

Symulacja dynamiki gazu w metodzie Monte Carlo
(Direct Simulation Monte Carlo)

Plan wykładu

- wstęp – o potrzebie używania MC w symulacjach gazu
- elementy teorii kinetycznej gazu, równanie Boltzmannna
- metoda DSMC
- przykłady:
 - propagacja fali uderzeniowej

Literatura:

- G.A. Bird, „**Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows**”, Oxford University Press
- F. Alexander, A. Garcia, „**The direct simulation Monte Carlo method**”, Computers in Physics 11, (1997) 588
- P. Prasanth, J. Kakkassery, „**Molecular models for simulation of rarefied gas flows using DSMC method**”, Fluid Dynamics Research 40, (2008) 233-252
- I. Sagert, W. Bauer, D. Colbry, J. Howell, R. Pickett, A. Staber, T. Strother, „**Hydrodynamic shock wave studies within a kinetic Monte Carlo approach**”, Journal of Computational Physics 266, (2014) 191-213
- M. Wang, Z. Li, „**Simulations for gas flows in microgeometries using the DSMC method**”, International Journal of Heat and Fluid Flow 25, (2004) 975-985
- A. Sharma, L. Long, „**Numerical simulation of the blast impact problem using the DSMC method**”, Journal of Computational Physics 200, (2004) 211-237

Wstęp – czyli o potrzebie używania MC w symulacjach gazu

- przepływ gazu może być modelowany przy użyciu modeli makroskopowych lub mikroskopowych
- **model makroskopowy**: gaz traktowany jest jako ciągłe medium, a do jego opisu konieczne jest wyspecyfikowanie oprócz współrzędnych położeniowych i czasu (zmiennie niezależne), także zmiennych zależnych jak:
 - wektora prędkości
 - gęstości
 - ciśnienia
 - temperatury

$$\vec{v}(\vec{r}, t), \rho(\vec{r}, t), p(\vec{r}, t), T(\vec{r}, t)$$

Związki między tymi wielkościami opisują **równania Naviera-Stokesa**, które traktują płyn jako substancję ciągłą (o nieznikającej gęstości).

- model mikroskopowy (lub cząsteczkowy): własności gazu opisywane są poprzez podanie położenia, prędkości, oraz stanów rotacyjnego i wibracyjnego (wewnętrzne stopnie swobody) jego składników czyli atomów i cząsteczek gazu.
- Dynamikę gazu w ujęciu mikroskopowym opisuje **równanie Boltzmann**a, którego rozwiązaniem jest **funkcja gęstości prawdopodobieństwa określająca rozkład cząstek w przestrzeni fazowej**
- pomijając wewnętrzne stopnie swobody (rotacyjny i wibracyjny) funkcję rozkładu definiujemy w przestrzeni fazowej (w tym ujęciu zastępujemy pędy prędkościami)

$$f = f(\vec{r}, \vec{p}, t) \rightarrow f(\vec{r}, \vec{v}, t)$$

- jednocząstkowa funkcja rozkładu w przestrzeni fazowej

$$1D \rightarrow 3D \text{ efektywnie : } f(x, V_x, t)$$

$$2D \rightarrow 5D \text{ efektywnie : } f(x, y, V_x, V_y, t)$$

$$3D \rightarrow 7D \text{ efektywnie : } f(x, y, z, V_x, V_y, V_z, t)$$

Ze względu na tak sformułowane zagadnienie, znalezienie rozwiązania analitycznego jest niemożliwe w ogólnym przypadku dla dowolnej geometrii warunków brzegowych. Pozostaje rozwiązanie problemu numerycznie.

- wielocząstkowa funkcja rozkładu w przestrzeni fazowej (gaz monoatomowy)**

Pełną informację o układzie N cząstek zawiera wielocząstkowa funkcja rozkładu

$$F(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_N, t)$$

- przestrzeń 6N wymiarowa**

ilość cząstek zawartych w elemencie objętości w przestrzeni fazowej

$$dN = F(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_N, t) \underbrace{d^{3N} \mathbf{r} d^{3N} \mathbf{v}}_{d\Omega_{rv}}$$

narzucamy warunek normalizacji fgp N cząstek

$$\int_{\Omega_{rv}} F(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_N, t) d^{3N} \mathbf{r} d^{3N} \mathbf{v} = 1$$

rozkład możemy zredukować do postaci jednocząstkowej

$$F^{(1)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t) = \int_{\Omega_{rv}} F(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_N, t) d^3 \mathbf{r}_2 \dots d^3 \mathbf{r}_N d^3 \mathbf{v}_2 \dots d^3 \mathbf{v}_N$$

określa ona rozkład gęstości prawdopodobieństwa znalezienia cząstki o indeksie 1 w **przestrzeni fazowej**.

Cząstki są nierozróżnialne tj. indeks 1 może dotyczyć dowolnej cząstki w układzie, z czego wynika warunek normalizacji

$$dN = f_{rv}(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{v} \quad \int F^{(1)}(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{v} = 1$$

rozkład jednocząstkowy →

$$f_{rv}(\vec{r}, \vec{v}, t) = N F^{(1)}(\vec{r}, \vec{v}, t)$$

← zredukowany rozkład wielocząstkowy

W symulacjach gazu istotne są **zderzenia między cząsteczkami** – są to oddziaływania dwuciałowe, możemy więc chwilowo zaniedbać informacje o pozostałych cząstkach, interesuje nas **zredukowany rozkład dwucząstkowy**

$$F^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_1, \vec{v}_2, t)$$

W **gazie rozrzedzonym** odległości między cząstkami są znacznie większe od rozmiarów cząstek (powiedzmy x 1000), zatem ruch cząstki pomiędzy zderzeniami pozostaje niezależny od pozostałych (brak oddziaływania na dużych odległościach), dwucząstkowy rozkład możemy zapisać jako iloczyn rozkładów jednocząstkowych

$$F^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_1, \vec{v}_2, t) = F^{(1)}(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t) \cdot F^{(1)}(\vec{r}_2, \vec{v}_2, t)$$

równanie to jest konsekwencją chaosu tj. chaotycznego ruchu cząstek w układzie

Elementy teorii kinetycznej gazu – funkcja rozkładu, równanie Boltzmann

- jednocząstkowa funkcja rozkładu w przestrzeni prędkościowej (gaz monoatomowy)**

Rozważamy gaz jednorodny (w przestrzeni położeniowej), który zawiera N cząstek. Gęstość przestrzenna jest stała, ale jaki jest rozkład prędkości cząsteczek? Rozkład taki opisuje **jednocząstkowa funkcja rozkładu prędkości**

$$f_v(\vec{v})$$

$$dN = N f_v(\vec{v}) dv_x dv_y dv_z = N f_v d^3\mathbf{v}$$

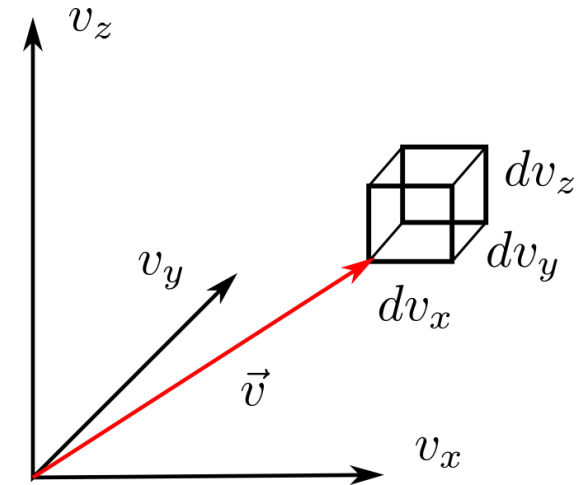
$$\frac{dN}{N} = f_v d^3\mathbf{v} \quad \rightarrow \quad \frac{1}{N} \int dN = \int f_v d^3\mathbf{v} = 1$$

