

## РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ МЕТОДИКИ РЕШЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА, ПРОВЕДЕННОГО НА ГАЗОДИНАМИЧЕСКОЙ ЗАДАЧЕ О РАСПАДЕ РАЗРЫВА

**А. В. Харитонов**

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

Приведены результаты численного исследования методики решения кинетического уравнения Больцмана, проведенного на газодинамической задаче о распаде разрыва.

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

### **Введение**

Кинетическое уравнение Больцмана [1] составляет теоретическую основу динамики газов. Это нелинейное интегро-дифференциальное уравнение представляет в математическом отношении очень интересный объект для изучения и апробирования 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. Автор статьи занимается созданием методики для численного решения кинетического уравнения Больцмана, применяя проекционно-сеточный метод с полной аппроксимацией уравнения [2–5]. Разрабатываемая методика положена в основу программы расчета кинетического уравнения Больцмана для трехмерной геометрии в применении к газовой динамике. В [6] приведены результаты сравнительных расчетов с точным решением задачи об однородной релаксации в простом газе, в качестве начальных данных была использована функция Максвелла. 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] приведены результаты математического моделирования неоднородной

релаксации в смеси нейтральных газов, состоящей из метана и аргона. В [9] приведены результаты сжатия вещества потоком тяжелых молекул.

В данной статье приведены результаты расчетов газодинамической задачи о распаде разрыва. Расчеты проведены на модельной задаче с плотными слоями на неподвижной геометрии в многогрупповом кинетическом приближении. Исследуемая методика дает монотонные профили значений плотности с очевидным выявлением разрыва. Полученные результаты сравнивались с результатами похожей задачи, сосчитанной по другим методикам [5]. Точного сравнения провести не представляется возможности, так как есть отличия в постановке задач. Но качественное поведение решения можно считать вполне удовлетворительным.

### **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,  $\xi, \xi_*$  – скорости молекул после столкновения,  $\xi', \xi'_*$  – скорости молекул перед столкновением,  $\sigma$  – диаметр молекулы,  $m$  – масса молекулы,  $n$  – единичный вектор, направленный вдоль линии, соединяющей центры молекул в момент столкновения,  $f$  – массовая плотность шестимерного пространства  $(x, \xi)$ ,  $\rho = \int f d\xi$  – 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. Расчеты проведены на модельной задаче с 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 3700. Пространственная сетка состоит из 10 листов, каждый лист содержит 10 секторов. Диаметр молекулы =  $3,1 \cdot 10^{-8}$  см, масса молекулы =  $0,166 \cdot 10^{-22}$  г.

Пятигрупповые скорости и весовые коэффициенты

$\zeta 1$	$\zeta 2$	$\xi 3$	$\xi 4$	$\xi 5$
0,5E-04	0,2505E-1	0,1025E+1	0,300E+1	0,5E+1
K1	K2	K3	K4	K5
0,1E-3	0,499E-1	0,195E+1	0,2E+1	0,2E+1

Геометрия одного листа приведена на рис. 1.

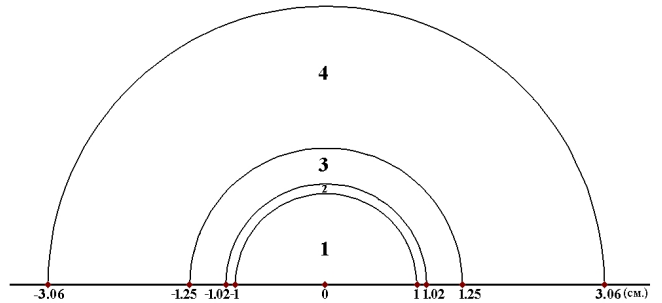


Рис. 1. Двумерная геометрия «листа»

На каждом листе построение пространственной сетки осуществлялось равномерно по радиусу: 1-я область – 15 интервалов, 2-я область – 2 интервала, 3-я область – 5 интервалов, 4-я область – 15 интервалов. Сетка по скоростной переменной выбиралась равномерной. Первая, вторая, третья и четвертая области – плотные слои. Во всех областях в начальный момент времени в качестве начальных данных задавались значения функции распределения в скоростных группах таким образом, чтобы плотность вещества соответствовала задаваемому значению. Графики плотности в численном решении для задач 1 приведены на рис. 2–7. На рис. 8 приведено качественное сравнение графиков плотностей, полученных по другим методикам.

### Задача 1

Использованы следующие обозначения:  $A$  – атомная масса;  $R$  – радиус (см);  $\xi$  – скорость частиц ( $10d7$  см/с);  $Ro$  – плотность ( $г/см^3$ );  $V$  – скорость ( $10D7$  см/с);  $T$  – температура (кэВ);  $t$  – время ( $10D-7$  с).

