ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

На правах рукописи

Долгошеина Елена Борисовна

ЧИСЛЕННЫЕ И АНАЛИТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ КИНЕТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ И НЕКОТОРЫЕ ИХ ПРИЛОЖЕНИЯ.

01.01.07 - вычислительная математика

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна - 1990

Работа выполнена в ордена Ленина Институте прикладной математики имени М.В.Келдыша Академии наук СССР

Научный руководитель: доктор физико-математических наук
А.В.Бобылев

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук
профессор Б.Н.Четверушкин,
кандидат физико-математических наук
доцент А.В.Лукшин

Ведущая организация – Вычислительный центр АН СССР

Автореферат разослан ...1 октября...1990г.,
защита диссертации состоится ...1 ноября...1990г.,
в .... на заседании Специализированного совета Д047.01.04 при лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединённого института ядерных исследований.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Учёный секретарь
Специализированного совета
к.ф.-м.н. З.М.Иванченко

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Целый ряд физических явлений из различных областей науки требует описания с помощью кинетических уравнений, то есть уравнений для одночастичной функции распределения. Классические газы и плазма являются наиболее традиционной областью применения нелинейных кинетических уравнений Больцмана, Власова, Ландау и др. В последние годы кинетические уравнения применяются также во многих нетрадиционных областях – астрофизике, химии, биологии.

В настоящее время развиваются различные подходы к решению задач, требующих описания на кинетическом уровне. Это методы поиска приближенных аналитических решений, различные методы монте-карловского моделирования исследуемых процессов и численные методы решения непосредственно кинетических уравнений.

Общий подход к решению задач такого типа един. Дело в том, что выбор математической модели и метода решения (численного или аналитического) соответствующих кинетических уравнений должны быть тесно связаны с характером постановки реальной задачи. С практической точки зрения это означает, что математические задачи, возникающие из физической проблемы с неопределенной постановкой, требуют лишь приближенных решений. Поэтому при применении кинетических уравнений (особенно к нетрадиционным областям) на передний план выходит проблема построения математической модели и выбор метода решения.

В диссертации представлены задачи из трех различных областей науки, а именно из динамики разреженных газов, иммунологии и астрофизики.

Задачи динамики разреженных газов (задачи, описываемые уравнением Больцмана) исследовались в работе численно. Задача о пространственно однородной релаксации численно решалась с помощью широко используемого метода Бёрда; задача о структуре фронта ударной волны исследовалась с помощью регулярного численного метода. Целью проведения этих расчетов было получение максимально точных результатов, возможных при использовании соответствующих численных методов и сравнение этих результатов с существующими аналитическими решениями.

Для иммунологической задачи об агглютинации бактерий в диссертации построена математическая модель, основным в которой является кинетическое уравнение коагуляции Смолуховского. Выписано аналитическое решение одного из вариантов модели.

Задача из области астрофизики - задача о переносе нейтрино в ядре коллапсирующей звезды исследовалась с помощью классического метода Чепмена-Энскога. Получены основные характеристики нейтринного импульса от звезды как решение задачи в диффузионном приближении.

Помимо актуальности разработки методом численного и аналитического исследования задач, описываемых кинетическими уравнениями, а также сравнения эффективности и целесообразности различных методов, работа актуальна и с точки зрения прикладного значения исследуемых задач.

Разработка кинетических моделей процесса агглютинации открывает возможности моделирования иммунной системы организма, а также совершенствования путей направленного воздействия на нее.

Задача о переносе нейтрино в веществе ядра коллапсирующей звезды - лишь небольшая часть задачи о гравитационном коллапсе, одной из основных задач современной астрофизики. Наконец, задача о стационарной ударной волне в больцмановском газе - это классическая проблема динамики разреженного газа, связанная с общеизвестными практическими приложениями этой области механики.

Цель работы

I) Разработка численных методов расчета течений больцмановского газа, в частности - построение разностной схемы для двумерного уравнения Больцмана с сечением рассеяния специального вида и проведение серии расчетов задачи о структуре фронта ударной волны с использованием этой схемы;
2) построение кинетической модели процесса агрегации в двухкомпонентной системе, сравнение аналитического решения одного из вариантов модели с результатами эксперимента по агглютинации бактерий антителами;
3) вывод диффузионного приближения для нелинейного уравнения переноса нейтрино в ядре коллапсирующей звезды, получение основных характеристик нейтринного импульса от звезды в диффузионном приближении.

Научная новизна

I) Построен полностью регулярный численный метод расчета двумерного уравнения Больцмана с сечением специального вида

$\sigma(u,\theta)=\sigma(u)\cdot 1/2\cdot[\delta(\theta-\frac{\pi}{2})+\delta(\theta+\frac{\pi}{2})]$. С использованием этого численного метода проведены расчеты задачи о поршне и задачи о стационарной ударной волне, полученное численное решение сравнивалось с приближенным решением Мотт-Смита, при этом наибольшие отличия (~ 50 % по толщине волны) получены при $M=\infty$.
2) Предложена кинетическая модель процесса агрегации в двухкомпонентной системе поливалентных частиц. Один из вариантов модели позволяет выписать аналитическое решение, которое демонстрирует хорошее качественное совпадение с результатами эксперимента по агглютинации бактерий.
3) В результате исследования нелинейного уравнения переноса нейтрино в ядре коллапсирующей звезды получено решение задачи в диффузионном приближении и выведены простые аналитические зависимости для экспериментально наблюдаемых величин: потока вылетающих частиц и их характерной энергии.

