

На правах рукописи

ГАЛКИН АЛЕКСЕЙ ВАЛЕРЬЕВИЧ

**Математическое моделирование столкновений частиц,
приводящих к решениям уравнений Больцмана и Смолуховского**

**05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ**

**Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук**

Москва 2009

Работа выполнена на кафедре прикладной математики Обнинского государственного технического университета атомной энергетики

Научный руководитель доктор физико-математических наук,
Савельев Валерий Иванович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Веденяпин Виктор Валентинович

доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник
Гинкин Владимир Павлович

Ведущая организация: кафедра математики физического факультета Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова

Защита состоится « 11 » июня 2009г. в « » часов

на заседании диссертационного совета Д 002.058.01

**при Институте математического моделирования РАН по адресу:
125047, Москва, Миусская пл., д.4а**

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института математического моделирования РАН.

Автореферат разослан « » 2009г.

**Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук**

Змитренко Н.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность.

Актуальность темы диссертационной работы определяется необходимостью тестирования и обоснования прямого моделирования для решения задач, связанных с процессами переноса вещества в системах сталкивающихся частиц, установления связи прямого моделирования с уравнениями Больцмана и Смолуховского.

Интерес к системам сталкивающихся частиц обусловлен исследованиями в авиационной и космической технике, вакуумной технике, химической технологии. Уравнения газовой динамики обладают уникальной универсальностью в том смысле, что они описывают основные физические процессы большинства современных технологий и экологических проблем от производства элементной базы микроэлектронной промышленности до переноса токсических компонентов воздушными потоками. Потребность в гидро- и газодинамических расчетах возрастает еще и потому, что по мере развития численных методов и бурного прогресса вычислительной техники увеличиваются возможности математического моделирования газодинамических процессов, и как следствие рост доверия инженеров и конструкторов к результатам вычислительного эксперимента. Помимо внешних стимулов со стороны промышленности неослабевающий интерес к развитию вычислительной газовой динамики поддерживается и внутренней логикой научного исследования этой интереснейшей с точки зрения развития механики, прикладной и общей математики проблемы.

Интерес к процессу коагуляции обусловлен исследованиями в метеорологии, экологии, астрономии, теории реакторов на быстрых нейтронах. Напрямую с явлениями коагуляции связаны процессы роста трещин в структуре материалов за счет их взаимных пересечений. Это имеет прямое отношение к задачам динамики разрушения деталей. Процессы

коагуляции лежат в основе явлений полимеризации, створаживания, свертываемости крови.

Важность прямого математического моделирования для расчета систем сталкивающихся частиц обусловлена тем, что необходимо иметь соответствие между решениями уравнения Больцмана и распределением частиц в реальных физических системах. Возможно проведение сравнительного анализа результатов имитационного моделирования с точными решениями и решениями, полученными с помощью разностных схем. При этом большое значение имеют правила подготовки спектров имитационного моделирования для последующего сравнения с точными решениями.

В настоящее время найдены точные решения уравнения Больцмана для сравнительно простых случаев малых градиентов температуры, скорости и концентраций в газе. Существуют ситуации, когда уравнение Смолуховского не имеет классического решения. Поэтому прямое моделирование процессов коагуляции имеет большое прикладное значение. Быстрый рост производительности вычислительной техники, использование многопроцессорных вычислительных систем делают реальной возможность детального моделирования газодинамических потоков.

Целью настоящей работы является разработка алгоритмов, реализация программного обеспечения и проведение вычислительных экспериментов прямого моделирования систем сталкивающихся частиц для специального случая одноатомного больцмановского газа и коагуляции в дисперсных системах.

Научная новизна. Основные результаты работы являются новыми и состоят в следующих положениях, выносимых на защиту:

1. Исследована новая математическая модель больцмановского газа, основанная на применении метода прямого моделирования.
2. Создан алгоритм и программное обеспечение для моделирования ортогональных соударений твердых сфер. Обоснована математическая

корректность исследуемой модели, приводящей для сферически симметричных распределений в импульсном пространстве к кинетическому уравнению Смолуховского.

3. Исследована новая математическая модель пространственно неоднородной коагуляции, приводящая к решениям классического уравнения Смолуховского.
4. Создан алгоритм и программное обеспечение для прямого моделирования процесса пространственно однородной и неоднородной парной коагуляции.

Практическая ценность работы. Работа носит теоретический характер. Методы, разработанные в диссертации, могут быть использованы для исследований проблем математического моделирования в больцмановском газе и пространственно неоднородной коагуляции. Создан алгоритм и программное обеспечение для моделирования ортогональных соударений твердых сфер. Обоснована математическая корректность исследуемой модели, приводящей для сферически симметричных распределений в импульсном пространстве к кинетическому уравнению Смолуховского. Создан алгоритм и программное обеспечение для прямого моделирования процесса пространственно однородной и неоднородной парной коагуляции.