В первой, второй, третьей областях  $A = 10.$ ,  $T = 0,8$ ,  $Ro = 12,5$ , в четвертой области  $A = 10.$ ,  $T = 1.$ ,  $Ro = 100.$ , задача сосчитана до  $6 \cdot 10D-7$  с. Расчеты проведены с пятью скоростными группами.

Графики плотности в численном решении для задачи 1 на первом счетном шагу приведены на рис. 2–4. На рис. 5–7 приведена зависимость плотности от радиуса и времени на пятом листе на 1-м, 5-м, 10-м секторах. На внешней границе входящий поток равен нулю, что означает возможность вылета частиц.

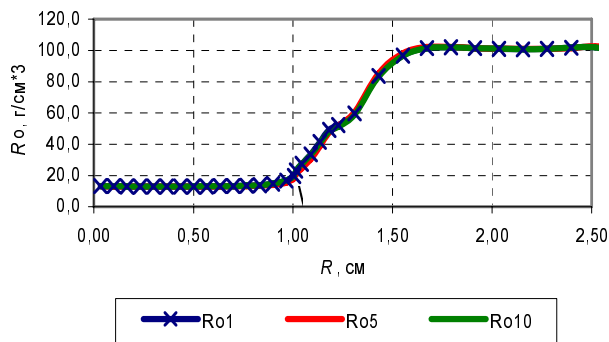


Рис. 2. Зависимость плотности от радиуса на первом листе, на 1-м, 5-м, 10-м секторах для задачи 1

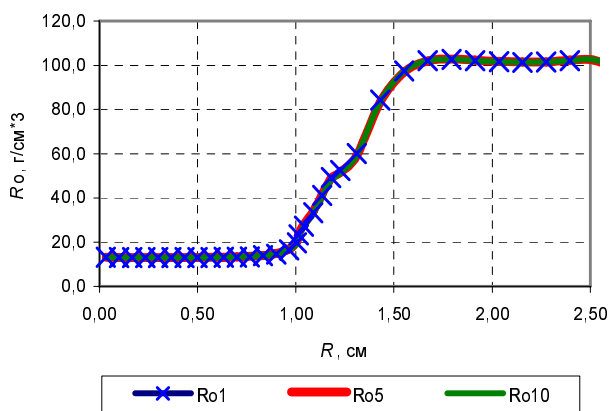


Рис. 3. Зависимость плотности от радиуса на пятом листе, на 1-м, 5-м, 10-м секторах для задачи 1

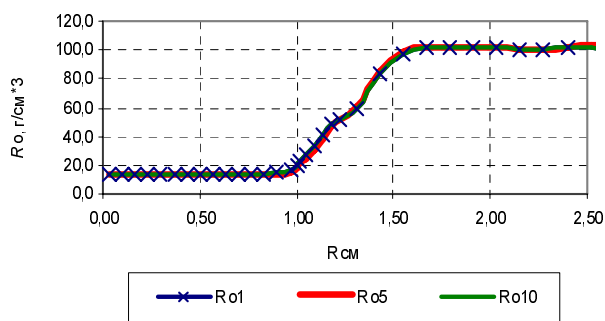


Рис. 4. Зависимость плотности от радиуса на десятом листе, на 1-м, 5-м, 10-м секторах для задачи 1

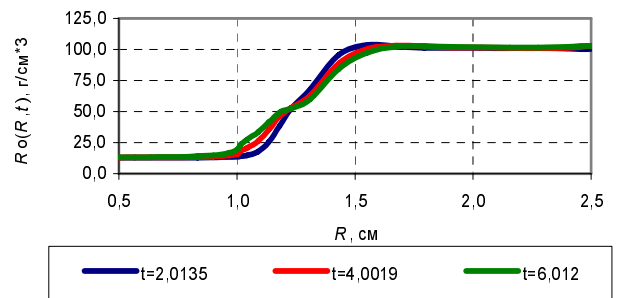


Рис. 5. Зависимость плотности от радиуса и времени на пятом листе, на 1-м секторе для задачи 1

