

УДК 536.6.011.8

© 1991 г.

В. Я. РУДЯК

**КОРРЕЛЯЦИИ В СИСТЕМЕ КОНЕЧНОГО ЧИСЛА ЧАСТИЦ,
МОДЕЛИРУЮЩЕЙ РАЗРЕЖЕННЫЙ ГАЗ**

Известно [1, 2], что метод прямого статистического моделирования, широко используемый для решения задач динамики разреженного газа, по сути сводится к решению основного кинетического уравнения разреженного газа, известного как уравнение Леонтовича – Каца. В работах [3, 4] это уравнение выведено из уравнения Лиувилля и тем самым установлена связь между методом прямого статистического моделирования и динамикой разреженной системы молекул. На практике для моделирования газовой системы в численных расчетах всегда используется ограниченное, более того, сравнительно малое число частиц. Это эквивалентно тому, что мы должны решать и основное кинетическое уравнение для конечного числа частиц N в ограниченном объеме V так, чтобы $N/V = n = \text{const}$. В [3–5] показано, что в пространственно однородной системе конечного числа частиц на временах порядка времени свободного пробега молекулы появляются корреляции. Такой газ уже нельзя считать разреженным. Поэтому моделирование разреженного газа будет совершаться с ошибкой. Оценка, полученная в [3, 4], показывает, что эта ошибка уменьшается с ростом N . Вместе с тем неясно, как на характер этих корреляций влияет наличие градиентов гидродинамических величин или поверхности. С практической точки зрения также важен достаточно простой тест, позволяющий исследовать влияние на решение задачи числа моделирующих частиц. Решению поставленных вопросов и посвящена настоящая статья.

1. Динамика разреженного газа описывается кинетическим уравнением Больцмана. Поэтому для исследования влияния числа частиц на решение задачи методом прямого статистического моделирования необходимо сравнить решение уравнения Больцмана с соответствующим решением основного кинетического уравнения. Для построения тестового примера целесообразно взять задачу, имеющую точное решение. Для уравнения Больцмана известно единственное точное решение, так называемое БКВ-решение (Бобылева – Крука – Ву) [6, 7]. Решение это получено для пространственно однородного уравнения Больцмана и именно такой случай рассматривается в этом разделе.

Основное кинетическое уравнение для пространственно однородного разреженного газа имеет вид

$$\frac{\partial \rho_N}{\partial t} = \frac{1}{V} \sum_{j>i}^N \int d\Omega \sigma v_{ij} [\rho_N(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_i', \dots, \mathbf{v}_j', \dots, \mathbf{v}_N, t) - \rho_N(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_i, \dots, \mathbf{v}_j, \dots, \mathbf{v}_N, t)], \quad d\Omega = d\epsilon dbb \quad (1.1)$$

где $\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_i'$ – скорости молекулы i до и после столкновения с частицей j , σ – дифференциальное сечение рассеяния, b – прицельный параметр, ϵ – азимутальный угол, ρ_N – N -частичная пространственно однородная функция распределения.

Если ввести s -частичные функции распределения

$$\rho_s(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_s) = \left(\frac{N}{V}\right)^s \int d\mathbf{v}_{s+1} \dots d\mathbf{v}_N \rho_N$$

то для одночастичной функции распределения из (1.1) получается следующее уравнение:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} = \frac{N-1}{N} \iint dv_2 d\Omega \sigma v_{12} (\rho_2' - \rho_2) \quad (1.2)$$

Кинетическое уравнение (1.2) незамкнуто относительно одночастичной функции распределения, так как его интеграл столкновений зависит от парной функции распределения $\rho_2 = \rho_1 \rho_1 + g$. Уравнение для парной корреляционной функции g также можно получить из (1.1), если проинтегрировать его по фазовым переменным $N-2$ частиц. В пределе разреженного газа оно имеет вид

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \frac{1}{V} L(\rho_2), \quad L(F) = \int d\Omega \sigma v_{12} (F' - F) \quad (1.3)$$

