

Цифровые модели структуры флюидов

Наац И.Э., Парватов Г.Н.

Представлена объединенным семинаром секторов
ДСМ и МРД НИИ ЭИ

Результаты работ [1, 2, 3] позволяют рассматривать флюиды как существенно ν -нерегулярные ансамбли молекул, взаимные положения которых постоянно меняются с сохранением среднего расстояния между ними. Структуры таких ансамблей молекул удобно рассматривать с точки зрения вероятностной геометрии. Полезными моделями при этом оказываются случайные упаковки равных жестких шаров. Основными параметрами, характеризующими упаковку равных шаров, являются координационное число, плотность и функция радиального распределения [4].

В настоящей работе предлагаются две математические модели структур флюидов, представленных в виде случайных совокупностей равных жестких сфер, заполняющих некоторый выборочный объем трехмерного пространства.

Модели реализуются с помощью алгоритмов случайного заполнения ограниченного пространства равными шарами. Характер заполнения определяется свойствами флюидов: распределением молекул в пространстве и их взаимными связями.

Первая модель представляет случайные структуры со слабыми молекулярными связями и равномерным распределением молекул в объеме, вторая — с достаточно сильными.

В общем случае обе модели описывают процессы упаковки ограниченного пространства равными шарами с тем или иным условием. Координаты центров пакуемых шаров представляются случайными числами q_1, \dots, q_S в S -мерном пространстве с $|q_i| < \infty$, где $i = 1, \dots, S$.

Для первой модели из этого пространства выбираются точки q_1^0, \dots, q_S^0 , удовлетворяющие условию [1] $a \leq |q_i^0| \leq b$ таким образом, чтобы расстояние между центрами шаров не было

меньше определенного:

$$\sum_{i=1}^S (q_i^0 - q_i^1)^2 \gg d \quad (2)$$

Это условие физически означает возможность сближения молекул только до касания друг с другом. Дальнейшему сближению препятствуют силы взаимного отталкивания.

Вторая модель предназначена для простых одноатомных жидкостей (типа жидких газов, кроме гелия) с достаточно сильными молекулярными связями. В этом случае молекулы имеют не менее четырех касаний не с одной стороны, образуя тем самым устойчивую конструкцию [4]. Молекулы здесь представляются жесткими, тяжелыми шарами. Вследствие этого вторая модель отличается от первой добавочным условием: неравенство (2) должно выполняться при обязательном удовлетворении в трехмерном пространстве ($S = 3$) координатами пакуемого шара x, y, z системе уравнений:

$$\begin{cases} (x - \frac{x_1 + x_2}{2})(x_2 - x_1) + (y - \frac{y_1 + y_2}{2})(y_2 - y_1) + (t - \frac{t_1 + t_2}{2})(t_2 - t_1) = 0 \\ (x - \frac{x_1 + x_2}{2})(x_3 - x_1) + (y - \frac{y_1 + y_2}{2})(y_3 - y_1) + (t - \frac{t_1 + t_2}{2})(t_3 - t_1) = 0 \\ (x - x_3)^2 + (y - y_3)^2 + (t - t_3)^2 = d \end{cases} \quad (3)$$

где d — диаметр шаров.

Этим самым осуществляется опускание очередного шара случайным образом в лунку между трех до касания с ними.

Модели были реализованы на ЦВМ М-20 для сферы диаметром $D = 1$. Центры координат пакуемых шаров радиуса 0,05 представлялись тройками 2^m разрядных чисел R_i, θ_i, ψ_i с равномерным распределением в интервалах $[0, 0,5]$, $[0, \pi]$, $[0, 2\pi]$ соответственно. Случайным образом из этих интервалов выбираются числа такие, чтобы $0 \leq |R_i| \leq 0,5$ для первой модели и $0 \leq |R_i| \leq 0,4$ для второй. Расстояние между центрами должно быть не меньше " d " — диаметра шара, причем для второй модели должно реализоваться выполнение системы уравнений (3). Значения плотностей, координационные числа и функции распределения по числу касаний вычислены методом статистических испытаний. Результаты представлены в виде гистограмм на рис. I.

