

УДК: 533.6.011.8

Основные подходы к построению методов Монте-Карло в вычислительной аэродинамике

Зея Мьо Мьинг, Хлопков А.Ю., Чжо Зин

Аннотация

Развитие численных методов в динамике разреженных газов связано в первую очередь с использованием методов статистического моделирования (Монте-Карло). Их используют для вычисления интегралов столкновения в регулярных конечно-разностных схемах решения кинетических уравнений, решения интегральных уравнений, и прямого статистического моделирования. Наиболее распространенным методом решения задач в динамике разреженных газов в настоящее время является метод прямого статистического моделирования. Но и в этом случае фактически невозможно обойтись без рассмотрения кинетических уравнений. В настоящей работе рассматривается общий подход к построению процедур решения задач динамики разреженных газов методом Монте-Карло.

Ключевые слова

Метод Монте-Карло, уравнение динамика разреженного газа, кинетическое уравнение, метод прямого статистического моделирования.

Основные уравнения динамика разреженного газа

Динамика разреженных газов описывается известным интегродифференциальным кинетическим уравнением Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \bar{\xi} \frac{\partial f}{\partial x} = \int (f' f'_1 - f f_1) \bar{g} b db d\epsilon d\bar{\xi}_1, \quad (1.1)$$

где f – функция распределения молекул по скоростям $\bar{\xi}$, \bar{g} – относительные скорости молекул при парных столкновениях, b, ϵ – прицельное расстояние и азимутальный угол при столкновениях частиц.

Сложная нелинейная структура интеграла столкновения и большое количество переменных создают существенные трудности для анализа, в том числе и численного,

этого уравнения, поэтому часто пользуются приближенными представлениями интеграла столкновений и функции распределения. Наиболее распространенными приближенными формами кинетических уравнений являются:

Модельное уравнение *Крука* [1]

$$\frac{df}{dt} = \nu(f_0 - f), \quad f_0 = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{m}{2kT}(\bar{\xi} - \bar{v})^2} \quad (1.2)$$

где ν - частота столкновений, f_0 – равновесная функция распределения

Эллипсоидальная модель *Халвея* [2]

$$\frac{df}{dt} = \nu(f_3 - f). \quad (1.3)$$

f_3 – эллипсоидальная функция распределения;

Аппроксимационная модель *Шахова* [3]

$$\frac{df}{dt} = \nu(f^+ - f), \quad f^+ = f_0 \left[1 + \frac{4}{5}(1 - \text{Pr})s_a c_a \left(c^2 - \frac{5}{2} \right) \right],$$

$$s_i = \frac{1}{n} \int c_i c^2 f d\bar{\xi}, \quad (1.4)$$

c и Pr – безразмерная молекулярная тепловая скорость и число Прандтля соответственно.

Здесь же необходимо упомянуть линеаризированное уравнение Больцмана, которое строго выводится из полного уравнения Больцмана при условии, что функция распределения слабо отличается от равновесной [4]:

$$\frac{d\varphi}{dt} = k(\bar{\xi})\varphi + \int K(\bar{\xi}, \bar{\xi}_1)\varphi_1 d\bar{\xi}_1, \quad (1.5)$$

где $f = f_0(1+\varphi)$, $\varphi \ll 1$, $K(\bar{\xi})$ и $K(\bar{\xi}, \bar{\xi}_1)$ - которые известные функции молекулярных скоростей, зависящие от сорта частиц.

Уравнения (1.2 – 1.4) в отличие от (1.5) не следуют строго из уравнения Больцмана, кроме того, являются существенно более нелинейными, чем исходное уравнение, но, как мы увидим ниже, в практической реализации при численном моделировании могут оказаться проще.

В [5] подробно рассматривается общая методика построения кинетических моделей и их роль в исследовании течений разреженного газа. Принципиальная схема метода, который можно рассматривать как метод аппроксимации уравнения Больцмана (1.1), заключается в том, что интеграл столкновений J заменяется некоторым более простым оператором Q , ограничивающим лишь итерационные свойства больцмановского. В частности, выставляется требование, чтобы для любой заданной функций распределенные первые моменты аппроксимирующего и истинного операторов столкновения, вплоть до некоторого порядка, совпадают. Предполагается, что приближенный оператор зависит от функции распределения, молекулярной скорости, а также от системы макропараметров соответствующего порядка. Таким образом, возникает система уравнений для определения этих макропараметров $a^{(0)}, a^{(1)}, \dots, a^{(n)}$:

$$\int J(f)\psi d\bar{\xi} = \int Q(f, \bar{\xi}, a^{(0)}, a^{(1)}, \dots, a^{(n)})\psi d\bar{\xi}, \quad (1.6)$$

где $\psi = 1, \xi_i, \xi_i \xi_i, \dots, \xi_1^{\alpha_1}, \xi_2^{\alpha_2}, \xi_3^{\alpha_3}, \dots$

$$\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = m, m = 0, 1, 2, \dots, n.$$

Свойство n -го приближения состоит в том, что полученные из него уравнения моментов, вплоть до n -го порядка, в точности совпадают с точными уравнениями моментов, следующими из уравнения Больцмана. Интегралы соотношения (1.6) есть не что иное, как расширение обычных требований о выполнении законов сохранения.

