

На правах рукописи

Самылкин Александр Александрович

**Статистический метод частиц в задачах
коагуляции.**

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2011

Работа выполнена в *Институте прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН.*

Научный руководитель: *кандидат физико-математических наук
КОРОЛЕВ Александр Евгеньевич*

Научный консультант: *доктор физико-математических наук,
академик МАРОВ Михаил Яковлевич*

Официальные оппоненты: *доктор физико-математических наук,
профессор ГАЛКИН Валерий Алексеевич;
доктор физико-математических наук,
профессор ШЕМАТОВИЧ Валерий Иванович.*

Ведущая организация: *Институт космических исследований РАН*

Защита состоится «13» октября 2011г. в 10 часов на заседании диссертационного совета 002.024.03 при *Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН*, расположенном по адресу: *125047, Москва, Миусская пл., д.4*

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке *ИПМ им. М.В.Келдыша РАН* по адресу *125047, Москва, Миусская пл., д.4.*

Автореферат разослан «_____» _____ 2011 г.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба высылать по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Ученый секретарь

диссертационного совета,

доктор физико-математических наук

Змитренко Н. В.

Общая характеристика работы

Актуальность работы определяется необходимостью построению модификаций численных методов для решения задач, связанными с процессами коагуляции в системах сталкивающихся частиц, описываемых уравнениями Больцмана и Смолуховского.

Интерес к системам сталкивающихся частиц обусловлен исследованиями в астрофизике, авиационной и вакуумной технике, биологических систем и химических процессов. Процессы кластерообразования возникают во многих природных явлениях: коагуляция пылевых частиц в газовых облаках, процессы полимеризации, свертываемости крови, динамика разрушений деталей.

Важность развития численных методов решения уравнений Больцмана и Смолуховского связана с необходимостью расчетов прямых математических моделей, соответствующих реальным физическим системам. В настоящее время найдены точные решения уравнений только для сравнительно простых случаев, а в некоторых ситуациях уравнение Смолуховского не имеет классического решения. Поэтому прямое математическое моделирование имеет большое прикладное значение. Быстрый рост производительности вычислительной техники, использование многопроцессорных вычислительных систем делают реальной возможность детального моделирования газодинамических потоков.

Цель диссертационной работы состоит в разработке модификаций статистического метода частиц, его анализа, реализации и проведении вычислительных экспериментов прямого моделирования систем взаимодействующих частиц с процессами кластерообразования.

Для достижения поставленных целей были решены следующие задачи:

1. Модификация статистического метода частиц для моделирования процессов кластерообразования.
2. Анализ соответствия алгоритмов моделируемых процессов уравнениям

Больцмана и Смолуховского.

3. Реализация алгоритма моделирования и проведение численных экспериментов для проведения тестовых расчетов на известных задачах.

Научная новизна

1. Предложена модификация весовой схемы испытаниями Бернулли для численного решения дискретного одно- и многокомпонентного уравнения Смолуховского.
2. Проведен теоретический анализ предложенных схем, доказано соответствие моделируемого процесса дискретному уравнению Смолуховского. На примере тестовых задач проведена проверка работы модификации весовой схемы.
3. Предложена имитационная равнопредставительная модель для столкновительной коагуляции и численного исследования уравнения Больцмана.
4. Проведен теоретический анализ предложенных схем, доказано соответствие моделируемого процесса уравнению Больцмана с первым порядком точности.
5. На примере расчета задачи столкновения встречных потоков показана принципиальная возможность использования схемы для моделирования астрофизических явлений, в первую очередь для планетной космогонии.

Практическая значимость работы состоит в следующем:

1. Создан алгоритм и программное обеспечение для численного решения дискретного одно- и многокомпонентного уравнения Смолуховского весовой схемой Бернулли.

2. Проведен теоретический анализ предложенных схем, доказано соответствие моделируемого процесса дискретному уравнению Смолуховского. На примере тестовых задач проведена проверка работы модификации весовой схемы.
3. Создан алгоритм и программное обеспечение для численного решения уравнения Больцмана с процессами кластерообразования.
4. Проведена серия численных расчетов для исследования процессов коагуляции при столкновительном взаимодействии массивных пылевых сгущений.

