УДК 519.633

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ МЕТОДИКИ РЕШЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА, ПРОВЕДЕННОГО НА ЗАДАЧЕ ОБ ОДНОРОДНОЙ РЕЛАКСАЦИИ В ПРОСТОМ ГАЗЕ С ПРОИЗВОЛЬНО ЗАДАННЫМИ НАЧАЛЬНЫМИ ДАННЫМИ

В. С. Афанасьева, А. В. Харитонов

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

Приведены результаты сравнительных расчетов с точным решением задачи об однородной релаксации в простом газе с произвольно заданными начальными данными.

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

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 удается только в частных случаях построить точное решение. Для общего случая решение кинетического уравнения Больцмана возможно только с помощью численных методов. Авторы статьи 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 работе [6] приведены результаты сравнительных расчетов с точным решением задачи об однородной релаксации в простом газе, в качестве начальных данных была использована функция Максвелла. В данной статье приведены результаты сравнительных расчетов с точным решением задачи об однородной релаксации в простом газе, в качестве начальных данных использовались произвольно выбранные значения. 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. Каждый расчет проводился до сходимости решения с заданной точностью. Полученная функция распределения использовалась для вычисления макровеличин. Значения этих макровеличин подставлялись в функцию Максвелла и проводились сравнения с полученными расчетными величинами. Анализ результатов проведенных расчетов позволяет сделать заключение о вполне удовлетворительной точности исследуемой методики при используемой постановке задачи.

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:

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

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 – массовая плотность в шестимерном пространстве (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:

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

Другие обозначения взяты из работы [1].

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.

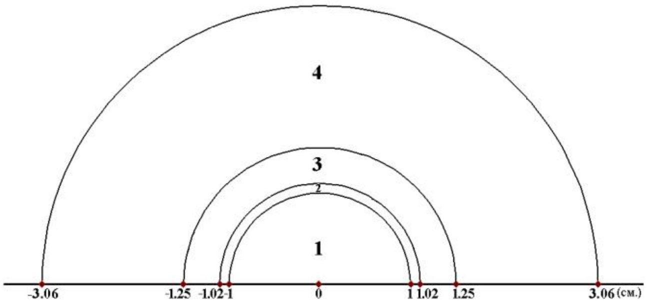

Рис. 1. Двумерная геометрия «листа»

На каждом листе построение пространственной сетки осуществлялось равномерно по радиусу: область 1 – 15 интервалов, область 2 – 2 интервала, область 3 – 5 интервалов, область 4 – 15 интервалов. Сетка по скоростной переменной выбиралась равномерной. Области 1, 2, 3 – вакуумные слои. В области 3 в начальный момент времени в качестве начальных данных задавались значения функции распределения в различных скоростных группах таким образом, чтобы плотность вещества соответствовала задаваемому значению. Каждый расчет проводился до сходимости решения с заданной точностью. Полученная функция распределения использовалась для вычисления макровеличин. Значения этих макровеличин подставлялись в функцию Максвелла и проводились сравнения с полученными расчетными величинами. Функция распределения Максвелла в численном и точном решении для задач 1–17 приведена на рис. 2–19. На рис. 10 показана эволюция функции распределения для задачи 8. На рисунках использованы следующие обозначения: A – атомная масса; V – скорость (см/с); $K = \sigma^2/m$; DT – шаг по времени; DV – шаг по скорости; KG – количество групп.

Расчеты проведены с вариацией задания начальных данных, атомной массы A, количества групп, величины шага по скоростной переменной. В задаче 1 в качестве начальных данных взята функция Максвелла. В задачах 2–6 в начальный момент времени в качестве начальных данных задавались значения функции распределения в третьей скоростной группе таким образом, чтобы плотность вещества равнялась 1 г/см^3.

В задаче 7 в начальный момент времени в качестве начальных данных задавались значения функции распределения в третьей и в шестой скоростных группах таким образом, чтобы плотность вещества равнялась 1 г/см^3.

В задаче 8 в начальный момент времени в качестве начальных данных задавались значения функции распределения во второй, в пятой и седьмой скоростных группах таким образом, чтобы плотность вещества равнялась 1 г/см^3.

