

Старший преподаватель П.А. Здоровцев
(Обнинский институт атомной энергетики – филиал НИЯУ МИФИ)
кафедра прикладной математики, тел. (48439) 3-17-82

Имитационное моделирование процесса медленной пространственно неоднородной коагуляции

Рассматривается новая модель имитационного моделирования процесса пространственно неоднородной коагуляции, т.е. объединения мелких частиц дисперсных систем в более крупные, для произвольного спектра скоростей свободного переноса частиц. Производится сравнение результатов моделирования с известными аналитическими и численными решениями.

A new model of spatially inhomogeneous coagulation, i.e. formation of larger clusters by joint interaction of smaller ones, is under study. The results of simulation are compared with known analytical and numerical solutions.

Ключевые слова: имитационное моделирование, коагуляция, метод Монте-Карло.

Актуальность темы исследования определяется тем, что явление коагуляции, т.е. объединения мелких частиц дисперсных систем в более крупные, является достаточно распространенным в реальных практических задачах в области метеорологии и экологии, материаловедении, и т.д.

Необходимость применения математического моделирования для описания динамики систем коагулирующих частиц объясняется необходимостью построения соответствия между распределением частиц в реальных физических системах и решениями уравнения Больцмана. В настоящее время найдены точные решения уравнения Больцмана для сравнительно простых случаев малых градиентов температуры, скорости и концентраций в газе. Уравнение коагуляции Смолуховского, описывающее динамику коагулирующих дисперсных систем зачастую не имеет классического аналитического решения, что делает необходимым применение методов прямого имитационного моделирования для описания состояния системы.

Широкий спектр приложений теории коагуляции в науке и технике ставит задачу разработки адекватных математических моделей динамики дисперсных систем, состоящих из взаимодействующих между собой частиц, их обоснования и тестирования, а также создания алгоритмов и программного обеспечения для имитационного моделирования на уровне отдельных частиц, основанного на применении метода Монте-Карло.

Рассмотрим систему, состоящую из статистически большого количества хаотически движущихся вдоль одной оси частиц. Ключевой характеристикой, определяющей поведение частицы, является ее масса m . Для упрощения, без ограничения общности, ограничим значения масс частиц натуральными значениями. Скорость переноса частиц системы между актами взаимодействия v_m зависит от их массы. В процессе своего движения частицы системы испытывают парные соударения.

Слияние двух частиц с массами m_1 и m_2 в кластер суммарной массы происходит с некоторой вероятностью Φ_{m_1, m_2} , которая определяется особенностями рассматриваемых физических систем. Пусть концентрация частиц массы m в окрестности точки x в момент времени $t \geq 0$ равна $u_m(x, t)$, $m = 1, 2, \dots$. Эволюция множества концентраций частиц различных масс во времени определяется решением задачи Коши для пространственно неоднородного уравнения Смолуховского:

$$\frac{\partial u_m(x, t)}{\partial t} + v_m \frac{\partial u_m(x, t)}{\partial x} = S_m(u(x, t)),$$

$$x \in \mathbb{R}, \quad m \in \mathbb{N}, \quad t \geq 0, \quad (1)$$

где оператор столкновений Смолуховского

$$S_m(u(x, t)) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{m-1} \Phi_{m-j, j} u_{m-j} u_j - u_m \sum_{j=1}^{\infty} \Phi_{m, j} u_j \quad (2)$$

Уравнение (1) дополняется начальными данными:

$$u_k(x, 0) = u_k^0(x) \geq 0, \quad k \in \mathbb{N}, \quad x \in \mathbb{R}. \quad (3)$$

Теорема существования обобщенных решений задачи Коши (1) – (3) доказана в [1] методом компенсированной компактности для последовательности гладких неотрицательных решений конечномерных задач (1)–(3)

$\{u_{m, M_0}\}_{M_0=1}^\infty$ при $M_0 \rightarrow \infty$, полученных заменой оператора (2) в уравнении (1) его конечномерными аппроксимациями $S_k^{(M_0)} = I_m^{(M_0)} S_m(I^{(M_0)} \cdot u)$, где $I_m^{(M_0)}$ – индикатор натуральных чисел, не превосходящих M_0 .