Dzięki rozkładowi prędkości możemy szacować wielkości zależne od prędkości

$$\langle A(\vec{v}) \rangle = \frac{1}{N} \int A dN = \frac{1}{N} \int A(\vec{v}) f_v(\vec{v}) N d^3\mathbf{v} = \int A(\vec{v}) f_v(\vec{v}) d^3\mathbf{v}$$

przykładowo możemy policzyć wartość oczekiwaną wektora prędkości – **strumienia gazu**

$$\langle \vec{v} \rangle = \int \vec{v} f_v(\vec{v}) d^3\mathbf{v}$$



- jednocząstkowa funkcja rozkładu w przestrzeni fazowej (gaz monoatomowy)**

W praktyce rzadko mamy do czynienia z gazem jednorodnym, gęstość może zmieniać się w różnych punktach układu zależności od warunków brzegowych i początkowych – wówczas bardziej przydatną funkcją jest **jednocząstkowa funkcja rozkładu w przestrzeni fazowej**

Dzięki niej możemy określić liczbę cząsteczek w elemencie objętości przestrzeni fazowej

$$dN = f_{rv}(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{v} \quad dx dy dz dv_x dv_y dv_z - \text{element objętości}$$

Oba rozkłady: prędkościowy i w przestrzeni fazowej są ze sobą powiązane

$$dN = N f_v(\vec{v}) d^3\mathbf{v} = f_{rv}(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{v}$$

$$\frac{dN}{d^3\mathbf{r}} = n(\vec{r}) - \text{gestość gazu}$$

$$n(\vec{r}) \cdot f_v(\vec{v}) = f_{rv}(\vec{r}, \vec{v}, t)$$

Ostatnia relacja ma olbrzymie znaczenie dla metody DSMC:

- gęstość będziemy określać na podstawie znanych położeń cząstek
- rozkład prędkości będziemy określać lokalnie – dzieląc przestrzeń (układ jest skończony/ograniczony) na mniejsze komórki obliczeniowe, a następnie uśredniając prędkość po znajdujących się w nich cząstkach

- **równanie Boltzmanna**

W dalszej części wykładu potrzebna będzie nam tylko funkcja rozkładu prędkościowego, w celu skrócenia zapisu przyjmujemy oznaczenie

$$f_v(\vec{v}) = f(\vec{v}) = f$$

Wiemy jak znaleźć liczbę cząsteczek w elemencie przestrzeni fazowej w określonym punkcie

$$dN(\vec{r}, \vec{v}, t) = n(\vec{r}) \cdot f(\vec{v}) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{v}$$

Interesuje nas dynamika, co oznacza że liczba cząsteczek może się zmienić.

Zmiana w czasie liczby cząsteczek w danym punkcie (komórkę elementarną objętości pozostawiamy w miejscu)

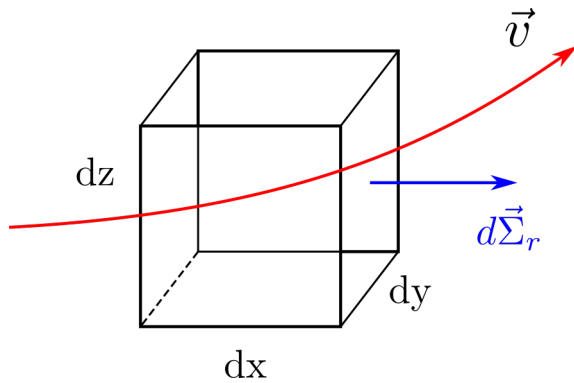
$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{\partial(n f)}{\partial t} d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{v}$$

zmiana liczby cząsteczek (gęstości) może być wynikiem:

- konwekcji – cząsteczki przemieszczają się pomiędzy zderzeniami po liniach prostych ze stałymi prędkościami
- sił zewnętrznych, które dają wkład do wyrazu konwekcyjnego
- zderzeń z innymi cząstkami – mogą być „wyszrotelone na zewnątrz” komórki lub „wstrzelone do środka”

Określmy wkłady od tych 3 czynników.

- adwekcja (unoszenie/konwekcja)**



- Cząstki, które wychodzą z komórki $dx dy dz$ są traczone, te które wchodzi dają wkład dodatni. Strumień cząstek przechodzący przez powierzchnię Σ_r otaczającą komórkę elementarną o objętości przestrzennej $dx \cdot dy \cdot dz$

$$\phi_1 = - \int_{\Sigma_r} n f \vec{v} \cdot d\vec{\Sigma}_r d^3 \mathbf{v}$$

korzystamy z prawa Gaussa

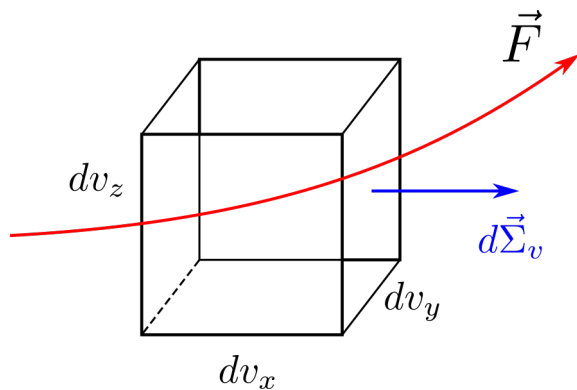
$$\phi_1 = - \int_{\Omega_r} \nabla_r (n f \vec{v}) d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{v} = \int d\phi_1$$

$$d\phi_1 = - \nabla_r (n f \vec{v}) d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{v}$$

zakładamy, że prędkość nie zmienia się wewnątrz **komórki przestrzennej**

$$d\phi_1 = - \vec{v} \cdot \nabla_r (n f) d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{v}$$

- wpływ sił zewnętrznych**



- Strumień cząstek przenikający powierzchnię Σ_v ograniczającą komórkę elementarną w przestrzeni prędkości, F oznacza siłę na jednostkę masy (wymiar przyspieszenia)

$$\phi_2 = - \int_{\Sigma_v} n f \vec{F} \cdot d\vec{\Sigma}_v d^3 \mathbf{r}$$

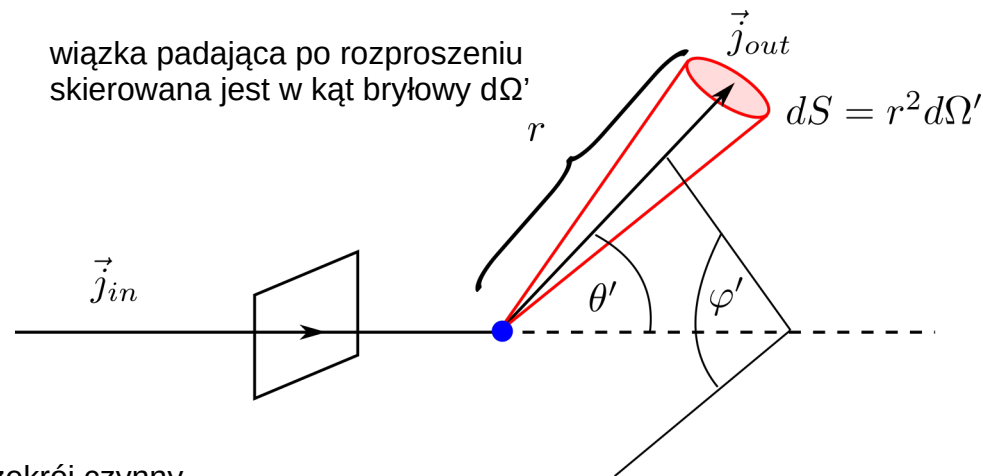
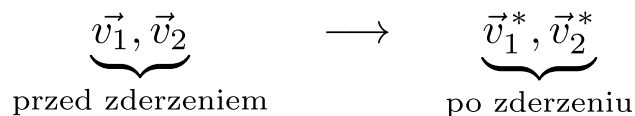
$$\phi_2 = - \int_{\Omega_v} \nabla_{\vec{v}} \cdot (n f \vec{F}) d^3 \mathbf{v} d^3 \mathbf{r}$$

