

Raport științific

privind implementarea proiectului PN-III-P1-1.1-PD-2021-0216, intitulat
Studiul curgerilor gazelor dense folosind un model cinetic Enskog
în perioada aprilie 2022-decembrie 2022 (etapa 1)

1 Descrierea științifică cu punerea în evidență a rezultatelor etapei anuale și gradul de realizare a obiectivelor

Raport de activitate (Etapa 1)

Pe langa obiectivele agreate, în cadrul acestei etapei a fost dezvoltat și unui model pe baza de particule pentru curgeri în coordonate sferice[2], acesta fiind necesar pentru validare modelelor Enskog lattice Boltzmann bazate pe formalismul tetradelor ce vor fi dezvoltate în cadrul Etapei 2, Obiectivului O3. Astfel, în cadrul etapei 2 a proiectului ne vom putea concentra pe dezvoltarea modelelor de tip Lattice Boltzmann pentru gaze dense pe spații curbe, dat fiind faptul ca metoda de validare a fost deja dezvoltată. Detalii despre aceasta activitate premergătoare etapelor următoare pot fi găsite în Sec. 1.1. Aceste rezultate au fost prezentate la conferinta internationala RGD22 32nd International Symposium on Rarefied Gas Dynamics[3].

Obiectivul O1. Model Enskog lattice Boltzmann cu diferente finite (FDLB) in coordonate carteziane

În cadrul acestui obiectiv se urmărește implementarea în cadrul modelelor de tip lattice Boltzmann cu diferențe finite a extensiei termenului de coliziune pentru a putea trata gaze dense. Aceasta în contextul în care ecuația Boltzmann devine invalidă odată ce dimensiunea moleculelor de gaz este comparabilă cu distanța

intermoleculară medie. O descriere mai bună este oferită de operatorul de coliziune Enskog, care ia în considerare dimensiunea finită a moleculelor de gaz. Această extensie implică coliziuni non-locale, precum și o creștere a frecvenței coliziunilor, făcându-l costisitor de rezolvat din punct de vedere computațional. O aproximare a operatorului de coliziune Enskog, denumit operatorul de coliziune Enskog simplificat, este utilizată în această lucrare pentru a dezvolta un model Lattice Boltzmann bazat pe cuadratură pentru gaze dense monoatomice neideale. Termenul de coliziune Shakhov este implementat pentru a ajusta numărul Prandtl. Acest model cinetic se dovedește a fi capabil să abordeze problemele de curgere de neechilibru ale gazelor dense, și anume propagarea undelor sonore și a undelor de soc. Rezultatele sunt comparate sistematic cu rezultatele metodei cu particule de rezolvare a ecuației Enskog care este mai precisă, dar intensiva din punct de vedere computațional. Se arată că modelul propus are o precizie bună pentru densitatea mică până la moderată a fluidului (definită ca raportul dintre diametrul molecular și drumul liber mijlociu) și, datorită eficienței în ceea ce privește timpul de calcul, este potrivite pentru aplicații practice. Aceste rezultate sunt cuprinse într-o lucrare aflată în revizie[1] și au fost prezentate în cadrul conferinței internaționale TIM22 Physics Conference[4]. Au fost abordate și probleme marginite de pereți, prin implementarea condițiilor pe frontiera de tip reflexie speculară și reflexie difuză, aceste rezultate fiind incluse într-o lucrare care este în pregătire[5].

Activitatea A1.1 Implementarea operatorului de coliziune Enskog simplificat în modelele lattice Boltzmann cu diferite finite. În cadrul acestei activități, termenul de coliziune Enskog a fost implementat în concordanță cu aproximația necesară pentru a putea dezvolta un model numeric eficient din punct de vedere computațional. Efectiv, ecuația ce trebuie rezolvată are în componența niște termeni sursă noi care vin din dezvoltarea în serie a termenului de coliziune Enskog, prin dezvoltarea în serii Taylor a funcției de distribuție și a valorii de contact a funcției de corelație a perechilor ce intra în coliziune. Aceasta abordare reprezintă o aproximație a termenului de coliziune și e de așteptat ca aceasta aproximație să fie validă doar pentru valori moderate ale densității fluidului. Din punct de vedere computațional, în cadrul modelelor lattice Boltzmann existente a fost incluse parte Enskog sub forma acestor noi termeni sursă. Mai multe detalii pot fi găsite

în Sec. 1.2.

Activitatea A1.2. Testarea condițiilor pe frontiera adecvate. În cadrul acestei activități am implementat condiții pe frontiera de tip reflexie speculară și reflexie difuză. Aceste condiții pe frontieră au fost implementate atât în model numeric nou propus precum și în metoda cu particule care a fost folosită drept benchmark. Rezultatele preliminare pot fi găsite în Sec. 1.3.

Activitatea A1.3 Aplicarea modelelor Enskog lattice Boltzmann cu diferențe finite unor probleme de curgere a gazelor dense în regim izoterm și neizoterm Curgerea la echilibru ale gazelor dense, și anume propagarea undelor sonore și a undelor de șoc, au fost abordate în această activitate. Rezultatele au fost comparate sistematic cu rezultatele metodei cu particule de rezolvare a ecuației Enskog care este mai precisă, dar intensiva din punct de vedere computațional. Modelul a fost testat pe o plajă largă a parametrilor de intrare, atât pentru undele longitudinale, cât și pentru undele de șoc. În cazul undelor longitudinale comparația a fost făcută în raport cu o soluție analitică, iar în cazul undelor de șoc a fost folosită metoda cu particule pentru benchmarking. Modelul propus se arată că are o precizie bună pentru densitatea mică până la moderată a fluidului (definită ca raportul dintre diametrul molecular și drumul liber mijlociu) și, datorită eficienței în ceea ce privește timpul de calcul, este potrivită pentru aplicații practice. Detalii pot fi găsite în Sec. 1.2.

Activitatea A1.4. Validarea modelelor Enskog lattice Boltzmann cu diferențe finite folosind o metoda bazată pe particule. Precum a fost detaliat în paragraful precedent, metoda cu particule a fost folosită pentru validarea modelului propus. Comparatii ale rezultatelor obținute folosind metoda cu particule și modelul propus de noi pot fi găsite în Sec. 1.2 și Sec. 1.3.

