

УДК 531.714.5:519.8

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧИ КОАГУЛЯЦИИ ЧАСТИЦ С ИСТОЧНИКОМ

В. А. Галкин¹, Т. В. Гавриленко², А. А. Егоров³, Н. И. Ладыгин⁴, В. В. Терещенко⁵
Сургутский государственный университет, ¹ val-gal@yandex.ru, ² taras.gavrilenko@g.ail.com,
³ eaafit@gmail.com, ⁴ mr.bugai86@yandex.ru, ⁵ integral@mail.ru

Предоставлены результаты численного моделирования коагуляции частиц с рождением и без, на основе заданных уравнений. Реализовано и протестировано алгоритмическое и программное обеспечение в основе которого лежит модель из теории кинетической коагуляции. Проведено сравнение результатов решения уравнений классическими методами численного моделирования и решения полученной моделью.

Ключевые слова: математическое моделирование, коагуляция частиц, уравнение Смолуховского.

NUMERICAL MODELING OF PROBLEM OF PARTICLES WITH SOURCE COAGULATION

V. A. Galkin¹, T. V. Gavrilenko², A. A. Egorov³, N. I. Ladygin⁴, V. V. Tereshenko⁵
Surgut State University, ¹ val-gal@yandex.ru, ² taras.gavrilenko@g.ail.com, ³ eaafit@gmail.com,
⁴ mr.bugai86@yandex.ru, ⁵ integral@mail.ru

The article presents the results of numerical modeling of coagulation for particles with and without production, based on set equations. Algorithmic supply and software, based on model of kinetic coagulation, are tested and implemented. The results of solution of the equations using classical numeric modeling methods and the solution using current method are compared.

Keywords: mathematical modeling, particle coagulation, Smoluchowski equation.

Введение

Решение задач моделирования физических процессов и моделирования динамических систем, часто сводится к решению системы неоднородных дифференциальных уравнений. При этом точное (аналитическое) решение находится далеко не всегда, даже для уравнений первого порядка. В данной работе рассматривается алгоритм, позволяющий с допустимым приближением найти решение задачи с использованием модели быстрой и медленной коагуляции.

Математическая модель

Математическая модель физического процесса, состоящая из большого количества частиц, основывается на фундаментальных соотношениях баланса — законе сохранения. Эволюция данных физических систем моделируется обобщённым уравнением Больцмана [1]:

$$\frac{df^{(\omega)}}{dt} + \operatorname{div}_x \left(v^{(\omega)} f^{(\omega)}(x, t) \right) = S^{(\omega)} \left(f^{(\cdot)}(x, t) \right), \quad (1)$$

$$\omega \in \Omega, t \in \mathbb{R}_1^+, x \in \mathbb{R}_n,$$

где f описывает состояния физической системы в каждый момент времени $t \geq 0$ в точках с пространственными координатами $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$. Скорость свободного переноса задается $v^{(\omega)}$ и определяет скорость движения элементов физической системы. Множество Ω задается метрическим локально компактным счетно-конечным пространством, т.е. может быть снабжено дискретной метрикой. Уравнение (1) описывает соотношение баланса, сопровождающего процесс моделирования системы взаимодействия частиц. Например, данная модель может описывать процесс взаимодействия нано- и микро-капель в аэрозольном облаке. Состояние моделируемого процесса задается вектором f в каждый момент времени t . Взаимодействие частиц задается оператором столкновений S . Взаимодействие частиц носит нелинейный характер в виду нелинейности операторов столкновений [1, 2, 3, 4].

Для моделей вида (1) кинетической теории коагуляции (Смолуховского), где фазовое пространство — это массы частиц, оператор столкновений S определен соотношениями:

$$\begin{aligned}
 S^{(\omega)}(f^{(\cdot)}) &= \frac{1}{2} \int_0^\omega \Phi(\omega - \omega', \omega') f^{(\omega - \omega')} f^{(\omega')} d\omega' - \\
 &- f^{(\omega)} \int_0^\infty \Phi(\omega, \omega') f^{(\omega')} d\omega', \quad \omega \in \mathbb{R}_1^+, \\
 \Phi(\omega, \omega') &= \Phi(\omega', \omega) \geq 0.
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

Оператор столкновений Смолуховского для коагуляции частиц с дискретными массами определен соотношением:

$$\begin{aligned}
 S^{(\omega)}(f^{(\cdot)}) &= \frac{1}{2} \sum_{\omega'=1}^{\omega-1} \Phi(\omega - \omega', \omega') f^{(\omega - \omega')} f^{(\omega')} d\omega' - \\
 &- f^{(\omega)} \sum_{\omega'=1}^{\infty} \Phi(\omega, \omega') f^{(\omega')} d\omega', \quad \omega \in \Omega = \mathbb{N}.
 \end{aligned}
 \tag{3}$$

Наличие в физической системе источников частиц, действующих с неотрицательной интенсивностью q , отражается добавлением этой величины к оператору столкновений S [1, 2].

