

Р.Р. Загидуллин

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ПЕРЕНОСА - КОАГУЛЯЦИИ В ДВУМЕРНОЙ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ОБЛАСТИ

Введение

Перенос и коагуляция могут проходить в системах, где присутствуют хаотически движущиеся частицы разных размеров. При этом распределение этих частиц в разных областях пространства меняется. Частицы случайно сталкиваются друг с другом и могут слипнуться, образовав новую более крупную частицу. Например, подобные процессы протекают при образовании звезд.

Для моделирования процесса коагуляции используются уравнения Смолуховского. Чтобы добавить пространственную неоднородность, в данной работе к уравнениям Смолуховского добавляется оператор переноса [1]. В данной главе будет показано решаемое уравнение и приведена постановка задачи. Далее будет представлена численная схема. В конце мы увидим результаты решения задачи.

Уравнение переноса-коагуляции выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(t, x, y, v)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{c}(x, y, v) f(t, x, y, v)) = \\ = \frac{1}{2} \int_0^v K(u, v-u) f(t, x, y, u) f(t, x, y, v-u) du - f(t, x, y, v) \int_0^\infty K(u, v) f(t, x, y, u) du \end{aligned} \quad (1)$$

где x, y – пространственные координаты, v – размеры частиц, \vec{c} – скорость переноса, $K(u, v)$ – ядро коагуляции, f – распределение частиц.

Формула для ядра коагуляции зависит от физических свойств рассматриваемой системы. В данной работе используется баллистическое ядро:

$$K(u, v) = (u^{\frac{1}{3}} + v^{\frac{1}{3}})^2 \sqrt{\frac{1}{u} + \frac{1}{v}} \quad (2)$$

Для однозначного решения уравнения необходимы начальные условия ($f(t=0)$), а также граничные условия по пространству ($f(x, y \in \partial D) = 0$). Область D , на которой решается уравнение, имеет три размерности – две по пространству и одну по размерам частиц ($D := [0.0 \leq x \leq 3.0; 0.0 \leq y \leq 0.5; 0.0 \leq v \leq 1.0]$). Начальные условия приведены на Рис. 1.

