

Численное моделирование течений разреженных газов с помощью решения кинетических уравнений детерминистическими методами

С.О.Полешкин

11 февраля 2023 г.

Аннотация

Продолжены работы по разработке и развитию детерминированных численных алгоритмов решения уравнения Больцмана и других кинетических уравнений. Проводилась разработка параллельного кода для численного моделирования динамики смеси разреженного газа. Проведено сравнение модельных уравнений с эталоном — уравнением Больцмана в задаче о структуре плоской ударной волны, в том числе для бинарной смеси.

Тема работы:

Численное моделирование течений разреженных газов с помощью решения кинетических уравнений детерминистическими методами.

Состав коллектива:

- Сергей Олегович Полешкин, м.н.с. лаб. 7 ИТПМ СО РАН
- Алексей Николаевич Кудрявцев, д.ф.-м.н., лаб. 7 ИТПМ СО РАН
- Евгений Александрович Малков, д.ф.-м.н., СибГУТИ

Гранты:

Работа проводилась в рамках проекта Российского Научного Фонда (РНФ) №. 18-11-00246-П, руководитель - А.Н. Кудрявцев.

Научное содержание работы

Целью работы является выявление отличий между столкновительными операторами в различных кинетических уравнениях. Проведено численное моделирование ударной волны с двумя числами Маха: $M = 1.5$ $M = 8$. Расчёты проводились на основе прямого численного детерминистического решения уравнения Больцмана и модельных уравнений: ВГК, эллипсоидальная модель, модель Шахова. Также проведено сравнение с решениями уравнений Навье-Стокса. Получено существенное отличие между решениями на основе различных уравнений.

Постановка задачи

Настоящая работа посвящена вопросу границ применимости модельных уравнений. Более конкретно, разнице столкновительных членов в модельных уравнениях и уравнении Больцмана.

Введение

Существуют несколько подходов к моделированию разреженных течений: численное решение непосредственно уравнения Больцмана, прямое статистическое моделирование (ПСМ), численное решение модельных кинетических уравнений и использование моментных уравнений. Каждый из перечисленных подходов имеет свои преимущества и недостатки. Уравнение Больцмана является основной и наиболее общей математической моделью динамики разреженного газа и выступает в этом списке в роли некоего золотого стандарта. Однако уравнение Больцмана является сложным нелинейным интегрально-дифференциальным уравнением. В правой части стоит пятимерный интеграл, который необходимо вычислить для каждой точки пространства и каждой скорости на каждом шаге по времени. Таким образом использование уравнения Больцмана для численного моделирования разреженных течений затруднительно. Наиболее широко в динамике разреженного газа применяется метод DSMC (Direct Simulation Monte-Carlo) [1], позволяющий с намного меньшими затратами проводить численное моделирование стационарных течений. Однако DSMC испытывает трудности с моделированием медленных и нестационарных течений. Модельные кинетические и моментные уравнения лишены недостатков первых двух подходов. Моментные уравнения являются разновидностью уравнений сплошной среды. Модельные уравнения представляют из себя кинетические нелинейные уравнения и похожи на уравнение Больцмана, от которого отличаются намного более простым столкновительным членом.

Результаты численного моделирования

Расчёты проводились при числах Маха $M = 1.5$ и $M = 8$ для одноатомного газа. Масштаба длины задача не имеет, поэтому расстояние обезразмерено на длину свободного пробега λ ($L = \lambda$, $Kn = 1$). В качестве модели межатомных столкновений использовалась модель твёрдых сфер:

$$\sigma(|\mathbf{v}_{rel}|, \frac{\mathbf{v}_{rel} \cdot \mathbf{n}}{|\mathbf{v}_{rel}|}) \sim 1 \quad (1)$$

В моделях BGK и Шахова частота столкновений для твёрдых сфер имеет вид:

$$\nu = \frac{8p}{5\sqrt{\pi}\sqrt{T}} \quad (2)$$

Частота столкновений для эллипсоидальной модели отличается дополнительным множителем Pr :

