Метод Монте-Карло для решения задачи однородной релаксации газовой смеси

Бойченко Алексей Александрович, гр. 522

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

Научный руководитель: к.ф.-м.н. Христинич В. Б.
Рецензент: к.ф.-м.н. Москалева Н. М.

Санкт-Петербург
2012г.

Основные величины

1. $\mathbf{u}$ — скорость одной молекулы, m — масса одной молекулы.
2. $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{u})$ — ненормированная плотность.
3. Концетрация (числовая плотность) $n(t, \mathbf{x}) = \int f(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) d\mathbf{u}$.
4. Нормированная плотность $\tilde{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) = \frac{f(t, \mathbf{x}, \mathbf{u})}{n(t, \mathbf{x})}$.
5. Плотность газа $\rho = m \cdot n(t, \mathbf{x})$.
6. Математическое ожидание (скорость потока) $\mathbf{V}(t, \mathbf{x}) = \int \mathbf{u} \tilde{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) d\mathbf{u}$.
7. Дисперсия $D(\mathbf{u}) = \int (\mathbf{u} - \mathbf{V})^2 f(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) d\mathbf{u}$.
8. Связь дисперсии с температурой: $D(\mathbf{u}) = 3RT$, $R = \frac{k}{m}$ где $k = 1.38 \cdot 10^{-16}$ эрг/К — постоянная Больцмана.
9. Температура для каждого из направлений $i = x, y, z$: $D(u_i) = 3RT_i = \int (u_i - V_i)^2 \, \frac{m}{2} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) d\mathbf{u}$.

Уравнение Больцмана

Уравнение Больцмана.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \int (f' f_1' - f f_1) W(\mathbf{u}, \mathbf{u_1} | \mathbf{u}', \mathbf{u_1}') d\mathbf{u_1} d\mathbf{u}' d\mathbf{u_1}'.$$

Здесь $f = f(t, \mathbf{x}, \mathbf{u})$, $f_1 = f(t, \mathbf{x}, \mathbf{u_1})$, $f' = f(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}')$, $f_1' = f(t, \mathbf{x}, \mathbf{u_1}')$. $W(\mathbf{u}', \mathbf{u_1}' | \mathbf{u}, \mathbf{u_1})$ — условная плотность распределения вероятностей того, что в результате столкновения молекулы со скоростями $\mathbf{u}$ и $\mathbf{u_1}$ они приобретут скорости $\mathbf{u}'$ и $\mathbf{u_1}'$ соответственно.

Параметры для смеси газов

1. $f^{(i)}$, $n^{(i)}$, $d^{(i)}$, $m^{(i)}$, — ненормированная плотность распределения, числовая плотность , эффективный диаметр , масса молекулы соответственно для компоненты смеси с номером $i \in 1..s$;
2. числовая плотность смеси:$n = \sum_{i=1}^{s} n^{(i)}$;
3. полное сечение столкновений молекулы сорта i с молекулой сорта j: $\sigma^{(ij)} = \frac{\pi}{4}\left(d^{(i)} + d^{(j)}\right)^2$;
4. средняя частота столкновений одной молекулы сорта i с молекулами сорта j: $\nu^{(ij)} = n^{(i)}\overline{\sigma^{(ij)}|g(ij)|}$;
5. средняя частота столкновений, приходящихся на молекулу смеси: $\nu = \sum_{i=1}^{s} \frac{n^{(i)}}{n} \sum_{j=1}^{s} \nu_i j$;
6. макроскопическая плотность смеси: $\rho = \sum_{i=1}^{s} m^{(i)} n^{(i)}$;
7. макроскопическая скорость потока для смеси (среднемассовая скорость): $\mathbf{V} = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^{s} m^{(i)} n^{(i)} \mathbf{V}^{(\mathbf{i})}$;
8. температура смеси T: $\frac{3}{2}kT = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{s} \frac{n^{(i)}}{n} m^{(i)} D\left(\mathbf{u}^{(\mathbf{i})}\right)$.

