

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СЖАТИЯ ВЕЩЕСТВА ПОТОКОМ ТЯЖЕЛЫХ МОЛЕКУЛ

А. В. Харитонов

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

Приведены результаты расчетов сжатия вещества потоком тяжелых молекул.

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

Введение

Автор статьи занимается созданием методики для численного решения кинетического уравнения Больцмана [1], применяя интегро-интерполяционный метод с полной аппроксимацией уравнения. Кинетическое уравнение Больцмана составляет теоретическую основу динамики газов. В связи с отсутствием общих аналитических подходов к решению нелинейных уравнений удастся лишь в частных случаях построить точное решение. Для общего случая решение кинетического уравнения Больцмана возможно только с помощью численных методов [2–5]. Разрабатываемая методика положена в основу программы расчета кинетического уравнения Больцмана для трехмерной геометрии в применении к газовой динамике. Автор проводит последовательное исследование как методики, так и программы. В данной статье приводятся результаты расчетов сжатия вещества потоком тяжелых молекул.

В [6] изложены результаты сравнительных расчетов с точным решением задачи об однородной релаксации в простом газе.

В [7] приведены результаты сравнительных расчетов с точным решением задачи об однородной релаксации в простом газе. В качестве начальных данных использовались произвольно выбранные значения.

В [8] проведен анализ результатов математического моделирования неоднородной релаксации в смеси нейтральных газов, состоящей из метана и аргона.

Постановка модельной задачи и результаты расчетов

Уравнение Больцмана для газа из твердых сфер имеет вид:

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

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 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 интегро-интерполя-

ционный метод с полной аппроксимацией. Методические расчеты проведены без учета внешней силы на неподвижной геометрии в многогрупповом кинетическом приближении на трехмерной пространственной сетке. Для расчетов выбрана модельная сферическая одномерная задача с плотными слоями, которая состоит из четырех математических областей. В каждой области определена своя пространственная сетка. Общее число ячеек в системе равно 1500. Пространственная сетка состоит из 10 листов. Каждый лист содержит 10 секторов. Геометрия одного листа приведена на рис. 1.

Пятигрупповые скорости и весовые коэффициенты

ξ_1	ξ_2	ξ_3	ξ_4	ξ_5
0,5E-05	0,28605E-4	0,52361E-03	0,15E-2	0,25E-2
K1	K2	K3	K4	K5
0,1E-4	0,3721E-4	0,95279E-3	0,1E-2	0,1E-2

Расчеты проводились с учетом интеграла столкновения в областях с пятью группами, задача считалась до $64 \cdot 10^{-7}$ с (см. таблицу).

Результаты расчетов приведены на рис. 2–10.

Изменение скоростей, плотностей в процессе расчета задачи, приведенные на соответствующих графиках, дают основание сделать вывод о работоспособности исследуемой методики.

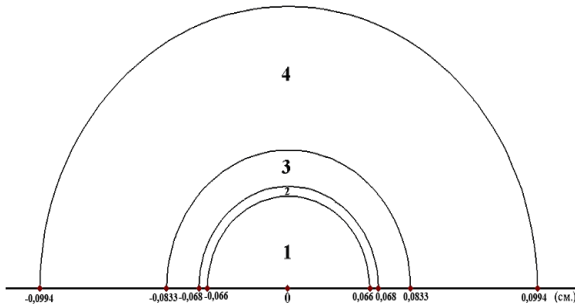


Рис. 1. Двумерная геометрия «листа»

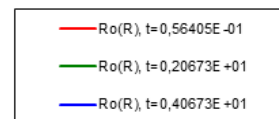
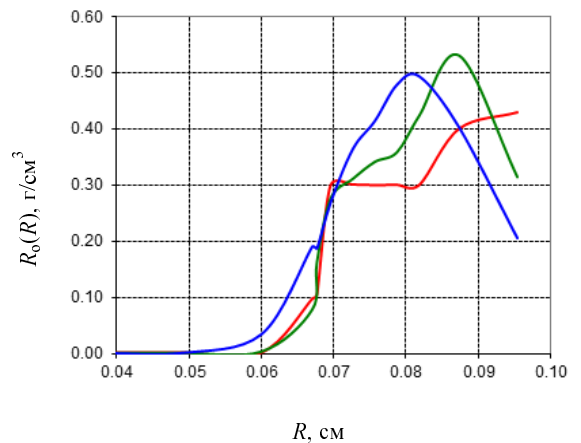
На каждом листе построение пространственной сетки осуществлялось равномерно по радиусу: 1-я область – 6 интервалов, 2-я область – 2 интервала, 3-я область – 5 интервалов, 4-я область – 2 интервала.