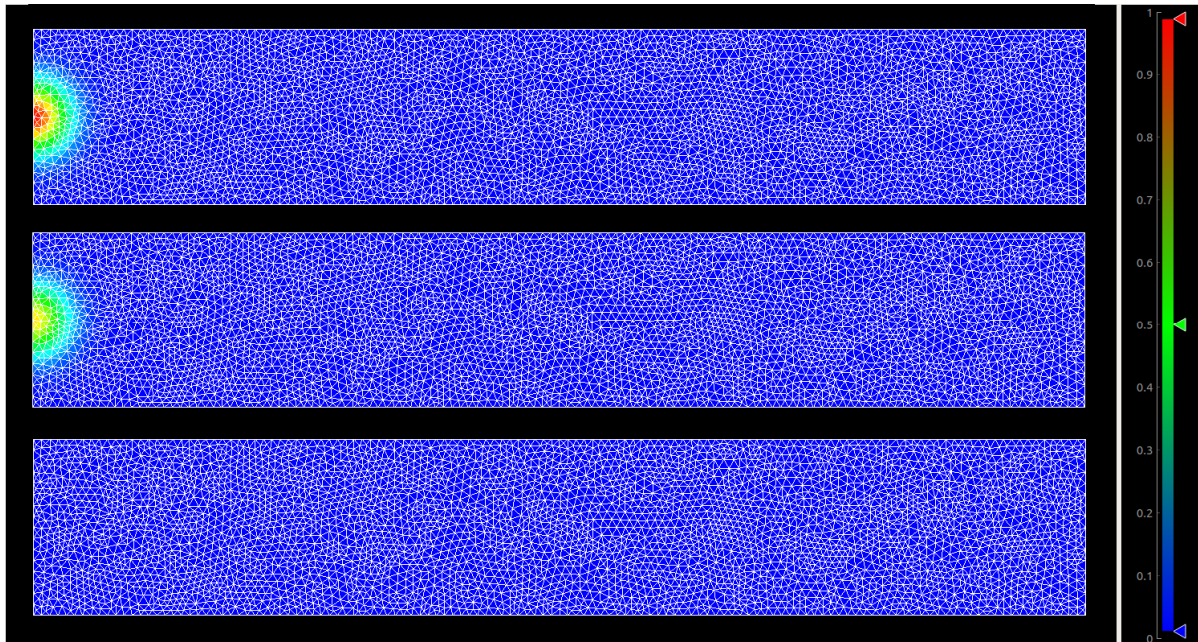


Рис.1. Начальные условия для задачи переноса-коагуляции. Моделируется перенос вправо постоянного потока частиц с постоянной скоростью. На самой верхней картинке изображены частицы малого размера, далее вниз: частицы среднего размера и частицы большого размера (частицы большого размера в начальной конфигурации отсутствуют). На правой границе установлен PML слой.

Численная схема

Пространственная область разбита на треугольники. Дискретизация по оси размеров частиц имеет структурированный вид и представляет из себя разбиение на равные отрезки. Стоит отметить, что для постановки задачи, указанной в данной работе, необходимость в неструктурированной сетке отсутствует. Однако в данном случае рассматриваемая область построена таким образом для удобства расчета относительной погрешности численного решения. Одной из целей работы является построение численной схемы, способной работать на областях произвольной формы (где триангуляция будет необходима или удобна). Если предположить, что два физических процесса незначительно влияют друг на друга, то численную схему можно построить, взяв за основу возможность независимого расчета операторов переноса и коагуляции [2]. Тогда общая явная схема будет выглядеть следующим образом:

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = A(f^n) + S(f^n) \quad (3)$$

Где $A(f)$ – оператор переноса, $S(f)$ – оператор Смолуховского.

Уравнение переноса решается с использованием метода конечных объемов и функции-ограничителя [3-6]. Чтобы мы могли применить

метод конечных объемов, нам необходимо знать информацию из треугольной ячейки сетки, показанной на Рис. 2.

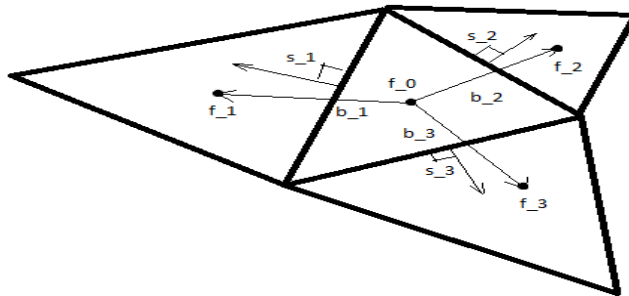


Рис.2. b_1, b_2, b_3 – векторы расстояния между центрами треугольников, s_1, s_2, s_3 – внешние нормали сторон треугольника, f_1, f_2, f_3 – значения искомой функции f (хранятся в центрах треугольников).

Для применения метода конечных объемов также необходимо интерполировать значения функции f из центров треугольников на середины сторон. Делается это при помощи формулы:

$$f^* = \left(1 - \frac{\phi(r)}{L}\right) f_c + \frac{\phi(r)}{L} f_D \quad (4)$$

Где C – центральная ячейка, D – ячейка, куда происходит перенос (downwind), $L = \frac{|\vec{d}_c| + |\vec{d}_D|}{|\vec{d}_c|}$ – удельный вес значения функции из той или иной ячейки на результата интерполяции C , $|\vec{d}_c|, |\vec{d}_D|$ – расстояние между центром треугольника и его стороной, $\phi(r)$ – функция-ограничитель, сохраняющая монотонность решения.

Теперь можно использовать интерполированные значения f^* .

Уравнение переноса:

$$\frac{\partial f(t, x, y)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{c} f(t, x, y)) = 0 \quad (5)$$

Интегрируем по R части уравнения:

$$\iint_R \frac{\partial f(t, x, y)}{\partial t} dR + \iint_R \vec{\nabla} \cdot \vec{F} dR = 0 \quad (6)$$

Где $\vec{F} = \vec{c} f(t, x, y)$.

