

# Projekt 12: Symulacja dynamiki gazu część 1.

Kacper Połuszejko, 412183

## 1 Wstęp

Wykonano symulację dynamiki gazu przy użyciu metody MC. W symulacji cząsteczki gazu mogą zderzać się ze sobą, z brzegiem układu oraz z brzegiem obiektu umieszczonego w środku. Na brzegu zewnętrznym możemy zadać warunki brzegowe:

- **Dirichleta** – wówczas cząstka padająca na brzeg jest zastępowana cząsteczką o energii kinetycznej losowanej z rozkładu Maxwella dla temperatury brzegu,
- **Neumanna** – wówczas ze względu na zerowanie gradientu temperatury cząstki są odbijane (kąt padania = kąt odbicia).

Symulację wykonamy przy pomocy procedur zawartych w klasie **DSMC\_2D**.

Cały obszar obliczeniowy dzieli się na małe komórki o wymiarach  $\Delta x \times \Delta y$  i rozważa się zderzenia jedynie w danej komórce o indeksie  $(i, j)$  oraz 8 jej okalających - cząstka będąca blisko brzegu swojej komórki w przedziale czasu  $(t, t + \Delta t)$  może przejść do sąsiedniej, gdzie zderzy się inną cząstką. Taki zabieg znacząco podnosi wydajność algorytmu.

Elementy algorytmu metody DSMC

- **warunek początkowy**

Ponieważ wyniki symulacji DSMC są rozwiązaniem równania transportowego, więc warunek początkowy będzie determinował zachowanie układu w początkowej fazie symulacji - w stanie nieustalonym. W stanie ustalonym oczekiwany równowagi termodynamicznej gazu czyli Maxwellowskiego rozkładu prędkości (pod warunkiem, że układ nie wymienia ciepła z otoczeniem - co oznacza narzucenie warunku Neumanna na każdej krawędzi brzegu zewnętrznego). Warunek początkowy w postaci rozkładu Maxwella w 2D - punktem wyjścia jest rozkład Boltzmanna (w dziedzinie energii)

$$f_E = \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{d/2} e^{-\frac{E_{\text{kin}}}{k_B T}}, \quad d = 1, 2, 3 - \text{liczba wymiarów} \quad (1)$$

z warunkiem unormowania

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

Ponieważ  $E_{\text{kin}} = m(V_x^2 + V_y^2)/2$  więc

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

i składowe prędkości w obu kierunkach możemy losować z rozkładu normalnego

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

Zazwyczaj interesuje nas maxwellowski rozkład prędkości cząstek tj. zależny tylko i wyłącznie od wartości prędkości, aby go uzyskać musimy dokonać transformacji zmiennych przechodząc do opisu we współrzędnych cylindrycznych

$$f_E(E)dE = f_1(V_x, V_y)dV_x dV_y = 2\pi f_2(V)V dV = \tilde{f}_V^{2D} dV \quad (5)$$

co daje rozkład

$$\tilde{f}_V^{2D} = \frac{mV}{k_B T} e^{-\frac{mV^2}{2k_B T}}, \quad V = \sqrt{V_x^2 + V_y^2} \quad (6)$$

z warunkiem normalizacji

$$\int_0^\infty \tilde{f}_V^{2D} dV = 1 \quad (7)$$

W układzie izolowanym to byłby oczekiwany rozkład w stanie ustalonym.

- **krok czasowy**

Zakładamy, że w czasie  $\Delta t$  cząstka nie może przemieścić się o więcej niż wynosi szerokość/wysokość komórki definiującej jej lokalne otoczenie

$$\Delta t(t) \leq \frac{\min\{\Delta x, \Delta y\}}{V_{\max}(t)}, \quad V_{\max} = \max\{V_1, V_2, \dots, V_{n_{\text{tot}}}\} \quad (8)$$

Cząstki zderzając się ze sobą zmieniają prędkość, zatem  $V_{\max}(t)$  i  $\Delta t(t)$  należy wyznaczać w każdym kroku.