Использованы следующие обозначения: t – время, 10^{-7} с; A – атомная масса; U – массовая скорость, 10^7 см/с; ξ – скорость частиц, 10^7 см/с; T – температура, кэВ; R – радиус, см; R_0 – плотность, г/см³.

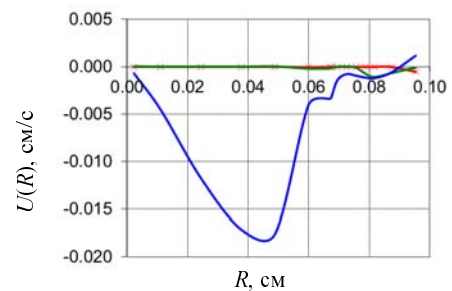
Рассчитывалась модельная задача сжатия вещества потоком тяжелых молекул, состоящая из четырех областей с одним веществом, но разными плотностями. Такое же вещество задавалось во входящем потоке. Начальное состояние вещества в областях описывалось функцией Максвелла, которая задавалась таким образом, чтобы плотность при температуре $T = 0,00001$ кэВ была равна в 1-й области $R_0 = 0,001$ г/см³; во 2-й области $R_0 = 0,1$ г/см³; в 3-й области $R_0 = 0,3$ г/см³; в 4-й области $R_0 = 0,4$ г/см³.

На внешней границе в промежутке времени от 0 до $0,5 \cdot 10^{-7}$ с задавался входящий поток молекул с возможностью вылета частиц. Входящие потоки молекул для каждой скоростной группы равны 10^{18} молекул/(с·см²). Диаметр молекулы равен $3,1 \cdot 10^{-8}$ см, масса молекулы равна $0,4 \cdot 10^{-21}$ г.

Входящие потоки одинаковы для направлений внутрь системы.

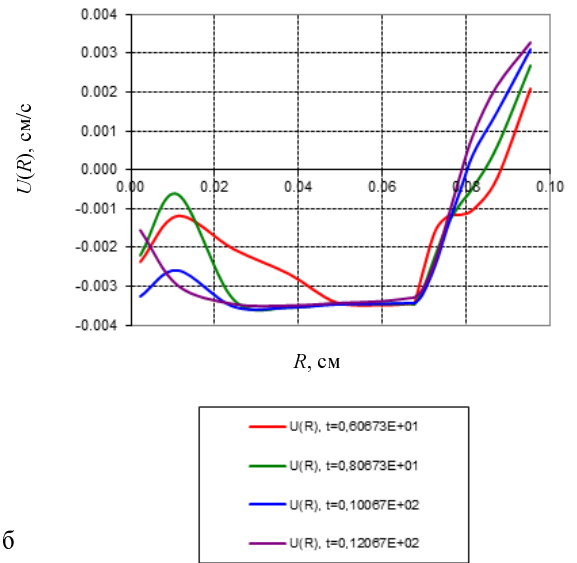
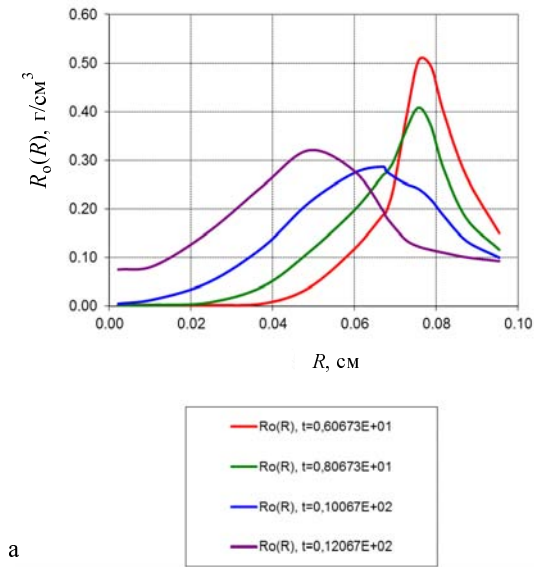


