

Monte Carlo simulacija zračnega upora

mag. Saša Harkai in dr. Milan Ambrožič

Fakulteta za naravoslovje in matematiko Univerze v Mariboru

dr. Marjan Krašna

Fakulteta za naravoslovje in matematiko in Filozofska fakulteta Univerze v Mariboru

Povzetek

Zaradi hitrih osebnih računalnikov so postale Monte Carlo simulacije v teoretični znanosti in tudi v praksi zelo popularne. Z njimi raziskujemo naključne pojave v naravi in družbi, ki so za izključno analitično obravnavo prezahtevni. Med zelo zahtevne fizikalne probleme spadajo tudi naloge s področja aerodinamike in hidrodinamike. Zato jih navadno rešujejo s kombiniranjem numeričnih simulacij in eksperimentov, na primer z uporabo vetrovnikov. Pri gibanju telesa skozi kapljevino ali plin se pojavi upor sredstva, za katerega pri dovolj majhnih hitrostih dobro velja linearni zakon upora (sorazmernost sile s hitrostjo telesa), pri velikih hitrostih pa kvadratni zakon (sorazmernost sile s kvadratom hitrosti telesa). Oba zakona dosledno izpeljemo iz Navier-Stokesove nelinearne parcialne diferencialne enačbe oziroma iz njenih približkov. Pri gibanju telesa skozi idealni plin pa lahko silo upora ocenimo tudi iz mikroskopske slike. Tako smo naredili v naši Monte Carlo simulaciji in pri tem med seboj povezali različne vede: statistično termodinamiko, mehaniko in numerične metode.

Ključne besede: Monte Carlo, zračni upor, idealni plin, statistična termodinamika

Monte Carlo Simulation of Drag

Abstract

Powerful personal computers made Monte Carlo simulations very popular in theoretical science and in practice. They are used to investigate probabilistic phenomena in nature and society which are too complex to be solved using a purely analytical approach. Tasks from the field of aerodynamics and hydrodynamics also belong to the class of very demanding physical problems. Therefore, they are usually solved with a combination of numerical simulations and experiments, e.g. using wind tunnels. When an object moves through liquid or gas it experiences drag, to which the linear law (force is proportional to the velocity of the object) applies for low enough velocities, while for high velocities the quadratic law applies (force is proportional to the square of the velocity of the object). Both laws can be logically derived from the Navier–Stokes nonlinear partial differential equation, i.e. from its approximations. However, when the object moves through an ideal gas, the drag force can also be estimated from the microscopic picture. This has been done in the present Monte Carlo simulation, in the process integrating different sciences: statistical thermodynamics, mechanics and numerical methods.

Keywords: Monte Carlo, drag, ideal gas, statistical thermodynamics

Uvod

Monte Carlo (MC) teoretične simulacije v fiziki in drugih vedah nam omogoča v programsko opremo računalnika vgrajeni generator naključnih števil (GNŠ) [1, 2]. Ta nam s ponavljanjem daje vedno nova enakomerno porazdeljena racionalna (praktično lahko rečemo kar realna) števila med 0 in 1. Čeprav je algoritem za ta števila

seveda točno določen (determinističen), imamo vseeno vtis, da so števila, ki nam jih daje GNŠ, naključna. S temi števili potem z ustrežno funkcijsko pretvorbo generiramo katerokoli naključno fizikalno spremenljivko z znano verjetnostno porazdelitvijo. MC-simulacije v fiziki in v vedah, povezanih s fiziko, uporabljajo npr. pri teoretičnem preučevanju mehanskih lastnosti ma-