В задаче 9 в начальный момент времени в качестве начальных данных задавались значения функции распределения в четвертой, пятой и шестой скоростных группах таким образом, чтобы плотность вещества равнялась 1 г/см^3.

Задача 10 аналогична задаче 9, но число групп равно одиннадцати. В задаче 11 – 5 групп, плотность вещества задавалась 18,7 г/см^3.

В задаче 12 – 5 групп, в начальный момент времени в качестве начальных данных задавались значения функции распределения во второй скоростной группе таким образом, чтобы плотность вещества равнялась 1 г/см^3 для полярного угла 120 градусов.

Задача 13 аналогична задаче 12, но начальные данные задавались для полярного угла 60 градусов.

Задача 14 – 7 групп, в начальный момент времени в качестве начальных данных задавались значения функции распределения во второй скоростной группе таким образом, чтобы плотность вещества равнялась 18,7 г/см^3.

Задача 15 – 7 групп, в начальный момент времени в качестве начальных данных задавались значения функции распределения во второй скоростной группе таким образом, чтобы плотность вещества равнялась 100 г/см^3.

Задача 16 – 5 групп, в начальный момент времени в качестве начальных данных задавались значения функции распределения во второй скоростной группе таким образом, чтобы плотность вещества равнялась 18,7 г/см^3.

Задача 17 – 7 групп, в начальный момент времени в качестве начальных данных задавались значения функции распределения в третьей скоростной группе таким образом, чтобы плотность вещества равнялась 100 г/см^3.

Для каждой задачи перед рисунками приведены параметры расчета. Параметры расчета для задачи 1: $A = 1$, $K = 10^8$, $DT = 0{,}0001$, $DV = 0{,}1$, $KG = 5$.

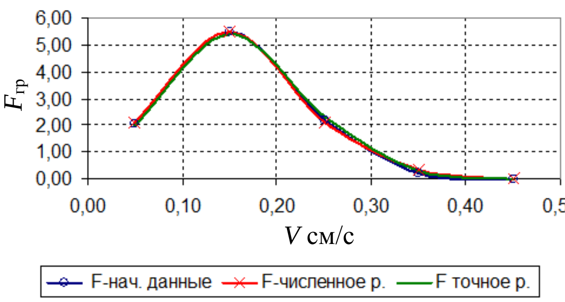

Рис. 2. Функция распределения в численном и точном решении для задачи 1

Параметры расчета для задачи 2: $A = 1$, $K = 10^8$, $DT = 0{,}0001$, $DV = 0{,}1$, $KG = 5$.

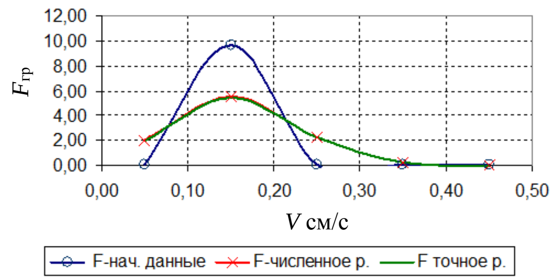

Рис. 3. Функция распределения в численном и точном решении для задачи 2

Параметры расчета для задачи 3: $A = 1$, $K = 10^8$, $DT = 0{,}0001$, $DV = 0{,}1$, $KG = 5$.

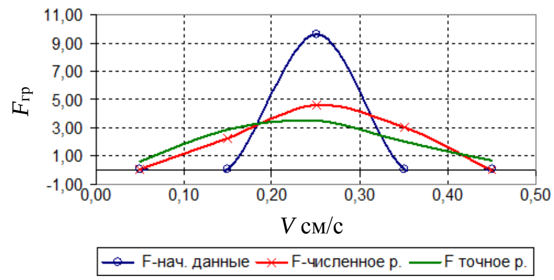

Рис. 4. Функция распределения в численном и точном решении для задачи 3

Параметры расчета для задачи 4: $A = 1$, $K = 10^8$, $DT = 0{,}0001$, $DV = 0{,}1$, $KG = 10$.