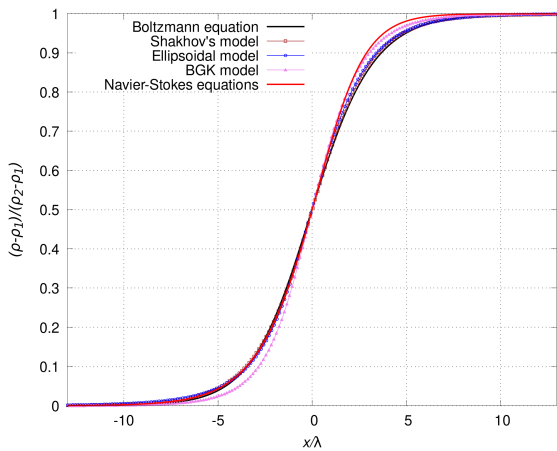
$$\nu = Pr \frac{8p}{5\sqrt{\pi}\sqrt{T}} \quad (3)$$

Для модельных уравнений и кинетического уравнения Больцмана использовалась одинаковая сетка в фазовом пространстве. Так, при моделировании ударной волны с малым числом Маха $M = 1.5$ сетка в фазовом пространстве состояла из $576 \times 24^3 \sim 8 \cdot 10^6$ ячеек, при большом числе Маха $M = 8$ — из $576 \times 24^3 \sim 8 \cdot 10^6$. Касательно разрешения волны в физическом пространстве, на одну длину свободного пробега приходилось 7.2 ячейки для $M = 1.5$ и 6.4 — для $M = 8$. Также было проведено сравнение с уравнениями Навье-Стокса, сетка использовалась точно такая же.

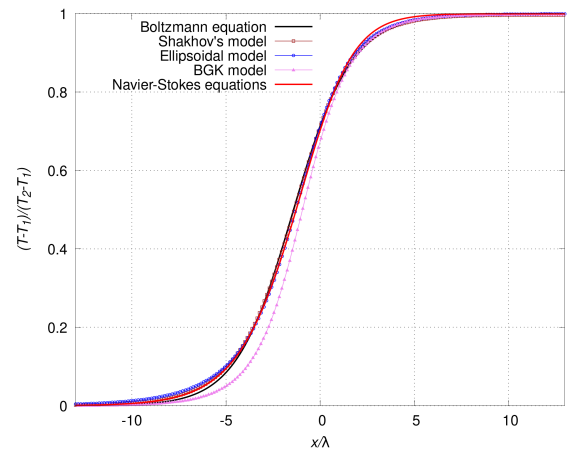
Начало отсчёта $x = 0$ установлено в точке, в которой $\rho = (\rho_2 + \rho_1)/2$. На рисунках ?? a,b изображены нормализованные профили плотности $(\rho - \rho_1)/(\rho_2 - \rho_1)$ и температуры $(T - T_1)/(T_2 - T_1)$. Хорошо видно, что уравнения Навье-Стокса и BGK не способны описывать структуру ударной волны даже при $M = 1.5$. Заметны небольшие отличия между решением уравнения Больцмана и решениями кинетических уравнений с эллипсоидальной моделью и Шахова.

Степень неравновесия течения можно оценить, рассмотрев отношение продольной температуры T_x к полной T и энтропию S (??). Стали заметны различия между уравнением Больцмана и моделями эллипсоидальной и Шахова перед фронтом волны (Fig. ??), различия с уравнением BGK увеличились. Профиль энтропии, полученный с помощью уравнения Навье-Стокса отличается достаточно сильно от решения уравнения Больцмана. Обращаем внимание, что наибольшие значения T_x/T и S наблюдаются вблизи центра волны $x = 0$.

Гораздо больший интерес представляет поведение функции распределения и интеграла столкновений в центре ударной волны $x = 0$, $\rho|_{x=0} = (\rho_2 + \rho_1)/2$, где ожидается наибольшее отклонение от равновесия. На рисунках ?? a and b изображены двумерные сечения при $v_z = 0$ функции распределения $f(v_x, v_y)$ и интеграла столкновений $I(f, f)(v_x, v_y)$, полученные с помощью уравнения Больцмана. Функция распределения близка к максвелловскому распределению. Это можно объяснить следующим образом. Функции распределения перед и за фронтом ударной волны представляют из себя максвеллианы с соответствующими условиям Рэнкена-Гюгонио параметрам. При малых числах Маха, $M = 1.5$ в данном случае, эти