Апробация работы. Основные положения и результаты работы докладывались на следующих научных конференциях и семинарах:

1. Семинар лаборатории Монте-Карло ускорителя на тяжелых ионах GSI г. Дармштадт, Германия, декабрь 2006 г.
2. 9-й Международный семинар «Математическое моделирование и супервычисления», Саров, 2006 г.
3. Международная конференция «20-th International Conference on Transport theory, Obninsk, 2007», г. Обнинск, июль 2007 г.

4. 10-й Международный семинар «Математическое моделирование и супервычисления», Саров, 2008 г
5. Международная конференция «Дифференциальные уравнения и смежные вопросы», посвященная 100-летию И.Г.Петровского, г. Москва, май 2007 г.
6. Международная конференция «Математические идеи П.Л.Чебышева и их приложение к современным проблемам естествознания», г. Обнинск, 14-18 мая 2006, 2008 гг.
7. Научный семинар ИММ РАН под руководством проф. Е.И.Леванова, 2009 г.

Выполнение исследований в рамках настоящей работы было поддержано грантом РФФИ, код проекта 08-01-00338(А).

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, разбитых на параграфы, заключения и списка литературы, содержащего ___ наименований. Объем диссертации составляет ___ страниц.

Публикации. Основные результаты, полученные автором и изложенные в диссертации, опубликованы в работах [1–12] (список литературы приведен в конце автореферата). По материалам диссертации опубликованы 12 научных работ и сделано 9 докладов на научных конференциях. Результаты, содержащиеся в работах, выполненных в соавторстве, и включенные в диссертацию, получены автором лично и включены в диссертацию с согласия и одобрения соавторов этих работ.

Краткое содержание работы.

Во введении обосновывается актуальность темы диссертации, научная новизна полученных результатов, а также кратко изложено содержание и основные результаты работы.

В первой главе приведен обзор исследований, связанных с математическим моделированием кинетики сталкивающихся частиц. Рассмотрены модели парных соударений частиц, характерных для Больцмановского газа, процессов коагуляции Смолуховского и выделен специальный случай ортогональных соударений, связывающий модели Больцмана и

Смолуховского. Приведены примеры точных решений.

Во второй главе [2-12] рассматривается математическая модель больцмановского газа, основанная на моделировании столкновений с повторным розыгрышем пар взаимодействующих частиц на каждом шаге по времени. При этом пары не взаимодействуют, если на данном шаге времени хотя бы одна частица в паре уже участвовала в розыгрыше. Этот алгоритм розыгрыша взаимодействий частиц на каждом шаге по времени универсальным образом применяется во всех моделях, рассматриваемых в диссертации в дальнейших главах. Пусть частицы физической системы занумерованы натуральными числами $1 \leq i \leq N$, $N \geq 1$. Каждому номеру i могут соответствовать величины скорости $v^i \in \mathbb{R}_n$, где \mathbb{R}_n - фазовое пространство рассматриваемой модели $n = 2, 3$.

Пусть значения времени t принимают дискретные значения $t_n = n\tau$, $n \in \mathbb{R}_n^+$, $\tau > 0$.

Частицы в момент времени t_n , могут участвовать в парных взаимодействиях по закону столкновений бильярдных шаров.

$$\begin{aligned} v' &= v - q(v - v_1, q)_{\mathbb{R}_n}, \quad v'_1 = v_1 + q(v - v_1, q)_{\mathbb{R}_n}, \quad (*) \\ \forall q \in \Sigma_2 &= \{q \in \mathbb{R}_n : (q, q)_{\mathbb{R}_n} = 1\}. \end{aligned}$$

Акты парных столкновений и изменение скоростей при столкновении разыгрываются следующим образом. Рассмотрим множество Δ , состоящее из пар номеров частиц (i, j) , $1 \leq i < j \leq N$. В каждый момент времени t_n разыгрываются независимые случайные величины $\pi^{(s)}(t_n)$ со значениями в Δ . При этом вероятность выбора пары $P\{\pi^{(s)}(t_n) = (i, j)\} = 1/C_N^2$, $1 \leq s \leq Q(N)$, где величина $Q(N)$ определяет количество повторных розыгрышей в данный момент времени. Возможные пары сталкивающихся частиц в момент времени t_n выберем как значения набора $\{\pi^{(s)}(t_n)\}_{s=1}^{Q(N)}$, накладывая дополнительное ограничение: если хотя бы один из номеров, входящих в пару $\pi^{(s)}(t_n)$ при $s \geq 2$, входит в одну из пар $\pi^{(1)}(t_n), \dots, \pi^{(s-1)}(t_n)$, то для пары $\pi^{(s)}(t_n)$ преобразования скоростей по закону бильярдных шаров в момент времени t_n не происходит. Тем самым исключаются многократные взаимодействия для каждой частицы в момент времени t_n .