Приближенный оператор столкновений задается в релаксационной форме:

$$Q = \nu(f^+ - f) \quad (1.7)$$

а для f^+ используется локально-максвелловская документация, умноженная на соответствующий полином

$$f^+ = f_0(a^{(0)} + a_a^{(1)}c_a + a_{\alpha\beta}^{(2)}c_\alpha c_\beta + \dots). \quad (1.8)$$

Таким образом, ограничивая соответствующее количество моментов в (1.8), можно получить последовательно оператор (1.7) в форме (1.2), (1.3) и (1.4) соответственно или построить модельное уравнение более высокого приближения.

Естественно, любое упрощение исходного уравнения приводит к тем или иным отходам от истинного решения, которые для различных областей могут быть существенным или нет. Так, хотя уравнение (1.2) обладает основными свойствами уравнения Больцмана: в частности, из него следует закон сохранения и H -теорема, оно

точно переходит в уравнение Больцмана в свободномолекулярном и сплошносредном невязком пределах. Однако при переходе к сплошной среде модель Крука дает неверное значение числа Прандтля. Модели (1.3) и (1.4) этого недостатка лишены, но в то же время конструируемые модели кинетических уравнений по-прежнему остаются достаточно сложными и практически недоступными для аналитического анализа. Поэтому основным критерием выбора той или иной модели при исследовании характерных задач является сравнение численных результатов, чему в основном и посвящена работа [5].

Основные подходы к построению статистических методов

Обычно считают, что развитие численных статистических методов в динамике разреженных газов идет по следующим трем направлениям: использование методов Монте-Карло для вычисления интегралов столкновения в регулярных конечно-разностных схемах решения кинетических уравнений; построение случайного процесса (типа процедура Уалама-Нэймана), соответствующего решению кинетического уравнения; прямое статистическое моделирование физического явления, которое разделяется на два подхода: стационарного и нестационарного прямого моделирования. Центральное место в динамике разреженных газов занимают методы прямого статистического моделирования.

Работы по конструированию статистических процедур при прямом моделировании открыли широкие возможности по повышению эффективности методов, снижения буквально на порядки объем оперативной памяти ЭВМ по сравнению с первоначальными модификациями, что позволило их применять к решению двухмерных и впоследствии, в том числе с учетом реальных свойств газов трехмерных задач. Однако при исследовании и обосновании применения этих методов фактически невозможно обойтись без рассмотрения описываемого моделируемое явление кинетического уравнения. Установление связи статистической процедуры с решением кинетического уравнения является необходимым по целому ряду причин. Во-первых, для того чтобы доверять решению и использовать полученные результаты в качестве эталонных, поскольку решения многих характерных задач были впервые решены именно методами прямого моделирования и до сих пор не повторены другими методами. Во-вторых, установление соответствия моделирования решению уравнения позволяет использовать хорошо развитый аппарат численных регулярных и статистических методов решения уравнений математической физики для анализа и повышения эффективности методов. И, в-третьих, это позволяет установить некоторый общий подход к построению методов и исключает всякого рода ложные модификации.

Процедура решения задач методом Монте-Карло заключается в том, что физическому явлению или описывающему его уравнению ставится в соответствие некоторый случайный процесс, математическое ожидание которого является оценкой искомых характеристик задачи. Как правило, математическая сложность рассматриваемых в динамике разреженных газов задач позволяет разграничить расчетные методы на регулярные и чисто статистические.

В этих случаях обычно не возникает сомнений в математической обоснованности решений уравнений и, как правило, облегчает анализ погрешностей, поскольку они носят в основном однородный характер. В большинстве случаев из-за сложности задач происходит взаимное проникновение друг в друга разностных и вероятностных подходов. Так, с одной стороны, статистическое моделирование течений газа основано, как правило, на дискретизации физического пространства, а с другой – в разностных методах для вычисления моментов используют методы Монте-Карло.

Связь стационарного статистического моделирования и решения кинетического уравнения

При разработке и исследовании методов статистического моделирования, в том числе и прямого моделирования, фактически невозможно обойтись без рассмотрения кинетических уравнений, описывающих данное явление. Так, при разработке метода прямого стационарного моделирования – движения пробных траекторий – Хэвиленд вынужден был привлекать уравнение Больцмана в следующем итерационном виде:

$$\bar{\xi} \frac{df^{(k)}}{dx} = \int (f^{(k)} f_1^{(k-1)} - f^{(k-1)} f_1^{(k)}) g b d b d \varepsilon d \bar{\xi}_1. \quad (1.9)$$

Наиболее очевидно связь методов Монте-Карло и кинетического уравнения устанавливается для линеаризованного уравнения в виде (1.5), когда для него в соответствии с ядром интегрального уравнения строится процедура Улама-Неймана.

