

Laboratorium nr 1: Symulacja przepływów metodą dynamiki molekularnej

Cel: Celem laboratorium jest zapoznanie studentów zastosowaniem metody Lagrange'a na przykładzie dynamiki molekularnej do symulacji przepływów.

Opis:

Metoda dynamiki molekularnej pozwala na symulację zachowania cząstek w skali mikro. W metodzie stosowany jest opis Lagrange'a polegający na śledzeniu położenia i prędkości pojedynczych cząsteczek, których interpretacja fizyczna zależy od konkretnego zastosowania. Metoda ta pozwala na symulację zjawisk nieliniowych w przepływach oraz obserwowanie powstawania wirów za optywanymi przeszkodami.

W ramach tego ćwiczenia zostanie napisany kod w środowisku MATLAB implementujący w maksymalnie przejrzysty sposób dynamikę molekularną do symulacji określonej populacji cząstek w przestrzeni pseudo nieskończonej (zastosowane są okresowe warunki brzegowe). Stworzony kod zostanie zastosowany do symulacji dwuwymiarowego przepływu cieczy przez rurę poprzez zaimplementowanie następujących założeń:

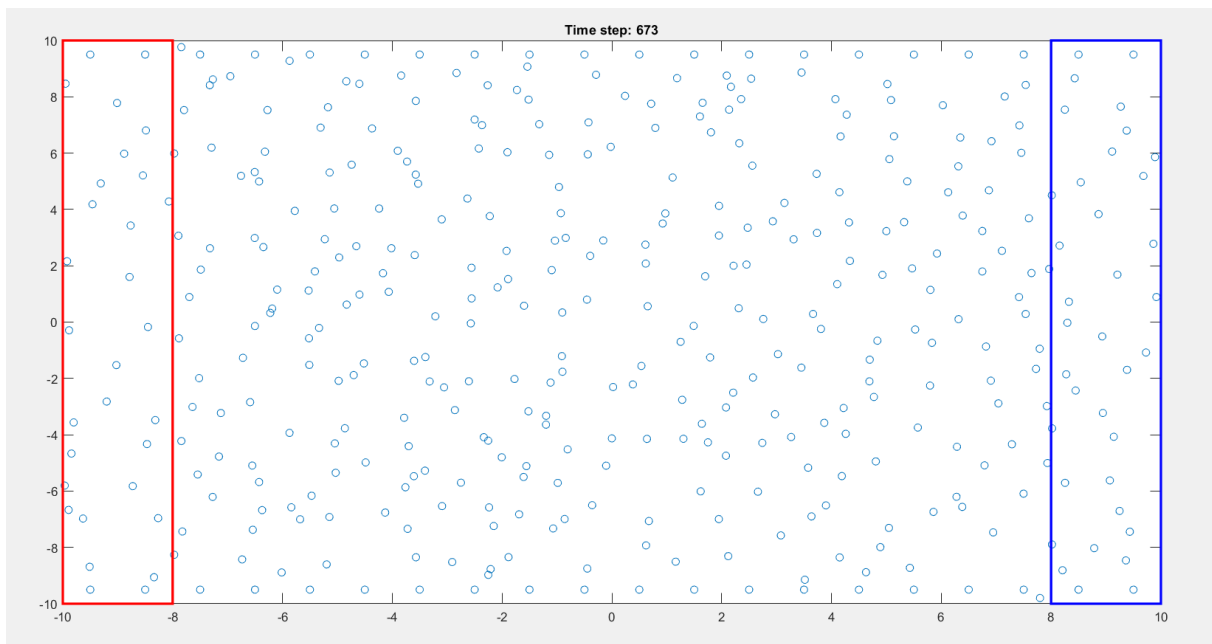
1. Modelowana ciecz znajduje się w prostokątnym obszarze o wymiarach $2L_x$ na $2L_y$ wyrażonych w jednostkach względnych.
2. Na wyznaczonym obszarze zastosowane są okresowe warunki brzegowe.
3. Symulowane cząstki oddziałują między sobą za pośrednictwem potencjału Lennarda-Jonesa (równanie poniżej), który jest często stosowany do symulacji takich ośrodków jak np. gazy szlachetne w których cząsteczki oddziałują siłami van der Waalsa.

$$\Phi(r) = 4 \cdot \varepsilon \cdot \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right)$$