Введем безразмерные переменные

$$V_i = v_i \sqrt{\frac{m}{kT}}, \quad \Sigma = \frac{\sigma}{\sigma_*}, \quad s = tn\sigma_*, \quad G_1 = \rho_1 h^{-1} \left(\frac{kT}{m}\right)^{3/2}, \\ G_2 = gn^{-2} \left(\frac{kT}{m}\right)^3$$

Здесь T — температура газа, σ_* — некоторое характерное значение дифференциального сечения рассеяния. Система уравнений (1.2) и (1.3) для максвелловских молекул тогда принимает вид

$$\frac{\partial G_1}{\partial s'} = J(G_1 G_1) + J(G_2), \quad \frac{\partial G_2}{\partial s} = \frac{1}{N} L(G_2) + \frac{1}{N} L(G_1 G_1) \\ s' = s(N-1)/N \quad (1.4)$$

где J — обычный интеграл столкновений Больцмана.

Формальное решение для корреляционной функции представляет собой ряд по степеням $1/N$ [3]. В отсутствие начальных корреляций $G_2 \sim \sim N^{-1}$. Поэтому решение системы уравнений (1.4) можно искать в виде рядов: $G_1 = G_1^{(0)} + G_1^{(1)} N^{-1} + \dots$, $G_2 = N^{-1} G_2^{(1)} + \dots$. Функция $G_1^{(0)}$ удовлетворяет тогда пространственно однородному уравнению Больцмана, а G_2 — уравнению

$$\frac{\partial G_2^{(1)}}{\partial s} = L(G_1^{(0)} G_1^{(0)}) \quad (1.5)$$

Для специального класса начальных данных (БКВ начальные данные) пространственно однородное уравнение Больцмана имеет точное решение. Ограничиваясь этим классом начальных данных, находим, что $G_1^{(0)}$ имеет вид [6]

$$G_1^{(0)}(V_1, s) = (2\pi\xi)^{-3/2} \left[1 + \frac{(1-\xi)}{\xi} \left(\frac{V_1^2}{2\xi} - \frac{3}{2} \right) \right] e^{-V_1^2/2\xi} \quad (1.6)$$

$$\xi = 1 - \theta \exp \left[-\frac{N-1}{N} \lambda s \right], \quad 0 \leq \theta \leq \frac{2}{5}$$

$$\lambda = \frac{\pi}{2} \int_0^\pi d\mu B(\mu) (1-\mu^2)$$

где $B(\mu)$ — так называемая индикатриса рассеяния.

Подставляя функцию (1.6) в правую часть уравнения (1.5), с помощью стандартных, но громоздких выкладок можно вычислить оператор $L(G_1^{(0)}G_1^{(0)})$. Интегрируя затем уравнение (1.5), находим, что в главном приближении по N парная корреляционная функция имеет вид

$$G_2(s) = -\frac{1}{64\pi^2 N} \int_0^s \frac{(1-\xi)^2}{\xi^7} \exp\left[-\frac{V_1^2+V_2^2}{2\xi}\right] [V_1^4+V_2^4+2(V_1V_2)^2-4V_1^2V_2^2] ds \quad (1.7)$$

Эта функция обратно пропорциональна N , что хорошо согласуется с численными расчетами [2, 5]. При $t \rightarrow \infty$ функция G_2 выходит на некоторое асимптотическое значение: $G_2(\infty) = \Phi(V_1, V_2)N^{-1}$, где $\Phi(V_1, V_2)$ — некоторая функция скоростей сталкивающихся молекул. Можно показать, что при $V_1, V_2 \gg 1$ функция $\Phi(V_1, V_2) \rightarrow 0$. Это означает, что корреляции между группами высокоскоростных молекул пренебрежимо малы. Во всех остальных случаях корреляции растут с уменьшением числа частиц в системе.