Уравнение (1.5) записывается в интегральном виде:

$$\begin{aligned} \varphi(t, x, \xi) = & \varphi(t_0, x - \xi(t - t_0)) e^{-k(\xi)(t-t_0)} + \\ & \int K(\xi, \xi_1) e^{-k(\xi)(t-\tau)} \varphi(\tau, x - \xi(t-\tau), \xi_1) d\xi_1 d\tau. \end{aligned} \quad (1.10)$$

В более удобной записи, соответствующей фредгольмовскому типу II-рода, оно будет иметь вид

$$\varphi(t, y) = \psi(t, y) + \int P(t_1, y_1, t, y) \varphi(t_1, y_1) dy_1 dt_1, \quad (1.11)$$

где y означает фазовое пространство (x, ξ) .

Для молекул твердых сфер вид ядра этого интегрального уравнения хорошо известен. В безразмерной форме:

$$P = \frac{k_0 d^2}{\sqrt{\pi}} e^{-\xi_1^2} \left[g - \frac{2}{g} e^{\xi_1^2} - \frac{(\xi_1 g)^2}{g^2} \right] \times e^{-k_0 d^2 t} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int g e^{\xi_1^2} d\xi_1. \quad (1.12)$$

Уравнению (1.10) сопоставляется однородная цепь Маркова с начальным распределением, соответствующим начальной функции распределения

$$\psi(t, y) = \varphi[t_0, y - \xi(t - t_0)] e^{-k(\xi)(t - t_0)}$$

и матрицей перехода, соответствующей ядру (1.12).

в этом случае вероятность последовательности $(t_1, y_1) \rightarrow (t_2, y_2) \rightarrow \dots (t_e, y_e)$, состоящей из l рассеяний, равна $\psi(t_1, y_1) P(t_1, y_1 \rightarrow t_2, y_2) P(t_2, y_2 \rightarrow t_3, y_3) \dots \times P(t_{e-1}, y_{e-1} \rightarrow t_e, y_e) dt, dy \dots dt_e, dy_e$, и математическое ожидание некоторой случайной величины

$$X = \sum_{i=1}^e \xi(t_i, y_i)$$

будет равно функционалу от решения исходного уравнения

$$(\varphi, \psi) = M[X].$$

Решение нелинейного кинетического уравнения методом стационарного статистического моделирования фактически проводится методом итераций. В каждой k -й итерации получается линейное интегральное уравнение, которое, в этой итерации решается методом Монте-Карло. Так, например, для модельного уравнения Крука оно имеет вид

$$f^{(k+1)} = f_n e^{-\int v^{(k)} dt} + \int \frac{f_0^{(k)}}{n^{(k)}} e^{-\int v^{(k)} dt} f^{(k+1)} d\xi dt. \quad (1.13)$$

В каждой итерации вычисляются макропараметры, входящие в исходное уравнение n^{k+1} , u^{k+1} , T^{k+1} и v^{k+1} и после этого переходят к следующей итерации. Если метод последовательных приближений сходится, то переход от одной итерации к другой в конечном итоге, приводит к решению кинетического уравнения.

Построение метода прямого статистического моделирования

Рассмотрим для простоты однородное уравнение Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = J(f, f). \quad (1.14)$$

Будем решать его методом последовательных приближений. Метод последовательных приближений выберем в форме Эйлера:

$$\begin{aligned} f^0 &= f(0), \\ f^1 &= f^0 + J(f^0, f^0)\Delta t, \\ f^2 &= f^1 + J(f^1, f^1)\Delta t, \\ f^n &= f^{n-1} + J(f^{n-1}, f^{n-1})\Delta t. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Введем в поле решения расчетную лагранжеву сетку, т.е. представим функцию распределения некоторой системой N частиц, каждая из которых характеризуется скоростью движения ξ_i . Систему (1.15) будем решать по методу дробных шагов, т.е. на полшаге по времени рассматривать изменение внутреннего состояния системы.