terialov (porazdelitev trdnosti in drugo), perkolacijski teoriji, raziskavah faznih prehodov tekočih kristalov, feroelektričnih in feromagnetnih materialov (razni spinski modeli) itd. Zanimiv primer uporabe MC-simulacij so razni fizikalni problemi v statistični termodinamiki. To je veda, ki se ukvarja z mikroskopskim opisom gibanja gradnikov snovi v kateremkoli agregatnem stanju in je izhodišče za termodinamične zakone v makroskopski (fenomenološki) termodinamiki [3]. Značilen zgled je obravna gibanja posameznih molekul idealnega plina v zaprti posodi s homogenim tlakom in temperaturo, iz česar izhaja splošno znana in dokaj preprosta plinska enačba. Ker je statistična termodinamika osnovana na verjetnostnem računu, so MC-simulacije zelo primerne zanj. V konkretnem primeru posode z ravnimi stenami lahko iz mikroskopske slike, to je z obravnavo trkov posameznih molekul ob steno, izračunamo tlak plina na steno – to je pravzaprav bistvo plinske enačbe. Lahko pa naredimo še korak dlje: izračunamo lahko silo plina na telo, ki se giblje skozenj. S tem lahko na mikroskopskem nivoju preverimo veljavnost linearnega in kvadratnega zakona upora, ne da bi morali reševati zapleteno Navier-Stokesovo parcialno diferencialno enačbo [4]. Naloga je zelo poučna tudi z didaktičnega vidika, predvsem za srednješolce in študente prvega letnika naravoslovnih in tehničnih smeri, saj gre za povezavo različnih vej fizike pa še za uporabo informacijsko-komunikacijske tehnologije [5-7]. Učitelj lahko to simulacijo opiše in prikaže npr. pri obravnavi gibalne količine in trkov ali pa pri termodinamiki.

Linearni in kvadratni zakon upora

Pri majhnih hitrostih gibanja telesa skozi tekočino (plin ali kapljevino) gre za silo upora zaradi viskoznosti sredstva [8]. Vzrok za to silo je trenje med plastmi tekočine v okolici telesa, ki se relativno gibljejo ena glede na drugo. Tik ob površju telesa se tekočina namreč lepi na telo in se giblje skupaj z njim, dovolj daleč od njega pa tekočina miruje; vmes imajo zato različne plasti tekočine različne hitrosti. Silo upora tekočine na telo zapišemo v tem primeru v splošnem z enačbo:

$$F_{u1} = kL\eta v \quad (1)$$

Pri tem je L značilna linearna dimenzija telesa, η viskoznost tekočine, v hitrost telesa, k pa ustrezen številski koeficient, med drugim odvisen od oblike telesa. Če gre npr. za gibanje kroglice s polmerom R skozi tekočino, vzamemo v enačbi (1) $L = R$ in $k = 6\pi$ ter zapišemo Stokesovo enačbo: $F_u = 6\pi R\eta v$. Pri velikih hitrostih pa linearni zakon upora, enačba (1), ni več uporaben. Zaradi večjih medsebojnih relativnih hitrosti plasti tekočine hitro pride do turbulentnega toka, plasti tekočine se »odlepijo« od telesa itd. Za upor tekočine na telo ni več bistvena viskozna sila, temveč zastojni tlak, kar je neka razlika tlačnih sil na sprednjo in zadnjo stran telesa (glede na smer gibanja) in jo približno izračunamo z

Bernoullijevo enačbo. Zastojni tlak in z njim sila upora sta sorazmerna s kvadratom hitrosti telesa [8]:

$$F_{u2} = \frac{1}{2} C_u \rho S v^2 \quad (2)$$

Pri tem je S največji prečni prerez telesa (pravokotno na smer gibanja), ρ pa gostota tekočine. Vpeljali smo tudi koeficient upora C_u , ki je odvisen od oblike telesa in katerega vrednosti za najznačilnejše aerodinamične oblike najdemo na spletu. Katera sila, (1) ali (2), prevladuje pri neki hitrosti, najelegantneje ugotovimo z njunim razmerjem. Sili torej delimo med seboj, v količniku F_{u2}/F_{u1} izpustimo številske faktorje, za prečni prerez vzamemo še oceno $S \approx L^2$ in dobimo Reynoldsovo število: $Re = \rho L v / \eta$. Če je torej število Re dovolj veliko (navadno zaradi gotovosti vzamemo oceno $Re > 1000$), potem dobro velja kvadratni zakon upora (2). Za $Re < 1$ pa dobro velja linearni zakon upora (1). Vmesno območje, $1 < Re < 1000$, je glede preproste ocene upora bolj negotovo in si raje pomagamo z numeričnimi simulacijami in eksperimentom.

