

УДК 531.714:519.87

МОДЕЛИРОВАНИЕ СЕДИМЕНТАЦИИ В НЕОДНОРОДНОМ ПОТОКЕ С УЧЕТОМ УДАЛЕНИЯ ВЫДЕЛИВШЕЙСЯ ФАЗЫ ИЗ ОБЛАСТИ ТЕЧЕНИЯ

В. А. Галкин

*Политехнический институт Сургутского государственного университета,
val-gal@yandex.ru*

Рассмотрена математическая модель сепарации компонента дисперсной среды в пространственно неоднородном потоке сливающихся при столкновениях частиц. Наличие неоднородного поля скоростей переноса частиц порождает новый эффект, связанный с аналогом кумулятивных течений, в которых образуются пространственно-временные зоны с интенсивным выделением полимерной структуры, мгновенно удаляющейся из среды (седиментация, основанная на сепарации выделившегося полимера). При этом в математическом описании явления возникают пространственно-временные особенности функций, описывающих концентрации частиц дисперсной среды. Предложен вычислительный алгоритм построения приближений концентраций, выполнены тестовые расчеты и проведено сравнение метода Монте-Карло с повторными испытаниями и расчетами по явной разностной схеме. Предложена процедура подготовки данных на уровне отдельных частиц, приводящая в пределе к решению сходящейся разностной схемы, которая в свою очередь сходится к обобщенному решению задачи Коши для пространственно неоднородного уравнения Смолуховского – кинетической теории коагуляции.

Ключевые слова: метод Монте-Карло с повторными испытаниями, кумулятивные течения, уравнение Смолуховского, обобщенные решения.

SEDIMENTATION MODELING IN NON-UNIFORM FLOW WITH REGARD FOR REMOVING OF PRECIPITATED PHASE FROM FLOW RANGE

V. A. Galkin

Polytechnic Institute, Surgut State University, val-gal@yandex.ru

The mathematical model of components separation of a dispersed medium in a spatially non-uniform flow of merging particles in collisions is considered. The availability of the non-uniform velocity field of particles transport generates a new effect connected to the analog of cumulative flows where space-time zones are formed with an intensive release of the polymeric structure that is instantaneously removed from the medium (sedimentation based on the separation of the precipitated polymer). At the same time, space-time features of functions that describe the concentrations of particles in a dispersed medium arise in the mathematical description of the phenomenon. A computational algorithm for the approximations concentration constructing is proposed, test calculations are performed, and the Monte Carlo method with duplicate tests is compared with calculations of explicit difference scheme. A data preparation procedure of data preparation at the level of individual particles is proposed, leading in the limit to a solution of a convergent difference scheme, which in turn converges to a generalized solution of the Cauchy problem for the spatially non-uniform Smoluchowski equation of kinetic theory of coagulation.

Keywords: Monte Carlo method with duplicate tests, cumulative flows, Smoluchowski equation, generalized solutions.

Введение: коагуляция и седиментация в дисперсных системах

Коагуляция (слияние) частиц является одной из основных причин эволюции пространственно неоднородных дисперсных систем, под которыми понимают механическую смесь среды (газообразной или жидкой) с частицами диспергированной фазы (твердой или жидкой), причем свойства фаз существенно зависят от переноса вещества между различными точками координатного пространства. При этом важно подчеркнуть наличие дисперсии скоростей переноса для частиц, находящихся в различных состояниях (иначе замена системы пространственно-временных координат описание сводится к модели, подобной пространственно однородному случаю).

Пространственно неоднородная коагуляция наблюдается в различных дисперсных системах: в растворах – броуновская коагуляция частиц, блуждающих из-за флуктуаций внешней среды; при слиянии частиц, падающих во внешней среде под действием силы тяжести – гравитационная коагуляция. Следует подчеркнуть, что наличие пространственной неоднородности значительно усложняет исследование таких математических моделей. В частности, это обусловлено новым эффектом (по-сравнению с пространственно однородными задачами), а именно, возникновением недифференцируемых особенностей по пространственно-временным переменным у плотности распределения частиц. Эти особенности, в свою очередь, порождают пространственно-временные зоны, в которых соотношение сохранения для оператора столкновений переходит в соотношение диссипации (эти области можно интерпретировать как зоны интенсивного образования осадков, не взаимодействующих с дисперсной фазой – явление седиментации). В указанных областях проявляется кумулятивный эффект течения жидкости, аналогичный возникновению ударной волны в газовой динамике.

Такие процессы оказывают воздействие на рост кристаллов в растворах, газовых пузырях и пор. Серьезное влияние оказывает пространственно неоднородная коагуляция продуктов горения топлива на тягу реактивных двигателей. Явление осаждения может быть использовано в сепараторах фракций дисперсной среды. Процесс пространственно неоднородной коагуляции оказывает воздействие на рост кристаллов в растворах, газовых пузырях и пор в твердом теле. Серьезное влияние оказывает пространственно неоднородная коагуляция продуктов горения топлива на тягу реактивных двигателей. Чтобы густая нефть с большей легкостью поднималась по трубам, надо прежде всего сделать ее более жидкой. Для этого необходимо применить особые растворы.