Во множестве пространственных координат размещены частицы, занумерованные натуральными числами $1 \leq i \leq N$, $N \geq 1$. Каждому номеру i соответствует величина $m_i(t)$, которая равна массе i -й частицы, а ее пространственные координаты обозначим $x_i(t)$. Если $m_i(t) = 0$ для всех ячеек, то частица с номером i отсутствует в системе. Условимся, если частица присутствует в системе, то она может находиться в данный момент времени только в одной ячейке. Таким образом, в каждый момент времени состояние системы задается распределением масс $m(t) = \{m_i(t)\}_{i=1}^N$ и пространственных координат $\{x_i(t)\}_{i=1}^N$

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

Частицы системы в момент времени t_n могут участвовать в парных взаимодействиях, приводящих к их коагуляции. Акты парных столкновений и коагуляции разыгрываются случайным образом так, что:

$$P\{\pi^{(s)}(t_n) = (i, j)\} = 1/C_N^2, \quad (4)$$

$$1 \leq s \leq Q(N)$$

Возможные пары сталкивающихся частиц системы 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 $\pi^{(s)}(t_n)$ коагуляция в системе в момент времени t_n не происходит. Тем самым исключаются многократные взаимодействия для каждой частицы коагулирующей системы.

Подсчитаем вероятность выбора пары взаимодействующих частиц с номерами (i, j) $1 \leq i < j \leq N$. Вероятность выбора этой пары на s -м шаге в серии $1 \leq s \leq Q(N)$ независимых испытаний равна:

$$\left(\frac{C_{N-2}^2}{C_N^2}\right)^{s-1} \cdot \frac{1}{C_N^2}, \quad (5)$$

где первый сомножитель является вероятностью того, что в первых $(s-1)$ -м испытаниях во множестве Δ не появлялась пара с заданными номерами частиц i или j . Второй сомножитель – это вероятность выбора искомой пары на последнем шаге. Таким образом, вероятность выбора пары (i, j) из множества Δ на одном из шагов в серии $1 \leq s \leq Q(N)$ независимых испытаний равна сумме геометрической прогрессии указанных вероятностей, которая равна:

$$\frac{1 - \left(\frac{C_{N-2}^2}{C_N^2}\right)^{Q(N)}}{C_N^2 - C_{N-2}^2} \quad (6)$$

Если число повторных испытаний $Q(N)$ по выбору пары взаимодействующих частиц таково, что величина $Q(N)N^{-1} \rightarrow \infty$, то при больших значениях N имеем:

$$\frac{1 - \left(\frac{C_{N-2}^2}{C_N^2}\right)^{Q(N)}}{C_N^2 - C_{N-2}^2} \sim \frac{1}{2N} \quad (7)$$

Возможность коагуляции для выбранных вышеуказанным способом пар номеров сталкивающихся частиц определим разыгрываем совокупности независимых случайных величин $\eta_{(i,j)}(t_n)$, $(i, j) \in \Delta$, принимающих два значения: 0 и 1. Значение 0 означает запрет коагуляции, а 1 – наличие коагуляции для пары частиц с номерами (i, j) если их пространственные координаты в мо-

мент времени t_n подчиняются условию $|x_i(t_n) - x_j(t_n)| \leq h$, где $h > 0$ – характерный пространственный масштаб парного взаимодействия частиц. Розыгрыш этих значений подчиним следующим правилам. Положим, что $\eta_{(i,j)}(t_n) = 0$, если $m_i(t_n)m_j(t_n) = 0$, т.е. при отсутствии, по крайней мере, одной из частиц в паре коагуляция не происходит. Если $m_i(t_n)m_j(t_n) > 0$, то значения случайной величины $\eta_{(i,j)}(t_n)$ задаются условной функцией распределения:

$$P\{\eta_{(i,j)}(t_n) = 1\} = \Phi_{m_i(t_n), m_j(t_n)}, \quad (8)$$

$$P\{\eta_{(i,j)}(t_n) = 0\} = 1 - \Phi_{m_i(t_n), m_j(t_n)}, \quad (9)$$

где $0 \leq \Phi_{m_1, m_2} = \Phi_{m_2, m_1} \leq 1$ – вероятность коагуляции сталкивающейся пары частиц с массами m_1 и m_2 .