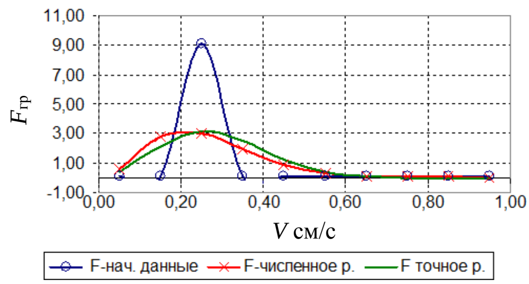

Рис. 5. Функция распределения в численном и точном решении для задачи 4

Параметры расчета для задачи 5: $A = 1$, $K = 10^8$, $DT = 0{,}0001$, $DV = 0{,}1$, $KG = 7$.

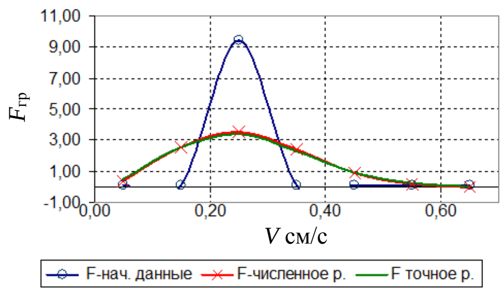

Рис. 6. Функция распределения в численном и точном решении для задачи 5

Параметры расчета для задачи 6: $A = 1$, $K = 10^8$, $DT = 0{,}0001$, $DV = 0{,}05$, $KG = 10$.

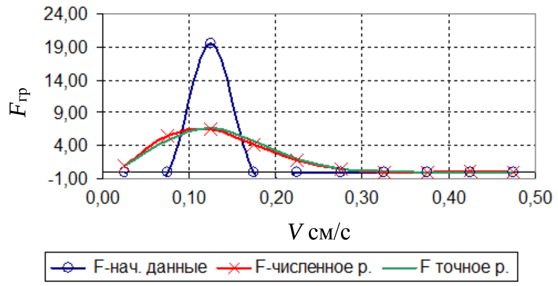

Рис. 7. Функция распределения в численном и точном решении для задачи 6

Параметры расчета для задачи 7: $A = 1$, $K = 10^8$, $DT = 0{,}0001$, $DV = 0{,}1$, $KG = 10$.

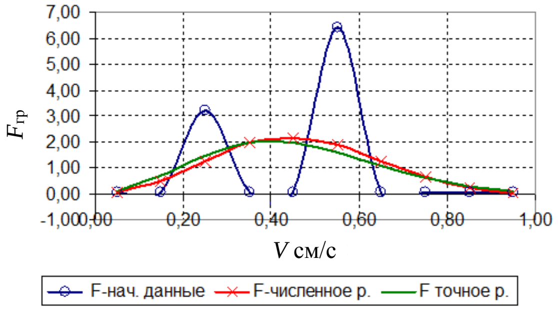

Рис. 8. Функция распределения в численном и точном решении для задачи 7

Параметры расчета для задачи 8: $A = 1$, $K = 10^8$, $DT = 0{,}0001$, $DV = 0{,}1$, $KG = 10$.

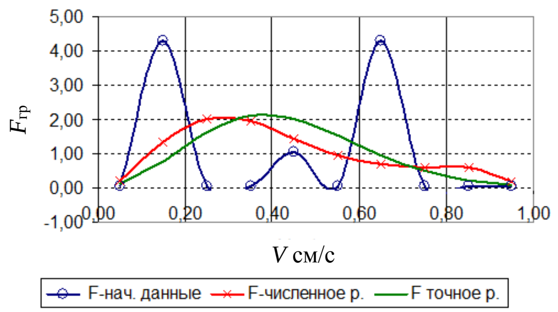

Рис. 9. Функция распределения в численном и точном решении для задачи 8

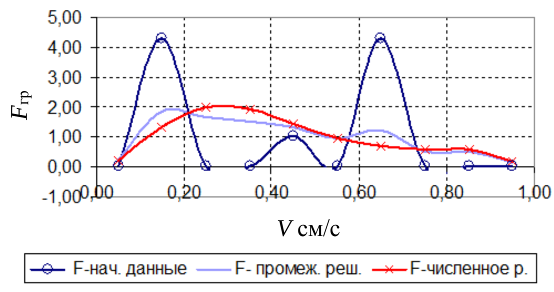

Рис. 10. Эволюция функции распределения в численном решении задачи 8

Параметры расчета для задачи 9: $A = 1$, $K = 10^8$, $DT = 0{,}0001$, $DV = 0{,}1$, $KG = 9$.