1.1 O schemă de particule ponderate pentru rezolvarea ecuației Enskog-Vlasov în geometria sferică

Ecuția Enskog-Vlasov s-a dovedit a avea succes în capturarea comportamentului complex al fluidelor supuse unei schimbări de fază. Cu toate acestea, soluția sa numerică este solicitantă din punct de vedere computațional, iar acest lucru a limitat studiile la fluxuri plane unidimensionale și bidimensionale. În această lucrare, este dezvoltată o schemă de particule ponderate pentru soluția numerică a ecuației Enskog-Vlasov în geometrie simetrică sferică. Se arată cum schemele cu particule ponderate concepute pentru ecuația Boltzmann pot fi extinse pentru a face față structurii non-locale a integralei de coliziune Enskog și se determină o expresie compactă a câmpului de forță mediu folosind shell theorem. Ca o aplicație, ratele de creștere a nano-picăturilor/bulelor într-un vapor/lichid metastabil omogen sunt evaluate într-o gamă largă de rapoarte de suprasaturare care nu au fost posibile până acum din cauza costului de calcul ridicat cerut de abordări alternative. Schema propusă mărește în mod semnificativ gama de probleme care pot fi investigate prin ecuația Enskog-Vlasov și este o piatră de temelie spre simularea curgerilor lichid-vapori tridimensionale generale.

1.1.1 Ecuația Enskog-Vlasov în coordonate sferice

Prin utilizarea coordonatelor sferice și presupunând simetria sferică, funcția de distribuție a unei particule se simplifică la $f(r, v_r, v_t, t)$, r fiind coordonata spațială radială, v_r și v_t reprezintă componenta radială și tangențială a vitezei. Ecuația de evoluție a distribuției particulelor arată astfel:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_r \frac{\partial f}{\partial r} + \left(\frac{\mathcal{F}_r[n]}{m} + \frac{v_t^2}{r} \right) \frac{\partial f}{\partial v_r} - \frac{v_r v_t}{r} \frac{\partial f}{\partial v_t} = \mathcal{C}_E[f], \quad (1)$$

unde $\mathcal{F}_r[n]$ este componenta radială a câmpului de forță autoconsistent generată de partea atractivă a potențialului de interacțiune, care depinde de câmpul de densitate numerică $n(r, t)$ și $\mathcal{C}_E[f]$ este integrala de coliziune pentru sfere tari (parantezele pătrate sunt folosite pentru a evidenția faptul că aceste mărimi sunt funcționale ale argumentelor lor).

Algorithm 1: Sub-pasul de free-streaming.

Variables: N_p : Numar particule computationale
 w_i : ponderea particulei i
 \tilde{w}_j : ponderea celulei j

for $i = 1$ **to** N_p **do**
 Evaluarea câmpului de forță;
 Calcularea valorii componentelor vitezei la jumatea pasului de timp;
 Calculați noua poziție radială;
 Rotirea componentelor vitezei înapoi pe axa radială;
 Calculați componentele vitezei aferente pasului complet de timp;
 Identificați celula j ocupată de particula i ;
 if ($w_i > \tilde{w}_j$) **then**
 Modificați ponderea particulei i în \tilde{w}_j ;
 Creați $[w_i/\tilde{w}_j] - 1$ copii cu ponderea \tilde{w}_j ;
 Creați o particula cu ponderea \tilde{w}_j cu probabilitate:
 $w_i/\tilde{w}_j - [w_i/\tilde{w}_j]$;
 else
 Eliminați particula i ;
 Creați o particulă cu ponderea \tilde{w}_j cu probabilitate: w_i/\tilde{w}_j ;
 end
end

1.1.2 Metoda numerica

Funcția de distribuție este actualizată printr-o metodă în etape fracționare bazată pe împărțirea în timp a operatorului de evoluție în două sub-pași, și anume streaming liber și coliziune. În sub-etapa de free-streaming, coliziunile dintre particule sunt neglijate și funcția de distribuție este avansată de la t la $t + \Delta t$. Sub-etapa de streaming este rezumată de algoritmul 1.

Odată ce o particulă este selectată, un vector \hat{k} este desenat uniform din sfera unității, iar partenerul de coliziune este ales la întâmplare din celula corespunzătoare învelișului radial îndreptat de acesta. În general, acest vector unitar identifică un punct în afara axei radiale (axa z) și, prin urmare, componentele de viteză ale particulei selectate trebuie să fie rotite pentru a aduce componenta z a acesteia pe axa radială care trece prin acel punct. rotațiile sunt efectuate folosind matricea de rotație asociată unghiurilor Euler. Acest proces este descris în Fig.1, precum și

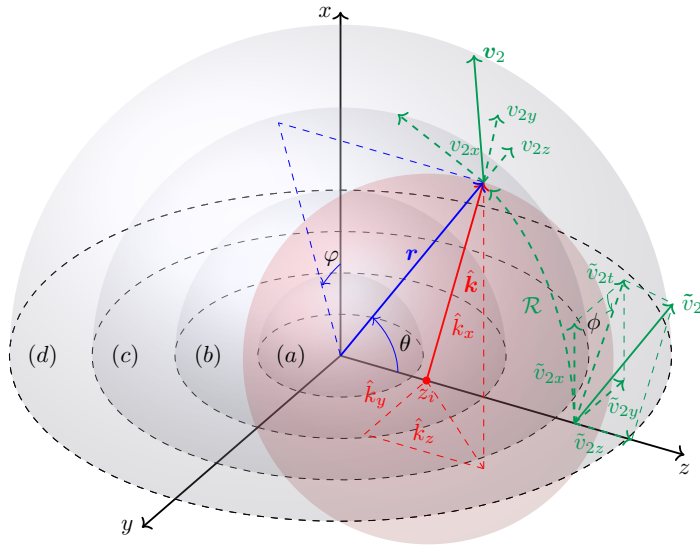


Figura 1: Selectarea perechilor de coliziune. Direcția radială este identificată cu axa z . O particulă la z_i este selectată pentru ciocnire din învelișul sferic (b). Un vector unitar aleatoriu $\hat{\mathbf{k}}$ este desenat pentru a găsi partenerul de coliziune (sfera roșie a unității definește setul de direcții posibile). Partenerul de coliziune este apoi selectat la întâmplare în învelișul sferic (d) îndreptat de $\hat{\mathbf{k}}$, cu coordonata radială r . Componentele vitezei partenerului de coliziune $\tilde{\mathbf{v}}_2$, originare de pe axa radială (axa z), sunt rotite până la punctul final al lui $\hat{\mathbf{k}}$ folosind matricea de rotație \mathcal{R} rezultând \mathbf{v}_2 . Ulterior, se efectuează ciocnirea elastică, iar componentele vitezelor post-coliziune sunt rotite înapoi pe axa radială.

printr-un sumar al algoritmului în Algorithm 2.

