

Projekt 13: Propagacja fali termicznej w gazie.

Kacper Połuszejko, 412183

1 Wstęp

Na laboratorium wykonano symulację propagacji fali termicznej. W lewej części układu znajduje się N_1 cząsteczek gazu, które mają rozkład Maxwella-Boltzmanna o temperaturze T_1 , w prawej części znajduje się N_2 cząsteczek także o rozkładzie Maxwella-Boltzmanna dla temperatury T_2 . Po zetknięciu obu układów, gaz znajdzie się w stanie nierównowagowym. Eksperymentalnie można to osiągnąć gwałtownie podnosząc temperaturę w lewej części układu (wybuch). Ponieważ $T_1 \gg T_2$ więc $p_1 \gg p_2$ i w konsekwencji następuje gwałtowny przepływ gazu z lewej części do prawej. Powstaje fala termiczna, której dynamikę zasymulowano korzystając z procedur zawartych w klasie **DSMC_2D**.

2 Metodyka

Ustawiono parametry wspólne dla obu podukładów w pliku wejściowym z danymi:

$$nx = 300, \quad ny = 75, \quad k_B = 1, \quad temp[0-3] = -1 \text{ (warunek Neumanna)}, \quad n_mix = 1, \quad mc1 = 1,0, \\ rc1 = 10^{-4}, \quad nodes = 0.$$

Wartości k_B oraz $mc1$ przyjęto w sposób nierealistyczny ze względu na zbyt małą liczbę cząstek w symulacji. Parametr $rc1$ określał efektywny promień cząsteczki obliczeniowej, który w metodzie **DSMC** reprezentuje zbiór wielu rzeczywistych cząstek — dlatego taki dobór parametru uznano za częściowo uzasadniony. Pozostałe parametry zmieniono w celu wygenerowania początkowego rozkładu.

1. Przygotowano rozkład cząstek w lewym podukładzie. Ustawiono wartości parametrów lewego podukładu:

$$x_min = 0, \quad x_max = 1,0, \quad y_min = 0, \quad y_max = 0,5, \quad temp = 10^4 \text{ (wysoka wartość } T_1), \\ N_1 = 8 \cdot 10^5, \quad init_dist = 2 \text{ (rozkład Maxwella-Boltzmanna)}.$$

Następnie wywołano funkcje:

```
init ()
write_position_velocity ("rv_left.dat");
```

Wygenerowano rozkład Maxwella-Boltzmanna i zapisano go do pliku `rv_left.dat`. Lewy podukład był gotowy.

2. Przygotowano rozkład cząstek w prawym podukładzie. Ustawiono wartości parametrów prawego podukładu:

$$x_min = 1,0, \quad x_max = 2,0, \quad y_min = 0, \quad y_max = 0,5, \quad temp = 300 \text{ (wartość } T_2), \\ N_2 = 10^5, \quad init_dist = 2 \text{ (rozkład Maxwella-Boltzmanna)}.$$

Następnie również wywołano funkcje:

```
init ()  
write_position_velocity ("rv_right.dat");
```

Wygenerowano rozkład MB i zapisano go do pliku `rv_right.dat`. Prawy podukład był gotowy.

3. Przygotowano początkowy rozkład cząstek w całym układzie. Połączono ze sobą pliki i utworzono wejściowy plik startowy do właściwej symulacji:

$$\text{rv_left.dat} + \text{rv_right.dat} \rightarrow \text{pos_vel_start.dat}$$

4. Przeprowadzono symulację gazu w całym układzie. Ustawiono parametry dla całego układu:

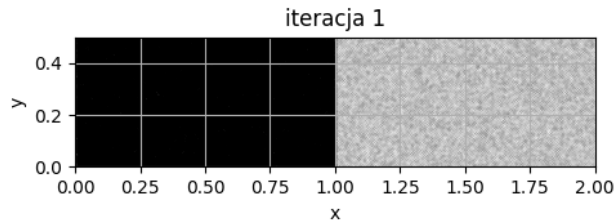
$$x_{min} = 0, \quad x_{max} = 2,0, \quad y_{min} = 0, \quad y_{max} = 0,5,$$

$N = N_1 + N_2 = 9 \cdot 10^5$, $init_dist = 0$ (program wczytuje dane z pliku `pos_vel_start.dat`).