Возможность преобразования скоростей для выбранных вышеуказанным способом пар номеров сталкивающихся частиц определим розыгрышем совокупности независимых случайных величин $\eta_{i,j}(t_n)$, $(i, j) \in \Delta$, принимающих два значения: 0 и 1. Значение 0 означает запрет преобразования скоростей, а 1 – наличие преобразования скоростей (*) для пары частиц с номерами (i, j) в момент времени t_n . Розыгрыш этих значений подчиним следующим правилам. Значения случайной величины $\eta_{i,j}(t_n)$

задаются условной функцией распределения

$$P\{\eta_{i,j}(t_n) = 1\} = \Phi(v^i, v^j)\tau \leq 1,$$

$$P\{\eta_{i,j}(t_n) = 0\} = 1 - \Phi(v^i, v^j)\tau,$$

где $0 \leq \Phi(v^i, v^j) = \Phi(v^j, v^i)$ – заданная интенсивность столкновений частиц, которая предполагается финитной функцией. Направление вектора q в формуле столкновений бильярдных шаров, который принадлежит единичной сфере в \mathbb{R}_n , выбираем на основе случайного розыгрыша точки на указанной сфере, распределенной по равномерному закону.

Если пара $(i, j) \in \Delta$ выбрана и значение $\eta_{i,j}(t_n) = 1$, то значение векторов скоростей для выбранной пары преобразуется по закону (*). При этом значения скоростей остальных частиц в системе остается неизменным. Если же $\eta_{i,j}(t_n) = 0$, то значения скоростей для всех частиц системы остаются неизменными. Указанная процедура выполняется для всех пар выбранных номеров последовательным перебором $\pi^{(1)}(t_n), \dots, \pi^{(Q(N))}(t_n)$.

Пусть фазовое пространство скоростей \mathbb{R}_n является объединением непересекающихся ячеек D_v положительной лебеговой меры $\text{mes}(D_v)$. Рассмотрим числа заполнения ячейки D_v :

$$N_v(t_n) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i:v^i \in D_v} 1.$$

Положим

$$u_{v,N}(t_n) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\langle N_v(t_n) \rangle}{\text{mes}(D_v)N},$$

–средняя концентрация частиц в ячейке D_v в момент времени t_n (средняя относительная доля частиц системы из N частиц, имеющих скорость v в момент времени t_n). Среднее значение относится к независимым реализациям описанного алгоритма.

Тестирование этого алгоритма проводилось посредством сравнения концентраций $u_{v,N}(t_n)$ с точными решениями А.В.Бобылева пространственно однородного уравнения Больцмана.

Параметры модели выбирались следующими: число частиц порядка $N = 25000$, которые в начальный момент времени имеют распределение вероятностей, соответствующее точному решению А.В.Бобылева (одночастичная функция распределения зависит только от кинетической энергии частиц). Фазовое пространство скоростей трехмерное. Промежуток времени выбора сталкивающихся пар частиц (шаг по времени) равен $\tau = 10^{-3}$.

Число повторных испытаний для выбора сталкивающихся пар на одном шаге по времени имеет порядок $Q(N) = 32000$. Интенсивность столкновений в вычислительном эксперименте выбиралась так, что $\Phi = 20$, если кинетическая энергия E каждой из сталкивающихся частиц не превосходит 10^6 . В противном случае полагаем величину $\Phi = 0$. Ячейки имеют вид сферических слоев с центром в точке O , при этом толщина каждого слоя равна 10^{-2} .

Результаты вычислительного эксперимента указывают на адекватность имитационного моделирования решению А.В.Бобылева с погрешностью порядка 7%.

Аналогичные вычислительные эксперименты выполнены для пространственно неоднородной модели, где также получены удовлетворительные результаты.

В третьей главе рассматривается модель разреженного газа [1], состоящего из одинаковых частиц, столкновения между которыми возможны лишь в том случае, когда векторы скоростей двух налетающих частиц ориентированы ортогонально друг другу. В этом случае выполняются законы сохранения импульса и кинетической энергии для пары сталкивающихся частиц. Покоящиеся частицы системы порождают структуру, которая является своеобразным «конденсатом» неподвижного вещества. Для описания динамики такого газа предложено кинетическое уравнение и выполнены вычислительные эксперименты, подтверждающие соответствие выбранной модели и прямого моделирования методом Монте-Карло процесса указанных столкновений. Приводится схема моделирования явления путем случайного розыгрыша (метод Монте-Карло). Тестируется сходимость результатов вычислительного эксперимента к точным решениям кинетического уравнения и решениям, полученным с помощью разностных схем.