1.1.3 Rezultate

Validare Trei cazuri de testare pentru a furniza validarea codului au fost utilizate. În primul rând, este luată în considerare o simulare a unei picături care crește în vaporii ei metastabili pentru a evalua cât de mult sunt afectate proprietățile de conservare ale schemei numerice. Ulterior, am testat cu succes predicția tensiunii superficiale a fluidului folosind ecuația Young-Laplace, precum și a dimensiunii critice a nucleelor picăturilor din vaporii lor în funcție de raportul de suprasaturație.

Cresterea picaturilor in gaz metastabil si a bulelor in lichid metastabil În această secțiune, prezentăm rezultatele creșterii picăturilor (colapsului) în vaporii suprarăciți (supraîncălziți) (Figura 2) și creșterea bulelor în lichid supraîncălzit

Algorithm 2: Sub-pasul de coliziune.

Variables: \bar{N}_c : Numarul de coliziuni total (reale+false)

Evaluati \bar{N}_c ;

for $i = 1$ **to** \bar{N}_c **do**

 Selectati o particulă pentru coliziune;

 Generati un vector unitar \hat{k} uniform distribuit pe sfera;

 Selectati la întâmplare partenerul de coliziune în celula indicată de \hat{k} ;

 Rotiti viteza partenerului de coliziune ;

 Evaluati produsul scalar $v_{rel} \cdot \hat{k}$;

if $(v_{rel} \cdot \hat{k}) > 0$ **and** *coliziunea e reala* **then**

 Actualizare viteze post-coliziune;

 Rotiti viteza partenerului de coliziune;

end

end

(Figura 3) pentru un set reprezentativ de temperaturi ale sistemului, adică $T_{in}/T_c = \{0.663, 0.729, 0.795, 0.861\}$. In cazul cresterii bulelor in lichid metastabil am facut si comparatia cu limita Rayleigh-Plesset unde am obtinut rezultate aproape perfecte pentru rata de creste a razei bulelor atunci cand presiunea lichidul se apropie de presiunea de pe curba spinodala.

1.2 Modele Lattice Boltzmann bazate pe cuadraturi pentru curgeri de gaze dense[1]

1.2.1 Ecuatia Enskog simplificata

Ecuatia Enskog care descrie evoluția unui sistem compus din molecule sferice rigide a fost propusă de autorul său în 1922. Spre deosebire de Boltzmann în ecuația sa, unde se presupune că moleculele sunt particule punctiforme și ciocnirile sunt locale, Enskog a luat în considerare volumul. a particulelor fluide (adică, molecule) care reduce spațiul liber de mișcare disponibil fiecărei particule, ceea ce are ca rezultat un număr crescut de ciocniri. În plus, ciocnirile între particule sunt nelocale, deoarece pozițiile celor două molecule care se ciocnesc sunt la un

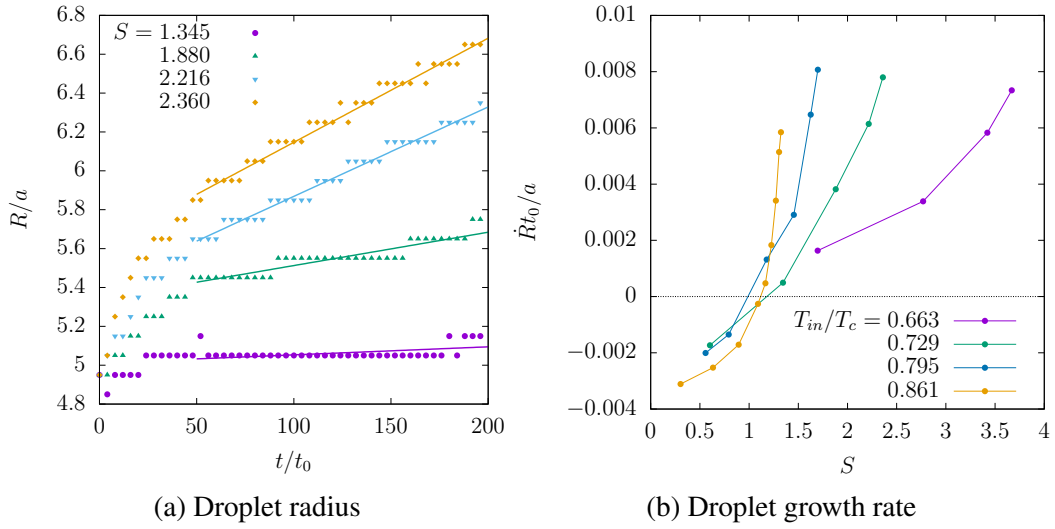


Figura 2: (a) Curbe tipice de creștere a picăturilor la $T_{in}/T_c = 0,729$ pentru diferite rapoarte de suprarăcire S , împreună cu liniile de potrivire liniară corespunzătoare. (b) Rata medie de creștere a picăturilor \dot{R} în raport cu raportul de suprarăcire $S = p(T, n_v)/p_{eq}(T)$ pentru diferite temperaturi.

