

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ МЕТОДИКИ РЕШЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА, ПРОВЕДЕННОГО НА ЗАДАЧЕ ОБ ОДНОРОДНОЙ РЕЛАКСАЦИИ В ПРОСТОМ ГАЗЕ

В. С. Афанасьева, А. В. Харитонов

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 607188, г. Саров Нижегородской обл.

Авторы занимаются созданием методики для численного решения кинетического уравнения Больцмана в применении к газовой динамике для трехмерной геометрии. Приведены результаты сравнительных расчетов с точным решением задачи об однородной релаксации в простом газе.

Ключевые слова: кинетическое уравнение Больцмана, трехмерная геометрия, численные расчеты.

1. Введение

Кинетическое уравнение Больцмана [1] составляет теоретическую основу динамики газов. Это нелинейное интегродифференциальное уравнение представляет в математическом отношении очень интересный объект для изучения и опробования различных идей и подходов, прежде всего численных. В связи с отсутствием общих аналитических подходов к решению нелинейных уравнений удастся только в частных случаях построить точное решение. Для общего случая решение кинетического уравнения Больцмана возможно только с помощью численных методов. Авторы занимаются созданием методики для численного решения кинетического уравнения Больцмана, применяя проекционно-сеточный метод с полной аппроксимацией уравнения [2–4]. Разрабатываемая методика положена в основу программы расчета кинетического уравнения Больцмана для трехмерной геометрии в применении к газовой динамике. В качестве модельной задачи [5] взята сферическая одномерная задача, для которой рассчитана трехмерная пространственная сетка. В качестве начальных данных была использована функция Максвелла. Каждый расчет проводился до сходимости решения с заданной точностью. Анализ результатов проведенных расчетов позволяет сделать заключение о вполне удовлетворительной точности исследуемой методики. Авторы выра-

жают благодарность В. В. Аристову за консультацию и полезные советы.

Постановка модельной задачи и результаты расчетов

В кинетической теории газов обычно рассматривают молекулярные модели, которые учитывают молекулярное взаимодействие более или менее точно. Одна из них – это модель твердых сфер. Другие модели представляются в виде материальных точек, взаимодействующих с центральными консервативными силами, и отличаются одна от другой лишь видом выражения для потенциала этих сил. Уравнение Больцмана для газа из твердых сфер имеет вид [1]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f}{\partial x} + X \frac{\partial f}{\partial \xi} = \frac{1}{m} \iiint (f' f'_* - f f_*) B(\theta, V, \sigma) d\theta d\varepsilon d\xi_*,$$

где $f_* = f(\xi_*)$; $f'_* = f(\xi'_*)$; $f' = f(\xi')$;
 $\xi' = \xi - n(nV)$; $\xi'_* = \xi_* + n(nV)$; $V = \xi - \xi_*$;
 $B(\theta, V, \sigma) = V \sigma^2 \sin \theta \cos \theta$ – сечение рассеяния; X – внешняя сила, ξ, ξ_* – скорости молекул после столкновения; ξ', ξ'_* – скорости молекул перед

столкновением; σ – диаметр молекулы; m – масса молекулы; n – единичный вектор, направленный вдоль линии, соединяющей центры молекул в момент столкновения; f – плотность шестимерного пространства (x, ξ) ; $\rho = \int f d\xi$ – плотность вещества;

$v = \frac{\int \xi f d\xi}{\int f d\xi}$ – массовая скорость; $c = \xi - v$ – тепловая скорость.

Плотность энергии задается выражением:

$$E = \frac{1}{2} \int \xi^2 f d\xi.$$

Плотность внутренней энергии задается выражением:

$$E_{\text{вн}} = \frac{1}{2} \int c^2 f d\xi.$$

Для численного решения кинетического уравнения Больцмана применен проекционно-сеточный метод с полной аппроксимацией уравнения. Методические численные расчеты уравнения Больцмана проведены без учета внешней силы и переносного члена, что является, по сути, решением задачи об однородной релаксации в простом газе. Расчеты проведены на модельной задаче с вакуумными и плотными слоями на неподвижной геометрии в многогрупповом кинетическом приближении. В качестве модельной задачи взята сферическая одномерная задача, для которой рассчитана трехмерная пространственная сетка. Расчеты проведены на системе, которая состоит из четырех математических областей. В каждой области определена своя пространственная сетка, общее количество ячеек в системе равно 14800. Пространственная сетка состоит из 20 листов, каждый лист содержит 20 секторов.

Геометрия одного листа приведена на рис. 1.

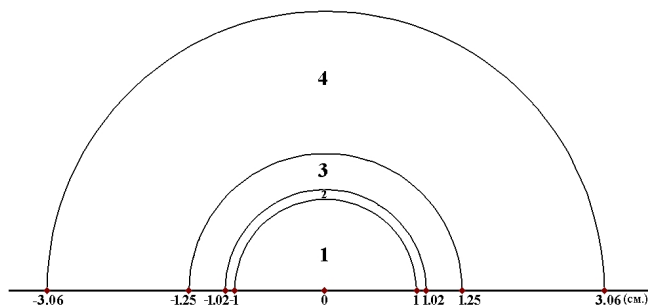


Рис. 1. Двумерная геометрия «листа»

На каждом листе построение пространственной сетки осуществлялось равномерно по радиусу: 1-я область – 15 интервалов, 2-я область – 2 ин-

тервала, 3-я область – 5 интервалов, 4-я область – 15 интервалов; 1, 2, 4-я области – вакуумные слои. В 3-й области в начальный момент времени задавалась плотность вещества 1 г/см^3 . В качестве начальных данных была использована функция Максвелла. Каждый расчет проводился до сходимости решения с заданной точностью. Сетка по скоростной переменной выбиралась равномерной. Результаты расчетов приведены на рис. 2–21.