- **zderzenia dwóch cząstek**

W oryginalnej wersji DSMC, cząstki są rozpraszane w komórkach w sposób losowy co oznacza, że na podstawie ich średniej prędkości kwadratowej oraz przekrojów czynnych na rozpraszanie określa się ile par cząstek ma się rozproszyć, a następnie rozprasza się je w układzie środka masy w losowym kierunku (tak aby pęd środka masy był zachowany). W programie, który użyjemy zderzenia są wykrywane a rozpraszane są tylko te cząstki, których trajektorie rzeczywiście się przecinają, natomiast ich kierunki po zderzeniu są randomizowane w układzie środka masy. Takie podejście jest mniej wydajne, ale zwiększa dokładność i rozdzielczość przestrzenną symulacji.

## 2 Metodyka

Symulację wykonano korzystając z gotowej procedury **DSMC\_2D**.

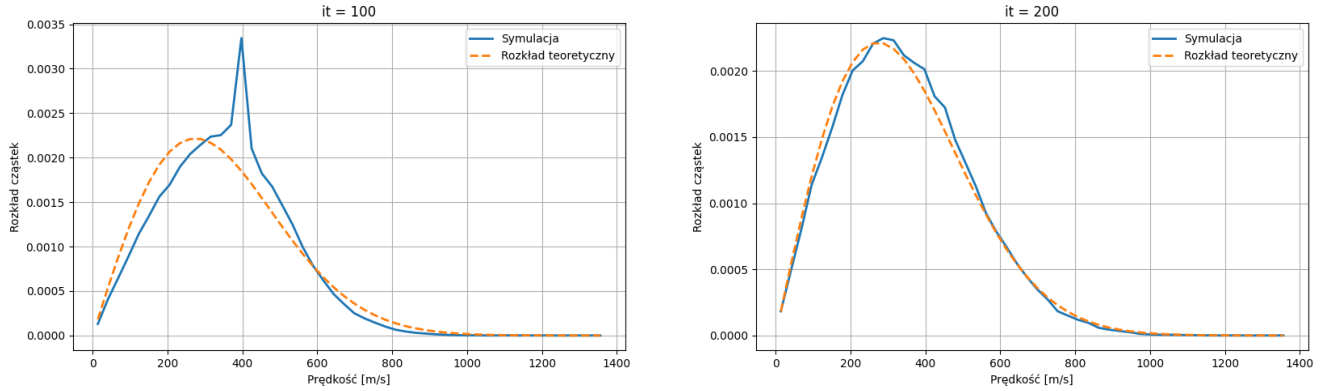
W symulacji przyjęto następujące parametry:  $x_{\min} = 0$ ,  $y_{\min} = 0$ ,  $x_{\max} = 1$ ,  $y_{\max} = 1$ ,  $n_y = n_x = 50$ ,  $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$ ,  $temp = 300$ . Zastosowano warunki brzegowe Neumanna (odbijające) oraz odpowiednią dystrybucję początkową (**init-dist**), której parametry były modyfikowane w trakcie badań. Liczbę cząstek przyjęto jako  $n_{\text{mix}} = 1$ ,  $n_1 = 10^5$ . Masa cząsteczki wynosiła  $m_1 = 40 \cdot 10^{-27}$  kg, a promień  $r_1 = 10^{-6}$  m. W obszarze symulacji nie uwzględniono żadnego obiektu wewnętrznego (**nodes = 0**).

### 3 Wyniki

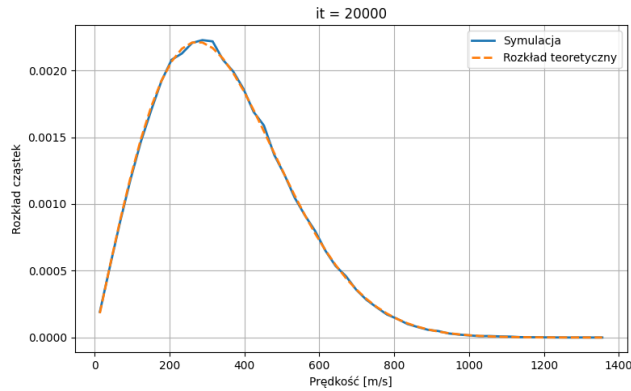
#### Zadanie 1

Dla ustawienia zmiennej `init_dist=1`, cząsteczki miały identyczne energie kinetyczne i prędkości początkowe. Wykonano symulację i narysowano rozkład końcowy prędkości (w stanie ustalonym), a także dwa rozkłady w stanie nieustalonym.