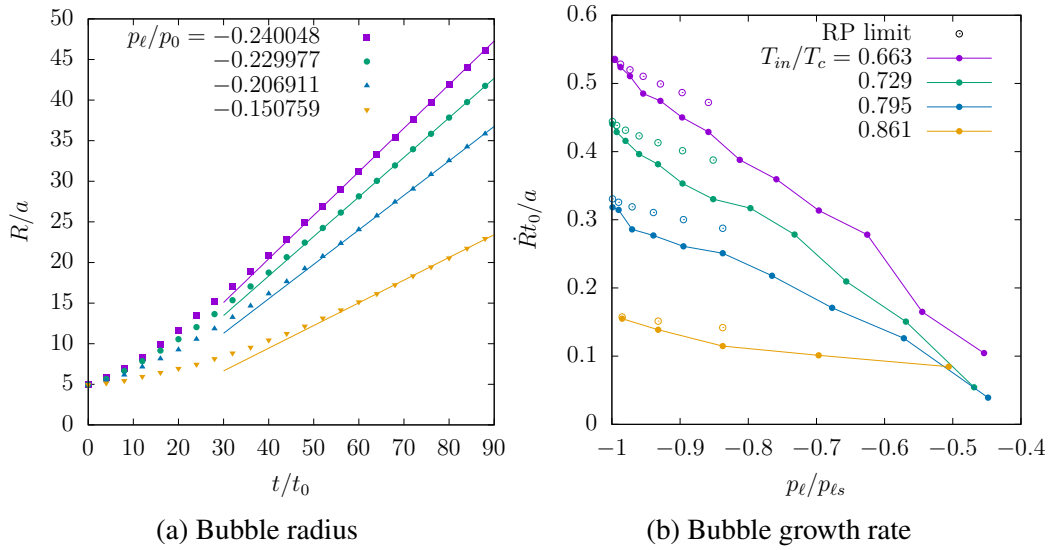


Figura 3: (a) Curbe tipice de creștere a bulelor la $T_{in}/T_c = 0,663$ pentru diferite presiuni ale lichidului p_l , împreună cu liniile de potrivire liniară corespunzătoare. (b) Rata medie de creștere a bulelor \dot{R} în raport cu presiunea lichidului înconjurător normalizată la valoarea sa spinodală p_{ls} .

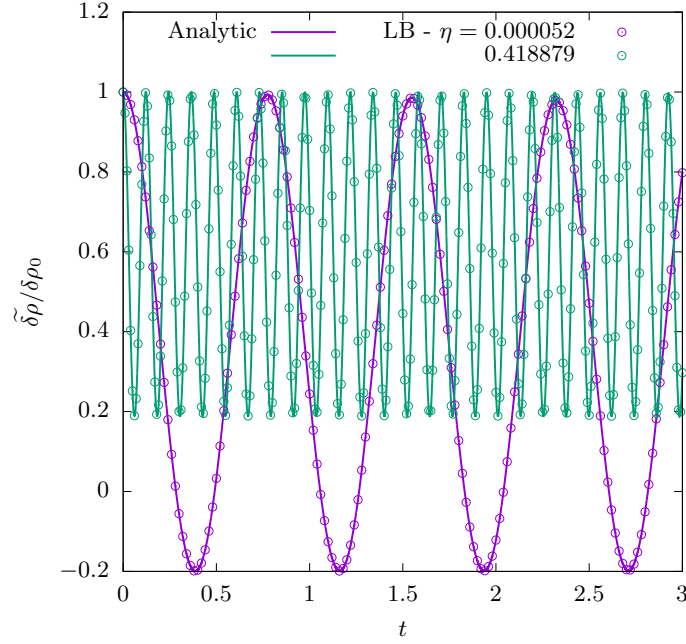


Figura 4: Evoluția amplitudinii densității normalizate $\delta\rho(t)/\delta\rho_0$ obținută numeric cu $N_x = 100$ și $Q_x = 8$, comparativ cu predicția analitică din Eq. (15), pentru două valori ale densității reduse η .

diametru molecular unul de celălalt. Ecuația Enskog poate fi scrisă ca[7]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f = J_E \quad (2)$$

unde m este masa particulei, \mathbf{F} este forța externă a corpului și $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ este funcția de distribuție a unei singure particule, dând la momentul t numărul de particule de impuls \mathbf{p} situate în volumul spațiului de fază unitar centrat în punctul al cărui vector de poziție este \mathbf{x} . Partea dreaptă este dată de operatorul de coliziune Enskog J_E care arată:

$$J_E = \sigma^2 \int \left\{ \chi \left(\mathbf{x} + \frac{\sigma}{2} \mathbf{k} \right) f(\mathbf{x}, \mathbf{p}^*) f(\mathbf{x} + \sigma \mathbf{k}, \mathbf{p}_1^*) - \chi \left(\mathbf{x} - \frac{\sigma}{2} \mathbf{k} \right) f(\mathbf{x}, \mathbf{p}) f(\mathbf{x} - \sigma \mathbf{k}, \mathbf{p}_1) \right\} (\mathbf{p}_r \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{p}_1 \quad (3)$$

unde σ este diametrul molecular. $\mathbf{p}_r = \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}$ este impulsul relativ și \mathbf{k} este vectorul unitar care dă poziția relativă a celor două particule care se ciocnesc. În

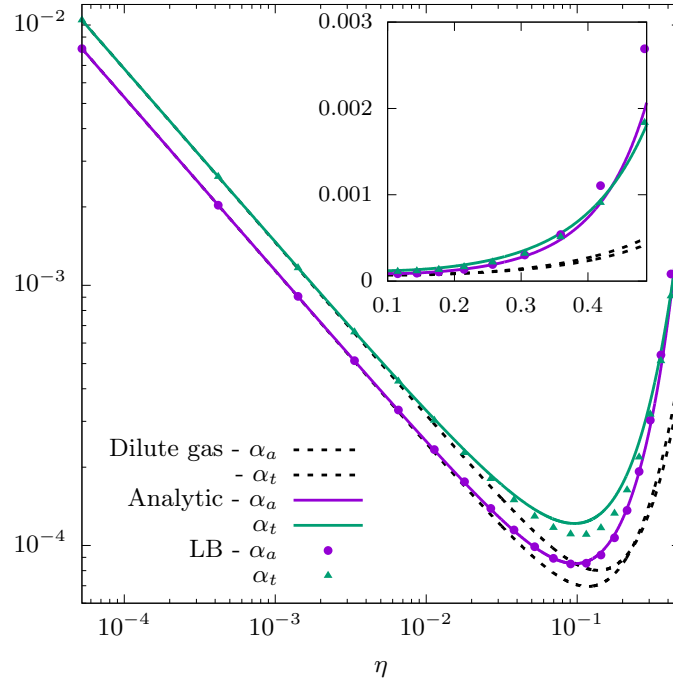


Figura 5: Dependența modurilor α_a acustice și termice α_t față de densitatea redusă η . Punctele denotă valorile numerice obținute folosind modelul de față și sunt ajustate folosind Eq. (15) cu α_a , α_t și c_s ca parametri liberi. Predicțiile analitice din Eq. (14) pentru modurile α_a și α_t sunt reprezentate sub formă de linii continue, în timp ce limita corespunzătoare a gazului diluat este afișată sub formă de linii întrerupte. Valorile α_a și α_t în limita gazului diluat sunt evaluate la o valoare a vâscozității dată de pentru η corespunzătoare. Inset: aceleași valori, dar pe o scară liniară. Se poate observa că eroarea relativă în cazul modului acustic α_a urcă în jur de 35% la cea mai mare valoare a densității reduse considerată ($\eta \approx 0.49$).

ecuația de mai sus, dependența funcției de distribuție de timpul t a fost eliminată pentru concizie. Superscriptul $*$ se referă la impulsurile post-coliziune.

