования схемы TRMC показывают, что для рассмотренного в работе тестового случая разработанная методика позволяет значительно сократить число реализуемых столкновений (примерно на 20%) без существенного изменения точности моделирования: вносимая ошибка в функцию распределения и значение ее моментов составляет величину порядка 1%. Было также показано, что вычислительная эффективность схемы TRMC может быть выше, чем эффективность классических схем метода ПСМ при моделировании течений газа в околосконтинуальном режиме (очень малые значения числа Кнудсена), а для течений в переходном режиме выигрыш в эффективности становится небольшим. Для эффективного

моделирования методом ПСМ течений газа в переходном режиме достаточно использовать схему мажорантной частоты.

Глава 2 посвящена исследованию влияния межмолекулярных столкновений на процесс оптического захвата газа.

В первой части главы рассматривается движение поляризуемой молекулы или атома в поле оптической решетки, движущейся с постоянной скоростью V_f . Приведена фазовая диаграмма движения частицы в потенциале поля под действием градиентной дипольной силы, и дано определение характерной скорости захвата молекулы V_{tr} . Величина скорости захвата зависит от интенсивности лазерного излучения: $V_{tr} = \sqrt{4\alpha I / (m\epsilon_0 c)}$, здесь ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума, c — скорость света, I — интенсивность лазера, m — масса молекулы газа, α — коэффициент поляризуемости молекулы, величина которого предполагается константой. Если скорость молекулы вдоль оптической решетки отличается от скорости решетки менее чем на величину скорости захвата, то молекула захватывается полем и движется вместе с решеткой. Если разница скорости молекулы и скорости решетки превышает скорость захвата, то молекула полем не захватывается.

Во второй части главы определяются безразмерные параметры течения разреженного газа при оптическом захвате. С этой целью рассматривается течение газа в присутствии одномерной интерференционной решетки (интенсивность которой зависит только от одной пространственной координаты, а поперечной градиентной силой можно пренебречь). Для определения параметров течения уравнение Больцмана преобразовано к безразмерным переменным (x', v', t') :

$$\frac{\pi}{2} \left(\frac{V_{tr}}{v_T} \right) \frac{\partial f'}{\partial t'} + v'_x \frac{\partial f'}{\partial x'} + \frac{\pi}{2} \left(\frac{V_{tr}}{v_T} \right)^2 \sin \left[2\pi \left(x' - \frac{2V_f}{V_{tr}} t' \right) \right] \frac{\partial f'}{\partial v'_x} = \frac{1}{\text{Kn}} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)'_{\text{coll}}, \quad (1)$$

где $x = \lambda x'$, $\mathbf{v} = v_T \mathbf{v}'$, $t = t'/\nu$, λ — длина свободного пробега, $\nu = v_T / \lambda$ — частота столкновений, $v_T = \sqrt{2k_B T / m}$ — характерная скорость теплового движения молекул, k_B — константа Больцмана. Анализ безразмерной формы уравнения Больцмана (1) показывает, что процесс оптического захвата определяется тремя безразмерными параметрами. 1) Число Кнудсена, рассчитанное по периоду решетки λ_l : $\text{Kn} = \lambda / \lambda_l$ — определяет влияние межмолекулярных столкновений.

