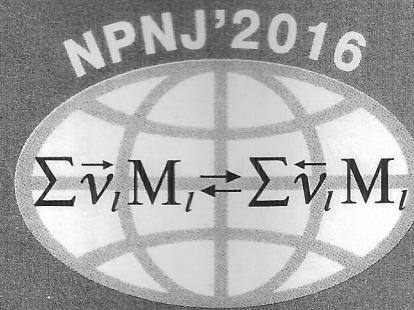




Посвящается памяти У.Г. Пирумова

МАТЕРИАЛЫ XI МЕЖДУНАРОДНОЙ  
КОНФЕРЕНЦИИ ПО НЕРАВНОВЕСНЫМ ПРОЦЕССАМ  
В СОПЛАХ И СТРУЯХ



25–31 мая 2016 г.  
Алушта, Крым

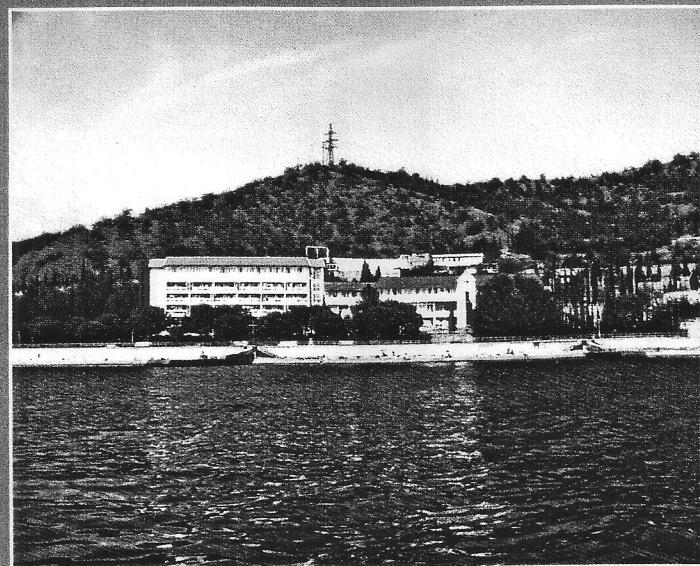


Рис. 2. Ураектории частич-

в прежних выводов для гауссовской смеси. В ряд новых задач о движении газа в гранулированном веществе входит то, что введение отдельных частиц в газ неизменяет его свойства. Это отличие от большинства общепринятых моделей, в которых отсутствует взаимодействие между частицами и газом. Важное отличие от задач трения, разрушения, обработки материалов и т. д. заключается в том, что в задачах о движении газа в гранулированном веществе неизменяется значение ключевого параметра шероховатости: вместе с тем, что в гранулированном веществе шероховатость от среднего уровня берется дисперсия твердых частиц, а не относительного этого уровня [7].

$$x_2, \dots, x_n) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{R_n(v)}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x - \sigma(v))^T R_n^{-1}(v)(x - \sigma(v))^T\right) dF(v)$$

$\varrho_n(v)$  — векторное математическое ожидание и корреляционная матрица процесса в заданных точках,  $|R_n(v)|$  — определитель корреляционной матрицы,  $\psi(v)$  — неубывающая на  $[0; \infty)$  весовая функция, от которой требуется непрерывность интеграла. Среди смесей вероятностных распределений полигауссовых модель выделяется тем, что позволяет сколь угодно точно приближать случайный процесс [2]. В частности, возможность достаточно точно аппроксимации реальных микрорельефов, полученных в ряде технологических процессов (записана в работе [9], ориентированной на приложения в таких областях как отражение света на шероховатой поверхности, выращивание тонких пленок в гетронике, диагностика поверхности методами электронной спектроскопии), явления, включая трение и износ изделий в машиностроении. Таким образом, алгоритм численного моделирования реализаций полигауссовых процессов, базирующийся на преобразовании гауссовых распределений. Поэтому, что аналогичные технологии применяются и при обработке струй и сопел, мы уделяем основное внимание свойствам полигауссовых процессов, влияющим на моделирование рассеяния атомов разреженного газа на поверхности.

дynamические свойства шероховатой поверхности обтекаемых разрезов стенок каналов и сопел определяются через величины, с большими дающиеся численному нахождению путем аппроксимации интегральной (стремящейся к бесконечности) кратности. К подобным величинам вероятность отсутствия выбросов за уровень  $u$  или же через факториальные моменты  $N_k(T, u)$  числа выходов процесса за этот уровень на отрезок  $[0, T]$ . Для полигауссовых полей они выражаются через факториальные функции  $r(t)$  гауссового случайного процесса с корреляционной функцией  $r(t)$  за уровень  $u/v$ .