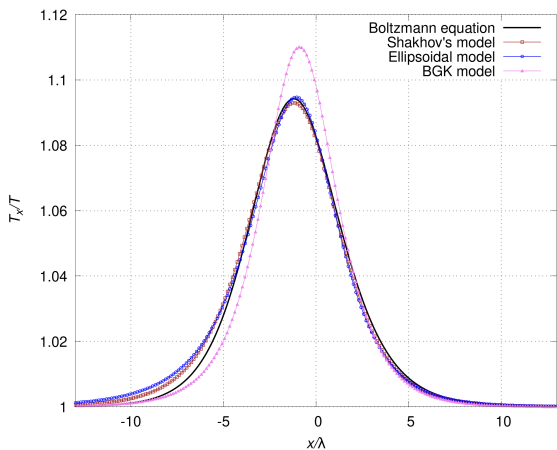


(a)

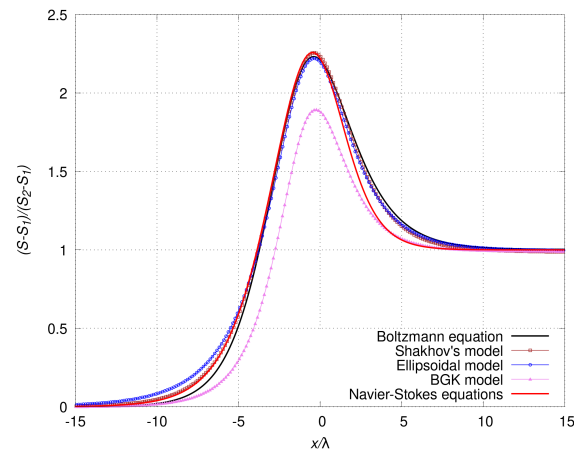


(b)

Рис. 1: Профили плотности (а) и температуры (б), $M = 1.5$.

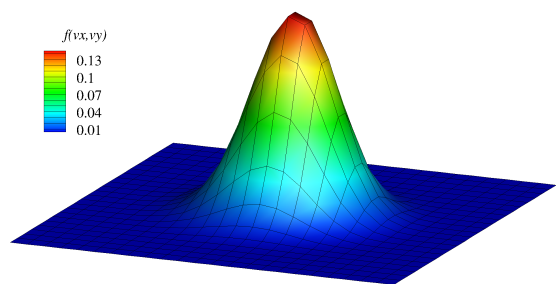


(a)

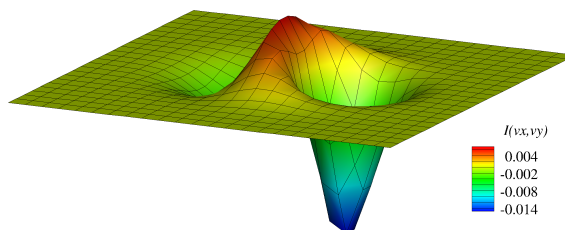


(b)

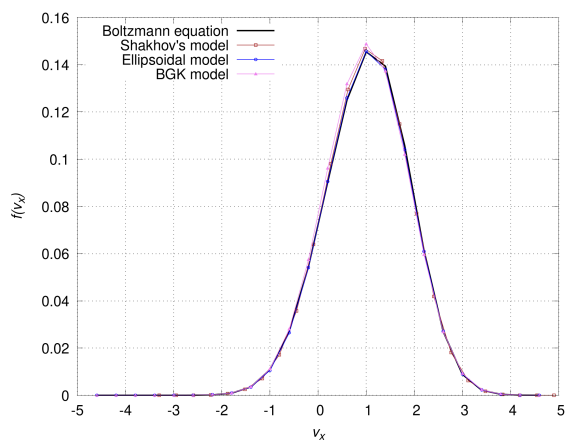
Рис. 2: Профили величин T_x/T (а) и энтропии (б), $M = 1.5$.



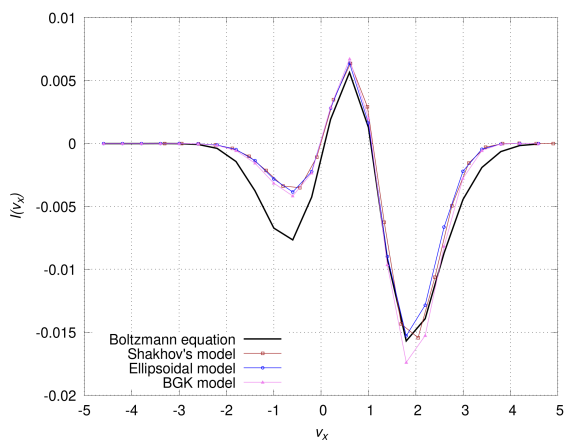
(a)



(b)



(c)



(d)

Рис. 3: Сечения функции распределения и интеграла столкновений в центре волны с $M = 1.5$, $x = 0$.

