

MONTE-CARLO METHODS FOR DETERMINATION OF AERO-THERMODYNAMIC CHARACTERISTICS OF SUPERSONIC AEROSPACE SYSTEMS

Yu. Khlopkov, Doctor of Mathematical and Physical sciences, Full Professor
M.M. Zay Yar, Candidate of Mathematical and Physical sciences, Doctoral Candidate
A. Khlopkov, Engineer
Kyaw Zin, Postgraduate Student
Moscow Institute of Physics and Technology, Russia

Great current scientific and applied value of rarefied gas dynamics is explained by practical importance of the solution of a wide range of tasks connected with the present stage of space exploration, development of vacuum technology. The first application of statistical methods was connected with direct modeling of gas flow and Monte-Carlo direct statistical simulation method appeared to be the most effective in the rarefied gas dynamics.

Keywords: Monte-Carlo method, aerodynamics of hypersonic vehicles, rarefied gas dynamic, aerospace systems.

Conference participants, National championship in scientific analytics

МЕТОДЫ МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ АЭРОТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ГИПЕРЗВУКОВЫХ ВОЗДУШНО КОСМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Хлопков Ю.И., д-р физ.-мат. наук, проф.
Зея М.М., канд. физ.-мат. наук, докторант
Хлопков А.Ю., инженер-программист
Чжо З., аспирант
Московский физико-технический институт, Россия

Большое научное и прикладное значение, которое в настоящее время имеет динамика разреженных газов, объясняется практической важностью решения широкого круга задач, связанных с современным этапом освоения космоса, развитием вакуумной технологии. Первое применение статистических методов связывалось с непосредственным моделированием течений газов и методы прямого статистического моделирования Монте-Карло оказались наиболее эффективными в динамике разреженных газов.

Ключевые слова: Метод Монте-Карло, аэродинамика гиперзвуковых аппаратов, динамика разреженного газа, воздушно-космических систем.

Участники конференции, Национального первенства по научной аналитике

Высокая стоимость выведения грузов на космическую орбиту объясняется высокой стоимостью ракетных двигателей, сложной системой управления, дорогими материалами, используемыми в конструкции ракет и их двигателей и главным образом их одноразовым использованием.

В конце XX века удельная стоимость выведения полезной нагрузки на низкую орбиту для одноразовых и частично многоразовых носителей США и Западной Европы составляла, примерно, от 10 000 до 25-000 \$/кг. Для транспортной космической системы «Space Shuttle» стоимость доставки 1 кг полезной нагрузки на околоземную орбиту составляет 10 416 \$/кг (в 2011 г.). Использование нового поколения одноразовых носителей типа «Atlas V», «Delta IV» и «Ariane V» должно привести к некоторому снижению удельной стоимости выведения, но, не слишком значительному. Вследствие комплекса причин удельная стоимость выведения одноразовыми российскими ракетами заметно меньше. Например, стоимость выведения носителями «Союз» и «Протон» на самом деле составляют 2 400 и 2 100 \$/кг соответственно.

Многоразовая космическая система предназначена для решения широкого круга задач в космосе, в том числе:

- Выведение на околоземную орбиту и возврат с орбиты полезных различных грузов;
- Транспортно-техническое обеспечение космических объектов различного назначения;
- Проведение аварийно-спасательных работ на орбите;
- Решение научно-технических и технологических экспериментов в космосе;
- Проведение международного контроля за космическим пространством;
- Экологический контроль за космическим пространством и земной поверхностью;

Создание, следующих друг за другом, поколений космической техники невозможно без умения решать, наверное, самое сложное уравнение математической физики – кинетическое уравнения Больцмана.

