

**AGH UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY**

WYDZIAŁ FIZYKI I INFORMATYKI STOSOWANEJ  
KIERUNEK STUDIÓW: FIZYKA TECHNICZNA



**METODY MONTE CARLO**

---

## **Laboratorium 12**

**Symulacja dynamiki gazu - część 1**

---

**zrealizował**  
**Przemysław Ryś**

Kraków, 27 Maj 2024

# 1 Opis zagadnienia

Metoda Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) jest stosowana do symulacji dynamiki gazów. W tej metodzie cząsteczki gazu mogą zderzać się ze sobą, z brzegami układu oraz z obiektami wewnętrznymi. Warunki brzegowe mogą być typu Dirichleta lub Neumanna. Symulacja jest realizowana za pomocą klasy DSMC\_2D.

## Geometria układu

Cząsteczki gazu są zamknięte w prostokątnym obszarze o wierzchołkach  $(x_{\min}, y_{\min})$  oraz  $(x_{\max}, y_{\max})$ . Na brzegach zewnętrznych można zadać warunki brzegowe:

- Dirichleta - cząstka zastępowana jest nową o energii kinetycznej losowanej z rozkładu Maxwella,
- Neumanna - cząstki są odbijane zgodnie z zasadą kąta padania równego kątowi odbicia.

## Warunek początkowy

Warunek początkowy w postaci rozkładu Maxwella w 2D wyznaczany jest na podstawie rozkładu Boltzmanna:

$$f_E = \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{d/2} e^{-E_{\text{kin}}/k_B T}, \quad d = 1, 2 \quad (1)$$

z warunkiem normalizacji:

$$\int_0^\infty f_E(E) dE = 1 \quad (2)$$

Ponieważ  $E_{\text{kin}} = \frac{m(V_x^2 + V_y^2)}{2}$ , rozkład prędkości wynosi:

$$f_E(E) = \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{1/2} e^{-mV_x^2/2k_B T} \cdot \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{1/2} e^{-mV_y^2/2k_B T} \quad (3)$$

Prędkości składowe losujemy z rozkładu normalnego:

$$V_x, V_y \sim \sigma_V \cdot N(0, 1), \quad \sigma_V = \sqrt{\frac{k_B T}{m}} \quad (4)$$

Rozkład Maxwella prędkości cząstek w stanie ustalonym:

$$f_{2D}(V) = \frac{mV}{k_B T} e^{-mV^2/2k_B T} \quad (5)$$

z warunkiem normalizacji:

$$\int_0^\infty f_{2D}(V) dV = 1 \quad (6)$$

## Krok czasowy

Zakładamy, że w czasie  $\Delta t$  cząstka nie przemieszcza się o więcej niż szerokość/ wysokość komórki:

$$\Delta t \leq \frac{\min\{\Delta x, \Delta y\}}{V_{\max}(t)}, \quad V_{\max} = \max\{V_1, V_2, \dots, V_{\text{tot}}\} \quad (7)$$

## Zderzenia cząstek

Cząstki zderzają się losowo w komórkach na podstawie ich średniej prędkości kwadratowej i przekrojów czynnych na rozpraszanie. W symulacji zderzenia są wykrywane, a kierunki po zderzeniu są randomizowane w układzie środka masy.

## Podział na komórki

Aby zwiększyć wydajność obliczeń, cały obszar obliczeniowy dzielimy na małe komórki o wymiarach  $\Delta x \times \Delta y$ . Zderzenia rozważamy tylko w lokalnym otoczeniu komórki.

## Klasa DSMC\_2D

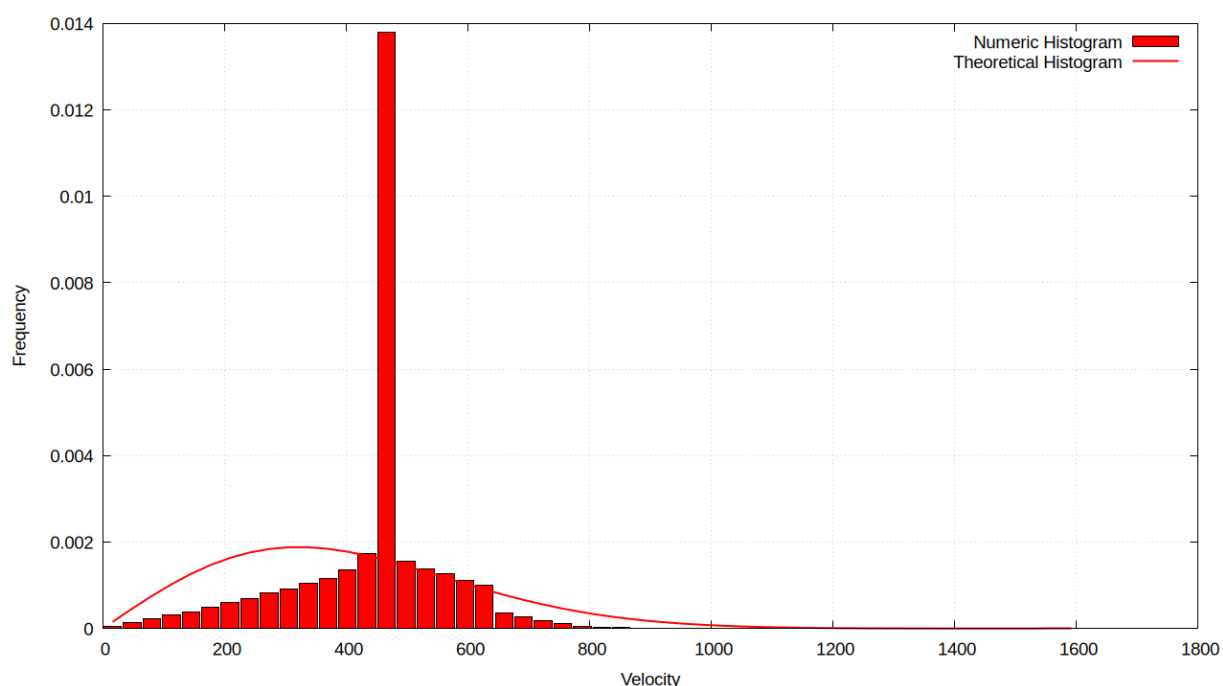
Symulacja jest realizowana za pomocą klasy DSMC\_2D, która zawiera klasę PARTICLE przechowującą informacje o cząstkach. Główne zmienne w klasie PARTICLE obejmują położenie, prędkość, indeksy komórki oraz liczbę zderzeń.