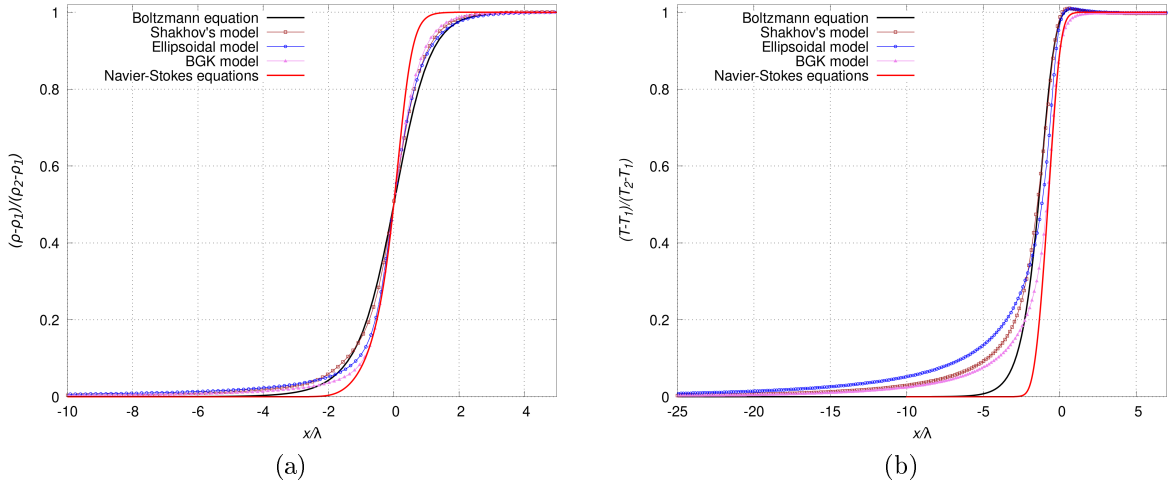


Рис. 4: Профили плотности (a) и температуры (b), $M = 8$.

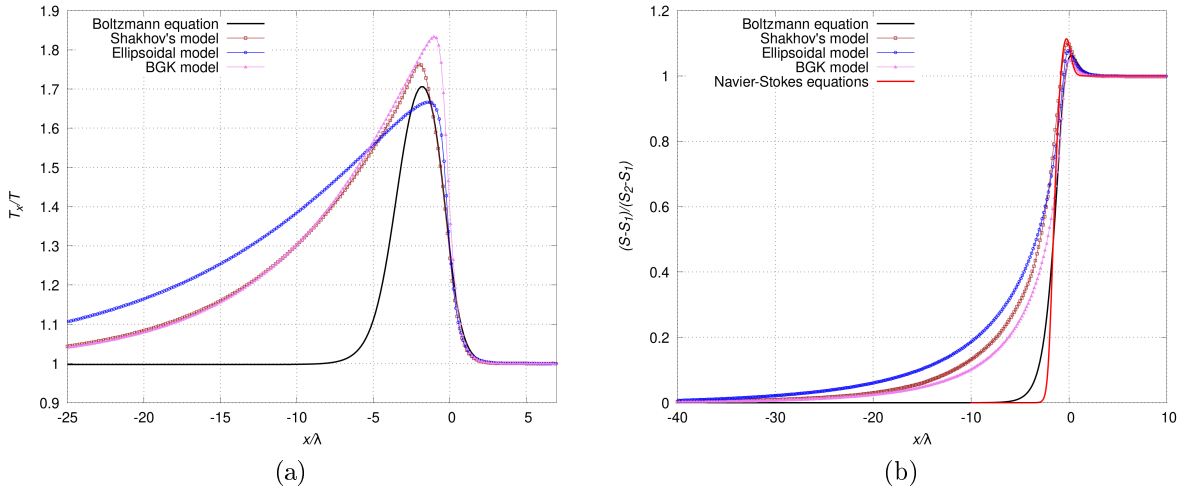


Рис. 5: Профили величин T_x/T (a) и энтропии (b), $M = 8$.

максвеллианы находятся близко к друг другу и мало друг от друга отличаются. Следуя бимодальному приближению [6, 7], функция распределения в центре волны должна быть их комбинацией. В силу близости максвеллианов перед и за фронтом волны, их линейная комбинация должна быть близка к максвеллиану.