2. Решение (1.7) представляет собой главный член разложения парной корреляционной функции в ряд по степеням N^{-1} . Чтобы определить характер влияния корреляций на поведение одночастичной функции распределения, следует функцию (1.7) подставить в первое уравнение системы (1.4) и решить его. В результате получается нелинейное неоднородное пространственно однородное кинетическое уравнение. Его решение, по-видимому, можно построить методом, разработанным в [6] для решения уравнения Больцмана. Ответить на поставленный вопрос, однако, можно и не вычисляя $G_1^{(1)}$. Характер поведения функции $G_1^{(1)}$ хорошо иллюстрируется поведением ее моментов. Итак, введем моменты одночастичной функции распределения

$$M_n = \frac{2^n n!}{(2n+1)!} \int V_1^{2n} G_1(V_1) dV_1, \quad n=0, 1, 2, \dots \quad (2.1)$$

Для БКВ начальных данных (функция G_1 дается тогда выражением (1.6)) эти моменты удовлетворяют рекуррентной системе уравнений, имеющей точные решения [7]

$$\frac{dM_n}{d\tau} + M_n = \frac{1}{n+1} \sum_{k=0}^n M_k M_{n-k}, \quad n=0, 1, 2, \dots \quad (2.2)$$

причем $M_0(\tau) = M_1(\tau) = 1$, $M_n(\infty) = 1$ для всех n , где $\tau = 4\pi s$.

Для системы конечного числа частиц, когда G_1 удовлетворяет уравнению (1.4), соответствующая рекуррентная система имеет вид

$$\frac{dM_n}{d\tau'} + M_n = \frac{1}{n+1} \sum_{k=0}^n M_k M_{n-k} + K_n, \quad n=0, 1, 2, \dots \quad (2.3)$$

$$K_n = \frac{2^n n!}{4\pi (2n+1)!} \int V_1^{2n} G_2(V_1, V_2, \tau') \sin \chi d\chi d\varepsilon dV_1 dV_2, \quad \tau = 4\pi s'$$

где χ — угол рассеяния.

Подставляя сюда функцию (1.7) и выполняя необходимые выкладки, получим

$$K_n = - \frac{n!}{16(n+1)(2n+1)!(N-1)} \sum_{k=0}^n \binom{2n+2}{2k+1} \frac{(2k+1)!(2n-2k+1)!}{(n+1)!} \times$$

$$\times \left(n^2 + \frac{16}{3} k^2 - \frac{16}{3} kn - n \right) \int_0^{\tau'} (1-\xi')^2 \xi'^{(n-2)} d\tau' \quad (2.4)$$

$$\xi' = \xi(\tau')$$

Нетрудно построить точные решения уравнений (2.3), (2.4) для любого n . Рассмотрим несколько первых моментов. Как и для бoльцмановской системы, $M_0(\tau') = M_1(\tau') = 1$, однако все моменты более высокого порядка существенно отличаются от бoльцмановских. В частности

$$M_2(\tau') = 1 + m_2 e^{-\tau'/3} - \frac{2\pi}{75(N-1)} + \frac{4\pi^2}{75(2\pi-3)(N-1)} e^{-\tau'/2\pi} \quad (2.5)$$

$$M_3(\tau') = 1 + m_3 e^{-\tau'/2} + 3m_2 e^{-\tau'/3} - \frac{54\pi^2}{1125(N-1)} +$$

$$+ \frac{4\pi^2}{25(2\pi-3)(N-1)} e^{-\tau'/2\pi} - \frac{32\pi^2}{1125(N-1)(2\pi-3)} e^{-3\tau'/4\pi}$$

Здесь функции m_i определяются из начальных условий. Бoльцмановское решение получается отсюда предельным переходом $N \rightarrow \infty$. При конечных N корреляции в системе быстро нарастают и тем быстрее, чем меньше N . Однако при любом N существует некоторый доверительный интервал времени, где точное решение будет совпадать с решением основного кинетического уравнения. С ростом порядка момента этот интервал времени уменьшается. С другой стороны, при $t \rightarrow \infty$ решение системы уравнений (2.3), (2.4) выходит на значение, отличное от физически требуемого ($M_n(\infty) = 1$). Это предельное значение зависит от N . Например, $M_2(\infty, N=5) = 0,979$, $M_2(\infty, N=10) = 0,992$, $M_2(\infty, N=100) = 0,999$, $M_3(\infty, N=5) = 0,962$, $M_3(\infty, N=10) = 0,985$, $M_3(\infty, N=100) = 0,998$, $M_4(\infty, N=5) = 0,923$, $M_4(\infty, N=10) = 0,966$, $M_4(\infty, N=100) = 0,997$.

