

Monte Carlo: symulacja dynamiki gazu

Filip Brodacz

14 czerwca 2025

1 Wstęp teoretyczny

Metoda DSMC (Direct Simulation Monte Carlo) jest techniką numeryczną umożliwiającą modelowanie dynamiki gazów rozrzedzonych. W metodzie tej rozdziela się trajektorie cząstek (deterministyczne) od procesu ich zderzeń (statystycznych). Zderzenia są rozpatrywane lokalnie, wyłącznie w obrębie danej komórki obliczeniowej i jej otoczenia.

Rozkłady statystyczne

Rozkład Maxwella-Boltzmanna dla składowych prędkości w dwóch wymiarach ma postać:

$$V_x, V_y \sim \mathcal{N}(0, \sigma_V^2), \quad \sigma_V = \sqrt{\frac{k_B T}{m}} \quad (1)$$

Rozkład prędkości (modułu):

$$f(V) = \frac{mV}{k_B T} \exp\left(-\frac{mV^2}{2k_B T}\right) \quad (2)$$

Krok czasowy

Krok czasowy jest dynamicznie dopasowywany tak, aby cząstka nie opuściła swojej komórki:

$$\Delta t = \frac{\min(\Delta x, \Delta y)}{V_{\max}} \quad (3)$$

2 Metoda i implementacja

Symulacja została przeprowadzona przy użyciu klasy `DSMC_2D`. Kluczowe funkcje to:

- `init()` – inicjalizacja układu,
- `evolution(tmax, iter_max)` – ewolucja czasowa układu,
- `hist_velocity_all(...)` – generacja histogramu prędkości.

Parametry układu:

- Obszar: $[0, 1] \times [0, 1]$, siatka: 50×50 ,
- Masa cząstki: $40 \cdot 10^{-27}$ kg,
- Promień: 10^{-6} m lub 10^{-5} m,
- Temperatura początkowa: 300 K,
- Liczba cząstek: 10^5 ,
- Warunki brzegowe: zależne od zadania.

3 Wyniki i analiza

3.1 Zadanie 1 – Równomierna energia, różne promienie cząstek (`init_dist = 1`)

Cząsteczki mają identyczną energię kinetyczną. Symulacja została przeprowadzona dla $r = 10^{-6}$ m oraz $r = 10^{-5}$ m.

Rozkład prędkości dla $r = 10^{-6}$ - animacja

Rozkład gęstości, ciśnienia, temperatury, prędkości, strumienia oraz moli w zależności od x dla $r = 10^{-6}$ - animacja

Rozkład położenia cząstek dla $r = 10^{-6}$ - animacja

Rozkład prędkości dla $r = 10^{-5}$ - animacja

Rozkład gęstości, ciśnienia, temperatury, prędkości, strumienia oraz moli w zależności od x dla $r = 10^{-5}$ - animacja

Rozkład położenia cząstek dla $r = 10^{-5}$ - animacja

Obserwacje:

- Większy promień cząstki prowadzi do szybszego osiągnięcia równowagi.
- Histogramy prędkości w stanie ustalonym zgadzają się z rozkładem Maxwella.

3.2 Zadanie 2 – Koncentracja w jednej komórce (`init_dist = 3`)

Cząstki początkowo znajdują się w jednej komórce (0,0).

Rozkład prędkości - animacja

Rozkład gęstości, ciśnienia, temperatury, prędkości, strumienia oraz moli w zależności od x - animacja

Rozkład położenia cząstek - animacja

Obserwacje:

- W pierwszych iteracjach obserwuje się spowolnienie obliczeń.
- Cząstki dynamicznie rozprzestrzeniają się po całym obszarze.
- Ostatecznie uzyskiwany jest rozkład równowagi.

3.3 Zadanie 3 – Gradient temperatury (`init_dist = 2`)

Lewy brzeg: 1000 K (Dirichlet), pozostałe – Neumann. Rozkład początkowy Maxwella.

Rozkład prędkości - animacja

Rozkład gęstości, ciśnienia, temperatury, prędkości, strumienia oraz moli w zależności od x - animacja

Rozkład położenia cząstek - animacja

Obserwacje:

- Początkowo występuje silny gradient temperatury.
- Z czasem układ dąży do wyrównania temperatury.
- Rozkład prędkości przesuwa się z czasem.

3.4 Zadanie 4 – Gradient pomiędzy 1000 K a 300 K (Dirichlet po obu stronach)

Lewy brzeg: 1000 K, prawy: 300 K (Dirichlet).

Rozkład prędkości - animacja

Rozkład gęstości, ciśnienia, temperatury, prędkości, strumienia oraz moli w zależności od x - animacja

Rozkład położenia cząstek - animacja

Obserwacje:

- Gradient temperatury w stanie ustalonym jest prawie liniowy.
- Rozkład prędkości zależy od położenia.

4 Podsumowanie

Przeprowadzone symulacje metodą DSMC potwierdziły poprawność podejścia statystycznego do dynamiki gazu rozrzedzonego. Główne wnioski:

- Rozkład Maxwella osiągany jest w stanie ustalonym niezależnie od warunków początkowych.
- Czas dochodzenia do równowagi zależy od promienia cząstek.
- Warunki brzegowe silnie wpływają na rozkład temperatury i prędkości.
- Możliwe jest symulowanie przewodnictwa cieplnego poprzez odpowiedni dobór warunków Dirichleta.