На защиту выносятся следующие основные результаты и положения:

1. Построена модификация весовой схемы испытаниями Бернулли для численного решения одно- и многокомпонентного уравнения Смолуховского. На примере тестовых задач проведена проверка работы модификации весовой схемы.
2. Построена имитационная равнопредставительная модель для столкновительной коагуляции и численного исследования уравнения Больцмана.
3. Проведен теоретический анализ предложенных схем, доказано соответствие моделируемого процесса уравнению Больцмана с первым порядком точности.
4. На примере расчета задачи столкновения встречных потоков показана принципиальная возможность использования схемы для моделирования астрофизических явлений, в первую очередь для планетной космогонии.

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

1. XXXIII Академические чтения по космонавтике. Москва, 2009
2. VIII Всероссийский симпозиум по прикладной и промышленной математике. Сочи, 2007
3. XV и XVI Международная конференция по механике и современным прикладным программным системам. Алушта, 2007, 2009.
4. VI Международная конференция по неравновесным процессам в соплах и струях. Санкт-Петербург, 2006.
5. VII и VIII Международная конференция по неравновесным процессам в соплах и струях. Алушта, 2008, 2010.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 15 печатных работах, из них 5 статей в рецензируемых журналах [1–5], 10 статей в сборниках трудов конференций и тезисов докладов.

Личный вклад автора. Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в результаты проведенных исследований. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причем вклад диссертанта был определяющим. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором и полностью отражены в публикациях .

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, обзора литературы, 3 глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации 104 страницы печатного текста. Библиография содержит 130 наименований.

Содержание работы

Во Введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения, приведен обзор исследований, связанных с математическим моделированием кинетики сталкивающихся частиц.

В первой главе изложен метод моделирования испытаниями Бернулли с весовыми множителями для численного решения дискретного уравнения Смолуховского:

$$\frac{\partial n(l, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l-1} K(l-i, i) n(i, t) n(l-i, t) - \sum_{i=1}^{\infty} K(l, i) n(l, t) n(i, t)$$

с начальными условиями $n(l, 0) = \phi(l)$. $n(l, t)$ - концентрация кластеров, состоящих из l частиц в момент времени t , а $K(x, y)$ - ядро коагуляции, которое определяет скорость с которой частицы размером x взаимодействуют с частицами размером y .

В §1 изложен алгоритм моделирования процессов коагуляции схемой испытаниями Бернулли с пропорциональной представленностью кластеров, показаны трудности, возникающие при использовании такой схемы: необходимость с течением времени создавать копии частиц с уменьшенным весом и увеличение общего количества частиц при переходе к моделированию многокомпонентных процессов кластерообразования.

В §2 предложена весовая модификация метода для однокомпонентного уравнения Смолуховского. Модельная частица p представляется двумя параметрами (l, w) , где $l \in \mathbb{N}$ - определяет размер кластеров, которые представляет модельная частица, а $w \in \mathbb{R}_+$ - определяет ее вес: количество кластеров, которые она представляет. Столкновение двух частиц - функция, отображающая

частицы p_i и p_j в себя следующим образом ($w(p_i) < w(p_j)$):

$$\begin{pmatrix} w(x), l(x) \\ w(y), l(y) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} w(x), & l(x) + l(y) \\ w(y) - w(x), & l(x) \end{pmatrix}$$

Эволюцию модели на временном шаге Δt проходит по следующему алгоритму. В системе из N частиц для всех возможных пар частиц (p_i, p_j) выполняются следующие процедуры:

Шаг 1. Разыгрывается факт взаимодействия с вероятностью

$$P = K(l(p_i), l(p_j)) \max(w(p_i), w(p_j)) \Delta t$$

Шаг 2. Если взаимодействие произошло, то частицы заменяются на новые, в соответствии с функцией столкновения. В противном случае параметры частиц не меняются.

Шаг 3. Перемешивание модельных частиц между реализациями случайного процесса.

В §3,4 проведен теоретический анализ используемого алгоритма, показано соответствие моделируемому уравнению и ограниченность дисперсии весовых множителей. Приведен пример, показывающий необходимость введения в расчетную схему процедуры перемешивания модельных представителей между независимыми реализациями случайного процесса. В §5 на примере расчета известных аналитических решений проверяется качество работы данной схемы.

В §6 приводится модификация весовой схемы испытаниями Бернулли для многокомпонентного уравнения Смолуховского, вместо фиксации одного сорта частиц, можно представить сорт в виде вектора $\vec{m} = (m^1, \dots, m^p)$, где p - число компонент смеси, а $m_i \in \mathbb{N}$.

В §7-8 проводится теоретический анализ алгоритма и сравнение с известными аналитическими решениями для двухкомпонентной смеси. При использовании 40000 реализаций случайного процесса с 2 модельными частицами погрешность не превышала 1% для различных моментов функции распределения кластеров.

