

# ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВЕСОВЫХ СХЕМ МОНТЕ–КАРЛО ДЛЯ СЛАБОИОНИЗОВАННЫХ РАЗРЕЖЕННЫХ ТЕЧЕНИЙ ГАЗА<sup>1)</sup>

© 2024 г. А. А. Шевырин<sup>1,\*</sup>, Е. А. Бондарь<sup>1</sup>

<sup>1</sup>630090 Новосибирск, ул. Институтская, 4/1, Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, Россия

\*e-mail: shevr@itam.nsc.ru

Поступила в редакцию 23.11.2023 г.

Переработанный вариант 18.03.2024 г.

Принята к публикации 03.04.2024 г.

Представлено описание процедур метода прямого статистического моделирования Монте–Карло слабоионизованных течений, возникающих при обтекании возвращаемых космических аппаратов. Для реакций ионизации и рекомбинации приводятся выражения для модельной зависимости вероятности реакций от скоростей и энергий реагентов. Представлен алгоритм диссоциативной рекомбинации, вычислительная эффективность реализации которого достигается обходом моделирования взаимодействия электронов и тяжелых частиц. Изложен подход к построению весовой схемы для упругих столкновений и химических реакций, которая существенно повышает вычислительную эффективность расчетов. Представлен пример использования описанных численных моделей и процедур для исследования слабоионизованного течения около возвращаемой капсулы в типичных условиях входа орбитальных космических аппаратов. Результаты расчетов сравниваются с данными измерений параметров плазмы в летном эксперименте. Библ. 32. Фиг. 4. Табл. 1.

**Ключевые слова:** весовые схемы, высотная аэротермодинамика, ионизация, метод прямого статистического моделирования Монте–Карло, неравновесное течение газа, низкотемпературная плазма, рекомбинация заряда.

DOI: 10.31857/S0044466924070157, EDN: xhxkek

## ВВЕДЕНИЕ

При разработке и эксплуатации пилотируемых возвращаемых космических аппаратов необходимо исследование их аэротермодинамики, а также предсказание участков траектории спуска с возможным экранированием радиосвязи. Такие комплексные численные исследования включают в себя расчет обтекания аппаратов. Верхний участок траектории характеризуется влиянием разреженности и неравновесности течения, поэтому необходимо применение кинетического подхода к описанию газа. Основным численным методом, реализующим такой подход, является метод прямого статистического моделирования Монте–Карло (ПСМ) (см. [1]).

В программном комплексе SMILE++ (см. [2], [3]), разработанном в ИТПМ СО РАН, имплементирован метод ПСМ с учетом основных физико-химических процессов: возбуждение внутренних степеней свободы молекул газа (см. [4]), химические реакции в газовой фазе (см. [5], [6]) и на поверхности аппарата (см. [7], [8]), ионизация (см. [9]) и тепловое излучение газа (см. [10]).

Решение, получаемое методом ПСМ, должно удовлетворять уравнениям сохранения. Уравнения сохранения массы, импульса и энергии ионизованного газа в наиболее общем виде приводятся в работе [11]. Анализ этих уравнений для течений около возвращаемых космических аппаратов проводился неоднократно (см., например, [12], [13]). Применительно к реализации моделей метода ПСМ вопрос рассмотрен в работе [14].

Для расчета электрически нейтральных ионизованных течений методом ПСМ для заряженных частиц используется упрощенный подход (см. [15]), в котором электроны не моделируются как частицы, а концентрация электронов оценивается как сумма концентраций ионов. Дальнейшее развитие этого подхода состоит в учете различных процессов, связанных с появлением, исчезновением

<sup>1)</sup>Работа выполнена в рамках государственного задания ИТПМ СО РАН с использованием оборудования ЦКП “Механика” (ИТПМ СО РАН).

заряженных частиц (см. [16]), а также учетом электронного транспорта (см. [17]). Адекватное моделирование переноса энергии электронами может быть важно не только для определения характеристик плазмы около обтекаемого аппарата, но также и при расчете теплового излучения газа (см. [18]).

Ранее нами в [14] был предложен подход, состоящий в сопряженном моделировании нейтральной плазмы методом ПСМ и решении уравнения на энергию свободных электронов в континуальном приближении. Получены условия применимости этого подхода, и показано их выполнение для течений около спускаемых космических аппаратов при параметрах обтекания, когда ионизация становится заметной. В настоящей работе основной акцент сделан на описании используемых процедур. При этом анализ физических аспектов применения приближенных моделей метода ПСМ представлен в предыдущих работах и здесь детально рассматриваться не будет.

Целью работы является описание численных процедур, имплементированных в программном комплексе SMILE++, связанных с моделированием появления и исчезновения ионов в слабоионизованных течениях: ассоциативной ионизации и диссоциативной рекомбинации. Реализация обеих реакций основана на идеях модели полной столкновительной энергии (Total collision energy, TCE [1]) и температурной зависимости скорости реакции с коэффициентом в форме обобщенной аррениусовской зависимости  $k(T) = AT^B \exp\left(\frac{-E_a}{k_B T}\right)$ . Наиболее сложным аспектом в реализации являлась необходимость повышения числа моделирующих частиц для заряженных компонентов, использования весовых схем метода ПСМ.

Применение представленных численных моделей для расчета плотности плазмы около спускаемых аппаратов продемонстрировано на примере обтекания капсулы RAM C-II. Полученные результаты демонстрируют необходимость применения весовых схем в расчетах методом ПСМ и соответствие расчетных данных результатам летного эксперимента.

## 1. МОДЕЛИРОВАНИЕ ИОНИЗОВАННЫХ ТЕЧЕНИЙ МЕТОДОМ ПСМ

### 1.1. Модель ассоциативной ионизации

В ударном слое перед обтекаемым аппаратом вследствие диссоциации молекул образуются атомы азота и кислорода. При столкновении атомов могут образовываться соответствующие молекулярные ионы.

В модели TCE предполагается, что если распределение энергии реагентов равновесное, то константа скорости реакции  $k(T)$  будет иметь температурную зависимость в форме Аррениуса с заданными параметрами. Константы скорости рассматриваемых реакций взяты из [19] и приведены в табл. 1.