$$d\phi_2 = - \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{v}} (n f) d^3 \mathbf{v} d^3 \mathbf{r}$$

siła niezależna od prędkości

$$\nabla_{\vec{v}} \cdot \vec{F} = 0$$

- zderzenie dwóch cząstek**



- różniczkowy przekrój czynny

$$\sigma = \frac{d\sigma_{tot}(\theta', \varphi')}{d\Omega'} = \frac{|\vec{j}_{out}|}{|\vec{j}_{in}|} r^2$$

- całkowity przekrój czynny

$$\int \sigma d\Omega = \sigma_{tot}$$

uwaga: dalej pomijamy „primy” dla kąta rozproszenia

zgodnie z klasyczną teorią zderzeń, zderzenia dwóch cząstek rozważamy w przestrzeni pędowej

$$\nu(\vec{p}_1, \vec{p}_2 \rightarrow p_1^*, p_2^*) \frac{d^3 p_1^*}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d^3 p_2^*}{(2\pi\hbar)^3} = |\vec{V}_2 - \vec{V}_1| \sigma d\Omega$$

$$\nu = |\vec{V}_2 - \vec{V}_1| \sigma d\Omega$$

- częstość zderzeń między cząstką o prędkości V_1 z cząstką o prędkości V_2

$$dN_2 = n f_2 d^3 \mathbf{r}_2 d^3 \mathbf{v}_2, \quad f_2 = f(\vec{v}_2) \cdot \text{średnia liczba cząstek o prędkości } V_2 \text{ w komórce elementarnej w przestrzeni fazowej}$$

składamy oba przyczynki, aby uzyskać:

- częstość zderzeń 1 cząstki o prędkości V_1 z wszystkimi cząstkami o prędkości V_2 zawartymi w części położeniowej komórki elementarnej

$$\frac{\nu dN_2}{d^3 \mathbf{r}_2} = n f_2 d^3 \mathbf{v}_2 \cdot |\vec{V}_2 - \vec{V}_1| \sigma d\Omega$$

Następnie uwzględniamy, ilość cząstek o prędkości V_1 w części położeniowej komórki elementarnej (analogicznie jak dla cząstek o prędkości V_2)

$$dN_1 = n f_1 d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{v}_1, \quad f_1 = f(\vec{v}_1)$$

iloczyn obu wielkości określa całkowitą liczbę zderzeń między cząstkami o prędkości V_1 a cząstkami o prędkości V_2 w komórce elementarnej

$$\frac{dN_{12 \rightarrow 1^* 2^*}^c}{dt} = \frac{\nu dN_2}{d^3 \mathbf{r}_2} dN_1 = (|\vec{v}_2 - \vec{v}_1| \sigma d\Omega) \cdot (n f_1 d^3 \mathbf{v}_1 d^3 \mathbf{r}_1) \cdot (n f_2 d^3 \mathbf{v}_2 d^3 \mathbf{r}_2)$$

Wyrażenie określa ile cząstek o prędkości V_1 zmienia swoją prędkość (**ubytek = „-”**) w wyniku rozproszenia na cząstkach V_2

$$\vec{v}_1, \vec{v}_2 \longrightarrow \vec{v}_1^*, \vec{v}_2^*$$

$$\frac{dN_{12 \rightarrow 1^* 2^*}^c}{dt} = n^2 f_1 f_2 |\vec{v}_2 - \vec{v}_1| \sigma d\Omega d^3 \mathbf{v}_1 d^3 \mathbf{v}_2 d^3 \mathbf{r}_1$$

Możemy też rozpatryć proces przeciwny, tj. odwrócony w czasie: wówczas cząstka o prędkości V_1^* będzie się rozpraszała na cząstce o prędkości V_2^* i w rezultacie dostaniemy cząstki o prędkościach V_1 i V_2 . W wyniku procesu odwrotnego, cząstek o prędkościach V_1 przybywa (**zysk = „+”**).

$$\vec{v}_1^*, \vec{v}_2^* \longrightarrow \vec{v}_1, \vec{v}_2$$

$$\frac{dN_{1^* 2^* \rightarrow 1 2}^c}{dt} = n^2 \underbrace{f_1^* f_2^* |\vec{v}_2^* - \vec{v}_1^*| \sigma^*}_{* - \text{tylko część zależna od prędkości}} d\Omega^* d^3 \mathbf{v}_1^* d^3 \mathbf{v}_2^* d^3 \mathbf{r}_1$$

* - tylko część zależna od prędkości

Symetria transformacji pierwotnego procesu rozpraszania i rozpraszania w kierunku odwrotnym powoduje, iż jacobian transformacji ma wartość jednostkową

$$|\sigma \Omega d^3 \mathbf{v}_1 d^3 \mathbf{v}_2| = |\sigma^* \Omega^* d^3 \mathbf{v}_1^* d^3 \mathbf{v}_2^*|$$

co upraszcza wyrażenie opisujące całkowitą zmianę liczby cząstek o prędkości V_1 w trakcie rozprożeń na cząstkach o prędkości V_2

$$\frac{dN_{12}^c}{dt} = n^2 (f_1^* f_2^* - f_1 f_2) |\vec{v}_2 - \vec{v}_1| \sigma d\Omega d^3 \mathbf{v}_1 d^3 \mathbf{v}_2 d^3 \mathbf{r}_1$$

całkując po pełnym kącie bryłowym oraz po prędkości V_2 otrzymamy całkowitą zmianę liczby cząstek o prędkości V_1

$$f_1 = f(\vec{v}_1)$$

$$f_2 = f(\vec{v}_2)$$

$$f_1^* = f(\vec{v}_1^*)$$

$$f_2^* = f(\vec{v}_2^*)$$

$$\frac{dN_1^c}{dt} = \left(\int d^3 \mathbf{v}_2 \int d\Omega n^2 (f_1^* f_2^* - f_1 f_2) |\vec{v}_2 - \vec{v}_1| \sigma \right) d^3 \mathbf{v}_1 d^3 \mathbf{r}_1$$

Wracamy do równania wyjściowego

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{\partial(n f)}{\partial t} d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{v}$$

i uwzględniamy wkłady od:

- konwekcji
- sił zewnętrznych
- zderzeń

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{\partial(n f)}{\partial t} d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{v} = d\phi_1 + d\phi_2 + \frac{dN^c}{dt}$$

pozbywamy się indeksu „1”: $\mathbf{v}_1 \rightarrow \mathbf{v}$

$$\frac{\partial(n f)}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}}(n f) - \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{v}}(n f) + \int d^3 \mathbf{v}_2 \int d\Omega n^2 (f^* f_2^* - f f_2) |\vec{v}_2 - \vec{v}| \sigma$$