Во второй главе изложено расширение весового подхода для процессов коагуляции, описываемых уравнением Больцмана. Существенно новым является использование индивидуальной сортовой характеристики частиц, которая изменяется при участии частиц в процессе кластерообразования.

В §1 приводится весовой алгоритм моделирования уравнения Больцмана в пространственно неоднородном случае. Алгоритм моделирования строится следующим образом. Фиксируется K независимых реализаций случайного процесса, расчетная область разбивается на ряд ячеек, в которых содержится постоянное число n модельных частиц. Функцией распределения скоростей частиц сорта l в ячейке будет $\phi_l(v) = \sum_{i=1}^N w_i [\vec{v}_i = v]$. Алгоритм моделирования можно представить в виде следующей последовательности действий на каждом шаге Δt для всех реализаций:

Шаг 1. Столкновительная релаксация частиц.

Шаг 2. Перемещение частиц в соседние ячейки.

Шаг 3. Перемешивание частиц между независимыми реализациями случайного процесса.

Случайный процесс строится как последовательность столкновений, разыгрываемых по Монте-Карло. Отличительной чертой схемы Бернулли является возможность использования в расчетах предельно малого числа представителей каждого компонента с сохранением больцмановской частоты столкнове-

ний. Для каждой пары частиц в ячейке с вероятностью:

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

N_l, N_k – количество модельных представителей компонент l и k

происходит столкновение, а скорости определяются в соответствии с механикой упругого удара. Для частиц с разными весами при достоверно произошедшем столкновении скорости частиц не обязательно изменятся. Модельные частицы, обладающие меньшим весом, w_{min} изменяют скорости с вероятностью 1, а частицы с большим весом w_{max} изменяют скорость с вероятностью w_{min}/w_{max} . Такая особенность моделирования связана с парностью столкновений. Общее число столкнувшихся пар частиц будет w_{min} , а $w_{max} - w_{min}$ частиц не будут участвовать в столкновении. Таким образом образуется 3 множества частиц, и для сохранения постоянного количества модельных частиц используется метод Монте-Карло, чтобы определить новые параметры модельных представителей.

Введение весовых множителей позволяет представлять каждый из S компонентов A_l концентраций $n_l, l = 1, 2, \dots, S$ рассматриваемой газовой смеси одним и тем же числом модельных частиц N независимо от значений n_l . В результате все многообразие реальных молекул каждого компонента заменяется N подмножествами частиц, обладающих одним и тем же вектором скорости внутри каждого подмножества (см. рис. 1). Любое подмножество частиц может быть подвергнуто внешнему воздействию различной природы и интенсивности.

Таким образом, каждый модельный представитель фактически характеризует собой поведение значительного числа реальных частиц. Мощности каждого подмножества соответствует вес w его модельного представителя. В начальный момент моделирования все веса для простоты принимаются равными $w_l(0) = n_l/N$. При химических превращениях в процессе расчета значения

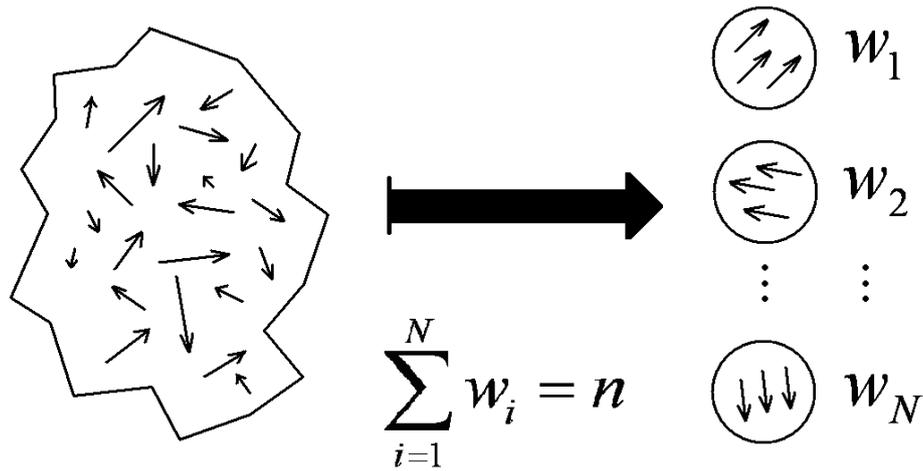


Рис. 1. Весовая схема моделирования

весов могут изменяться, однако неизменно для каждого компонента смеси выполняется условие: $\sum w_l(t) = n(t)$.