Maxwellova porazdelitev hitrosti molekul v idealnem plinu

Obravnavajmo enostavni plin, na primer dušik, s homogeno temperaturo, npr. $T = 300$ K. Iz statistične termodinamike izhaja, da je povprečna hitrost molekul sorazmerna s korenem absolutne temperature. Pri 300 K je groba ocena hitrosti za molekule dušika (N_2): $v \approx 500$ m/s. Pri kisikovi molekuli O_2 ne izračunamo bistveno drugačne vrednosti; hitrost molekule je sicer odvisna tudi od njene mase, vendar pa je razlika med masama molekul N_2 in O_2 le okrog 14 %. Značilno je tudi to, da vse molekule niso enako hitre, temveč so njihove hitrosti naključno porazdeljene po Maxwellovi porazdelitvi [9]:

$$p(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) \quad (3)$$

Simbol m v enačbi (3) označuje maso molekule, k pa je Boltzmannova konstanta: $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ J/K. Funkcija $p(v)$ ima pomen verjetnostne gostote: če to funkcijo integriramo med dvema vrednostma hitrosti, v_1 in v_2 , njen integral pomeni verjetnost, da bo imela naključno izbrana molekula hitrost v območju $v_1 \leq v \leq v_2$. Graf funkcije (3) v brezdimenzijski obliki je prikazan na sliki 1. Funkcija $p(v)$ je pri majhnih hitrostih kvadratna, $p \propto v^2$, saj je eksponentni faktor približno enak 1. Pri velikih hitrostih funkcija hitro pada, pri neki hitrosti v_M pa ima izrazit maksimum. To hitrost izračunamo z zahtevo, da je odvod dp/dv enak 0:

$$v_M = \sqrt{\frac{2kT}{m}} \quad (4a)$$

Vrednost funkcije pri tej hitrosti je:

$$p_M = \frac{4}{e\sqrt{\pi} \cdot v_M} \quad (4b)$$

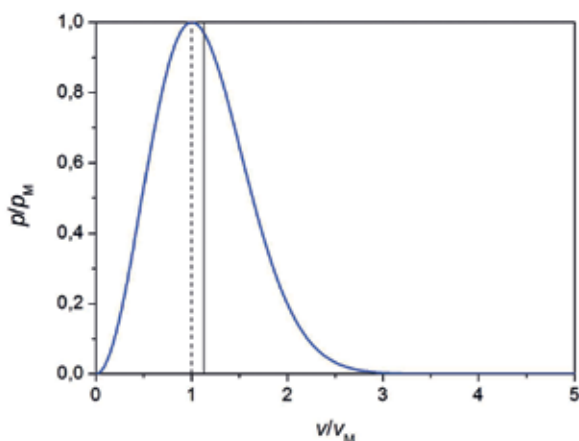
Simbol e v zadnji enačbi označuje osnovo naravnega logaritma. Funkcijo (3) zapišimo v brezdimenzijski obliki, primerni za grafični prikaz:

$$\frac{p(v)}{p_M} = e \cdot \left(\frac{v}{v_M}\right)^2 \cdot \exp\left[-\left(\frac{v}{v_M}\right)^2\right] \quad (5)$$

Omenimo še, da povprečno hitrost $\bar{v}$ molekul izračunamo takole:

$$\bar{v} = \int_0^\infty v p(v) dv = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \quad (6)$$

Zaradi asimetrije funkcije $p(v)$ sta omenjeni hitrosti različni: $\bar{v} \approx 1,13 v_M$.



Slika 1: Graf verjetnostne gostote v brezdimenzijski obliki pri Maxwelllovi porazdelitvi; črtna navpična črta označuje hitrost (v_M) z največjo vrednostjo funkcije $p(v)$, polna navpična črta pa povprečno hitrost ($\bar{v}$).