Уравнения Больцмана для $f^{(i)}$:

$$\frac{\partial f^{(i)}}{\partial t} = \sum_{j=1}^{s} \int \left(f^{(i)'} f^{(j)'} - f^{(i)} f^{(j)}\right) W_{ij}(\mathbf{u}, \mathbf{u_1}|\mathbf{u}', \mathbf{u}_1')d\mathbf{u_1}d\mathbf{u}'d\mathbf{u}_1'. \qquad (1)$$

Моменты:

$$M^{(N)}_{i_1\dots i_N}(t,\mathbf{x}) = \int \prod_{l=1}^{N} u_{i_l}\tilde f(t,\mathbf{x},\mathbf{u})d\mathbf{u},$$

$$\mathcal{M}^{(N)}_{i_1\dots i_N} t,\mathbf{x}) = \int \prod_{l=1}^{N} (u_{i_l} - V_{i_l})\tilde f(t,\mathbf{x},\mathbf{u})d\mathbf{u}.$$

- Тензор напряжений $P_{ij} = nm\mathcal{M}^{(2)}_{ij} = nm\int (u_i - V_i)(u_j - V_j)\tilde f d\mathbf{u}$.
- Поток энергии
  $q_i = n\frac{m}{2}\left(\mathcal{M}^{(3)}_{i11} + \mathcal{M}^{(3)}_{i22} + \mathcal{M}^{(3)}_{i33}\right) = \frac{m}{2}.\int (u_i - V_i)(\mathbf{u}-\mathbf{V})^2 f d\mathbf{u}$

Тринадцатимоментная система Града:

1. $\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_l}(\rho V_l) = 0,$
2. $\frac{\partial V_i}{\partial t} + V_l\frac{\partial V_i}{\partial x_l} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial P_{il}}{\partial x_l} = 0, i = x, y, z,$
3. $\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_l}(pV_l) + \frac{2}{3}P_{il}\frac{\partial V_i}{\partial x_l} + \frac{2}{3}\frac{\partial q_l}{\partial x_l} = 0,$
4. $\frac{\partial p_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_l}(V_r p_{ij}) + \frac{2}{5}(\frac{\partial q_i}{\partial x_j} + \frac{\partial q_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial q_l}{\partial x_l}) + p_{il}\frac{\partial V_j}{\partial x_l} + p_{jl}\frac{\partial V_i}{\partial x_l} -$
   $\frac{2}{3}\delta_{ij}p_{rs}\frac{\partial V_r}{\partial x_s} + p(\frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial V_l}{\partial x_l}) + 6\frac{A}{m}\left(\frac{8K}{m}\right)^{\frac{1}{2}}\rho p_{ij} = 0,$
5. $\frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_r}(V_r q_i) + \frac{7}{5}q_r\frac{\partial V_i}{\partial x_r} + \frac{2}{5}q_r\frac{\partial V_r}{\partial x_i} + \frac{2}{5}q_i\frac{\partial V_r}{\partial x_r} + \frac{kT}{m}\frac{\partial p_{ir}}{\partial x_r} +$
   $\frac{7}{2}p_{ir}\frac{\partial}{\partial x_r}\left(\frac{kT}{m}\right) - \frac{p_{ir}}{\rho}\frac{\partial P_{rs}}{\partial x_s} + \frac{5}{2}p\frac{\partial}{\partial x_i}(\frac{kT}{m}) + 4\frac{A}{m}(\frac{8K}{m})\rho q_i = 0,$

Уравнения после замены переменных:

- $\frac{\partial p_{ij}}{\partial t} + A_{ij} + \frac{1}{\tau_p} p_{ij} = 0,$
- $\frac{\partial q_i}{\partial t} + B_i + \frac{2}{3}\frac{1}{\tau_p} p_{ij} = 0.$

Их решения:

- $p_{ij}(t) =$
  $\left(p_{ij} + \tau_p - \tau_p \frac{\partial A_{ij}\tau_p}{\partial t} + \ldots \right) \Big|_{t=0} e^{-\int_0^t \frac{d\tau}{\tau_p}} - \left(\tau_p A_{ij} - \tau_p \frac{\partial A_{ij}\tau_p}{\partial t} + \ldots \right) \Big|_{t=t}$
- $q_i(t) = \left(q_i + \frac{3}{2}\tau_p B_I - \frac{9}{4}\tau_p \frac{\partial B_i \tau_p}{\partial t} + \ldots \right) \Big|_{t=0} e^{-\frac{2}{3}\int_0^t \frac{d\tau}{\tau_p}} -$
  $\left(\frac{3}{2}\tau_p B_i - \frac{9}{4}\tau_p \frac{\partial B_i \tau_p}{\partial t} + \ldots \right) \Big|_{t=t}$

Процесс релаксации идет по экспоненциальному закону. τ_p — время релаксации газа.

Общая схема метода прямого статистического моделирования

1. Моделируемый объем физического пространства разбивается на ячейки с малыми размерами.
2. Временной отрезок $[0, T]$ разбивается на интервалы Δt, малые по сравнению со средним временем между столкновениями.
3. Цикл по временным интервалам.
    1. Свободномолекулярный перенос. Расчет взаимодействия молекул с границей.
    2. Вычисление столкновений за время Δt в ячейках. Скорости до столкновения заменяются скоростями после столкновения. Взаимное расположение молекул не учитывается.
    3. Вычисление параметров течения за истекший период.
4. Вывод результатов.

Параметры задачи. Температуры компонент и смеси

- Число моделирующих молекул $N = 1500000$,
- $\Delta t = 0.2$,
- число компонент смеси $nc = 3$,
- концетрации компонент $n^{(0)} = n^{(1)} = n^{(2)} = 1$,
- диаметры $d^{(0)} = 1, d^{(1)} = 2, d^{(2)} = 0.5$,
- массы $m^{(0)} = 1, m^{(1)} = 3, m^{(2)} = 10$,
- начальные температуры $T_0^{(0)} = 9, T_0^{(1)} = 5, T_0^{(2)} = 1$.

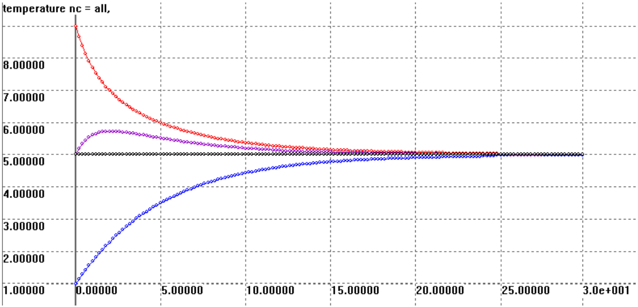

Рис.: Температуры компонент и смеси. $N = 1500000$.

Асимметрии компонент

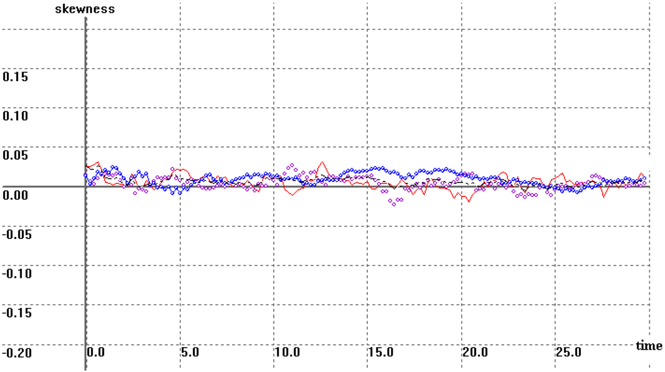

Рис.: Асимметрия распределений скоростей молекул компонент и смеси. $N = 150000$.