## 2 Wyniki

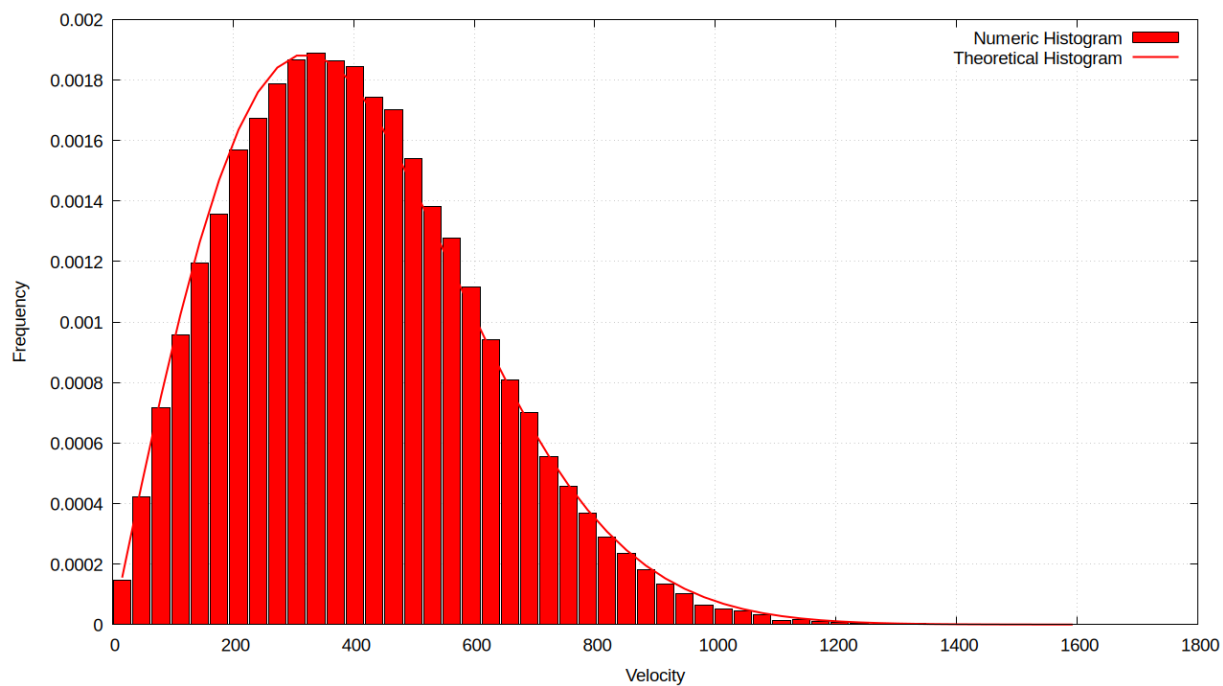
### Zadanie 1

- ★ Warunek początkowy dla cząstek stanowi to, że posiadają one takie same energie kinetyczne i prędkości (`init_dist=1`).

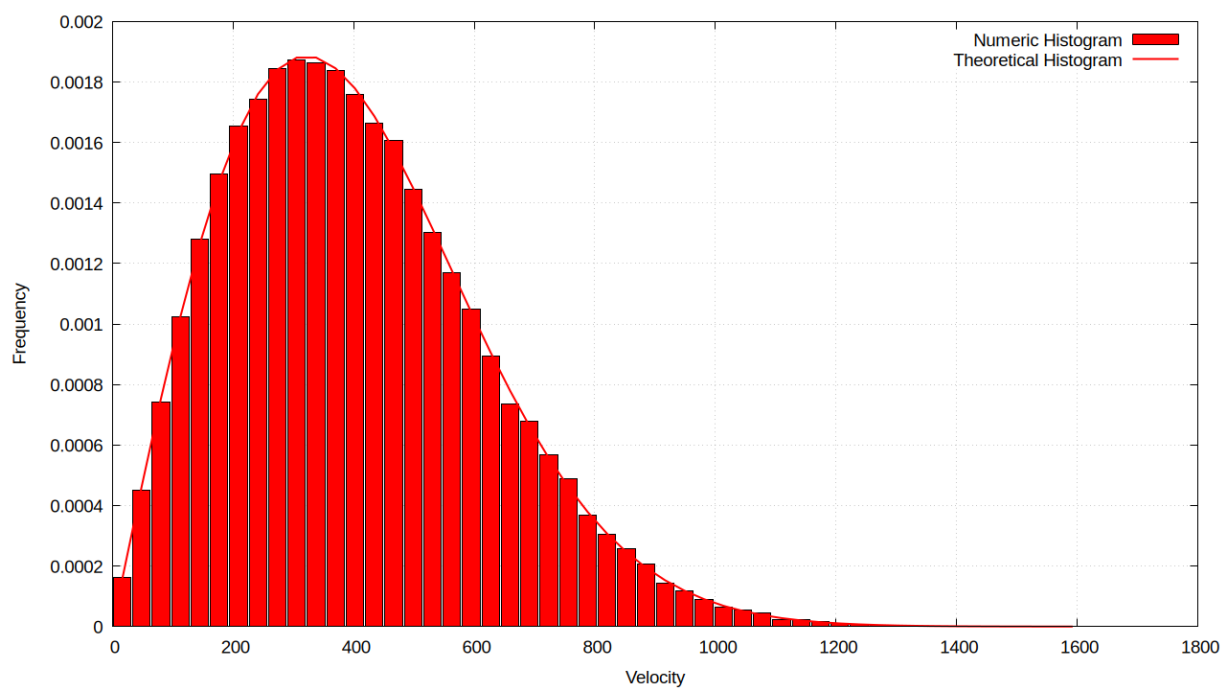
Wykresy 1, 2 oraz 3 przedstawiają rozkłady prędkości cząstek w różnych chwilach czasowych dla efektywnego promienia cząstki wynoszącego  $r = 10^{-6}$  wraz z wyrysowaną krzywą rozkładu teoretycznego, jak można zauważyć, wraz ze wzrostem iteracji rozkład obejmuje kształt teoretycznej obwiedni.



Rys. 1: Rozkład prędkości w stanie nieustalonym (numer iteracji: 200)

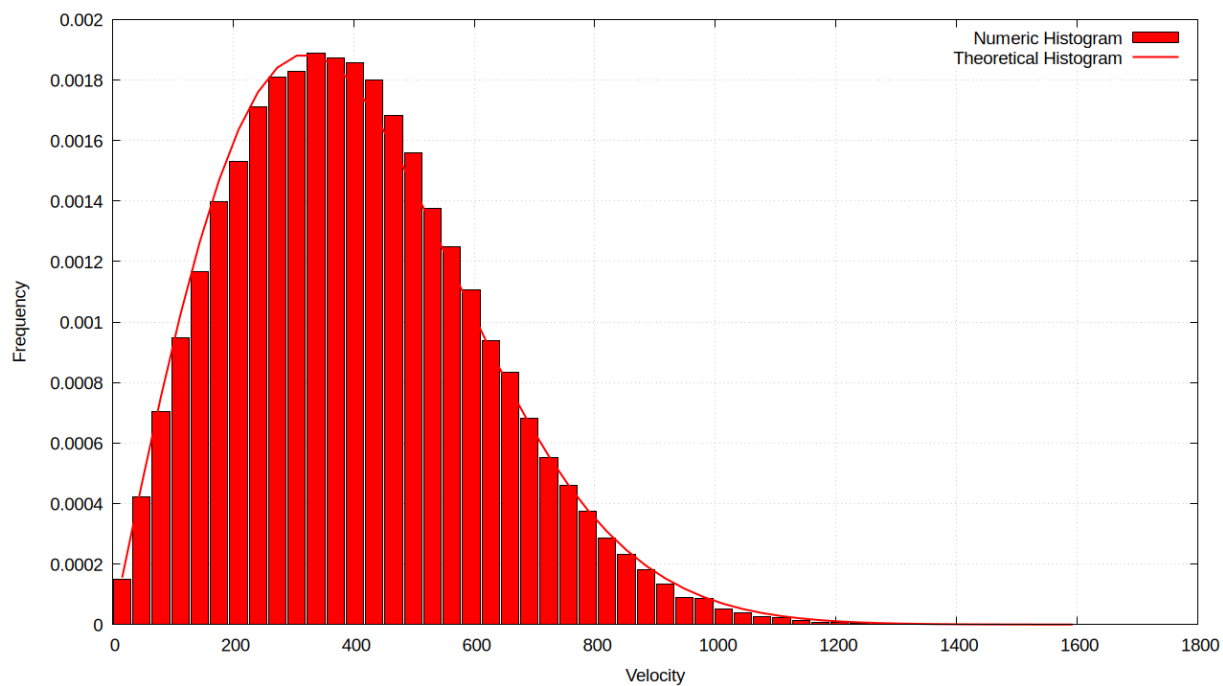


Rys. 2: Rozkład prędkości w stanie nieustalonym (numer iteracji: 2000)