Чтобы задать M_2 с точностью порядка 0,1%, необходимо $N > 85$. Чтобы задать с той же точностью M_3 и M_4 , необходимо соответственно $N > 152$ и $N > 308$.

3. Основное кинетическое уравнение для пространственно неоднородного газа выведено в [4] и имеет вид

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{r}_i} = \frac{1}{V} \sum_{j>i}^N \int d\Omega \sigma v_{ij} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) [f_N(\dots, \mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i', \dots,$$

$$\dots, \mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j', \dots) - f_N(\dots, \mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \dots)] \quad (3.1)$$

где f_N — огрубленная по временным и пространственным масштабам N -частичная функция распределения.

Введем снова s -частичные функции распределения

$$f_s(x_1, \dots, x_s) = \left(\frac{N}{V} \right)^s \int dx_{s+1} \dots dx_N f_N, \quad x_i = \{r_i, v_i\}$$

Тогда из уравнения (3.1) для одночастичной и парной корреляционной функций распределения снова можно вывести уравнения, которые

ИМЕЮТ ВИД

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{r}_1} = \frac{N-1}{N} J(f_1 f_1) + \frac{N-1}{N} J(g) \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \sum_{i=1}^2 \mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial g}{\partial \mathbf{r}_i} = -\frac{\nu}{N} g + \frac{1}{N} K g + \frac{1}{N} L'(f_1 f_1)$$

$$\nu = n \int d\Omega \sigma v_{12}, \quad K g = n \int d\Omega \sigma v_{12} g', \quad L' = n L$$

Радикальным отличием системы уравнений (3.2) от соответствующей пространственно однородной (1.2), (1.3) является наличие наряду с длиной свободного пробега l еще одного пространственного характерного масштаба — гидродинамического — L . По этой причине кинетические уравнения (3.2) содержат число Кнудсена $\text{Kn} = l/L$. При $\text{Kn} \rightarrow \infty$ (свободномолекулярный режим) влиянием столкновений можно пренебречь и если корреляции в начальный момент в системе отсутствовали, то они и не появятся. С другой стороны, в гидродинамическом режиме течения можно ожидать, что зависимость корреляционной функции от координат определяется изменением в пространстве гидродинамических переменных φ_α

$$\nabla g(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \frac{\partial g}{\partial \varphi_{\alpha}} \nabla \varphi_{\alpha}$$

С учетом этого уравнение для g можно записать так

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \left(-\frac{\nu}{N} + \sum_{\alpha} \nabla \varphi_{\alpha} \cdot \mathbf{A}_{\alpha} \right) g + \frac{1}{N} K g + \frac{1}{N} L'(f_1 f_1) \quad (3.3)$$

$$\mathbf{A}_{\alpha} = \frac{1}{2} (\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2) \partial / \partial \varphi_{\alpha}$$

Решение этого уравнения, так же как для пространственно однородного случая [3, 4], можно построить с помощью резольвентного оператора $\Gamma(t, t_1)$ и оно будет иметь вид

$$g(\mathbf{r}, t) = g_0(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{N} \int_{t_0}^t \Gamma(t, t_1) g_0(\mathbf{r}, t_1) dt_1 \quad (3.4)$$

$$g_0(\mathbf{r}, t) = S_-(t, t_0) g(\mathbf{r}, t_0) + \frac{1}{N} \int_{t_0}^t dt_1 S_-(t, t_1) L'(f_1 f_1) \quad (3.5)$$

$$\Gamma(t, t_1) = \sum_{n=0}^{\infty} K_{n+1}(t, t_1)$$

Ядро K_{n+1} задается рекуррентной формулой

$$K_{n+1}(t, t_1) = \int_{t_1}^t K(t, t_2) K_n(t_2, t_1) dt_2, \quad K(t, t_i) \equiv K(t, t_i) = \frac{1}{N} S_-(t, t_i) K$$