Указанные явления типичны для нефтехимических процессов при использовании мицеллярных дисперсий. Основными составляющими этих составов являются нефтерастворимые поверхностно-активные вещества: спирт, углеводородный растворитель типа керосина или легких фракций нефти и воды. При закачке их в пласт, они образуют в сочетании с нефтью эмульсию, дисперсную фазу которой составляют частицы композитного состава – мицеллы. При этом возможно уменьшение сил, связывающих эмульсию с пористой нефтесодержащей средой, и тем самым появляется управляющее воздействие на коэффициент извлечения нефти (КИН) из коллектора. Очевидно, что его увеличение – важный экономический фактор. Это является одной из перспективных технологий, основанной на подготовке дисперсной среды с последующей сепарацией. В частности, одной из основных задач для суперкомпьютерных технологий является существенное увеличение извлекаемых запасов углеводородов за счет увеличения коэффициента извлечения нефти и газа. Последнее может быть достигнуто путем выбора оптимальных стратегий в результате предсказательного моделирования динамики нефти в пористой среде при физических воздействиях на пласт, направленных на повышение нефтеотдачи. Даже управление процессами фронтального вытеснения и обеспечение его устойчивости в состоянии потенциально существенно повысить коэффициент извлечения нефти. В России на данный момент коэффициент извлечения нефти по разведанным запасам составляет 37,7 %. Увеличение коэффициента нефтеизвлечения в масштабах России даже на 3–5 % даст дополнительно 3–5 млрд тонн извлекаемых запасов нефти, а это 100–150 млн тонн дополнительной добычи в год [1].

Для получения особо высокодисперсных эмульсий применяется ультразвуковой метод. Эмульсии, полученные из беспримесных жидкостей, обычно неустойчивы, и дисперсная система для двухкомпонентной смеси постепенно расслаивается на две несмешивающиеся жидкости за счет слияния капелек в смеси. Получение устойчивых эмульсий возможно в присутствии веществ, которые, адсорбируясь на поверхности капелек, препятствуют их слиянию и придают системе агрегатную устойчивость. Поэтому процессы коагуляции и управление ими весьма важны для поддержания структурной устойчивости эмульсий, используемых в нефтедобыче. В концентрированных эмульсиях в отличие от разбавленных при превышении пороговой концентрации дисперсной фазы, слияние капелек происходит с значительной скоростью и эмульсия достаточно быстро разделяется на два слоя. Получение устойчивых концентрированных эмульсий возможно только в присутствии специальных эмульгаторов. К эмульгаторам, способным образовывать прочные защитные пленки, относятся высокомолекулярные соединения, например, сапонин, белки (желатин, казеин), каучук, смолы, соли жирных кислот (мыла) и др.

Физический формализм получения уравнений пространственно неоднородной кинетической теории коагуляции описан в [2, 3]. Физическим аспектам явления коагуляции посвящена обширная литература [4, 5].

Основные предположения физического характера, накладываемые на систему коагулирующих частиц, состоят в следующем. Частиц достаточно большое количество, чтобы можно было применять функцию распределения частиц по массам и в координатном пространстве. Считается, что частицы испытывают только парные столкновения и образуют локально хаотическое множество.

Пространственно неоднородные задачи, связанные с переносом частиц, осуществляемым посредством однопараметрической группы сдвигов по пространственной переменной, являются наиболее трудными с математической точки зрения.

Математическая модель возникновения зон седиментации (кумуляции)

Рассмотрим математическую модель процесса коагуляции в дисперсной системе, состоящей из вязкой среды, в которой вдоль оси $Ox = \{x \in \mathbb{R}\}$ под действием внешней силы с постоянной скоростью движутся частицы, которые состоят из объединений мономеров, имеющих массу $\mu_1 > 0$. Частицу, порожденную объединением i мономеров (т. е. ее масса равна $i\mu_1$, $i \in \mathbb{N}$), будем для краткости именовать i -мер, слово *полимер* примем для обозначения бесконечного объединения мономеров. Пусть скорость движения i -мера равна v_i , а при столкновении пары частиц происходит их слияние в единый конгломерат, состоящий из суммарного количества мономеров обеих частиц (*коагуляция*). Для описания эволюции концентрации i -меров $f_i \stackrel{\text{def}}{=} f(i, x, t)$ в такой системе используется кинетическое уравнение Смолуховского:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + v_i \frac{\partial f_i}{\partial x} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \Phi_{i-j,j} f_{i-j} f_j - f_i \sum_{j=1}^{\infty} \Phi_{i,j} f_j, \quad i \in \mathbb{N}, \quad (1)$$

где $\Phi_{i,j} = \sigma_{i,j} |v_i - v_j|$ – интенсивность слияния i и j -меров; $\sigma_{i,j}$ – сечение захвата, являющееся симметричной, неотрицательной функцией на $\mathbb{N} \times \mathbb{N}$. Оператор столкновений, определяемый правой частью уравнения (1), обозначим $S_i(f)$, $f = \{f_i\}_{i \in \mathbb{N}}$. Первое слагаемое в $S_i(f)$ считаем по определению равным нулю. Выражение для $S_i(f)$ задает локальный баланс между рождением i -меров из-за слияния $i-j$ и j -меров и уничтожением i -меров. Оператор столкновений определяет локальный закон

сохранения количества вещества, заключенного в частицах, состоящих из конечного числа мономеров, ибо для финитных наборов концентраций f справедливо равенство:

$$\sum_{i \in \mathbb{N}} i S_i(f) = 0.$$

Для уравнения (1) рассматривается задача Коши с начальными данными:

$$f(i, x, 0) = \varphi_i(x), \quad x \in \mathbb{R}, \quad i \in \mathbb{N}. \quad (2)$$

Ниже указываются достаточные условия, когда на решении уравнения (1) возникают негладкие особенности по переменным x, t при сколь угодно гладкой начальной функции $\varphi = \{\varphi_i\}_{i \in \mathbb{N}}$.