При построении математической модели процесса соударений частиц на систему налагают следующие предположения физического характера :

- все частицы системы имеют одинаковые массы $m > 0$;
- в столкновениях участвуют только пары частиц, имеющие ортогонально направленные скорости в системе отсчета центра масс множества частиц, рассматриваемого в рамках модели;
- при столкновениях выполняется закон сохранения импульса и кинетической энергии.

Таким образом, в силу законов сохранения скорости сталкивающихся частиц $v \in \mathbb{R}_n$ и $u \in \mathbb{R}_n$ в предлагаемой модели преобразуются по следующему закону:

$$\begin{cases} v' = v + u, \\ u' = 0, \\ (v, u) = 0, \end{cases}$$

где символ «штрих» относится к скоростям частиц после столкновения.

Величина $(v, u) = \sum_{k=1}^n v_k u_k$ — скалярное произведение. Таким образом, в

процессе такого столкновения обязательно образуется покоящаяся частица, которая, по существу, выбывает из последующих взаимодействий, ибо в данной модели при столкновении с такой частицей происходит обмен импульсами. В кинетическом уравнении Больцмана

$$\frac{\partial}{\partial t} f(v, t) = S^{(v)}(f(., t)).$$

оператор столкновений $S^{(dv)}(f)$, соответствующий такому закону взаимодействия частиц имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} S^{(dv)}(f) = \delta_0(dv) & \left\{ \frac{1}{2} \int_{\{\mathbb{R}_n \setminus 0\} \times \{\mathbb{R}_n \setminus 0\}} \Phi(v, v_1) f(v) f(v_1) \delta_0(\cos(v, v_1)) dv dv_1 \right\} + \\ & + dv \left\{ \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}_n \setminus 0} \Phi(v - v_1, v_1) f(v, t) f(v_1, t) \delta_0(\cos(v - v_1, v_1)) dv_1 - \right. \\ & \left. - \int_{\mathbb{R}_n \setminus 0} \Phi(v, v_1) f(v, t) f(v_1, t) \delta_0(\cos(v, v_1)) dv_1 \right\}. \end{aligned}$$

Он состоит из двух компонент – сингулярной, задаваемой атомарной мерой Дирака $\delta_0(dv)$, сосредоточенной на покоящихся частицах, и абсолютно непрерывной компоненты с мерой Лебега dv . Сингулярная компонента описывает образование конденсированного вещества, состоящего из совокупности покоящихся частиц в системе отсчета, связанной с центром масс системы частиц.

Примером решения указанного уравнения при интенсивности столкновений $\Phi = 1$ является мера, состоящая из абсолютно непрерывной компоненты с нестационарным максвелловским распределением, и атомарной меры, эволюционирующей при $t \rightarrow +\infty$ к мере Дирака $\delta_0(dv)$:

$$f(dv, t) = \frac{1}{\pi \left(1 + \frac{t}{2\pi}\right)^2} \exp\left(-\frac{v^2}{1 + \frac{t}{2\pi}}\right) dv + \frac{t}{2\pi + t} \delta_0(dv)$$

Приведенная формула описывает «перекачку» вещества из подвижной

компоненты газа в неподвижную. Она является примером функционального решения задачи Коши при непрерывных начальных данных (распределение Максвелла). Очевидно, что для этого решения выполняются законы сохранения массы, средний импульс равен нулю, сохраняется средняя кинетическая энергия. Масса вещества в подвижной компоненте (совпадающая с вероятностью обнаружения частицы в подвижной компоненте) равна $\rho(t) = \frac{1}{1 + \frac{t}{2\pi}}$; полная масса неподвижной компоненты

(вероятность обнаружения частицы в неподвижной компоненте) равна $\frac{t}{2\pi + t}$;

температура неподвижной компоненты равна нулю. При этом температура газа $T^\circ(t)$ сосредоточена в подвижной компоненте и растет с течением времени пропорционально $1 + \frac{t}{2\pi}$. Выполняется уравнение состояния идеального газа (закон Клапейрона—Менделеева) $P = R\rho T^\circ$. На приведенном решении давление $P \equiv \text{const}$.