Otrzymaliśmy równanie transportowe Boltzmann

$$\frac{\partial(n f)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}}(n f) + \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{v}}(n f) = \int d^3 \mathbf{v}_2 \int d\Omega n^2 (f^* f_2^* - f f_2) |\vec{v}_2 - \vec{v}| \sigma$$

Uwzględniając równanie ciągłości

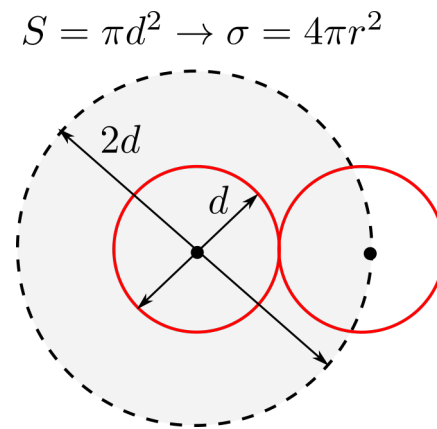
$$\frac{\partial n}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla n = 0$$

redukujemy postać równania Boltzmanna do części prędkościowej

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{v}} f = n \int d^3 \mathbf{v}_2 \int d\Omega (f^* f_2^* - f f_2) |\vec{v}_2 - \vec{v}| \sigma$$

Interpretacja przekroju czynnego na rozpraszanie w przybliżeniu twardej sfery – zderzenia kontaktowe

- przekrój czynny σ określa pole powierzchni koła w środku, którego nie może znaleźć się środek innej cząsteczki



W gazach definiujemy **średnią drogę swobodną**, która zależy od gęstości i przekroju czynnego cząstki

$$\lambda = \frac{1}{n\sigma}$$

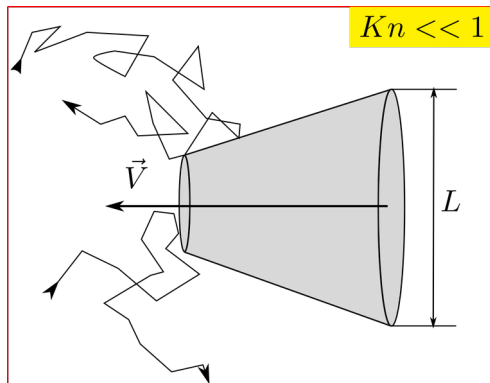
• średnia droga swobodna

- w praktycznych zastosowaniach interesuje nas oddziaływanie cząsteczek gazu obiektami o skończonych wymiarach rzędu L , relacja między długością drogi swobodnej a L to **liczba Knudsen**

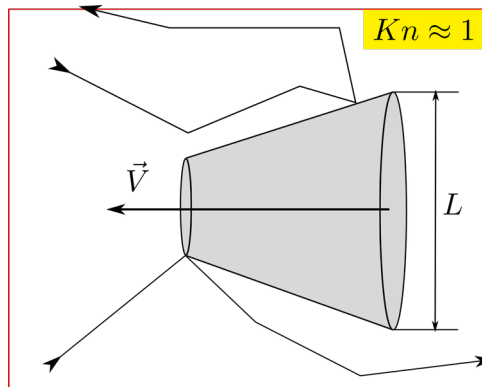
$$Kn = \frac{\lambda}{L}$$

• liczba Knudsen

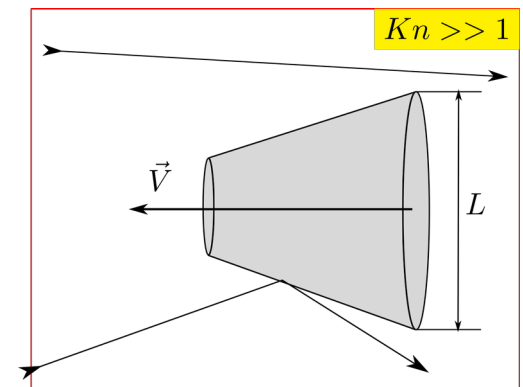
Liczba Knudsen określa na ile ważnym czynnikiem są zderzenia w gazie w rozważanym problemie



Przepływ ciągły
(klasyczna dynamika płynów)



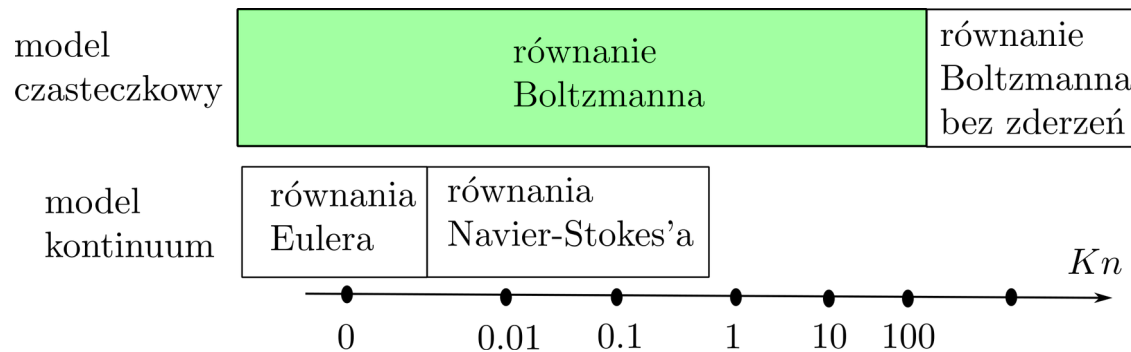
zakres pośredni
(opis cząsteczkowy)



swobodny przepływ bez zderzeń
(opis kinetyczny)

- wykorzystując liczbę Knudsena równanie Boltzmann można zapisać w postaci

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{v}} f = \frac{1}{K_n} \int d^3 \mathbf{v}_2 \int d\Omega (f^* f_2^* - f f_2) \sigma (|\vec{v}_2 - \vec{v}|)$$



modele czasteczkowe:

- dynamika molekularna
- Monte Carlo (DSMC)

- model czasteczkowy stosuje się, gdy $Kn > 0.1$, poniżej tej liczby stosowanie modeli czasteczkowych nie ma sensu ze względu na ich zbyt małą wydajność
- model czasteczkowy zazwyczaj stosuje się dla **gazów rozrzedzonych**, które określa **parametr gęstości**

$$\varepsilon = n d^3 \ll 1$$

powietrze w atmosferze:

$$\varepsilon = 0.0014$$

n - gęstość gazu [liczba czasteczek/objętość]
 d - średnica czasteczek gazu
 ε - określa objętość zajętą przez czasteczki

- atmosfera jest gazem rzadkim

Model DSMC

Zapiszmy równanie w zwartej postaci

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{v}} f = \frac{1}{K_n} \underbrace{\int d^3 \mathbf{v}_2 \int d\Omega (f^* f_2^* - f f_2) \sigma (|\vec{v}_2 - \vec{v}|)}_{Q(f, f)}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{v}} f = \frac{1}{K_n} Q(f, f)$$

$$Q(f, f) = \int d^3 \mathbf{v}_2 \int d\Omega (f^* f_2^* - f f_2) \sigma = \underbrace{\int d^3 \mathbf{v}_2 \int d\Omega f^* f_2^* \sigma}_{=P(f, f)} - f \underbrace{\int d^3 \mathbf{v}_2 \int d\Omega f_2 \sigma}_{=\mu}$$

$$Q(f, f) = P(f, f) - \mu f$$

μ – to średnia liczba zderzeń

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{v}} f = \frac{1}{K_n} (P(f, f) - \mu f)$$

Z wykładu dotyczącego równań stochastycznych wiemy np. że równanie dyfuzji w którym występuje funkcja rozkładu $n(r)$ możemy rozwiązywać na dwa sposoby:

- poszukując ciągłego rozkładu funkcji $n(r)$ stosując np. standardowe metody numeryczne
- generując dużą liczbę cząstek, które poddane dynamice równania stochastycznego, w kolejnych chwilach czasu będą miały rozkład przestrzenny odpowiadający funkcji $n(r)$

W przypadku układów o skomplikowanej geometrii, warunkach brzegowych oraz dużej objętości zastosowanie pierwszego podejścia staje się nieopłacalne ze względu na olbrzymi koszt stworzenia programu komputerowego, jego obsługi oraz kosztu obliczeniowego.