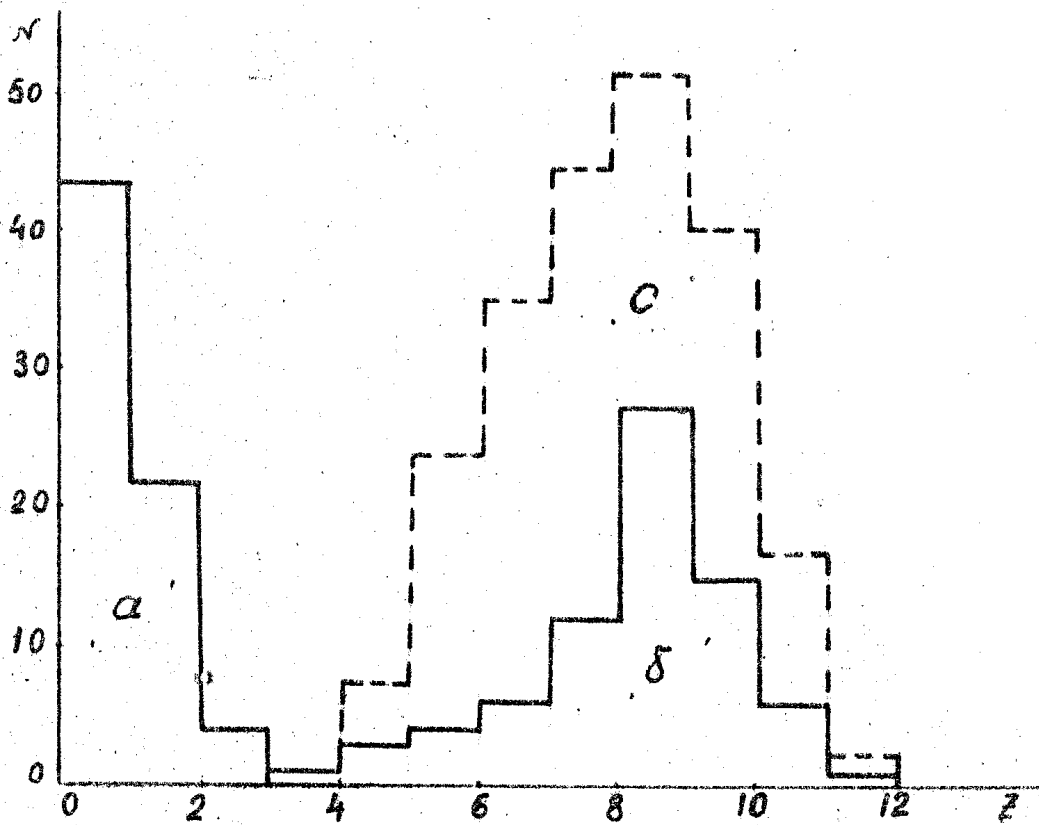


Рис. I. Гистограммы числа писаний.

a - первая модель

δ - вторая модель

c - гистограмма из работы 4

Полученные значения плотностей 0,32 и 0,61 для первой и второй модели соответственно свободны от влияния границ. Влияние границ исключено методом переноса границ [5].

При подсчете функции распределения шаров по числу касаний шары считались касающимися, если расстояние между ними находится в интервалах L , $d + \Delta$. Здесь Δ — ошибка алгоритма и равняется 1,5% от диаметра шара.

Гистограммы показывают, что моды касаний находятся в интервалах 0-1 для первой (рис.1а), модели и 8-9 — для второй (рис.1б). Соответственно средние числа касаний на шар равны 0,46 и 7,9. Полученные результаты хорошо согласуются с аналогичными данными, полученными из дифракции рентген-лучей на одноатомных жидкостях [3] и данными, полученными с помощью физических моделей [4] (рис.1с). Метод математического моделирования имеет некоторые преимущества перед физическими моделями. Основное из них — быстрота получения конечного результата. Эксперимент на ЦВМ М-20 занимает времени от 2 до 60 мин в зависимости от сложности модели. Вследствие этого предлагаемые математические модели простых одноатомных жидкостей могут быть рекомендованы для исследования соответствующих структур с применением ЦВМ.

Л и т е р а т у р а

1. Stewart G.W. *Rev. Mod. Phys.* 2.116 (1941)
2. Prins J.A. *Physica III*, 3. 147 (1936)
3. Furukawa K. *Nature* 184. 1208 (1959)
4. Bezgal J.D. *Nature* 183. 141 (1959)
5. Назац И.Э., Парватов Г.Н. "К определению структурных свойств случайных заполнителей". Сборник ТПИ 1969.