Для тестирования модели в рамках вычислительного эксперимента рассматривалась пространственно однородная задача с дискретным оператором столкновений

Положим, что дискретное множество скоростей Ω лежит в плоскости. Пусть в столкновениях участвовали только те пары частиц, у которых ортогональные направления движения и одинаковые значения кинетической энергией $E_k = 2^{k-1}$, $k = 1, 2, \dots$ (Величина кинетической энергии частицы массы m равна $\frac{1}{2}mv^2$). Для удобства вычислений потребуем, чтобы значение массы частицы $m = 2$. На каждом энергетическом уровне E_k выделим две пары взаимно ортогональных направлений, задаваемых единичными векторами

$$\begin{cases} e_1 = (1, 0), \\ e_2 = (0, 1), \end{cases} \quad \begin{cases} e_3 = (1, 1)/\sqrt{2}, \\ e_4 = (-1, 1)/\sqrt{2}. \end{cases}$$

Интенсивность столкновений частиц определим формулой $\Phi(v_1, v_2) = d_k$, $d_k \geq 0$, если значения скоростей пары сталкивающихся частиц принимают значения $v_{1,k}^\pm = \pm\sqrt{E_k}e_1$ и $v_{1,k}^\pm = \pm\sqrt{E_k}e_2$, либо $v_{1,k}^\pm = \pm\sqrt{E_k}e_3$ и $v_{1,k}^\pm = \pm\sqrt{E_k}e_4$. В остальных случаях положим значения $\Phi(v_1, v_2) = 0$. Зададим величину $d_0 = 0, E_0 = 0$. Таким образом, на каждом энергетическом уровне E_k ($k \neq 0$) имеется восемь значений скорости (с учетом знака относительно выбранных четырех направлений), которые участвуют в парных столкновениях. Конфигурация расположения скоростей на плоскости изображена на рис. 1.

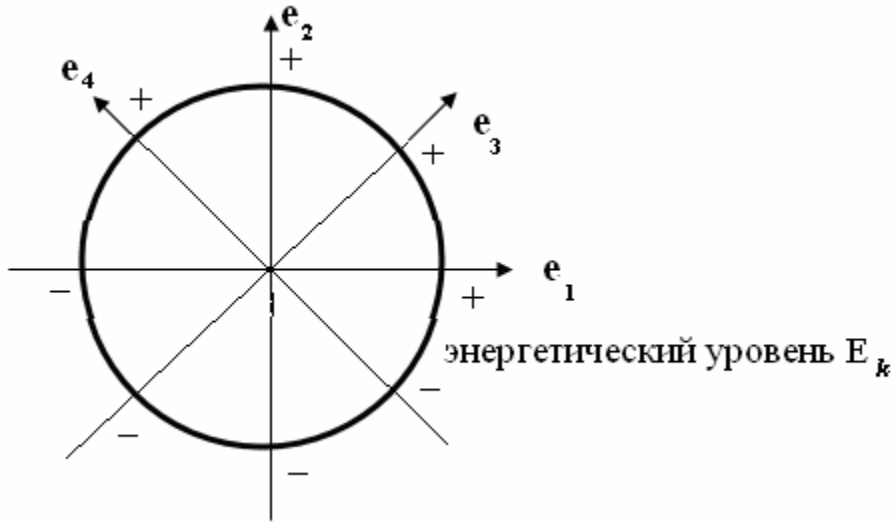


Рис.1. Диаграмма направления ортогональных пар скоростей сталкивающихся частиц

Тогда в этих обозначениях с учетом указанных требований на функцию Φ , пространственно однородное кинетическое уравнение принимает следующий вид:

$$\frac{df_0}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} d_k \left[f_{1,k}^+ f_{2,k}^+ + f_{1,k}^+ f_{2,k}^- + f_{1,k}^- f_{2,k}^+ + f_{1,k}^- f_{2,k}^- + f_{3,k}^+ f_{4,k}^+ + f_{3,k}^+ f_{4,k}^- + f_{3,k}^- f_{4,k}^+ + f_{3,k}^- f_{4,k}^- \right],$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{df_{1,k}^+}{dt} = d_{k-1} f_{3,k-1}^+ f_{4,k-1}^- - d_k f_{1,k}^+ [f_{2,k}^+ + f_{2,k}^-], \quad \frac{df_{3,k}^+}{dt} = d_{k-1} f_{1,k-1}^+ f_{2,k-1}^+ - d_k f_{3,k}^+ [f_{4,k}^+ + f_{4,k}^-], \\ \frac{df_{1,k}^-}{dt} = d_{k-1} f_{3,k-1}^- f_{4,k-1}^+ - d_k f_{1,k}^- [f_{2,k}^+ + f_{2,k}^-], \quad \frac{df_{3,k}^-}{dt} = d_{k-1} f_{1,k-1}^- f_{2,k-1}^- - d_k f_{3,k}^- [f_{4,k}^+ + f_{4,k}^-], \\ \frac{df_{2,k}^+}{dt} = d_{k-1} f_{3,k-1}^+ f_{4,k-1}^+ - d_k f_{2,k}^+ [f_{1,k}^+ + f_{1,k}^-], \quad \frac{df_{4,k}^+}{dt} = d_{k-1} f_{1,k-1}^- f_{2,k-1}^+ - d_k f_{4,k}^+ [f_{3,k}^+ + f_{3,k}^-], \\ \frac{df_{2,k}^-}{dt} = d_{k-1} f_{3,k-1}^- f_{4,k-1}^- - d_k f_{2,k}^- [f_{1,k}^+ + f_{1,k}^-], \quad \frac{df_{4,k}^-}{dt} = d_{k-1} f_{1,k-1}^+ f_{2,k-1}^- - d_k f_{4,k}^- [f_{3,k}^+ + f_{3,k}^-]. \end{array} \right.$$