Таким образом, счет можно вести так: на лагранжевом этапе вычислений в каждом приближении по времени определяется перенос частиц, в данном случае

$$f_i^n = f_i^{n-1/2}, \Delta \xi f(t, \xi_i) = f\left(t - \frac{\Delta t}{2}, \xi_i\right) \Delta \xi, \quad (1.16)$$

Где f_i – часть функции распределения, аппроксимируемая частицами со скоростями в районе ξ_i , а эйлеров этап, так же как и в полурегулярных методах, можно оценивать с помощью методов Монте-Карло. Так, из формы этапа релаксации

$$\Delta \xi f^{n+1/2}(t + \Delta t, \xi_i) = \frac{\Delta t}{2} T_i^n \Delta \xi - v^{n(t)} \frac{\Delta t}{2} f^n(t, \xi_i) \Delta \xi. \quad (1.17)$$

видно, что часть молекул, пропорциональная частоте столкновений на предыдущем шаге и шагу по времени, скоростей не меняют, а часть молекул меняет скорости в соответствии с величиной $J^n(t, \xi_i)$. В частности, расчет правой части (1.17) можно проводить так. По

величине $v^n(t)$ и лагранжевой сетке (количеству частиц, аппроксимирующих функцию распределения) на n -м шаге можно определить время, которое тратится на одно столкновение, и в соответствии с вероятностью столкновения $\xi(g)$ выбираются пары молекул, над которыми производится акт столкновения. Количество сталкивающихся пар выбирается так, чтобы общее время, затраченное на столкновения, не превосходило шага по времени. Остальные частицы за этот шаг скоростей не меняют. Таким образом, после этапа релаксации часть частиц изменяет скорости, а часть остается без изменения, а в общем лагранжева сетка изменится. После этого вновь происходит шаг по времени и процесс продолжается в соответствии с системой (1.15) вплоть до установления последовательных приближений к решению уравнений Больцмана (1.14). Можно видеть, что описанный здесь процесс решения кинетического уравнения аналогичен процедуре прямого моделирования Берда.

Подобные несложные рассуждения позволяют, как мы увидим в дальнейшем, оценивать погрешности методов и строить схемы решения.

Метод Монте-Карло и его применение в динамике разреженного газа

Располагая изложенными выше сведениями, можно решить ряд практических задач путем имитации вероятностной модели некоторого реального явления. Особенность метода Монте-Карло состоит в том, что его применение не требует формулировки интегродифференциального уравнения, описывающего течение разреженного газа. На практике могут возникнуть ситуации, когда формулировка подобных уравнений представляет значительные трудности и желательно решить задачу без аналитического исследования вероятностной модели. Использование аналитического аппарата позволяет строить более эффективные алгоритмы решения задач.

Динамика разреженного газа изучает явления, имеющие место при произвольном отношении длины пробега молекул к характерному размеру явления. Исследование таких явлений требует в общем случае учета молекулярной структуры газов. В круг задач динамики разреженных газов входят, например, задачи об обтекании летательных аппаратов, движущихся на больших высотах, о движении газов в вакуумных аппаратах и т.д.

Основным инструментом кинетического описания газов является одночастичная функция распределения $f(t, \mathbf{x}, \xi)$, где t — время, \mathbf{x} — вектор координат, ξ — вектор скорости.

Функция $f(t, \mathbf{x}, \xi)$ представляет собой плотность молекул в фазовом пространстве, то есть, в 6-мерном пространстве координат и скоростей. Иначе говоря, $f(t, \mathbf{x}, \xi)$ характеризует количество молекул с координатами в интервале $(\mathbf{x}, \mathbf{x} + d\mathbf{x})$ и со скоростями

в интервале $(\xi, \xi + d\xi)$. Отсюда следует, что число молекул в единице объема n (числовая плотность) равно:

$$n(t, \mathbf{x}) = \int f(t, \mathbf{x}, \xi) d\xi, \quad (1.18)$$

где интегрирование ведется по всем возможным скоростям молекул. Конечно, точно количество молекул с данными скоростями в определенный момент времени подсчитать невозможно, оно колеблется из-за флуктуаций. Поэтому можно лишь говорить о вероятном числе молекул в фазовом объеме. Можно ввести нормированную функцию:

$$n\mathcal{f} = f,$$

тогда \mathcal{f} будет плотностью распределения в обычном смысле: если P – вероятность того, что молекула имеет координаты в интервале $(\mathbf{x}, \mathbf{x} + d\mathbf{x})$ и скорость в интервале $(\xi, \xi + d\xi)$ то \mathcal{f} – плотность вероятности распределения молекул в 6-мерном пространстве координат и скоростей.

С помощью функции распределения можно определить такие макроскопические величины, как средняя скорость молекул, тензор напряжений, вектор потока тепла, температура:

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \int \xi \mathcal{f} d\xi, \\ P_{ij} &= mn \int \xi_i \xi_j \mathcal{f} d\xi, \\ \mathbf{q} &= \frac{mn}{2} \int \mathbf{c}^2 \mathcal{f} d\xi, \\ T &= \frac{m}{3k} \int \mathbf{c}^2 \mathcal{f} d\xi, \end{aligned} \quad (1.19)$$

где $\mathbf{c} = \xi - \mathbf{v}$ – тепловая скорость.

