Обобщение уравнения Клаузинга и его решение методом Монте-Карло.

Иванов Николай Юрьевич, гр. 522

Санкт-Петербургский государственный университет
Математико-механический факультет
Кафедра статистического моделирования

Научный руководитель: к.ф.-м.н., д. Христинич В.Б.
Рецензент: к.ф.-м.н., д. Кривулин Н.П.

Санкт-Петербург
2007г.

Цели дипломной работы

- Обобщение уравнения Клаузинга для случая цилиндрической симметрии.
- Решение уравнения Клаузинга методом Монте-Карло.
- Изучение проводимости канала в зависимости от параметров задачи.
- Изучение точности решения, в зависимости от числа частиц.

Уравнение Клаузинга

$$w(X_1) = w_0(X_1) + \int_0^{\bar{L}} K(X_1, X_2) w(X_2) dX_2 \ ,$$

$$w(X) = \frac{N(X)}{n_{01}}; \quad w_0(X_1) = \frac{1}{2}\left(\frac{1+2X_1^2}{\sqrt{1+X_1^2}} - 2X_1\right)$$

$$K(X_1, X_2) = 1 - |X_2 - X_1| \frac{2(X_2-X_1)^2+3}{2(1+(X_2-X_1)^2)^{3/2}}$$

$$\bar{L} = L/2r; X = x/2r.$$

L - длина канала, r - радиус,
n_{01} - концентрация в начальной камере,
$w(X)$ - безразмерная концентрация.

Уравнение свободномолекулярного движения

$$\frac{df(\mathbf{u},\mathbf{r},t)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + (\mathbf{u}\cdot\nabla_{\mathbf{r}})f + (\frac{\mathbf{F}}{m}\cdot\nabla_{\mathbf{u}})f = 0 \ ,$$

где:

$\frac{f(\mathbf{u},\mathbf{r},t)}{n(\mathbf{r},t)}$ - плотность распределения скоростей частиц в точке $\mathbf{r}$ в момент времени t,

$n(\mathbf{r},t)$ - концентрация частиц в точке $\mathbf{r}$ в момент времени t, $\mathbf{u}$ - вектор скорости частицы $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)$,

$\mathbf{r}$ - радиус-вектор частицы $\mathbf{r} = (x, y, z)$,

t - время,

$\nabla_{\mathbf{r}} = (\frac{\partial}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z}\mathbf{k})$,

$\nabla_{\mathbf{u}} = (\frac{\partial}{\partial u_x}\mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial u_y}\mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial u_z}\mathbf{k})$,

$\mathbf{F}(\mathbf{r},\mathbf{t})$ - внешние силы.

Интегральный подход.

$$f(\mathbf{u},\mathbf{r},t)=\frac{1}{|u_{\mathbf{n}}|}\tilde{\Phi}(\mathbf{u},\mathbf{r}_s,t)\ ,$$

$$\tilde{\Phi}(\mathbf{u},\mathbf{r}_s,t)=\begin{cases}\iiint_{(\mathbf{u}_1\cdot\mathbf{n})<0}|(\mathbf{u}_1\cdot\mathbf{n})|f(\mathbf{u}_1,\mathbf{r}_s,t)\tilde{T}(\mathbf{u}|\mathbf{u}_1,\mathbf{r}_s,\theta)d\mathbf{u}_1,\\ \text{если } \mathbf{r}=\mathbf{r}-\mathbf{u}(t-t_0) \text{ пересекает поверхность } S\\ \text{в точке } \mathbf{r}_s,\\ \\ |(\mathbf{u}_1\cdot\mathbf{n})|f_\infty(\mathbf{u},\mathbf{r},t), -\text{траектория частицы}\\ \ \text{не пересекает поверхность}\end{cases}$$

$\mathbf{r}_s$ - точка поверхности S, $\mathbf{r}_s\in S$, в которой отразилась частица. $\mathbf{n}$ - внешняя нормаль в точке $\mathbf{r}_s$,
f_∞ - распределение со входного сечения,
$\mathbf{u}_1$ - скорость частицы в точке $\mathbf{r}_s$,
θ - параметр плотности распределения $\tilde{T}$, где
$\tilde{T}$ - описывает распределение отраженных частиц
$f(\mathbf{u}_1,\mathbf{r}_s,t)$ - распределение падающих частиц.

Допущения

- **Распределение скоростей в граничных точках на бесконечности:**
  Максвелловское распределение скоростей.(нормальный трехмерный закон).
- **Характер взаимодействия с поверхностью**: Чисто диффузное отражение (скорости падения и отражения независимы).
- **Поверхность**: Цилиндрическая поверхность, с круговыми сечениями.