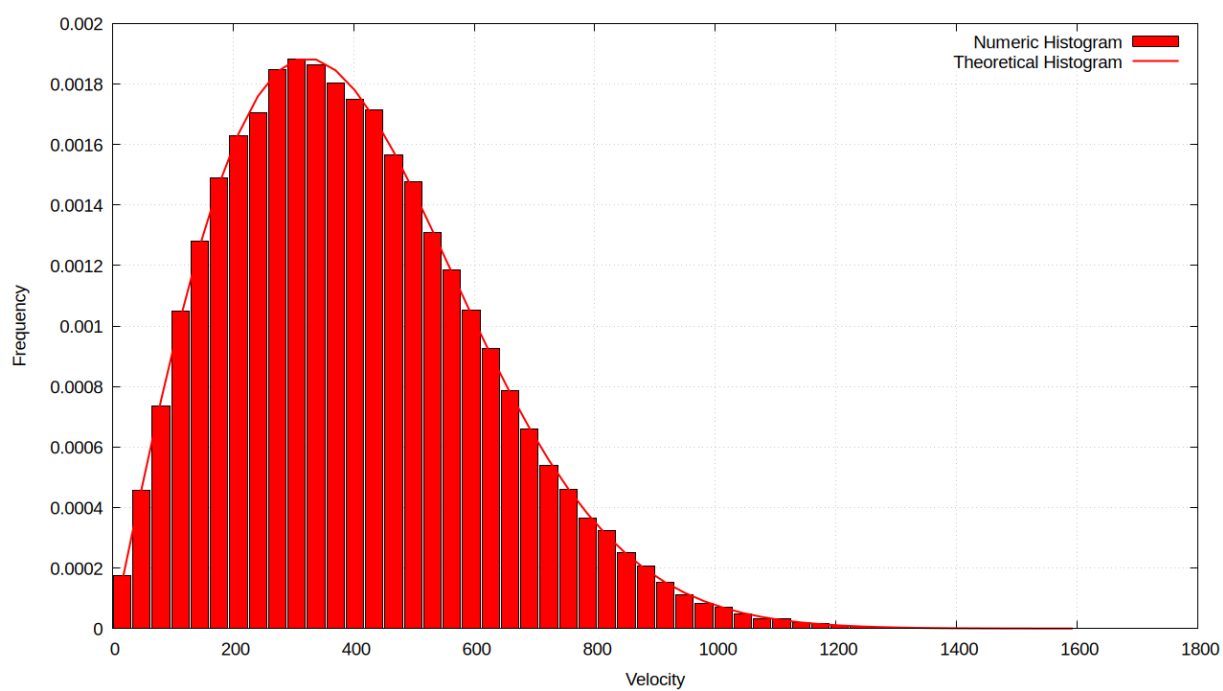


Rys. 3: Rozkład prędkości w stanie ustalonym (numer iteracji: 20000)

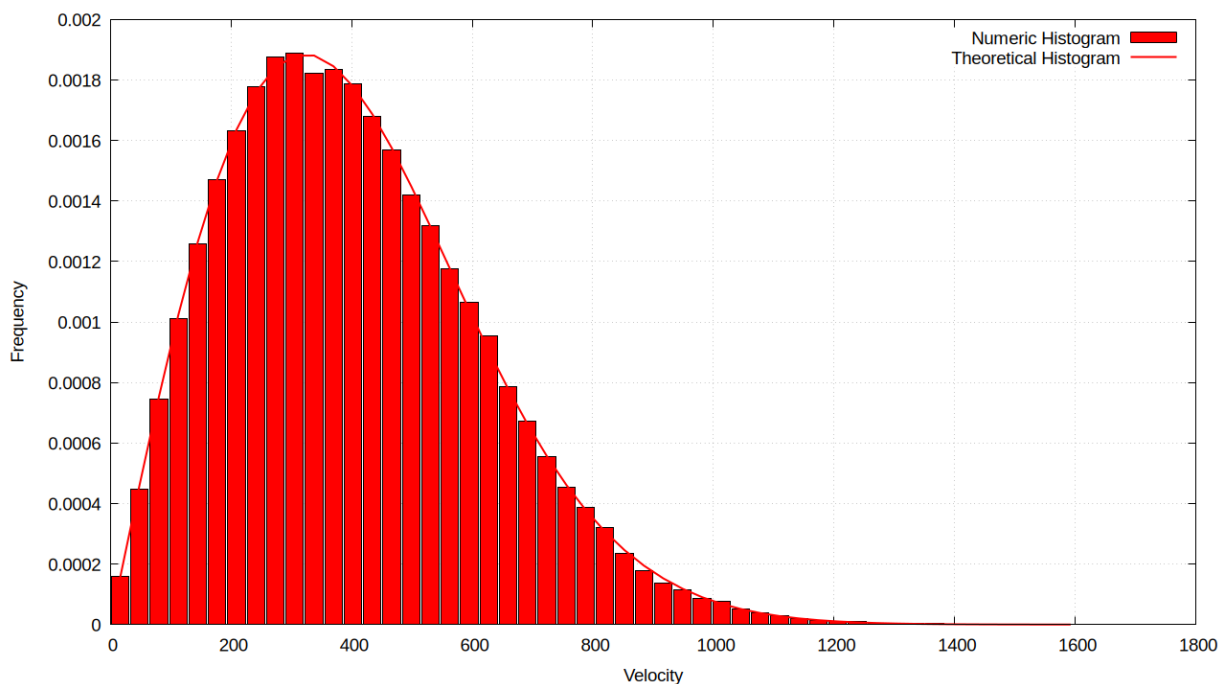
Wykresy 4, 5 oraz 6 natomiast przedstawiają rozkłady prędkości cząstek w różnych chwilach czasowych dla efektywnego promienia cząstki wynoszącego  $r = 10^{-5}$  wraz z wyrysowaną krzywą rozkładu teoretycznego. W tym przypadku układ dochodzi do stanu ustalonego dużo szybciej niż poprzednio, dla mniejszego efektywnego promienia.



Rys. 4: Rozkład prędkości w stanie nieustalonym (numer iteracji: 200)



Rys. 5: Rozkład prędkości w stanie nieustalonym (numer iteracji: 2000)

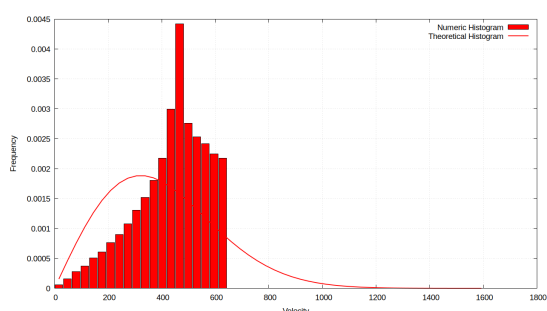


Rys. 6: Rozkład prędkości w stanie ustalonym (numer iteracji: 20000)

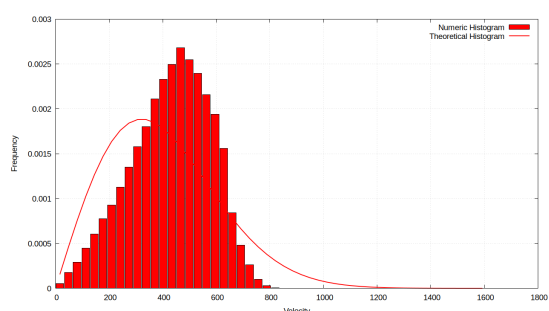
## Zadanie 2

- ★ Warunek początkowy dla cząstek stanowi to, że na początku symulacji znajdują się w tym samym punkcie przestrzeni (punkt o koordynatach  $x = 0, y = 0$ ). (`init_dist=3`).
- ★ W dalszej części zadania przyjąłem efektywny promień wynoszący  $r = 10^{-5}$  ze względu na szybsze dochodzenie do równowagi układu o takim parametrze.

