

基于 PIC 模拟的中性气体多元多相模型及其数值求解

屈马林, 王甲富, 刘佳鑫

(空军工程大学 理学院, 陕西 西安 710051)

摘要:针对 PIC 模拟程序中中性粒子状态的描述问题,建立了等离子体中多元多相中性气体的流体模型,研究了与其相关的边界条件的处理方法,采用二阶精度的 Beam - Warming 差分格式进行数值方法,成功地应用于气体绝热点源扩散过程的数值运算,所得结果与理论取得很好的一致。该模型将用于扩充 PIC 粒子模拟程序对中性粒子状态的描述。

关键词:多元多相;PIC 粒子模拟;Beam - Warming 数值方法

中图分类号: O53 **文献标识码:** A **文章编号:** 1009 - 3516(2007)04 - 0084 - 04

随着计算机技术的发展和各种数值方法的深入研究,计算机粒子模拟技术得到越来越多的应用。目前国际上常用的 PIC 模拟程序,如 MAGIC、KARAT、XOOPIC 等^[1-3],虽然引入了蒙特卡洛方法扩充了带电粒子与中性粒子之间的碰撞^[4-6],但对中性粒子的运动状态及分布变化尚未涉及。事实上,在很多实际问题中,中性粒子的影响不容忽视。本文针对这一实际问题,提出并建立了多元多相中性气体的数值模型,详细研究了与其相关的边界条件的处理方法。

1 多元多相中性气体模型

在非完全电离等离子体中,“元”和“相”均是用来描述中性粒子的状态的,其中“元”是同类粒子的总称,可用粒子的质量区分;“相”是同样内能状态粒子的总称,可用粒子所处的定态能量区分。以下标 α 表示处于不同元相的中性粒子状态,令 m_α, ρ_α 和 n_α 分别表示 α 类粒子的分子质量、质量密度和粒子数密度, $\vec{v}_\alpha, P_\alpha, T_\alpha, \varepsilon_\alpha$ 分别表示该类流体质元的宏观速度矢量、压强、温度和单位质量内能等,则连续性方程、动量输运方程及能量守恒方程具有形式

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\alpha \vec{v}_\alpha) = m_\alpha \psi_\alpha \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\rho_\alpha \vec{v}_\alpha)}{\partial t} = m_\alpha \psi_\alpha - \nabla P_\alpha - \rho_\alpha (\vec{v}_\alpha \cdot \nabla \vec{v}_\alpha) + n_\alpha \vec{F}_{\alpha\beta} \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\frac{v_\alpha^2}{2} + \varepsilon_\alpha \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho_\alpha \vec{v}_\alpha \left(\frac{v_\alpha^2}{2} + Q_\alpha \right) \right] - \nabla \cdot (\rho_\alpha \vec{v}_\alpha) + \rho_\alpha q_\alpha + \nabla \cdot (\kappa \nabla T_\alpha) + \vec{v}_\alpha \cdot \nabla \cdot \vec{\tau} + Q_{\alpha\beta} \left(Q_\alpha - \frac{v_\alpha^2}{2} \right) m_\alpha \psi_\alpha \quad (3)$$

其中 $\gamma, R, K, \kappa, \mu$ 分别为气体的比热容比、普适气体常数、波尔兹曼常数、热传导系数及动力粘滞系数; ψ_α 为由于各种碰撞所引起的单位时间单位体积 α 类粒子产生(湮灭)的粒子数; $Q_\alpha = \varepsilon_\alpha + \frac{P_\alpha}{\rho_\alpha}, \varepsilon_\alpha$ 为单位质量流体的内能; $\vec{F}_{\alpha\beta}, Q_{\alpha\beta}$ 分别为 α 类中性粒子与 β 类中性粒子相互碰撞时, α 类中性粒子所受到的内摩擦力及热量,分别表示为 $\vec{F}_{\alpha\beta} = -\frac{m_\alpha m_\beta}{m_\alpha + m_\beta} \gamma_{\alpha\beta} (\vec{v}_\alpha - \vec{v}_\beta), Q_{\alpha\beta} = -\frac{3}{2} \sum_\beta \gamma_{\alpha\beta} \frac{2m_\alpha m_\beta}{(m_\alpha + m_\beta)^2} n_\alpha (T_\alpha - T_\beta)$, 其中 $\gamma_{\alpha\beta}$ 为两粒子的

收稿日期:2006-11-02

基金项目:陕西省自然科学基金资助项目(2006A16)

作者简介:屈马林(1956-),男,陕西合阳人,教授,主要从事激光技术、红外技术及等离子体技术的研究;.