а



б

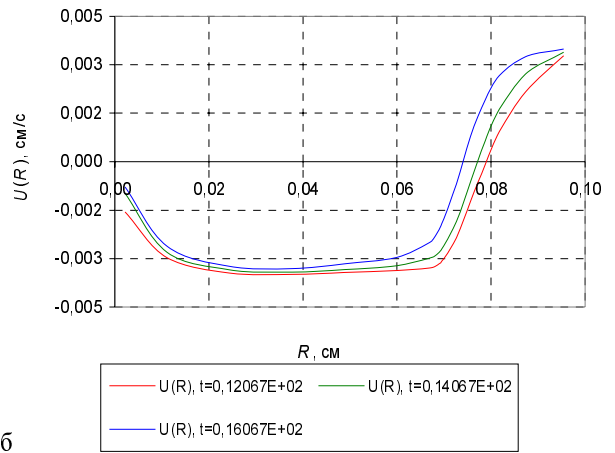
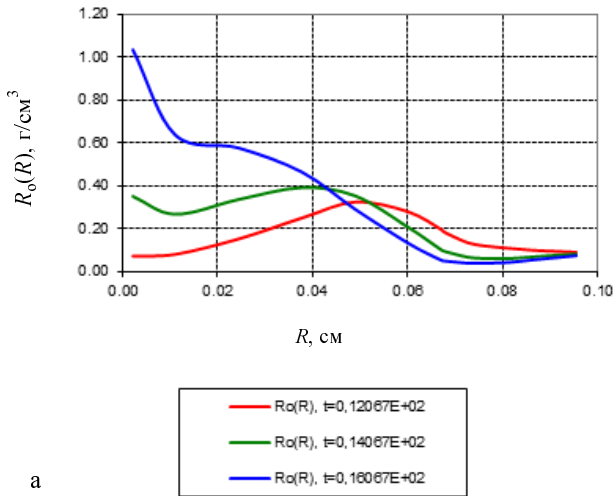
Рис. 2. Зависимость плотности (а) и скорости (б) от радиуса и времени на 5-м секторе на 5-м листе при $t = 0,56405E-01$, $t = 0,20673E+01$, $t = 0,40673E+01$



а

б

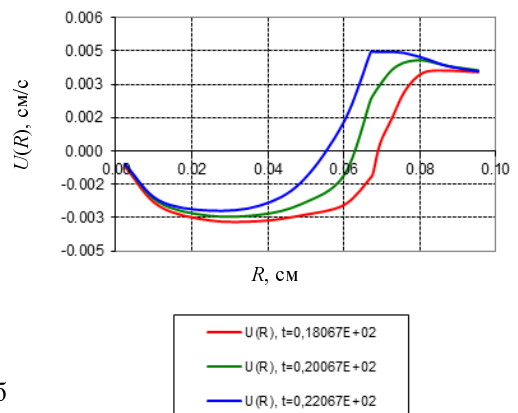
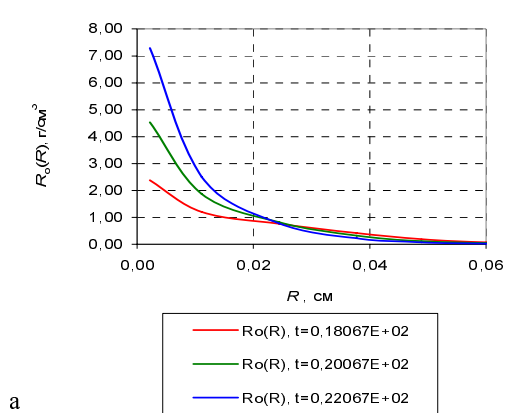
Рис. 3. Зависимость плотности (а) и скорости (б) от радиуса и времени на 5-м секторе на 5-м листе при $t = 0,60673E+01$, $t = 0,80673E+01$, $t = 0,10067E+02$, $t = 0,12067E+02$



а

б

Рис. 4. Зависимость плотности (а) и скорости (б) от радиуса и времени на 5-м секторе на 5-м листе при $t = 0,12067E+02$, $t = 0,14067E+02$, $t = 0,16067E+02$



а

б

Рис. 5. Зависимость плотности (а) и скорости (б) от радиуса и времени на 5-м секторе на 5-м листе при $t = 0,18067E+02$, $t = 0,20067E+02$, $t = 0,22067E+02$