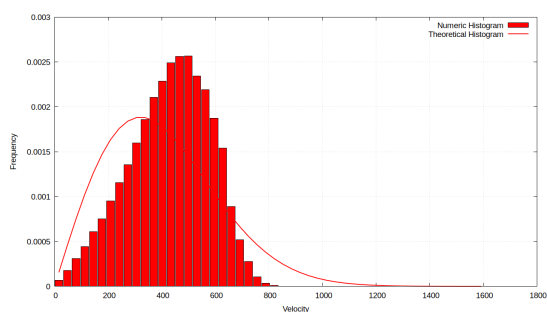
Wykresy z rysunku 7 przedstawiają rozkłady prędkości cząstek w kilku pierwszych iteracjach.



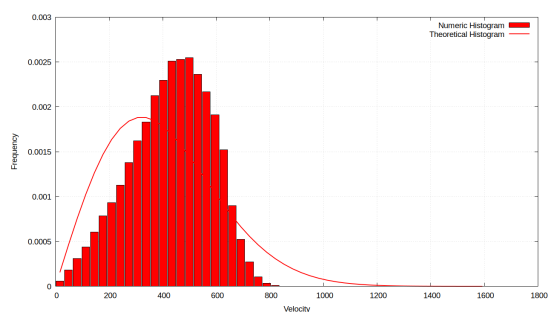
(a) Rozkład prędkości w stanie nieustalonym (numer iteracji: 1)



(b) Rozkład prędkości w stanie nieustalonym (numer iteracji: 2)



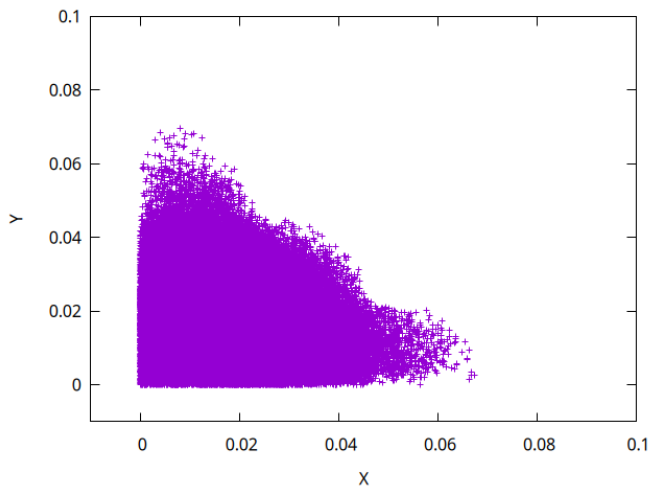
(c) Rozkład prędkości w stanie nieustalonym (numer iteracji: 5)



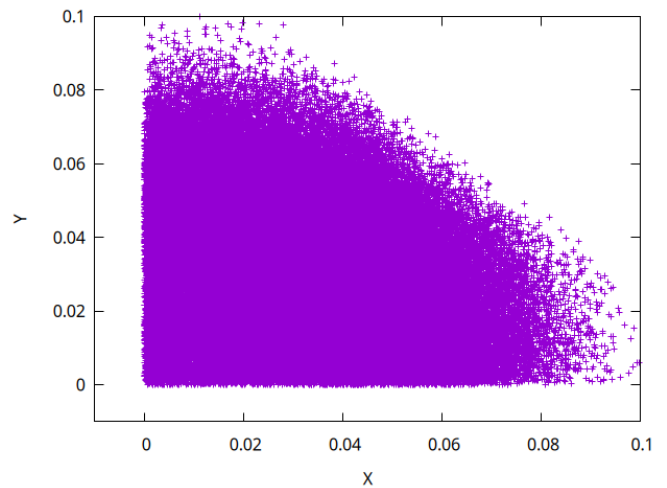
(d) Rozkład prędkości w stanie nieustalonym (numer iteracji: 10)

Rys. 7: Rozkłady prędkości w stanie nieustalonym w różnych iteracjach

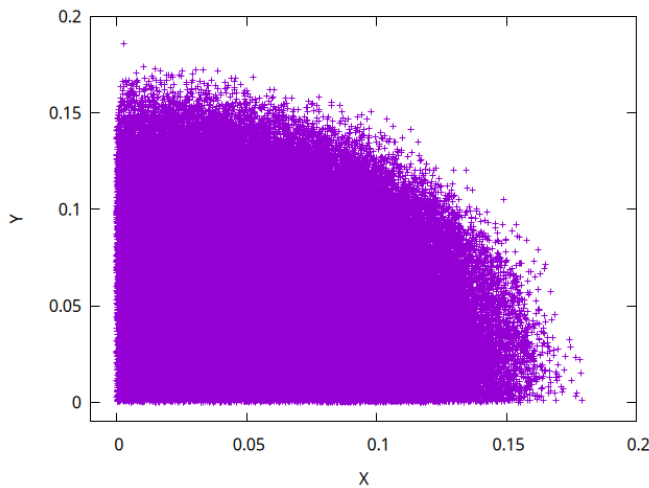
Wykresy z rysunku 8 przedstawiają położenia cząstek w tych samych iteracjach, ukazując w ten sposób ewolucję układu.



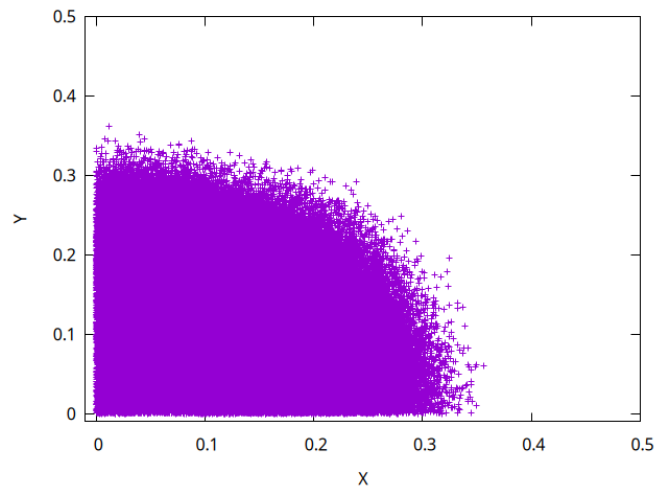
(a) Rozkład położzeń w stanie nieustalonym (numer iteracji: 1)



(b) Rozkład położzeń w stanie nieustalonym (numer iteracji: 2)



(c) Rozkład położzeń w stanie nieustalonym (numer iteracji: 5)