Уравнение Больцмана является основной моделью, которая используется для описания течений разреженных газов, оно отражает изменение одночастичной плотности распределения вероятности за счет перелетов частиц и столкновений между ними:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_x \frac{\partial f}{\partial x} + \xi_y \frac{\partial f}{\partial y} + \xi_z \frac{\partial f}{\partial z} = J(f, f) = \int (f' f'_1 - f f_1) g b db d\theta d\xi_1. \quad (1.20)$$

Здесь скорости ξ , ξ_1 , ξ' , ξ'_1 соответствуют скоростям пары частиц до и после столкновения, $f = f(t, \mathbf{x}, \xi)$, $f_1 = f(t, \mathbf{x}, \xi_1)$, $f' = f(t, \mathbf{x}, \xi')$, $f'_1 = f(t, \mathbf{x}, \xi'_1)$, $J(f, f)$ - интеграл столкновений, $g = |\mathbf{g}| = |\xi_1 - \xi|$ - относительная скорость, b - прицельное расстояние, θ - азимутальный угол в плоскости, перпендикулярной плоскости столкновения. Уравнение Больцмана выведено в предположении, что газ достаточно разрежен для того, чтобы столкновения можно было считать бинарными и описывать состояние газа с помощью одночастичной функции распределения в предположении молекулярного хаоса. Для плотных газов и жидкостей это несправедливо, и поэтому для их описания используются другие подходы.

Число Кнудсена Kn представляет собой отношение длины свободного пробега молекул между столкновениями λ к характерному макроскопическому размеру в течении L .

$$\text{Kn} = \frac{\lambda}{L}. \quad (1.21)$$

Длина свободного пробега молекул – это среднее расстояние, которое молекулы проходят, не сталкиваясь между собой. Длина свободного пробега обратно пропорциональна произведению числовой плотности газа на сечение столкновений:

$$\lambda \sim \frac{1}{n\sigma}. \quad (1.22)$$

Таким образом, число Кнудсена характеризует степень разреженности среды. Нужно заметить, что даже в предположении постоянства сечения столкновений частиц газа концентрация частиц в различных точках газа может сильно меняться, поэтому длина свободного пробега является переменной величиной. В качестве характерного масштаба L может выступать величина, определенная с помощью размера обтекаемого тела, размера канала для внутреннего течения, с помощью градиентов макропараметров, например, плотности: $L = \rho/(dp/dx)$. В последнем случае число Кнудсена является показателем локальной разреженности в течении.

Если провести процедуру обезразмеривания уравнения Больцмана, введя характерные масштабы длины L , скорости $c = \sqrt{RT}$ и времени $t = L/c$, получим уравнение в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \frac{a}{\text{Kn}} \int (f' f'_1 - f f_1) g b d b d \theta d \xi_1, \quad (1.23)$$

где a – некоторый множитель порядка единицы, зависящий от характера взаимодействия частиц. Функция распределения обезразмеривается делением на величину n/c^3 , где n – некоторая характерная концентрация. Таким образом, число Кнудсена характеризует влияние столкновительных процессов на состояние газа, а также границы применимости макроскопического описания среды. При больших значениях числа Кнудсена ($\text{Kn} \gg 1$) столкновения в выбранном масштабе L не играют значительной роли, и поэтому течение можно рассматривать как свободномолекулярное. Течения при $\text{Kn} \sim 1$ представляют собой переходный режим, когда среда не может быть описана макроскопически, но столкновения в ней играют существенную роль. Режим $\text{Kn} \ll 1$ близок к модели сплошной среды, течение газа может быть описано макроскопически почти везде, за исключением неравновесных областей (слой Кнудсена, ударная волна).

В газовой динамике нашел применение вариант метода Монте-Карло, основанный на моделировании реального течения газа посредством относительно небольшого числа молекул. То есть, проводится численный эксперимент, в котором прослеживается история ограниченного числа частиц, каждая из которых является представителем большого числа W реальных молекул. W – число представляемых молекул – называют весовым множителем. Для каждой из молекул запоминаются ее координаты, скорость и энергия. По этим величинам путем осреднения по всем моделирующим частицам определяются газодинамические параметры течения.

Область течения разбивается на ячейки, причем такие, чтобы изменение газодинамических параметров течения в каждой ячейке было малым. Размер ячейки имеет порядок длины свободного пробега частицы.

Для стационарных задач расчет начинается с задания некоторого начального распределения частиц в расчетной области, которое с течением времени эволюционирует.

Моделирование физического движения молекул проводится посредством дискретных шагов по времени Δt , малых по сравнению со средним временем между столкновениями молекул $\Delta t < \tau \sim 1/(n \langle g \sigma \rangle)$. Движение молекул и межмолекулярные столкновения на временном интервале моделируются последовательно. На каждом шаге по времени Δt осуществляется два этапа расчета. На первом этапе проводятся столкновения между молекулами с последующей коррекцией молекулярных скоростей. Выбор очередной сталкивающейся пары частиц проводится в пределах одной ячейки и производится на основе данных генератора случайных чисел. Предполагается, что

сталкиваются только те частицы, которые находятся в одной пространственной ячейке. На втором этапе все молекулы перемещаются на расстояния, определяемые их скоростями $\xi \Delta t$. Учитываются пересечения молекулами поверхностей твердых тел, линий и плоскостей симметрии и границ течения. При наличии потока внутрь области на соответствующих границах генерируются новые молекулы. Если молекула покидает область расчета, то она исключается из расчета.

