

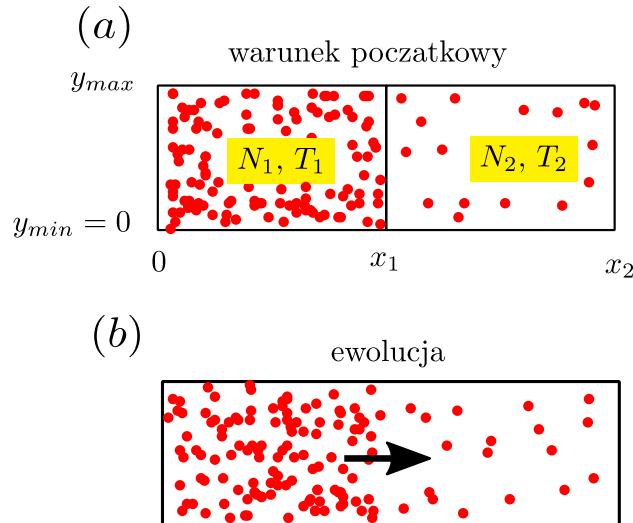
Monte Carlo: propagacja fali termicznej w gazie - problem Riemanna

10 czerwca 2022

1 Wstęp

Na laboratorium wykonamy symulację propagacji fali termicznej. Schemat układu pokazany jest narysunku 1. W jego lewej części znajduje się N_1 cząsteczek gazu, które mają rozkład Maxwella-Boltzmannna o tmeperaturze T_1 , w prawej części znajduje się N_2 cząsteczek także o rozkładzie Maxwella-Boltzmannna dla temperatury T_2 . Po zetknięciu obu układów, gaz znajdzie się w stanie nierównowagowym. Eksperymentalnie można to osiągnąć gwałtownie podnosząc temperaturę w lewej części układu (wybuch). Ponieważ $T_1 \gg T_2$ więc $p_1 \gg p_2$ i w konsekwencji następuje gwałtowny przepływ gazu z lewej części do prawej. Powstaje fala termiczna, której dynamikę zasymulujemy korzystając z procedur zawartych w klasie **DSMC_2D**.

Opisany proces rozchodzenia się fali termobarycznej to problem Riemanna, który ma swoje rozwiązanie analityczne. Wyniki uzyskane metodą MC można porównywać z wynikami analitycznymi tylko dla dużej liczby symulowanych cząstek ($> 2 \cdot 10^7$) co na laboratorium jest poza naszym zasięgiem ze względu na brak odpowiedniego sprzętu i niestety musimy z takiego porównania zrezygnować.



Rysunek 1: (a) układ w stanie początkowym składa się z dwóch podukładów, lewego i prawego, zawierających $N_1 > N_2$ cząstek mających rozkład Maxwella-Boltzmannna o temperaturach $T_1 \gg T_2$. (b) po uruchomieniu symulacji w czasie, oba układy zostają połączone i następuje transport gazu do prawego podukładu.

2 Zadania do wykonania

Ustawiamy parametry wspólne dla obu podukładów w pliku wejściowym z danymi (np. "i.dat"): $n_x = 300$, $n_y = 75$, $k_B = 1$, $temp_i[0 - 3] = -1$ (warunek Neumanna), $n_{mix} = 1$, $mcl = 1.0$, $rc1 = 10^{-4}$, $nodes = 0$. Wartości k_B oraz mcl są nierealistyczne, ale musimy takie przyjąć ze względu na zbyt małą liczbę cząstek w naszej symulacji. Natomiast wartość parametru $rc1$ określa efektywny promień cząsteczki obliczeniowej, która reprezentuje w metodzie **DSMC** zbiór wielu rzeczywistych cząstek, więc taki dobór tego parametru jest częściowo uzasadniony. Wartości pozostałych parametrów będziemy zmieniać aby wygenerować początkowy rozkład.

1. Przygotowanie rozkładu cząstek w lewym podukładzie.

Ustawiamy wartości parametrów **lewego** podukładu: $x_{min} = 0$, $x_{max} = 1.0$, $y_{min} = 0$, $y_{max} = 0.5$, $temp = 10^4$ (wartość T_1 musi być wysoka), $N_1 = 8 \cdot 10^5$, $init_dist = 2$ (rozkład Maxwella-Boltzmann). Następnie wywołujemy tylko dwie funkcje

```
init()
write_position_velocity("rv_left.dat");
```

w celu wygenerowania rozkładu MB, który zapisujemy do pliku "rv_left.dat". Rozkład w lewym podukładzie mamy gotowy.