Drugie podejście bazujące na ewolucji czasowej grupy złożonej z dyskretnych cząsteczek pozbawione jest tych wad. W procesie ewolucji czasowej wykorzystamy metodę MC odwołując się do teorii kinetycznej w celu przeprowadzenia procesu zderzania cząstek – który ma charakter losowy.

Założenia:

- w dowolnej chwili czasowej określone są położenia i prędkości wszystkich cząstek w układzie

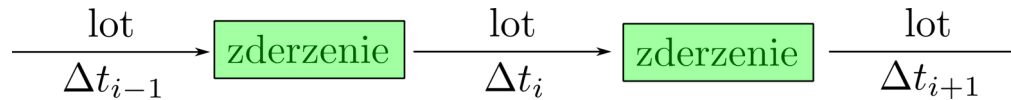
$$\vec{D} = [\vec{r}_1(t), v_1(t), \vec{r}_2(t), v_2(t), \dots, \vec{r}_N(N), v_1(t)]$$

- przedział czasu w którym wykonujemy ewolucję układu dzielimy na dyskretne chwile czasowe, dla nich będziemy określać stan układu

$$t_0 \rightarrow t_1 \rightarrow t_2 \rightarrow \dots \rightarrow t_n$$

$$\vec{D}_0 \rightarrow \vec{D}_1 \rightarrow \vec{D}_2 \rightarrow \dots \rightarrow \vec{D}_n$$

- ponieważ symulacja ma być prowadzona w gazie rozrzedzonym, więc twierdzimy że do zderzeń dochodzi sporadycznie
- po między zderzeniami cząstki poruszają się po liniach prostych ze stałą prędkością (brak sił zewnętrznych) lub są przyspieszane w polu sił zewnętrznych
- gdy cząstka napotka partnera, wówczas dochodzi do zderzenia – proces jest traktowany jako natychmiastowy
- rozdzielamy proces adwekcji i rozpraszania – oba zagadnienia rozważamy osobno (ang. splitting)



- faza adwekcji:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f - \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{v}} f$$

- faza zderzeniowa:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{Kn} (P(f, f) - \mu f)$$

- w fazie adwekcji rozwiązujemy równania ruchu każdej z cząstki

n – to chwila czasowa

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i^n}{dt^2} = \vec{F}_i^n, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

brak sił:

$$\vec{F}_i = 0 \rightarrow \vec{r}_i^{n+1} = \vec{r}_i^n + \vec{v}_i^n \cdot \Delta t^n$$

z siłą:

$$\vec{F}_i \neq 0 \rightarrow \vec{r}_i^{n+1} \leftarrow \text{algorytm RK4}$$

- porównanie z algorytmem dynamiki molekularnej

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i^n}{dt^2} = \sum_{j \neq i} \vec{F}_{ij} + \vec{F}_i^n, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

dynamika molekularna wymaga wyznaczania sił od innych cząsteczek w każdym kroku, jej stosowanie dla gazów rozrzedzonych nie ma sensu

- faza zderzeniowa – interpretacja probabilistyczna

dyskretyzujemy pochodną czasową (wzór Eulera – rząd dokładności: 1)

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = \frac{1}{K_n} [P(f^n, f^n) - \mu f^n]$$

$$f^{n+1} = \left(1 - \frac{\mu \Delta t}{K_n}\right) f^n + \left(\frac{\mu \Delta t}{K_n}\right) \frac{P(f^n, f^n)}{\mu}$$

$$p_{free} = 1 - \frac{\mu \Delta t}{K_n}$$

- prawdopodobieństwo że cząstka nie została rozproszona, zachowujemy dotychczasowy stan cząstki (prędkość)

$$p_{col} = \frac{\mu \Delta t}{K_n}$$

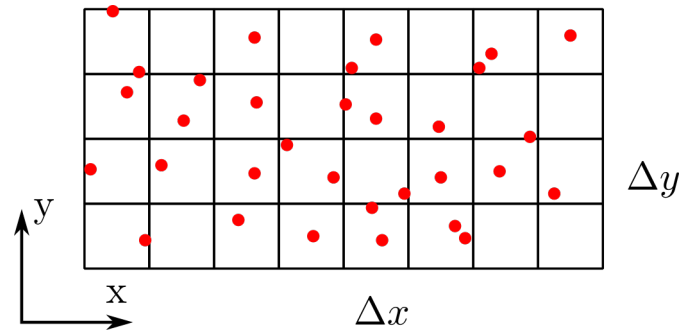
- prawdopodobieństwo, że cząstka bierze udział w zderzeniu,
- rozkład prędkości po rozproszeniu opisuje funkcja $P(f,f)/\mu$

Aby rozwiązać równanie Boltzmann'a należy określić czynnik zderzeniowy $P(f,f)$.

Przykładowo w modelu BGK zakładamy, że gaz znajduje się w równowadze termodynamicznej więc czynnik $P(f,f)/\mu$ to rozkład Maxwella

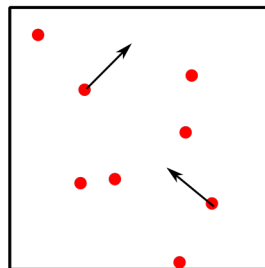
$$\frac{P(f, f)}{\mu} \rightarrow f(v) = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} 4\pi v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right)$$

- aby sprawnie przeprowadzić proces zderzenia, zauważmy że zderzyć się mogą jedynie cząstki, które są blisko siebie, dlatego układ dzielimy na mniejsze komórki i zderzenia przeprowadzamy w każdej z nich niezależnie od pozostałych

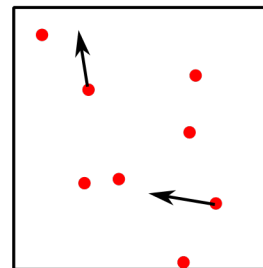


- każda cząstka ma przypisany identyfikator komórki (sortowanie)
- zderzenia wykonywane są w każdej komórce niezależnie od innych
- w wyniku zderzenia zostają zmienione prędkości obu cząstek
- rozmiar komórki na tyle mały że można uznać rozkład cząstek w środku jest jednorodny
- zderzenia mają charakter stochastyczny – cząstki nie muszą fizycznie ze sobą oddziaływać**

przed zderzeniem



po zderzeniu



- skalowanie przekroju czynnego w DSMC

- podstawowym założeniem DSMC jest statystyczny sposób rozpraszania cząstek, możemy zrobić kolejny krok w tym kierunku i założyć (w końcu to MC), że jedno zderzenie losowe może statystycznie reprezentować wiele pojedynczych zderzeń dwucząsteczkowych
- w DSMC zakładamy, że jedna „**cząstka obliczeniowa gazu**” reprezentuje N_p rzeczywistych cząstek i w związku z tym musimy przeskalować (powiększyć N_p razy) przekrój czynny na zderzenia