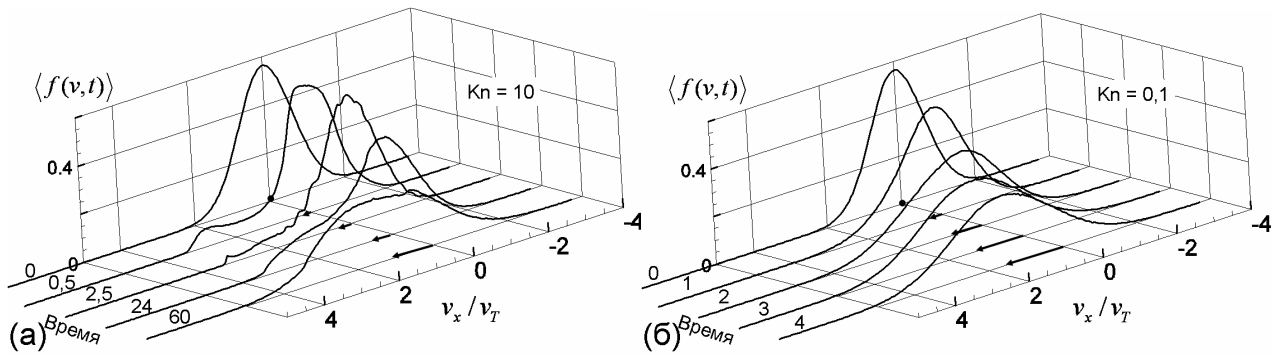


Рис. 1. Эволюция функции распределения при оптическом захвате для $V_{tr}/v_T = 1,4$ и $V_f/v_T = 2,0$.

Единица времени — период малых колебаний в поле оптической решетки.
Стрелки — среднее значение скорости газа.

- 2) Параметр V_{tr}/v_T — задает ширину диапазон скоростей захваченных молекул по отношению к характерной скорости теплового движения.
- 3) Параметр V_f/v_T — определяет отношение фазовой скорости оптической решетки к тепловой скорости движения молекул.

В третьей части проводится многопараметрическое исследование процесса оптического захвата. На рис. 1 показаны примеры изменения функции распределения при оптическом захвате для значений числа Кнудсена 10 и 0,1. Картина формирования плато на профиле функции распределения в моменты времени 0,5 и 2,5 для $Kn = 10$ согласуется с экспериментальными наблюдениями оптического захвата при малом числе межмолекулярных столкновений (Fulton, Bishop et al, 2006). Влияние столкновений проявляется при больших временах (24 и 60 на рис. 1,а) и приводит к ускорению и нагреву газа. Сильное влияние межмолекулярных столкновений в случае $Kn = 0,1$ приводит к более быстрому развитию оптического захвата газа, чем для случая $Kn = 10$, что выражается в более интенсивном ускорении и нагреве газа. Как видно из рис. 1,б, изменение профиля функции распределения происходит без формирования плато в области захвата пространства скорости молекул.

Полученные численные данные о скорости развития оптического захвата объясняются наличием двух процессов, приводящих к изменению импульса и тепловой энергии газа. *Первый процесс* определяется воздействием оптической решетки на молекулы газа, за счет чего происходит «накачка» энергии в движение молекул вдоль решетки (направлению оси x). При этом изменение импульса и энергии газа происходит в основном за счет молекул, которые находятся в области

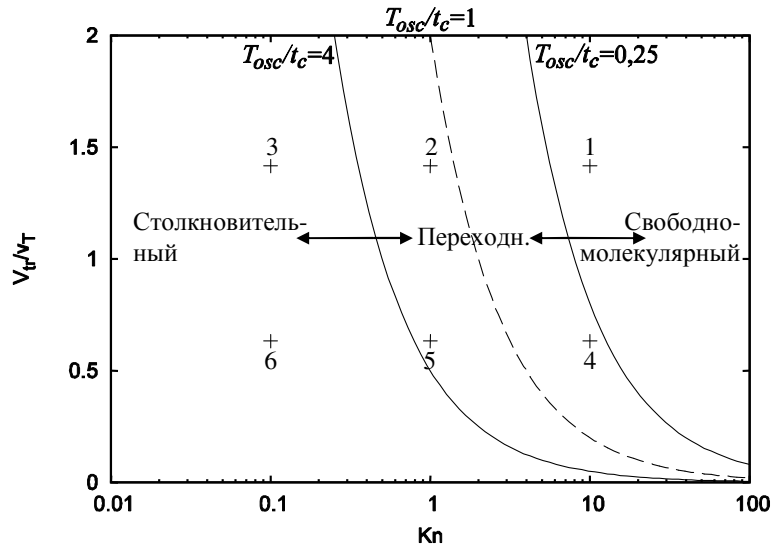


Рис. 2. Схема области параметров для различных режимов оптического захвата. Режим определяется значением параметра T_{osc}/t_c .