На рисунках использованы следующие обозначения: A – атомная масса; T – температура (кэВ); V – скорость (см/с); $K = \sigma^2/m$; DT – шаг по времени; DV – шаг по скорости; KG – количество групп.

В настоящей работе приведены результаты расчетов с вариацией атомной массы A , температуры T , количества групп, величиной шага по времени, величиной шага по скоростной переменной. Расчеты проводились и с вариацией значения коэффициента K : $K = 1, 10^2, 10^4, 10^8, 10^{12}$. Все полученные результаты расчетов сравнивались с точными значениями, так как основной целью проводимых расчетов являлось исследование точности методики. Результаты 20 сравнительных расчетов приведены на рис. 2–21. Перед каждым рисунком даются параметры, которые использованы в соответствующих расчетах.

Задачи 1–10 сосчитаны со значениями $A = 1$, $T = 0,001$. В задачах 11–20 значение A изменялось от 40 до 238, а значение T изменялось от 0,03 до 20 кэВ.

Задачи 1–4 рассчитывались с пятью группами по скоростной переменной с шагом $DV = 0,1$. Анализ результатов, приведенных на рис. 2–5, позволяет сделать вывод, что влияние вариации временного шага и величины сечения рассеивания (значения величины K) на точность расчетов незначительны. В задаче 5 шаг по скоростной переменной был увеличен в 2 раза, что привело к значительному искажению численного решения. Результаты этого расчета приведены на рис. 6. Задача 6 аналогична задаче 5, но рассчитывалась с десятью группами по скоростной переменной с шагом $DV = 0,05$. Результаты этого расчета приведены на рис. 7, на котором видно, что получено вполне удовлетворительное совпадение с точным значением. Из анализа результатов расчетов задач 5–6 можно сделать вывод, что от шага по скоростной переменной имеет место наибольшая зависимость точности решения. В остальных расчетах все счетные параметры аккуратно выбирались с учетом сделанных выше выводов относительно выбора сетки по скоростной переменной.

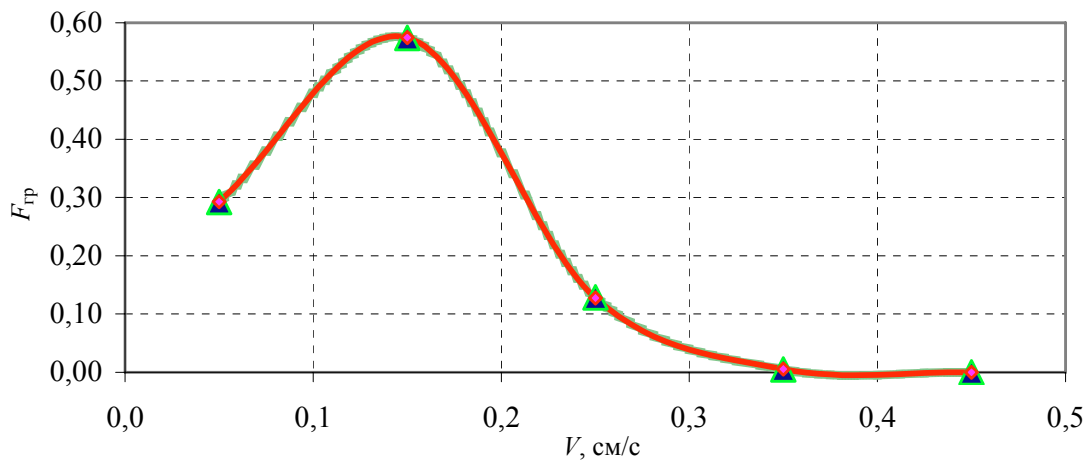


Рис. 2. Функция распределения Максвелла в численном (—▲—) и точном решении (—◆—) для задачи 1 ($A = 1, T = 0,001, K = 10^4, DT = 0,0001, DV = 0,1, KG = 5$)

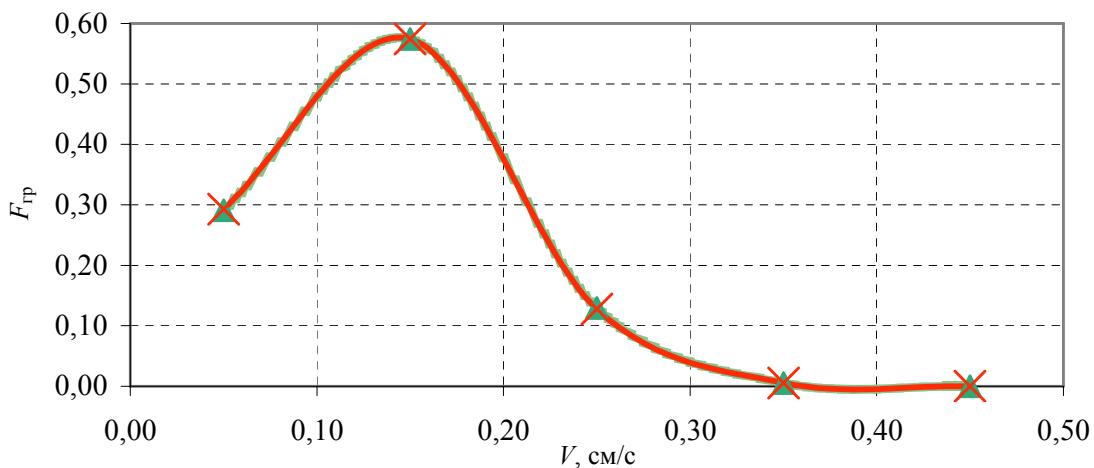


Рис. 3. Функция распределения Максвелла в численном (—▲—) и точном (—×—) решении для задачи 2 ($A = 1, T = 0,001, K = 10^4, DT = 0,0001, DV = 0,1, KG = 5$)