Входящий сюда оператор эволюции $S_-(t, t_i)$ определяется выражением

$$S_-(t, t_i) = \exp \left[-\frac{\nu(t-t_i)}{N} \right] \exp \left[-\sum_{\alpha} \int_{t_i}^t \nabla \varphi_{\alpha} \cdot \mathbf{A}_{\alpha} dt_2 \right] \quad (3.6)$$

Из решения (3.4) видно, что при любом конечном N и $t > t_0$ двухчастичная функция распределения не факторизуется ни при каких начальных условиях, за исключением локально максвелловских, когда $f_2(t_0) = f_{10}(t_0)f_{10}(t_0)$, где f_{10} — локально максвелловская функция распределения. В тех случаях, когда начальные корреляции отсутствуют, эволюция функции $g(t)$ определяется членами, содержащими оператор L . Оператор эволюции (3.6) в отличие от соответствующего оператора для пространственно однородной системы локальный и его значения зависят от градиентов гидродинамических величин. Поскольку градиенты гидродинамических величин могут изменять знак, то наличие в (3.4) оператора $S_-(t, t_1)$ может приводить как к усилению, так и к подавлению корреляций в системе (по сравнению с уровнем корреляций в пространственно однородной системе при том же числе частиц).

В главном приближении по N парная корреляционная функция имеет вид (3.5). Если воспользоваться теоремой о среднем, то в этом случае для функции $g(\mathbf{r}, t)$ можно получить оценку

$$g(\mathbf{r}, t) = M(\mathbf{r}) \left\{ 1 - \exp \left[- \frac{v(t-t_0)}{N} + \xi(t) - \xi(t_1) \right] \right\} \quad (3.7)$$

Здесь предполагается, что начальные корреляции отсутствуют, $t_1 \in [t_0, t_1]$, $M(\mathbf{r})$ — некоторая функция импульсов двух частиц.

Оценка (3.7) локальная и в разных точках пространства может быть различна. Функция $\xi(t)$ зависит от градиентов гидродинамических величин и в общем случае знакопеременная. При малых градиентах $\xi(t) \rightarrow 0$ и оценка (3.7) переходит в оценку для пространственно однородной системы [4, 5].

Как уже указывалось, зарождение корреляций происходит на временах порядка времени свободного пробега τ_l . Градиенты же гидродинамических величин на этих временах обычно мало изменяются. Таким образом, на временах порядка τ_l система ведет себя как пространственно однородная. Поэтому сначала функция $g(\mathbf{r})$ быстро нарастает до некоторого уровня, а затем начинают проявляться градиенты, что может приводить как к уменьшению корреляций, так и к некоторому их увеличению. В эволюционных задачах по мере выравнивания градиентов корреляции будут выходить на свой пространственно однородный предел.

Полезна еще одна оценка. Запишем первое из уравнений системы (3.2) в интегральной форме. Тогда, учитывая, что в пространственно неоднородном случае перед интегралами столкновений стоит число Кнудсена, получим следующую оценку для одночастичной функции распределения:

$$f_i = f_i^0 + O(1/NKn)$$

где f_i^0 — решение уравнения Больцмана.