Если пара $(i, j) \in \Delta$ выбрана и значение $\eta_{(i,j)}(t_n) = 1$, то значение вектора состояния $m(t_n)$ преобразуется по следующему правилу:

$$m_\alpha(t_n) \mapsto \bar{m}_\alpha(t_n) = m_\alpha(t_n), \quad \alpha \neq i, \quad (10)$$

$$m_i(t_n) \mapsto \bar{m}_i(t_n) = m_i(t_n) + m_j(t_n)$$

$$m_j(t_n) \mapsto \bar{m}_j(t_n) = 0.$$

Если же $\eta_{(i,j)}(t_n) = 0$, то значения $m_\alpha(t_n)$, $1 \leq \alpha \leq N$ остаются неизменными. Указанная процедура выполняется для всех пар выбранных номеров последовательным перебором $\pi^{(1)}(t_n), \dots, \pi^{(Q(N))}(t_n)$.

Рассмотрим числа заполнения пространственных ячеек с центром в заданных точках $x^{(l)} \in O_x$, которые обозначим:

$$D_l \stackrel{def}{=} \{x \in O_x : |x - x^{(l)}| \leq \frac{h}{2}\}, \quad (11)$$

частицами массы $m \in \mathbb{N}$:

$$N_m^{(l)}(t_n) \stackrel{def}{=} \sum_{i=1}^N \delta_{m, m_i(t_n)} \theta(0.5h - |x_i(t_n) - x^{(l)}|). \quad (12)$$

Здесь θ – функция Хевисайда. Вышеуказанной процедуре розыгрыша актов коагуляции сталкивающихся частиц в ячейке D_l соответствует преобразование чисел заполнения $N_k^{(l)}(t_n) \mapsto \bar{N}_k^{(l)}(t_n)$.

После завершения розыгрыша актов слияния частиц коагулирующей пространственно неоднородной системы осуществляется перемещение частиц вдоль пространственной оси. Положим, что v_m – скорость пространственного переноса частицы массы $k \in \mathbb{N}$. Размер пространственных ячеек h и шаг по времени τ подчиним условию $\tau h^{-1} = 1$. Тогда, если частица с номером i имеет массу m , то за время τ она перемещается в пространстве Ox по закону $x_i(t_n + \tau) = x_i(t_n) + v_m \tau$. Тем самым определяется состояние коагулирующей системы в момент времени t_{n+1} .

Далее вновь разыгрываются акты коагуляции, осуществляется пространственный перенос и т.д. Таким образом, полностью определена эволюция системы для всех $t_n \geq 0$.

Обозначим величиной $\langle N_m^{(l)}(t_n) \rangle$ среднее число частиц массы m в ячейке D_l в момент времени $t_n \geq 0$. Положим:

$$u_{m,N}^{(l)}(t_n) \stackrel{def}{=} \frac{\langle N_m^{(l)}(t_n) \rangle}{Nh}, \quad (13)$$

– средняя концентрация частиц массы m в ячейке D_l в момент времени t_n .

Воспользуемся приведенной в работе [2] разностной схемой для поиска решения задачи Коши уравнения Смолуховского.

Для проверки корректности построенной модели воспользуемся условиями тестовых примеров работ [3], [4].