Valoarea de contact a funcției de corelare a perechii χ ține cont de efectul diametrului molecular σ asupra frecvenței de coliziune. În teoria standard Enskog (SET), χ este aproximat cu valoarea funcției de corelare a perechii la punctul de contact a două particule care se ciocnesc într-un fluid care este în echilibru uniform. O expresie aproximativă, dar exactă pentru χ_{SET} , și anume:

$$\chi_{\text{SET}}[n] = \frac{1}{nb} \left(\frac{P^{hs}}{nk_B T} - 1 \right) = \frac{1}{2} \frac{2 - \eta}{(1 - \eta)^3}, \quad (4)$$

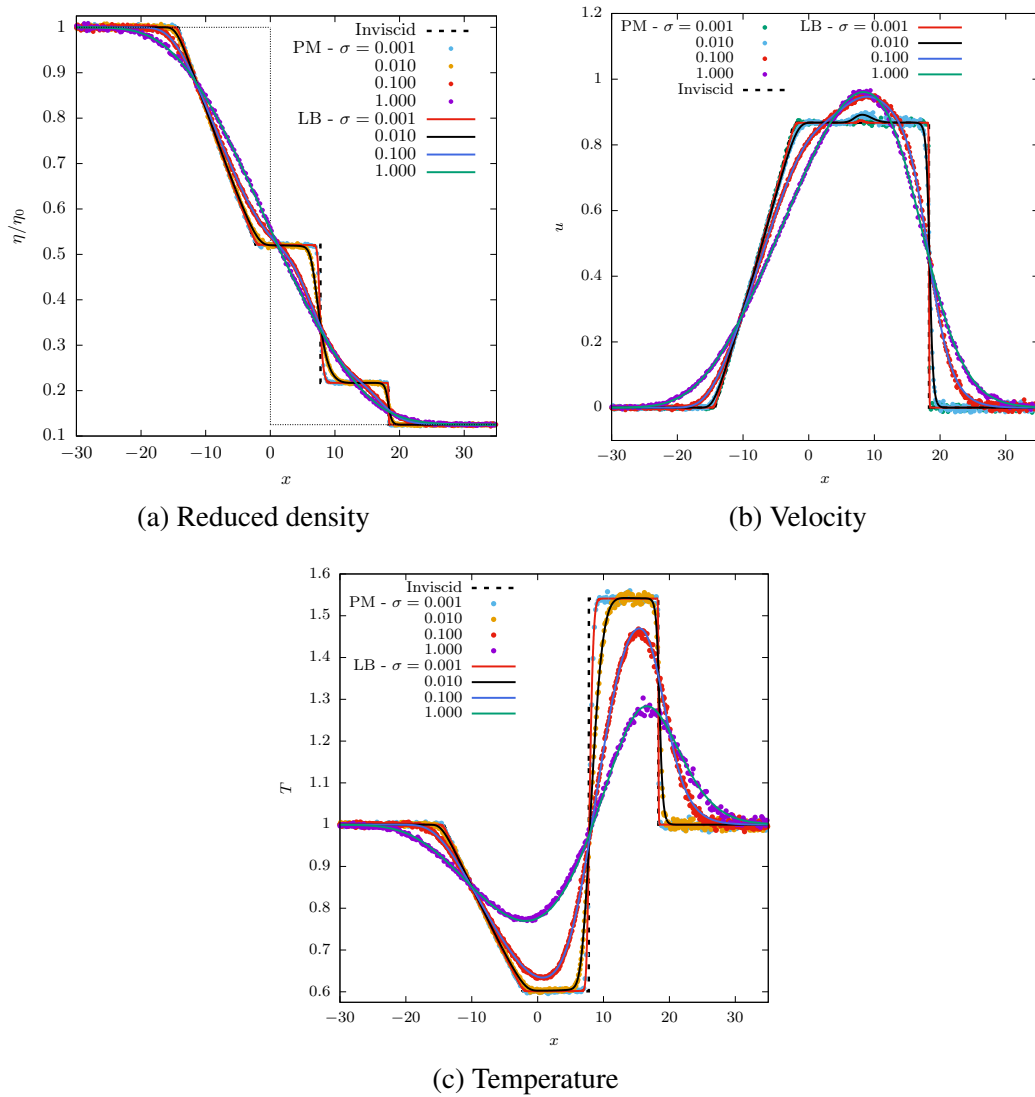


Figura 6: Propagarea undelor de șoc. (a) Densitate, (b) viteză și (c) profile de temperatură pentru densitate redusă constantă $\eta_i = 0.05$ ($E_l = 0.4825$) dar cu diferite valori ale diametrului molecular (implicit diverse valori ale timpului de relaxare τ) obținut folosind modelul LB (linii continue) și metoda particulelor PM (puncte). Linia întreruptă reprezintă limita inviscida, în timp ce în cazul (a) linia întreruptă subțire arată și condiția inițială. Un acord excelent poate fi observat pentru toate regimurile de curgere.

se obține din ecuația de stare a fluidului sferei dure propusă de Carnahan și Star-

ling:

$$p^{hs} = nk_B T \frac{1 + \eta + \eta^2 - \eta^3}{(1 - \eta)^3} \quad (5)$$

unde n este densitatea numărului de particule, $\eta = b\rho/4$ este densitatea redusă de particule, cu $b = 2\pi\sigma^3/3m$, p^{hs} este presiunea unui sistem de sfere dure și k_B este constanta Boltzmann și T este temperatura. Parantezele pătrate din Eq. (4) indică o dependență funcțională.