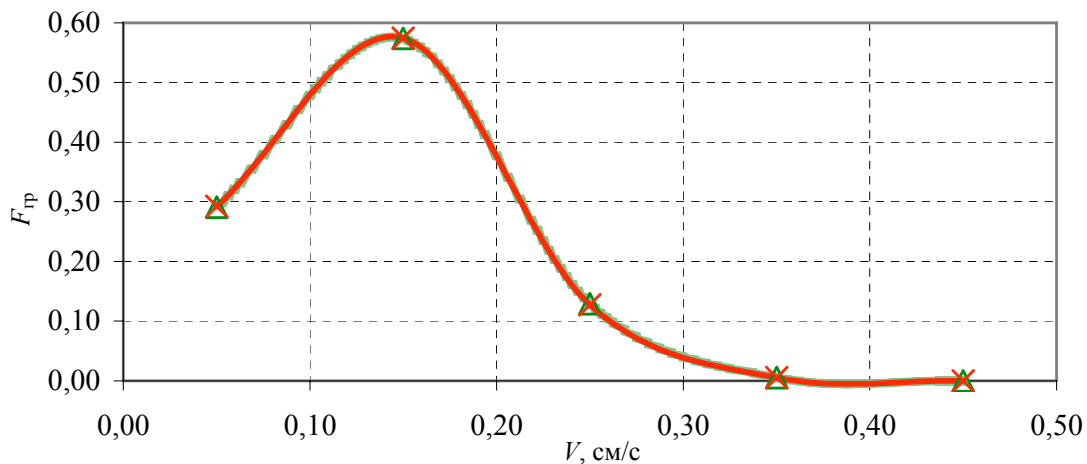


Рис. 4. Функция распределения Максвелла в численном (—▲—) и точном (—×—) решении для задачи 3 ($A = 1, T = 0,001, K = 10^8, DT = 0,0001, DV = 0,1, KG = 5$)

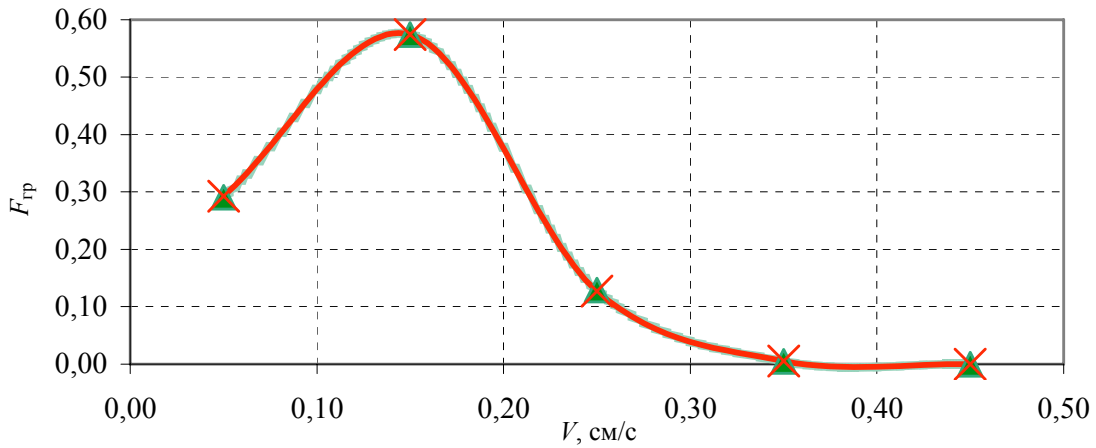


Рис. 5. Функция распределения Максвелла в численном (—▲—) и точном (—×—) решении для задачи 4 ($A = 1, T = 0,001, K = 10^8, DT = 0,001, DV = 0,1, KG = 5$)

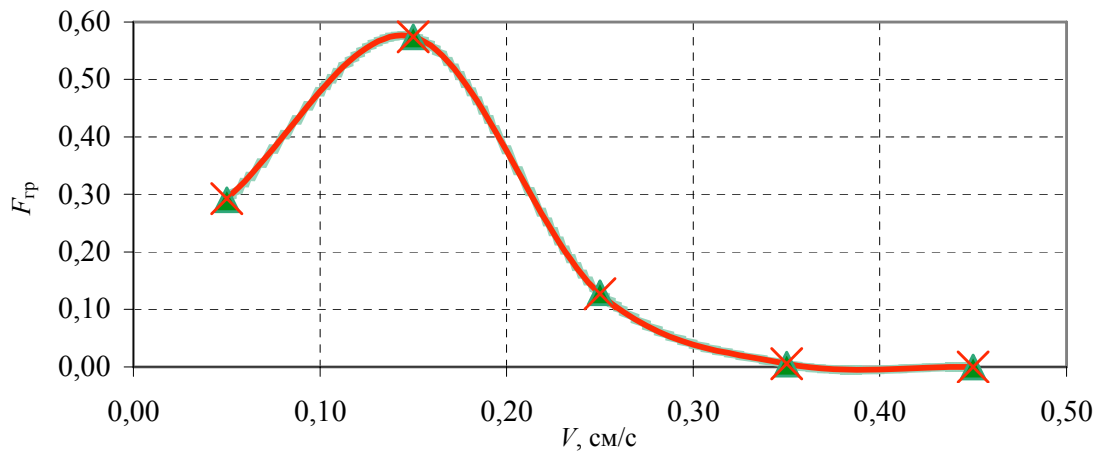


Рис. 6. Функция распределения Максвелла в численном (—▲—) и точном (—×—) решении для задачи 5 ($A = 1, T = 0,001, K = 10^8, DT = 0,5, DV = 0,2, KG = 5$)