Интегральной формой задачи (1), (2) является нелинейное интегральное уравнение вольтерровского вида:

$$f|_t = T_t \varphi + \int_0^t T_{t-\tau} \circ S(f)|_\tau d\tau, \quad t \geq 0, \quad (3)$$

где T_t – однопараметрическая группа сдвигов, действие которой определено формулой:

$$T_t(\varphi)(i, x) = \varphi_i(x - v_i t), \quad \varphi = \{\varphi_i\}_{i \in \mathbb{N}}. \quad (4)$$

Уравнение (3) определяет обобщенное решение задачи Коши для уравнения Смолуховского (1).

Примем обозначение $\bar{f} = T_t \varphi$ для набора концентраций при свободном преносе частиц. Положим:

$$\begin{aligned} \bar{I}_i(x, t) &= \sum_{j=1}^{\infty} \Phi_{i,j} \bar{f}(j, x, t), \\ I_i(x, t) &= \sum_{j=1}^{\infty} \Phi_{i,j} f(j, x, t). \end{aligned}$$

Теорема 1. Пусть сечение захвата частиц $\sigma_{i,j}$ ($i, j \in \mathbb{N}$) удовлетворяет неравенствам

$$0 < \inf_{i \in \mathbb{N}} \sigma_{i,j} \leq \sup_{i \in \mathbb{N}} \sigma_{i,j} < \infty,$$

скорость свободного переноса частиц v_i является строго монотонной функцией аргумента $i \in \mathbb{N}$. Предположим, что начальные концентрации $\{\varphi_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ в условии (2) – положительные гладкие по $x \in \mathbb{R}$ функции, имеющие конечные интегралы

$$\int_{\mathbb{R}} \sum_{j=1}^{\infty} (1 + \Phi_{i,j}) j \varphi_j(x) dx < \infty,$$

и $\varphi_j(x) \rightarrow 0$ при $|x| \rightarrow \infty$. Пусть набор начальных концентраций $\{\varphi_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ в каждой точке $x \in \mathbb{R}$ удовлетворяет локальному соотношению сохранения

$$\sum_{i \in \mathbb{N}} i S_i(f|_{t=0}) = 0.$$

Тогда, если существуют точки (x, t) , в которых величина $\bar{I}(x, t) = +\infty$, то независимо от класса гладкости начальных концентраций решение уравнения (1) с этими начальными данными не может быть гладким по (x, t) для всех $t \geq 0$, $x \in \mathbb{R}$.

Замечание 1. В точках, где $\bar{I}(x, t) = +\infty$, решение задачи Коши (1), (2) имеет особенность типа градиентная катастрофа, т. е. производные обращаются в бесконечность. При этом в указанных точках $S_i(f) = -\infty$ и, следовательно, справедливо неравенство:

$$\sum_{i \in \mathbb{N}} i S_i(f) < 0. \quad (5)$$

Значит, локальное соотношение сохранения (4) с течением времени преобразуется в локальное соотношение диссипации (5).

Перед доказательством теоремы 1 сделаем ряд предварительных утверждений.

Лемма 1. Пусть последовательность непрерывных неотрицательных функций $u_i(x, t)$, $t \geq 0$, $x \in \mathbb{R}$, $i \in \mathbb{N}$ подчиняется неравенствам:

$$u_i(x, t) \leq T_t u_i(., 0) + C_i \int_0^t \sum_{j=1}^{i-1} T_{t-\tau} (u_{i-j}(., \tau) u_j(., \tau)) d\tau, \quad i \in \mathbb{N}, \quad (6)$$

где $\{C_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ – монотонно возрастающая последовательность неотрицательных чисел. Положим по определению сумму в правой части неравенства при $i=1$ тождественно равной нулю. Если начальные функции $u_i(x, 0)$ удовлетворяют неравенствам:

$$u_i(x, 0) \leq F_0 = \text{const} < \infty, \quad x \in \mathbb{R}, \quad i \in \mathbb{N},$$

то справедливы соотношения:

$$u_i(x, t) \leq F_0 \exp(F_0 i C_i t), \quad x \in \mathbb{R}, \quad i \in \mathbb{N}, \quad t \geq 0. \quad (7)$$

Доказательство. Утверждение леммы получается методом математической индукции, применяемым по индексу $i \in \mathbb{N}$.

Лемма 2. Пусть выполнены условия предыдущей леммы и в дополнение к ним функции $u_i(x, 0) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \infty \quad \forall i \in \mathbb{N}$. Тогда $u_i(x, t) \rightarrow 0$, $x \rightarrow \infty$, при каждом $i \in \mathbb{N}$ равномерно относительно изменения значений t на любом конечном промежутке в $\mathbb{R}_1^+$.

Доказательство. Утверждение леммы получается методом математической индукции по номеру $i \in \mathbb{N}$.

Лемма 3. Пусть $\{f_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ – гладкое неотрицательное решение задачи Коши (1), (2), соответствующее начальным данным, для которых выполнены условия теоремы 1. Тогда при $t \geq 0$ справедливы следующие неравенства:

$$\int_{\mathbb{R}_1} \sum_{i \in \mathbb{N}} f_i(x, t) dx \leq \int_{\mathbb{R}_1} \sum_{i \in \mathbb{N}} \varphi_i(x) dx = N_0, \quad (8)$$

$$\int_0^t \sum_{j \in \mathbb{N}} |a - v_j| f_j(x + a\tau, \tau) d\tau \leq 2N_0 \quad \forall a \in \mathbb{R}_1. \quad (9)$$

Замечание 2. Неравенства (8), (9) имеют простой физический смысл. Оценка (8) означает, что в коагулирующей системе число частиц с ростом времени уменьшается, а оценка (9) показывает, что через сечение потока коагулирующих частиц, движущееся со скоростью a вдоль оси Ox , может пройти не более $2N_0$ частиц за время t при монотонной функции v_i , поскольку каждая частица проходит через это сечение не более двух раз.