În teoria Enskog revizuită (modificată), χ este dat de valoarea funcției de corelare a perechii la punctul de contact al celor două particule care se ciocnesc într-un fluid aflat în echilibru neuniform. O bună aproximare a funcției de distribuție radială se obține în urma prescripției Fischer-Methfessel (FM). În această abordare, valoarea reală a densității la punctul de contact este înlocuită cu $\bar{n}(\mathbf{x})$, care reprezintă valoarea câmpului de densitate mediat pe un volum sferic de rază σ centrat în punctul \mathbf{x} . În consecință, valoarea de contact a funcției de corelare perechi este dată de:

$$\chi_{\text{RET-FM}} \left(n \left(\mathbf{x} - \frac{\sigma}{2} \hat{\mathbf{k}} \right) \right) = \chi_{\text{SET}} \left(\bar{n} \left(\mathbf{x} - \frac{\sigma}{2} \hat{\mathbf{k}} \right) \right), \quad (6a)$$

unde

$$\bar{n}(\mathbf{x}) = \frac{3}{4\pi\sigma^3} \int_{\mathbb{R}^3} n(\mathbf{x}') w(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x}'; \quad w(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \begin{cases} 1, & \|\mathbf{x}' - \mathbf{x}\| < \sigma, \\ 0, & \|\mathbf{x}' - \mathbf{x}\| > \sigma. \end{cases} \quad (6b)$$

Operatorul de coliziune Enskog din Eq. (3) poate fi privit ca o generalizare a operatorului de coliziune Boltzmann la particule care au întindere spațială. Luând limita diametrului molecular σ la zero, funcția de corelare a perechii trece la unitate ($\chi \rightarrow 1$) și se obține operatorul de coliziune Boltzmann deoarece termenul σ^2 provine din împrăștiere. secțiune transversală.

Presupunând că valoarea de contact a funcției de corelare a perechii χ (dependența funcțională a scăzut din motive de concizie) și a funcțiilor de distribuție $\{f^* \equiv f(\mathbf{x}, \mathbf{p}^*), f_1^* \equiv f(\mathbf{x} + \sigma\mathbf{k}, \mathbf{p}_1^*), f \equiv f(\mathbf{x}, \mathbf{p}), f_1 \equiv f(\mathbf{x} - \sigma\mathbf{k}, \mathbf{p}_1)\}$ sunt funcții netede, se pot aproxima aceste funcții în integrala de coliziune Enskog J_E printr-o serie Taylor aproape de punctul \mathbf{x} . Termenii rezultați până la gradientii de ordinul

întâi $J_E \approx J_0 + J_1$ sunt[7]:

$$J_0(f, f) = \chi \int (f^* f_1^* - f f_1) \sigma^2(\mathbf{p}_r \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{p}_1 \quad (7)$$

$$J_1(f, f) = \chi \sigma \int \mathbf{k} (f^* \nabla f_1^* - f \nabla f_1) \sigma^2(\mathbf{p}_r \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{p}_1 \\ + \frac{\sigma}{2} \int \mathbf{k} \nabla \chi (f^* f_1^* - f f_1) \sigma^2(\mathbf{p}_r \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathbf{p}_1 \quad (8)$$

unde toate funcțiile f^*, f_1^*, f, f_1 și χ sunt evaluate în punctul \mathbf{x} .

Termenul de coliziune $J_0(f, f)$ este termenul de coliziune obișnuit al ecuației Boltzmann înmulțit cu χ și este tratat ca atare, prin aplicarea aproximării uzuale a timpului de relaxare. În această lucrare vom folosi termenul de coliziune Shakhov.

Al doilea termen al lui J_E , și anume $J_1(f, f)$, poate fi aproximat prin înlocuirea funcțiilor de distribuție (f^*, f_1^*, f, f_1) cu funcțiile de distribuție de echilibru corespunzătoare. Folosind $f_{MB}^* f_{MB,1}^* = f_{MB} f_{MB,1}$ și integrând peste \mathbf{k} și \mathbf{p}_1 , se obține[7]:

$$J_1(f, f) \approx J_1(f_{MB}, f_{MB}) = \\ -b\rho\chi f_{MB} \left\{ \xi \left[\nabla \ln(\rho^2 \chi T) + \frac{3}{5} \left(\zeta^2 - \frac{5}{2} \right) \nabla \ln T \right] \right. \\ \left. + \frac{2}{5} \left[2\zeta\zeta : \nabla \mathbf{u} + \left(\zeta^2 - \frac{5}{2} \right) \nabla \cdot \mathbf{u} \right] \right\} \quad (9)$$

unde $\zeta = \xi/\sqrt{2RT}$. Cu aproximările de mai sus și luând în considerare nicio forță externă, ecuația Enskog Eq. (2) devine:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \nabla_{\mathbf{x}} f = -\frac{1}{\tau} (f - f_S) + J_1(f_{MB}, f_{MB}) \quad (10)$$

Mărimile macroscopice sunt evaluate ca momente ale funcției de distribuție:

$$\begin{pmatrix} n \\ \rho \mathbf{u} \\ \frac{3}{2} n k_B T \end{pmatrix} = \int d^3 p \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{p} \\ \frac{\xi^2}{2m} \end{pmatrix} f \quad (11)$$

unde $\rho = mn$.

Eq. (10) este rezolvata cu ajutorul modelelor cu diferențe finite Lattice Bolt-

Metoda→	LB			PM	
σ	Q_x	N_x	t_{LB}	t_{PM}	t_{PM}/t_{LB}
0.001	8	1600	62s	186h	$\approx 1.1 \times 10^4$
0.01	8	800	32s	23h	$\approx 2.5 \times 10^3$
0.1	20	640	71s	7.25h	≈ 370
1	200	160	176s	5.8h	≈ 120

Tabela 1: Comparație de timp de calcul pentru simulările prezentate în Fig. 6. După cum era de așteptat, raportul t_{PM}/t_{LB} crește pentru un timp de relaxare mai mic τ , deoarece la o densitate constantă redusă η timpul de relaxare este proporțională cu diametrul molecular σ .

zmann. Scheme numerice folosite sunt: pentru evoluția în timp folosim schema numerică Runge-Kutta de ordinul 3, pentru advecție folosim schema numerică de tip WENO-5 de ordinul 5 și pentru derivatele parțiale ale marimilor macroscopice care apar în Eq. (9) folosim schema centrală de ordinul 6.

1.2.2 Unde longitudinale

Studiul undelor longitudinale este un subiect important în mecanica fluidelor[6]. Propagarea undelor longitudinale induce fluctuații ale proprietăților macroscopice ale fluidului, ale căror amplitudini se diminuează din cauza disipării vâscoase și termice. Unda sonoră se propagă ca undă longitudinală prin compresia și relaxarea elementelor fluide învecinate. Pentru simplitate, vom lua în considerare mici perturbații de densitate și presiune în jurul valorilor constante ρ_0 și P_0 într-un fluid omogen de-a lungul axei y și z . Unda se propagă de-a lungul axei x cu o viteză mică $u(x,t)$:

$$\rho(x,t) = \rho_0[1 + \delta\rho(x,t)], \quad P(x,t) = P_0[1 + \delta P(x,t)] \quad (12)$$

unde perturbațiile $\delta\rho$ și δP sunt de același ordin de mărime ca u .