Выделяется специальный класс решений этой системы уравнений, симметричных относительно направления движения частиц. Для этого примем, что решение системы зависит только от энергетического уровня, т.е.

$$f_{i,k}^{\pm}(t) \equiv \varphi_k(t), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Тогда концентрация газа n_k на энергетическом уровне E_k вычисляется по формуле

$$n_k(t) = \sum_{i=1}^4 (f_{i,k}^+ + f_{i,k}^-) = 8\varphi_k(t).$$

В этом случае уравнения для концентраций частиц на энергетических уровнях имеют следующий вид:

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} d_{k-1}^* n_{k-1}^2 - d_k^* n_k^2, \quad k=1,2,\dots, \quad d_k^* = \frac{1}{4} d_k$$

$$\frac{dn_0}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} d_k^* n_k^2.$$

Отметим, что эта система уравнений является частным случаем уравнения Смолуховского:

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{k-1} D_{k-i,i} n_{k-i} n_i - \sum_{i=1}^{\infty} D_{k,i} n_k n_i, \quad k=1,2,\dots,$$

для которого разработана подробная теория.

Для компьютерного моделирования процесса ортогональных столкновений частиц применен алгоритм повторных розыгрышей столкновений, разработанный в [5] и оказавшийся весьма эффективным для моделирования процессов коагуляции. В качестве теста использовался пример описанной выше дискретной модели. Сравнение одновременно проводилось значений концентраций частиц $n_k(t)$ на энергетических уровнях $E_k = 2^{k-1}$, $k=1,2,\dots$, полученных методом имитационного моделирования столкновений частиц, а также аналитическим решением и разностным решением уравнений Рикатти по схеме Эйлера.

Для энергетического уровня E_1 - это уравнение Бернулли и соответственно имеем аналитическое решение:

$$n_1(t) = \frac{n_1(0)}{1 + d_1^* n_1(0)t}.$$

Концентрации на последующих уровнях подчиняются рекуррентной последовательности уравнений Рикатти, которые имеют неотрицательное решение при всех $t \geq 0$, если начальные данные $n_k(0)$ неотрицательные.

Пример типичного сравнительного расчета для одной истории описанного вычислительного эксперимента приведен на рис. 2. В этом примере использовались следующие параметры моделирования:

$$N = 2,4 \cdot 10^3, \quad N^* = 4, \quad d_k = 10, \quad k \geq 1, \quad d_0 = 0, \quad k_0 = 10, \quad \tau = 10^{-3}, \quad Q(N) = 9,7 \cdot 10^3, \quad T = 8.$$

На каждом из восьми направлений движения в начальный момент времени загружалось по 300 частиц. При прямом моделировании, как и ранее в модели Больцмана применялся алгоритм с повторными розыгрышами пар взаимодействующих частиц на каждом шаге по времени с исключением уже разыгранных частиц на данном шаге.