Доказательство. Получим сначала неравенство (8). Суммируя в (1) по индексу $1 \leq i \leq M$, имеем:

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{i=1}^M f_i(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} \sum_{i=1}^M v_i f_i(x, t) \leq 0,$$

ибо $\sum_{i=1}^M S_i(f) \leq 0 \quad \forall M \in N$. Интегрируя это неравенство по времени, получаем:

$$\sum_{i=1}^M f_i(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} \sum_{i=1}^M v_i \int_0^t f_i(x, \tau) d\tau \leq \sum_{i \in N} \phi_i(x).$$

Дальнейшее интегрирование по переменной x при $|x| \leq A$ приводит к соотношению:

$$\int_{-A}^A \sum_{i=1}^M f_i(x, t) dx + \sum_{i=1}^M v_i \int_0^t [f_i(A, \tau) - f_i(-A, \tau)] d\tau \leq N_0.$$

Воспользовавшись результатом леммы 2, перейдем к пределу при $A \rightarrow +\infty$. Таким образом,

$$\int_{\square_1} \sum_{i=1}^M f_i(x, t) dx \leq N_0.$$

Переходя к пределу $M \rightarrow \infty$ на основании леммы Б. Леви [6], получаем окончательно неравенство (8).

Теперь установим справедливость оценки (9). Поскольку функция $\{v_i\}_{i \in \square}$ монотонная, то без ограничения общности можно считать ее монотонно возрастающей (в противном случае следует сделать замену переменных $x \mapsto -x$ в уравнении (1)). Итак, при монотонно возрастающей функции v_i в тождестве (1) сделаем замену переменных:

$$t \mapsto t, \quad x \mapsto x + at, \quad a = \text{const},$$

тогда для функций

$$\tilde{f}_i(x, t) \stackrel{\text{def}}{=} f_i(x + at, t), \quad i \in \square$$

имеет место тождество

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{f}_i + (v_i - a) \frac{\partial}{\partial x} \tilde{f}_i = S_i(\tilde{f}_i), \quad i \in \square. \quad (10)$$

Обозначим i_0 наибольшее значение индекса i , для которого $v_i < a$. Тогда суммированием по номеру i получаем неравенство:

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{i=1}^{i_0} \tilde{f}_i(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} \sum_{i=1}^{i_0} (v_i - a) \tilde{f}_i(x, t) \leq 0.$$

После интегрирования обеих частей этого неравенства по времени на промежутке $(0, t)$ и по пространственной переменной на интервале $(x, +\infty)$, учитывая лемму 2, имеем

$$\int_0^t \sum_{i=1}^{i_0} (a - v_i) \tilde{f}_i(x, \tau) d\tau \leq \int_x^{+\infty} \sum_{i \in \square} \varphi_i(\xi) d\xi = N_0^+. \quad (11)$$

Повторим те же рассуждения для сумм по номеру $1 \leq i \leq M$ в соотношении (10), интегрируя теперь по пространственной переменной на промежутке $(-\infty, x)$. Таким образом, получаем:

$$\int_0^t \sum_{i=1}^M (v_i - a) \tilde{f}_i(x, \tau) d\tau \leq \int_{-\infty}^x \sum_{i \in \square} \varphi_i(\xi) d\xi = N_0^-.$$

Полагая $M > i_0$ и учитывая (11), приходим к неравенству:

$$\int_0^t \sum_{i=i_0+1}^M (v_i - a) \tilde{f}_i(x, \tau) d\tau \leq N_0^+ + N_0^- = N_0. \quad (12)$$

Сочетая неравенства (11), (12) и переходя к пределу $M \rightarrow \infty$, устанавливаем справедливость неравенства:

$$\int_0^t \sum_{i \in \square} |v_i - a| \tilde{f}_i(x, \tau) d\tau \leq 2N_0.$$

Возвратимся в этом соотношении к исходным функциям f_i и тем самым получаем (9). Лемма доказана.

Доказательство теоремы 1. Предположим, что при условиях теоремы существует гладкое решение задачи (1), (2) при всех $t \geq 0$, $x \in \square$. Отбрасывая в правой части тождества (1) неотрицательные слагаемые, приходим к неравенству:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + v_i \frac{\partial f_i}{\partial x} \geq -f_i \sum_{j=1}^{\infty} \Phi_{i,j} f_j, \quad i \in \square,$$

и, таким образом,

$$f_i(x, t) \geq \bar{f}_i(x, t) \exp \left[- \int_0^t I_i(\xi, \tau) \Big|_{\xi=x-v_i} (t-\tau) d\tau \right],$$

$$i \in \square, \quad t \geq 0.$$

Воспользовавшись неравенством (9) из леммы 3, получаем оценку интеграла:

$$\int_0^t I_i(\xi, \tau) \Big|_{\xi=x-v_i} (t-\tau) d\tau \leq 2N_0, \quad i \in \square,$$

$$t \geq 0, \quad x \in \square,$$

которая в сочетании с предыдущим неравенством приводит к соотношению

$$f_i(x, t) \geq \bar{f}_i(x, t) \exp(-2 \sup_{i,j \in \square} \sigma_{i,j} N_0), \quad i \in \square, \quad t \geq 0, \quad x \in \square. \quad (13)$$