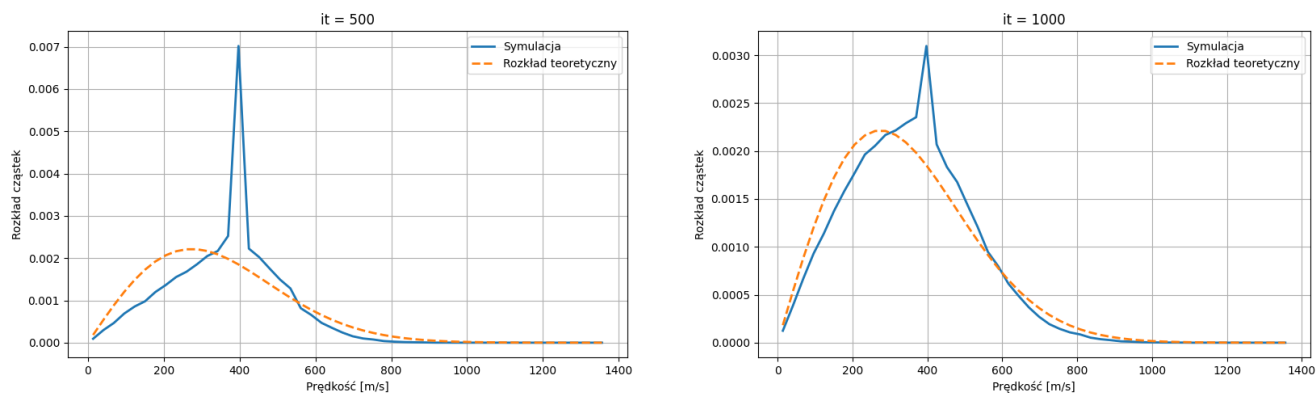
Symulacje przeprowadzono dla dwóch promieni cząsteczek:  $r_1 = 10^{-5}$  m,  $r_2 = 10^{-6}$  m.



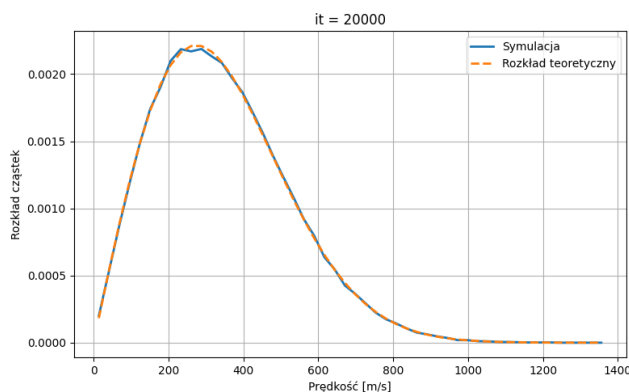
**Rys. 1:** Rozkłady prędkości dla 100 (po lewej) i 200 (po prawej) kroku czasowego. Rozmiar cząstek -  $r = 10^{-5}$ .



**Rys. 2:** Rozkład prędkości po zakończeniu symulacji. Rozmiar cząstek -  $r = 10^{-5}$ .



**Rys. 3:** Rozkłady prędkości dla 500 (po lewej) i 1000 (po prawej) kroku czasowego. Rozmiar cząstek -  $r = 10^{-6}$ .



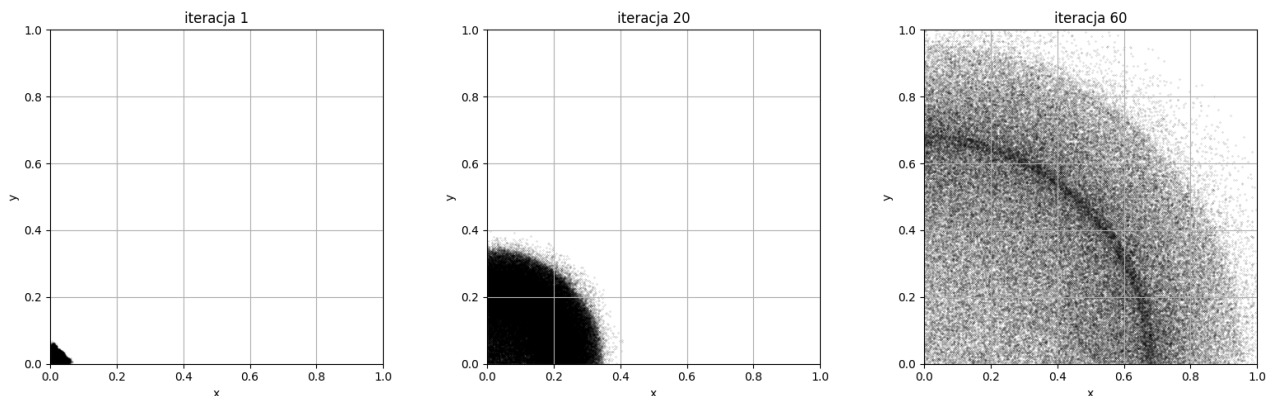
**Rys. 4:** Rozkład prędkości po zakończeniu symulacji. Rozmiar cząstek -  $r = 10^{-6}$ .