**Таблица 1.** Параметры константы скоростей реакций  $k(T) = AT^B \exp\left(\frac{-E_a}{k_B T}\right)$  по [19]

Реакция	Ионизация			Рекомбинация		
	$A, \text{ м}^3/\text{с}$	$B$	$E_a, \text{ Дж}$	$A, \text{ м}^3/\text{с}$	$B$	$E_a, \text{ Дж}$
$\text{N} + \text{O} \leftrightarrow \text{NO}^+ + e$	$8.766 \times 10^{18}$	0	$4.416 \times 10^{-19}$	$1.321 \times 10^{-9}$	-1.187	0
$\text{N} + \text{N} \leftrightarrow \text{N}_2^+ + e$	$3.387 \times 10^{17}$	0	$9.346 \times 10^{-19}$	$7.274 \times 10^{-12}$	-0.65	0

Для реакций ассоциативной ионизации  $A + B \rightarrow AB^+ + e$  вероятность  $P_r(E_c)$  для сталкивающихся частиц-реагентов как функция энергии  $E_c$  сталкивающейся пары в системе ее центра масс удовлетворяет выражению для константы скорости реакции

$$k(T) = \int_0^\infty P_r(E_c) f_c^{\text{eq}}(T, E_c) dE_c, \quad (1)$$

где  $f_c^{\text{eq}}(T, E_c)$  — плотность равновесного распределения  $f_c(E_c)$ , нормированная на единицу. Индекс  $c$  показывает, что распределение соответствует *сталкивающимся* частицам. Такая функция распределения зависит от сечения столкновения  $\sigma$ , которое для модели переменных твердых сфер (VHS) и обратно-степенного потенциала взаимодействия пропорционально степени модуля относительной скорости  $g = |\mathbf{v}_B - \mathbf{v}_A|$ :  $\sigma \sim g^{-2\alpha}$ ,  $\alpha$  — справочный параметр, принятый равным 0.25. В настоящей

работе рассматриваются только ассоциативная ионизация атомов, поэтому число внутренних степеней свободы частиц А и В равно нулю. Равновесная функция распределения может быть выражена как (см. [1])

$$f_c(E_c) = \left(\frac{E_c}{k_B T}\right)^{1-\alpha} \frac{\exp\left(\frac{-E_c}{k_B T}\right)}{\Gamma(2-\alpha)k_B T}. \quad (2)$$

В модели ТСЕ предполагается, что

$$P_r(E_c) = C_1(E_c - E_a)^{C_2} \left(1 - \frac{E_a}{E_c}\right)^{1-\alpha}, \quad (3)$$

где константы  $C_1$  и  $C_2$  могут быть выражены через параметры аррениусовской зависимости из решения уравнения (1) с функцией распределения (2):

$$C_1 = \frac{\varepsilon A}{\sigma_{\text{ref}} k_B^{B-0.5+\alpha} T_{\text{ref}}^\alpha} \sqrt{\frac{m_r \pi}{8k_B}} \frac{\Gamma(2-\alpha)}{\Gamma(B+\frac{3}{2})}, \quad C_2 = B + \alpha - \frac{1}{2}. \quad (4)$$

Для данных табл. 1 параметр  $B = 0$  для всех трех реакций и сохранен в формулах для общности. В выражении (4),  $\varepsilon = 1/2$ , если реагенты — атомы одного сорта, и единице — если разного.

Реакция ассоциативной ионизации для *сталкивающихся* атомов реализуется с вероятностью  $P_r(E_c)$ , а с дополнительной вероятностью происходит столкновение без химической реакции. Реализация состоит в следующем. Создается ион  $AB^+$ , имеющий скорость, равную скорости центра масс атомов-реагентов А и В. Импульсом свободного электрона мы пренебрегаем. Энергия атомов  $E_c$  уменьшается на величину теплового эффекта реакции, равного энергии активации  $E_a$ . Оставшаяся энергия распределяется между колебательными, вращательными модами образованного иона и свободным электроном пропорционально их степеням свободы:  $E_c - E_a = E_i + E_e$ . Полученное значение энергии электрона  $E_e$  накапливается в ячейке для подсчета величины источника энергии свободных электронов, который может быть использован при решении уравнения на энергию электронов (см. [14]).

### 1.2. Модель диссоциативной рекомбинации

В отличие от реализации реакций ассоциативной ионизации в методе ПСМ, рекомбинация ионов  $AB^+ + e \rightarrow A + B$  требует учета взаимодействия с электронами, являющимися реагентом в реакции. В настоящей реализации столкновения с электронами не моделируются. Рекомбинация ионов и электронов выполнена в виде отдельной процедуры, следующей за столкновительной процедурой в ячейке (подробное обоснование модели приводится в работе [14]).

Число реакций  $\nu = -\left(\frac{\partial n_i}{\partial t}\right)_r$ , приходящихся на единицу объема и единицу времени, или частота реакций, полагается равным

$$\nu = n_i n_e \bar{\nu}_1 = n_i n_e \int_0^\infty \nu_1(E) f(E) dE, \quad (5)$$

где  $n_i$  и  $n_e$  — плотности ионов сорта  $i$  и электронов соответственно, а  $\bar{\nu}_1$  — среднее значение частоты реакции, приходящееся на единичные концентрации реагентов. Таким образом, частота рекомбинации электрона с энергией  $E_e$  и иона с энергией возбуждения внутренних мод иона  $E_i$  предполагается зависящей от суммы  $E = E_e + E_i$ . Локальное распределение  $E$  описывается плотностью распределения  $f(E)$ , нормированной на единицу.

В случае локального равновесия  $\bar{\nu}_1 = k(T)$ , где  $k(T) = AT^B \exp\left(\frac{-E_a}{k_B T}\right)$  — выражение Аррениуса. При температуре  $T$  в равновесном случае распределение  $f_{E_e} \sim \sqrt{E_e} \exp\left(\frac{-E_e}{k_B T}\right)$ , а распределение  $f_{E_i} \sim E_i^{\zeta/2-1} \exp\left(\frac{-E_i}{k_B T}\right)$ , где  $\zeta$  — число внутренних степеней свободы иона. Тогда плотность функ-

ции распределения величины  $E = E_e + E_i$

$$f_E^{\text{eq}} \sim \int_0^E (E - E_i)^{1/2} E_i^{\zeta/2-1} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) dE_i \sim E^{\zeta/2+1/2} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right). \quad (6)$$

С учетом нормировки

$$f_E^{\text{eq}} = \frac{E^{\zeta/2+1/2}}{(k_B T)^{\zeta/2+3/2} \Gamma(\zeta/2 + 3/2)} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right).$$