В силу положительности начальных данных f имеем положительность функций $\bar{f}_i$, $i \in \mathbb{N}$, и, значит, $f_i > 0$ при $t \geq 0$. Кроме того, подставляя правую часть оценки (13) в выражение для $I_i(x, t)$, имеем неравенство:

$$I_i(x, t) \geq c_1 \bar{I}_i(x, t),$$

где постоянная $c_1 > 0$ не зависит от $i \in \mathbb{N}$. Итак, в точках, где значения $\bar{I} = +\infty$, значения оператора столкновений

$$S_i(f(x, t)) = -\infty$$

из-за строгой положительности и ограниченности величин f_i . Тем самым доказано, что в указанных точках значение характеристической производной

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + v_i \frac{\partial f_i}{\partial x} = -\infty, \quad i \in \mathbb{N},$$

т. е. возникает градиентная катастрофа, причем в этих точках

$$\sum_{i \in \mathbb{N}} S_i(f) = -\infty.$$

Теорема доказана.

Возникновение особенностей решения уравнения (1), установленное в теореме 1, обусловлено тем, что значения скорости свободного переноса частиц $\{v_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ различные при бесконечном наборе индексов $i \in \mathbb{N}$. В противном случае утверждение теоремы не имеет места, поскольку задача становится практически пространственно однородной (за исключением конечного набора индексов i), и указанный эффект, связанный с перемешиванием частиц из различных точек пространства, взятых в бесконечном количестве, не возникает. Таким образом, рассмотренное явление связано с существенной пространственной неоднородностью кинетической системы и основано на дисперсии скоростей свободного переноса частиц.

Остановимся на построении начальных данных для теоремы 1. Отметим, что значения $\bar{I}$ отыскиваются по формуле:

$$\bar{I}_i(x, t) = \sum_{j=1}^{\infty} \sigma_{i,j} |v_i - v_j| \varphi_j(x - v_j t).$$

Пусть функции $\{\varphi_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ являются гладкими, неотрицательными, финитными, причем $\bar{I}_i(x, 0) < \infty \quad \forall i$. Фиксируем $x_0 \in \mathbb{R}$, $t_0 > 0$ и положим, значения начального распределения подчиняются условию:

$$\varphi_i(x_0 + v_i t_0) = 1, \quad i \in \mathbb{N},$$

считая при этом последовательность v_i строго монотонно возрастающей; ширину носителя функции φ_i подберем так, чтобы сходились все интегралы, указанные в формулировке теоремы 1. Очевидно, что при таком выборе начальных данных в точке (x_0, t_0) значение $\bar{I}_i(x_0, t_0) = +\infty$. Естественно, от финитности φ_i можно легко отказаться, заменяя это требование на строгую положительность и достаточно быстрое стремление к нулю $\varphi_i(x)$ при $x \rightarrow \infty$. Для ограниченных монотонных скоростей свободного переноса частиц можно указать на-

чальные данные, удовлетворяющие условиям теоремы 1, когда функция $\bar{I} = +\infty$ на линии, выходящей из (x_0, t_0) и трансверсальной к характеристическим направлениям уравнения (1).

Подчеркнем еще раз, что приведенная конструкция основана на дисперсии скоростей свободного переноса для бесконечного набора индексов $i \in \mathbb{N}$. Возникающие при этом особенности спектров обусловлены взаимодействием свободного переноса и столкновений частиц, что связано с нарушением соотношения сохранения.

Имитационная модель

Множество пространственных координат Ox разобьем на ячейки $D_l = [x_l, x_{l+1})$, $x_l = lh$, $l \in \mathbb{N}$, $h > 0$, среди которых размещены частицы, занумерованные натуральными числами $1 \leq i \leq N$, $N \geq 1$. Каждому номеру i соответствует величина $m_i^{(l)}(t)$, которая равна массе i -й частицы, если она находится в момент времени t в ячейке D_l , и $m_i^{(l)}(t) = 0$ в противном случае. Если $m_i^{(l)}(t) = 0$ 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 $M(t) = \{m^{(l)}(t)\}_{l \in \mathbb{N}}$, где $m^{(l)}(t) = (m_1^{(l)}(t), m_2^{(l)}(t), \dots, m_N^{(l)}(t))$.

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

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 $\pi_l^{(s)}(t_n)$ при $s \geq 2$, входит в одну из пар $\pi_l^{(1)}(t_n), \dots, \pi_l^{(s-1)}(t_n)$, то для пары $\pi_l^{(s)}(t_n)$ коагуляция в ячейке D_l в момент времени t_n не происходит. Тем самым исключаются многократные взаимодействия для каждой частицы внутри ячеек.