Развитие численных методов в динамике разреженных газов связано в первую очередь с использованием метода прямого статистического моделирования процессов, описываемых

кинетическим уравнением Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v}\nabla f = \int (f' f'_1 - f f_1) \vec{g} b d\vec{b} d\vec{\epsilon} d\vec{\omega} = J(f)$$

Здесь $f = f(t, x, y, z, \xi_x, \xi_y, \xi_z)$ – функция распределения молекул по времени, координатам и скоростям. f, f_1, f', f'_1 – функции распределения, соответствующие скоростям пары частиц до и после столкновения, $g = |\vec{g}| = |\xi_1 - \xi|$ – относительная скорость, b – прицельное расстояние, ϵ – азимутальный угол в плоскости, перпендикулярной плоскости столкновения. В практической реализации методы прямого статистического моделирования, основанные на подходах Бёрда [1] (моделирование динамики ансамбля молекул) и Хэвилленда [2] (моделирование индивидуальных траекторий молекул), оказались наиболее эффективными и их модификации с переменным успехом осуществляли победное шествие по вычислительной аэродинамике. К настоящему времени безусловный приоритет в динамике разреженного газа принадлежит методу Бёрда, модификации которого трудами отечественных исследователей О.М. Белоцерковского, В.Е. Яницкого, М.С. Иванова, В.А. Перепухова, А.И. Ерофеева, Ю.И. Хлопкова позволили буквально на порядки повысить

эффективность метода. Суть метода заключается в том, что эволюция системы на малом промежутке времени $\Delta t \rightarrow 0$ расщепляется на два ясных физических процесса:

1. релаксацию в соответствии с оператором столкновений в кинетическом уравнении

$$\frac{\partial f}{\partial t} = J(f)$$

2. свободномолекулярный перенос

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\bar{\xi} \nabla f$$

Это хорошо известная схема расщепления первого порядка по Δt для любого операторного уравнения, но в данном случае она подкупает тем, что расщепляет динамику такой сложной кинетической системы на два ясных физических процесса. Функция распределения моделируется N частицами, которые на первом этапе в каждой ячейке между собой сталкиваются в соответствии с частотой столкновения на протяжении времени Δt , а на втором, в течение Δt , перелетают на расстояния $\bar{\xi}_j \Delta t$. 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. Скорости частиц после столкновения выбираются в соответствии с законами взаимодействия молекул. Хотя эффективность метода зависит от довольно многих параметров схемы счета (установления, расщепления по времени, выхода на стационарный режим, шага по времени, сетки по пространству и т.д.), основные работы по совершенствованию метода посвящены улучшению процедуры столкновений и уменьшению статистической погрешности схемы, как основного момента, позволяющего уменьшить количество частиц в ячейках и, соответственно, уменьшить оперативную память вычислительной машины и уменьшить время расчёта. Так, в работе [3, 4] была предложена модификация процедуры столкновений для одного

частного случая – максвелловских молекул, при которой результаты расчета практически не зависят от количества частиц в ячейке при их изменении от 40 до 6. В многих работах предложен общий метод, независящий от сорта молекул, в котором на этапе столкновений подсистема частиц в каждой ячейке рассматривается как N -частичная модель Каца [5]:

$$\frac{\partial \varphi_1(t, \bar{\xi}_1)}{\partial t} = \frac{N-1}{N} \int \left[\varphi_2(t, \bar{\xi}_1, \bar{\xi}_2') - \varphi_2(t, \bar{\xi}_1, \bar{\xi}_2) \right] g_{12} d\sigma_{12} d\bar{\xi}_2$$

Моделирование столкновения сводится к статистической реализации эволюции не уравнения Больцмана, а модели Каца в течение времени Δt . Время столкновения в модели Каца рассчитывается в соответствии со статистикой столкновения в идеальном газе по схеме Бернулли. Эта схема позволяет использовать существенно меньшее число частиц в ячейке и более мелкий шаг расчетной сетки. Анализ результатов показал, что результаты расчета практически не зависят от количества частиц в ячейке вплоть до 2. Дело в том, что уравнение Больцмана с необходимостью требует предположения о молекулярном хаосе, которое при том количестве частиц в ячейке, на которое способны современные компьютеры, выполняется с систематической ошибкой. Уравнение Каца этого не требует и поэтому этап столкновения рассчитывается как чисто марковский процесс. А с другой стороны, при $N \rightarrow \infty$ имеет место полная эквивалентность модели Каца и пространственно однородного уравнения Больцмана. Таким образом, разработанный Белоцерковским – Яницким подход [6]:

- даёт путь построения эффективных численных схем, обеспечивающих возможность решения трёхмерных задач аэродинамического обтекания;

- решает важнейшую методологическую задачу эквивалентности численного метода решению кинетического уравнения.