Если область R достаточно мала, первое слагаемое левой части уравнения можно заменить на произведение значения функции и площади малой области. Для второго уравнения используем формулу Гаусса-Остроградского:

$$A_R \frac{\partial f(t, x, y)}{\partial t} + \oint_S \vec{F} \cdot \vec{n} dS_R = 0 \quad (7)$$

Вводим триангуляцию. Получаем следующую формулировку для оператора переноса:

$$A(f^n) = -\frac{1}{A_R} \sum_{k=1}^3 \vec{F}_k^n \cdot \vec{s}_k \quad (8)$$

Где \vec{s}_k – внешняя нормаль, длина которой равна длине соответствующей стороны, \vec{F}_k – поток частиц, переносимый через k-ую сторону треугольника. \vec{F}_k хранится в центре стороны треугольника (чтобы посчитать поток нужны интерполированные значения функции f^*).

Решение уравнений Смолуховского с использованием малорангового разложения коагуляционного ядра приведены в работе [7]. Опишем кратко алгоритм.

Аппроксимируем коагуляционное ядро суммой произведений векторов [8].

$$K(u, v) = \sum_{\alpha=1}^R a_\alpha(u) b_\alpha(v) \quad (9)$$

Вставляем малоранговое представление в интегралы и выносим из-под интеграла независимые от интегрирования компоненты. В итоге получаются следующие формулировки:

$$S(f^n) = \sum_{\alpha=1}^R \int_0^v a_\alpha(u) f^n(u) b_\alpha(v-u) f^n(v-u) du - \sum_{\alpha=1}^R b_\alpha(u) \int_0^{V_{\max}} a_\alpha(u) f^n(u) du \quad (10)$$

Для решения первого интеграла можно воспользоваться алгоритмом быстрого преобразования Фурье ($O(NRM \log M)$ операций на всей области D). Второй интеграл считается численно квадратурными формулами за $O(NRM)$ операций, где N – количество треугольников в пространственной сетке, M – количество точек в дискретизации оси размеров частиц. R – ранг ядра коагуляции.

Результаты

В данной главе приведены результаты численного решения представленного уравнения. Моделировался постоянный поток частиц, гетерогенных по размеру. Частицы движутся с постоянной скоростью по пространственной области и коагулируют. На правой границе частицы проходят через PML слой, который поглощает отражение функции от границы [9]. Рис. 3, 4 показывают решение уравнения при заданных начальных условиях соответственно на 800-ой и 1600-ой итерациях численного метода.