Возможность коагуляции для выбранных вышеуказанным способом пар номеров сталкивающихся частиц определим розыгрышем совокупности независимых случайных величин $\eta_{(i,j)}^{(l)}(t_n)$, $l \in \mathbb{N}$, $(i, j) \in \Delta$, принимающих два значения: 0 и 1. Значение 0 означает запрет коагуляции, а 1 – наличие коагуляции для пары частиц с номерами (i, j) в ячейке D_l в момент времени t_n . Розыгрыш этих значений подчиним следующим правилам. Положим, что $\eta_{(i,j)}^{(l)}(t_n) = 0$, если $m_i^{(l)}(t_n)m_j^{(l)}(t_n) = 0$, т. е. при отсутствии, по крайней мере, одной из частиц в паре коагуляция не происходит. Если $m_i^{(l)}(t_n)m_j^{(l)}(t_n) > 0$, то значения случайной величины $\eta_{(i,j)}^{(l)}(t_n)$ задаются условной функцией распределения:

$$P\left\{\eta_{(i,j)}^{(l)}(t_n) = 1\right\} = \Phi_{m_i^{(l)}(t_n), m_j^{(l)}(t_n)},$$

$$P\left\{\eta_{(i,j)}^{(l)}(t_n) = 0\right\} = 1 - \Phi_{m_i^{(l)}(t_n), m_j^{(l)}(t_n)},$$

где $0 \leq \Phi_{k_1, k_2} = \Phi_{k_2, k_1} \leq 1$ – вероятность коагуляции сталкивающейся пары частиц с массами k_1 и k_2 .

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

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

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

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

Если же $\eta_{(i, j)}^{(l)}(t_n) = 0$, то значения $m_\alpha^{(l)}(t_n)$, $1 \leq \alpha \leq N$ остаются неизменными. Указанная процедура выполняется для всех пар выбранных номеров последовательным перебором $\pi_1^{(l)}(t_n), \dots, \pi_{Q(N)}^{(l)}(t_n)$.

После проведения перечисленных розыгрышей во всех ячейках, содержащих частицы, переходим к выборочному вероятностному пространству [7, 8], в котором все построенные выше случайные величины являются независимыми без изменения их функций распределения.

Обозначим $F_{i, k}^{(l)}(t_n) = P\{m_i^{(l)}(t_n) = k\}$. Для пары $\pi = (i, j) \in \Delta$ положим $\min \pi = i$, $\max \pi = j$.

Рассмотрим числа заполнения ячейки D_l частицами массы $k \in \square$:

$$N_k^{(l)}(t_n) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^N \delta_{k, m_i^{(l)}(t_n)}.$$

Вышеуказанной процедуре розыгрыша актов коагуляции сталкивающихся частиц в ячейке D_l соответствует следующее преобразование чисел заполнения $N_k^{(l)}(t_n) \mapsto \bar{N}_k^{(l)}(t_n)$:

$$\begin{aligned} \bar{N}_k^{(l)}(t_n) = & N_k^{(l)}(t_n) + \sum_{(i, j) \in \Delta} \sum_{s=1}^{Q(N)} \delta_{\pi_l^{(s)}(t_n), (i, j)} \prod_{q=1}^{s-1} (1 - \delta_{\min \pi_l^{(q)}(t_n), i}) \times \\ & \times (1 - \delta_{\max \pi_l^{(q)}(t_n), i}) (1 - \delta_{\min \pi_l^{(q)}(t_n), j}) (1 - \delta_{\max \pi_l^{(q)}(t_n), j}) \times \\ & \times \eta_{(i, j)}^{(l)}(t_n) \left\{ \sum_{\alpha+\beta=k} \delta_{\alpha, m_i^{(l)}(t_n)} \delta_{\beta, m_j^{(l)}(t_n)} - \delta_{k, m_i^{(l)}(t_n)} \sum_{\beta=1}^{\infty} \delta_{\beta, m_j^{(l)}(t_n)} - \delta_{k, m_j^{(l)}(t_n)} \sum_{\alpha=1}^{\infty} \delta_{\alpha, m_i^{(l)}(t_n)} \right\}. \end{aligned}$$

Все суммы здесь состоят из конечного числа ненулевых слагаемых.

Пространственный перенос

После завершения розыгрыша актов коагуляции во всех ячейках, содержащих частицы, осуществляется перемещение частиц между ячейками. Положим, что $v_k \in \square$ – скорость пространственного переноса частицы массы $k \in \square$. Размер пространственных ячеек h и шаг по времени τ подчиним условию $\tau h^{-1} = 1$. Тогда частицы массы k за время τ перемещаются из ячейки D_l в ячейку D_{l+v_k} . Тем самым определяется состояние системы в

момент времени t_{n+1} . Очевидно, $N_k^{(l)}(t_{n+1}) = \bar{N}_k^{(l-v_k)}(t_n)$.

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 $\langle N_k^{(l)}(t_n) \rangle$ среднее число частиц массы k в ячейке D_l 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_l в момент времени t_n .

Теорема 2. Пусть вероятность слияния частиц Φ_{k_1, k_2} является финитной функцией, т. е. $\Phi_{k_1, k_2} = 0$ при $k_1 \geq M_0$ или $k_2 \geq M_0$. Тогда средние концентрации $u_{k,N}^{(l)}(t_n)$ подчиняются разностному уравнению

$$u_{k,N}^{(l)}(t_{n+1}) = u_{k,N}^{(l-v_k)}(t_n) + \tau S_k^{(M_0)}(u_{\bullet, N}^{(l-v_k)}(t_n)) + \tau O(h^{-2}(N-1)^{-1}),$$

$$N \geq 2,$$

где оценка O является равномерной относительно t_n , $S_k^{(M_0)} = I_k^{(M_0)} S_k(I^{(M_0)} \cdot u)$, где $I_k^{(M_0)}$ – индикатор натуральных чисел, не превосходящих M_0 .

Следствие. Пусть выполнены условия теоремы 2 и существует $\lim_{N \rightarrow \infty} u_{k,N}^{(l)}(0) = u_k^{(l)}(0)$.

