

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕОДНОРОДНОЙ РЕЛАКСАЦИИ В СМЕСИ НЕЙТРАЛЬНЫХ ГАЗОВ, СОСТОЯЩЕЙ ИЗ МЕТАНА И АРГОНА

В. С. Афанасьева, А. В. Харитонов

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

Приведены результаты математического моделирования неоднородной релаксации в смеси нейтральных газов, состоящей из метана и аргона.

*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 удастся 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 [5] приведены результаты сравнительных расчетов с точным решением задачи об однородной релаксации в простом газе. В [6] приведены результаты сравнительных расчетов с точным решением задачи об однородной релаксации в простом газе, в качестве начальных данных использовались произвольно выбранные значения. В данной статье приведены результаты математического моделирования неоднородной релаксации в смеси нейтральных газов, состоящей из метана и аргона.

### 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 смеси газов из твердых сфер имеет вид:

$$\frac{\partial f_j}{\partial t} + \xi \frac{\partial f_j}{\partial x} + X \frac{\partial f_j}{\partial \xi} = \sum_{i=1}^n \frac{1}{m_i} \iiint (f'_j f'_{i*} - f_j f_{i*}) B_{ij}(\theta, V, \sigma) d\theta d\varepsilon d\xi_*$$

Общий вид уравнения и все обозначения взяты из работы [1].

Для численного решения кинетического уравнения Больцмана применен интегроинтерполяционный метод с полной аппроксимацией уравнения. Методические численные расчеты уравнения Больцмана проведены без учета внешней силы. Расчеты проведены на модельной задаче на неподвижной геометрии в многогрупповом кинетическом приближении.

Геометрия одного листа приведена на рис. 1.

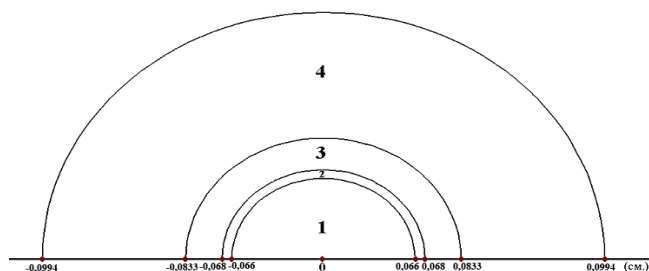


Рис. 1. Двумерная геометрия «листа»

На каждом листе построение пространственной сетки осуществлялось равномерно по радиусу: 1-я область – 6 интервалов, 2-я область – 2 интервала, 3-я область – 5 интервалов, 4-я область – 2 интервала. Сетка по скоростной переменной выбиралась равномерной. Используются следующие обозначения:  $t$  – время ( $10^{-7}$  с);  $A$  – атомная масса;  $V$  – массовая скорость ( $10^{-7}$  см/с);  $\xi$  – скорость частиц ( $10^{-7}$  см/с);  $t(1) - t(70)$  моменты времени ( $10^{-7}$  с);  $N_1$  – масса (спектр) частиц метана в области (г);  $N_2$  – масса (спектр) частиц аргона в области (г);  $T$  – температура (кэВ);  $R_0$  – плотность (г/см<sup>3</sup>).

**Задача 1.** В качестве тестовой задачи [7] рассматривалась однородная релаксация смеси газов, состоящая из упругих сфер, моделирующей взаимодействие метан–аргон с начальной температурой метана 300 К, температурой аргона 10000 К, плотностями газов  $n_1 = n_2 = 10^{18}$  см<sup>3</sup>, с реальными отношениями молекулярных масс  $m_1/m_2 = 0,401$  и сечений столкновений  $d_1/d_2 = 1,121$ . Начальные условия задавались в виде максвелловских функций с соответствующими плотностями и температурами компонент. На рис. 2 приведена функция распределения метана из [7].

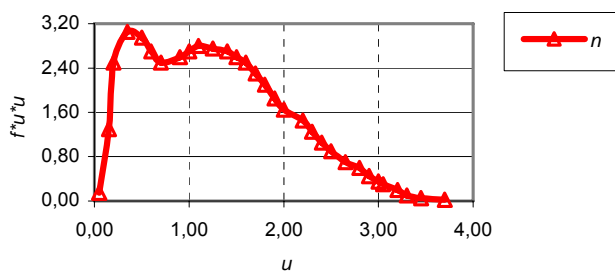


Рис. 2. Функция распределения метана (зависимость от скорости)

Обращает на себя внимание наличие двух локальных максимумов в спектре на момент времени  $t = 4$  из [7], полученных двумя авторами (точки и линия). Наши расчеты неоднородной релаксации проводились с учетом интеграла столкновения с 11 группами. На внешней границе входящий поток равен нулю, что означает возможность вылета частиц. Результаты расчетов приведены на рис. 3–8. На рис. 4, 5 показаны спектры к моментам сильного падения плотностей метана в смеси газов. На рис. 7, 8 показаны спектры к моментам сильного падения плотностей аргона в смеси газов. Отмечается существование нескольких максимумов аналогично задаче однородной релаксация из [7].