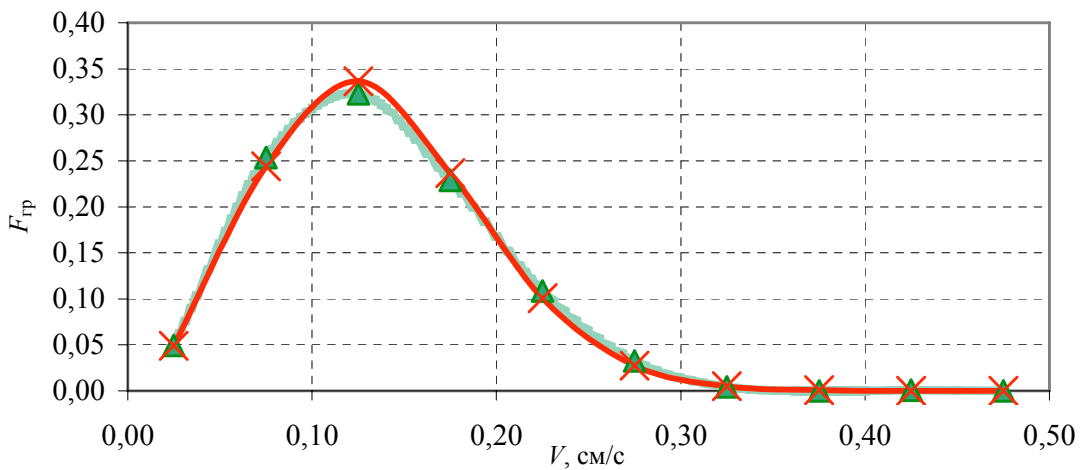


Рис. 7. Функция распределения Максвелла в численном (—▲—) и точном (—×—) решении для задачи 6 ($A = 1, T = 0,001, K = 10^8, DT = 0,5, DV = 0,05, KG = 10$)

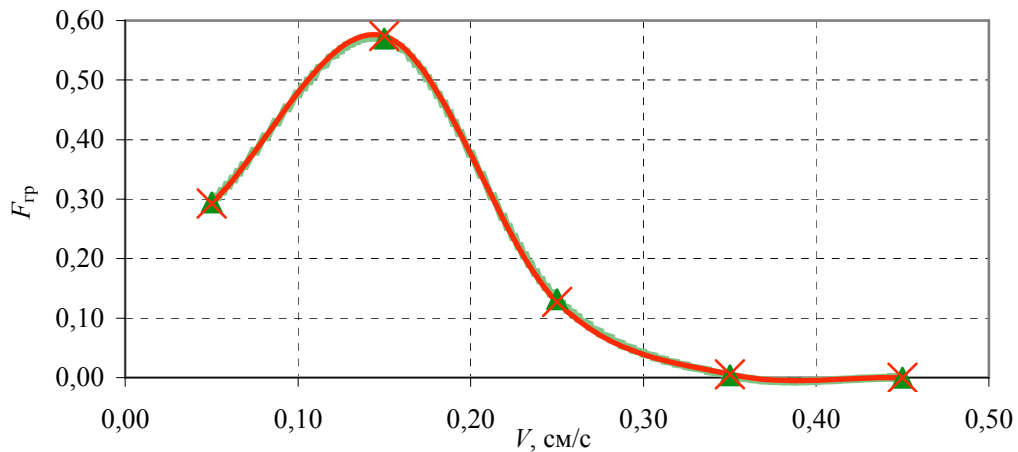


Рис. 8. Функция распределения Максвелла в численном (—▲—) и точном (—×—) решении для задачи 7 ($A = 1, T = 0,001, K = 10^2, DT = 0,0001, DV = 0,1, KG = 5$)

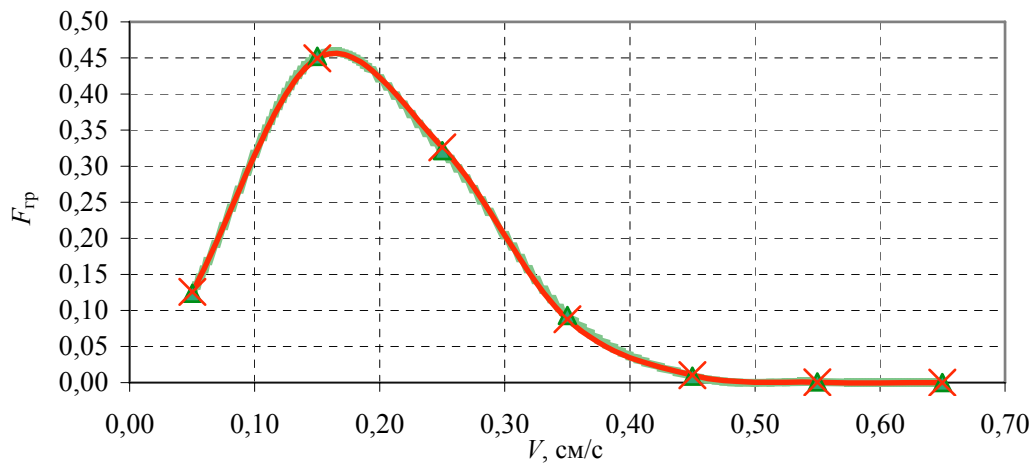


Рис. 9. Функция распределения Максвелла в численном (—▲—) и точном (—×—) решении для задачи 8 ($A = 1, T = 0,001, K = 10^8, DT = 0,0001, DV = 0,1, KG = 7$)