4. Одной из важных задач, решаемых методом прямого статистического моделирования, является задача внутреннего или внешнего обтекания. Чтобы выяснить влияние границы на характер решения, рассмотрим задачу взаимодействия разреженного газа с твердой поверхностью. В [8] показано, что такая система описывается уравнением Лиувилля с источником. Из этого уравнения, так же как и в случае отсутствия поверхности [3, 4], можно вывести основное кинетическое уравнение. Оно отличается от уравнения (3.1) наличием источникового члена, обусловленного взаимодействием газа с поверхностью

$$\sum_i^N \int dW \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}) \int d\mathbf{v}_i \theta(-\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n}) |\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n}| [U(\mathbf{v}_i^0, \mathbf{v}_i) \times \\ \times f_N(\dots, \mathbf{v}_i^0, \dots) - \delta(\mathbf{v}_i^0 - \mathbf{v}_i) f_N(\dots, \mathbf{v}_i, \dots)]$$

где v_i° , v_i — соответственно скорости налетающей на поверхность и отраженной молекулы, R — радиус-вектор точек на поверхности W , $U(v_i^\circ, v_i)$ — ядро рассеяния, θ — функция Хевисайда.

Уравнение для парной корреляционной функции, следующее из такого уравнения, имеет вид

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \sum_{i=1}^2 v_i \cdot \frac{\partial g}{\partial r_i} = -\frac{v}{N} g + \frac{1}{N} K g + \frac{1}{N} L'(f_i f_i) - \Psi g \quad (4.1)$$

$$\Psi g = n \sum_{i=1}^2 \int dW \delta(r_i - R) \int dv_i^\circ \Theta(-v_i^\circ \cdot n) |v_i^\circ \cdot n| \times \\ \times [-U(v_i^\circ, v_i) g(v_i^\circ, v_i) - \delta(v_i^\circ - v_i) g(v_i^\circ, v_i)]$$

Если закон взаимодействия газа с поверхностью зеркальный, то $\Psi g = 0$ и уравнение (4.1) переходит в уравнение для корреляционной функции безграничной системы. Наличие зеркально отражающей поверхности, следовательно, не изменяет характера эволюции корреляций в объеме.

При диффузном же законе взаимодействия газа с поверхностью наличие последней приводит к экспоненциальному по времени подавлению корреляции вблизи стенки. Чтобы убедиться в этом, надо записать решение уравнения (4.1) и затем воспользоваться оценкой (3.7). Физически этот результат очевиден. Молекула, взаимодействующая с поверхностью, «забывает» о предшествующем взаимодействии ее с другой молекулой.

Автор признателен М. С. Иванову за обсуждение полученных результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Белоцерковский О. М., Яницкий В. Е. Статистический метод частиц в ячейках для решения задач динамики разреженного газа. II Вычислительные аспекты метода // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1975. Т. 15. № 6. С. 1553–1567.
2. Ivanov M. S., Rogasinski S. V., Rudyak V. Ya. Direct statistical method and master kinetic equation // Proc. XVI Int. Symp. RGD. California, Pasadena: Pergamon Press, 1989. P. 171–181.
3. Рудяк В. Я. О связи основного кинетического уравнения Каца с уравнениями Лиувилля и Больцмана // Тр. 9-го Всесоюз. конф. по динам. разреж. газов. Свердловск, июнь, 1987. Т. 1. Свердловск, 1988. С. 14–22.
4. Рудяк В. Я. Основное кинетическое уравнение разреженного газа // Изв. АН СССР. МЖГ. 1989. № 6. С. 154–160.
5. Иванов М. С., Рудяк В. Я. Основное кинетическое уравнение и метод прямого статистического моделирования // Мат. моделирование. 1989. Т. 1. № 7. С. 93–99.
6. Бобылев А. В. Точные и приближенные методы в теории нелинейных кинетических уравнений Больцмана и Ландау. М.: ИПМ АН СССР, 1987. 251 с.
7. Krook M., Wu T. T. Exact solutions of the Boltzmann equation // Phys. Fluids. 1977. V. 20. № 10. Pt 1. P. 1589–1595.
8. Рудяк В. Я. Статистическая теория диссипативных процессов в газах и жидкостях. Новосибирск: Наука, 1987. 272 с.

Новосибирск

Поступила в редакцию
12.X.1990