Положим начальные условия и значения ядер коагуляции:

$$\begin{aligned} \Phi_{m_1, m_2} &= |m_1 - m_2|, \\ \varphi_1(x) = \varphi_2(x) &= \frac{1}{2} \theta(x) \theta(1-x), \quad |x| < \infty. \end{aligned} \quad (14)$$

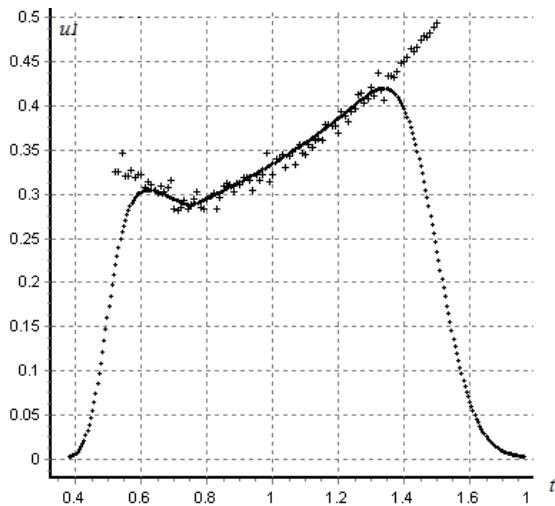


Рисунок 1 - Начальная загрузка 10 тыс. частиц; — Разностная схема, +++ Вычислительный эксперимент. Сечение $u_1(t)$ при $x = 1,5$.

В следующем тестовом примере положим интенсивность коагуляции, начальные скорости и массы частиц в виде:

$$\begin{aligned} \Phi_{m_1, m_2} &= 1, \\ v_k &= \frac{(-1)^k}{k}, \\ \phi(x) &= \begin{cases} \frac{1}{2^k} e^{-x}, & 0 < x < 1 \\ 0, & x > 1 \end{cases}. \end{aligned} \quad (15)$$

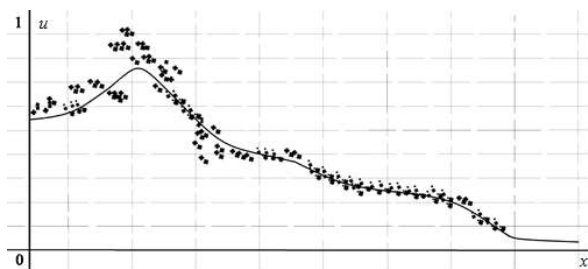


Рисунок 2 - Начальная загрузка 20 тыс. частиц — Разностная схема, +++ Вычислительный эксперимент. Полная концентрация $u(x)$ при $t = 0,5$.

На основе анализа полученных данных можно сделать вывод о наличии достаточно хорошего согласования между результатами предложенного алгоритма прямого имитационного моделирования и аналитическими решениями задачи Коши для уравнения Смолуховского пространственно неоднородной коагуляции.

ЛИТЕРАТУРА

1 Галкин, В.А. Анализ математических моделей: системы законов сохранения, уравнения Больцмана и Смолуховского [Текст] / В.А. Галкин. – М.: Бином. – 2009.

2 Здорозцев, П.А. Вычислительная модель пространственно неоднородной медленной коагуляции [Текст] / П.А. Здорозцев и др. // Журнал вычислительной математики и математической физики.– 2012.–Т. 52. - № 11. – С. 2101–2112.

3 Здорозцев, П.А. Решения моментных цепочек для уравнения переноса и их приближения [Текст] / П.А. Здорозцев и др. // Математическое моделирование.– 2012.– Т. 24. - № 11.– С. 65-71.

REFERENCES

1 Galkin, V.A. Analysis of mathematical models of the system of conservation laws, Boltzmann and Smoluchowski equation [Text] / V.A. Galkin. - M.: Binom. - 2009.

2 Zdorovtsev, P.A. The computational model of a spatially inhomogeneous slow coagulation [Text] / P.A. Zdorovtsev et al // Journal of computational mathematics and mathematical physics. - 2012. - V. 52. - № 11. - P. 2101-2112.

3 Zdorovtsev, P.A. Solutions of moment sequence for the transport equation and its approximation [Text] / P.A. Zdorovtsev et al // Mathematical modeling. - 2012. - V. 24. - № 11. - P. 65-71.