Сплошные линии — условные границы режимов оптического захвата, пунктирная линия — $T_{osc}/t_c = 1$. Точки — параметры расчетов, проведенных методом ПСМ. Результатам на рис. 1,а соответствует расчет 1; рис. 1,б — расчет 3.

захвата пространства скоростей (на рис. 1,а область захвата при v_x/v_T от 0,58 до 3,43). Характерное время составляет величину порядка периода малых колебаний молекул в потенциале $T_{osc} = 2\lambda_l/V_{tr}$, а масштаб длины — периода оптической решетки λ_l . Второй процесс определяется обменом за счет столкновений между группой захваченных молекул, взаимодействующих с полем достаточно сильно, и группой незахваченных молекул, которые взаимодействуют с полем относительно слабо. Масштабы этого процесса столкновительные: среднее время между столкновениями t_c и длина свободного пробега λ .

Обычно режим течения разреженного газа может быть определен по значению числа Кнудсена: большое значение Kn указывает на то, что режим является свободномолекулярным, а малое значение Kn — континуальным. При промежуточных величинах числа Кнудсена реализуется переходный режим.

Проведенный анализ показал, что влияние межмолекулярных столкновений на режим оптического захвата газа определяется отношением периода малых колебаний в поле оптической решетки к среднему времени между столкновениями, которое выражается через число Кнудсена и параметр V_{tr}/v_T в виде $T_{osc}/t_c = 2/[\text{Kn} \cdot (V_{tr}/v_T)]$. На рис. 2 представлена схема режимов оптического захвата при различных параметрах Kn и V_{tr}/v_T . На схеме символами обозначены прове-

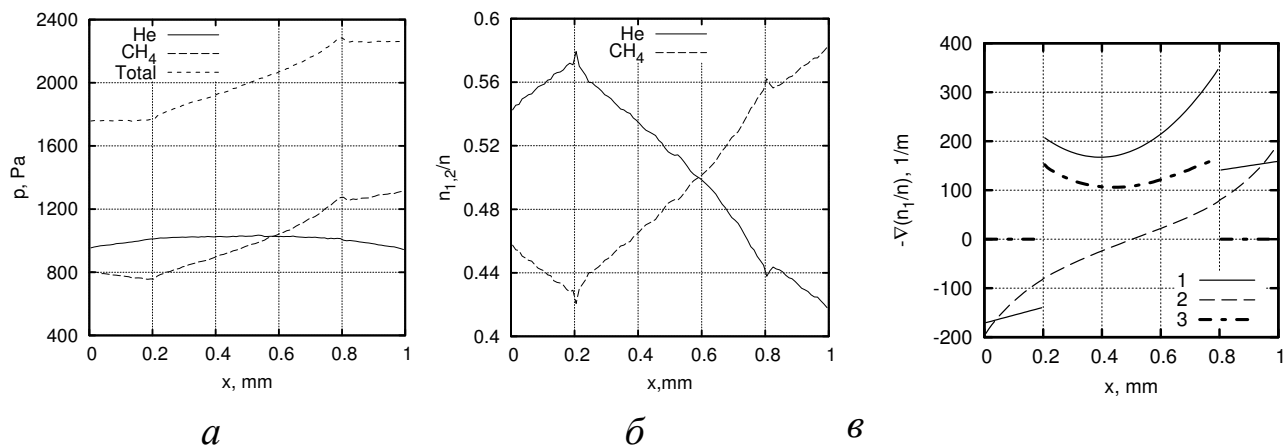


Рис. 1. Разделение 1:1 смеси гелия и метана между пластинами с температурой 300 К, расположенными на расстоянии 1 мм, под действием оптической решетки.

a – парциальное давление компонентов и полное давление смеси, *б* – молярная доля компонентов, *в* – вклад в разделение (линия 1) термодиффузии (линия 2) и бародиффузии (линия 3).