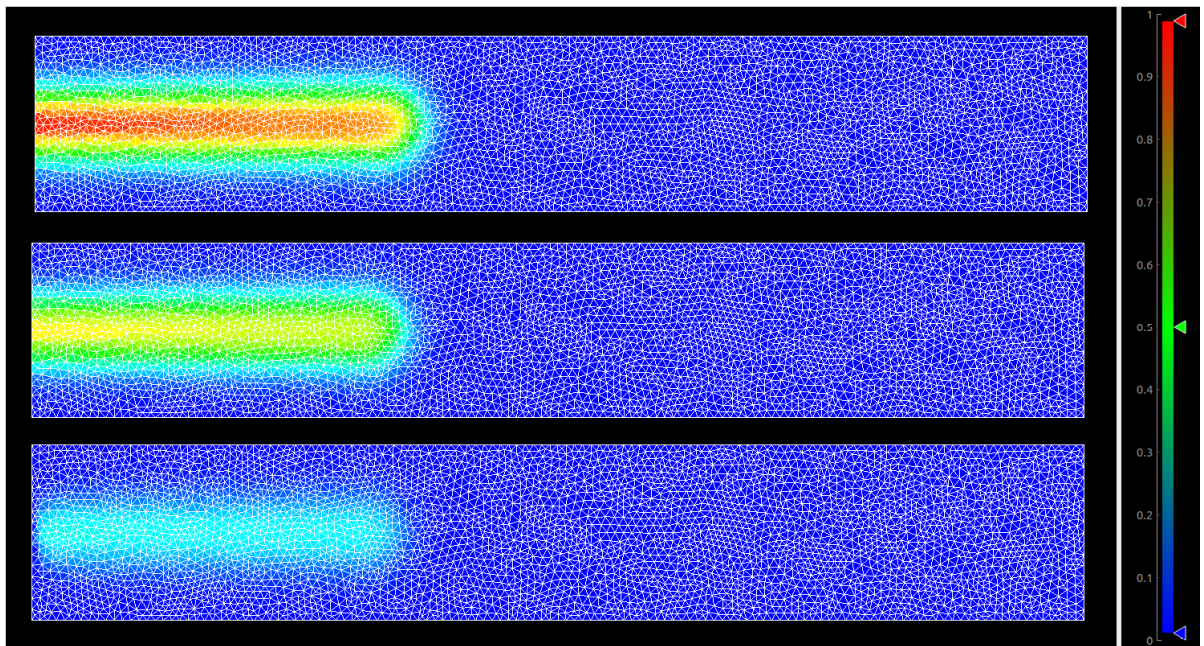


Рис.3. Решение поставленной задачи переноса-коагуляции на 800-ом шаге по времени.

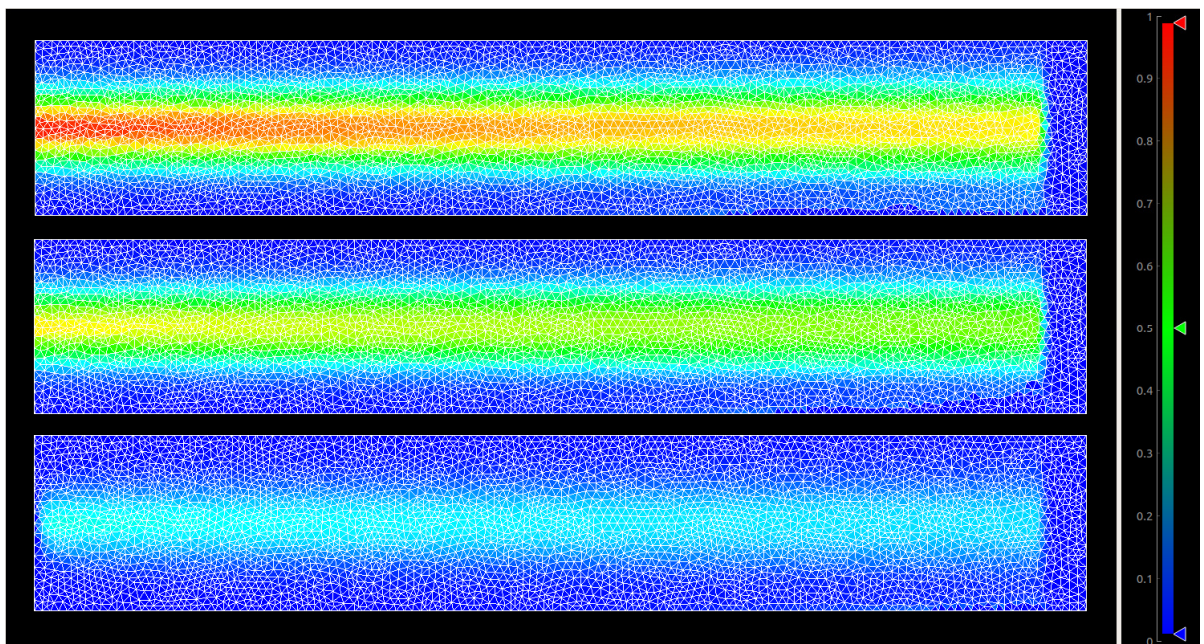


Рис. 4. Решение поставленной задачи переноса-коагуляции на 1600-ом шаге по времени.

Для оценки сходимости решения рассматривается относительная погрешность по Чебышевской норме (Таблица 1).