Для детального сравнения на рисунках ?? с and d изображены одномерные сечения при $v_y = 0$, $v_z = 0$, полученные с помощью всех использованных в работе кинетических уравнений. В то время как функции распределения совпали, модельные уравнения дают интеграл столкновений, отличающийся от полученного с помощью уравнения Больцмана.

С ростом числа Маха возрастает отклонение от равновесия. На рисунках ?? a and b наблюдаются существенные различия в профилях плотности и температуры, полученных с помощью различных уравнений. В первую очередь видна большая разница в толщине волны. Для уравнений Навье-Стокса толщина очень маленькая, в то время как для модельных уравнений она напротив — намного больше, чем у решения уравнения Больцмана. Решения всех представленных кинетических моделей сильно отличаются от решения уравнения Больцмана. Профили энтропии отличаются похожим образом (Fig. ?? b). На рисунке ?? a видно, что профиль отношения продольной температуры к полной симметричен, в то время как профили модельных уравнений несимметричны, перед ударной волной наблюдается большой хвост.

В работе ?? показано, что при $M = 8$ имеет место локальный максимум полной температуры. На рисунке ?? изображён локальный максимум, полученный с помощью различных моделей. Уравнения BGK и Навье-Стокса вообще не воспроизводят этот эффект. Эллипсоидальная модель при этом намного ближе к решению уравнения Больцмана, чем модель Шахова. Функция распределения имеет два горба (Fig. ?? a).

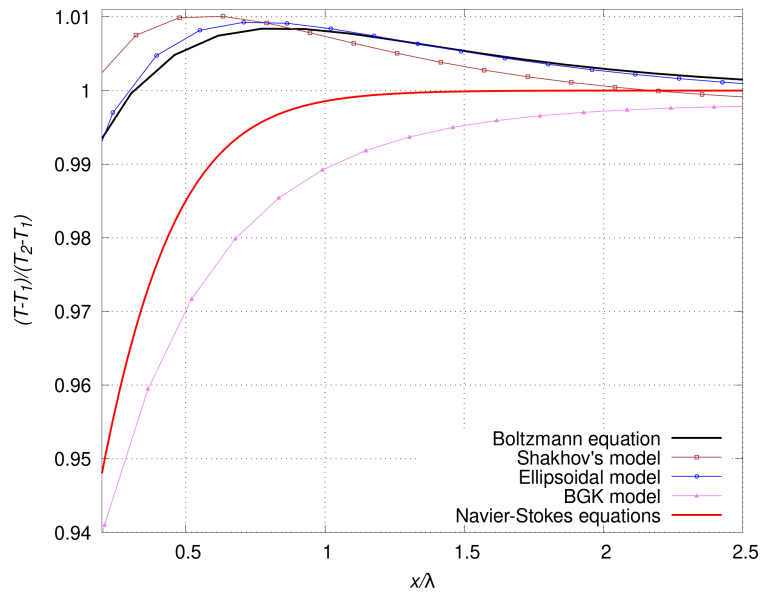


Рис. 6: Локальный максимум температуры, полученный с помощью различных подходов, $M = 8$.