Poleg Maxwelllove porazdelitve velikosti hitrosti molekul pri značilni MC-simulaciji idealnega plina upoštevamo še, da so smeri vektorja hitrosti molekul izotropno porazdeljene, to pomeni, da so vse smeri enakovredne. V MC-simulaciji moramo poleg začetnih vektorjev hitrosti molekul z GNŠ postaviti tudi naključne lege, enakomerno porazdeljene po simulacijski celici. Ko so tako postavljeni začetni pogoji (vektor lege in hitrosti za vsako molekulo), plin prepustimo samemu sebi. Molekule se gibljejo premo enakomerno, razen v trenutku trka s steno ali oviro. Vpliv teže lahko povsem zanemarimo. To preverimo npr. tako, da primerjamo razliko potencialnih energij molekul na različnih višinah v posodi in značilno kinetično energijo. Naj bo višina posode 1 m, značilna hitrost molekul pa 500 m/s, kot smo ocenili zgoraj za dušik. Opazujemo torej razliko potencialnih energij dveh molekul pri višinski razliki 1 m in jo primerjamo s povprečno kinetično energijo: $\Delta W_p/W_k = (mgh)/(mv^2/2) = 2gh/v^2 \approx 8 \cdot 10^{-5}$. Potencialno energijo res lahko zanemarimo.

MC-simulacija zračnega upora

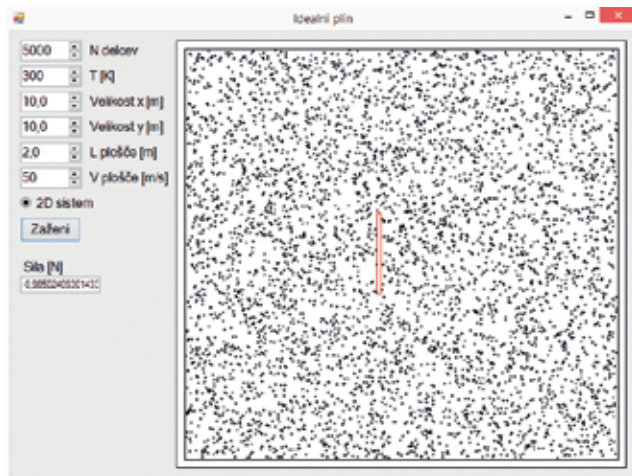
Namesto tridimenzionalne (3D) obravnave problema smo si zaradi nazornosti raje izbrali dvodimenzionalni (2D) prikaz in simulacijo. Kot simulacijsko celico s plinom smo torej vzeli kvadrat s stranico 10 m. Kot smo že omenili, smo na začetku z GNŠ vsaki molekuli priredili začetne pogoje: dve koordinati, x in y , hitrost v na osnovi porazdelitve (3), smer vektorja hitrosti pa smo podali s kotom glede na os x . To pomeni, da smo za vsako molekulo plina potrebovali štiri naključna števila GNŠ. Poleg tega smo v simulacijsko celico dodali majhno ploščico (ozek pravokotnik v dvodimenzionalnem prikazu), ki se je gibala enakomerno z določeno hitrostjo v vodoravni smeri (os x). Pri izpeljavi sile plina na ploščico smo si pomagali s teorijo prožnih trkov, podobno kot pri izpeljavi tlaka plina na stene posode. Naj se torej ploščica (telo) giblje s hitrostjo $\mathbf{v}_t = (v_t, 0)$ v desno. Vanjo naj od »zadaj« trči molekula plina s hitrostjo $\mathbf{v} = (v_x, v_y)$, kjer je $v_x > v_t$. Ker je trk prožen in ker je molekula neprimerljivo lažja od ploščice, se molekula odbije nazaj s hitrostjo $\mathbf{v}' = (2v_t - v_x, v_y)$. Ta hitrost izhaja iz zakona o ohranitvi kinetične energije in gibalne količine. Sunek sile molekule na ploščico v smeri osi x je torej: $F \Delta t = m(v_x - v_x') = 2m(v_x - v_t)$. Molekule, ki trčijo v ploščico od »spredaj«, v povprečju delujejo na ploščico z večjo absolutno vrednostjo sunka sile kot tiste, ki jo zadenejo od zadaj. Zanje velja enaka enačba kot za trke od »zadaj«, če prav upoštevamo predznake komponent hitrosti. V času t naj ploščico zadene M molekul, ki jih označimo z indeksom i . Tedaj je sila na ploščico:

$$F = \frac{2m}{t} \sum_{i=1}^M (v_{x,i} - v_t) \quad (7)$$

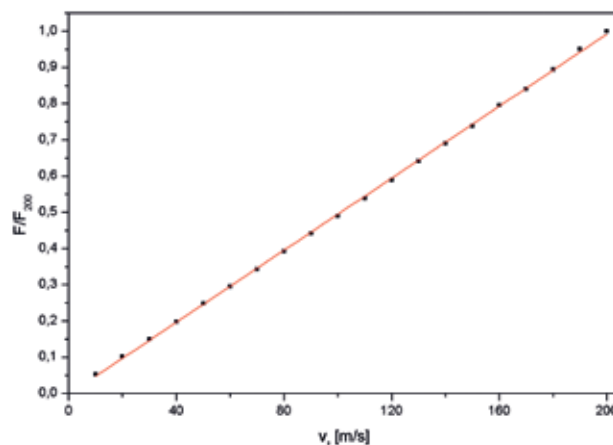
Čeprav je ta sila negativna, saj sila na ploščico deluje v nasprotno smer od njenega gibanja, smo na grafih silo upora prikazali kot pozitivno količino. Ker je simulacijska celica (posoda) končna, moramo upoštevati tudi, kaj se zgodi, ko molekula prileti do mejne ploskve. Uporabili smo dva različna načina obravnave takšnih primerov. Pri prvem načinu spremenimo predznak komponente hitrosti v tisti smeri, v kateri je molekula zapustila mejo celice. Če npr. molekula prekorači mejo, ki je pravokotna na os x , se komponenti v_x po trku samo zamenja predznak, komponenta v_y pa ostane nespremenjena. S takim načinom obravnavamo mejo kot steno zaprte posode. Drugi način pa je, da molekulo premaknemo na nasprotno stran meje, ki jo je presegla: če npr. molekula prekorači desno mejo, pravokotno na os x , potem jo premaknemo na levo mejo pravokotno na os x na enaki višini. Tako simuliramo neskončni sistem, v katerem je simulacijska celica osnovna celica, ki se neskončno ponavlja v obe smeri. Po pričakovanju se je izkazalo, da dobimo v obeh primerih enake vrednosti sile upora.

Uporabili smo programski paket Microsoft Visual Studio 2010 v programskem jeziku C#. Izbrali smo število molekul $N = 10^4$ v kvadratu s stranico $a = b = 10$ m. Če

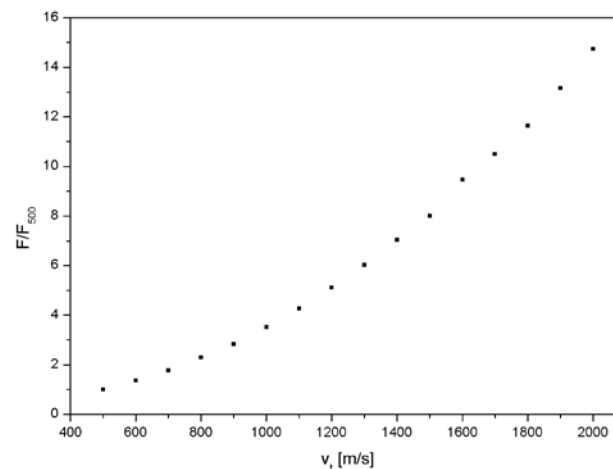
si npr. mislimo, da je tretja stranica kvadra, ki je nismo prikazali, enaka $c = 1$ m, potem je prostornina kvadra $V = a^2c = 100 \text{ m}^3$ in je številna gostota molekul na prostorninsko enoto: $n = N/V = 100/\text{m}^3$. To je majhna vrednost v primerjavi z realnimi razmerami, kjer je navadno n velikostnega reda $10^{25}/\text{m}^3$. Lahko bi vzeli npr. kvader s stranicami $a = b = 1$ mm, $c = 1$ mm, pa bi takoj imeli večjo prostorninsko gostoto molekul, $n = 10^{16}/\text{m}^3$, a še vedno precej manj od $10^{25}/\text{m}^3$. Lahko izberemo renormalizirano (precej večjo) maso molekul, kot je v resnici, pa dobimo enak učinek pri manjši prostorninski gostoti molekul. Izbrali smo vrednost mase $m = 10^{-10}$ kg. A tu nam ne gre za absolutne vrednosti fizikalnih količin, posebno sile na ploščico, temveč za to, kako se relativna vrednost sile spreminja s hitrostjo. Lege molekul (točk v modelu) in ploščice v nekem trenutku simulacije so prikazane na sliki 2, vrednosti sil pa na slikah od 3 do 5. Na sliki 3, kjer so hitrosti ploščice manjše od 200 m/s, je graf $F(v_t)$ prikazan v navadni obliki in linearna odvisnost sile od hitrosti je očitna. Torej za $v_t < 200$ m/s dobro velja linearni zakon upora. Na sliki 4 je prikazan graf $F(v_t)$ za hitrosti ploščice, večje od 500 m/s. Graf ni linearen. Ali je $F(v_t)$ potenčna funkcija, najlažje preverimo tako, da graf narišemo v logaritemskem merilu (slika 5). Linearna odvisnost v logaritemskem diagramu res dokazuje potenčno odvisnost sile od hitrosti, smerni koeficient premice, ki podaja eksponent, pa je v našem računu $k = 1,97 \pm 0,02$. To je res zelo blizu pravi vrednosti 2, torej v tem območju hitrosti odlično velja kvadratni zakon upora.