При разработке метода прямого стационарного моделирования – движения пробных траекторий – Хэви-

ленд вынужден был привлекать уравнение Больцмана в следующем итерационном виде:

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

Наиболее очевидно связь методов Монте-Карло и кинетического уравнения устанавливается для линеаризованного уравнения в виде [7]

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

когда для него в соответствии с ядром интегрального уравнения строится процедура Улама-Неймана [8, 3]. Уравнение записывается в интегральном виде:

$$\varphi(t, x, \xi) = \varphi(t_0, x - \xi(t - t_0)) e^{-k(\xi)(t-t_0)} + \int K(\xi, \xi_1) e^{-k(\xi)(t-\tau)} \varphi(\tau, x - \xi(t-\tau), \xi_1) d\xi_1 d\tau$$

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

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

где y означает фазовое пространство (x, ξ) .

Для молекул твердых сфер вид ядра этого интегрального уравнения был выведен Гильбертом [7]. В безразмерной форме:

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

Решение строится следующим образом. Уравнению Фредгольма II рода 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. 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 $\psi(t_1, y_1) P(t_1, y_1 \rightarrow t_2, y_2) P(t_2, y_2 \rightarrow t_3, y_3) \dots \times P(t_{e-1}, y_{e-1} \rightarrow t_e, y_e) dt_e dy_e \dots dt_e dy_e$, и математическое ожидание некоторой случайной величины

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

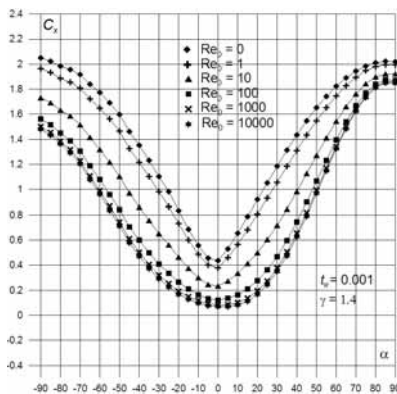


Рис.1. Зависимости $C_x(\alpha)$ для ВКС «Клипер»

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

$$f^{(k+1)} = f_n e^{-\int_n^{(k)} dt} + \int_n^{(k)} \frac{f^{(k)}}{n^{(k)}} e^{-\int_n^{(k)} dt} f^{(k+1)} d\xi dt.$$

В каждой итерации вычисляются макропараметры, входящие в исходное уравнение n^{k+1} , u^{k+1} , f^{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.

Методам традиционного использования статистического моделирования посвящено огромное количество работ, поэтому мы ограничимся в основном задачами аэродинамики. Как уже отмечалось, в практической реализации

для задач динамики разреженных газов статистические методы оказались более эффективными по сравнению с регулярными и полурегулярными методами [9]. Для задач обтекания, как наиболее существенных в аэродинамике, они впервые были успешно применены для получения аэродинамических характеристик различных, в том числе и сложных тел в свободномолекулярном и близком к свободномолекулярному потоках. На рис. 1 представлены зависимости коэффициента сопротивления силы C_x от угла атаки α для воздушно-космического самолета ВКС «Клипер, модель ЦАГИ» [10].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (Грант № 11-07-00300-а).