В настоящей работе используется модельная зависимость  $\nu_1(E) = C_1 E^{C_2}$ . Константы  $C_1$  и  $C_2$  определяются из условия равенства скорости реакции в равновесной плазме заданной температурной зависимости с параметрами (см. [19]), приведенными в табл. 1. Для этого зависимость Аррениуса  $k(T)$  приравнивается интегралу из (5) с функцией  $f(E) = f_E^{\text{eq}}$  (параметр  $E_a = 0$  для всех трех реакций):

$$k(T) = AT^B = \int_0^\infty C_1 E^{C_2} f_E^{\text{eq}} dE = C_1 (k_B T)^{C_2} \frac{\Gamma\left(\frac{\zeta}{2} + C_2 + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\zeta}{2} + \frac{3}{2}\right)},$$

$$C_1 = A \frac{\Gamma\left(\frac{\zeta}{2} + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\zeta}{2} + B + \frac{3}{2}\right) k_B^B}, \quad C_2 = B.$$

Заметим, что аргумент гамма-функции должен быть положительным, и это является одним из ограничений модели ТСЕ на параметры скоростей реакций (см. [16]). Данные работы [19], используемые в настоящей работе, показывают, что такая ситуация может возникнуть при рекомбинации ионов кислорода  $O_2^+ + e \rightarrow O + O$ , поскольку значение параметра  $B = -2.412$  для этой реакции достаточно малое. Для условий, рассматриваемых в настоящей работе, скорость образования  $O_2^+$  на порядок меньше, чем  $N_2^+$  и  $NO_2^+$  (см. [20]). Поэтому реакции  $O + O \leftrightarrow O_2^+ + e$  исключены из рассмотрения.

Приведем приближенную схему мажорантной частоты (см. [21]) для рекомбинации. Учитывая, что для всех рассматриваемых реакций  $B < 0$  и функция  $\nu_1(E) = C_1 E^B$  является убывающей, выберем  $E_{\min}$  такое, что количеством реакций с  $E < E_{\min}$  можно пренебречь. Для этого может быть использована приближительная оценка, основанная на равновесной функции распределения из оценки интеграла (5):

$$\frac{\int_0^{E_{\min}} \nu_1(E) f_E^{\text{eq}}(E) dE}{\int_0^\infty \nu_1(E) f_E^{\text{eq}}(E) dE} < \varepsilon, \quad (7)$$

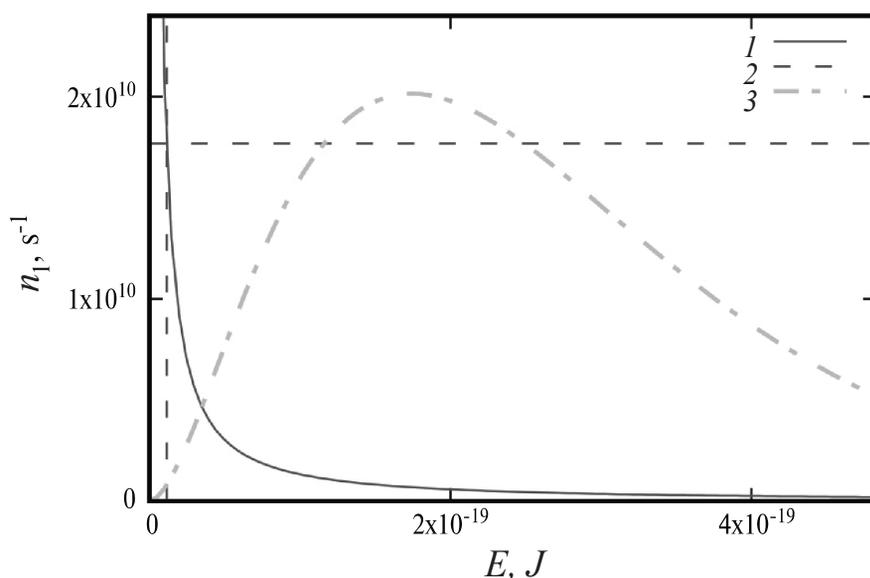
где  $\varepsilon$  — малое число. Для каждой реакции рекомбинации  $i$ -го иона из условия (7) определяется  $E_{\min} = E_{\min,i}$  и рассчитывается значение функции  $\nu_1(E = E_{\min,i}) = \nu_{1\max,i}$  для мажорирования подынтегрального выражения (5). На фиг. 1 на примере реакции  $NO^+ + e \rightarrow N + O$  приведена зависимость  $\nu_1(E) = C_1 E^B$  (линия 1). Величины  $E = E_{\min,i}$  и  $\nu_1 = \nu_{1\max,i}$  для значения  $\varepsilon = 0.02$  и  $T = 7000$  К показаны вертикальной и горизонтальной линиями 2. График функции  $f^{\text{eq}}(E)$  (линия 3, выражение (6)) в относительных единицах приводится с иллюстративной целью.

Рассмотрим ячейку объемом  $V_c$ . Пусть ячейка содержит  $N_i$  молекулярных ионов сорта  $i$ . При этом число электронов определяется из условия локальной нейтральности плазмы, т.е. по числу расположенных в ячейке ионов. Проведение реакций в каждой ячейке на временном шаге  $\Delta t$  выполняется циклическим повторением следующих пунктов процедуры. Перед выполнением счетчик реакций  $l = 0$ .

1. Определяется число электронов в ячейке как сумма числа ионов  $N_e = \sum N_i$ .
2. Определяется частота рекомбинации для каждой реакции в ячейке

$$\nu_{m,i} = F_n N_i (N_e - 1) \frac{\nu_{1\max,i}}{V_c}, \quad (8)$$

а также суммарная частота  $\nu_m = \sum \nu_{m,i}$ .



Фиг. 1. 1 – Функция  $v_1(E)$  для реакции  $\text{NO}^+ + e \rightarrow \text{N} + \text{O}$ ; 2 – значение  $E = E_{\min}$  (вертикальная линия) и  $v_1 = v_{1\max,i}$  (горизонтальная линия); 3 – равновесное распределение  $f^{\text{eq}}(E)$  в произвольных единицах. Пример для  $T = 7000$  К.

3.  $l = l + 1$ . Время до следующей реакции  $\tau_l$  разыгрывается случайным образом по плотности вероятности  $v_m \exp(-v_m \tau_l)$ .

4. Если  $\sum \tau_l > \Delta t$ , то процедура в данной ячейке прекращается. Иначе проводится переход по времени на  $\tau_l$ :

- с вероятностью пропорциональной  $v_{m,i}$  определяется одна из реакций  $i$ , выбирается один ион сорта  $i$  из  $N_i$ ;
- по значению температуры  $T_e$  в ячейке и распределению  $f_{E_e}$  выбирается энергия электрона  $E_e$ ;
- вычисляется  $E = E_e + E_i$  – сумма энергии электрона и энергии внутренних степеней свободы иона, определяется  $v_1 = CE^B$ ;
- реакция выполняется с вероятностью  $\frac{v_1}{v_{1\max,i}}$ , а с дополнительной вероятностью реагенты остаются без изменения.