件, $p_{j_1+1,k}^n = p_{j_1,k}^n$, $\Delta P_{j_1+1,k} = \Delta P_{j_1,k}$, 于是 $\Delta U_{4j_1+1,k}^n = L_1^n \Delta U_{1j_1+1,k}^n + L_2^n \Delta U_{2j_1+1,k}^n + L_3^n \Delta U_{3j_1+1,k}^n + L_4^n \Delta U_{4j_1+1,k}^n$, $L_1^n = \frac{1}{2(U_{1j_1+1,k}^n)^2} [(U_{2j_1+1,k}^n)^2 + (U_{3j_1+1,k}^n)^2]$, $L_2^n = -\frac{U_{2j_1+1,k}^n}{U_{1j_1+1,k}^n}$, $L_3^n = -\frac{U_{3j_1+1,k}^n}{U_{1j_1+1,k}^n}$, $L_4^n = 1$ 。得边界点上所满足的迭代方程为

$$\Delta U_{j_1,k}^n = \begin{bmatrix} \frac{M_{\text{mol}}(\gamma-1)}{RT_w} L_1^n & \frac{M_{\text{mol}}(\gamma-1)}{RT_w} L_2^n & \frac{M_{\text{mol}}(\gamma-1)}{RT_w} L_3^n & \frac{M_{\text{mol}}(\gamma-1)}{RT_w} L_4^n \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ L_1^n & L_2^n & L_3^n & L_4^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta U_{1j_1+1,k}^n \\ \Delta U_{2j_1+1,k}^n \\ \Delta U_{3j_1+1,k}^n \\ \Delta U_{4j_1+1,k}^n \end{bmatrix} \quad (8)$$

式中, M_{mol} 为该气体的摩尔质量。其它边界条件,处理方法类似,此处不一一列举。

4 气体绝热扩散过程的数值模拟

4.1 计算条件

考虑点波源的绝热扩散过程,设由惰性气体 Ne 电离所形成的绝热等离子体区域为 $(x,y|0 \leq x \leq 0.05, 0 \leq y \leq 0.05)\text{m}$, 建立空间 2 维网格 $(j,k|0 \leq j \leq 48, 0 \leq k \leq 48)$, 设所有边界均为绝热壁, 并设区域最初除点波源所在结点质量密度为 $\rho_{024,24} = 30.5 \times 10^{-2} \text{kg/m}^3$ 之外, 其余各点密度均匀, 且 $\rho_{0j,k} = 30 \times 10^{-2} \text{kg/m}^3$ 。由于密度梯度的存在, 系统将发生密度扩散现象。取计算时间步长 $\Delta t = 4 \times 10^{-6} \text{s}$, 初始时刻系统温度 $T_{0,k} = 273.15 \text{K}$, 沿 x,y 方向的宏观速度分量分别为 $u_{0j,k} = 0, v_{0j,k} = 0$ 。

4.2 模拟结果

在计算机上运行程序表明, 当 $t > 1.6 \times 10^{-3} \text{s}$ 时, 扩散过程已趋结束, 描述系统宏观性质的各物理量的数值基本达到稳定, 系统达到平衡状态。

图 1 是点源所在结点质量密度的时间变化曲线, 图 2、图 3、图 4 分别为在 $t = 4.8 \times 10^{-5} \text{s}, t = 1.6 \times 10^{-4} \text{s}$ 时刻以及 $t > 1.6 \times 10^{-3} \text{s}$ 系统达到平衡态后质量密度的空间分布图象。图 1 表明, 扩散点的密度最初急剧下降, 随后渐趋平缓, 最后达到平衡态。这是因为气体扩散的速度与密度梯度成正比, 初始时刻密度梯度很大, 扩散速度也大; 随着过程的进行, 密度梯度逐渐减小, 扩散速度也随之减小, 直至达到平衡状态, 扩散过程结束。这一现象与有关理论一致。