Предположим, что $\frac{Q(N)}{N} \rightarrow \infty$ при $N \rightarrow \infty$. Тогда при каждом $t_n \geq 0$ существует $\lim_{N \rightarrow \infty} u_{k,N}^{(l)}(t_n) = u_k^{(l)}(t_n)$, подчиняющийся разностному уравнению:

$$u_k^{(l)}(t_{n+1}) = u_k^{(l-v_k)}(t_n) + \tau S_k^{(M_0)}(u_{\bullet}^{(l-v_k)}(t_n)). \quad (14)$$

Теорема 3. Пусть начальные функции (2) являются гладкими, а начальные значения в разностном уравнении (14) согласованы с (2) так, что

$$u_k^{(l)}(0) = \phi_k(x_l) \geq 0, \quad 1 \leq k \leq M_0. \quad (15)$$

Тогда при условии $\tau h^{-1} = 1$ разностная схема (14), (15) сходится к единственному гладкому неотрицательному решению задачи Коши:

$$\frac{\partial u_{k,M_0}(x,t)}{\partial t} + v_k \frac{\partial u_{k,M_0}(x,t)}{\partial x} = S_k^{(M_0)}(u_{\bullet, M_0}(x,t)), \quad x \in \square, \quad t \geq 0, \quad 1 \leq k \leq M_0, \quad (16)$$

$$u_{k,M_0}(x,0) = u_k^0(x) \quad 1 \leq k \leq M_0, \quad x \in \square. \quad (17)$$

Методами работ [9, 10] можно показать, что в случае выполнения условий

$$0 \leq \Phi_{k_1, k_2} = \Phi_{k_2, k_1} \leq 1, \quad k_1, k_2 \in \square,$$

$$\Phi_{k,k} = 0, \quad k \in \square,$$

из последовательности решений задачи Коши (16), (17) можно выделить подпоследовательность, слабо сходящуюся к обобщенному решению задачи Коши (1), (2).

Аналогичным образом за счет выбора соотношения $h\tau^{-1} \in \square$ вышеуказанные результаты можно распространить на скорости переноса с рациональными значениями, а далее за счет непрерывной зависимости решений задачи (16), (17) от v_k – на все действительные значения скорости переноса.

Тестирование модели пространственно неоднородной медленной коагуляции

Моделирование пространственно неоднородной коагуляции реализовывалось на основе программы NUSMOL. На рис. 1, 2 приведены расчеты в случае вероятности слияния пары частиц $\Phi=1$, шаг по времени $\tau=0.02$, шаг по пространственной переменной $h=0.02$, скорость пространственного переноса $v_k=k$. В системе 25 000 частиц, на каждом шаге по времени в каждой ячейке разыгрывалось 30 000 повторных испытаний. Выведены значения концентраций при значениях $k=1, 2$ на отрезке времени от 0.0 до 0.7 (слева). Справа выведена пространственная развертка значений концентраций в расчетной области от 0 до 2. Белые точки – результат розыгрыша Монте-Карло, красные точки – расчет по разностной схеме решения задачи Коши для пространственно-неоднородного уравнения Смолуховского (1). На верхнем графике представлена суммарная концентрация частиц. Графики временной развертки концентраций при значениях $k=1, 2$ приведены для точки наблюдения $x=1.3$.