*ya O.A., Khalidov I.A. Simulation of Rarefied Gas Flow Interaction with R*  
*on the Base of Poly-Gaussian Model // VI European Conference for Aerosp*  
*s. Proceedings. Krakow, 2015. No. 355.*

жеватой поверхностью с позиций полигауссовой математической модели // Научно-технические ведомости СПбГПУ. – 2014. – №4. – С. 129–138.

- Aksanova O. A., Khalidov I. A.** Poly-Gaussian Model of Randomly Rough Surface in Rarefied Gas Flow // Rarefied Gas Dynamics. American Institute of Physics. AIP Conf. Proc. V. 1628. — New York: Melville, 2014. — P. 388–398.

**Халидов И. А.** Применение полигауссовых случайных процессов к моделированию обтекания шероховатой поверхности потоком разреженного газа // Вестник Санкт-Петербургского государственного Университета. Сер. 1. №3. 2014. С. 428–436.

**Мирошин Р. Н., Халидов И. А.** Локальные методы в механике сплошных сред. — СПб.: Изд-во Санкт-Петербургского ун-та, 2002. — 304 с.

**Аксенова О. А., Халидов И. А.** Шероховатость поверхности в аэродинамике разреженного газа: фрактальные и статистические модели. — СПб.: Изд-во ВВМ С.-Петербургского ун-та, 2004. — 120 с.

**Aksanova O. A., Khalidov I. A.** Molecular Dynamics Simulation of Gas Molecules Reflected from Rough Surface // Rarefied Gas Dynamics. American Institute of Physics / Ed. by D. A. Levin, I. J. Wysong, A. L. Garcia. — New York: Melville, 2011. — P. 441–446.

**Aksanova O. A., Khalidov I. A.** Application of Gaussian Random Field Theory to Direct Simulation of Rarefied Gas Flow near Rough Surface // Rarefied Gas Dynamics. American Institute of Physics. AIP Conf. Proc. 1501. — New York: Melville, 2012. — P. 1160–1167  
doi: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4769642>.

**Литвак М. Я., Малюгин М. И.** Полигауссовые модели негауссовой случайно-шероховатой поверхности // Журнал технической физики. — 2012. — Т. 82, №4. — С. 99–107.

# РАЗРАБОТКА МОДЕЛЕЙ СЕЧЕНИЙ СТОЛКНОВЕНИЙ МОЛЕКУЛ С УЧЕТОМ РЕАЛЬНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

*А. В. Басалаев<sup>1,2</sup>, А. П. Потапов<sup>3</sup>, Е. П. Дербакова<sup>1,2</sup>,  
З. П. Осипова<sup>2</sup>, Д. О. Михайлов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>МФТИ, Долгопрудный, Московская обл., Россия;

<sup>2</sup>НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Для решения задач физической кинетики применяется уравнение Больцмана, где в правой части стоит интеграл столкновений, который необходимо учитывать численно моделировать. В частности, необходимо численно рассчитывать дифференциальное сечение рассеяния в зависимости от различных входных параметров (потенциала взаимодействия, относительной скорости столкновения частиц). Для решения данной задачи используется так называемый «брюсовский метод». Целью данной работы является вычисление при помощи компьютерного моделирования дифференциального сечения рассеяния молекул сильно разреженного одноатомного газа Ne при столкновениях при комнатной температуре. Задача предполагается трехмерной.

При моделировании столкновения предполагается, что частицы налетают друг на друга с одной и той же относительной скоростью, много меньше релятивистской. Выборка составляет 700 тыс. частиц. Число узлов вокруг углов, в которые рассеиваются частицы – 500 (один угол рассеивания – один узел). Задача моделируется в безразмерных величинах. Итоговая блок-схема программы представлена на рис. 1. Программа реализована на C++.

Начальные координаты частиц задаются случайно. Частицы распределяются равномерно по осям  $X$  и  $Y$  при кол-ве частиц более 1000. Расчет траекторий

производится на основе уравнений движения при учете взаимодействия между частицами на основе потенциалов Леннард-Джонса и Букингема численно методом Эйлера и методом Рунге-Кутты четвертого порядка. При столкновении частиц проверяются на выполнение З.С.М.Э и З.С.И. и, в случае невыполнения, траектория пересчитывается с меньшим шагом по времени. Примеры вида рассчитанных программой траекторий приведены на рис. 2 (рассеивающий центр находится в начале координат, возможны и иные типы траекторий, но они встречаются пренебрежимо реже).