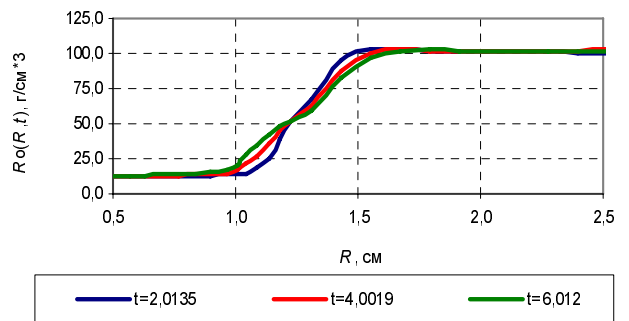


Рис. 6. Зависимость плотности от радиуса и времени на пятом листе, на 5-м секторе для задачи 1

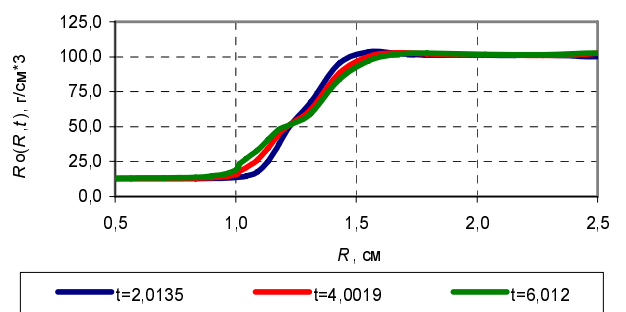


Рис. 7. Зависимость плотности от радиуса и времени на пятом листе, на 10-м секторе для задачи 1

Ниже показаны результаты расчетов, приведенных в [5]. На рис. 8 проводится сравнение схемы в применении к тестовой газодинамической задаче о распаде разрыва с известными схемами Годунова и Бориса–Бука (расчеты по этим схемам для плоской геометрии сделаны С. П. Поповым и Ю. А. Ромашкевичем). Начальные параметры газа менялись в точке  $x = 50$  при  $t = 0$  от значений  $n1 = 1, T1 = 1, u1 = 0$  слева до значений  $n2 = 0,125, T2 = 0,8, u2 = 0$  справа.

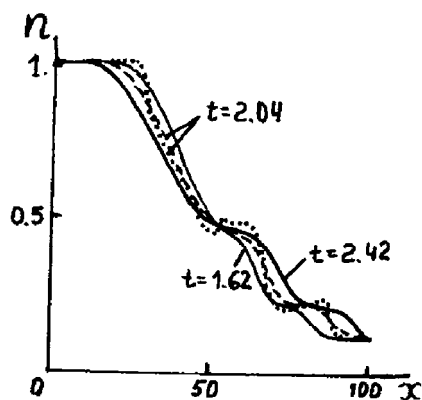


Рис. 8. Зависимость плотности от радиуса, времени и методик расчета

Отличие рассчитанных величин макропараметров за ударной волной от точных значений не превышает 1% (на рис. 8 показаны значения плотности). В качественном отношении результаты по кинетической схеме (сплошная линия) близки к решению по методу Годунова (штриховая линия): асимптотическая схема расщепления также дает монотонные профили величин, размазывая скачки уплотнения на несколько счетных ячеек. Решение по методу Бориса-Бука (пунктир) характеризуется немонотонностью, но более точным выявлением разрывов.

На графике (рис. 8) результатов по автоматической задаче единица длины  $\Delta x$ , единица времени  $\Delta t$  ( $kT/m$ )-1/2.

Как видно на рис. 5–7, исследуемая методика дает монотонные профили значений плотности с очевидным выявлением разрыва. О точном сравнении результатов, приведенных на рис. 5–7, полученных по разрабатываемой методике, с результатами, приведенными на рис. 8, полученными по другим методикам [5], не может быть и речи. Это связано с тем, что имеется много отличий в постановке задачи, в единицах измерения, но качественное поведение решения по исследуемой методике можно считать вполне удовлетворительным.

### Заключение

Автор, занимаясь созданием методики и программы расчета кинетического уравнения Больцмана, проводит последовательное исследование и тестирование, как самой методики, так и программы. В данной статье приведены результаты расчетов газодинамической задачи о распаде разрыва. Расчеты проведены на модельной задаче с плотными слоями на неподвижной геометрии в много-

групповом кинетическом приближении. Исследуемая методика дает монотонные профили значений плотности с очевидным выявлением разрыва. Полученные результаты расчетов сравнивались с результатами похожей задачи, сосчитанной по другим методикам [5]. Точного сравнения результатов провести не представляется возможным, так как имеют место отличия в постановке задачи. Но качественное поведение решения по исследуемой методике можно считать вполне удовлетворительным.

### 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.
9. Харитонов А. В. Математическое моделирование сжатия вещества потоком тяжелых молекул // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2016. Вып. 3. С. 24–29.

Статья поступила в редакцию 21.03.2017