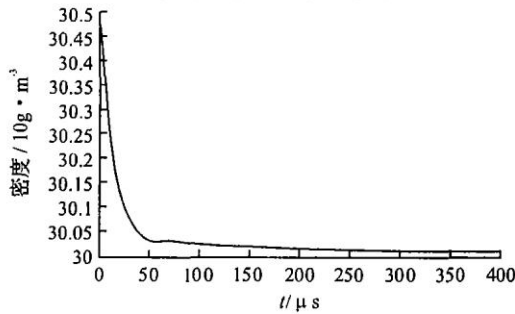


图 1 点源处质量密度的变化曲线

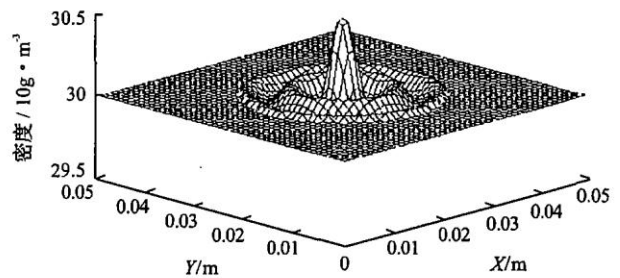


图 2 $t = 4.8 \times 10^{-5} \text{s}$ 时的质量密度空间分布

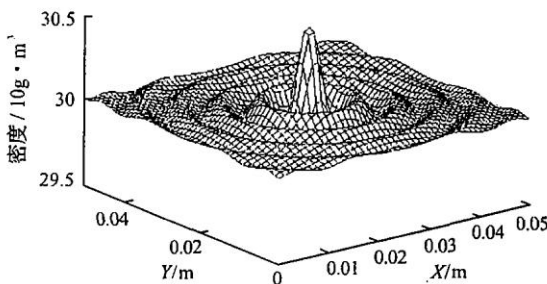


图 3 $t = 1.6 \times 10^{-4} \text{s}$ 时的质量密度空间分布

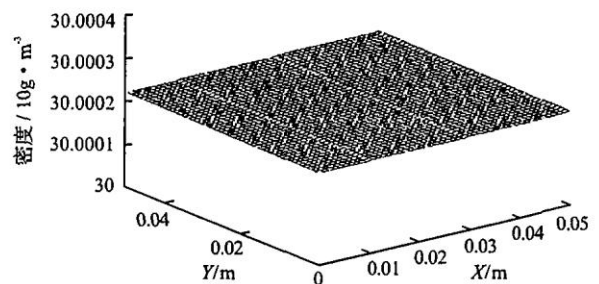


图 4 平衡时质量密度的空间分布

图2、图3揭示了过程进行中空间各点的密度变化的规律。结果表明,点源所在处的质量并非均匀地向周围迁移,空间各点的质量密度呈现出周期性的变化,说明扩散过程与气体中的波动现象密切相关。由诊断知,密度波的波长 $\lambda = 0.0085\text{ m}$,周期为 $T = 2.4 \times 10^{-5}\text{ s}$,则其传播速度为 $v = 354.17\text{ m/s}$,与理论计算该气体声波的传播速度一致。

图4表明扩散过程最终达到了平衡态,过程的进行朝着平衡态方向发展是孤立系统内部一切物理过程所遵守的基本规律,与理论结果完全一致。计算表明,过程的弛豫时间为 $\tau = 1.6 \times 10^{-3}\text{ s}$ 。

5 结论

在 PIC 模拟程序的基础上扩充了中性气体多元多相流体模型,使程序能够对等离子体中不同能级原子的密度、能量、压强及温度场分布的变化规律进行更全面地描述,扩大了程序的应用范围。采用该数值模型对点波源的绝热密度扩散过程进行模拟,所得结果和理论取得很好的一致,模拟结果揭示了气体中由于密度不均匀所导致的扩散过程与波动过程紧密联系,密度迁移以波动形式进行,波的速度与该气体中的声波速度相同。

参考文献:

- [1] Verboncoeur J P. Particle Simulation of Plasmas: Review and Advances [J]. IOP Plasma Physics and Controlled Fusion, 2005, 47:231 - 260.
- [2] 邵福球. 等离子体半导模拟[M]. 北京:科学出版社,2002.
- [3] Birdsall C K, Langdon A B. Plasma Physics Via Computer Simulation[N]. New York: M C Graw - Hiu Book Company, 1985.
- [4] 王甲富, 屈马林. 含导体边界的等离子体空间二维静电场 PIC 算法[J]. 空军工程大学学报:自然科学版, 2006, 7(5): 60 - 62.
- [5] Qu M L, Wang B K, Wang F. A Two Dimensional Fast CIC Algorithm for Soling Electrostatic Field Equations With Bounded Plasma Space[A]//Proc Int Symp Test Meas. Shenzhen: Internationed Academic Publisher, 2003, 2: 1757 - 1760.
- [6] Zhang G L, Qu M L. A Fast Electrostatic CIC Field Solver in Plasma Space With Complicated Conductive and Dielectric Structures[C]//Proc Int Symp Test Meas, 2003, 2: 1653 - 1656.
- [7] B. E. 戈兰特. 等离子体物理基础[M]. 北京:原子能出版社, 1983.
- [8] 苏铭德, 黄素逸. 计算流体力学基础[M]. 北京:清华大学出版社, 1997.

(编辑:田新华,徐楠楠)

A Two - dimensional Model Based on PIC Simulation for Multi - element and Multi - phase Neutral Gas and its Numerical Solution

QU Ma - lin, WANG Jia - fu, LIU Jia - xin

(The Science Institute, Air Force Engineering University, Xi'an 710051, China)

Abstract: To deal with the lack of detailed depiction of neutral gas in PIC simulation, the paper presents a two - dimensional model of multi - element and multi - phase neutral gas to depict explicitly the fields of neutral gas in plasma region. Numerical methods of solving the proposed equations as well as various boundary conditions are put forward. The above model and method are applied to the simulation of adiabatic gas diffusion. The results obtained well accord with the theory. The model can be used in improving PIC simulation programs.

Key words: multi - element and multi - phase; PIC simulation; beam - warning