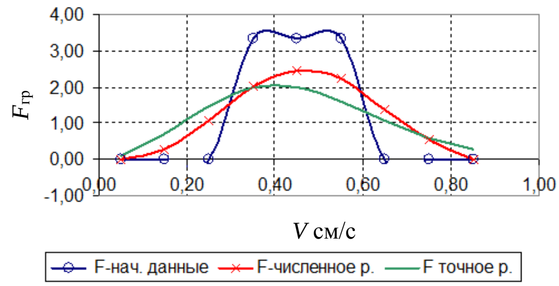

Рис. 11. Функция распределения в численном и точном решении для задачи 9

Параметры расчета для задачи 10: $A = 1$, $K = 10^8$, $DT = 0{,}0001$, $DV = 0{,}1$, $KG = 11$.

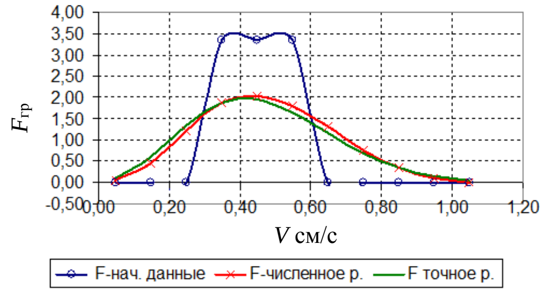

Рис. 12. Функция распределения в численном и точном решении для задачи 10

Параметры расчета для задачи 11: $A = 238$, $K = 10^6$, $DT = 0{,}0001$, $DV = 0{,}1$, $KG = 5$.

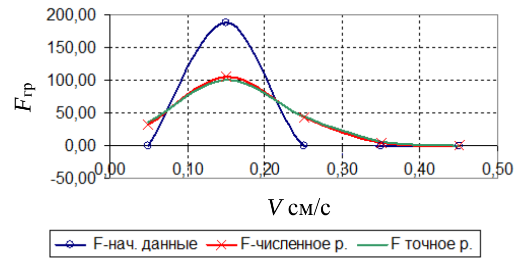

Рис. 13. Функция распределения в численном и точном решении для задачи 11

Параметры расчета для задачи 12: $A = 1$, $K = 10^8$, $DT = 0{,}0001$, $DV = 0{,}1$, $KG = 5$.

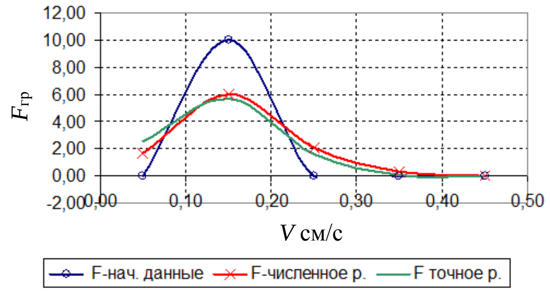

Рис. 14. Функция распределения в численном и точном решении для задачи 12

Параметры расчета для задачи 13: $A = 1$, $K = 10^8$, $DT = 0{,}0001$, $DV = 0{,}1$, $KG = 5$.

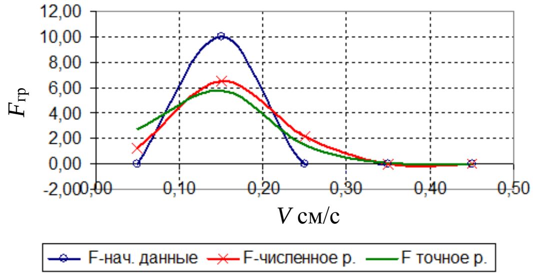

Рис. 15. Функция распределения в численном и точном решении для задачи 13

Параметры расчета для задачи 14: $A = 1$, $K = 10^8$, $DT = 0{,}0001$, $DV = 0{,}1$, $KG = 7$.