Ustawiono maksymalną liczbę iteracji na 2000 (jako argument funkcji `evolution(tmax, IT_MAX)`) i uruchomiono symulację. Wyniki (rozkłady przestrzenne dla kierunku x) zostały zapisane w katalogu `wyniki` w plikach `nptv_iteracja.dat` w formacie: x, gęstość, ciśnienie, temperatura, $\langle \sqrt{V^2} \rangle$, $j_x = \langle v_x n(x) \rangle$ (składowa x-owa strumienia gęstości cząstek).

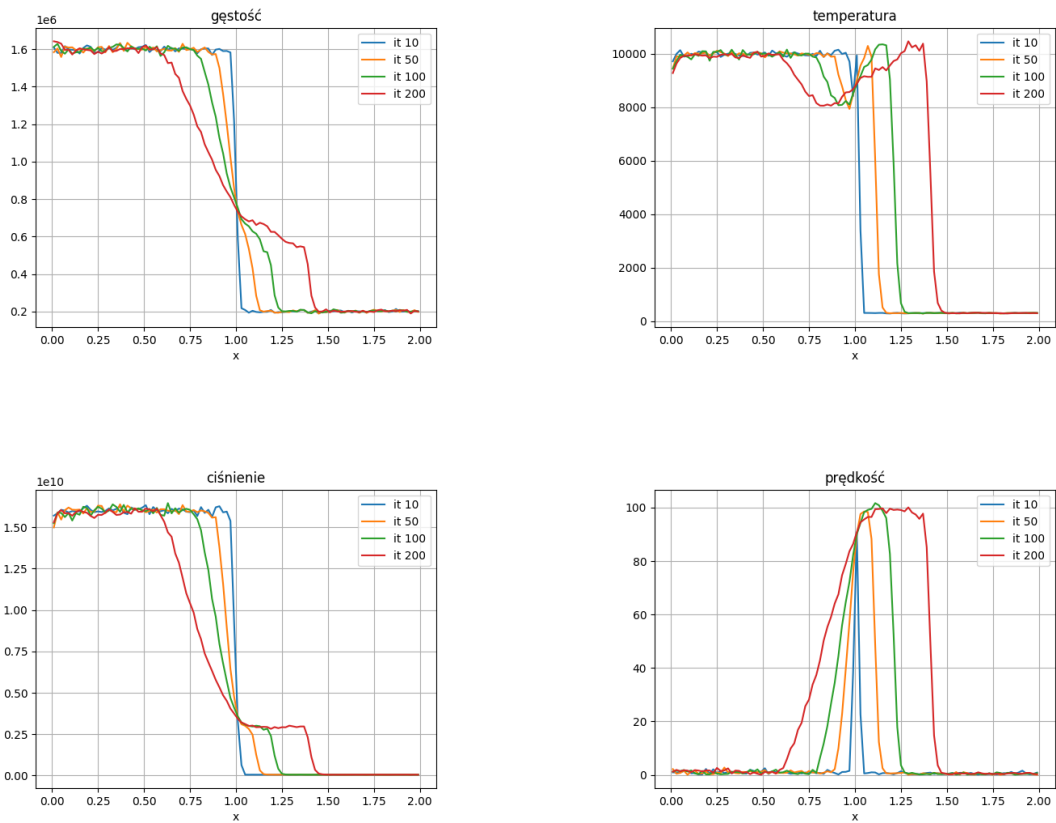
5. Przeprowadzono analizę wyników. Narysowano zmiany przestrzenne: gęstości, ciśnienia, temperatury, prędkości i strumienia cząstek w wybranych chwilach czasowych.

3 Wyniki



Rys. 1: Rozkład cząstek po pierwszym kroku czasowym.