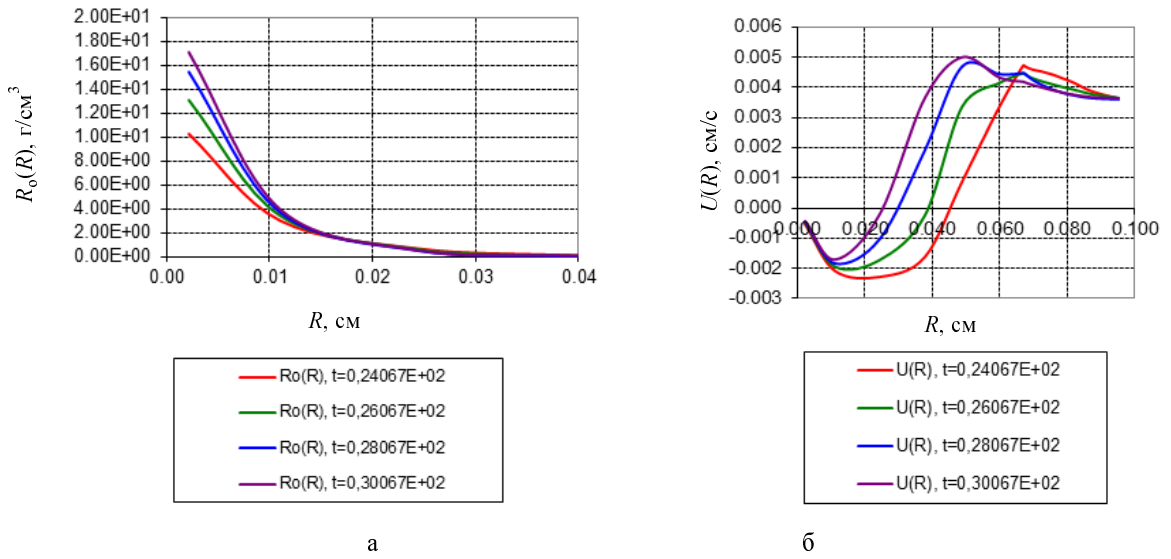


Рис. 6. Зависимость плотности (а) и скорости (б) от радиуса и времени на 5-м секторе на 5-м листе при $t = 0,24067\text{E}+02$, $t = 0,26067\text{E}+02$, $t = 0,28067\text{E}+02$, $t = 0,30067\text{E}+02$