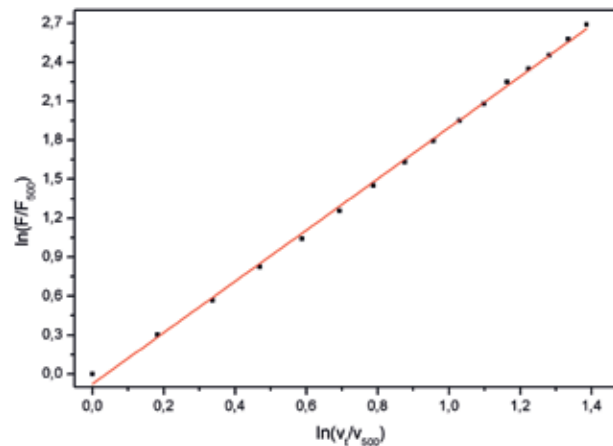
Slika 2: Trenutna razporeditev 10^4 molekul plina v 2D modelu in lega ploščice (tanek pravokotnik), ki se nato začne enakomerno gibati v desno. Simulacijo najdete na spletni strani: http://distance.pfmb.uni-mb.si/av/fizika/idealni_plin_simulacija1.mp4. Sila, ki jo program prikazuje levo spodaj, je trenutna sila pri zgoraj določenih podatkih (npr. pri dani hitrosti ploščice), katere vrednost zaradi statističnih fluktuacij nekoliko niha.



Slika 3: Graf odvisnosti sile upora od hitrosti ploščice: sila je normalizirana glede na silo pri hitrosti 200 m/s. Točke pomenijo izračunane vrednosti sile, premica med njimi pa je najboljši približek linearne funkcije.



Slika 4: Graf odvisnosti sile upora od hitrosti ploščice pri večjih hitrostih: sila je normalizirana glede na silo pri hitrosti 500 m/s.



Slika 5: Graf odvisnosti sile upora od hitrosti ploščice pri večjih hitrostih v logaritemski skali. Že na pogled je videti, da je koeficient ustrezne premice blizu vrednosti 2.

Hitrosti na slikah 3 do 5 so pretirane, saj so npr. na slikah 4 in 5 največje hitrosti ploščice neprimerno večje od povprečne hitrosti molekul plina N_2 pri navadnih temperaturah. Opozoriti pa moramo še na nekaj. Čeprav smo z MC-simulacijo ugotovili, da je pri dovolj majhnih hitrostih objekta sila upora sorazmerna s hitrostjo, pa ta simulacija vseeno ni prava razlaga linearnega zakona upora (1). S simulacijo smo namreč upoštevali trke molekul ob telo in npr. od stene posode, ne pa tudi medsebojnih trkov molekul. Za viskoznost idealnega plina pa so pomembni ravno slednji, saj določajo »notranje trenje« med molekulami zaradi različnih povprečnih hitrosti plasti plina ob telesu. Viskoznost plina je odvisna od efektivnega premera molekul za medsebojne trke, v naši MC-simulaciji pa smo računali, kot da so molekule točkaste in se vedno »zgrešijo«.