## 2. ВЕСОВАЯ СХЕМА

Число моделирующих частиц в расчете методом ПСМ определяется параметром  $F_n$ , выражающим отношение числа моделирующих частиц к числу молекул газа (см. [21]). Необходимое число моделирующих молекул определяется исследованием сходимости по числу частиц (см. [22]). Значение параметра  $F_n$  при этом удовлетворяет различным условиям (см., например, [23], [24]), которые однако дают более-менее близкие друг к другу значения.

Введение различных значений  $F_n$  для различных сортов (т.н. весовые схемы метода ПСМ) обычно требуется для повышения объема статистики компонент газовой смеси, которые присутствуют в следовых количествах, без существенного увеличения временных затрат на проведение расчета. При использовании вышеописанной численной модели, основанной на отделенной от столкновений реализации реакций для слабоионизованных течений (степень ионизации – сотые и тысячные процента), требования на  $F_n$  становятся очень строгими, поскольку ионы и электроны исчезают в процессе реакции. Если даже выбор параметра  $F_n$  обеспечивает корректное моделирование нейтральных компонентов, то для следовых заряженных частиц выбор возможных реагентов в ячейке будет существенно ограничен. Это приведет к занижению скорости реакции в сравнении с требуемыми значениями, а следовательно, к превышению концентрации плазмы в ударном слое.

При реализации весовой схемы предполагалось, что каждая компонента имеет значение  $F_{ni}$ , которое может отличаться от других. Во входных данных указывается во сколько раз  $F_{ni}$  меньше “глобального”, значения  $F_n$ , а программная реализация предполагает, что их отношение является целым числом — степенью двойки  $\frac{F_n}{F_{ni}} = 2^{w_i}$ ,  $w_i$  — целое.

Рассмотрим сначала реализацию весовой схемы для столкновений. Затем опишем ее реализацию для бинарных химических реакций.

### 2.1. Весовая схема для упругих столкновений

Частота столкновений частицы сорта  $i$  в газе частиц сорта  $j \neq i$  с плотностью  $n_j$  равна  $v_{1ij} = n_j \overline{\sigma(g)g}$ , где  $g$  — относительная скорость частиц, а черта сверху обозначает осреднение по скоростям частиц сорта  $j$  (см. [25]). Пусть в столкновительной ячейке объема  $V_c$  число частиц  $N_i$  и  $N_j$  для этих сортов. При одинаковых значениях  $F_n$  для этих сортов ожидаемое число столкновений  $N_{ij}$  моделирующих частиц в ячейке за время  $\Delta t$  будет соответствовать частоте столкновений молекул в газе как

$$\frac{F_n N_{ij}}{V_{cell}} = n_i v_{1ij} \Delta t = \frac{N_i F_n}{V_{cell}} \cdot \frac{N_j F_n}{V_{cell}} \overline{\sigma(g)g} \Delta t. \quad (9)$$

Здесь используется оценка концентрации частиц через их число в ячейке  $n_i = N_i \frac{F_n}{V_{cell}}$ , а  $\overline{\sigma(g)g}$  теперь среднее по частицам сорта  $i$  и  $j$ .

Выражение (9) может быть обобщено для различных  $F_n$  как

$$F_{n,coll} \frac{N_{ij}}{V_{cell}} = n_i n_j \overline{\sigma(g)g} V_{cell} \Delta t = \frac{N_i F_{ni}}{V_{cell}} \cdot \frac{N_j F_{nj}}{V_{cell}} \overline{\sigma(g)g} \Delta t. \quad (10)$$

Из (10) можно получить выражение для числа столкновений моделирующих частиц

$$N_{ij} = N_i N_j \frac{F_{ni} F_{nj}}{F_{n,coll}} \overline{\sigma(g)g} \frac{\Delta t}{V_{cell}}. \quad (11)$$

Если положить  $F_{n,coll} = \min(F_{ni}, F_{nj})$ , то  $\frac{F_{ni} F_{nj}}{F_{n,coll}} = \max(F_{ni}, F_{nj})$ . Как обычно для схем мажорантной частоты, введем число потенциальных столкновений через оценку сверху

$$\{N_{ij}\}_{\max} = N_i N_j \max(F_{ni}, F_{nj}) \overline{\sigma(g)g}_{\max} \frac{\Delta t}{V_{cell}}. \quad (12)$$

Тогда, на основе (12), в ячейке для выполнения столкновений производится расчет мажорантой частоты столкновений сортов  $i$  и  $j$ , при этом вместо параметра  $F_n$  используется  $\max(F_{ni}, F_{nj})$ :

$$v_{m,ij} = \max(F_{ni}, F_{nj}) N_i N_j \frac{\{\sigma(g)g\}_{\max}}{V_c},$$

а также суммарной частоты  $v_m = \sum_{i,j \leq i} v_{m,ij}$ . При  $i = j$  число возможных пар  $N_i N_j$  заменяется на  $N_i \frac{N_i - 1}{2}$  (см. [21]):

$$v_{m,ii} = F_{ni} \left[ N_i \frac{N_i - 1}{2} \right] \frac{\{\sigma(g)g\}_{\max}}{V_c}.$$

Реализация столкновений в ячейке на временном шаге  $\Delta t$  состоит в повторении следующей процедуры.

1. Время до следующего столкновения  $\tau$  разыгрывается случайным образом по плотности вероятности  $v_m \exp(-v_m \tau)$ .

2. Если время до конца шага больше  $\tau$ , с вероятностью пропорциональной  $v_{m,ij}$  определяются сорта  $i$  и  $j$ . Иначе — конец процедуры в ячейке.

3. Для случайных молекул сортов  $i$  и  $j$  определяется относительная скорость  $g = |\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j|$ .

4. С вероятностью  $\sigma(g)g/\{\sigma(g)g\}_{\max}$  вычисляются параметры частиц после столкновения, но изменения параметров частиц не производятся. Иначе выполняется переход на пункт 1 процедуры.

5. Параметры частицы сорта  $i$  изменяются на параметры после столкновения с вероятностью  $\frac{F_{n,coll}}{F_{ni}}$ , с дополнительной вероятностью изменение параметров не проводится. Аналогично для частицы сорта  $j$  — с вероятностью  $\frac{F_{n,coll}}{F_{nj}}$ .