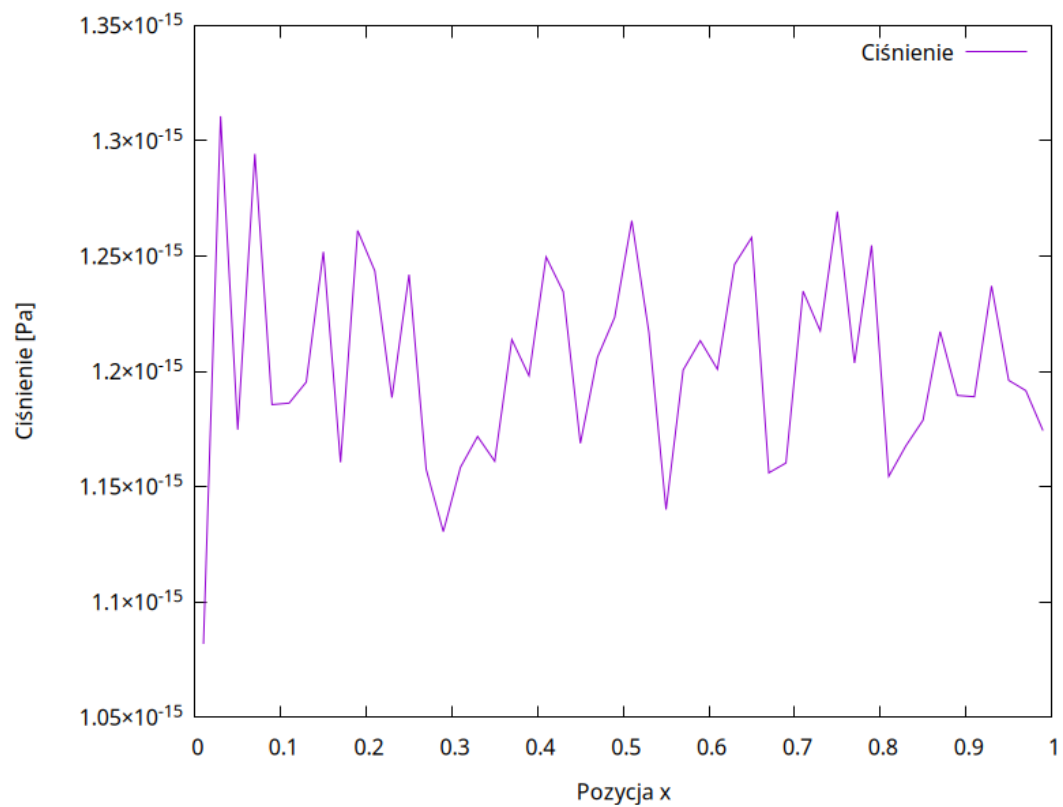
(d) Rozkład położzeń w stanie nieustalonym (numer iteracji: 10)

Rys. 8: Rozkłady położzeń w stanie nieustalonym w różnych iteracjach

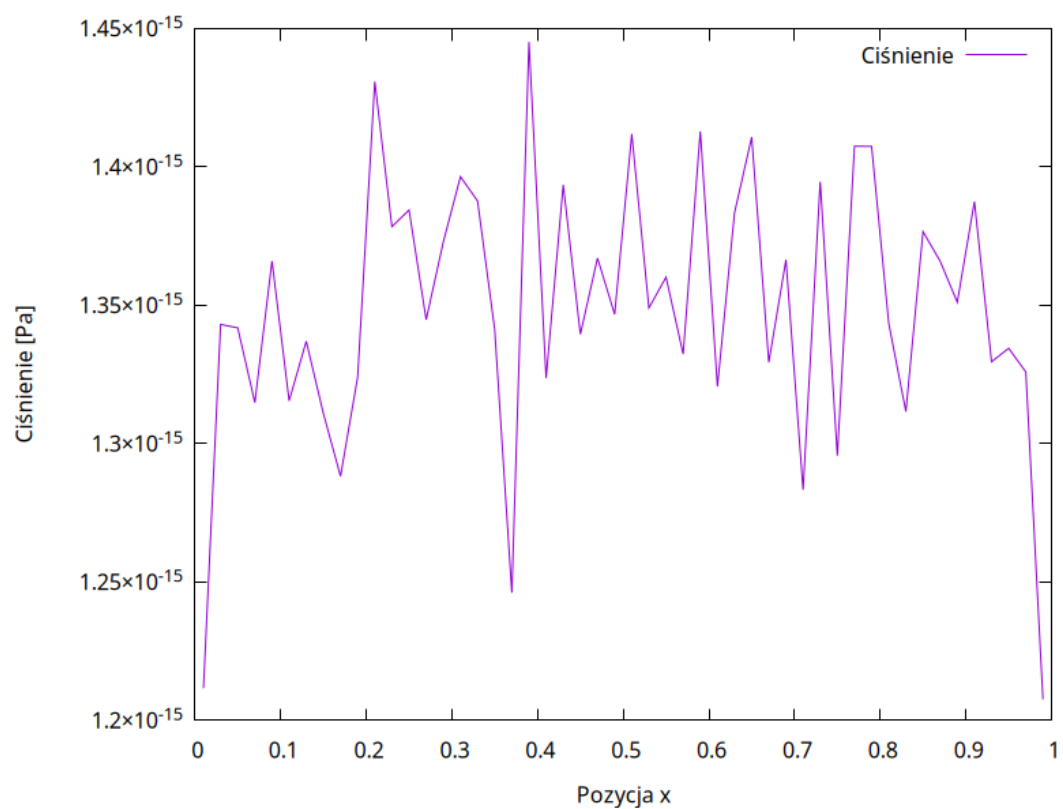
### Zadanie 3

- ★ Warunek początkowy dla cząstek stanowi rozlosowanie ich położenia na całym obszarze przy pomocy rozkładu Maxwella (`init_dist=2`).
- ★ To zadanie również zakłada efektywny promień wynoszący  $r = 10^{-5}$  ze względu na szybsze dochodzenie do równowagi układu o takim parametrze.
- ★ temperatura lewego brzegu ustalona została na wartość 1000 K, natomiast na pozostałych krawędziach został ustanowiony warunek Neumanna.

Wykresy na rysunkach 9, 10 przedstawiają rozkłady ciśnienia, 11, 12 przedstawiają rozkłady temperatur, natomiast 13 przedstawia wspólny rozkład prędkości. Wszystkie wykresy są w argumentie położenia w osi x. Wprowadzenie różnych temperatur na brzegach powoduje powstanie gradientu temperatury, który stabilizuje się w stanie ustalonym. Rozkłady temperatury i ciśnienia wzdłuż kierunku x-owego pokazują, że w stanie ustalonym gradient temperatury jest stabilny i odpowiada oczekiwany wartościom.

