

А. Е. Королев, В. П. Осипов, А. А. Самылкин (Москва, ИПМ). **Применение «весовой» схемы имитационного моделирования молекулярных потоков.**

В работе, представленной данным сообщением, обсуждается «весовая» схема имитационного статистического моделирования нестационарного поведения диссипативных молекулярных потоков с помощью методов Монте-Карло. Основным требованием к подобным методам является то, что генерируемый случайный процесс должен соответствовать системе кинетических уравнений Больцмана.

Статистический метод переменных весовых множителей [1] удовлетворяет этому требованию и позволяет молекулярную газовую смесь в однородном объеме заменять системой (до 10^4) модельных подмножеств. Последовательность столкновений подмножеств строится как случайный процесс и разыгрывается по методу Монте-Карло. Вероятность столкновения w определяется «весом» модельных представителей в общей системе частиц. При этом строго соблюдается принцип парности взаимодействия реальных молекул. В общем случае:

$$w_{ij}^{lk} = K \frac{n_k \sigma_{lk} g_{ij}^{lk} \Delta t}{N_k} = K \frac{n_i \sigma_{lk} g_{ij}^{kl} \Delta t}{N_i}, \quad K = \begin{cases} 1, & \text{при } l \neq k, \\ N_l / (N_l - 1), & \text{при } l = k, \end{cases}$$

$k = 1, \dots, S$, S — количество компонентов смеси; N_l , N_k — количество модельных представителей компонент l и k ; n — концентрация соответствующей компоненты; σ — сечение столкновений; g — относительная скорость молекул; Δt — расчетный шаг по времени.

Рассматривается применимость метода для моделирования нестационарных молекулярных струй с учетом и без учета диссипации энергии, для исследования процессов кластерообразования и когерентного поведения в диссипативных молекулярных потоках.

Работа выполнена при поддержке Совета по грантам при президенте РФ (проект № НШ-3066.2006.8).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Королев А. Е., Осипов В. П., Самылкин А. А. Модификация статистического метода частиц в приложении к задачам процесса тепломассопереноса в разреженных газовых смесях. — Космонавтика и ракетостроение, 2006, № 4.