

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ОБТЕКАНИЯ ТЕЛ В РАЗРЕЖЕННОЙ СРЕДЕ

В. В. Пилянский

Исследование физических процессов и явлений в разреженных неравновесных течениях имеет непосредственное отношение к разработке новых аэрокосмических и микроэлектронных технологий. Такие течения традиционно изучаются в рамках динамики разреженного газа.

Газовый поток можно описывать на макроскопическом или микроскопическом уровне. Макроскопическая модель рассматривает газ как континуум, и соответствующее описание дается зависимостями макроскопических параметров течения, таких как скорость, плотность, давление и температура от координат и времени, а микроскопическая, или молекулярная, модель представляет корпускулярную структуру газа как мириады дискретных молекул и в идеале содержит информацию о положениях и скоростях каждой молекулы в любой момент времени [1].

Рассмотрим подобные течения на примере метеорита, влетающего в атмосферу Земли. Процесс движения метеорита в атмосфере хорошо изучен. Сначала он вступает во взаимодействие с очень разреженными верхними слоями атмосферы. Для изучения этого взаимодействия используется микроскопическая модель. Молекулы газа независимо друг от друга сталкиваются с телом, вызывая небольшое его замедление, а также выбивают молекулы вещества с поверхности тела и нагревают его. Затем метеорит входит в плотные слои атмосферы и для описания движения достаточно макроскопической модели.

В рамках макроскопической модели применимы уравнения Навье-Стокса. Для описания движения газа этого вполне достаточно, и среду можно рассматривать как вязкую жидкость. Но такой подход справедлив, пока в физически малом объёме содержится достаточное число молекул. Разреженность течения традиционно характеризуется числом Кнудсена Kn , которое определяется как отношение средней длины свободного пробега молекул λ к характерной длине L [2]. При числах Кнудсена < 0.1 обычно пренебрегают внутренней структурой газа и применяют подходы, основанные на решении уравнений Навье-Стокса.

Поскольку экспериментальное моделирование разреженных неравновесных течений затруднительно как с технической, так и с экономической точки зрения (особенно в случае высокоэнтальпийных течений), то практически единственным средством для получения достоверных данных являются численные методы динамики разреженного газа [3]. В кинетической теории газов используется модель, основанная на статистическом (вероятностном) описании поведения совокупности молекул.

Основную роль в этой модели играет уравнение Больцмана для функции распределения молекул по их положениям в пространстве и по скоростям. Газокинетическая модель существенна и успешно применяется для описания поведения сильно разреженных газов.

Уравнение Больцмана описывает эволюцию во времени функции распределения плотности $f(x,p,t)$ в одночастичном фазовом пространстве, где x и p – координата и импульс соответственно. Распределение определяется так, что $f(x,p,t) d^3x d^3p$ пропорционально числу частиц в объеме $d^3x d^3p$ в момент времени t . Уравнение Больцмана имеет вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \frac{p}{m} + \frac{\partial f}{\partial p} \cdot F = S, \quad (1)$$

где F – поле сил, действующее на частицы в жидкости или газе, а m – масса частиц. Член S в правой части уравнения добавлен для учёта столкновений между частицами и называется интегралом столкновений.

Однако уравнения Больцмана – сложное интегро-дифференциальное уравнение в частных производных. Кроме того, интеграл столкновений зависит от конкретной системы, от типа взаимодействия между частицами и других факторов. Сложность уравнения Больцмана, особенно в пространственно неоднородном случае, делает невозможным эффективное использование аналитических методов для его решения. Алгоритм решения уравнения Больцмана методом Монте-Карло имеет в этом случае наиболее простой вид.

Метод Монте-Карло прямого моделирования является техникой моделирования на ЭВМ реального течения газа несколькими тысячами молекул. В памяти ЭВМ запоминаются координаты и скорость моделируемых молекул, изменение которых в течение времени обусловлено межмолекулярными столкновениями и взаимодействием с границами физического пространства. Моделируемая газовая среда заменяется системой модельных дискретных частиц (каждая из которых представляет собой большое количество реальных молекул), для которых задан стохастический процесс их столкновения друг с другом. Эволюция множества частиц описывается как равномерное прямолинейное движение, прерываемое в случайные моменты времени мгновенными актами парных столкновений. В практической реализации методы прямого статистического моделирования, основанные на подходах Бёрда (моделирование динамики ансамбля молекул) и Хэвиленда (моделирование индивидуальных траекторий молекул), оказались наиболее эффективными. К настоящему времени безусловный приоритет в моделировании динамики разреженного газа принадлежит методу Бёрда, модификации которо-

го позволили буквально на порядки повысить эффективность точного подхода.

Опыт применения различных вариантов метода Монте-Карло указывает на удовлетворительное совпадение его результатов с экспериментом, а также с имеющимися решениями уравнения Больцмана [1].

Для упрощения алгоритма и существенного ускорения счёта, фазы перемещения и столкновения частиц разделены между собой и чередуются, а столкновительные партнеры выбираются только в пределах той же самой ячейки (без учёта взаимного расположения).

