

01; 03

© 1991

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗРЕЖЕННОГО ГАЗА  
СИСТЕМОЙ МАЛОГО ЧИСЛА ЧАСТИЦ

С.Ф. Гимельшейн, В.Я. Рудяк

Современное развитие аэрокосмической техники, вакуумной технологии и микроэлектроники требует расчетов различных физических процессов, происходящих в разреженном газе. Разреженным называется газ точечных молекул, в котором пространственно-временные масштабы порядка эффективного радиуса взаимодействия молекул и времени их взаимодействия неразличимы. Кроме того, учитываются лишь парные взаимодействия молекул, которые считаются статистически независимыми перед столкновением. Последнее свойство выполняется лишь для системы бесконечного числа молекул. Вместе с тем на практике для моделирования разреженного газа используется небольшое число молекул  $N$ . В настоящее время наибольшее распространение в динамике разреженного газа получил метод прямого статистического моделирования (ПСМ) [1], принципиальным моментом которого является моделирование пространственно однородной релаксации газа.

Как показано в [2-4], при практической реализации метода ПСМ в моделируемой системе из-за конечности числа молекул быстро нарастают динамические корреляции. В результате такого моделирования получается решение, отличное от решения уравнения Больцмана, которое описывает динамику разреженного газа. Решение этой задачи и является целью настоящей заметки. Для простоты здесь рассмотрен лишь случай пространственно однородного газа.

Основной причиной нарастания корреляций в системе конечного числа частиц являются повторные столкновения [3-5]. В реальном разреженном газе повторные столкновения отсутствуют. Молекулы  $i$  и  $j$ , столкнувшиеся в данный момент времени, далее взаимодействуют с окружающими их молекулами (со средой) и никогда друг с другом. Последовательности парных столкновений, приводящие к повторным соударениям молекул, имеют место лишь в плотном газе [6]. Задача моделирования разреженного газа будет поэтому практически решена, если удастся исключить из расчетов повторные столкновения. В природе такое исключение происходит за счет взаимодействия рассматриваемой группы молекул со средой - разреженным газом. Именно этот процесс необходимо смоделировать. Для этого рассмотрим две системы молекул. Первая, состоящая из  $j = 1, 2, \dots, N$  молекул (эти молекулы обозначаются латинскими буквами), моделирует эволюция разреженного газа, а вторая, состо-

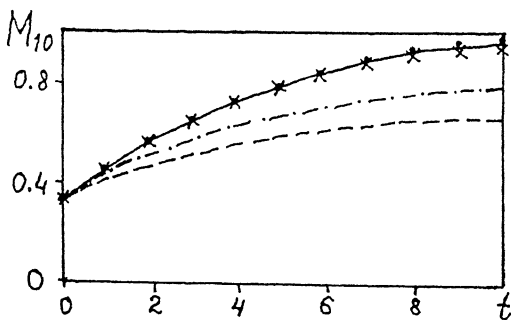


Рис. 1.

ящая из  $\alpha = N + 1, \dots, T$  молекул (эти молекулы обозначаются греческими буквами), где  $T \gg N$  - взаимодействие молекулы со средой. На первом этапе решение эволюционной задачи строится стандартно методом ПСМ. Определяется число столкновений в системе и сталкивающиеся пары. Положим, в результате произошло столкновение  $ij$ , то есть столкновение молекулы  $i$  с молекулой  $j$ , затем столкновения  $ik$ ,  $jm$ , и снова  $ij$ . Последнее столкновение и является повторным. Чтобы его устранить, используем „среду“, т.е. фоновые молекулы. Для этого тем или иным образом, случайно, определяем партнеров для  $i$ -й и  $j$ -й молекул в рассматриваемом повторном столкновении. Скажем, для  $i$ -й молекулы выпадает партнер  $\alpha$ , а для  $j$ -й -  $\beta$ . Производим эти столкновения. Таким образом, вместо повторного столкновения  $ij$  мы имеем два столкновения  $i\alpha$  и  $i\beta$ . Мы сняли повторные столкновения с помощью такого же процесса, который происходит в природе естественно. Далее расчет продолжается обычным образом до тех пор, пока снова не случится повторного столкновения  $ij$ . Здесь опять следует организовать столкновения молекул  $i$  и  $j$  с фоновыми и т.д.

Конечно, решение задачи будет зависеть от того, как выбран фон, каковы его параметры. В общем случае здесь нельзя дать единого рецепта, выбор параметров среды, естественно, должен определяться характером конкретной физической задачи. В эволюционных задачах функцию распределения фоновых молекул почти всегда можно выбрать локально-максвелловской.