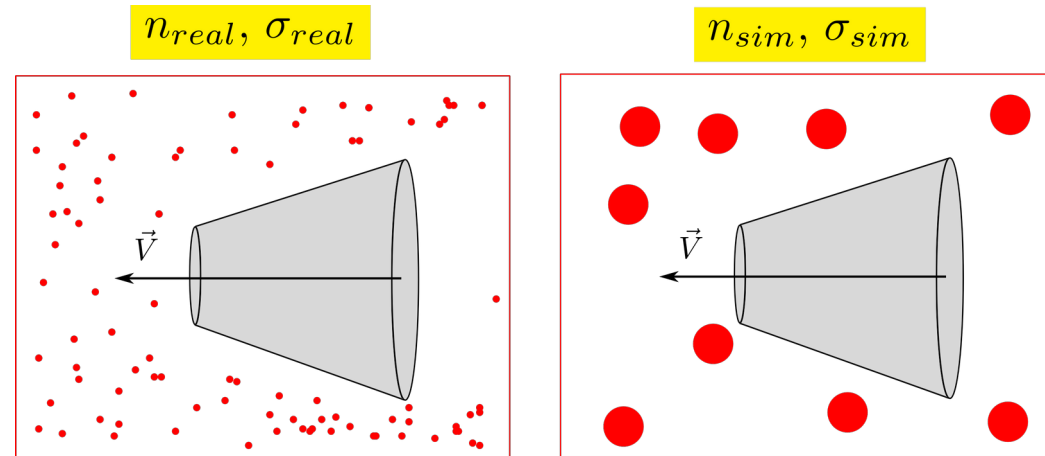
Częstość zderzeń w gazie określa relacja

$$\omega = \nu n = \langle v_{rel} \rangle \sigma n$$

załóżmy, że prędkości cząsteczek pozostają niezmienione, ale zmieniamy σ i n tak aby częstość była stała

$$\omega = const \rightarrow \sigma_{sim} n_{sim} = \sigma_{real} n_{real}$$

$$\sigma_{sim} = \sigma_{real} \frac{n_{real}}{n_{sim}} = W \sigma_{real}$$



Przykład. Bird „Direct simulation...” strona 223 (11.2 collision test program)

$$V = 1m^3$$

$$n_{real} = 10^{20}m^{-3}$$

$$n_{sim} = 10^3m^3$$

$$W = \frac{10^{20}}{10^3} = 10^{17}$$

Argon:

$$r_{Ar} = 2.08 \cdot 10^{-10}m \quad \sigma = 4\pi r_{eff}^2$$

$$r_{eff} = r_{Ar} \cdot \sqrt{W} = 6.6 \cdot 10^{-2}m$$

- Algorytm NTC doboru cząstek biorących udział w zderzeniach (time counter Bird)

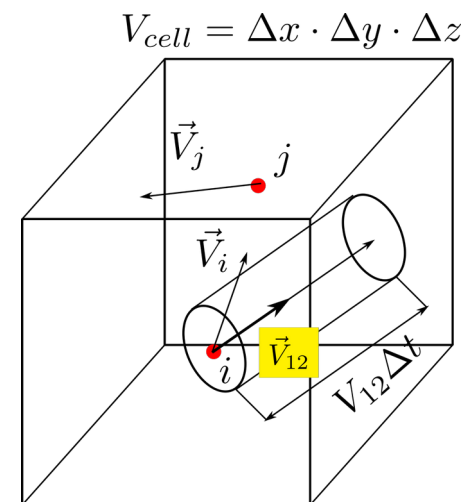
prawdopodobieństwo zderzenia pary cząstek (i,j)

$$p_{ij} = \frac{(N_p \sigma) v_{i,j} \Delta t}{V_{cell}}$$

2 problemy:

- p_{ij} jest bardzo małe – małe prawd. akceptacji
- musielibyśmy sprawdzić wszystkie pary w komórce (a tych może być dużo)

$$N_c(N_c - 1)/2$$



Rozwiązanie:

- określamy maksymalną prędkość względną w układzie – arbitralnie, ale rozsądnie i określamy maksymalne prawdopodobieństwo zderzenia
- określamy maksymalną liczbę par atomów, które mogą podlegać zderzeniom
- określmy jeszcze średnią liczbę par atomów, które powinny się zderzyć
- dzieląc oczekiwaną liczbę zderzeń przez maksymalną określamy prawdopodobieństwo akceptacji zderzeń w zbiorze N_{max}
- po wylosowaniu N_{max} par dla każdej z nich określamy prawdopodobieństwo, że atomy ulegają zderzeniu

$$p_{max} = \frac{(N_p \sigma) v_{rel,max} \Delta t}{V_{cell}} < 1$$

$$N_{max}^{pair} = \frac{N_c^2}{2} p_{max}$$

$$N_{av}^{pair} = \frac{N_c^2}{2} \langle p_{ij} \rangle$$

$$\bar{p} = \frac{N_{av}^{pair}}{N_{max}^{pair}}$$

- to prawdopodobieństwo jest już duże, symulacja zderzeń będzie wydajna

$$p_{i,j}^{acc} = \frac{v_{i,j}}{v_{rel,max}} > U_1, \quad U_1 \sim U(0, 1)$$

Uwaga:

cząsteczki są zderzane sekwencyjne, jedno zderzenie po drugim – stąd nazwa metody, cząsteczka może brać udział w więcej niż jednym zderzeniu

Interpretacja: jeśli prędkość względna $v_{ij} = v_{max}$ to powinno dojść do zderzenia, zatem akceptujemy tylko te liczby U_1 które są mniejsze od p^{acc}

- procedura zderzenia dwóch czastek w modelu HS (HS – hard sphere)

zderzenie rozważamy w układzie środka masy obu atomów, **pęd środka masy** musi być zachowany, natomiast kierunki prędkości względnych po rozproszeniu podlegają randomizacji

$$\text{ZZE} \quad \frac{m\vec{v}_1^2}{2} + \frac{m\vec{v}_2^2}{2} = \frac{m\vec{v}'_1{}^2}{2} + \frac{m\vec{v}'_2{}^2}{2}$$

$$\text{ZZP} \quad m\vec{v}_1 + m\vec{v}_2 = m\vec{v}'_1 + m\vec{v}'_2$$

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}_1 + [(\vec{v}_2 - \vec{v}_1) \cdot \vec{n}] \cdot \vec{n}$$

$$\vec{v}'_2 = \vec{v}_2 - [(\vec{v}_2 - \vec{v}_1) \cdot \vec{n}] \cdot \vec{n}$$