$\ f^{\Delta h, \Delta t} - f^{\frac{\Delta h}{2}, \frac{\Delta t}{2}} \ _C$	$\ f^{\frac{\Delta h}{2}, \frac{\Delta t}{2}} - f^{\frac{\Delta h}{4}, \frac{\Delta t}{4}} \ _C$	$\ f^{\frac{\Delta h}{4}, \frac{\Delta t}{4}} - f^{\frac{\Delta h}{8}, \frac{\Delta t}{8}} \ _C$	$\ f^{\frac{\Delta h}{8}, \frac{\Delta t}{8}} - f^{\frac{\Delta h}{16}, \frac{\Delta t}{16}} \ _C$
0.06002	0.032	0.023	0.0095

Таблица 1. Разность численных решений в момент $t = 0.5$ по Чебышевской норме при измельчении шагов по пространству и времени $\Delta h = 0.01, \Delta t = 0.005$.

На Рис. 3 показана сетка при $\frac{\Delta h}{8}$.

Из таблицы можно сделать вывод, что численное решение обладает свойством сходимости. Однако порядок сходимости очень маленький. Это объясняется наличием разрыва в начальном условии по размерам сетки (частицы крупнее определенного значения отсутствуют). Если убрать разрыв, то таблица сходимости будет иметь следующий вид (Таблица 2):

$\ f^{\Delta h, \Delta t} - f^{\frac{\Delta h}{2}, \frac{\Delta t}{2}} \ _C$	$\ f^{\frac{\Delta h}{2}, \frac{\Delta t}{2}} - f^{\frac{\Delta h}{4}, \frac{\Delta t}{4}} \ _C$	$\ f^{\frac{\Delta h}{4}, \frac{\Delta t}{4}} - f^{\frac{\Delta h}{8}, \frac{\Delta t}{8}} \ _C$	$\ f^{\frac{\Delta h}{8}, \frac{\Delta t}{8}} - f^{\frac{\Delta h}{16}, \frac{\Delta t}{16}} \ _C$
0.0153	0.0032	0.0005	0.00001

Таблица 2. Разность численных решений в момент $t = 0.5$ по Чебышевской норме при измельчении шагов по пространству и времени для гладкого начального условия.

Получаем порядок сходимости выше первого. Данный метод позволяет моделировать явления переноса коагулирующих частиц. Однако система должна быть достаточно простой, чтобы отсутствовало влияние физических процессов на коэффициенты, участвующие в формулировке исходного уравнения.

Литература

1. Zagidullin R.R., Smirnov A.P., Matveev S.A., Tyrtysnikov E.E. An efficient numerical method for a mathematical model of a transport of coagulating particles. Moscow University Computational Mathematics and Cybernetics, т. 41, 2017, с. 179-186
2. Betelin V.B. Galkin V.A. On the formation of structures in the nonlinear problems of physical kinetics. //Doklady Mathematics, 2019
3. Denner F., van Wachem B.G.M. TVD differencing on three-dimensional unstructured meshes with monotonicity-preserving correction of mesh skewness. //Journal of Computational Physics, т. 298, 2015, с. 466-479
4. Darwish M.S., Moukalled F. TVD schemes for unstructured grids. International Journal of Heat and Mass Transfer, т. 46, 2003, с. 599-611

5. *Syrakos A., Varchanis S., Dimakopoulos Y., Goulas A., Tsamopoulos J.* A critical analysis of some popular methods for the discretization of the gradient operator in finite volume methods. // *Physics of Fluids*, т. 29, 2017, с. 127103
6. *Sozer E., Brehm C, Kiris C.C.* Gradient calculation methods on arbitrary polyhedral meshes for cell-centered CFD solvers.//*Science and Technology Forum and Exposition: Conference Paper 2014*
7. *Matveev S.A, Tyrtysnikov E.E., Smirnov A.P., Brilliantov N.V.* A fast numerical method for solving the smoluchowski-type kinetic equations of aggregation and fragmentation processes.//*Vychislitel'nye Metody I Programirovanie*, т. 15, 2014, с. 1-8
8. *Tyrtysnikov E.E.* Incomplete cross approximation in the mosaic-skeleton methods. // *Programirovanie*, т. 64, 2000, с. 367-380
9. *Berenger J.-P.* A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. // *Journal of Computational Physics*, т. 114, 1994, с. 185-200