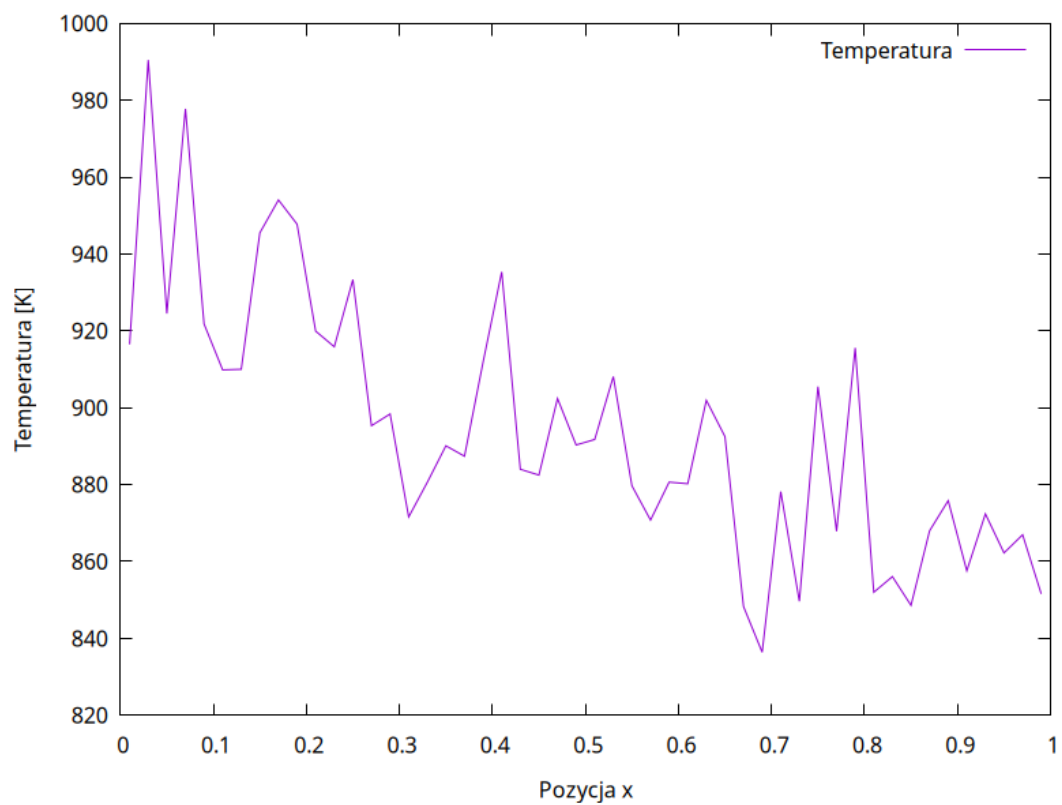


Rys. 9: Rozkład ciśnienia wzdłuż osi  $x$  po 1000 iteracji

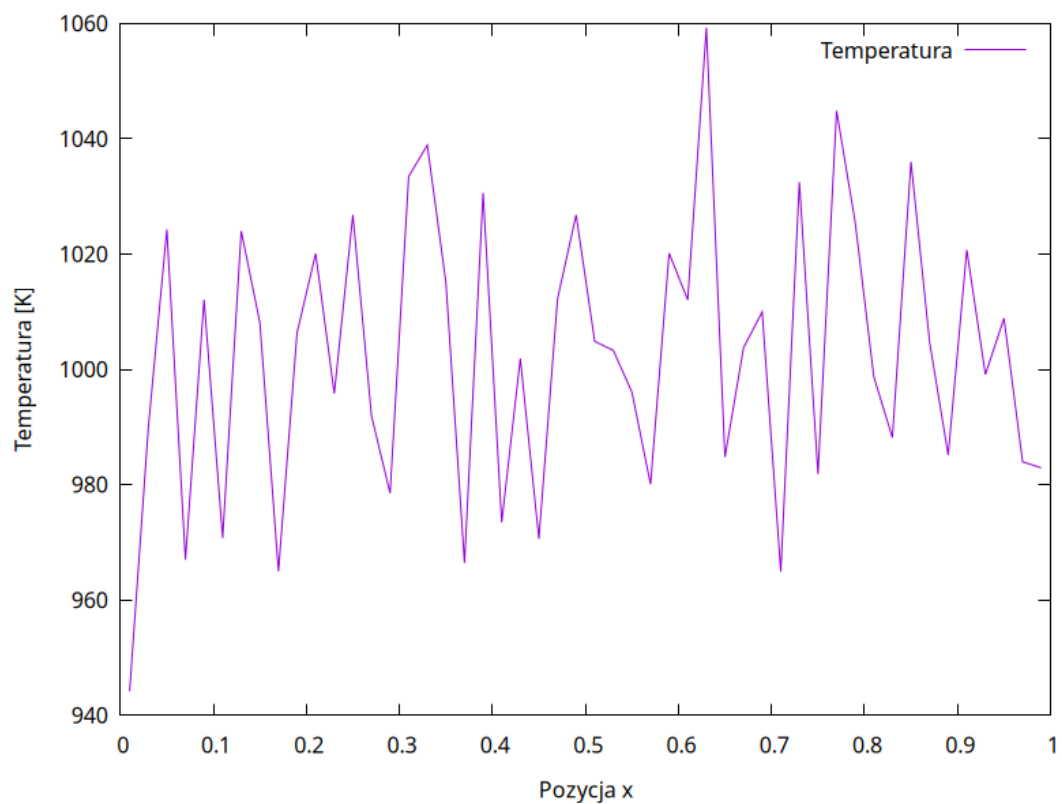


Rys. 10: Rozkład ciśnienia wzdłuż osi  $x$  po 5000 iteracji

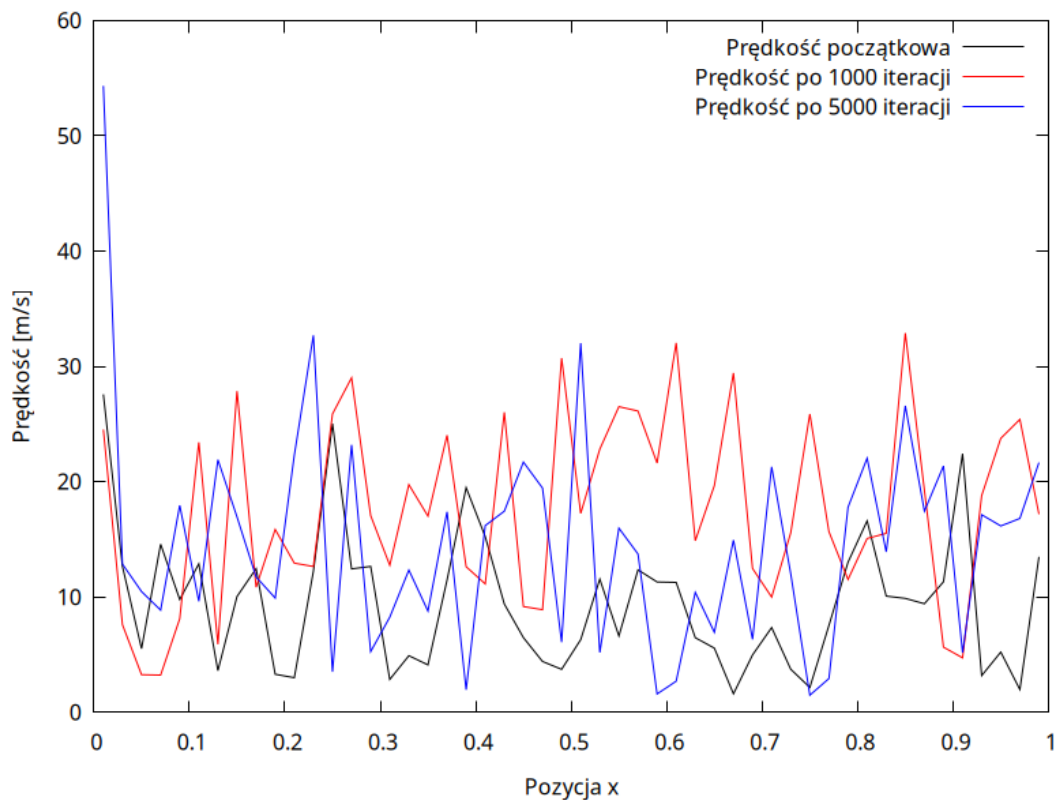




Rys. 11: Rozkład temperatury wzdłuż osi  $x$  po 1000 iteracji



Rys. 12: Rozkład temperatury wzdłuż osi  $x$  po 5000 iteracji



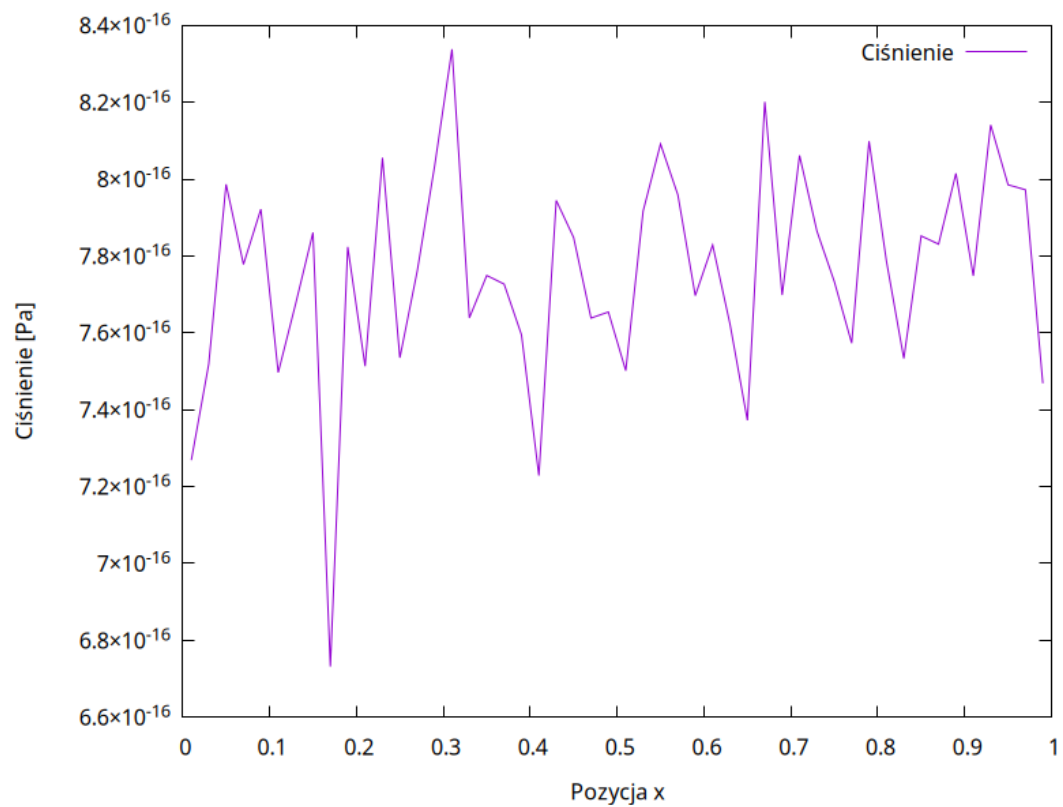
Rys. 13: Rozkład prędkości wzdłuż osi  $x$  w chwili początkowej, po 1000 oraz po 5000 iteracji

#### Zadanie 4

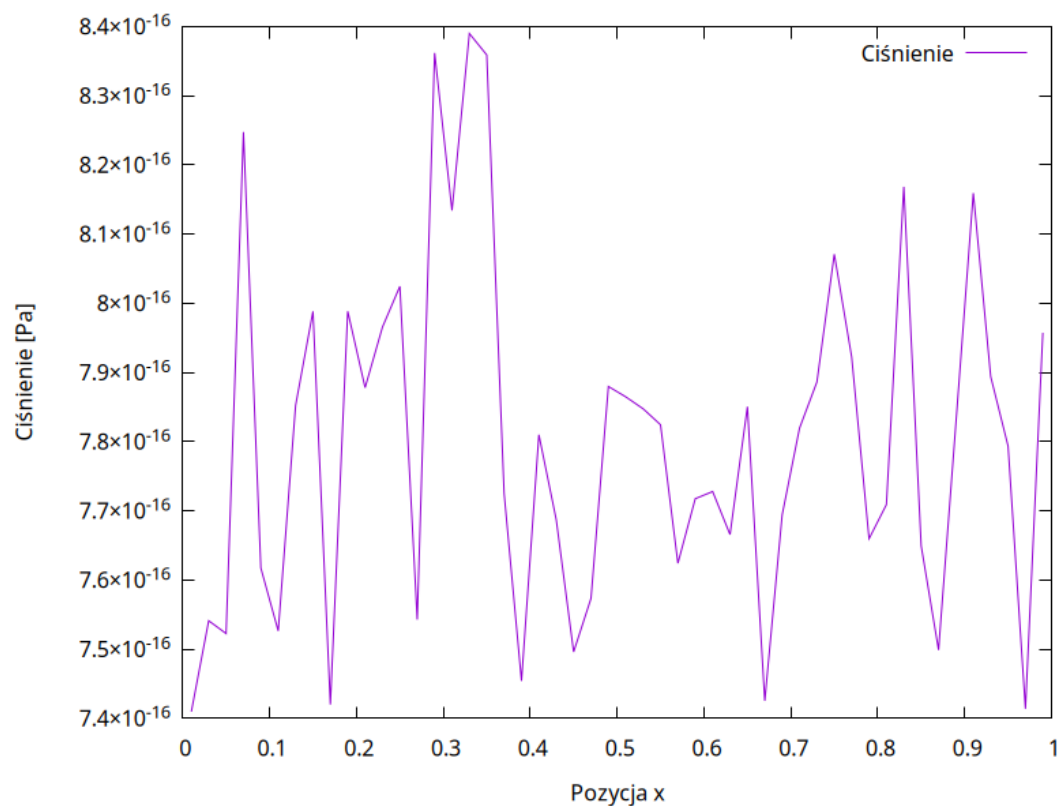
- ★ Warunek początkowy dla cząstek stanowi rozlosowanie ich położenia na całym obszarze przy pomocy rozkładu Maxwella (`init_dist=2`).
- ★ To zadanie również zakłada efektywny promień wynoszący  $r = 10^{-5}$  ze względu na szybsze dochodzenie do równowagi układu o takim parametrze.