Важной частью метода прямого моделирования является вычисление числа столкновений. Частота столкновений определяется свойствами реального газа, для которого решается задача, и именно эта величина определяет диссипативные свойства течения – в конечном итоге, вязкость и теплопроводность моделируемого газа.

Для вычисления макроскопических параметров газа – плотности, скорости, давления, температуры – аккумулируются данные для всех молекул. Затем происходит дополнительное осреднение по числу расчетов, чтобы уменьшить статистическую ошибку. Алгоритм метода является хорошо параллелизуемым при расчете на многопроцессорных ЭВМ.

Как показывает опыт численного моделирования течений разреженного и умеренно-разреженного газа, результаты расчетов по кинетическим моделям хорошо соответствуют данным эксперимента.

Важным преимуществом метода прямого статистического моделирования (ПСМ) по сравнению с решением задачи на основе уравнения Больцмана является формулировка граничных условий в терминах вероятностного описания для каждой молекулы, а не в виде функции распределения в окрестности границы.

К недостаткам метода можно отнести высокие требования к аппаратным ресурсам, сложность расчета нестационарных течений с макроскопическими скоростями, малыми по сравнению со скоростью звука. Указанные сложности возрастают с уменьшением числа Кнудсена. Кроме того, в практических задачах обычно не требуется столь подробная информация, как знание функции распределения, интерес представляют ее моменты – газодинамические величины.

Рассмотрим моделирование свободномолекулярного течения методом Монте-Карло. Без ограничения общности выделим около обтекаемого тела область прямоугольной или кубической формы, габариты которой превышают размеры тела в соответствующих направлениях. Будем считать, что на границах области столкновения молекул между собой не играют существенной роли, что справедливо в случае $Kn \gg 1$, т.е. когда длина пробега существенно превышает размеры тела. Тогда на границах области функцию распределения влетающих в область молекул можно положить равной f_∞ .

Далее необходимо вычислить количество частиц, влетающих в область в единицу времени через все границы:

$$N_j S_j = -S_j \int_{(\xi \cdot \mathbf{n}) < 0} (\xi \cdot \mathbf{n}) f_\infty(t, \mathbf{x}, \xi) d\xi, \quad (1.24)$$

где $N_j S_j$ – поток частиц через границу с номером j . Вычисление $N_j S_j$ сводится к известным интегралам от максвелловской функции, зависящим от скоростного отношения $s = V_\infty/a_\infty$. На первом этапе разыгрывается номер границы, через которую влетает очередная частица. В случае высокоскоростного потока алгоритм может быть упрощен: если поперечные размеры расчетной области достаточны для учета теплового разброса скоростей молекул, влет молекул можно рассматривать только с передней границы.

На втором этапе необходимо определить координату влета частицы. Так как поток газа однороден, координаты молекул равномерно распределены по соответствующей части границы.

На третьем этапе по известным соотношениям, описанным выше, вычисляется скорость молекулы как случайная величина, распределенная в соответствии с функцией f_∞ .

На четвертом этапе, зная координаты точки влета молекулы и ее скорость, определяются координаты точки попадания этой молекулы на тело (если молекула попадает на тело). Вычисляются величины импульса и энергии, приносимые молекулой на тело.

На пятом этапе по функции распределения отраженных молекул определяется скорость отраженной молекулы и вычисляется реактивный импульс и энергия, уносимая отраженной молекулой. Вычисляя средние величины импульса и энергии по большому количеству молекул, находим силы и моменты, действующие на летательный аппарат, а также потоки энергии, приносимые газом на поверхность летательного аппарата.

Алгоритм метода Монте-Карло выглядит следующим образом:

- 1) Определение номера части границы;
- 2) Вычисление координат точки влета частицы в область;
- 3) Вычисление скорости частицы;
- 4) Вычисление координаты точки пересечения траектории частицы с поверхностью тела;
- 5) Вычисление импульса и энергии, приносимых частицей;
- 6) Вычисление скорости отраженной частицы;

7) Вычисление импульса и энергии отраженной частицы.

Так как частицы не сталкиваются между собой, отраженная частица покидает расчетную область. В алгоритме происходит передача управления на пункт 1 и вычисляется траектория следующей частицы.

Если тело невыпуклое или имеется несколько тел, алгоритм несколько усложняется. После пункта 7 отраженная частица может попасть на другую часть тела, поэтому управление передается на пункт 4, где вычисляются координаты точки пересечения траектории частицы с поверхностью. Если траектория частицы не пересекает тело, частица покидает область и управление передается на пункт 1.