4. Część cząstek zostaje wyróżniona poprzez zwiększenie ich masy o kilka rzędów wielkości, co w praktyce powoduje ich unieruchomienie i możliwość budowania za ich pomocą ścianek rury, czy przeszkód.
5. Budowa przeszkód z cząstek pozwala na symulację oddziaływań przepływającej cieczy ze ściankami naczynia lub przeszkodą (zjawiska lepkości powodujące opory przepływu).
6. Wymuszenie przepływu zrealizowane jest poprzez wprowadzenie dwóch obszarów:
 - a. Obszar przyspieszania – cząstki znajdujące się w tym obszarze mają przypisaną dodatkową siłę działającą wzdłuż osi X;
 - b. Obszar termostatu – cząstki znajdujące się w tym obszarze mają przeskalowaną prędkość o określony czynnik w każdym kroku czasowym.

Zastosowanie takiego mechanizmu pozwala na usuwanie energii w obszarze termostatu, która jest dostarczana do układu w obszarze przyspieszania, a co za tym idzie wymuszenie przepływu cieczy przy jednoczesnym zachowaniu całkowitej energii układu pozwalające na utrzymanie stanu stacjonarnego. Różne stosunki siły wymuszającej do czynnika skalującego pozwalają na uzyskanie różnych prędkości przepływu.

Przykładowy wygląd ekranu symulacji pokazany jest na rysunku poniżej:



Plan ćwiczenia:

Wstępna wersja kodu przygotowana będzie w trakcie zajęć przez studentów. Studenci mogą dowolnie rozwijać model poprzez dodawanie nowych mechanizmów, jak obliczanie parametrów makroskopowych (temperatura, ciśnienie), wprowadzanie cząstek znacznika, czy przepływy dwufazowe.

Sugerowane rozwiązania poszczególnych etapów symulacji:

1. Oddziaływanie – potencjał Lennarda-Jonesa (patrz 1 str.)
2. Całkowanie równań ruchu jedną z metod:
 - a. Prędkościowa postać algorytmu Verleta:

$$r_i^{n+1} = r_i^n + \Delta t \cdot v_i^n + \Delta t^2 \frac{F_i^n}{2m}$$

$$v_i^{n+1} = v_i^n + \Delta t \frac{F_i^n + F_i^{n+1}}{2m}$$

- b. Metoda żabiego skoku:

$$v_i^{n+1/2} = v_i^{n-1/2} + \Delta t \frac{F_i^n}{m}$$

$$r_i^{n+1} = r_i^n + \Delta t \cdot v_i^{n+1/2}$$

$$v_i^n = \frac{v_i^{n-1/2} + v_i^{n+1/2}}{2}$$

3. Warunki brzegowe:

$$i_x = INT\left(\frac{r_x}{L_x}\right)$$

$$i_y = INT\left(\frac{r_y}{L_y}\right)$$

$$r_x = r_x - 2 \cdot L_x \cdot i_x$$

$$r_y = r_y - 2 \cdot L_y \cdot i_y$$

Pierwszym zadaniem do realizacji w ramach ćwiczenia jest sprawdzenie rozkładu statystycznego prędkości cząstek na różnych etapach symulacji (początkowe prędkości cząstek rozlosowane są zgodnie z rozkładem normalnym) oraz zaimplementowanie obliczania temperatury medium.

Drugim zadaniem jest analiza przekroju poprzecznego prędkości cząstek oraz wpływu parametrów potencjału L-J (sigma, epsilon) oraz ilości i szerokości przedziałów uśredniania na kształt otrzymanej funkcji.

W kolejnym kroku studenci samodzielnie implementują przeszkodę o dowolnym kształcie i analizują rozkład prędkości przepływu wokół tej przeszkody.

Ostatni krok będzie polegał na wykonaniu wirtualnego eksperymentu znacznikowego poprzez zaznaczenie części cząstek jako znacznika i obserwacji ich stężenia w wybranym obszarze.

Wytyczne do sprawozdania:

1. Sprawozdanie powinno zawierać kod modelu ze szczegółowym opisem działania poszczególnych części.
2. Proszę zamieścić prezentację i dyskusję rozkładu statystycznego prędkości w różnych etapach symulacji oraz porównanie go z rozkładem teoretycznym.
3. Proszę o analizę profilu poprzecznego prędkości dla pustej rury.
4. Proszę przeanalizować rozkład prędkości dla zaprojektowanej przeszkody o dowolnym kształcie.
5. Proszę przedstawić uzyskaną funkcję krzywej przejścia znacznika.
6. Sprawozdanie powinno zawierać wnioski podsumowujące ćwiczenie.