денные численные расчеты. Как можно видеть из схемы, число Кнудсена может использоваться для определения режима только при достаточно большой величине параметра V_{tr}/v_T . Например, при достаточно малой интенсивности лазерного излучения, когда размер области захвата V_{tr} в два и более раз меньше скорости теплового движения молекул v_T , столкновительный режим может реализовываться даже при значениях $Kn > 1$.

Таким образом, в главе 2 получены параметры течения газа в присутствии оптической решетки, которые определяют режим оптического захвата газа. Численные исследования, проведенные на уровне функции распределения при различной интенсивности лазерного излучения и числе межмолекулярных столкновений, позволили выявить особенности механизма процесса оптического захвата, объясняемые наличием двух масштабов. Эти особенности объясняются обменом между группами захваченных и незахваченных молекул за счет столкновений.

В главе 3 исследуется разделение смеси газов под действием эффекта оптического захвата. Исследование проводилось с использованием аналитической оценки для пондеромоторной градиентной силы, действующей на газ со стороны оптической решетки, а также численного моделирования разделения с применением метода ПСМ. Проведена оценка вклада селективности объемной силы, бародиффузии и

термодиффузии в получаемое при оптическом захвате разделение. Представлены оценки частоты повторения лазерных импульсов, необходимых для разделения смеси газов с использованием импульсных источников лазерного излучения.

Определение вклада различных эффектов (селективного действия решетки, баро- и термодиффузии) в разделение проводится на основе выражения для локального диффузионного баланса двух компонентов смеси газов, масса молекул которых m_1 и m_2 . Выражение диффузионного баланса в рассмотренном одномерном случае определяет изменение молярной доли первого компонента смеси и имеет вид

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{n_1}{n} \right) = \frac{\rho_1 \rho_2}{p \rho} \left(\frac{F_{1x}}{\rho_1} - \frac{F_{2x}}{\rho_2} \right) - k_T \frac{d(\ln T)}{dx} - \frac{n_1 n_2 (m_2 - m_1)}{n \rho} \frac{d(\ln p)}{dx}. \quad (2)$$

Здесь $n_{1,2}$ — числовая плотность компонентов смеси, $n = n_1 + n_2$, k_T — термодиффузионное отношение, связанное с коэффициентом термодиффузии α_T : $n_1 n_2 \alpha_T = n^2 k_T$. Диффузионный поток компонентов смеси, возникающий за счет изменения молярной доли n_1/n , уравнивается селективным действием оптической решетки, которое пропорционально разнице объемных сил $(F_{1x}/\rho_1 - F_{2x}/\rho_2)$, а также термодиффузией и бародиффузией, возникающими из-за изменения температуры газа T и давления p соответственно. Для определения вклада различных эффектов в разделение $\nabla(n_1/n)$ использована оценка соответствующих членов в выражении (2): бо́льшая величина указывает на бо́льший вклад эффекта.

В первой части главы исследуется вклад баро- и термодиффузии в разделение компонентов газовой смеси, возникающее при оптическом захвате. С этой целью с помощью метода ПСМ рассматривается установившееся состояние смеси метана и гелия между двумя неподвижными непроницаемыми пластинами под действием оптической решетки, занимающей 80% пространства между пластинами. Определено, что объемная сила, действующая на газ в области решетки, приводит к достаточно большому изменению давления газа между пластинами (приблизительно на 20%, см. график давления на рис. 3,а), а температура смеси в центре области возрастает из-за нагрева. Распределение молярной доли гелия и метана между пластинами, показанное на графике рис. 3,б, позволяет судить о величине получаемого

разделения смеси: изменение концентрации компонентов достигает величины приблизительно 5%.