Da pri majhnih hitrostih ploščice pridemo do linearnega zakona upora (namesto kvadratnega zakona), ki pa nima nobene zveze z viskoznostjo, je mogoče dokazati s preprosto analitično oceno in z uporabo enačbe (7), če upoštevamo, da imajo molekule, ki zadenejo ploščico od zadaj, v povprečju manjšo relativno hitrost glede na ploščico kot tiste, ki ploščico zadenejo od spredaj. Mogoče je torej, da imajo direktni trki molekul ob telo tudi prispevek k linearnemu zakonu upora, a je ta prispevek manjši kot tisti zaradi viskoznosti.

Sklep

Pokazali smo, da je z Monte Carlo simulacijo, s katero obravnavamo mikroskopsko gibanje idealnega plina,

mogoče na poučen način preveriti linearni zakon upora pri majhnih hitrostih telesa in kvadratni zakon upora pri velikih hitrostih. Uporabili smo preprostejši dvodimenzionalni model, čeprav bi bila razširitev na tri dimenzije relativno enostavna. Če pa bi hoteli izračunati koeficient upora v enačbi (2) za kvadratni zakon upora za telesa znanih aerodinamičnih oblik, bi seveda morali računati v treh dimenzijah. Zavedati se moramo tudi, da opisana simulacija ne daje realistične razlage za linearni zakon upora, saj viskoznost plina razložimo z medsebojnimi trki molekul, ki jih tu nismo mogli upoštevati. Molekule smo namreč obravnavali kot točkasta telesa. Naj omenimo še, da smo se lotili tudi simulacij v treh dimenzijah, npr. pri gibanju elipsoida s tremi različnimi polosmi skozi plin. Ta problem je matematično zahtevnejši, npr. zato, ker je sunek sile molekule plina na elipsoid odvisen od mesta, kjer molekula zadene elipsoid. Prvi rezultati potrjujejo, kar smo že ugotovili za dvodimenzionalni sistem: pri majhnih hitrostih elipsoida velja linearna odvisnost sile upora od hitrosti, pri velikih hitrostih pa kvadratna.

Prikaz dvodimenzionalne simulacije s programom, ki ga lahko prenesete na svoj računalnik, je na spletni strani: http://distance.pfmb.uni-mb.si/av/fizika/idealni_plin_simulacija1.mp4.

Program za realno simulacijo na vašem računalniku (za potrpežljivega bralca, ker ta simulacija teče počasneje) v stisnjeni obliki pa najdete na spletni strani: <https://www.dropbox.com/s/tduf6l07g5gi2wx/Idealni%20plin.zip?dl=0>.

Viri

- [1] https://en.wikipedia.org/wiki/Monte_Carlo_method
- [2] Ambrožič, M. (2013). Računalniška simulacija naključnosti. *Življenje in tehnika*, maj 2013, l. 64, št. 5, str. 38-44.
- [3] https://en.wikipedia.org/wiki/Statistical_mechanics
- [4] https://en.wikipedia.org/wiki/Navier%E2%80%93Stokes_equations
- [5] Gerlič, I. (2000). *Sodobna informacijska tehnologija v izobraževanju*. Ljubljana: DZS.
- [6] Svetlik, I. (2006). *O kompetencah, Vzgoja in izobraževanje*. 1/2006. Ljubljana: Zavod RS za šolstvo.
- [7] Grubelnik, V. (ur.) (2010). *Opredelitev naravoslovnih kompetenc* (znanstvena monografija projekta RNK). Maribor: Fakulteta za naravoslovje in matematiko.
- [8] Strnad, J. (2003). *Mala fizika 1, Učbenik za pouk fizike v 1. in 2. letniku gimnazij in srednjih šol*. Ljubljana: DZS.
- [9] https://en.wikipedia.org/wiki/Maxwell%E2%80%93Boltzmann_distribution