Центральным местом в методе нестационарного статистического моделирования является процедура подсчета столкновений. Пара частиц выбирается для столкновения в соответствии с частотой столкновений молекул, вне зависимости от расстояния между ними в данной ячейке. Достоверность континуальных решений в режиме обтекания подтверждена сравнением с численными решениями кинетического уравнения Больцмана с модельными интегралами столкновений, с результатами, полученными методом прямого статистического моделирования Монте-Карло и с решением в свободномолекулярном режиме [2].

В данной работе рассмотрена трёхмерная задача обтекания тела разреженным газом в цилиндре радиуса r и длины b . Молекулы влетают через торец цилиндра и движутся по трубе, обтекая расположенное в ней тело. При этом прямолинейное движение продолжается, пока не случится одно из событий: вылет из трубы;

- столкновение с телом;
- столкновение с другой молекулой.

В случае вылета через противоположную плоскость, или через стенки цилиндра молекулы заново генерируются в начальной области. Тело, которое помещено в трубу, является цилиндром. При столкновении с ним молекулы отлетают согласно модели смешанного (зеркального плюс диффузионного) отражения.

Для исследования межмолекулярных столкновений, моделируемый объем физического пространства разбивается на ячейки. Для каждой ячейки вычисляется время следующего столкновения (оно в основном зависит от количества молекул в ячейке). Когда это время наступает, в этой ячейке выбираются две молекулы и проводится столкновение согласно модели упругих сфер и закону сохранения импульса. С повышением температуры в газе возбуждаются внутренние степени свободы молекулы. В построенной модели внутренняя энергия каждой молекулы тратится как на поступательное движение, так и на вращательное и колебательное движение. Если энергия столкновения больше некоторой

энергии активации, происходит реакция диссоциации – распад молекулы на атомы.

На рисунке представлены результаты численного моделирования обтекания цилиндра радиуса $y = 1\text{ м}$ и длины $x = 1.5\text{ м}$ в области размерами $H = 2\text{ м}$, $W = 4.5\text{ м}$. Число молекул – 5000, скорость потока 20 км/с, газ – азот.

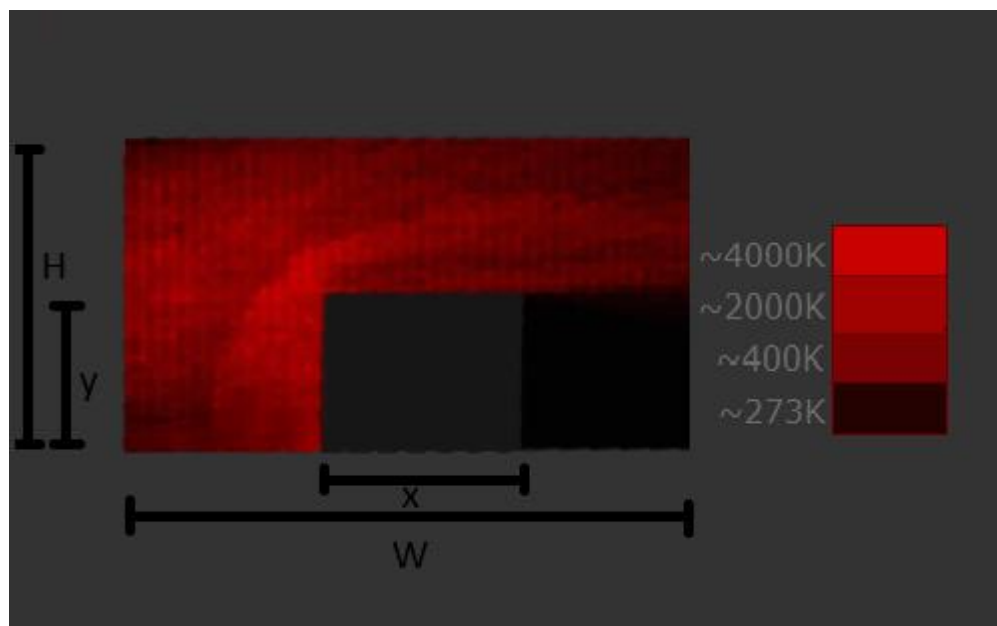


Рис. Поле температуры при обтекании цилиндра

Отметим, что максимальная температура в области сжатия с учётом диссоциации и возбуждения внутренних степеней свободы молекул более чем в 2 раза ниже по сравнению с вариантом без учёта этих процессов.

Разработанное программное обеспечение позволяет проводить моделирование широкого круга задач динамики разреженных газов.

Литература

1. Бёрд, Г. Молекулярная газовая динамика: практ. пособие / Г. Бёрд. – Oxford: ClarendonPress, 1976. – 322 с.
2. Bird, G. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows / Г. Бёрд. – Oxford: Clarendon Press, 1994. – 479 с.
3. Хлопков, Ю. И. Кинетические модели и их роль в исследованиях течений разреженного газа / Ю.И.Хлопков, Е.М. Шахов. – Москва: ВЦ АН ССР, 1974. – 158 с.