References:

1. Bird G.A. Shock-wave structure in rigid sphere gas, *Rarefied Gas Dynamics*. N-Y. Acad. Press, Vol. 1, 1965.
2. Haviland J.K., Lavin M.L. Application of the Monte Carlo Method to Heat Transfer in a Rarefied Gas, *Phys. Fluids*, Vol. 5, No. 11, 1962.
3. Khlopkov Yu.I. *Statisticheskoe modelirovanie v vychislitel'noi aerodinamike* [Statistical modeling in computational aerodynamics]. – Moscow., MFTI, 2006. –260 p.
4. Khlopkov Yu.I., Serov V.V. *Sovershenstvovanie metodov pryamogo nestatsionarnogo modelirovaniya* [Improvement of methods of direct non-stationary modeling]. – Moscow., MFTI, 1987.
5. Kats M. *Veroyatnost' i smezhnye voprosy v fizike* [Probability and related issues in physics]. – Moscow., Mir, 1967.
6. Belotserkovskii O.M., Khlopkov Yu.I. *Metody Monte-Karlo v mekhanike zhidkosti i gaza* [Monte Carlo methods in mechanics of liquids and gases]. – Moscow., Azbuka, 2008. –330 p.
7. Kogan M.N. *Dinamika razrezhenykh gazov* [Dynamics of the rarefied gases]. – Moscow., Nauka, 1967. –440 p.
8. Ermakov S.M. *Metod Monte-Karlo i smezhnye voprosy* [Monte Carlo method and related issues]. – Moscow., Nauka, 1971. –327 p.
9. Belotserkovskii O.M., Khlopkov Yu.I. *Metody Monte-Karlo v mekhanike zhidkosti i gaza* [Monte Carlo methods in mechanics of liquids and gases]. – Moscow., Azbuka, 2008. –330 p.
10. Zeya M'o M'int, Khlopkov A.Yu. *Aerodinamicheskie kharakteristiki letatel'nogo apparata slozhnoy formy s uchetom potentsiala vzaimodeistviya molekulyarnogo potoka s poverkhnost'yu* [Aerodynamic characteristics of the

complex form aircraft taking into account the potential of interaction of a molecular stream and a surface], *Scientific notes of TsAGI.*, 2010., Vol. XLI, No. 5., pp. 33-45.

Литература:

1. Bird G.A. Shock-wave structure in rigid sphere gas // *Rarefied Gas Dynamics*. N-Y. Acad. Press, vol. 1, 1965.
2. Haviland J.K., Lavin M.L. Application of the Monte Carlo Method to Heat Transfer in a Rarefied Gas // *Phys. Fluids*, vol. 5, N. 11, 1962.
3. Хлопков Ю.И. *Статистическое моделирование в вычислительной аэродинамике*. – М.:МФТИ, 2006. – 260 с.
4. Хлопков Ю.И., Серов В.В. *Совершенствование методов прямого нестационарного моделирования*. – М.: МФТИ, 1987.
5. Кац М. *Вероятность и смежные вопросы в физике*. – М.: Мир, 1967.
6. Белоцерковский О.М., Хлопков Ю.И. *Методы Монте-Карло в механике жидкости и газа*. – М.: Azbuka, 2008. – 330 с.
7. Коган М.Н. *Динамика разреженных газов*. – М.: Наука, 1967. – 440 с.
8. Ермаков С.М. *Метод Монте-Карло и смежные вопросы*. – М: Наука, 1971. – 327 с.
9. Белоцерковский О.М., Хлопков Ю.И. *Методы Монте-Карло в механике жидкости и газа*. – М.: Azbuka, 2008. – 330 с.
10. Зея Мью М'инт, Хлопков А.Ю. *Аэродинамические характеристики летательного аппарата сложной формы с учётом потенциала взаимодействия молекулярного потока с поверхностью*// *Ученые записки ЦАГИ*. – 2010. – Т. XLI, № 5. – с. 33-45.

Information about authors:

1. Yuri Khlopkov - Doctor of Mathematical and Physical sciences, Full Professor, Moscow Institute of Physics and Technology, address: Russia, Zhukovsky city; e-mail: khlopkov@falt.ru
2. Zay Yar Myo Myint - Candidate of Mathematical and Physical sciences, Doctoral Candidate, Moscow Institute of Physics and Technology, address: Russia, Zhukovsky city; e-mail: zayyarmyomyint@gmail.com
3. Anton Khlopkov - Engineer, Moscow Institute of Physics and Technology, address: Russia, Zhukovsky city; e-mail: khlopkov@falt.ru
4. Kyaw Zin - Postgraduate Student, Moscow Institute of Physics and Technology, address: Russia,