Jak widać na wykresach, w obu przypadkach układ dąży do rozkładu Maxwella, przy czym większe cząsteczki osiągają stan równowagi szybciej. Rozkład końcowy pokrywa się dobrze z rozkładem teoretycznym, co potwierdza poprawność działania symulacji.

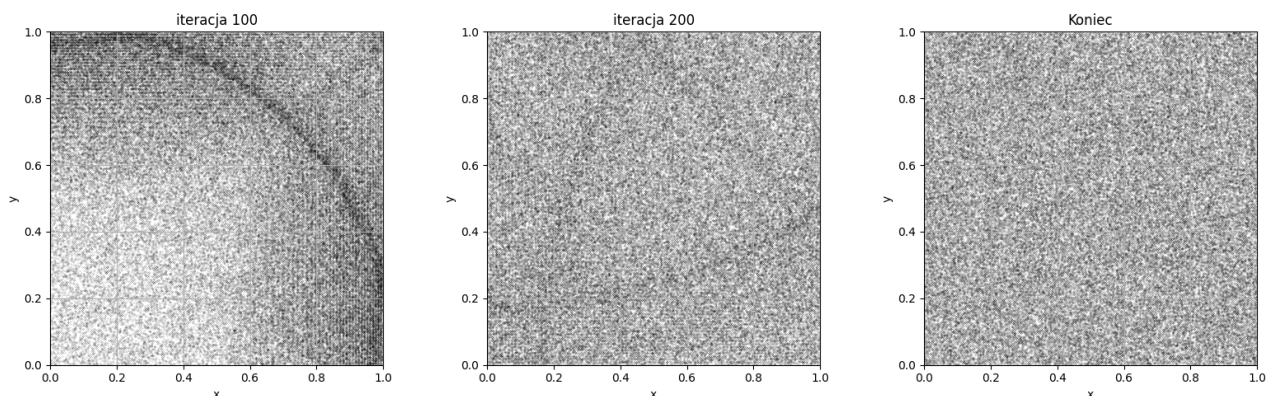
## Zadanie 2

Symulację z zadania 1 powtórzono dla ustawienia `init_dist=3`, co oznacza, że wszystkie cząstki zostały początkowo umieszczone w jednej komórce  $(0,0)$ .

W trakcie symulacji zaobserwowano rozpraszanie się cząstek i stopniowe dążenie do stanu równowagi. Na poniższych wykresach przedstawiono rozkład przestrzenny cząstek w kilku wybranych krokach czasowych:



**Rys. 5:** Rozkłady położenia cząstek dla kroków czasowych 1, 20 i 60. Rozmiar cząstek:  $r = 10^{-6}$ .



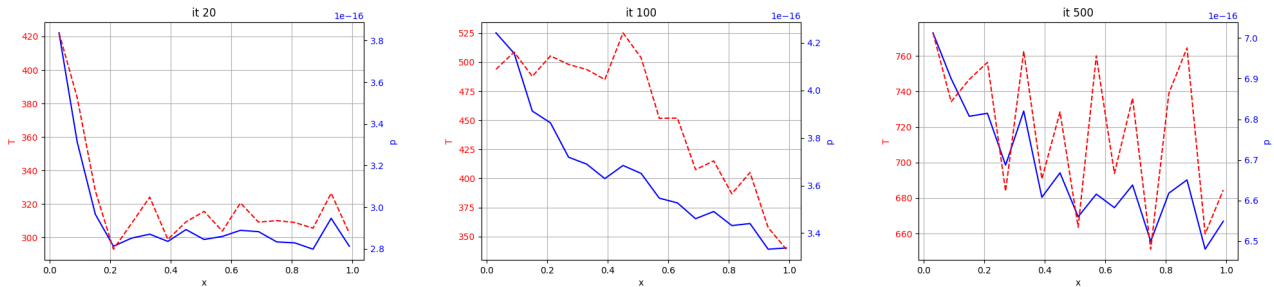
**Rys. 6:** Rozkłady położenia cząstek dla kroków czasowych 100, 200 i 20000. Rozmiar cząstek:  $r = 10^{-6}$ .