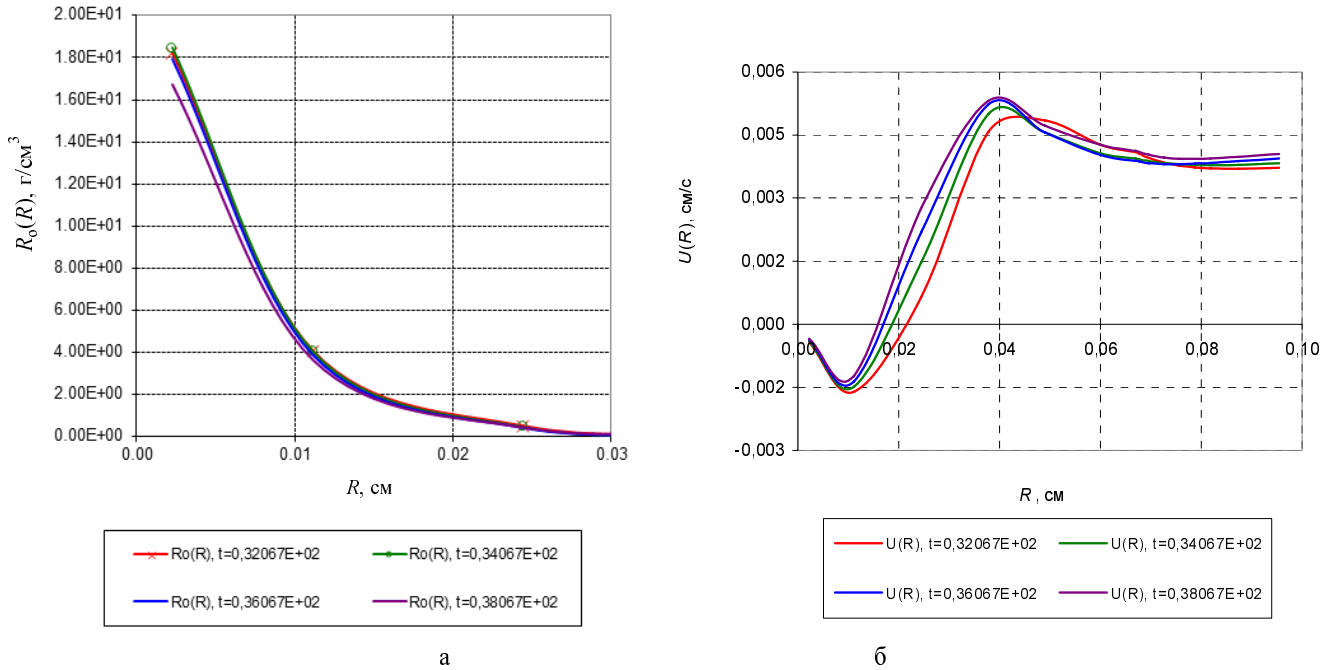
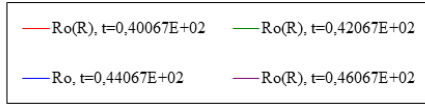
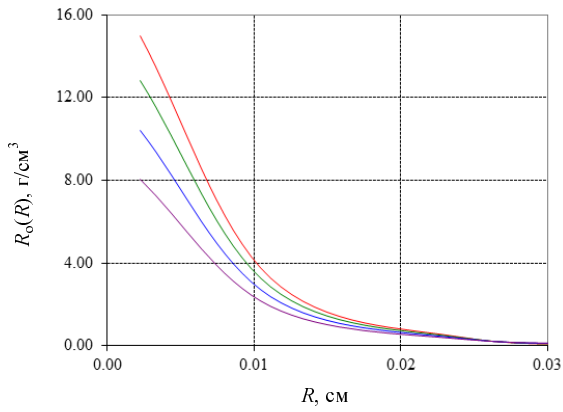
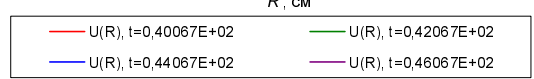
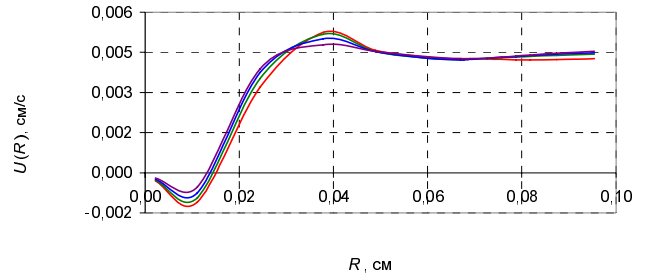


Рис. 7. Зависимость плотности (а) и скорости (б) от радиуса и времени на 5-м секторе на 5-м листе при $t = 0,32067\text{E}+02$, $t = 0,34067\text{E}+02$, $t = 0,36067\text{E}+02$, $t = 0,38067\text{E}+02$



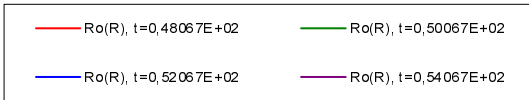
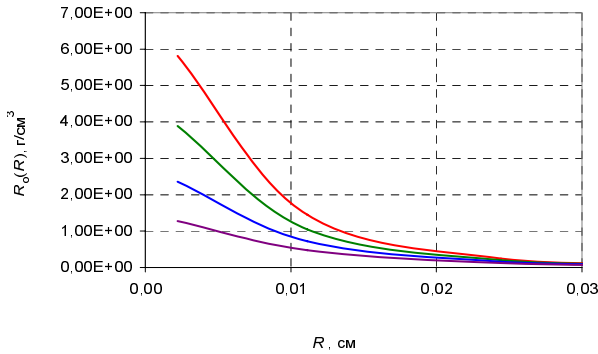
а



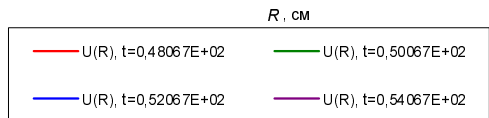
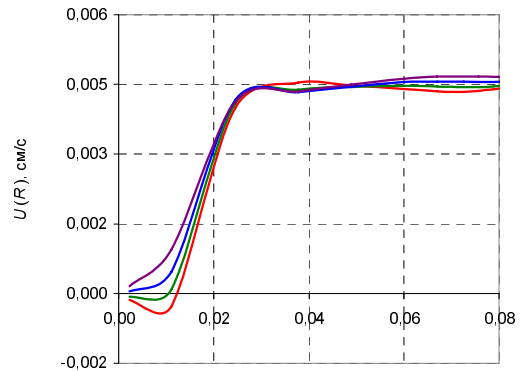
б

Рис. 8. Зависимость плотности (а) и скорости (б) от радиуса и времени на 5-м секторе на 5-м листе при $t = 0,40067E+02, t = 0,42067E+02, t = 0,44067E+02, t = 0,46067E+02$.