Для пространственно однородного случая модель (1) с учётом добавления оператора Смолуховского и с источника частиц выглядит следующим образом:

$$\frac{du^{(\omega)}(t)}{dt} = S^{(\omega)}(u^{(\cdot)}(t)) + q^{(\omega)}(t), \quad \omega \in \mathbb{R}_1^+, t > 0,
 \tag{4}$$

где S оператор Смолуховского (3), а $q^{(\omega)}(t) \geq 0$ интенсивность рождения частиц.

Для представления данного уравнения, как задачи Коши, начальные данные задаются выражением:

$$u^{(\omega)} \Big|_{t=0} = u_0^{(\omega)}, \quad \omega \in \mathbb{R}_1^+.
 \tag{5}$$

Численное моделирование

Следующая разностная схема задает приближенный численный метод решения задачи Коши (4), (5):

$$\begin{cases}
 \frac{u_\alpha^{(\omega_i)}(t+\tau) - u_\alpha^{(\omega_i)}(t)}{\tau} = S_h^{\omega_i}(u_\alpha^{(\cdot)}(t)) + q_n^{(\omega_i)} \\
 t \in \mathbb{R}_1^+, \quad \omega \in \mathbb{R}_1^+, \\
 u_\alpha^{(\omega_i)}(t) = u_0^{(\omega_i)}, \quad 0 \leq t < \tau.
 \end{cases}
 \tag{6}$$

Сходимость данной разностной схемы доказано В. А. Галкина в работах [1, 2].

В данной работе рассматривается случай, когда фазовое пространство $\Omega = \{1\}$, тогда оператор Смолуховского для коагуляции частиц с дискретными массами выглядит следующим образом:

$$S^{(\omega)}(u^{(\cdot)}(t)) = -\Phi(\omega, \omega) u^{(\omega)}(t)^2, \quad \omega \in \Omega = \{1\}.
 \tag{7}$$

Перепишем (4) с учётом (7), получим:

$$\frac{du^{(\omega)}(t)}{dt} = q^{(\omega)}(t) - \Phi(\omega, \omega) u^{(\omega)}(t)^2, \quad \omega \in \{1\}, t > 0.
 \tag{8}$$

Запишем разностную схему (6) для (8):

$$\begin{cases}
 \frac{u^{(\omega)}(t+\tau) - u^{(\omega)}(t)}{\tau} = q^{(\omega)}(t) - \Phi(\omega, \omega) u^{(\omega)}(t)^2, \\
 t \in \mathbb{R}_1^+, \quad \omega \in \{1\}, \\
 u^{(\omega)}(0) = u_0^{(\omega)}, \quad 0 \leq t < \tau
 \end{cases}
 \tag{9}$$

Из (9) выразим $u^{(\omega)}(t + \tau)$, получим:

$$u^{(\omega)}(t + \tau) = u^{(\omega)}(t) + \tau \left(q^{(\omega)}(t) - \Phi(\omega, \omega) u^{(\omega)}(t)^2 \right). \quad (10)$$

Выражение (10) является численным решением задачи Коши (4), (5), когда фазовое пространство $\Omega = \{1\}$ [1, 2].

Результаты и их сравнение с моделью коагуляции

В данной статье рассматривался процесс коагуляции частиц с источником, где источник задан функцией:

$$q^{(\omega)}(t) = |\sin(2\pi t)|,$$

а интенсивность взаимодействия частиц $\Phi(\omega, \omega) = 0$. Таким образом, модель коагуляции представляет собой уравнение:

$$\frac{du(t)}{dt} = |\sin(2\pi t)|, \quad t > 0. \quad (11)$$

Аналитическое решение (11):

$$u(t) = \frac{2}{\pi} \left(t - \frac{1}{(2\pi) * \arccos(\cos(2\pi t) * \text{sgn}(\sin(2\pi t)))} \right) + \frac{1}{2\pi} (1 - \cos(2\pi t) \text{sgn}(\sin(2\pi t))) \quad (12)$$

или

$$u(t) = (t * 2 - (t * 2) \bmod 1) \int_0^\tau |\sin(2\pi t)| + \int_0^\infty |\sin(2\pi t)|, \quad \tau = 1/2. \quad (13)$$

Проведён вычислительный эксперимент для моделирования процесса коагуляции с источником и интенсивностью взаимодействия частиц $\Phi(\omega, \omega) = 0$.