Эксцесс

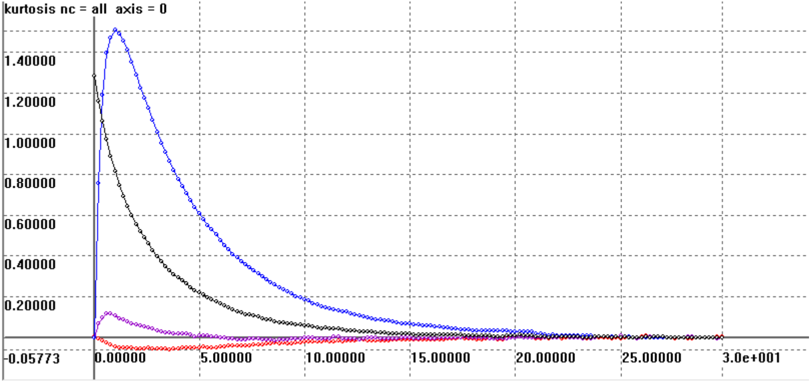

Рис.: Эксцесс распределений скоростей молекул смеси и ее компонент. $N = 1500000$.

Эмпирическая плотность

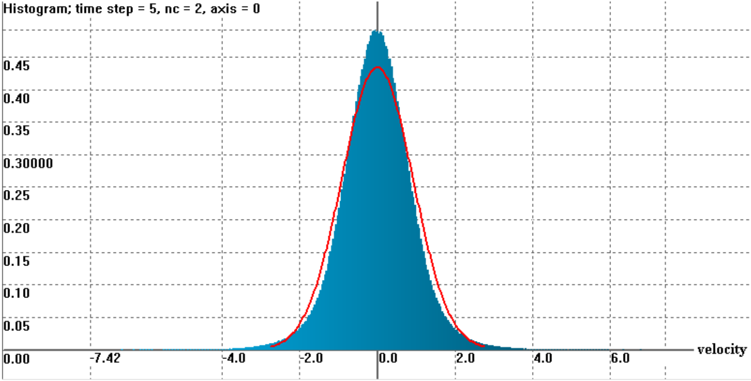

Рис.: Эмпирическая плотность распределения скоростей холодной компненты в момент времени $t = 1$. $N = 1500000$.

Эволюция эмпирической плотности

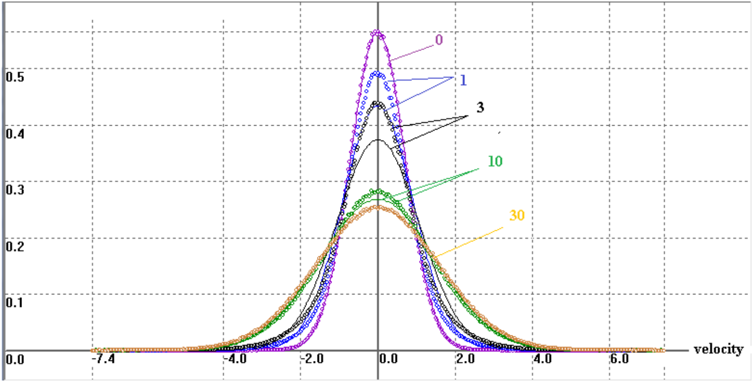

Рис.: Эволюция эмпирической плотности распределения скоростей холодной компоненты Взяты моменты времени $t = 0, t = 1, t = 5, t = 20, t = 30$.

Заключение

- В дипломной работе были разработаны алгоритм и программа, позволяющая проводить анализ решения задачи на уровне эмпирических плотностей и моментов третьего и четвертого порядков. Для написания программы использовалась среда Visual Studio 2010.
- Построены эмпирические плотности распределений скоростей молекул смеси и ее компонент.
- Были получены экспериментальные зависимости асимметрии и эксцесса распределений молекул смеси и ее компонент.
- Выделен временной промежуток, на котором достигалось наибольшее отличие распределений скоростей молекул компонент от нормального закона.
- Определен диапазон скоростей, на котором достигалось наибольшее отличие экспериментально полученной плотности от плотности нормального распределения.