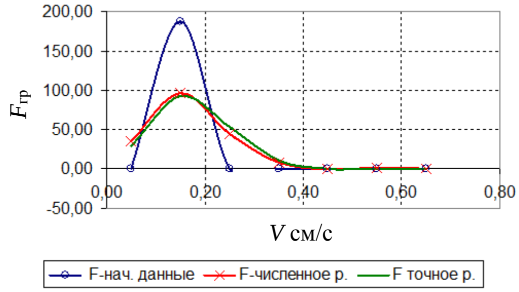

Рис. 16. Функция распределения в численном и точном решении для задачи 14

Параметры расчета для задачи 15: $A = 238$, $K = 10^6$, $DT = 0{,}0001$, $DV = 0{,}1$, $KG = 7$

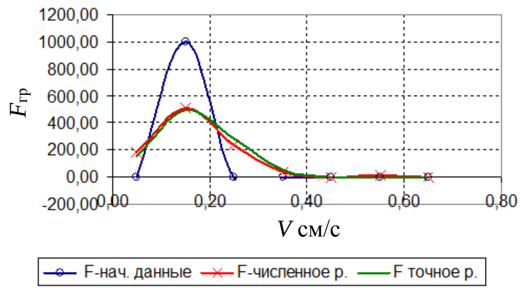

Рис. 17. Функция распределения в численном и точном решении для задачи 15

Параметры расчета для задачи 16: $A = 1$, $K = 10^8$, $DT = 0{,}0001$, $DV = 0{,}2$, $KG = 5$.

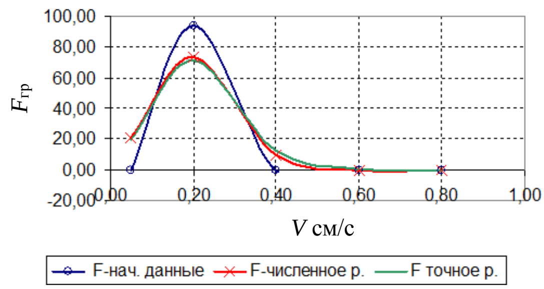

Рис. 18. Функция распределения в численном и точном решении для задачи 16

Параметры расчета для задачи 17: $A = 238$, $K = 10^6$, $DT = 0{,}0001$, $DV = 0{,}1$, $KG = 7$

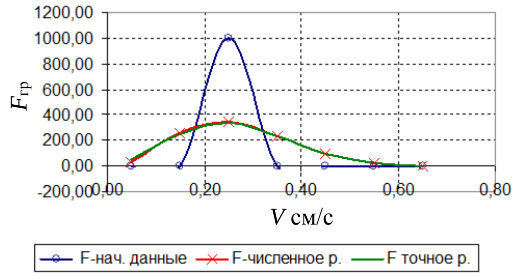

Рис. 19. Функция распределения в численном и точном решении для задачи 17

Заключение

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 с произвольно заданными начальными данными. Расчеты проведены на модельной задаче с вакуумными и плотными слоями на неподвижной геометрии в многогрупповом кинетическом приближении. Расчеты проводились с вариацией начальных данных, атомной массы A, количества групп, величиной шага по скоростной переменной. Каждый расчет проводился до сходимости решения с заданной точностью. Полученная функция распределения использовалась для вычисления макровеличин. Значения этих макровеличин подставлялись в функцию Максвелла и проводились сравнения с полученными расчетными величинами. Анализ результатов проведенных расчетов позволяет сделать заключение о вполне удовлетворительной точности исследуемой методики при используемой постановке задачи. Наиболее сильное влияние на точность оказывает сетка по скоростной переменной (задачи 3, 8, 9, 13). При разумно выбранной сетке по скоростной переменной максимальное отличие расчетных результатов от точного решения не более 2–4 % (задача 10). В следующих расчетах уменьшить константу для анализа сходимости.

Благодарим В. А. Карепова за ценные советы.

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 $\frac{\partial U}{\partial t} + \bar{\Omega}\,\mathrm{grad}\,U = 0$ методом конечных разностей на нерегулярных сетках // Численные методы механики сплошной среды. 1974. Т. 5, № 2. С. 116–135.

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

6. Афанасьева В. С., Харитонов А. В. Результаты численного исследования методики решения кинетического уравнения Больцмана, проведенного на задаче об однородной релаксации в простом газе // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2014. Вып. 3. С. 36–45.

Статья поступила в редакцию 12.03.2015