**Задача 2.** Задача 2 отличается от задачи 1 начальной температурой метана 400 К. На рис. 9 показаны спектры к моментам сильного падения плотностей метана в смеси газов.

**Задача 3.** Задача 3 отличается от задачи 1 большим перепадом концентрации  $n_1/n_2 = 10^3$ . На рис. 10, 11 показаны спектры к моментам сильного падения плотностей для метана и аргона в смеси газов.

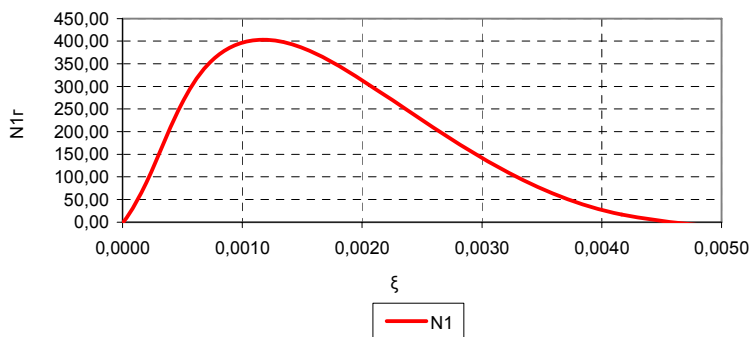


Рис. 3. Зависимость массы частиц метана от скорости в начальный момент времени для задачи 1

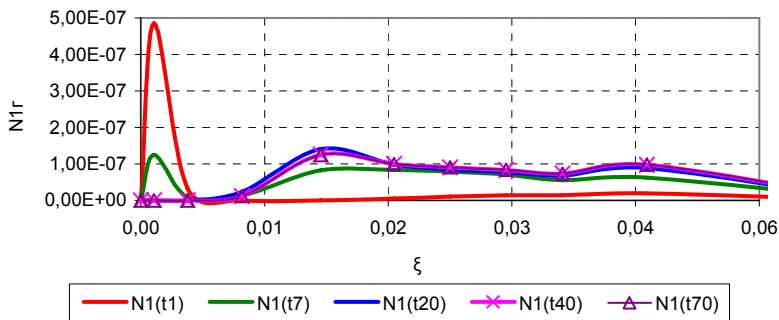


Рис. 4. Зависимость массы частиц метана в смеси от скорости и времени для задачи 1

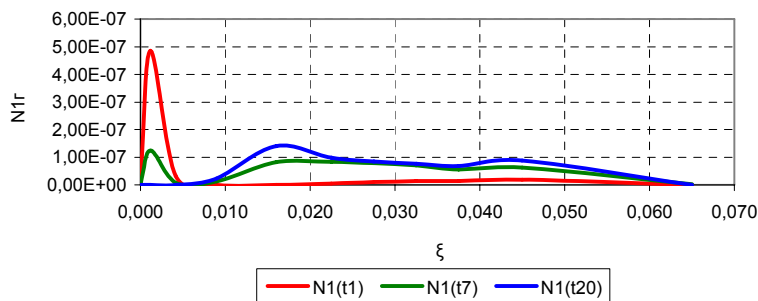


Рис. 5. Зависимость массы частиц метана в смеси от скорости и времени для задачи 1

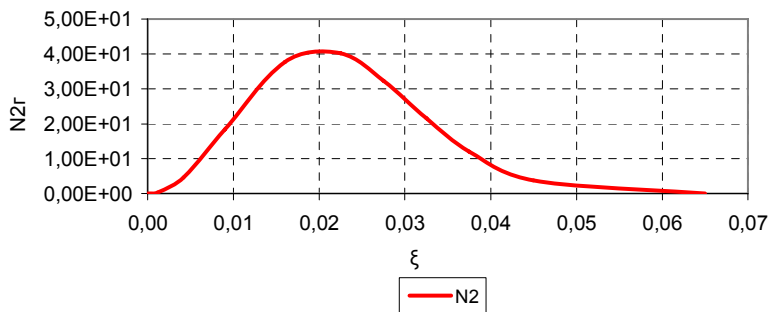


Рис. 6. Зависимость массы частиц аргона от скорости в начальный момент времени для задачи 1