С точки зрения программной реализации эта процедура отличается от стандартной реализации столкновений в методе ПСМ изменением  $v_{m,ij}$  и возможностью сохранения параметров частицы до столкновения, обеспечивая среднее число реальных (11) и потенциальных (12) столкновений, каждое из которых соответствует  $F_{n,coll}$  реальных столкновений.

## 2.2. Химические реакции

В модели химических реакций ТСЕ после шага 4 вышеприведенной процедуры вычисляется вероятность химической реакции (3). Как одному столкновению моделирующих частиц соответствует  $F_{n,coll}$  реальных столкновений, так и изменение числа моделирующих частиц в химической реакции соответствует изменению реальных частиц соответствующих сортов в  $F_{n,coll}$  химических реакциях. Это достигается следующим образом.

- Если частица сорта  $i$  является реагентом в химической реакции, то она исчезает или изменяет свои параметры с вероятностью  $\frac{F_{n,coll}}{F_{ni}}$ , а с дополнительной вероятностью остается в расчете с параметрами, которые были у нее до столкновения.

- Если частица сорта  $i$  является продуктом, и  $F_{ni} > F_{n,coll}$ , то она появляется с вероятностью  $\frac{F_{n,coll}}{F_{ni}}$ .

- Если для продукта  $F_{ni} < F_{n,coll}$  (производство следовой компоненты), то необходимо создание  $\frac{F_{n,coll}}{F_{ni}}$  копий этой частицы.

Дробные части числа копий в нашей реализации не возникают, так как любые  $F_{ni}$  соотносятся между собой как целые числа.

Для диссоциативной рекомбинации иона сорта  $i$  число реакций соответствует рекомбинации  $F_{ni}$  реальных ионов. Поэтому в выражении (8) используется параметр  $F_{ni}$ , а  $N_e = \sum_{j \in \text{ионы}} F_{nj} \frac{N_j}{F_{ni}}$ .

В расчетах настоящей работы для ионов  $F_{ni} < F_n$ . Поэтому при ионизации возникают  $\frac{F_n}{F_{ni}}$  копий ионов. Моделирование с идентичными ионами нарушает условие независимости частиц между собой (см. [24]) и приводит к большому отклонению результатов численного расчета от решаемых уравнений. В данном случае отклонение выражается в сильно заниженной плотности плазмы в газе, так как копии одного и того же иона, одновременно двигающиеся в расчете, с большой вероятностью рекомбинируют друг с другом. Для уменьшения влияния копий частиц друг на друга стандартно используется задержка частиц (molecule duplication buffer [1]). Аналогичные принципы используются и при реализации радиальных весов в методе ПСМ (см. [26], [27]).

## 3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

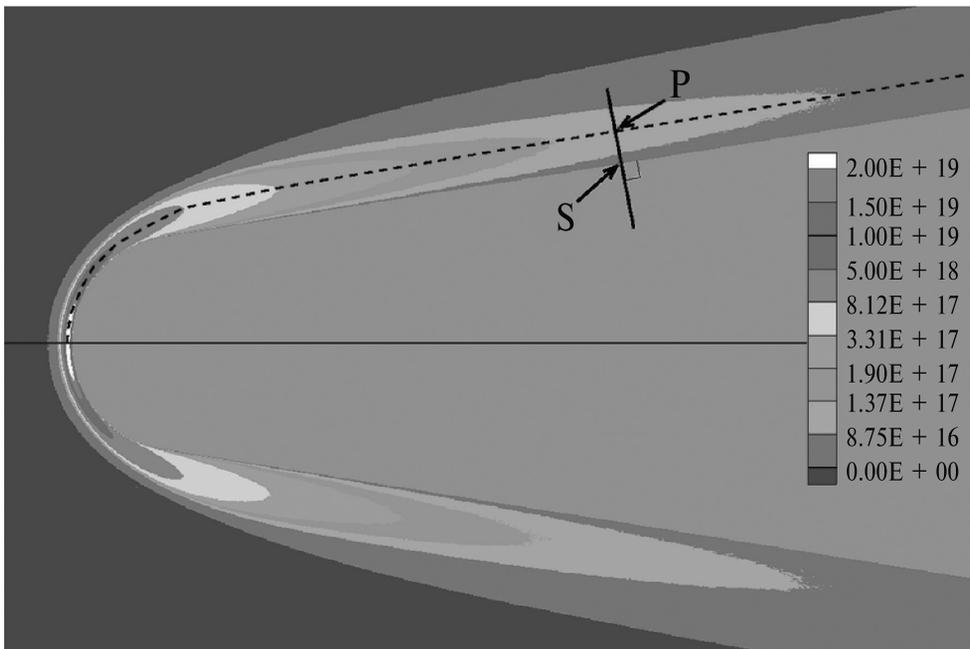
Рассматривалось хорошо исследованное слабоионизованное течение (см., например, [28], [29]), возникающее при обтекании капсулы RAM C-II на высотах 73 км и 81 км. Температура набегающего потока высоте 81 км составляла 194 К, давление 0.726 Па, а на высоте 73 км — 210 К и 2.81 Па. Молярные доли  $O_2$  и  $N_2$  предполагались равными 21.7% и 78.3% соответственно. Капсула представляет собой конус длиной 1.3 м с углом раствора  $18^\circ$  и сферическим затуплением радиусом 0.152 см. На поверхности капсулы реализовывались условия диффузного отражения молекул с полной аккомодацией импульса и энергии, температура поверхности капсулы была равна 1000 К. При отражении ионов от поверхности предполагалась их полная рекомбинация. Молекулярный ион ( $N_2^+$  или  $NO^+$ ), взаимодействуя со стенкой, становился нейтральной молекулой ( $N_2$  или  $NO$  соответственно).

Течение рассмотрено в осесимметричной постановке, ось  $x$  направлена вдоль оси симметрии, а ось  $y$  — в радиальном направлении. Начало координат — в точке торможения потока. Для случая 81 км расчетная область имела размеры  $-0.2 < x < 1.3$  и  $y < 0.6$  и была разделена на  $1200 \times 480$  ячеек. Для случая 73 км параметры были  $-0.1 < x < 1.3$ ,  $y < 0.6$  и  $2240 \times 960$  ячеек. Эти ячейки использовались для накопления макропараметров, в то время как столкновительные ячейки получались в процессе адаптации — деления ячеек в каждом из двух направлений таким образом, чтобы количество частиц в ячейке было меньше восьми. Временной шаг был равен  $5 \times 10^{-8}$  с.