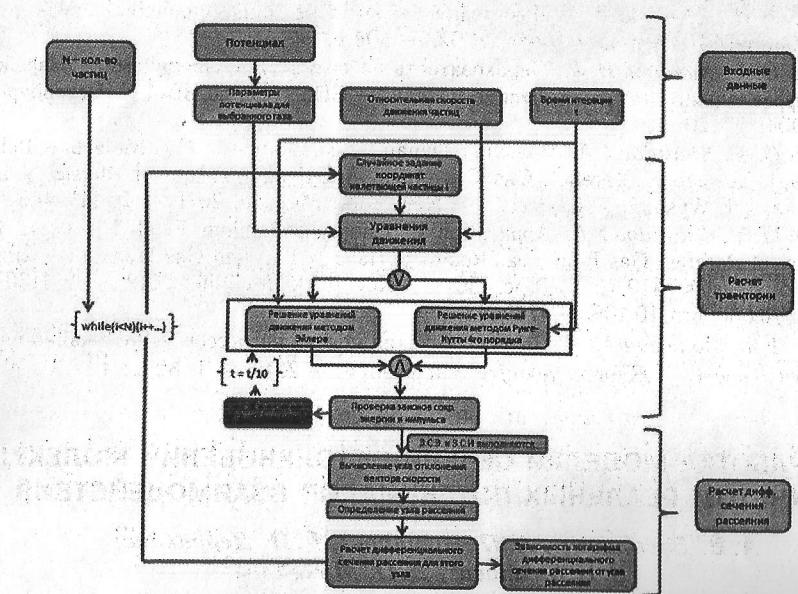


Рис. 1. Блок-схема программы

Для построения зависимости сечения рассеяния от азимутального угла используется неравномерное разбиение оси угла отклонения на узлы (ближе к нулю увеличивается частота узлов). Зависимость количества частиц от угла отклонения представлена на рис. 3 (слева — случай  $\theta < 0,12$ , справа — случай  $0,12 < \theta < \pi$ )

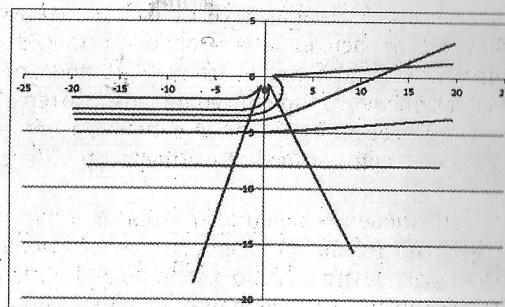


Рис. 2. Траектории частиц

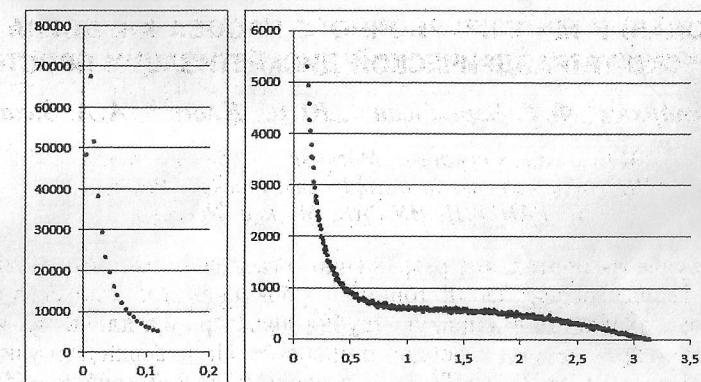


Рис. 3. Распределение частиц по углам

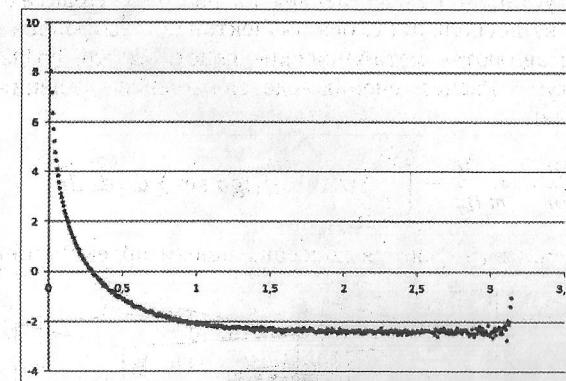


Рис. 4. Итоговые результаты

Итоговые результаты зависимости логарифма дифференциального сечения рассеяния от угла представлены ниже ( $N = 700000$ , потенциал Леннард-Джонса) и представлены на рис. 4. В дальнейшем планируются следующие шаги развития программы:

- расчет зависимости логарифма сечения рассеяния от угла рассеяния для двухатомного газа, молекулы которого представляются жестким ротором;
  - автоматизация (увеличение или уменьшение) шага по времени при расчете траектории в зависимости от угла отклонения частицы при двух последовательных итерациях расчета;
  - построение зависимости логарифма сечения рассеяния частиц от угла и относительной скорости частиц (трехмерный график).

1. Felix Sharipov, Guilherme Bertoldo. Numerical solution of the linear equation for an arbitrary intermolecular potential // Journal of Computational Physics. 2013. V. 246. P. 3345–3357.
  2. Buckingham R. A. The Classical Equation of State of Gases // Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences. 1938. V. 168. P. 1–12.