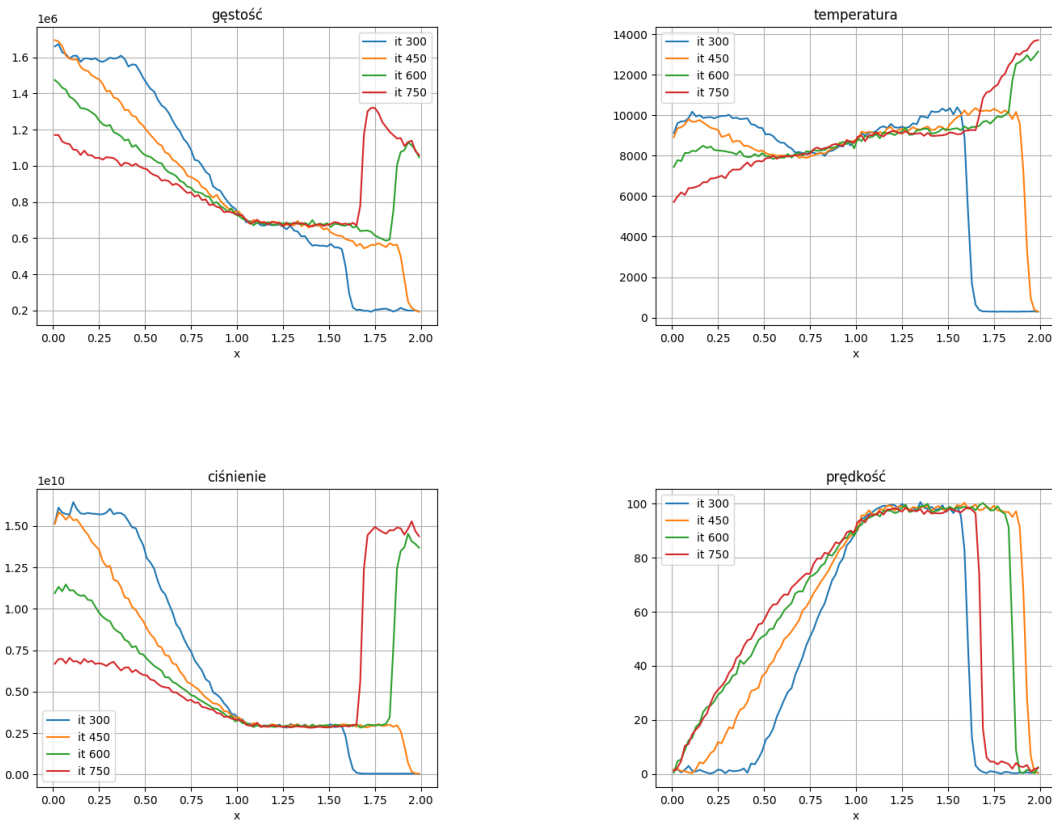
Jak widać na powyższym rysunku, znacznie większa część cząstek znajduje się po prawej stronie układu na początku symulacji.



Rys. 2: Rozkład wielkości opisujących układ na początku symulacji.

W początkowym etapie symulacji zauważono wyraźny podział układu na dwa obszary — lewy i prawy — w których wartości takich wielkości jak gęstość, temperatura i ciśnienie pozostawały stałe. Średnia prędkość cząstek w tych regionach była bliska zeru, co oznacza, że cząstki poruszały się w sposób przypadkowy we wszystkich kierunkach. Wyjątek stanowił centralny obszar układu, w którym zaobserwowano niewielką dodatnią wartość prędkości, wskazującą na kierunkowy przepływ cząstek z bardziej zagęszczonej strefy do mniej zagęszczonej — po prostu tam istniała przestrzeń, by mogły się przemieszczać.