Верификация варианта метода Монте-Карло

Рассмотрим приложение описанных методов к решению задач определения аэродинамических характеристик тел простейших формы в свободномолекулярном потоке разреженного газа. Конус был представлен 60 треугольными элементами, что позволяет в общем случае работать с телами сложной формы. Исходный круговой конус имеет радиус дна $R = 0.5$, длину $L = 1$, угол полураствора $\theta = 26.56^\circ$, ось конуса направлена против оси x . Значения параметров: температурный фактор $t_w = T_w/T_\infty = 0.001$; скоростное отношение $s = 10$; коэффициенты аккомодации $\sigma_\tau = 0, 1$. Расчет проводился с использованием 5×10^6 моделирующих частиц. Угол атаки α во всех случаях изменяется от 0° до 180° с шагом 5° .

В результате расчетов были получены значения коэффициентов аэродинамических силы сопротивления C_x , подъемной силы C_y , и момента m_z , как функции угла атаки при различных значениях коэффициентов аккомодации (рис. 1, 2, 3). Коэффициенты вычислены по площади дна конусов, коэффициент момента вычислен относительно центра масс тела и на основе высоты конуса.

Из графиков видно, что при малых углах растут сопротивления с ростом коэффициента аккомодации. Можно объяснить что, при нулевой аккомодации все молекулы отражаются зеркально, и полной аккомодации отражаются диффузно. Зеркальные отраженные молекулы передают поверхности больший импульс, чем диффузно рассеянные от холодной стенки молекулы. Можно объяснить что, величина нормальных и касательных напряжений, вызываемых отраженным потоком, зависит от характера отражения молекул. При зеркальном отражении $p_r = p_i$. Тогда суммарное нормальное напряжение, действующее на элемент поверхности, будет равно $p = 2p_i$. Касательное напряжение τ_r , вызываемое отраженными молекулами, равно $\tau_r = -\tau_i$. Поэтому суммарное напряжение трения будет равно нулю $\tau = 0$. при диффузном

отражении касательное напряжение от отраженных молекул равно нулю, так как при этом все направления отражения являются одинаково вероятными.

Модели Максвелла и Черчиньяни-Лампис-Лорда (CLL) при ($\sigma_\tau = 0, 1$) значительно совпадали. При $\sigma_\tau = 0$ зависимость сопротивления достигает до ~ 4 ($\alpha = 180^\circ$), что можно сказать молекулы отражают зеркально от поверхности с полностью. С уменьшением коэффициент аккомодации увеличиваются подъемной силы при малых углах атаки. Можно объясняется при увеличении коэффициента аккомодации начиная с нуля импульс отраженных молекул уменьшается, хотя большая часть молекул все еще отражается зеркально. При нулевой аккомодации момент тангажа m_z всегда меньше нуля – это значит, что положение тела будет неустойчивым. При значительной аккомодации появляется диапазон углов атаки, где $m_z(\alpha)$ больше нуля. В этом диапазоне положение тела будет устойчивым.

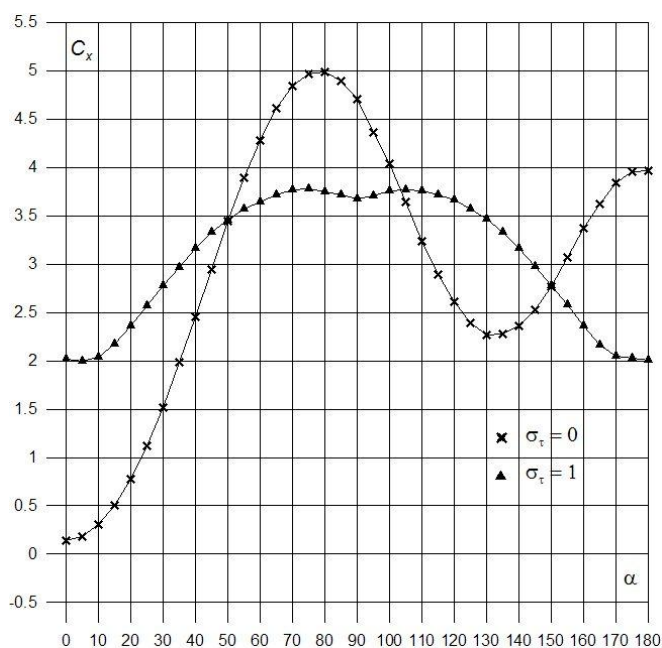


Рис. 1. Зависимость $C_x(\alpha)$ для конуса ($\sigma_\tau = 0, 1; t_w = 0.001$)