Существенно подчеркнуть, что при взаимодействии модельных молекул скорость частицы, обладающей большим весом изменяется не обязательно, а лишь с вероятностью, равной отношению меньшего веса к большему. При этом всегда строго соблюдается принцип парности взаимодействия реальных молекул. На рис. 2 показана схема реализации весового подхода при моделировании упругого взаимодействия двух модельных представителей различной мощности.

Для пространственно неоднородных нестационарных задач на каждом временном шаге, наряду с этапом молекулярных столкновений, имитируется этап пространственного сдвига, в ходе которого возможен переход частиц в соседние пространственные ячейки расчетной области.

Была разработана вычислительная процедура, при реализации которой в течение всего процесса моделирования в отдельной пространственной ячейке каждый компонент смеси представляется одним и тем же постоянным числом частиц. Алгоритм расчета пространственного сдвига на малом временном шаге Δt сводится к моделированию методом Монте-Карло акта обмена частицами

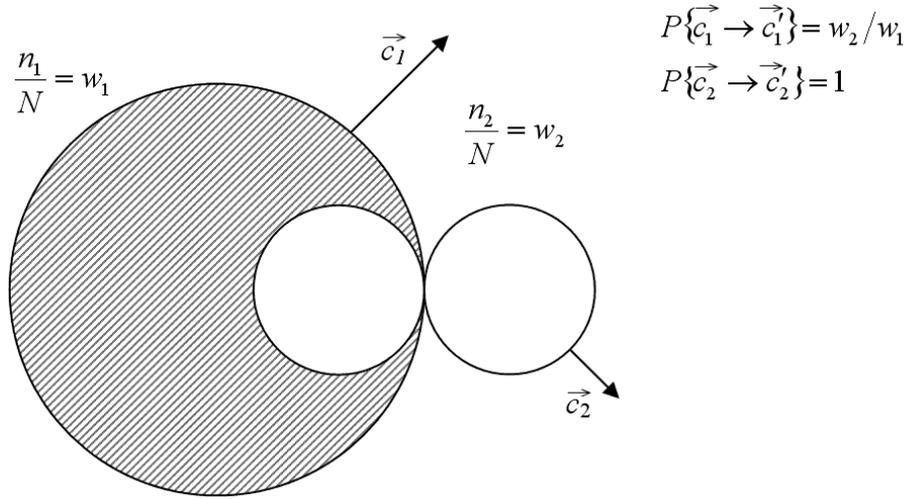


Рис. 2. Весовой подход при моделировании столкновений

между соседними ячейками. Далее для упрощения символики индексы компонентов газовой смеси опускаются.

Для иллюстрации алгоритма ниже рассмотрено двумерное плоское течение. Пусть все пространственные ячейки имеют прямоугольную форму и одинаковые размеры Δx и Δy , число ячеек по осям OX и OY одинаково и равно K . Без потери общности рассуждений будем считать, что частица имеет положительные составляющие вектора скорости $c_x > 0$, $c_y > 0$. Тогда схема реализации пространственного сдвига частицы A_{kn} весом w_{kn} , находящейся в пространственной ячейке с номером k по оси OX и номером n по оси OY будет такова:

Шаг 1. Вычисляется доля частиц в группе A_{kn} , перешедших в ячейки с номерами $(k + 1, n)$, $(k + 1, n + 1)$, и $(k, n + 1)$:

$$\delta_{(k+1)n} = w_{kn} \left(\frac{c_x \Delta t}{\Delta x} \right) \left(1 - \frac{c_y \Delta t}{\Delta y} \right);$$

$$\delta_{(k+1)(n+1)} = w_{kn} \left(\frac{c_x \Delta t}{\Delta x} \right) \left(\frac{c_y \Delta t}{\Delta y} \right);$$

$$\delta_{k(n+1)} = w_{kn} \left(1 - \frac{c_x \Delta t}{\Delta x} \right) \left(\frac{c_y \Delta t}{\Delta y} \right)$$