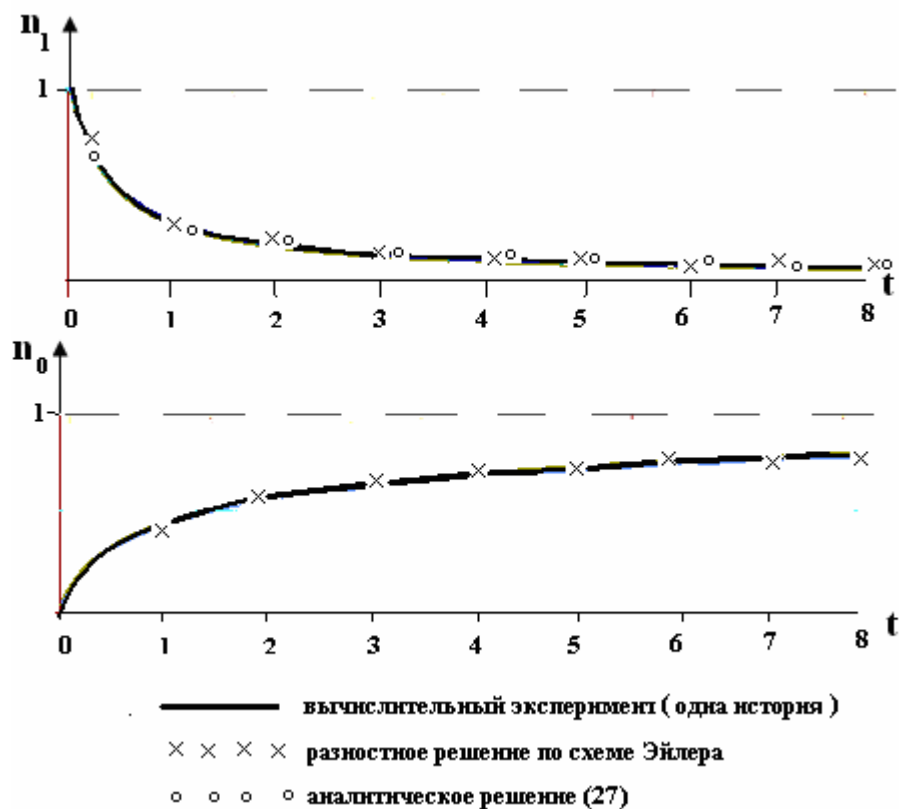


Рис. 2. Результаты компьютерного моделирования процесса ортогональных столкновений (графики концентраций $n_1(t)$ и $n_0(t)$).

Погрешности вычислительного эксперимента при рассматриваемых условиях не превосходили 2%.

В четвертой главе применяются алгоритмы моделирования [2—5] для процессов коагуляции (слияния) частиц. При прямом моделировании, как и ранее в модели Больцмана применялся алгоритм с повторными розыгрышами пар взаимодействующих частиц на каждом шаге по времени с исключением уже разыгранных частиц на данном шаге. Частицы, помещенные в ячейку D_l в момент времени t_n , могут участвовать в парных взаимодействиях, приводящих к их коагуляции. Акты парных столкновений и коагуляции разыгрываются следующим образом.

Рассмотрим множество Δ , состоящее из пар номеров (i, j) , $1 \leq i < j \leq N$. В каждой ячейке D_l в момент времени t_n разыгрываются независимые случайные величины $\pi_l^{(s)}(t_n)$ со значениями в Δ так, что $P\{\pi_l^{(s)}(t_n) = (i, j)\} = 1/C_N^2$, $1 \leq s \leq Q(N)$. Возможные пары сталкивающихся частиц в ячейке D_l в момент времени t_n выберем как значения набора $\{\pi_l^{(s)}(t_n)\}_{s=1}^{Q(N)}$, накладывая дополнительное ограничение: если хотя бы один из номеров, входящих в

пару $\pi_i^{(s)}(t_n)$ при $s \geq 2$, входит в одну из пар $\pi_i^{(1)}(t_n), \dots, \pi_i^{(s-1)}(t_n)$, то для пары $\pi_i^{(s)}(t_n)$ коагуляция в ячейке D_i в момент времени t_n не происходит. Тем самым исключаются многократные взаимодействия для каждой частицы внутри ячеек. После завершения розыгрыша актов коагуляции во всех ячейках, содержащих частицы, осуществляется перемещение частиц между ячейками. Обозначим величиной $\langle N_k^{(l)}(t_n) \rangle$ среднее число частиц массы k в ячейке D_i в момент времени $t_n \geq 0$. Положим

$$u_{k,N}^{(l)}(t_n) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\langle N_k^{(l)}(t_n) \rangle}{Nh}$$

— средняя концентрация частиц массы k в ячейке D_i в момент времени t_n .

Предположим, что при числе частиц $N \rightarrow \infty$ величина повторных испытаний $Q(N)$ такова, что

$$\frac{Q(N)}{N} \rightarrow \infty$$

Тогда при каждом n существуют предельные концентрации частиц $u_k^{(l)}(t_n) = \lim_{N \rightarrow \infty} u_{k,N}^{(l)}(t_n)$, подчиняющиеся разностному уравнению

$$u_k^{(l)}(t_{n+1}) = u_k^{(l-v_k)}(t_n) + \tau S_k^{(M_0)}(u_{\bullet}^{(l-v_k)}(t_n)).$$

Поскольку решения разностного уравнения сходятся к решению уравнения Смолуховского, то отсюда следует сходимость метода имитационного моделирования к решениям уравнения Смолуховского.