Рассматривается модель воздушной смеси, содержащая восемь компонент воздушной смеси (N, O, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, NO, N<sub>2</sub><sup>+</sup>, NO<sup>+</sup>, e) с 15 реакциями диссоциации, 4 реакциями обмена и 4 реакциями ассоциативной ионизации/диссоциативной рекомбинации. Описание используемых физико-химических моделей и их параметров приведено в работе [30].

Для исследования сходимости по весам заряженных компонент применялось приближение  $T_e = T_v(N_2)$ , которое использовалось для определения энергии электрона, когда проводились реакции диссоциативной рекомбинации ионов и электронов. В работе [14] ранее проводился анализ этого приближения и было показано, что реалистичное распределение  $T_e$  в целом в течении плохо удовлетворяется этим приближением.

В работе [31] рассчитано корректное распределение  $T_e$ , в частности, учитывающее теплопроводность свободных электронов. Такие расчеты требуют больших вычислительных ресурсов. Однако расчеты [31] показали, что для рассматриваемого течения результаты с  $T_e = T_v(N_2)$  и с реалистичным распределением  $T_e$  дают близкие распределения концентрации электронов  $n_e$  (также показано на фиг. 2), что объясняется двумя факторами. Во-первых, в областях, где скорость рекомбинации значительна, эти две модели дают близкие значения  $T_e \approx T_v(N_2)$ . Во-вторых, рекомбинация слабо влияет на максимальные показатели концентрации плазмы в ударном слое, которые измерялись в летном эксперименте.



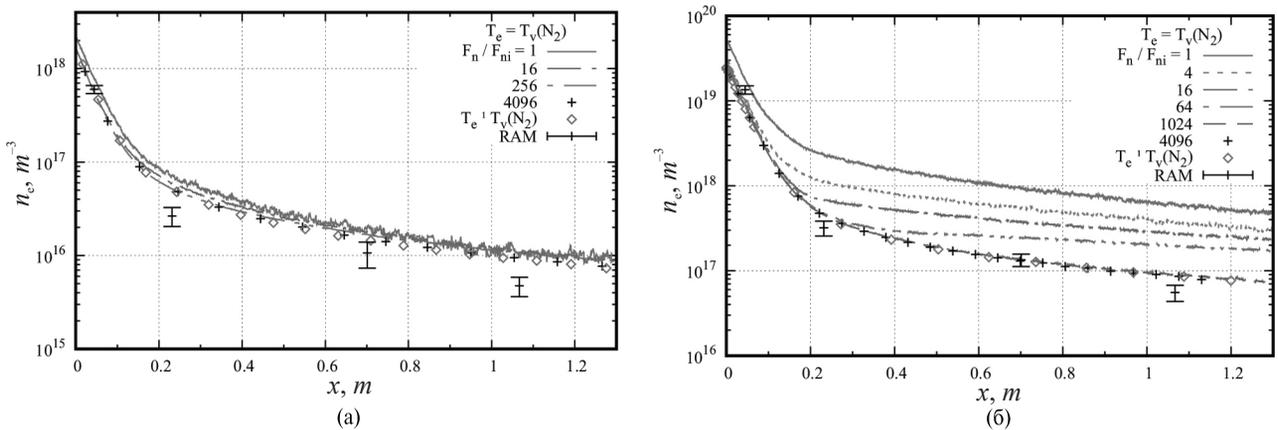
Фиг. 2. Поле концентрации электронов  $n_e$  ( $\text{м}^{-3}$ ). Вверху — приближение  $T_e = T_v(N_2)$ , внизу — расчет по процедуре [14] ( $T_e \neq T_v(N_2)$ ).

Таким образом, использование сложной процедуры нахождения корректного распределения  $T_e$  не принципиально для исследования сходимости по весовым параметрам схемы, и такое исследование в настоящей работе проведено в приближении  $T_e = T_v(N_2)$ . Полученные значения весовых параметров использовались для сопряженного решения уравнения сохранения на энергию свободных электронов, когда  $T_e \neq T_v(N_2)$ , и расчета методом ПСМ.

Максимальная степень ионизации на высоте 81 км приблизительно равна  $5 \times 10^{-4}$ , следовательно, весовой множитель  $F_n/F_{ni}$  следует ожидать на уровне 2000. Проведены расчеты для значений  $F_n/F_{ni}$  от 1 (без весов) до 4096.

Схема построения графиков распределения концентрации электронов вдоль поверхности капсулы показана на фиг. 2. На схеме пунктиром показана кривая вдоль поверхности, на которой достигаются максимальные значения  $n_e$ . Для каждой точки Р этой кривой строится нормаль к поверхности капсулы и определяется соответствующая точка S. На графиках по оси абсцисс отложена координата  $x$  точки S. Максимальное вдоль нормали значение  $n_e$  (в точке Р) отложено по оси ординат.

Результаты для 81 км показаны на фиг. 3а. Как следует из графиков, использование весов для ионов практически не влияет на плотность электронов. Это объясняется тем, что при обтекании капсулы РАМ С-II на данной высоте из-за малой степени ионизации скорость реакций рекомбинации чрезвычайно низкая. Таким образом, хотя использование весовой схемы исправляет скорость реакции рекомбинации, это не отражается на плотности электронов.



Фиг. 3. Концентрация электронов вдоль поверхности капсулы. Расчеты с различными весами ионов  $F_n/F_{ni}$ ; RAM — эксперимент [32] (Radio Attenuation Measurement); (а) — высота 81 км, (б) — высота 73 км.

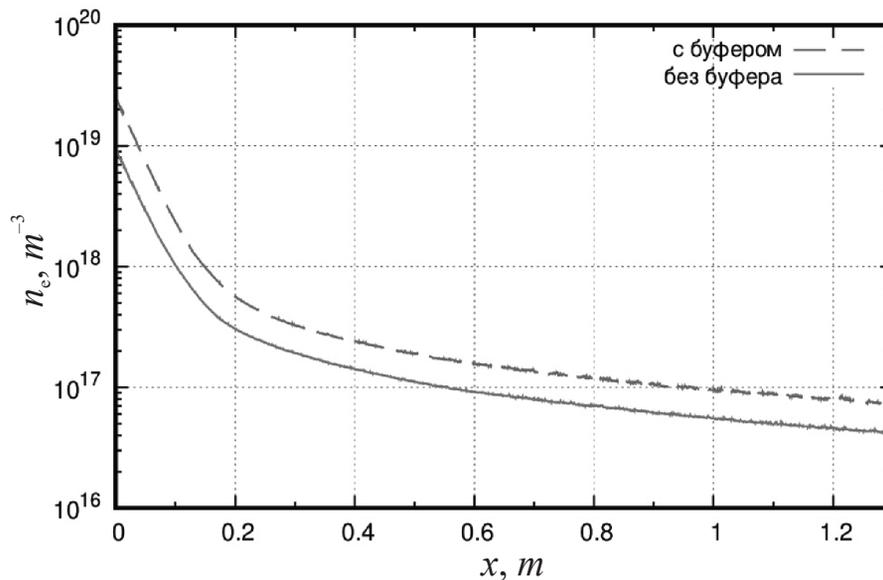
Также на фиг. 3а показан результат расчета, в котором распределение температуры электронов  $T_e$  определяется из решения континуального уравнения на энергию свободных электронов, а расчет плотности электронов методом ПСМ выполняется по процедуре, предложенной в работе [14]. Этот расчет обозначен на графике  $T_e \neq T_v(N_2)$ .