Expresia pentru viteza sunetului în fluid este dată de:

$$c_s^2 = \partial_\rho P + \frac{P_0}{\rho_0^2 c_V} \partial_T P \quad (13)$$

Fără a parcurge rezolvarea ecuațiilor, listam aici rezultatele finale pentru coeficienții de amortizare α_a, α_s și α_t :

$$\begin{aligned}\alpha_t &= \frac{\gamma \mu k^2}{\text{Pr} \rho_0 c_s^2} \partial_\rho P, & \alpha_s &= k c_s \\ \alpha_a &= \frac{k^2 \mu}{2 \rho_0} \left[\frac{4}{3} + \frac{\mu_V}{\mu} + \frac{\gamma c_s^2}{\text{Pr}} (1 - \partial_\rho P) \right]\end{aligned}\quad (14)$$

Soluția completă pentru evoluția în timp a amplitudinii densității este:

$$\delta \rho(t) \approx \delta \rho_0 \left[e^{\alpha_t t} + (e^{-\alpha_a t} \cos(k c_s t) - e^{-\alpha_t t}) \frac{\partial_\rho P}{c_s^2} \right] \quad (15)$$

Această soluție analitică este folosită pentru a valida modelul LB propus. În Fig. 4 am reprezentat grafic evoluția în timp a amplitudinii densității și putem observa o excelentă suprapunere între rezultatele numerice și cele analitice. Mai mult, pentru fiecare valoare a densității reduse η considerată am evaluat valorile coeficienților de atenuare executând un fit al valorilor numerice cu Eq. 15 cu coeficienții de atenuare ca parametri liberi. Rezultatele fitării sunt prezentate în Fig. 5 unde putem observa că pe măsura ce valoarea densității reduse crește, rezultatele numerice deviază de cele analitice, acesta oferind un interval de acuratețe al metodei propuse.

1.2.3 Unde de soc

Problema tubului de șoc 1D Sod a fost propusă de G. A. Sod în 1978. Considerăm o membrană situată la $x = x_0$ care separă două domenii semi-infinite. Proprietățile fluidului sunt omogene în fiecare domeniu, în timp ce viteza este zero peste tot. La momentul inițial, proprietățile fluidului sunt:

$$\begin{pmatrix} \eta_L \\ T_L \\ u_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \eta_i \\ 1.0 \\ 0.0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \eta_R \\ T_R \\ u_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \eta_i/8 \\ 1.0 \\ 0.0 \end{pmatrix} \quad (16)$$

unde η_i este valoarea inițială a densității reduse în domeniul stâng.

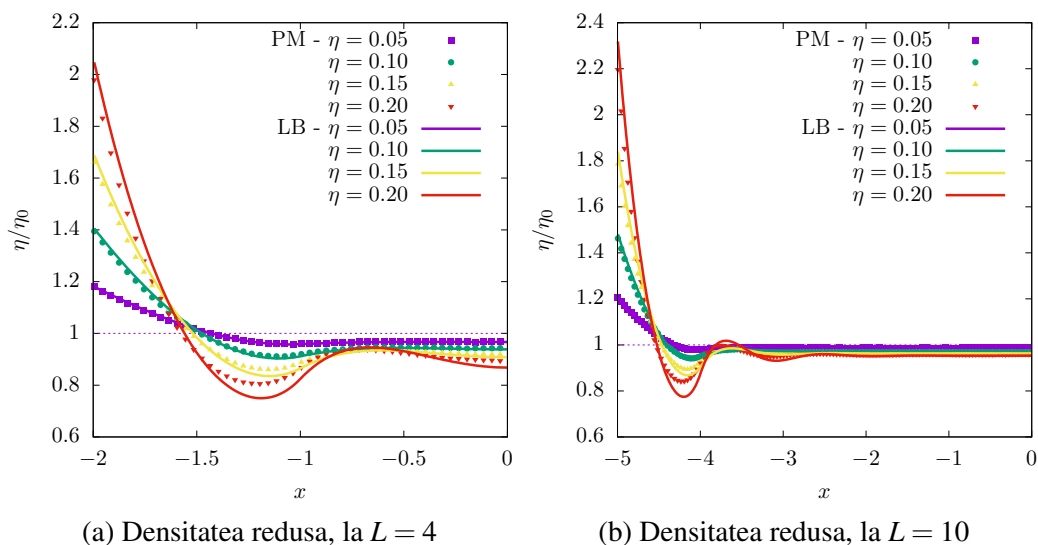


Figura 7: Densitatea redusa a unui gaz dens între doi pereti plan paraleli, cu condiții pe frontiera de tip reflexie speculara. (a) Sistem cu distanta dintre pereti egala cu $L = 4$, (b) distanta dintre pereti egala cu $L = 10$. Diametru particulelor este de $\sigma = 1$.

În regimul inviscid pot fi obținute soluții numerice ale ecuațiilor Euler în tandem cu condițiile Rankine-Hugoniot pentru frontul șocului. În acest caz a fost obținuta o suprapunere aproape perfectă între rezultatele modelului propus și cele obținute analitic din ecuațiile de conservare. Mai departe, pentru valori intermediare a vâscozității și implicit ale timpului de relaxare am comparat rezultatele obținute cu modelul LB propus cu cele obținute folosind metoda cu particule PM, rezultatele sunt regăsite în Fig. 6. Rezultatele obținute sunt în acord deplin cu rezultatele metodei cu particule la valori relativ mici ale densității reduse, însă cu un timp de calcul mult mai mic, după cum poate fi observat în tabelul 1, unde am comparat timpii de execuție ai celor doua metode.