Сравнение аналитического решения и численного решения уравнения (11) при заданном шаге по времени $\tau = 0.05$ отображено на рис. 1.

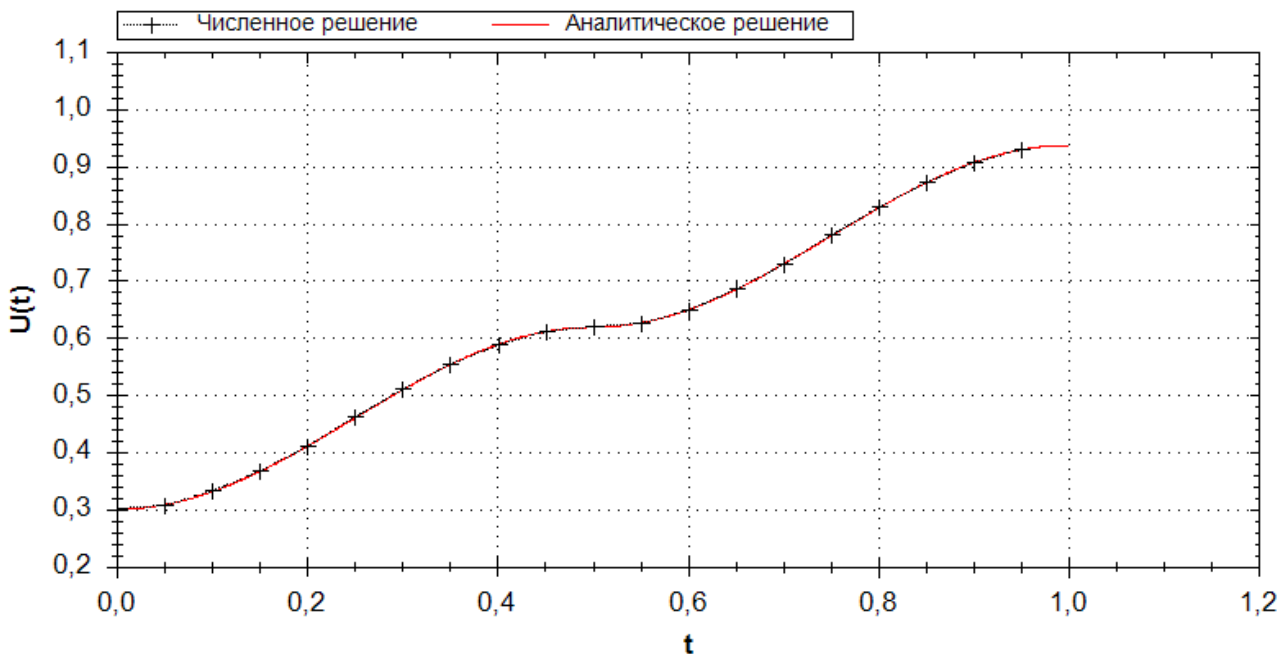


Рис. 1. Графики, отражающие зависимость концентрации частиц от времени, полученные аналитическим решением и численным решением

На рис. 2, 3, 4 приведен сравнительный анализ результатов моделирования при заданном шаге по времени $\tau = 0,001$ и различном количестве взаимодействующих частиц с точным аналитическим решением задачи Коши (4), (5).