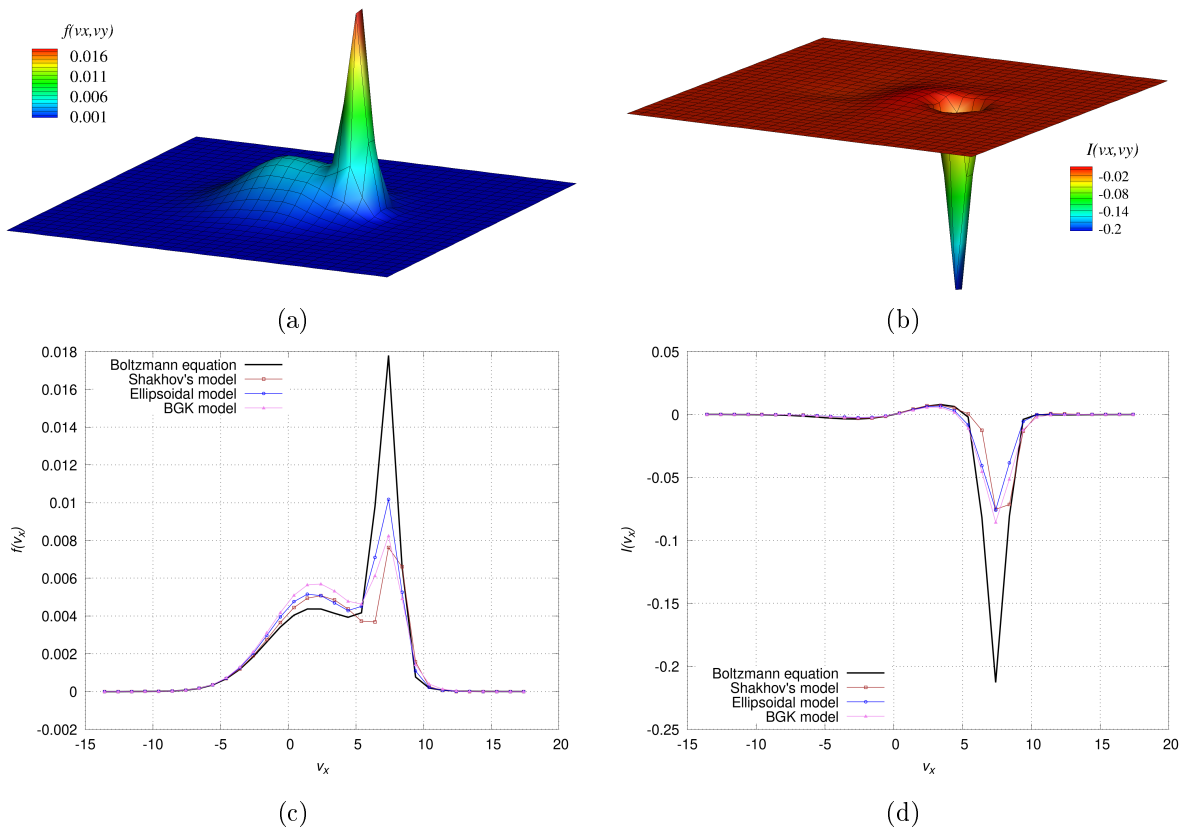


Рис. 7: Сечения функции распределения и интеграла столкновений в центре волны с $M = 8$, $x = 0$.

На рисунках ?? с and d изображены одномерные сечения функции распределения и интеграла столкновений при $v_y = v_z = 0$ в центре волны — $x = 0$. Имеют место существенные отличия кинетических моделей как от уравнения Больцмана, так и друг от друга.

Эффект от использования кластера

До появления гибридных кластеров моделирование течений разреженного газа на основе непосредственно численного решения уравнения Больцмана было невозможно. Ресурсы кластера позволили получить численное решение уравнения Больцмана для ряда задач динамики разреженного газа.

Перечень публикаций

- Sergey Poleshkin and A. N. Kudryavtsev, “Kinetic simulation of the Rayleigh-Taylor instability”, AIP Conference Proceedings 2288, 030010 (2020); DOI: 10.1063/5.0028881

Список литературы

- [1] G.A. Bird: “Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flow”, Clarendon Press, Oxford (1994).
- [2] M.S. Ivanov and S.V. Rogazinskij, USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics 28, 64–71 (1988).
- [3] Bhatnagar P.L. Gross E.P., Krook M.A.: “Model for collision process in gases”, Phys. Rev. 94, pp.511–525 (1954).
- [4] E.M. Shakhov, “Generalization of the Krook kinetic relaxation equation”, Fluid Dynamics 3, 95–96 (1968). <https://doi.org/10.1007/BF01029546>
- [5] Holway L.H.: “New statistical models for kinetic theory: Methods of construction”. Physics of Fluids 9, pp.1658-1673 (1966). DOI: 10.1063/1.1761920
- [6] И. Е. Тамм, Труды ФИАН СССР 29(239) (1965), работа выполнена в 1947г.
- [7] Mott-Smith H. M., Phys. Rev. 82(885) (1951).
- [8] B. L. Hicks, Sh.-M. Yen and B. J. Reilly: “The internal structure of shock waves”, J. Fluid Meck. 53(1), 85–111 (1972).
- [9] E.A. Malkov, Ye.A. Bondar, A.A. Kokhanchik, S.O. Poleshkin and M.S. Ivanov: “High-accuracy deterministic solution of the Boltzmann equation for the shock wave structure”, Shock Waves, 25 (2015). doi: <https://doi.org/10.1007/s00193-015-0563-6>.