Z wyników wynika, że mimo początkowego nagromadzenia cząstek w jednym miejscu, system dąży do równomiernego rozproszenia.

### Zadanie 3

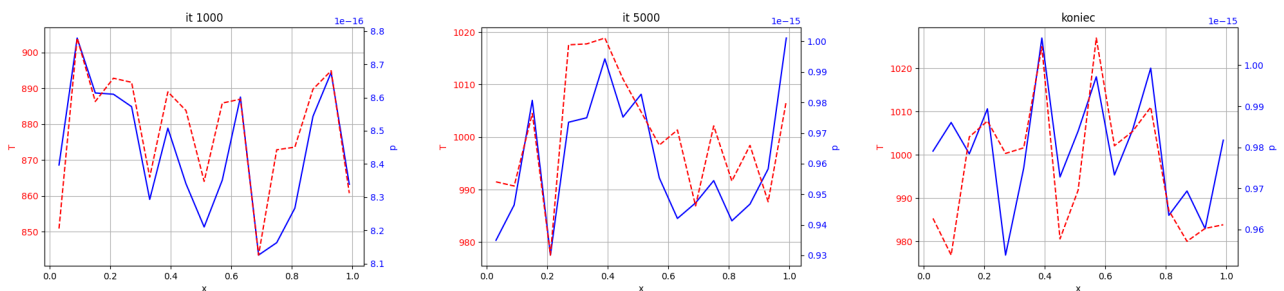
W tej symulacji ustawiono parametr `init_dist=2`, co odpowiada rozkładowi Maxwella w całym obszarze. Przyjęto początkową temperaturę  $T = 300$  K w całym układzie. Na lewym brzegu ustawiono temperaturę  $T = 1000$  K, natomiast na pozostałych krawędziach zastosowano warunek Neumanna.

Przeprowadzono symulację i sporządzono wykresy rozkładu temperatury oraz ciśnienia wzdłuż kierunku  $x$  w kilku wybranych chwilach czasu:



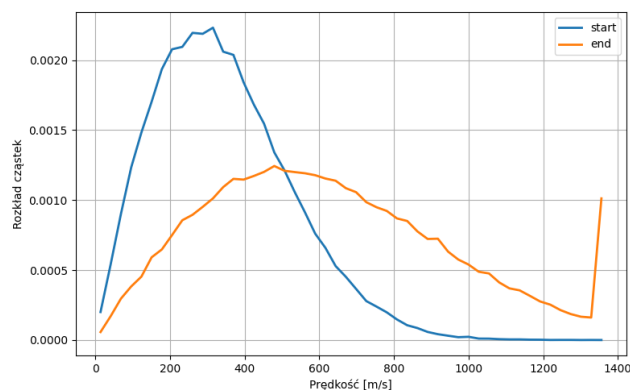
**Rys. 7:** Rozkład temperatury i ciśnienia wzdłuż kierunku x-owego dla kroków czasowych 10, 100 oraz 500.

Jak widać na rysunkach, temperatura po lewej stronie układu w początkowych krokach iteracji jest wyższa niż po prawej. Z czasem temperatura w całym układzie rośnie oraz stabilizuje się. W tym samym czasie rośnie również ciśnienie, co można wytłumaczyć, korzystając np. z równania Clapeyrona.