wystarczy tylko wylosować kierunek wektora \mathbf{n}

$$n_x = \cos \varphi \sin \theta$$

$$n_y = \sin \varphi \sin \theta$$

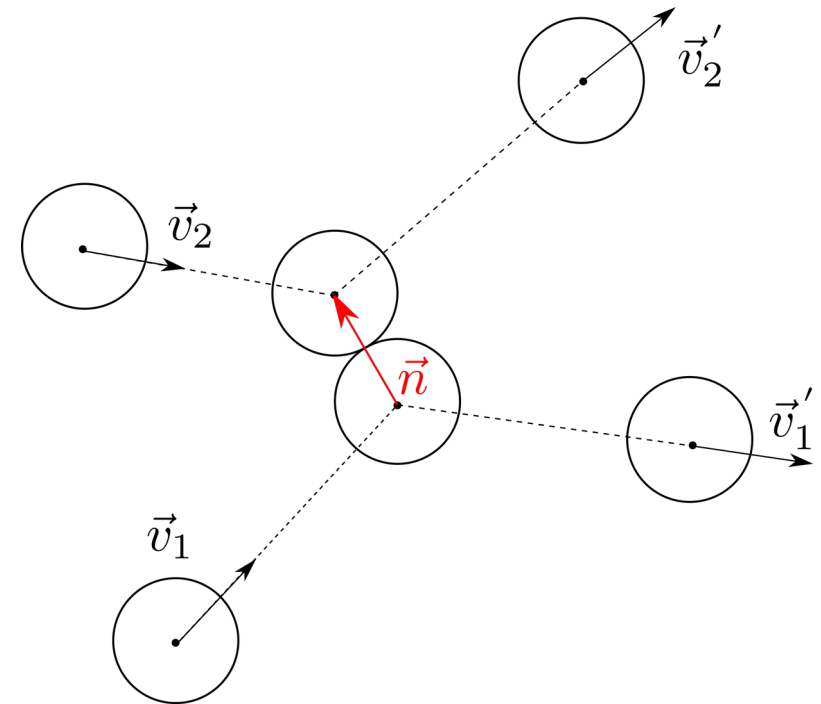
$$n_z = \cos \theta$$

$$\cos \theta = 1 - 2U_1, \quad U_1 \sim U(0, 1)$$

$$\sin \theta = \sqrt{1 - \cos^2 \theta}$$

$$\varphi = 2\pi U_2, \quad U_2 \sim U(0, 1)$$

zderzenie w układzie środka masy



- warunki brzegowe**

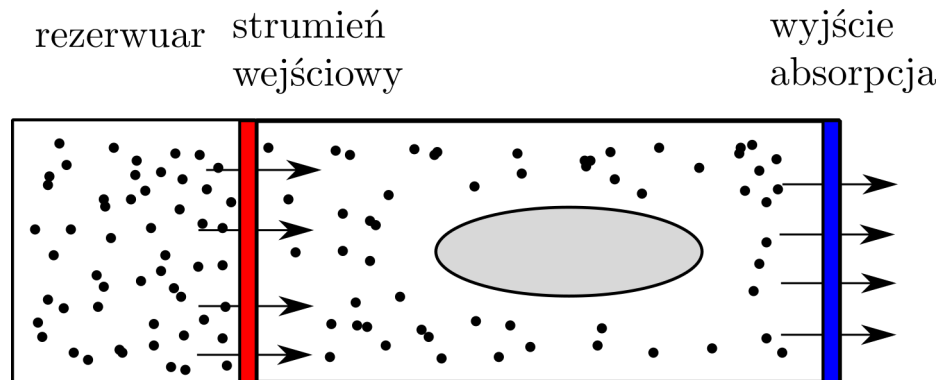
warunki odbiciowe (atomy nie mogą przenikać przez brzeg) – strumień ciepła na brzegu znika:

- zwykłe odbicie – kąt odbicia taki sam jak kąt padania,
- odbicie dyfuzyjne – cząstka zostaje odbita ale jej wektor prędkości jest losowany z rozkładu Maxwella-Boltzmannna

warunki częściowo lub całkowicie absorpcyjne

- strumień wyjściowy to ucieczka cząstek z układu – cząstki padające na brzeg są absorbowane (usuwane)
- strumień wejściowy to cząstki, które wchodzi do układu w strudze o prędkości V_{in} , cząstki padające na brzeg są absorbowane, natomiast z rezerwuaru znajdującego się za brzegiem przemieszczają się do układu cząstki o przesuniętym rozkładzie Maxwella-Boltzmannna

$$f(v) = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m(\vec{v} - \vec{v}_{in})^2}{2kT} \right]$$



Pseudokod symulacji DSMC z algorytmem NTC Bird'a

```

inicjalizacja :  $\vec{r}_i(0), \vec{v}_i(0), \quad i = 1, 2, \dots, N$ 
                IT_MAX, t=0

for (it=1; it <= IT_MAX; it++){

faza adwekcji:
  for (i=1; i<= N; i++){
     $\vec{V}_i(t + \Delta t) = \text{równanie ruchu} + \text{WB}$ 

    sortowanie cząstek - przypisanie do komórek

faza zderzeniowa:
  for (k=1; k<=Kcell ; k++) {
    for (l=1; l<=Nmaxpair(k); l++){

      losuj parę:  $(i, j) \rightarrow v_{i,j} \rightarrow p_{ij} = \frac{v_{i,j}}{v_{max}(k)}$ 

      if ( $p_{i,j} > U(0, 1)$ ) {
         $\vec{v}_i(t + \Delta t) \leftarrow \vec{v}'_i$ 
         $\vec{v}_j(t + \Delta t) \leftarrow \vec{v}'_j$ 
      }
    }
  }
  t=t+\Delta t
}

```

W DSMC stosujemy przybliżenie statystyczne dla gazu rozrzedzonego. Gdy jednak rozważamy układ, w którym gaz wypełnia tylko część dostępnej przestrzeni a reszta jest pusta (ekspansja), wyniki DSMC są wówczas nieprawdziwe.

W takim przypadku można użyć dokładniejszego modelu zderzeniowego POCA (ang. Point of Closest Approach)

- w każdej komórce obliczeniowej sprawdzamy czy cząstka zderza się z inną bazując na ich przekroju czynnym

$$\vec{r}_{i,j}(t) = \vec{r}_i(t) - \vec{r}_j(t)$$

$$\vec{v}_{i,j}(t) = \vec{v}_i(t) - \vec{v}_j(t)$$

$$\vec{r}_{i,j}(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t + \Delta t) - \vec{r}_j(t + \Delta t)$$

$$\vec{v}_{i,j}(t + \Delta t) = \vec{v}_i(t + \Delta t) - \vec{v}_j(t + \Delta t)$$

określamy parametr zderzenia

$$\chi = [\vec{r}_{ij}(t) \cdot \vec{v}_{ij}(t)] [\vec{r}_{ij}(t + \Delta t) \cdot \vec{v}_{ij}(t + \Delta t)] = \begin{cases} > 0 & \Rightarrow \text{brak zderzenia} \\ < 0 & \Rightarrow \text{możliwe zderzenie} \end{cases}$$

ponieważ przekrój czynny zależy od promienia efektywnego cząstki

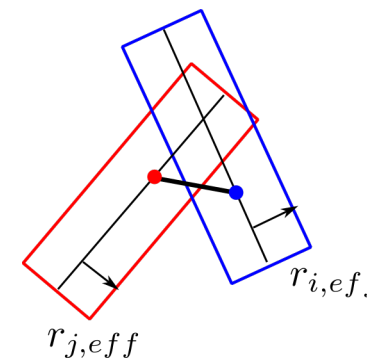
$$\sigma = 4\pi r_{eff}^2$$

$$\chi < 0 \quad \wedge \quad |\vec{r}_{ij}(t + t_c)| \leq r_{i,eff} + r_{j,eff}, \quad t_c \in [0, \Delta t]$$

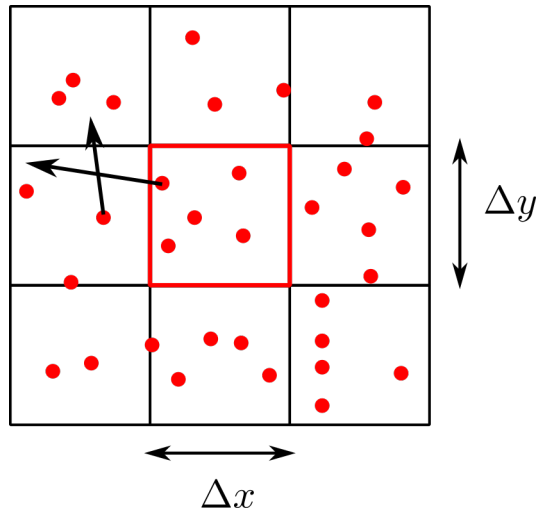
t_c wyznaczmy z warunku zderzenia

$$|\vec{r}_{ij}(t) + \vec{v}_{i,j}(t) \cdot t_c| = r_{i,eff} + r_{j,eff}$$

$$t_{c,1,2} = \frac{1}{|\vec{v}_{ij}|} \left[-(\vec{v}_{i,j} \cdot \vec{r}_{ij})^2 \pm \sqrt{(\vec{v}_{i,j} \cdot \vec{r}_{ij})^2 - |\vec{v}_{i,j}|^2 \left(|\vec{r}_{ij}|^2 - (r_{i,eff} + r_{j,eff})^2 \right)} \right]$$