- ★ temperatura lewego brzegu ustalona została na wartość 1000 K, prawy brzeg posiada temperaturę wynoszącą 300 K, na pozostałych krawędziach został ustanowiony warunek Neumanna.

Wykresy na rysunkach 14, 15 przedstawiają rozkłady ciśnienia, 16, 17 przedstawiają rozkłady temperatur, natomiast 18 przedstawia wspólny rozkład prędkości. Wszystkie wykresy są w argumentie położenia w osi  $x$ .

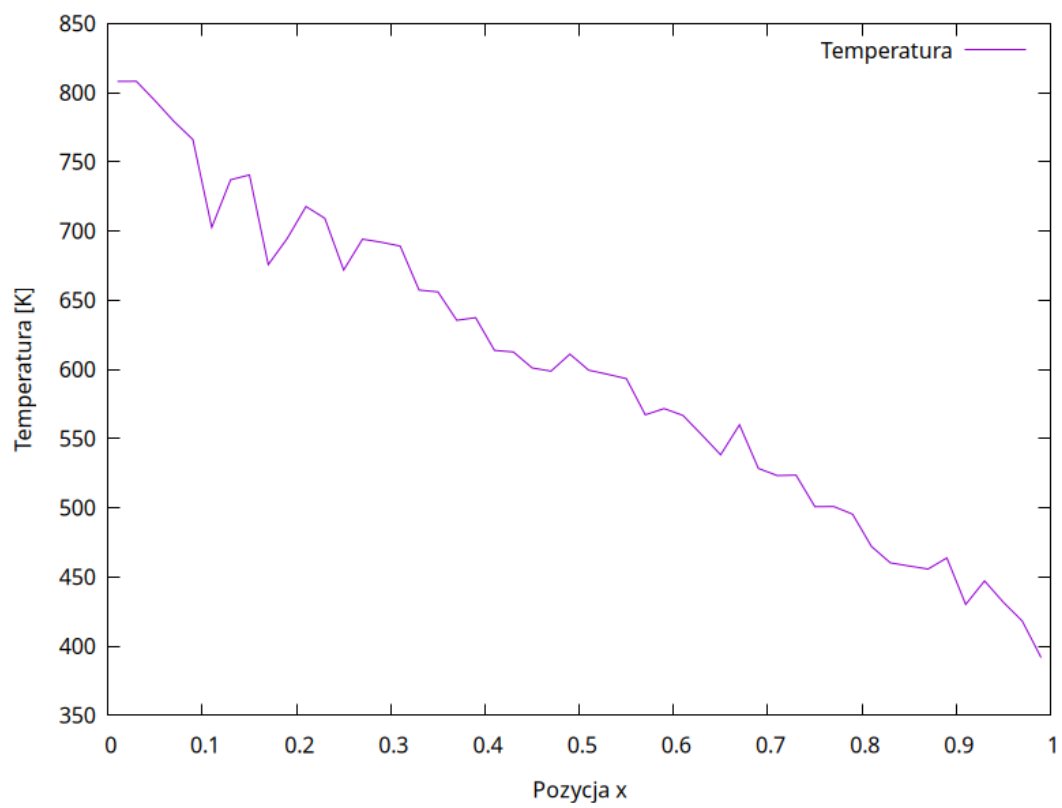
Przy warunku Dirichleta na lewym (temperatura 1000 K) prawym brzegu (temperatura 300 K) obserwujemy lekki rozrzut wartości przy różnej liczbie wykonanych kroków procedury. Spowodowane jest to tym że cząstki nagrzewane są po od lewego brzegu obszaru, natomiast ochładzane na prawym, co implikuje spadkowy gradient wzdłuż kierunku osi  $x$ .