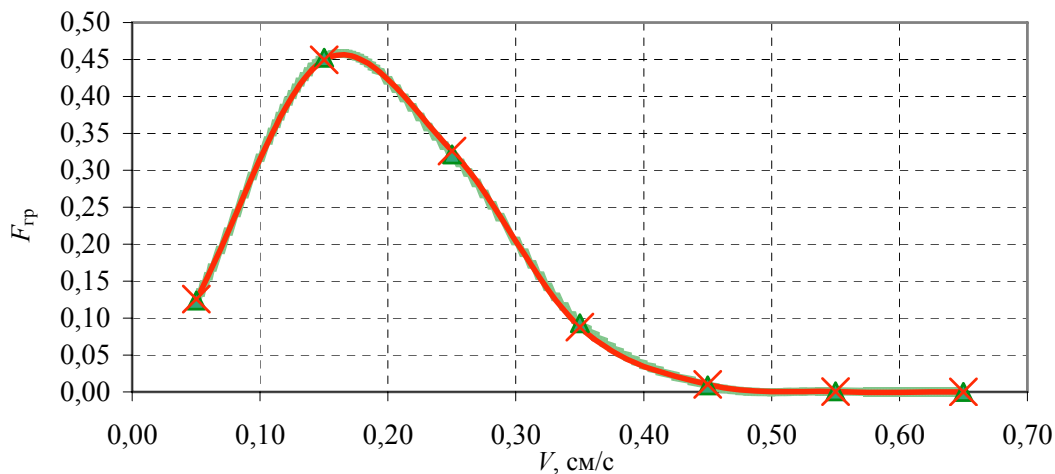


Рис. 10. Функция распределения Максвелла в численном (—▲—) и точном (—×—) решении для задачи 9 ($A = 1, T = 0,001, K = 10^{12}, DT = 0,01, DV = 0,1, KG = 7$)

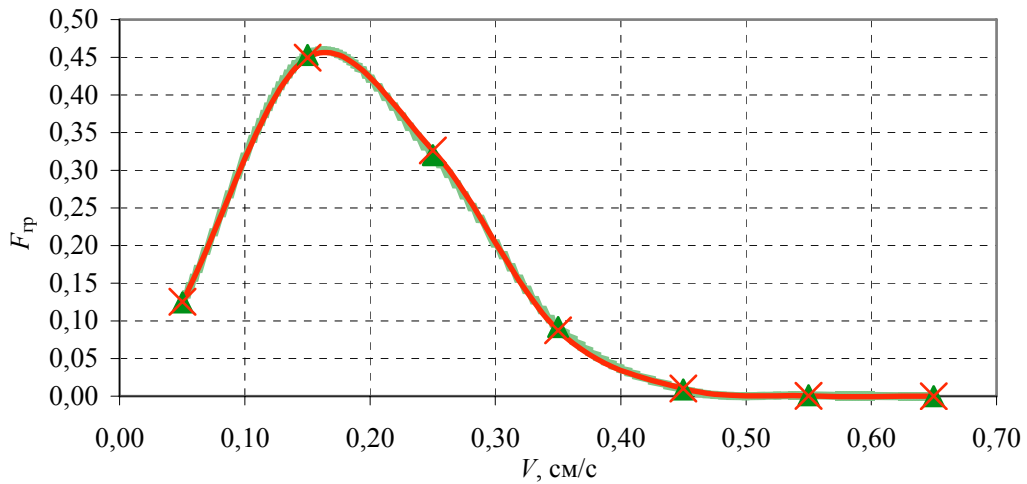


Рис. 11. Функция распределения Максвелла в численном (—▲—) и точном (—×—) решении для задачи 10 ($A = 1, T = 0,001, K = 1, DT = 0,05, DV = 0,1, KG = 7$)

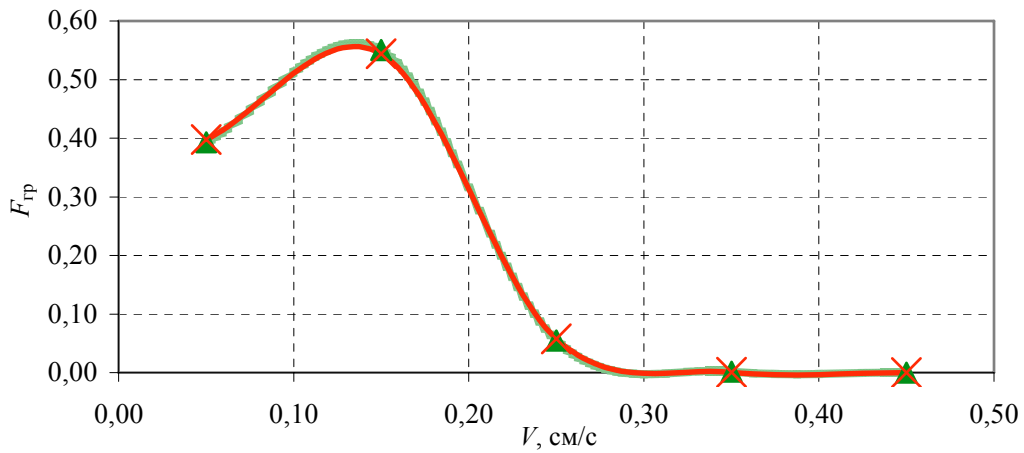


Рис. 12. Функция распределения Максвелла в численном (—▲—) и точном (—×—) решении для задачи 11 ($A = 40, T = 0,03, K = 10^8, DT = 0,01, DV = 0,1, KG = 5$)

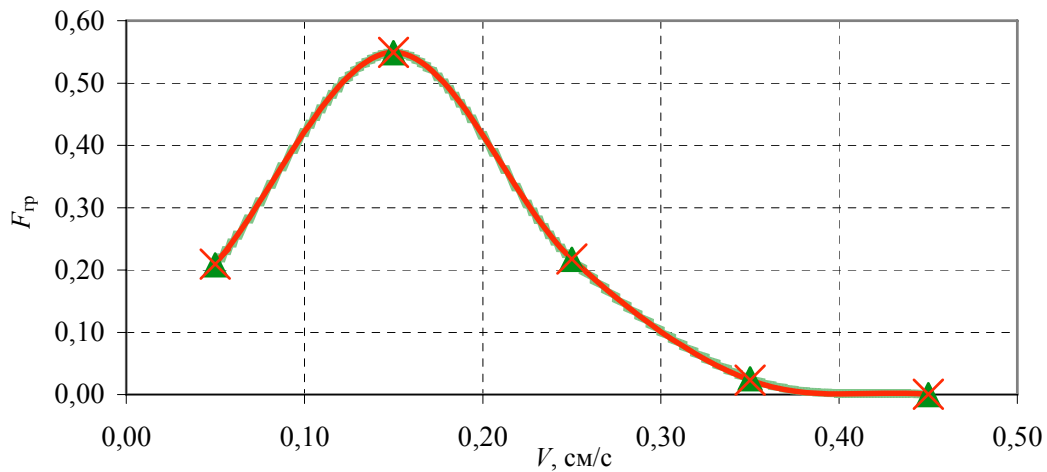


Рис. 13. Функция распределения Максвелла в численном (—▲—) и точном (—×—) решении для задачи 12 ($A = 150, T = 0,2, K = 10^8, DT = 0,01, DV = 0,1, KG = 5$)