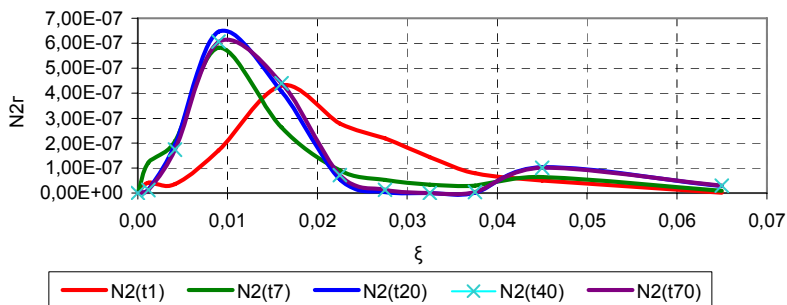


Рис. 7. Зависимость массы частиц аргона в смеси от скорости и времени для задачи 1

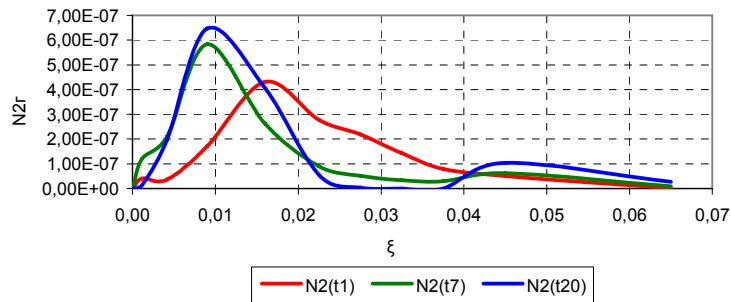


Рис. 8. Зависимость массы частиц аргона в смеси от скорости и времени для задачи 1

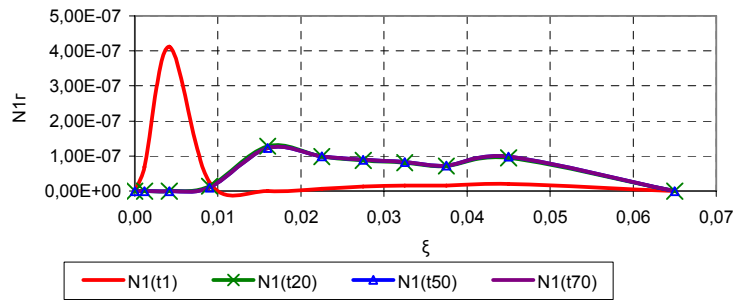


Рис. 9. Зависимость массы частиц метана в смеси от скорости и времени для задачи 2

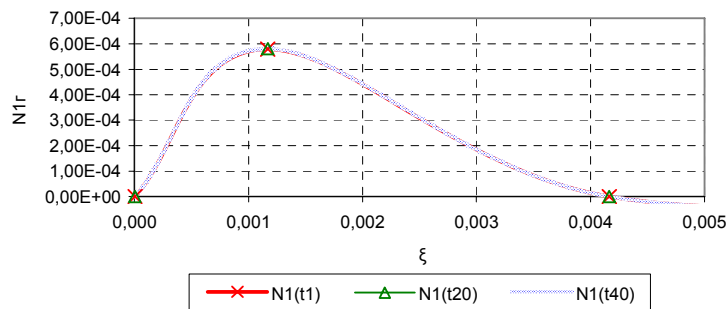


Рис. 10. Зависимость массы частиц метана в смеси от скорости и времени для задачи 3

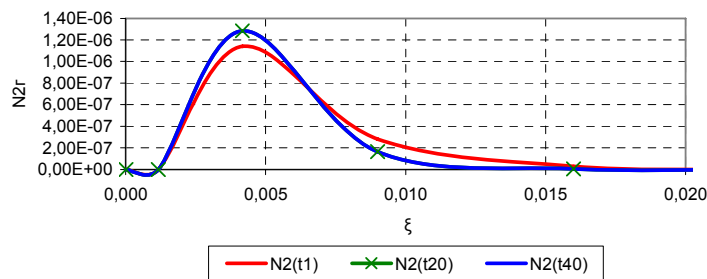


Рис. 11. Зависимость массы частиц аргона в смеси от скорости и времени для задачи 3

### 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 математического моделирования неоднородной релаксации в смеси нейтральных газов из метана и аргона, сопровождающейся разлетом.

На данном этапе исследования точности работы методики и программы решения уравнения Больцмана получено вполне удовлетворительное качественное совпадение результатов с данными других авторов. Так, в обоих случаях имеют место два локальных максимума. Получены спектры в моменты сильного падения плотности частиц.

### 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. С. 116–135.

5. 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.

6. Афанасьева В. С., Харитонов А. В. Результаты численного исследования методики решения кинетического уравнения Больцмана, проведенного на задаче об однородной релаксации в простом газе с произвольно заданными начальными данными // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2015. Вып. 1. С. 35–40.

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

Статья поступила в редакцию 06.11.2015