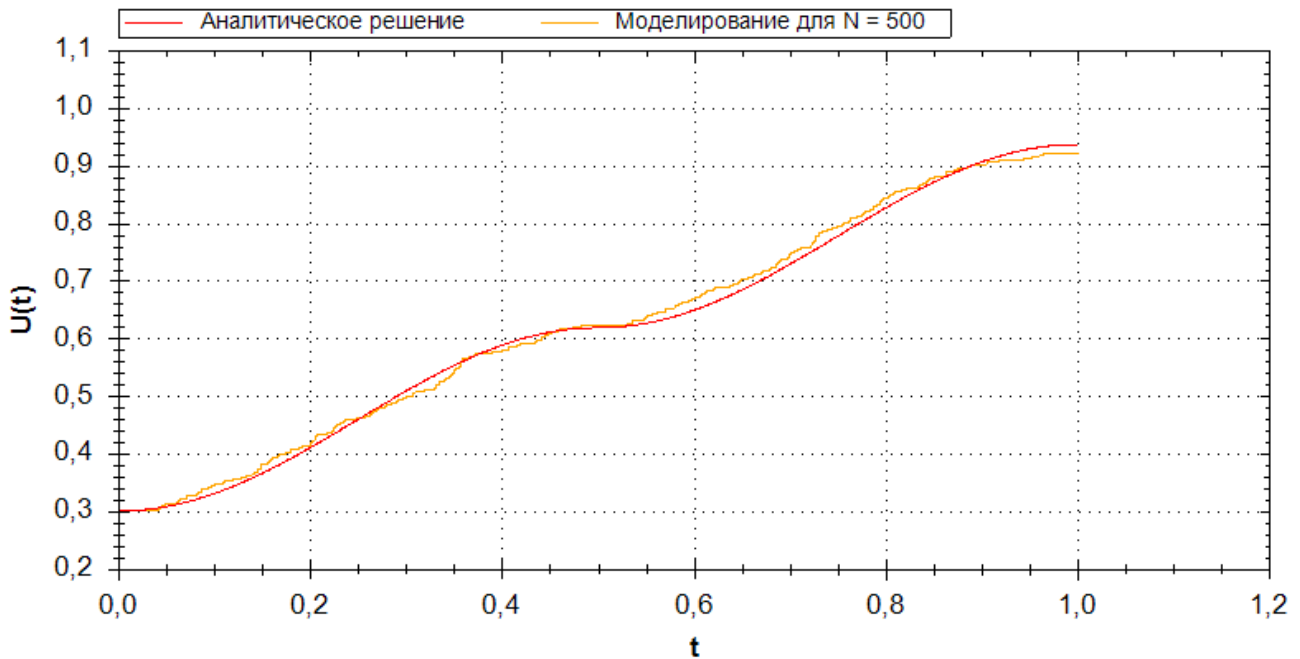


Рис. 2. Графики, отражающие зависимость концентрации частиц от времени, полученные аналитическим способом и путем моделирования процесса коагуляции при количестве частиц в системе $N = 500$

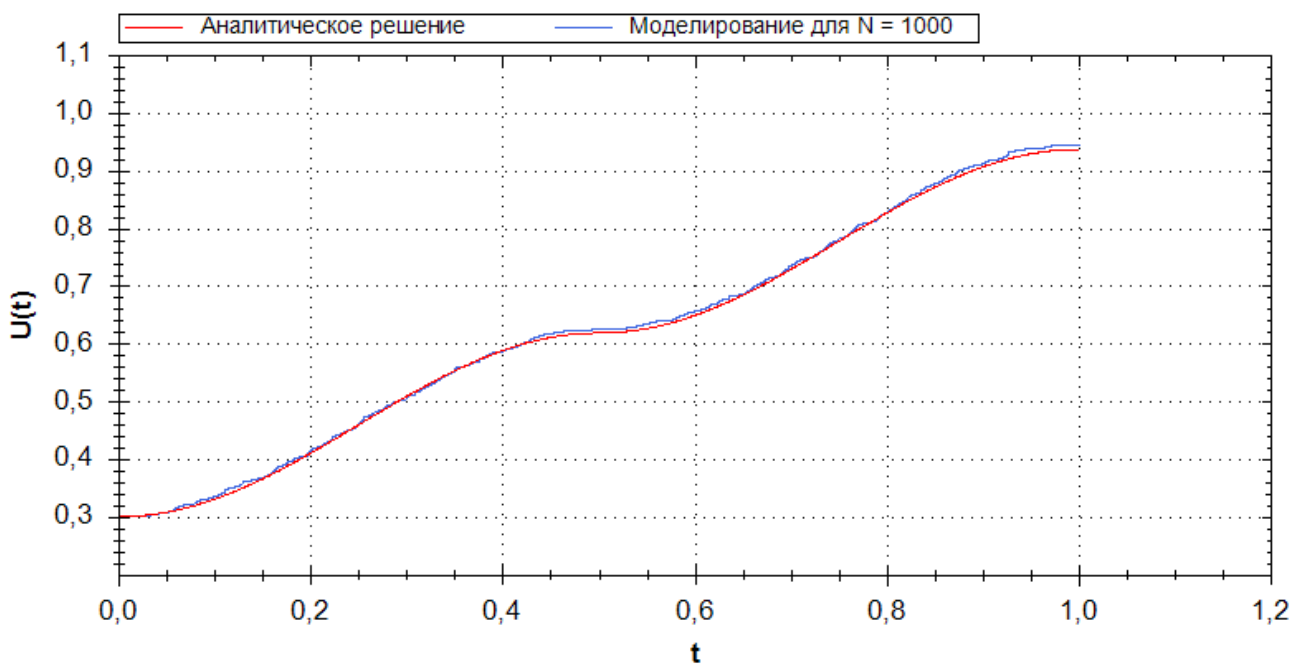


Рис. 3. Графики, отражающие зависимость концентрации частиц от времени, полученные аналитическим способом и путем моделирования процесса коагуляции при количестве частиц в системе $N = 1000$

Анализируя полученные данные, можно сделать вывод: по мере увеличения числа частиц, принимающих участие в моделируемой системе, наблюдается сближение расчётов к точному решению. Также, следует отметить, что дисперсия в вычислительных экспериментах не превышает 5 %.