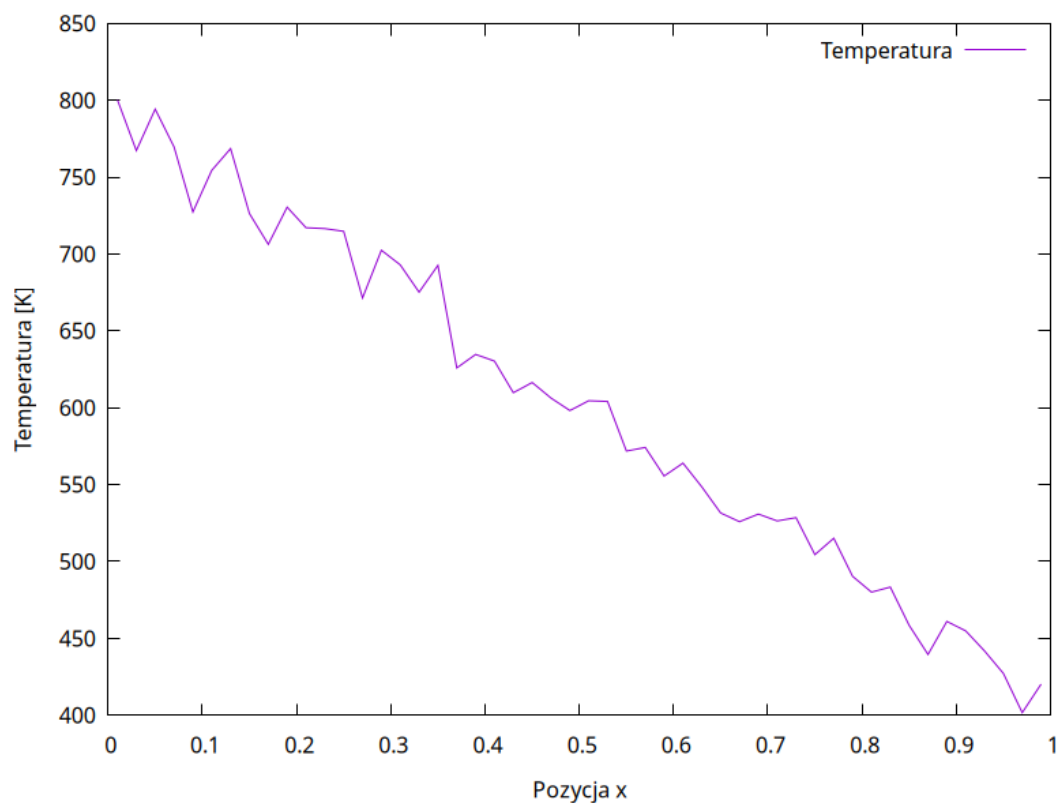
Rys. 14: Rozkład ciśnienia wzdłuż osi  $x$  po 1000 iteracji



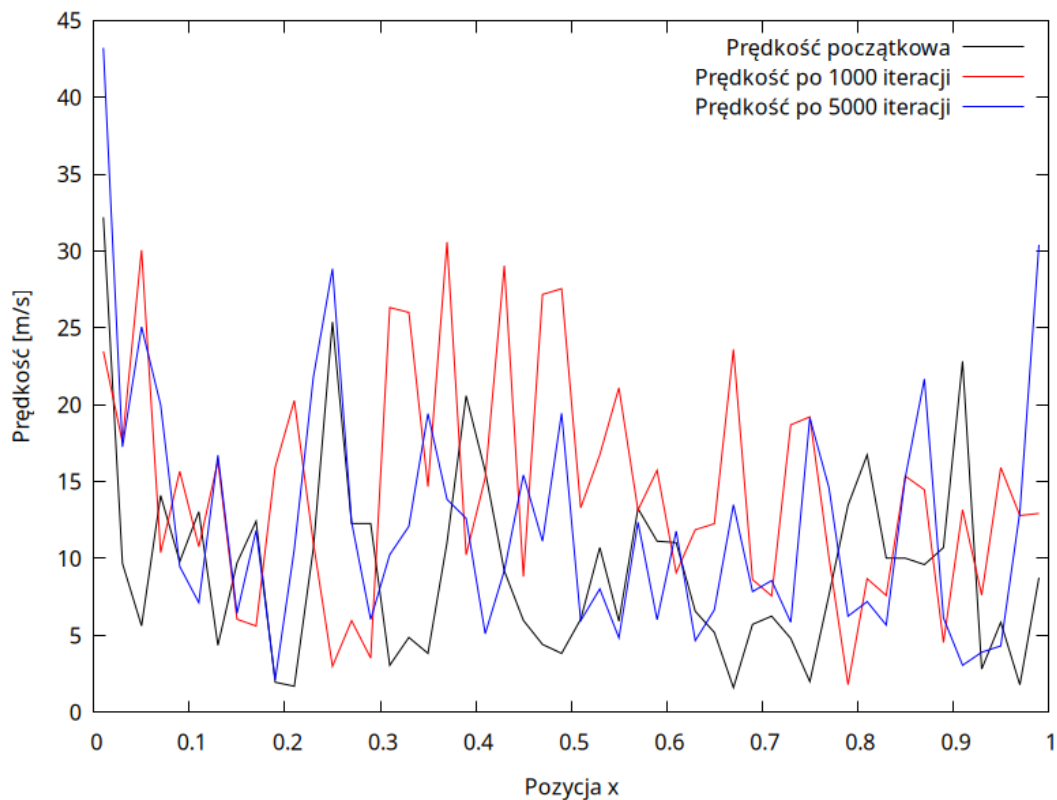
Rys. 15: Rozkład ciśnienia wzdłuż osi  $x$  po 5000 iteracji



Rys. 16: Rozkład temperatury wzdłuż osi  $x$  po 1000 iteracji



Rys. 17: Rozkład temperatury wzdłuż osi  $x$  po 5000 iteracji



Rys. 18: Rozkład prędkości wzdłuż osi  $x$  w chwili początkowej, po 1000 oraz po 5000 iteracji

### 3 Wnioski

W przypadku symulacji z identycznymi energiami kinetycznymi dla wszystkich cząsteczek ( $\text{init\_dist} = 1$ ), system osiągnął stan równowagi termodynamicznej zgodny z rozkładem Maxwella, co potwierdza efektywność metody w modelowaniu fizyki gazów. Natomiast dla skupienia wszystkich cząsteczek w jednej komórce ( $\text{init\_dist} = 3$ ), obserwowano początkowe znaczące opóźnienia w obliczeniach z powodu gęstej koncentracji cząsteczek, które stopniowo rozpraszają się i przyczyniają się do stabilizacji systemu. Eksperymenty z różnymi temperaturami na brzegach (warunki Neumanna i Dirichleta) wykazały istotny wpływ warunków brzegowych na rozkłady temperatury i ciśnienia wzdłuż układu. Wprowadzenie gradientów temperatury na brzegach zewnętrznych spowodowało odpowiednie zmiany w dynamice gazu, co zostało zobrazowane poprzez analizę rozkładów w stanie ustalonym.

Metoda DSMC jest skutecznym narzędziem do modelowania złożonych interakcji w gazach, umożliwiającym badanie zachowania się układów w różnych warunkach początkowych i brzegowych.