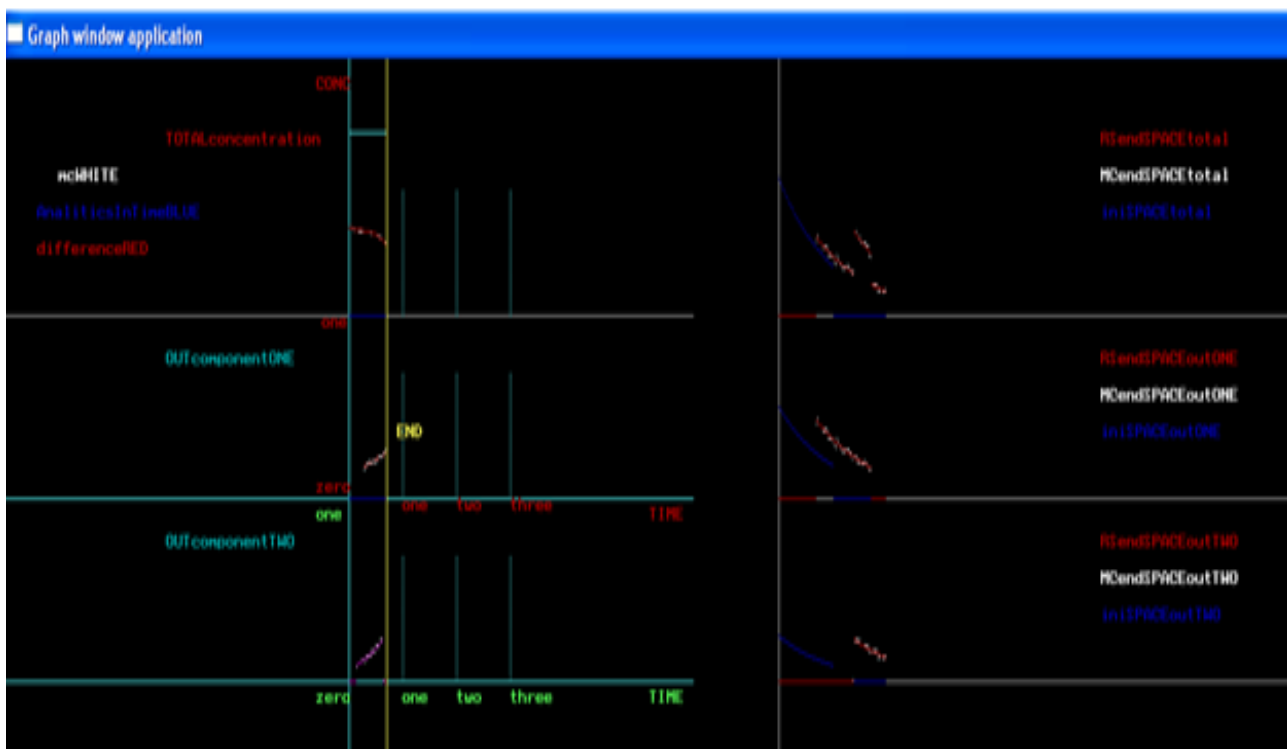


Рис. 1. Расчет по программе NUSMOL для пространственно неоднородной коагуляции

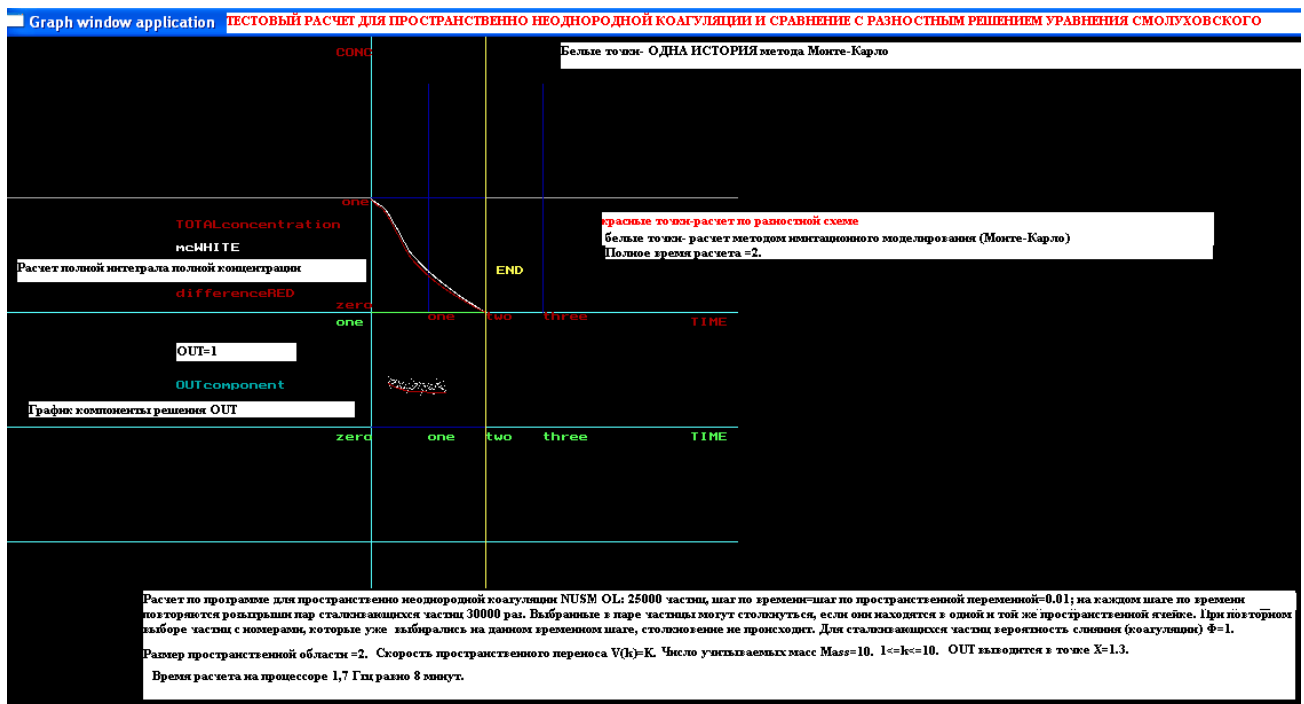


Рис. 2. Расчет по программе NUSMOL для пространственно неоднородной коагуляции

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 15-41-00013 –урал_a.

Литература

1. Шпильман А. В. Геологическое строение и нефтегазоносность баженовской свиты Западно-Сибирской нефтегазоносной провинции // Математика и информационные технологии в нефтегазовом комплексе. Избранные труды. Сургут, 2017. С. 146–153.
2. Волощук В. М., Седунов Ю. С. Процессы коагуляции в дисперсных системах. Л. : Гидрометеиздат, 1975. 320 с.
3. Волощук В. М. Кинетическая теория коагуляции. Л. : Гидрометеиздат, 1984.
4. Иванов И., Платицанов Д. Коллоиды. Л. : Химия, 1975. 152 с.
5. Иванов Н. В., Пискунов В. Н. Моделирование процессов переноса и осаждения аэрозольных частиц методом Монте-Карло // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Математическое моделирование физических процессов. 1991. Вып. 2. С. 73–78.
6. Колмогоров А. Н., Фомин С. В. Элементы теории функций и функционального анализа. М. : Наука, 1972. 496 с.
7. Розанов Ю. А. Теория вероятностей, случайные процессы и математическая статистика. М. : Наука, 1985. 320 с.
8. Галкин В. А. Сходимость разностных схем и метода непосредственного моделирования к решениям уравнения Смолуховского кинетической теории коагуляции // Доклады РАН. 2004. № 1. С. 4–11.
9. Галкин В. А. Обобщенное решение уравнения Смолуховского для пространственно неоднородных систем // ДАН СССР. 1987. Т. 293. № 1. С. 74–77.
10. Галкин В. А. Уравнение Смолуховского. М. : ФИЗМАТЛИТ, 2001. 336 с.