2. Przygotowanie rozkładu cząstek w prawym podukładzie.

Ustawiamy wartości parametrów **prawego** podukładu: $x_{min} = 1.0$, $x_{max} = 2.0$, $y_{min} = 0$, $y_{max} = 0.5$, $temp = 300$ (wartość T_2), $N_2 = 10^5$, $init_dist = 2$ (rozkład Maxwella-Boltzmann). Następnie wywołujemy tak jak poprzednio tylko dwie funkcje

```
init()
write_position_velocity("rv_right.dat");
```

w celu wygenerowania rozkładu MB, który zapisujemy do pliku "rv_right.dat". Mamy rozkład w prawym podukładzie

3. Początkowy rozkład cząstek w całym układzie.

Łączymy ze sobą pliki i tworzymy wejściowy plik startowy do właściwej symulacji

```
rv_left.dat + rv_right.dat → pos_vel_start.dat
```

4. Symulacja gazu w całym układzie.

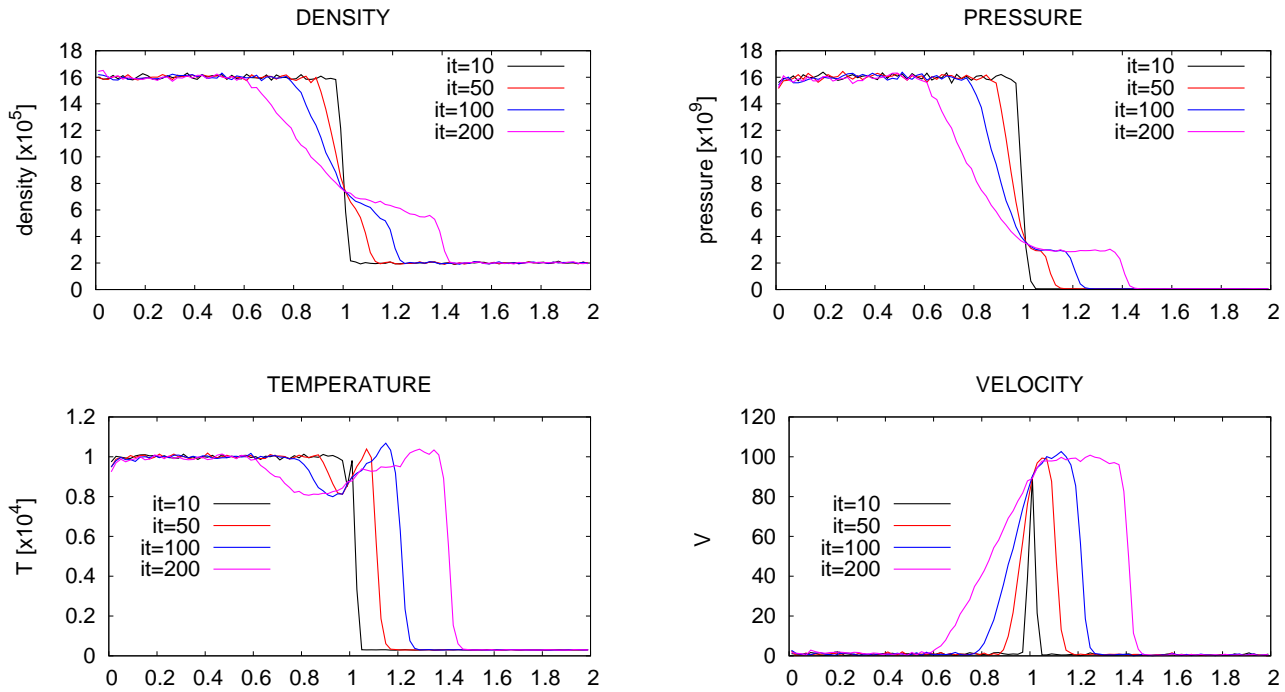
Ustawiamy parametry dla całego układu: $x_{min} = 0$, $x_{max} = 2.0$, $y_{min} = 0$, $y_{max} = 0.5$, $N = N_1 + N_2 = 9 \cdot 10^5$, $init_dist = 0$ (**program wczytuje dane z pliku "pos_vel_start.dat"**). Ustawiamy maksymalną liczbę iteracji na 2000 (jako argument funkcji $evolution(tmax, IT_MAX)$) i wykonujemy symulację. Ze względu na dużą liczbę cząstek może to potrwać kilka godzin (w zależności od używanego sprzętu). Potrzebne wyniki (rozkłady przestrzenne dla kierunku x) są zapisywane w katalogu *wyniki* w plikach *nptv_iteracja.dat* w formacie: x, gęstość, ciśnienie, temperatura, $\langle \sqrt{V^2} \rangle$, $j_x = \langle v_x n(x) \rangle$ (składowa x-owa strumienia gęstości cząstek)

5. Analiza wyników.

Narysować zmiany przestrzenne: gęstości, ciśnienia, temperatury, prędkości i strumienia cząstek w wybranych chwilach czasowych np. co 100 iteracji umieszczając 3-4 wykresy tej samej wielkości na jednym rysunku (rysunków będzie dużo więc należy ograniczyć ich ilość). Skomentować zmiany zachodzące w czasie. Opisać sposób propagacji fali termicznej i fali ciśnienia. Wyjaśnić zmiany gęstości gazu w lewym podukładzie w oparciu o wykresy rozkładów prędkości (czoło fali

porusza się o wiele szybciej od reszty). Opisać co dzieje się z temperaturą i ciśnieniem, gdy fala dotrze do prawego brzegu układu.

3 Przykładowe wyniki



Rysunek 2: Przykładowe wyniki symulacji propagacji fali termicznej.