Обобщенное уравнение, для стационарного случая.

$$n(\mathbf{r}) = n_0(\mathbf{r}) + n_1(\mathbf{r}) \ ,$$

где:

$$n(\mathbf{r})_0 = \int_{\Omega_1} f_\infty(\mathbf{r}, \mathbf{u}_1) du_1 \ ,$$

вклад частиц пришедших со входного сечения,
Ω_1 - телесный угол под которым из рассматриваемой точки видно входное сечение.

$$n_1(\mathbf{r}) = \int\limits_{(\mathbf{u}_1, \mathbf{n}_2) > 0} \Big(- \int\limits_{(u_2, \mathbf{n}_2) < 0} \int \tilde{T}(\mathbf{u}_1, \mathbf{r}_2)(\mathbf{u}_2, \mathbf{n}_2) n(\mathbf{r}_2) \tilde{T}(\mathbf{r}_2, \mathbf{u}_2) d\mathbf{u}_2 d\mathbf{r}_2 \Big) d\mathbf{u}_1$$

вклад частиц пришедших после столкновения со стенками канала.

$\mathbf{r}$ - произвольная точка канала,$\mathbf{r}_2$ - точка на стенке канала,
$n(\mathbf{r}_2)$ - числовая плотность у стенки канала.

Расчет расхода газа

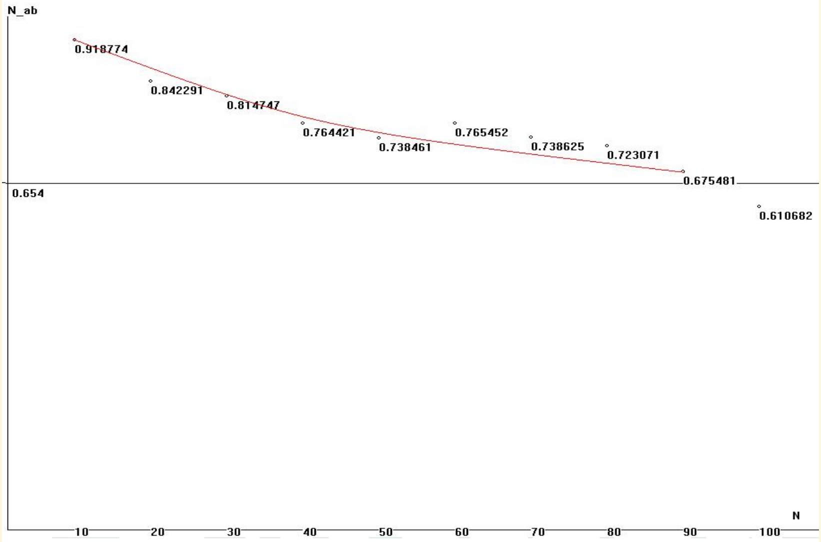
Определение и нахождение функционалов от решения

Формула расхода:

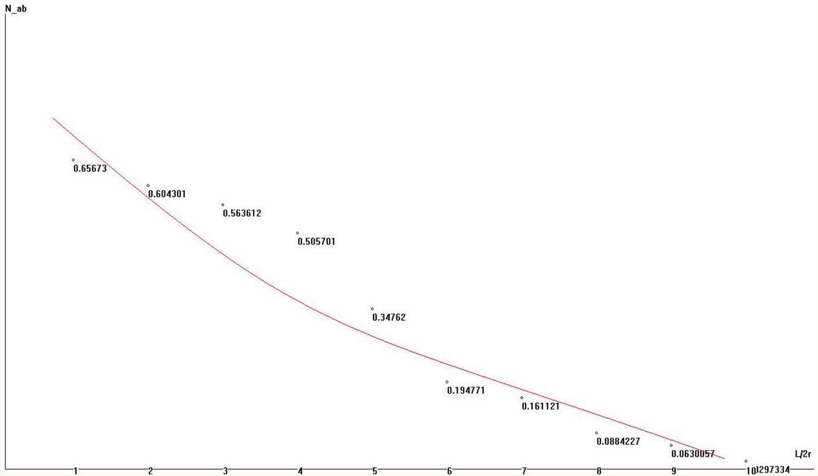
$$N_{AB} = N_{\alpha} - N_{\sigma\alpha} = n_{\alpha}\pi r^2 \sqrt{\frac{RT}{2\pi}} \left\{ 1 - 2\int_0^{\bar{L}} w(X) \left[\frac{1+2X^2}{\sqrt{1+X^2}} - 2X \right] dX \right\},$$

где $w(X)$ - решение уравнения Клаузинга.

Точность решения, в зависимости от числа частиц



Проводимость, в зависимости от соотношения длины канала к его диаметру.



Результаты работы

- Построено обобщенное уравнение.
- Для плотности распределения начального состояния построена обратная функция.
- Разработан и реализован алгоритм для расчета характеристик течения.
- Проведены расчеты, проводимости канала в зависимости от отношения длины к диаметру и точности решения в зависимости от числа частиц.