- w modelu **POCA** danym kroku czasowym cząstki mogą zderzyć się tylko raz
- cząstka może się zderzyć tylko z inną cząstką z komórki macierzystej lub z komórki sąsiedniej – spełnienie tego warunku wymaga zmiany kroku czasowego



- zderzenie cząstki z cząstką z komórki sąsiedniej
- krok czasowy wyznaczamy w kolejnych chwilach globalnie, dla całego układu

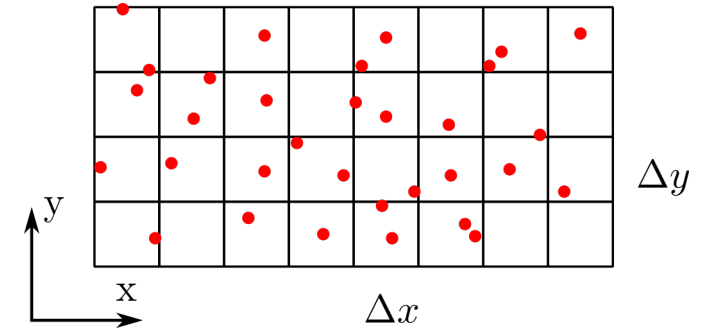
$$v_{max} = \max\{v_1, v_2, \dots, v_N\}$$

$$\Delta t = \frac{\min\{\Delta x, \Delta y\}}{v_{max}}$$

- zderzenie wykonujemy w układzie środka masy, następnie kierunek prędkości obu cząstek poddawany jest randomizacji – to prowadzi do większej losowości wyniku (chaos wymuszony na małej liczbie cząstek)

Wielkości wyznaczone w trakcie symulacji DSMC

- wielkości fizyczne wyznaczamy lokalnie – w komórkach obliczeniowych
- pojedyncza komórka powinna zawierać 20-80 cząstek, przy czym celować należy raczej w środek tego przedziału
- nie zaleca się stosowania komórek z dużą liczbą cząstek (>100) bo:
 - spowalnia to obliczenia
 - używanie dużych komórek daje małą zdolność rozdzielczą



- gęstość komórkowa
$$\rho^k(\vec{r}, t) = \frac{1}{V_{cell}} \sum_{i=1}^{N_c^{(k)}} m_i^{(k)}$$

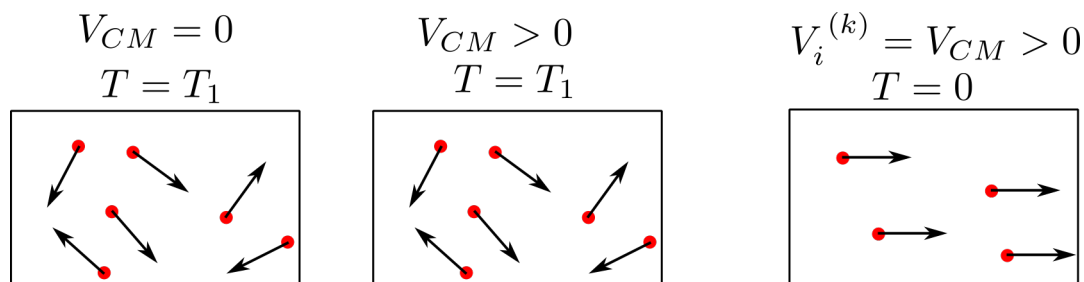
- gęstość pędu
$$\vec{p}^k(\vec{r}, t) = \frac{1}{V_{cell}} \sum_{i=1}^{N_c^{(k)}} m_i^{(k)} \vec{v}_i^{(k)}$$

- gęstość energii kinetycznej
$$\varepsilon^k(\vec{r}, t) = \frac{1}{V_{cell}} \sum_{i=1}^{N_c^{(k)}} \frac{1}{2} m_i^{(k)} \left(\vec{v}_i^{(k)} \right)^2$$

- prędkość komórki
$$\vec{v}^{(k)} = \frac{\vec{p}^{(k)}}{\rho^{(k)}}$$

- temperatura w komórce
$$E_{kin} = \frac{3}{2} kT \quad \rightarrow \quad T = \frac{2}{3k} E_{kin} = \frac{2}{3k} \left(\frac{\varepsilon^{(k)}}{\rho^{(k)}} - \frac{(\vec{v}^{(k)})^2}{2} \right)$$

Licząc temperaturę należy pamiętać o odjęciu energii środka masy, gaz w komórce może przemieszczać się w sposób kolektywny i ta część energii nie ma wpływu na temperaturę



identyczne rozkłady prędkości w układzie CM

- w każdej komórce ciśnienie wyznaczamy korzystając z **tensora ciśnienia**

$$P_{\alpha,\beta} = - \left[\sum_{i=1}^{N_c^{(k)}} m_i \left(v_{i,\alpha} - \bar{v}_{\alpha}^{(k)} \right) \left(v_{i,\beta} - \bar{v}_{\beta}^{(k)} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_c^{(k)}} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_c^{(k)}} r_{ij,\alpha} \frac{\Delta p_{i,\beta}}{\Delta t} \right]$$

$$r_{i,j,\alpha} = r_{i,\alpha} - r_{j,\alpha}$$

$$\Delta \vec{p}_i = m_i [\vec{v}_i(t + \Delta t) - \vec{v}_i(t)]$$

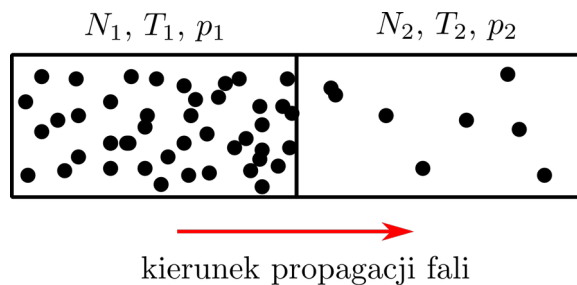
- zmiana pędu i-tej cząstki w wyniku zderzenia ze ścianką lub inną cząstką

$$p_{2D} = - \frac{1}{V_k} \frac{P_{xx} + P_{yy}}{2}$$

$$p_{3D} = - \frac{1}{V_k} \frac{P_{xx} + P_{yy} + P_{zz}}{3}$$

- ciśnienie w komórce

Przykład – propagacja fali termicznej w układzie 2D (test Soda, problem Riemana)



- rozkład Maxwella w obu podukładach

$$N_1 = 2 \cdot 10^7, \quad T_1 = 10^4$$

$$N_2 = 2 \cdot 10^6, \quad T_2 = 300$$

- porównanie wyników MC z rozwiązaniem analitycznym
- wielkości oznaczone "*" oznaczają wartości znormalizowane do ich wartości początkowych
- wyniki MC są zbliżone do dokładnych, niewielkie różnice wynikają ze zbyt małej liczby cząstek użytych w symulacji