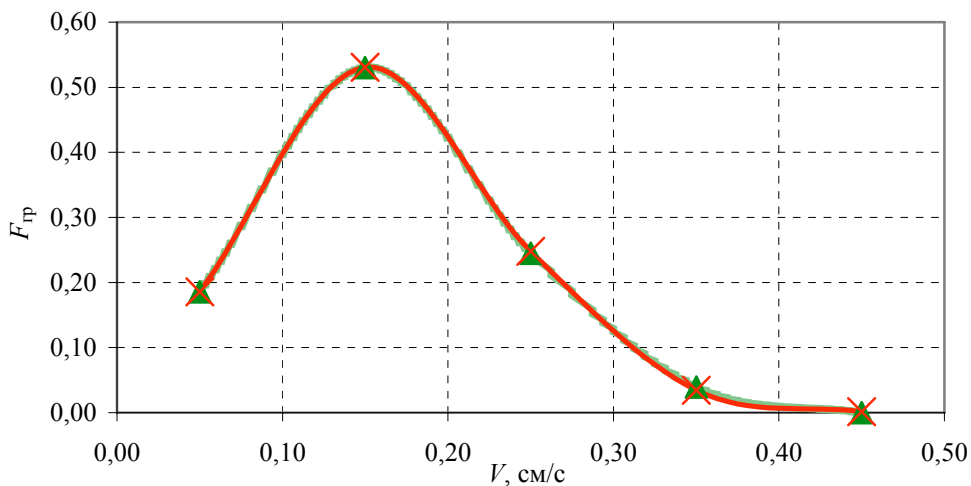


Рис. 14. Функция распределения Максвелла в численном (—▲—) и точном (—×—) решении для задачи 13 ($A = 238, T = 0,35, K = 10^8, DT = 0,01, DV = 0,1, KG = 5$)

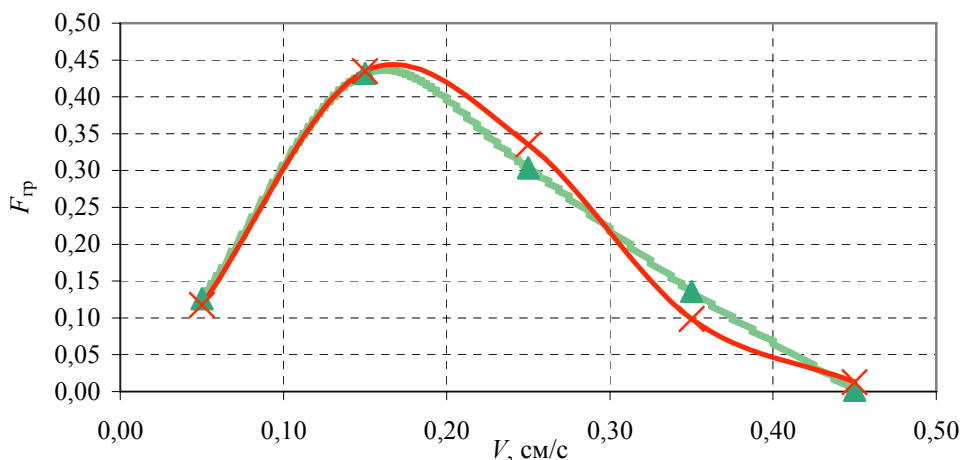


Рис. 15. Функция распределения Максвелла в численном (—▲—) и точном (—×—) решении для задачи 14 ($A = 238, T = 0,5, K = 10^8, DT = 0,01, DV = 0,1, KG = 5$)

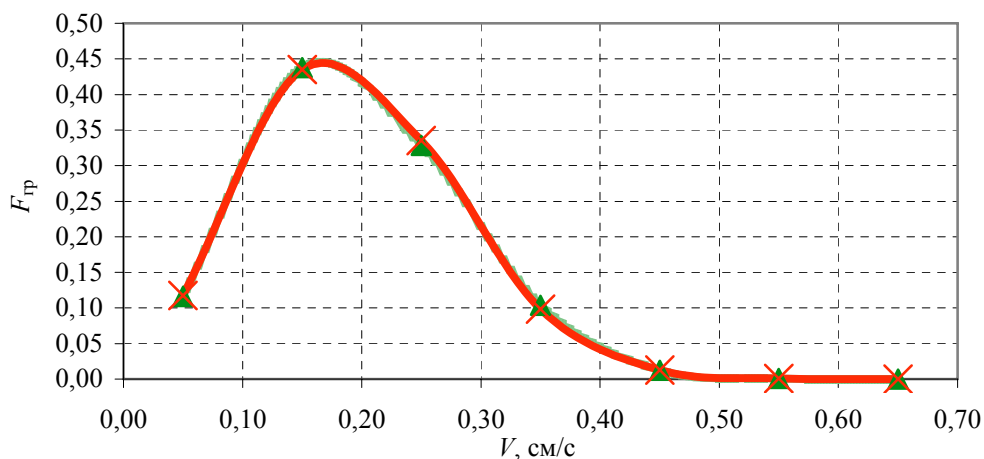


Рис. 16. Функция распределения Максвелла в численном (—▲—) и точном (—×—) решении для задачи 15 ($A = 238, T = 0,5, K = 10^8, DT = 0,01, DV = 0,1, KG = 7$)