На рис. 3,в представлена оценка вклада термо- и бародиффузии в разделение. Для определения величины разделения выбрано значение градиента молярной доли гелия $\nabla(n_1/n)$. График

показывает, что вклад термодиффузии в разделение в центре области имеет малую величину и становится значительным только в периферийных областях оптической решетки, где температура претерпевает существенное изменение. Сопоставление кривых 1 и 3 на рис. 3,в позволяет заключить, что в центре области, где влияние термодиффузии мало, бародиффузия дает более половины величины получаемого разделения. Это указывает на то, что вклад бародиффузии в разделение в рассматриваемой области превышает по величине вклад

селективности объемной силы:

$$|\nabla \ln p (m_2 - m_1) n_1 n_2 / (n \rho)| > |(F_{1x} \rho_2 - F_{2x} \rho_1) / (p \rho)|.$$

Для сравнения вклада селективности объемной силы и бародиффузии, определяемого соответственно первым и третьим слагаемым в правой части выражения (2), получено приближенное аналитическое выражение для объемной силы, действующей на i -й компонент газа со стороны оптической решетки:

$$F_{xi} = \frac{m_i^2 V_f}{\lambda_i k_B T} f_{0i}(V_f) V_{tr}^4, \quad (3)$$

где $f_{0i}(v_x) = n_i \sqrt{m_i / (2\pi k_B T)} \exp[-m_i v_x^2 / (2k_B T)]$ — равновесная максвелловская функция распределения молекул по скоростям, λ_i — средняя длина свободного пробега молекул между столкновениями. Оценка вкладов селективности и бародиффузии в разделение позво-

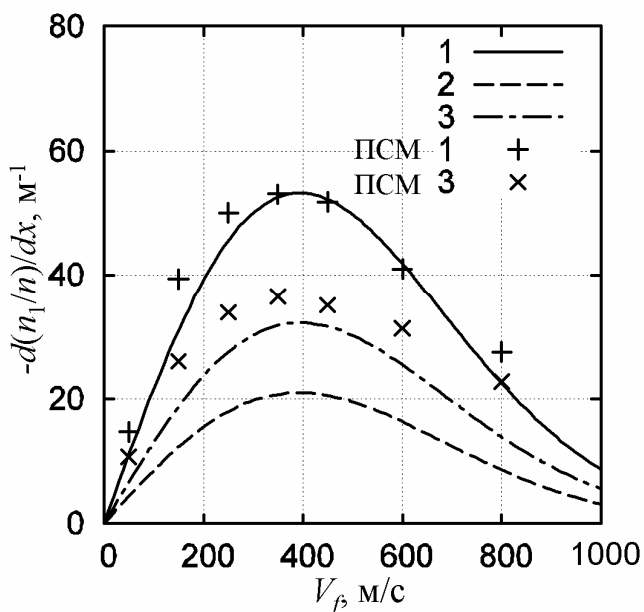


Рис. 4. Оценка вклада селективности 2 и бародиффузии 3 в разделение 1 смеси гелия и метана при оптическом захвате.

Символы — результаты статистического моделирования.

ляет провести оценку величины $\nabla(n_1/n)$ в центре между пластинами, где вклад термодиффузии мал. На рис. 4 показан расчет вклада в разделение 1 селективности объемной силы 2 и бародиффузии 3 на примере смеси гелия и метана для интенсивности лазера $I = 5 \times 10^{14}$ Вт/м² и различной скорости оптической решетки. Как видно из приведенного примера, вклад бародиффузии в разделение может превышать влияние селективного воздействия оптического захвата. Результаты приближенной аналитической оценки подтверждаются хорошим совпадением с результатами статистического моделирования. Статистическая погрешность представленных на рис. 4 данных ПСМ не превышала 3%.

Таким образом, бародиффузия, возникающая под действием оптической решетки, может давать больший вклад в разделение газовой смеси, чем вклад селективности объемных сил. Вклад термодиффузии в разделение составляет меньшую величину и становится значительным только на периферии оптической решетки, где могут иметь место большие градиенты температуры.