Результаты расчетов сравниваются с летным экспериментом (см. [32]), в котором проводились измерения максимальной плотности электронов с использованием микроволновых рефлектометров (обозначено на графике RAM — Radio Attenuation Measurement). Сравнение показывает хорошее совпадение рассчитанной плотности электронов с измерениями.

На высоте 73 км плотность набегающего потока в 3.6 раз больше, чем в случае 81 км. При этом максимальная концентрация электронов больше в 13.6 раз. Как следует из результатов расчета (фиг. 3б), концентрация электронов  $n_e$  заметно различается при разных значениях  $F_n/F_{ni}$ . Следовательно, влияние рекомбинации на концентрацию электронов для 73 км уже значительно. Из графиков следует, что при значении  $F_n/F_{ni} = 1024$  достигается сходимость распределения  $n_e$ : график совпадает с  $F_n/F_{ni} = 4096$ . В расчете с распределением  $T_e \neq T_v(N_2)$  по процедуре [14] получено распределение  $n_e$ , совпадающее с приближением  $T_e = T_v(N_2)$  (ромбы на фиг. 3б), а сравнение с экспериментом вновь дает хорошее согласие.

На фиг. 4 сравниваются распределения  $n_e$ , полученные в расчетах с буфером задержки частиц и без буфера. Оба расчета выполнены при значении  $F_n/F_{ni} = 1024$ . В расчете с буфером, результаты которого показаны также на фиг. 3б, глубина буфера составляла 3 000 000 частиц. При этом на каждом из 63 про-

цессоров, на которых запускался расчет, создавался отдельный буфер. В среднем, для стационарного течения, каждый шаг выполнялось 38 112 замен во всех буферах. Сравнение графиков показывает, что без буфера плотность электронов получается приблизительно в 2 раза меньше, чем с буфером. Отличие объясняется повышенной скоростью рекомбинации, вызванной наличием в расчете копий ионов и свидетельствует о необходимости использования приемов по уменьшению влияния корреляций между копиями на моделируемый процесс рекомбинации.



**Фиг. 4.** Влияние буферизации дубликатов ионов на концентрацию электронов вдоль поверхности капсулы. Высота 73 км,  $F_n/F_{ni} = 1024$ .

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлено описание реализации весовой схемы метода ПСМ, позволяющей проводить расчеты течений, в которых определенные компоненты газовой смеси имеют низкую относительную концентрацию. Рассмотрено применение реализованной схемы для течения слабоионизованного воздуха, возникающего при обтекании спускаемых космических аппаратов, входящих в атмосферу Земли со скоростями порядка орбитальных (около 8000 м/с). Приведено подробное описание численных моделей релевантных плазмохимических процессов для метода ПСМ и показано, что особенности реализации этих моделей способствуют возникновению большой вычислительной ошибки при определении плотности плазмы, если не использовать весовые схемы.

Применение весовой схемы продемонстрировано на примере условий эксперимента RAM C-II (см. [32]). Рассмотрены случаи полета в условиях различного уровня разреженности течения, соответствующих высотам 81 и 73 км. Численные результаты показывают, что даже для близких по параметрам условий обтекания ошибка в определении плотности плазмы может либо не проявляться (случай 81 км), либо приводить к отклонению концентрации электронов на порядок величины (случай 73 км). Ошибка устраняется с использованием весовой схемы.

Рассматриваемое течение ярко демонстрирует необходимость применения весовых алгоритмов в методе ПСМ для исследования плазмы около космических аппаратов. Метод ПСМ интенсивно развивается, а спектр решаемых этим методом задач постоянно расширяется. Для задач аэротермодинамики спускаемых аппаратов метод ПСМ стал де-факто стандартом определения аэротермодинамических характеристик на верхних участках траектории спуска космических аппаратов. Особенную значимость результаты настоящей работы могут иметь для разработки возвращаемых космических аппаратов при проведении пилотируемых миссий, где важно предсказание участков траектории с экранированием радиосвязи. Одним из направлений дальнейшего развития модели может быть