Проверка предлагаемой модифицированной схемы метода прямого статистического моделирования проводилась на точном ВКВ решении пространственно однородного уравнения Больцмана. Сравнение с точным ВКВ решением уравнения Больцмана показало, что при  $N = 10^3$  результаты решения задачи обычным методом ПСМ отличаются от точных значений функции распределения не более чем на 3% вплоть до трех тепловых скоростей. Моменты функции распределения  $M_\alpha$  ( $\alpha = 2, 4, \dots$ ) совпадают с теоретическими зна-

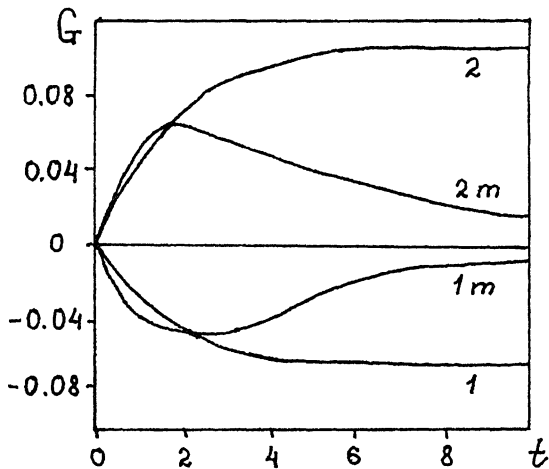


Рис. 2.

числениями с еще большей точностью [7]. При малых значениях  $N$  и при сохранении общего объема выборки  $L \cdot N = 10^6$  ( $L$  — число  $N$ -частичных траекторий) результаты расчетов по обычной схеме существенно отличаются от точного решения. На рис. 1 точному решению соответствует сплошная линия, а результатам расчетов стандартным методом ПСМ — штриховая ( $N=5$ ) и пунктирная ( $N=10$ ) линии ( $t_* = t/\tau$ ,  $\tau$  — время свободного пробега молекул).

При проведении расчетов по предлагаемому модифицированному методу варьировалось число основных молекул  $N$ . Число фоновых молекул  $T \gg N$ , а их функция распределения выбиралась максвелловской. Результаты расчетов эволюции момента  $M_{10}$  по модифицированному методу также представлены на рис. 1. Здесь темные точки соответствуют  $N=5$ , а крестики —  $N=10$ . Ошибки в решении задачи и при  $N=5$ , и при  $N=10$  не превышают 3%, т.е. при использовании модифицированного метода ПСМ уже на 5 частицах мы получаем практически такую же точность, какая достигается при использовании обычного метода на  $10^3$  частицах. Для более низких моментов точность еще выше. Естественно, с ростом  $N$  точность решения задачи и по модифицированной схеме будет увеличиваться.

Столь неплохие результаты моделирования по модифицированной схеме объясняются подавлением корреляций, обусловленных конечным числом частиц в системе. В обычных схемах эти корреляции при малых  $N$  быстро нарастают. На рис. 2 представлено временное поведение корреляционной функции  $G = g(v_1, v_2) / f_1(v_1) \cdot f_1(v_2)$  для разных скоростных групп молекул и  $N=10$ . Здесь  $g = f_2 - f_1 f_1$

$f_2, f_1$  - соответственно двух- и одночастичная функции распределения.  $V_i = \sigma_i / \sqrt{2RT}$ ,  $\sigma_i$  - скорость молекулы  $i$ ,  $T$  - температура газа. Кривая 1 соответствует скоростям (1.6, 2.8), 2 - (0.8, 2.4). При использовании модифицированного метода возникающие в системе  $N$  частиц корреляции подавляются. На рис. 2 расчеты по модифицированной схеме обозначены буквой  $m$ , так что, например, кривая  $Im$  соответствует функции  $\zeta(V_1=1.6, V_2=2.8)$  для  $N=10$  и т.д.

В заключение отметим, что предложенная схема устранения динамических корреляций может быть использована для моделирования разреженного газа и в других методах, в частности, в методе молекулярной динамики.

### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Б е р д Г.А. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир. 1981. 320 с.
- [2] Р у д я к В.Я. Труды IX Всес. конф. по динамике разреженного газа. Свердловск, 1988. Т. 1. С. 14-22.
- [3] Р у д я к В.Я. // Изв. АН СССР. МЖГ. 1989. № 6. С. 154-160.
- [4] R u d y a k V. Proc. 17th Int. Symp. RGD. Weinheim: VCH, 1991. P. 140-145.
- [5] G i m e l s h e i n S.F., I v a n o v M.S., R o g a s i n s k y S.V. Proc. 17th Int. Symp. RGD. Weinheim: VCH, 1991. P. 717-726.
- [6] Р у д я к В.Я. Статистическая теория диссипативных процессов в газах и жидкостях. Новосибирск: Наука, 1987. 270 с.
- [7] И в а н о в М.С., Р у д я к В.Я. // Мат. моделирование. 1989. Т. 1. № 7. С. 93-99.

Поступило в Редакцию  
13 сентября 1991 г.