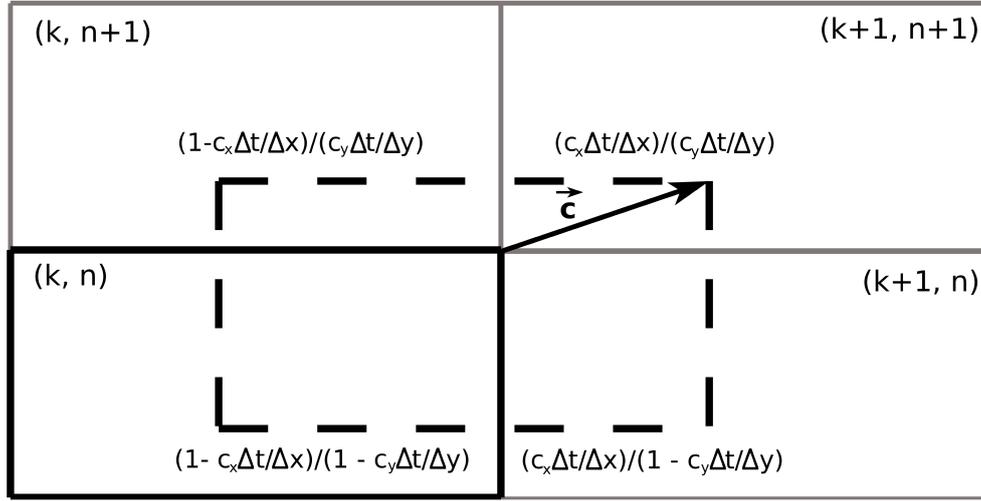


Рис. 3. Схема пространственного сдвига.

Шаг 2. Доля частиц, оставшихся в ячейке (k, n) , уменьшается на величину:

$$\delta_s = \delta_{k(n+1)} + \delta_{(k+1)(n+1)} + \delta_{(k+1)n},$$

т.е. их вес становится равным: $w_{kn}^* = w_{kn} - \delta_s$.

Шаг 3. Веса частиц $A_{(k+1)n}$, $A_{k(n+1)}$, $A_{(k+1)(n+1)}$ увеличиваются соответственно на величины $\delta_{(k+1)n}$, $\delta_{k(n+1)}$, $\delta_{(k+1)(n+1)}$.

Шаг 4. Скорости частиц $A_{(k+1)n}$, $A_{k(n+1)}$, $A_{(k+1)(n+1)}$ изменяются с вероятностями, соответствующими весовому подходу:

$$P_{(k+1)n}(c_{kn} \rightarrow c_{(k+1)n}) = \frac{\delta_{(k+1)n}}{w_{(k+1)n}}$$

$$P_{k(n+1)}(c_{kn} \rightarrow c_{k(n+1)}) = \frac{\delta_{k(n+1)}}{w_{k(n+1)}}$$

$$P_{(k+1)(n+1)}(c_{kn} \rightarrow c_{(k+1)(n+1)}) = \frac{\delta_{(k+1)(n+1)}}{w_{(k+1)(n+1)}}$$

На границе раздела фаз реализуется аналогичная весовая схема, описывающая различные типы взаимодействия модельных частиц со стенкой расчетной области, включая отражение частиц в прежнюю или соседние ячейки в зависимости от значения соответствующих компонент скорости.

Алгоритм поддерживает в ячейках постоянное число частиц независимо от интенсивности переходов как на равномерных сетках так и на переменных. При этом, алгоритм естественным образом сохраняет это условие при работе с адаптивными сетками. Без каких-либо принципиальных изменений в алгоритме возможно рассмотрение осесимметричных и трехмерных течений.

В §2,3 проводится теоретический анализ предлагаемого алгоритма. Использование весовых множителей приводит к нарушению детального соблюдения законов сохранения при моделировании взаимодействия частиц. Анализ схемы устанавливает наличие в ней консервативности на уровне математического ожидания. Исследование алгоритма позволяет сделать вывод о соответствии порождаемого им случайного процесса уравнению Больцмана для упругого взаимодействия частиц с точностью до разностной аппроксимации производной d/dt и статистической зависимости частиц. В §4 приведены результаты расчетов задачи теплопередачи между параллельными пластинами для бинарной смеси газов.

В §5,6 предложена модификация весовой схемы Бернулли для процессов коагуляции, зависящих от относительных скоростей взаимодействующих частиц. Существенно новым является введение в модель индивидуальной сортовой характеристики частицы, позволяющей избежать квадратичной зависимости относительно количества сортов частиц. Проводится теоретический анализ соответствия предложенной схемы уравнению Больцмана, описывающему процессы коагуляции.