учет возбуждения электронных уровней атомов и молекул, что, в частности, важно для расчета переноса теплового излучения в разреженном ударном слое.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bird G. A.* Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Oxford: Clarendon Press, 1994.
2. *Kashkovsky A. V., Bondar Ye. A., Zhukova G. A., Ivanov M. S., Gimelshein S. F.* Object-oriented software design of real gas effects for the DSMC method // AIP Conf. Proc. 2005. V. 762. N 1. P. 583–588.
3. *Ivanov M. S., Kashkovsky A. V., Vashchenkov P. V., Bondar Ye. A.* Parallel object-oriented software system for DSMC modeling of high-altitude aerothermodynamic problems // AIP Conf. Proc. 2011. V. 1333. N 1. P. 211–218.
4. *Shoey G. V., Vashchenkov P. V., Bondar Ye. A.* Calculation of the heat flux and pressure on the cone surface in a high-enthalpy non-equilibrium flow of a binary nitrogen mixture ( $N_2/N$ ) // AIP Conf. Proc. 2018. V. 2027. N 1. P. 040010.
5. *Wysong I., Gimelshein S., Bondar Ye., Ivanov M.* Comparison of direct simulation Monte Carlo chemistry and vibrational models applied to oxygen shock measurements // Phys. Fluid. 2014. V. 26. N 4. P. 043101.
6. *Galeyev A. Ye., Kashkovsky A. V., Shevyrin A. A., Bondar Ye. A.* Comparison of nonequilibrium dissociation models in the direct simulation Monte Carlo method // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. V. 1404. P. 012107.
7. *Molchanova A. N., Kashkovsky A. V., Bondar Ye. A.* Surface recombination in the direct simulation Monte Carlo method // Phys. Fluid. 2018. V. 30. N 10. P. 107105.
8. *Litvintsev A. S., Molchanova A. N., Bondar Ye. A.* Effects of heterogeneous NO production on the aerothermodynamics of high-altitude re-entry // AIP Conf. Proc. 2020. V. 2288. N 1. P. 030090.
9. *Shevyrin A. A., Shkredov T. Yu., Shoey G. V., Bondar Ye. A.* Modeling of the plasma environment of re-entry space vehicles // AIP Conf. Proc. 2018. V. 2027. N 1. P. 030031.
10. *Shkredov T., Shoey G., Shevyrin A.* Implementation of the tangent-slab approximation for radiation modeling coupled with flowfield computation // AIP Conf. Proc. 2023. V. 2504. N 1. P. 030053.
11. *Lee J.-H.* Basic governing equation for flight regimes of Aeroassisted orbital transfer vehicles // AIAA 1984–1729.
12. *Gnoffo P. A., Gupta R. N., Shinn J. L.* Conservation equations and physical models for hypersonic air flows in thermal and chemical nonequilibrium // NASA TP V. 2867. 1989.
13. *Kim M. K., Gulhan A., Boyd I. D.* Modeling of electron temperature in hypersonic flows // AIAA 2011–1028.
14. *Shevyrin A., Bondar Ye.* On the calculation of the electron temperature flowfield in the DSMC studies of ionized re-entry flows // Adv. Aerodyn. 2020. V. 2. N 6.
15. *Bird G. A.* Nonequilibrium radiation during re-entry at 10 km/s // AIAA Paper 87–1543. 1987.
16. *Кусов А. Л.* Расчет ионизации методом прямого статистического моделирования Монте–Карло // Физ.-хим. кин. в газ. дин. 2016. Т. 17. Вып. 2.
17. *Parent B., Shneider M. N., Macheret S. O.* Detailed modeling of plasmas for computational aerodynamics // AIAA J. 2016. V. 54. N 3. P. 898–911.
18. *Kusov A. L., Levashov V. Y., Gerasimov G. Y., Kozlov P. V., Bykova N. G., Zabelinsky I. E.* Direct statistical Monte Carlo simulation of argon radiation behind the front of a strong shock wave // Fluid. Dyn. 2023. V. 58. P. 759–772.
19. *Boyd I. D.* Modeling backward chemical rate processes in the direct simulation Monte Carlo method // Phys. Fluid. 2007. V. 19. N 12. P. 126103.
20. *Gimelshein S. F., Wysong I. J.* Impact of the ionization reaction set in nonequilibrium hypersonic air flows // AIAA J. 2020. V. 58. N 3. P. 1255–1265.
21. *Иванов М. С., Рогазинский С. В.* Экономичные схемы прямого статистического моделирования течений разреженного газа // Матем. моделирование. 1989. Т. 1. № 7. С. 130–145.

22. *Shugalevskaia N. V., Shevyrin A. A., Bondar Ye. A.* Comparison of modern implementations of the direct simulation Monte Carlo method // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2019. V. 1404. N 012123.
23. *Maltsev R. V.* On the Selection of the Number of Model Particles in DSMC Computations // *AIP Conf. Proc.* 2011. V. 1333. N 1. P. 289–294.
24. *Shevyrin A. A., Bondar Ye. A., Ivanov M. S.* Analysis of repeated collisions in the DSMC method // *AIP Conf. Proc.* 2005. V. 762. N 1. P. 565–570.
25. *Коган М. Н.* Динамика разреженного газа (кинетическая теория). М.: Наука, 1967. 440 с.
26. *Ivanov M. S., Markelov G. N., Kashkovsky A. V., Gimelshein S. F.* Statistical simulation of high-altitude aerodynamic problems // *Proc. 3rd Europ. Symp. on Aerothermodynamics for Space Vehicles, Noordwijk.* 1998. ESA SP-426. P. 245–252.
27. *Мальцев Р. В.* Численное исследование сверхзвуковых течений разреженных газовых смесей с сильно отличающимися массами компонент. Дис. ... канд. физ.-мат. наук. Новосибирск: ИТ СО РАН, 2014.
28. *Candler G. V., MacCormack R. W.* Computation of weakly ionized hypersonic flows in thermochemical nonequilibrium // *J. Thermophys. Heat Trans.* 1991. V. 5. N 3. P. 266–273.
29. *Суржиков С. Т.* Двумерный численный анализ ионизации потока в летном эксперименте RAM-C-II // *Хим. физика.* 2015. Т. 34. № 2. С. 24–42.
30. *Шевырин А. А., Бондарь Е. А., Калашников С. Т., Хлыбов В. И., Дегтярь В. Г.* Прямое статистическое моделирование разреженного высокоэнтальпийного течения около капсулы RAM C-II // *ТВТ.* 2016. Т. 54. № 3. С. 408–414.
31. *Shevyrin A. A., Bondar Ye. A.* Coupled kinetic-continuum modeling of reentry vehicle plasma environment // *AIP Conf. Proc.* 2024. V. 2996. N 1. P. 080015.
32. *Jones W. L., Cross A. E.* Electrostatic-probe measurements of plasma parameters for two reentry flight experiments at 25000 feet per second // *Tech. Rep. NASA, Washington, D.C., 1972. TN D-6617.*

## USING MONTE CARLO WEIGHT SCHEMES FOR WEAKLY IONIZED RAREFIED GAS FLOWS

A. A. Shevyryan<sup>a,\*</sup>, E. A. Bondar<sup>a</sup>

<sup>a</sup> 630090 Novosibirsk, Institutskaya str., 4/1, S. A. Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics, SB RAS, Russia

\*e-mail: shevr@itam.nsc.ru

Received 23 November, 2023

Revised 18 March, 2024

Accepted 3 April, 2024

**Abstract.** The description of the procedures of the direct statistical Monte Carlo simulation of weakly ionized flows arising during the flow of returning spacecraft is presented. For ionization and recombination reactions, expressions are given for the model dependence of the probability of reactions on the velocities and energies of the reagents. The dissociative recombination algorithm is presented, the computational efficiency of which is achieved by bypassing the simulation of the interaction of electrons and heavy particles. An approach to the construction of a weight scheme for elastic collisions and chemical reactions is described, which significantly increases the computational efficiency of calculations. An example of using the described numerical models and procedures to study the weakly ionized flow near the return capsule in typical entry conditions of orbiting spacecraft is presented. The calculation results are compared with the data of measurements of plasma parameters in the flight experiment.

**Keywords:** weight schemes, high-altitude aerothermodynamics, ionization, direct statistical Monte Carlo simulation method, nonequilibrium gas flow, low-temperature plasma, charge recombination.