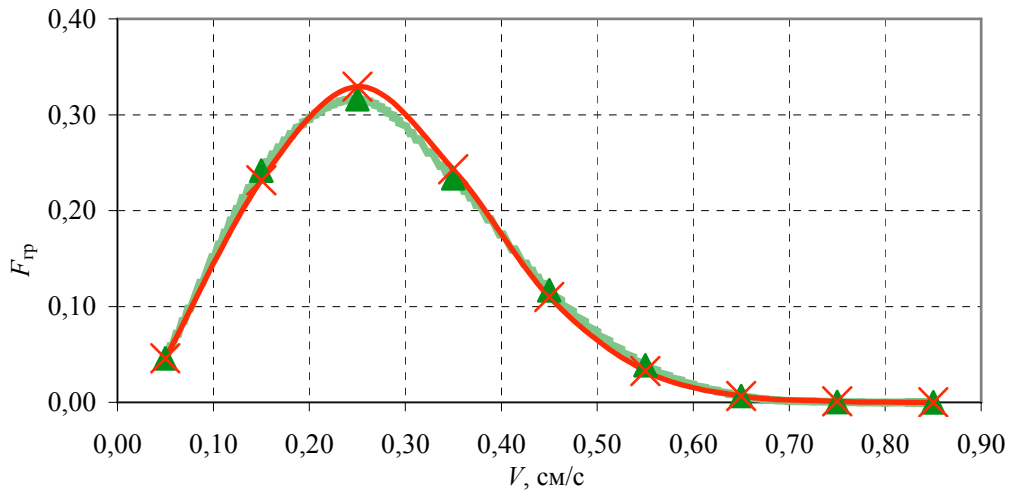


Рис. 17. Функция распределения Максвелла в численном (—▲—) и точном (—×—) решении для задачи 16 ($A = 238, T = 1, K = 10^8, DT = 0,01, DV = 0,1, KG = 9$)

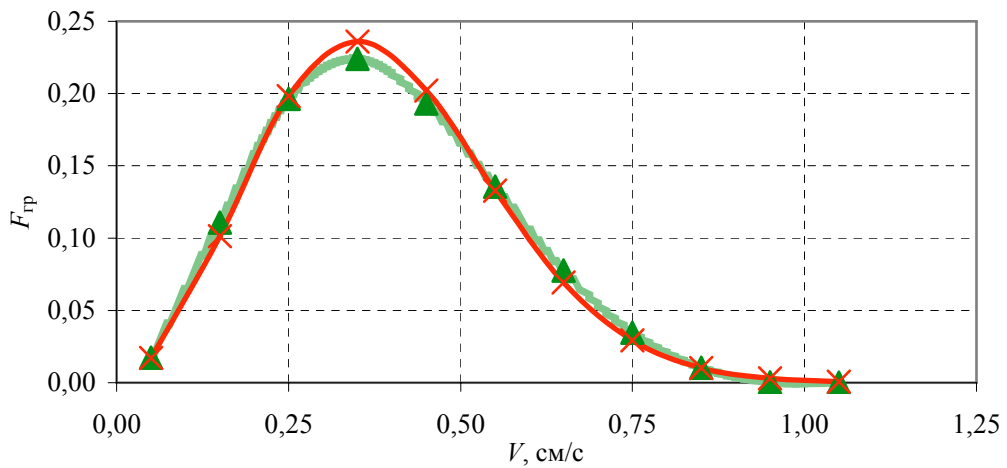


Рис. 18. Функция распределения Максвелла в численном (—▲—) и точном (—×—) решении для задачи 17 ($A = 238, T = 2, K = 10^8, DT = 0,01, DV = 0,1, KG = 11$)

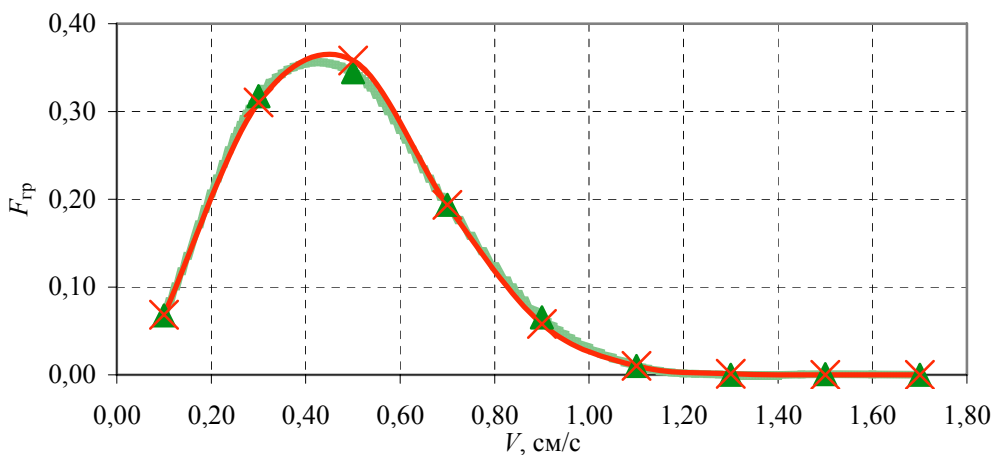


Рис. 19. Функция распределения Максвелла в численном (—▲—) и точном (—×—) решении для задачи 18 ($A = 238, T = 3, K = 10^8, DT = 0,05, DV = 0,2, KG = 9$)