Во второй части главы исследуется вопрос о проведении разделения газовой смеси с использованием оптической решетки, создаваемой импульсным лазерным источником. Проведены оценки характерного времени затухания возмущения, создаваемого импульсной оптической решеткой в газовой смеси. Оценка этого времени позволяет рассчитать частоту следования лазерных импульсов, необходимую для поддержания возмущения внутри тонкой трубки, что может быть использовано при экспериментальной регистрации разделения.

Проведена оценка вклада бародиффузии в разделение при оптическом захвате в импульсном режиме. Для оценки величины бародиффузии использована величина градиента давления, полученная с помощью моделирования нестационарного течения. Показано, что вклад бародиффузии может почти в десять раз превышать вклад селективного действия оптической решетки, возникающего при импульсном воздействии лазерного излучения.

Оценки интервала времени после импульса, необходимого для установления градиента давления в нестационарном течении, и релаксации возмущения за счет вязкого трения о стенки внутри трубки указывают, что при длительности импульса 10 нс в трубке длиной от 1 до 10 см и радиусом 1 мм оптимальная частота следования импуль-

сов находится вблизи диапазона 10 – 30 кГц, что вполне реализуемо с помощью современных лазеров.

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. Показана возможность использования числа повторных столкновений и числа моделирующих молекул, пересчитанного на лямбда-ячейку с линейными размерами, равными средней локальной длине свободного пробега, в качестве индикатора точности результатов ПСМ и выполнения гипотезы о молекулярном хаосе, используемой при выводе уравнения Больцмана.

2. На примере классических задач динамики разреженного газа исследованы различные алгоритмы и численные схемы метода ПСМ. В частности, показана возможность применения точной по времени реализации схемы мажорантной частоты метода ПСМ (без использования расщепления по времени) для оценки точности численных результатов метода ПСМ. Также рассмотрена возможность увеличения численной эффективности схемы Монте-Карло с временной релаксацией метода ПСМ с использованием замены реализации межмолекулярных столкновений на перераспределение согласно максвелловской функции распределения.

3. С помощью анализа уравнения Больцмана для течений разреженного газа с учетом градиентной дипольной силы при наличии интерференционной решетки были получены безразмерные параметры, характеризующие такие течения. С помощью прямого статистического моделирования течения газа при оптическом захвате изучено влияние межмолекулярных столкновений на процесс оптического захвата. Выявлена роль обмена между группами захваченных и незахваченных молекул газа за счет межмолекулярных столкновений в изменении скорости развития оптического захвата.

4. Численно продемонстрировано наличие двух масштабов в развитии оптического захвата газа, определяемых процессами взаимодействия с оптической решеткой и столкновительной релаксации газа. Получено смещение столкновительного режима оптического захвата газа в сторону больших значений числа Кнудсена при уменьшении интенсивности лазерного излучения. Наблюдаемые численно особенности различных режимов оптического захвата газа объяснены с помощью анализа безразмерных параметров.

5. Проведена оценка вклада термо-, бародиффузии и селективности объемных сил при разделении компонентов газовой смеси с использованием явления оптического захвата. Было получено новое аналитическое выражение для объемной силы, действующей на компоненты газовой смеси в переходном режиме оптического захвата (при $Kn_l \geq 1$). С использованием этого аналитического выражения и расчетов методом ПСМ было показано, что бародиффузия, возникающая под действием оптической решетки, может давать вклад равный или больший, чем вклад селективности объемных сил. Вклад термодиффузии в разделение составляет меньшую величину и становится значительным только на периферии оптической решетки, где могут иметь место большие градиенты температуры.

6. Показано, что вклад бародиффузии в разделение смеси газов при импульсном воздействии оптической решетки может превышать действие селективности объемных сил приблизительно на порядок величины.