Третья глава посвящена апробированию алгоритма для задач астрофизики: моделированию взаимодействия массивных пылевых сгущений. В большинстве существующих моделей [4] с динамикой частиц и их ростом при соударениях связывают образование зародышей планет - планетезималей. Однако численные и лабораторные эксперименты последних лет показали, что при относительных скоростях пылевых частиц выше 1 м/с преобладает процесс

разрушения, а не объединения. Не достаточно обоснована и возможность роста частиц путем объединения при столкновениях в интервале размеров от 10 см до 10 м, как и возможность образования самогравитирующих тел размерами 0.1-1 км. Более вероятным сценарием эволюции газопылевого субдиска может быть модель образования пылевых сгущений (пылевых кластеров) с начальной массой порядка массы астероидов ($10^{15} - 10^{19}$ г.) и размерами в пределах $\approx 0,1 - 10$ км, особенно внутри вихревых структур, с учетом процессов самоорганизации в турбулентной среде.

Результаты численных экспериментов по изучению столкновительного взаимодействия массивных пылевых сгущений в зависимости от концентрации частиц и относительных поступательных скоростей позволяют проследить характер эволюции поля концентраций и наложить вполне определенные ограничения на условия слипания частиц в сгущениях (кластерообразования). Это подкрепляет представления о начальном этапе образования зародышей планет вследствие возникновения в протопланетном диске первичных пылевых сгущений и их взаимодействий, как значительно более вероятном механизме, чем рост пылевых частиц при непосредственных соударениях в диске.

В Заключение диссертации сформулированы основные результаты, полученные впервые и выносимые на защиту.

1. Построена модификация весовой схемы испытаниями Бернулли для численного решения дискретного одно- и многокомпонентного уравнения Смолуховского. Использование весовых множителей, а так же свойства исходной схемы моделирования позволяют эффективно моделировать релаксацию в смесях с большим различием в концентрациях, используя небольшое число частиц в одной модели. С целью уменьшения статистических флуктуаций осуществляется параллельный розыгрыш большого числа реализаций модели. Проведен теоретический анализ предложенной схемы, создана и протестирована компьютерная программа для алгорит-

ма моделирования.

2. Предложена имитационная равнопредставительная модель для столкновительной коагуляции и численного решения уравнения Больцмана. Существенно новым моментом является введение в модель переменных масс и диаметров частиц, что позволяет учитывать изменение концентраций кластеров в результате процессов коагуляции, сохраняя постоянное и равное число модельных представителей.

Проведен теоретический анализ предложенных схем, доказано соответствие моделируемого процесса уравнению Больцмана с точностью до величины разностной аппроксимации производной d/dt и статистической зависимости частиц.

3. Проведена серия численных расчетов для исследования процессов коагуляции при столкновительном взаимодействии массивных пылевых сгущений. Исследовано влияние концентраций и диаметров частиц на процессы кластерообразования.
4. Разработанные алгоритмы моделирования и вычислительная программа могут быть использованы для математического моделирования коагуляции в молекулярных облаках, исследования процессов кластерообразования в протопланетных дисках и массивных пылевых сгущениях.

В заключении автор благодарит научного консультанта данной работы академика Марова М.Я., который высказал идею создания алгоритмов для решения задач коагуляции в приложении к задачам образования планет и научного руководителя к.ф.-м.н. Королева А.Е. за плодотворное обсуждение методов Монте-Карло. Автор также благодарит заведующего отделом ИПМ им. М.В. Келдыша РАН д.ф.-м.н. Колесниченко А.В. и к.т.н. Осипова В.П. за постоянное внимание к работе.

Список публикаций

1. Королев А.Е., Осипов В.П., Самылкин А.А. Модификация статистического метода частиц в приложении к задачам тепломассопереноса в разреженных газовых смесях // Космонавтика и ракетостроение. 2006. № 4(45). С. 16–23.
2. Маров М.Я., Королев А.Е., Осипов В.П., Самылкин А.А. Развитие метода прямого численного моделирования в приложении к задачам кластерообразования в разреженных гетерогенных средах. // Вестник Калужского университета. 2008. № 3. С. 3–8.
3. Маров М.Я., Королев А.Е., Осипов В.П., Самылкин А.А. Имитационное моделирование струйных течений и диссипативных потоков методом переменных весовых множителей. // Матем. моделирование. 2009. Т. 21, № 9. С. 34–42.
4. Маров М.Я., Королев А.Е., Осипов В.П., Самылкин А.А. Численное стохастическое моделирование образования кластеров. // Доклады Академии Наук. 2010. Т. 432, № 4. С. 1–4.
5. Marov M. Ya., Korolev A.E., Osipov V.P., Samylkin A.A. Numerical Stochastic Simulation of Cluster Formation // Doklady Physics. 2010. Vol. 55, no. 6. Pp. 283–286.