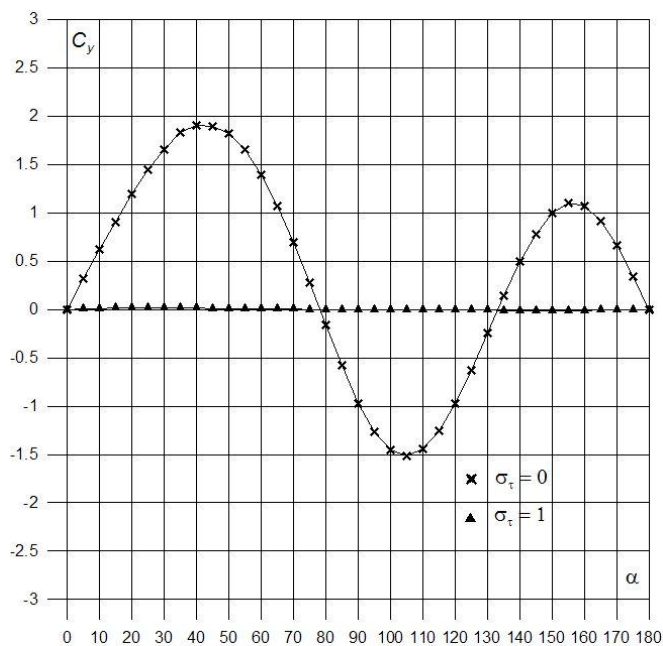


Рис. 2. Зависимость $C_y(\alpha)$ для конуса ($\sigma_\tau = 0, 1; t_w = 0.001$)

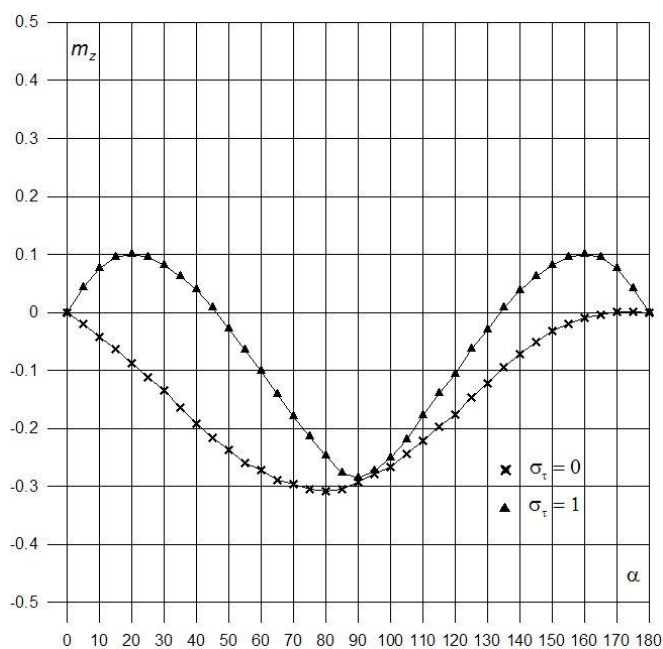


Рис. 3. Зависимость $m_z(\alpha)$ для конуса ($\sigma_\tau = 0, 1; t_w = 0.001$)

Заключение

Создание сложной нелинейной структуры интеграла столкновения и большое количество переменных существуют трудности анализа, в том числе и численного уравнения. Поэтому пользуются приближенными представлениями интеграла столкновений и функции распределения. Статистическое моделирование течений газа основано, на дискретизации физического пространства, а с другой в разностных методах

для вычисления моментов используют методы Монте-Карло. Представлены результаты расчетов верификация варианта метода Монте-Карло, получены значения коэффициентов аэродинамических силы сопротивления C_x , подъемной силы C_y , и момента m_z , как функции угла атаки при различных значениях коэффициентов аккомодации с использованием различных модели взаимодействия молекул с поверхностью (Максвелл и CLL).

Библиографический список

1. Bhathnagar P.D., Gross E.P., Krook M.A. A model for collision processes in gases // Phys. Rev., 94. 1954.
2. Holway L.H. Approximation Procedures for Kinetic Theory. Ph.D. Thesis, Harvard, - 1963.
3. Шахов Е.М. Метод исследования движений разреженного газа. – М.: Наука, - 1974.
4. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. – М.: Наука, - 1967.
5. Хлопков Ю.И., Шахов Е.М. Кинетические модели и их роль в исследованиях течений разреженного газа // ВЦ АН СССР. М., 1974. Вып. 3.

Сведения об авторах

Зея Мьо Мьинт, аспирант, Московского физико-технического института (государственного университета), мобильный телефон: +7 963 997 75 65, e-mail: zayyarmyomyint@gmail.com

Хлопков Антон Юрьевич, Инженер-программист общефакультетской лаборатории, Московского физико-технического института (государственного университета), мобильный телефон: +7 926 468 46 68, e-mail: khlopkov@falt.ru

Чжо Зин, студент, Московского физико-технического института (государственного университета), мобильный телефон: +7 926 308 43 06, e-mail: kyawzin.mipt@gmail.com