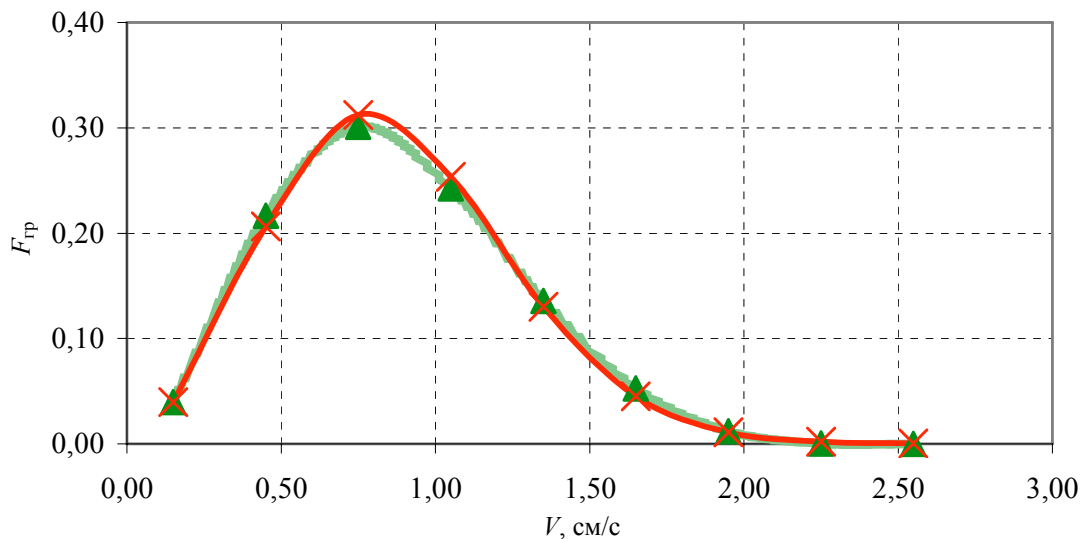


Рис. 20. Функция распределения Максвелла в численном (—▲—) и точном (—×—) решении для задачи 19 ($A = 238, T = 10, K = 10^8, DT = 0,05, DV = 0,3, KG = 9$)

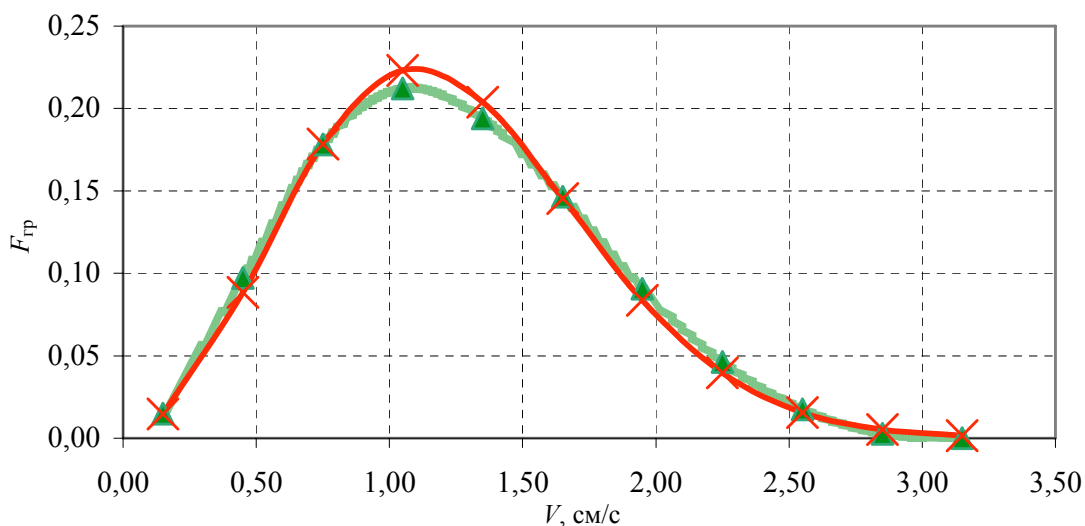


Рис. 21. Функция распределения Максвелла в численном (—▲—) и точном (—×—) решении для задачи 20 ($A = 238, T = 20, K = 10^8, DT = 0,05, DV = 0,3, KG = 11$)

Заклучение

Авторы, занимаясь созданием методики и программы расчета кинетического уравнения Больцмана, проводят последовательное исследование и тестирование, как самой методики, так и программы. В данной статье приведены результаты сравнительных расчетов с точным решением задачи об однородной релаксации в простом газе. Расчеты проведены на модельной задаче с вакуумными и плотными слоями на неподвижной геометрии в многогрупповом кинетическом приближении.

В качестве начальных данных была использована функция Максвелла. Расчеты проводились с вариацией атомной массы A , температуры T , количества групп, величиной шага по времени, величиной шага по скоростной переменной и величиной сечения рассеивания K . Каждый расчет проводился до сходимости решения с заданной точностью. Анализ результатов проведенных расчетов позволяет сделать заключение о вполне удовлетворительной точности исследуемой методики. Наиболее сильное влияние на точность оказывает сетка по скоростной переменной. При разумно выбран-

ной сетке по скоростной переменной максимальное отличие расчетных результатов отличается от точного решения не более 1–2 %.

Список литературы

1. Черчиньяни К. Теория и приложения уравнения Больцмана. М.: Мир. 1978.
2. Самарский А. А., Попов Ю. П. Разностные схемы газовой динамики. М.: Наука. 1975.
3. Марчук Г. И., Агошков В. И. Введение в проекционно-сеточные методы. М.: Наука. 1981.

4. Софронов И. Д., Урм В. Я., Харитонов А. В. О решении уравнения $\frac{\partial U}{\partial t} + \bar{\Omega} \text{grad} U = 0$ методом конечных разностей на нерегулярных сетках // Численные методы механики сплошной среды. 1974. Т. 5, № 2. Новосибирск.

5. Аристов В. В., Черемисин Ф. Г. Прямое численное решение кинетического уравнения Больцмана. М.: Вычислительный центр РАН, 1992.

Статья поступила в редакцию 14.11.2014