Следует подчеркнуть специфику, отличающую пространственно однородные модели от пространственно неоднородных. В пространственно однородных уравнениях Смолуховского функция Φ является интенсивностью слияний (т.е. вероятность слияния пары частиц равна $\Phi \tau$), а в пространственно неоднородном случае – вероятностью слияния частиц при парных соударениях.

Тестирование моделей медленной коагуляции. Численное моделирование коагуляции по алгоритму с повторным выбором пар взаимодействующих частиц проводилось аналогично модели бальцмановского газа. Сравнение имитационного результатов моделирования проводилось с аналитическими решениями и вычислениями методом разностных схем. Например, в пространственно однородной модели для числа частиц N порядка 200. Для времени взаимодействия частиц τ порядка 10^{-3} для одной истории имитационного моделирования для ядра $\Phi = 1$ типичная погрешность не превышала 2% для общей концентрации частиц и отдельных компонент спектра.

Основные результаты

Основными научными результатами, полученными лично автором, являются:

1. Проведение вычислительного эксперимента на основе имитационной модели поведения бальцмановского газа. Проведение детального сравнительного анализа полученных результатов с точными решениями.
2. Алгоритм и программная реализация на ЭВМ прямого моделирования случая ортогональных соударений, приводящего к пространственно однородному уравнению Смолуховского.
3. Проведение вычислительного эксперимента на основе прямого моделирования процесса пространственно неоднородной парной коагуляции для широкого класса интенсивностей взаимодействия частиц и начальных данных. Проведение детального сравнительного анализа полученных результатов.
4. Алгоритм и программная реализация на ЭВМ прямого имитационного моделирования процесса парных столкновений в пространственно однородном и неоднородном случае для бальцмановского газа.

Основные результаты опубликованы в работах

1. Галкин А.В. Математическое моделирование газа, образующего конденсированную структуру // Математическое моделирование, 2009, т. 21, №2, с. 103—117.
2. Галкин А.В. Математическая модель динамики сливающихся частиц //X международный семинар "Супервычисления и математическое моделирование", Саров, 2008, С. 52—54.
3. Галкин А.В. Моделирование процесса пространственно неоднородной коагуляции//Тезисы 4-й международной конференции "Математические идеи П.Л.Чебышева и их приложение к современным проблемам естествознания", 2008, С. 17—18.
4. Galkin V.A., Galkin A.V., Saveliev V.I. Mathematical simulation of dynamics in cluster systems of Boltzmann – Smoluchowski type//Abstracts of 20-th International Conference on Transport theory, Obninsk, 2007, p. 67—70.

5. Галкин В.А., Галкин А.В. Метод Монте-Карло прямого моделирования пространственно неоднородной коагуляции// Труды 3-й международной конференции "Математические идеи П.Л.Чебышева и их приложение к современным проблемам естествознания", 2008, С. 8—18.
6. Галкин А.В., Галкин В.А. Математическое моделирование роста агломератов// Сборник научных трудов, т. 29, Физико—математические и технические науки, 2008, с. 16—23.
7. Галкин В. А., Галкин А. В., Галкина И.В., Здоровцев П.А., Осецкий Д.Ю., Савельев В.И. Разработка и исследование математических моделей сложных систем// Труды регионального конкурса научных проектов в области естественных наук, 2008, вып. 14, с. 11—24.
8. Галкин В.А., Галкина И.В., Осецкий Д. Ю., Рыжиков Д. А., Галкин А. В. Математическое моделирование процессов спекания порошковых материалов и роста агломератов//Труды Регионального Конкурса научных проектов в области естественных наук, Калуга, 2007, С. 42—56.
9. Галкин В.А., Галкин А.В. Математическое моделирование пространственно неоднородной коагуляции. 2006, Международный семинар "Супервычисления и математическое моделирование", Саров—2006.
10. Galkin V.A., Galkin A.V. Quasilinear non—local Hopf—type equation describing clusters growth due to mutual connections between elements in the interacting couples of clusters// Abstracts of EQUADIFF—2007 , Vienna, Austria, 2007, p.52.
11. Галкин В. А., Галкин А. В., Галкина И.В., Осецкий Д.Ю., Савельев В.И. Разностный метод для решения уравнения Больцмана—Смолуховского //в сб. "Труды регионального конкурса научных проектов в области естественных наук" , 2007, вып. 13, с. 46—50 .
12. Галкин А. В., Галкин В.А., Осецкий Д.Ю. Математическое моделирование роста дефектов в материалах ЯЭУ тезисы доклада// Труды международной конференции " Безопасность АЭС и подготовка кадров". Тезисы докладов X международной конференции, с. 119—120.