7. Проведены оценки времени затухания возмущения в газе, находящемся внутри замкнутой трубки, после импульсного воздействия оптической решетки. В частности, оценки показывают, что для трубки длиной 1 см и радиусом 1 мм импульсное воздействие с частотой 10 – 30 кГц может позволить сохранить уровень возмущений в смеси газов для наиболее эффективного разделения компонентов смеси.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ РАБОТЫ

1. Shevyrin A.A., Ivanov M.S. Separation of gas mixtures due to forces from a nonresonant optical lattice // J. Appl. Phys. – 2009. – 106, 054903.
2. Шевырин А. А., Иванов М. С. Исследование процесса оптического захвата газа нерезонансным излучением с учетом межмолекулярных столкновений // Теплофизика и аэромеханика. 2007. № 3. – С. 391-400.
3. Шевырин А.А. Сравнение континуального и кинетического подходов для расчета течения Пуазейля // Тезисы XLI Международной научной студенческой конференции. Секция физика. – Новосибирск, 2003.
4. Russo G., Pareschi L., Trazzi S., Shevyrin A.A., Bondar Ye.A., Ivanov M.S. Comparison between TRMC and MFS Methods for the Space Homogeneous Boltzmann Equation // Proc. 24th Inter. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. – Melville, New York, 2005. – Vol. 762. – P. 571-576.
5. Russo G., Pareschi L., Trazzi S., Shevyrin A.A., Bondar Ye.A., Ivanov M.S. Plane Couette Flow Computations by TRMC and MFS Methods // Proc. 24th Inter. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. – Melville, New York, 2005. – Vol. 762. – P. 577-582.
6. Shevyrin A.A., Bondar Ye.A., Ivanov M.S. Analysis of Repeated Collisions in the DSMC Method // Proc. 24th Symp. on Rarefied Gas Dynamics. – Melville, New York, 2005. – Vol. 762. – P. 565-570.
7. Шевырин А. А. Прямое статистическое моделирование захвата газа нерезонансным световым излучением // Тезисы XLIV Международной научной студенческой конференции. – Новосибирск, 2006.
8. Ivanov M.S., Shevyrin A.A. DSMC computations of a rarefied gas interacting with light // Proc. 25th Inter. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. – Novosibirsk, 2007. – P. 507-513.
9. Russo G., Ivanov M.S., Shevyrin A.A. Simulation of rarefied gas flows by Improved TRMC method // Proc. 25th Inter. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. – Novosibirsk, 2007. – P. 495-500.
10. Russo G., Shevyrin A.A. Time Relaxed Monte-Carlo Methods based on sampling from McKean graphs // Proc. 25th Inter. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. – Novosibirsk, 2007. – P 501-506.
11. Shevyrin A.A., Ivanov M.S. Optical trapping of a gas using a non-resonant laser field // Intern. Conf. Methods Aerophysical Research: Abstr. Pt. 2 – Novosibirsk, 2008. – P. 129-130.
12. Shevyrin A.A., Ivanov M.S. Direct Simulation Monte-Carlo Method for studying binary gas mixture separation using a nonresonant optical lattice // XIV Intern. Conf. Methods Aerophysical Research: Abstr. Pt. 1 – Novosibirsk, 2008. – p. 256.
13. Shevyrin A.A., Ivanov M.S. Comparison of thermal diffusion and forces from the optical lattice for separation of binary gas mixtures // Proc. 26th Intern. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. – 2008. – Vol. 1084. – P. 239-244.

14. Shevyrin A.A., Ivanov M.S. Comparison of two DSMC results for Fourier flow // Proc. 26th Intern. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. – 2008. – Vol. 1084. – P. 395-398.

15. Shevyrin A.A., Ivanov M.S. DSMC analysis of the gas mixture separation using optical lattices // Proc. of the 41st AIAA Thermophysics Conf., 22 – 25 June, 2009, San Antonio, Texas. – AIAA-2009-3741.

Ответственный за выпуск А.А. Шевырин
Подписано к печати 08.04.2010
Формат бумаги 60×84/16,
Усл. печ. л. 1.0, Уч.-изд. л. 1.0,
Заказ № 4, Тираж 100 экз.
Отпечатано в ЗАО «ДокументСервис»
630090, Новосибирск-90, Институтская 4/1