Заключение

В работе было проведено моделирование процесса коагуляции при заданном функцией источнике частиц. Разработан алгоритм имитационной модели процесса парной коагуляции. Разработано программное обеспечение реализующее алгоритм на персональном компьютере.

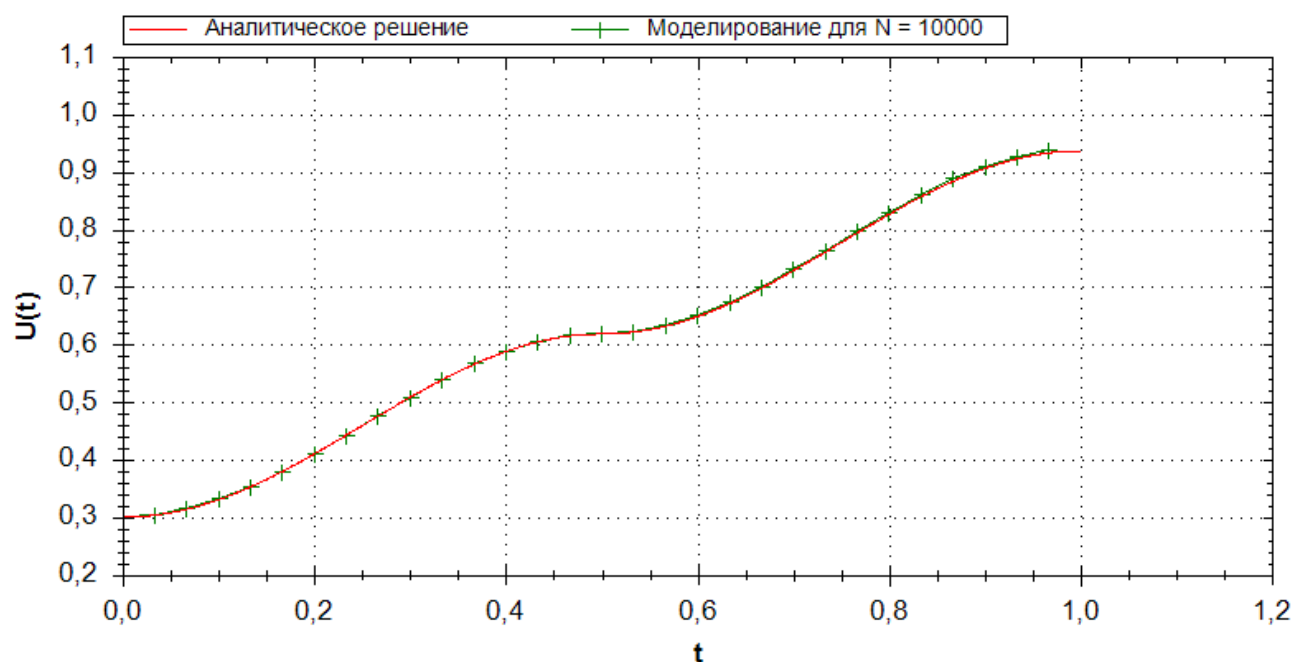


Рис. 4. Графики, отражающие зависимость концентрации частиц от времени, полученные аналитическим способом и путем моделирования процесса коагуляции при количестве частиц в системе $N = 10000$

ЛИТЕРАТУРА

1. Галкин В. А. Уравнение Смолуховского. М. : ФИЗМАТЛИТ, 2001. 336 с.
2. Галкин В. А. Анализ математических моделей: системы законов сохранения, уравнения Больцмана и Смолуховского. М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. 408 с.
3. Галкин В. А., Осецкий Д. Ю. Математическое моделирование кинетики коагуляции // Матем. моделирование. 2006, Т. 18. № 1. С. 99–116.
4. Галкин В. А. Итерационный метод решения одного класса эволюционных уравнений, связанных с физической кинетикой // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1981, Т. 21, № 2. С. 385–399.