**Rys. 8:** Rozkład temperatury i ciśnienia wzdłuż kierunku x-owego dla kroków czasowych 1000, 5000 oraz 20000.

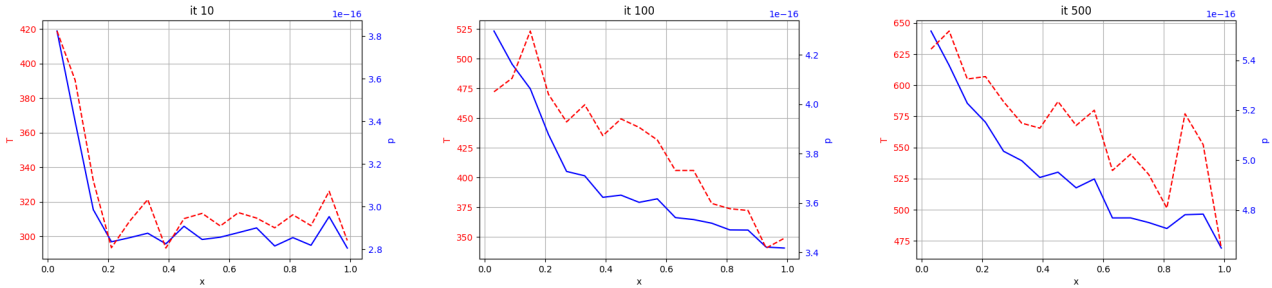
Oba rozkłady są rozkładami Maxwella 2D. Z powodu podwyższonej temperatury na końcu symulacji, rozkład wypłaszcza się i przesuwa w prawo.



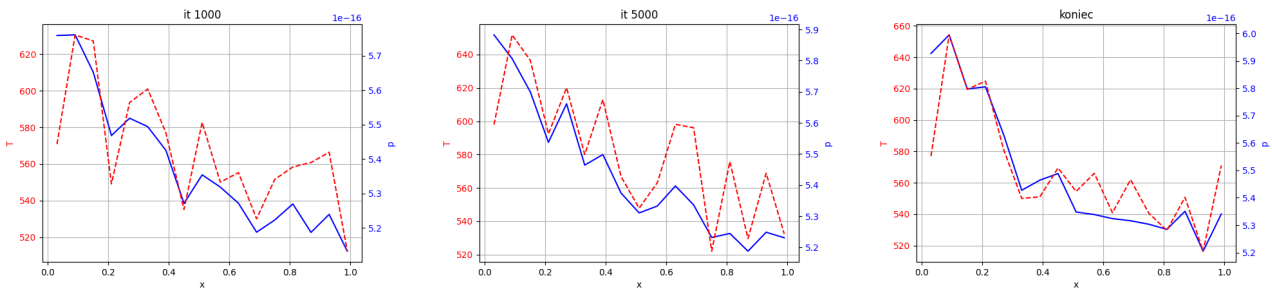
**Rys. 9:** Rozkład prędkości w chwili początkowej oraz końcowej.

## Zadanie 4

Powtórzono symulację z zadania 3, tym razem stosując warunki Dirichleta zarówno na lewym, jak i prawym brzegu. Na lewym brzegu nadal utrzymywano temperaturę  $T = 1000$  K, natomiast na prawym brzegu wprowadzono stałą temperaturę  $T = 300$  K.

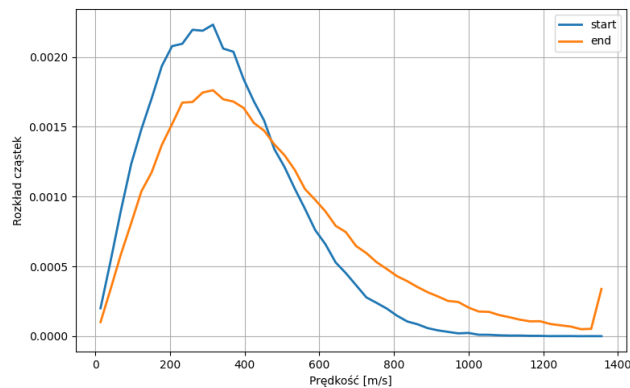


**Rys. 10:** Rozkład temperatury i ciśnienia wzdłuż kierunku x-owego dla kroków czasowych 10, 100 oraz 500.



**Rys. 11:** Rozkład temperatury i ciśnienia wzdłuż kierunku x-owego dla kroków czasowych 1000, 5000 oraz 20000.

Podobnie jak w poprzednim zadaniu, w pierwszych krokach obserwujemy dość wysoki gradient temperatury spowodowany dużą różnicą między temperaturą początkową układu (300 K), a lewej ścianki (1000 K). Pod koniec symulacji gradient stabilizuje się już i jedynie delikatnie fluktuuje. Temperatura nie jest jednak jednorodna, ponieważ różnią się temperatury brzegów układu.



**Rys. 12:** Rozkład prędkości w chwili początkowej oraz końcowej.

Oba rozkłady są rozkładami Maxwella 2D. Z powodu podwyższonej temperatury na końcu symulacji, rozkład wypłaszcza się i przesuwają w prawo.