1.3 Modele Lattice Boltzmann bazate pe cuadraturi pentru curgeri de gaze dense între pereti plan paraleli[5]

Calculul profilului de densitate într-un gaz dens de sfere tari aflat în echilibru lângă un perete specular a fost selectată ca problemă de testare pentru condițiile pe frontiera de tip reflexie difuză. Această problemă este una clasică în fizica

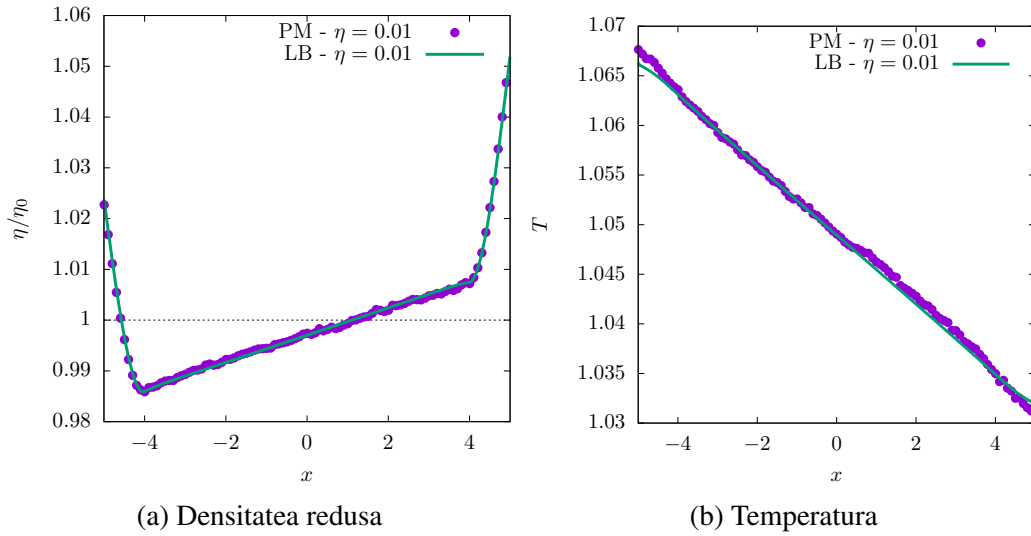


Figura 8: Densitatea redusa a unui gaz dens între doi pereti plan paraleli, cu condiții pe frontiera de tip reflexie difuza. (a) Densitatea redusa și (b) temperatura, într-un sistem cu distanța dintre pereti egală cu $L = 10$ și diametru particulelor de $\sigma = 1$.

statistica. Rezultate staționare pentru un gaz dens între doi pereti plan paraleli aflate la distanța $L \in \{4, 10\}$ unul față de celălalt sunt prezentate în Fig. 7, unde diametrul molecular este egal cu unitatea $\sigma = 1$. Pentru valori mici ale densității reduse am obținut o suprapunere aproape perfectă între cele două metode, pe când în cazul valorilor mari se poate vedea clar o diferență între metode, indicând că aproximația pentru termenul de coliziune Enskog nu mai e bună la acele valori.

În cazul condițiilor pe frontiera de tip reflexie difuză am ales pentru testare transferul termic între doi pereti plan paraleli aflate la distanța de $L = 10$ și diametrul molecular de $\sigma = 1$. Suprapunere excelentă poate fi observată între cele două metode, precum poate fi observat în Figura 8.

2 Un sumar al progresului (livrabile realizate, indicatori de rezultat, diseminarea rezultatelor, justificare diferențe, dacă e cazul)

Angajat	Realizat	Grad de îndeplinire
Model numeric Enskog lattice Boltzmann.	Model numeric Enskog lattice Boltzmann.	Îndeplinit.
Un articol ISI	Două articole ISI în curs de evaluare[1, 2].	Rezultat livrat parțial.
O prezentare la o conferință internațională	Două prezentări la conferințe internaționale[3, 4].	Rezultat livrat.

3 Rezumat executiv - PN-III-P1-1.1-PD-2021-0216

În cadrul acestei etape se urmărește implementarea în cadrul modelelor de tip lattice Boltzmann cu diferențe finite a extensiei termenului de coliziune pentru a putea trata gaze dense în coordonate Carteziene.

O aproximare a operatorului de coliziune Enskog, denumit operatorul de coliziune Enskog simplificat, este utilizată în această lucrare pentru a dezvolta un model Lattice Boltzmann bazat pe cuadratură pentru gaze dense monoatomice neideale. Termenul de coliziune Shakhov este implementat pentru a ajusta numărul Prandtl. Acest model cinetic se dovedește a fi capabil să abordeze problemele de curgere de neechilibru ale gazelor dense, și anume propagarea undelor sonore și a undelor de șoc. Rezultatele sunt comparate sistematic cu rezultatele metodei cu particule de rezolvare a ecuației Enskog care este mai precisă, dar intensiva din punct de vedere computațional. Se arată că modelul propus are o precizie bună pentru densitatea mică până la moderată a fluidului (definită ca raportul dintre diametrul molecular și drumul liber mijlociu) și, datorită eficienței în ceea ce privește timpul de calcul, este potrivite pentru aplicații practice. Aceste rezultate sunt cuprinse într-o lucrare aflată în revizie și au fost prezentate în cadrul conferinței internaționale TIM22 Physics Conference.

Au fost abordate și probleme marginite de pereți, prin implementarea condițiilor pe frontiera de tip reflexie speculară și reflexie difuză, aceste rezultate fiind incluse într-o lucrare care este în pregătire.

În același timp, în cadrul acestei etape a fost dezvoltat și un model pe baza de particule pentruurgeri în coordonate sferice, ce va fi folosit în cadrul etapei a doua pentru a valida modele Lattice Boltzmann dezvoltate în cadrul proiectului. Aceste rezultate sunt cuprinse într-o lucrare aflată în revizie și au fost prezentat la conferința 32nd International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Seoul, Coreea de Sud.

Director Proiect,
Busuioc Sergiu

Bibliografie

- [1] S. Busuioc, *Quadrature-based Lattice Boltzmann model for non-equilibrium dense gas flows*, Physics of Fluids, articol în revizie.
- [2] Busuioc, Sergiu and Frezzotti, Aldo and Gibelli, Livio, *A Weighted Particle Scheme for Enskog-Vlasov Equation to Simulate Spherical Nano-Droplets/Bubbles*, Journal of Computational Physics, articol în revizie.
- [3] Busuioc, Sergiu and Frezzotti, Aldo and Gibelli, Livio, *A Weighted Particle Scheme for Enskog-Vlasov Equation to Simulate Spherical Nano-Droplets/Bubbles*, RGD22 (32nd International Symposium on Rarefied Gas Dynamics), Seoul, Coreea de Sud, 4-8 Iulie 2022
- [4] S. Busuioc, *Quadrature based Lattice Boltzmann scheme for dense gases using the simplified Enskog collision operator*, TIM22 Physics Conference, Timisoara , Romania, 23-25 Noiembrie 2022
- [5] S. Busuioc, *Bounded dense gas flows using a lattice Boltzmann model*, articol în pregătire.
- [6] T. E. Faber, *Fluid dynamics for physicists*, (Cambridge university press, 1995)
- [7] G. M. Kremer, *An introduction to the Boltzmann equation and transport processes in gases*, (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2010).