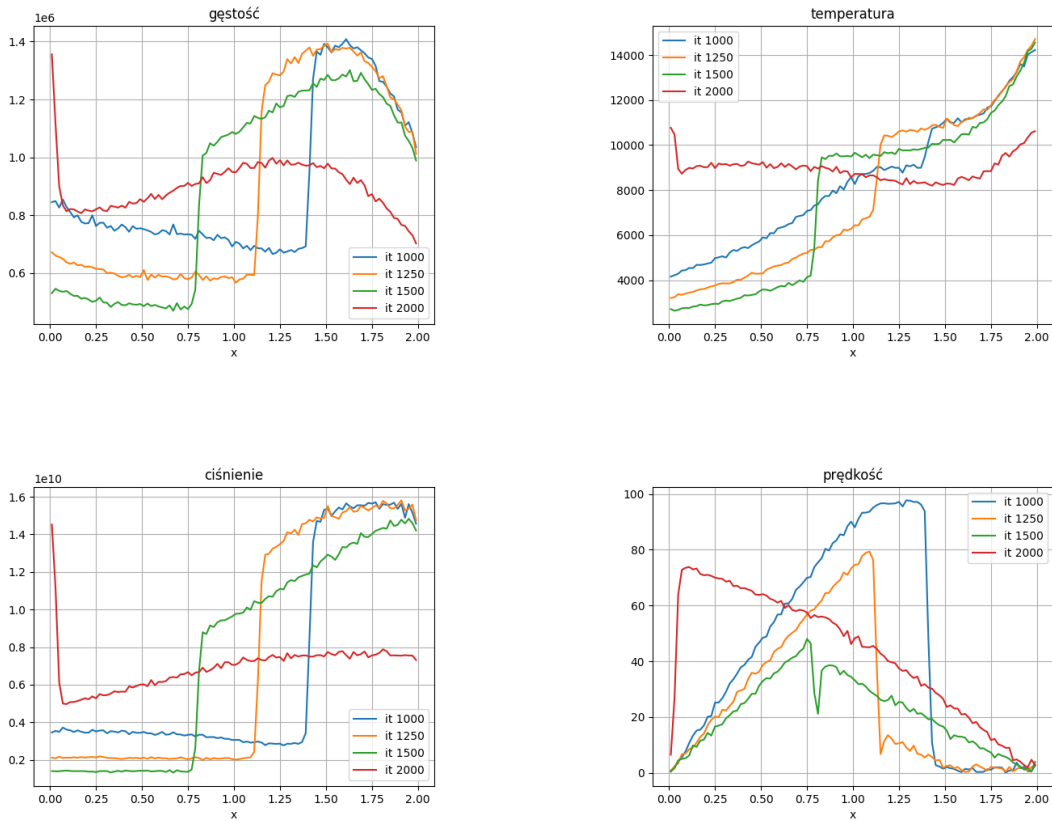
W pierwszych fazach symulacji następowało wyrównywanie gęstości i ciśnienia w całym obszarze układu. Jednocześnie na czele powstającej fali obserwowano wzrost temperatury, co wiązało się z ruchem cząstek z obszaru lewego w stronę prawego. Prędkości atomów wzdłuż kierunku propagacji były rozłożone niemal równomiernie w pewnym zakresie przestrzennym — od środka układu aż po czoło fali temperaturowej.



Rys. 3: Rozkład wielkości opisujących układ na początku symulacji.

W momencie, gdy czoło fali docierało do prawej granicy układu, zaobserwowano lokalne nagromadzenie cząstek. Powstało tam wyraźne maksimum gęstości, które można interpretować jako nową falę odbijającą się od prawej ściany i przemieszczającą się w kierunku przeciwnym — w lewo. Zjawisko to wynikało z faktu, że cząstki docierające do tej granicy były *wypychane* przez kolejne, nadchodzące od lewej strony. W efekcie prowadziło to do powstania znacznego wzrostu ciśnienia w tej części układu, podobnego do tego, które początkowo występowało w lewym zbiorniku.

Równie interesująco zachowywała się temperatura. Jej wartość w miejscu odbicia fali okazała się wyższa niż początkowa temperatura w lewym obszarze układu. Co więcej, po odbiciu fali od prawej granicy średnia prędkość cząstek po jej prawej stronie ponownie dążyła do zera, natomiast na samym czole oraz tuż przed nim obserwowano dużą wartość prędkości (najprawdopodobniej cząstki wciąż przemieszczały się w prawo).



Rys. 4: Rozkład wielkości opisujących układ na początku symulacji.

W miarę postępu symulacji coraz więcej cząstek docierało do prawej części układu, co prowadziło do wzrostu gęstości oraz ciśnienia w tym obszarze. W pewnym momencie wartości te osiągały maksimum i zaczynały się stopniowo stabilizować. Wzrostowi gęstości towarzyszył również charakterystyczny rozkład temperatury — na prawym brzegu pozostawała ona nadal wyraźnie wyższa niż w pozostałej części układu, podczas gdy temperatura po stronie lewej utrzymywała się na znacznie niższym poziomie. Fala termiczna nadal była obecna i przemieszczała się w kierunku przeciwnym, tj. w lewo.

Prędkość cząstek wykazywała silną zależność od ich położenia względem fali. W późniejszych etapach symulacji zaobserwowano, że w rejonie czoła fali prędkość dążyła do zera. Po przejściu czoła przez środek układu, prędkość cząstek zaczynała wykazywać liniowy wzrost wzdłuż położenia, osiągając minimum przy prawej granicy. Jednak pewna liczba cząstek znajdujących się na końcu układu zaczynała poruszać się w przeciwnym kierunku, co sugeruje ich udział w tworzeniu fali odbitej kierującej się w lewo.