Плотность в первой области достигла максимума



а



б

Рис. 9. Зависимость плотности (а) и скорости (б) от радиуса и времени на 5-м секторе на 5-м листе при $t = 0,48067E+02, t = 0,50067E+02, t = 0,52067E+02, t = 0,54067E+02$.

Плотность в первой области стала убывать

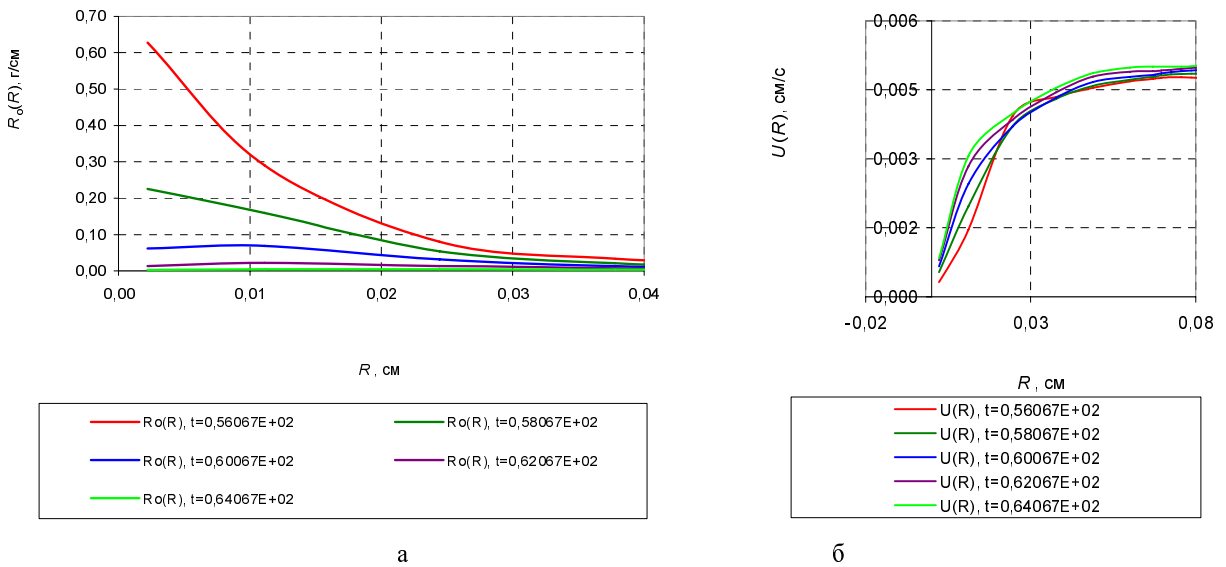


Рис. 10. Зависимость плотности (а) и скорости (б) от радиуса и времени на 5-м секторе на 5-м листе при $t = 0,56067E+02$, $t = 0,58067E+02$, $t = 0,60067E+02$, $t = 0,62067E+02$, $t = 0,64067E+02$

Заключение

Автор, занимаясь созданием методики и программы расчета кинетического уравнения Больцмана, проводит последовательное исследование и тестирование как самой методики, так и программы. Приведены результаты расчетов задачи сжатия вещества потоком тяжелых молекул. Рассчитывалась модельная задача, состоящая из четырех областей с одним веществом, но с разными плотностями. На данном этапе исследования точности работы методики и программы решения уравнения Больцмана получено вполне удовлетворительное описание динамики сжатия и разлета вещества.

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. 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.
7. 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.
8. Афанасьева В. С., Харитонов А. В. Математическое моделирование неоднородной релаксации в смеси нейтральных газов, состоящей из метана и аргона // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2015. Вып. 4. С. 16–20.

Статья поступила в редакцию 20.07.2016