Апробация работы: Основные результаты диссертации докладывались на научном семинаре под руководством проф. М.В.Масленникова в ИПМ им. М.В.Келдыша АН СССР, на семинаре лаборатории иммунобиохимии в Институте биохимии им. А.Н.Баха АН СССР, на X Всесоюзной конференции "Динамика разреженных газов" (Москва, июнь I989 года).

Публикации: Основные результаты диссертации опубликованы в 5 работах, список которых помещен в конце автореферата.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и приложения. Общий объем работы составляет I43 страницы, включая 27 рисунков (28 стр.), 2 таблицы и список литературы из 65 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы, дан общий обзор литературы по теме диссертации, а также краткая характеристика содержания работы.

Первая глава "Уравнение Больцмана. Здачи о релаксации и структуре фронта ударной волны" состоит из I0 параграфов.

В §I вводится уравнение Больцмана. §2-§3 посвящены численному исследованию пространственно-однородной релаксации газа псевдомаксвелловских молекул методом Бёрда.

Уравнение Больцмана для одночастичной функции распределения

$f(\vec{v},\vec{r},t)$ (где $\vec{v}$ - вектор скорости, $\vec{r}$ - вектор пространственной координаты, t - время) записывается следующим образом:

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\vec{v}\frac{\partial f}{\partial \vec{r}}=\int\limits_{R^3} d\vec{w}\int\limits_{\Omega} d\theta\, g(u,\cos\theta)\{f(\vec{w}',\vec{r},t)f(\vec{v}',\vec{r},t)-f(\vec{w},\vec{r},t)f(\vec{v},\vec{r},t)\}=I_{cm}$$

Здесь f - функция распределения частиц, I_{cm} - интеграл столкновений Больцмана, где $\vec{v},\vec{w}$ - скорости частиц до столкновения, $\vec{v}',\vec{w}'$ - скорости после столкновения:

$$\vec{v}'=\frac{1}{2}(\vec{v}+\vec{w}+u\vec{n}) \quad , \quad \vec{w}'=\frac{1}{2}(\vec{v}+\vec{w}-u\vec{n})$$

$\vec{u}=\vec{v}-\vec{w}$ - относительная скорость сталкивающихся частиц, $\vec{n}$ - единичный вектор, $\cos\theta=\vec{u}\vec{n}/|\vec{u}|$, θ - угол поворота вектора относительной скорости частиц в результате их столкновения; $g(u,\cos\theta)$ - индикатриса рассеяния, численно равная произведению дифференциального сечения рассеяния на $u=|\vec{u}|$.

Задача о релаксации газа псевдомаксвелловских молекул ($g(u,\cos\theta)=const$) решалась методом прямого статистического моделирования (методом Бёрда). Была проведена серия расчетов на разном числе моделирующих частиц (N) и результаты расчетов усреднялись по разному числу испытаний (M). Результаты расчетов сравнивались с точными следствиями уравнения Больцмана (моментами функции распределения и "нормальными координатами" [I]).

§4-§9 посвящены регулярному численному методу расчета уравнения Больцмана. С помощью этого метода исследовались задачи о поршне и о фронте ударной волны.

В работе построен полностью регулярный численный метод (разностная схема) для двумерного уравнения Больцмана с индикатрисой рассеяния специального вида $g(u,\theta)=g(u)\cdot\frac{1}{2}\cdot[\delta(\theta-\frac{\pi}{2})+\delta(\theta+\frac{\pi}{2})]$
В этом случае уравнение Больцмана записывается таким образом:

I. А.В.Бобылев. Точные и приближенные методы в теории нелинейных кинетических уравнений Больцмана и Ландау - М., ИПМ, 1987.

$$\frac{\partial f}{\partial t}+v_x\frac{\partial f}{\partial x}+v_y\frac{\partial f}{\partial y}=\int d\vec{w}\, g(u)\left(f(\vec{w}')f(\vec{v}')-f(\vec{w})f(\vec{v})\right)=J_{cm}$$

где $\vec{v}'=\frac{1}{2}(\vec{w}+\vec{v}+u\vec{n}_\perp)$; $\vec{w}'=\frac{1}{2}(\vec{w}+\vec{v}-u\vec{n}_\perp)$ $(|\vec{n}_\perp|=1,(\vec{n}_\perp,\vec{u})=0)$

Это уравнение допускает естественную запись на равномерной (в пространстве скоростей) сетке, то есть для него просто построить разностную схему. Такая схема является полностью консервативной и не требует никаких искусственных приемов для выполнения законов сохранения.

С помощью предложенной разностной схемы (§4-§5 Главы I) исследовались задачи о пространственно-однородной релаксации (§ 5), о фронте стационарной ударной волны (§6-8) и о поршне (§9). Наибольшее внимание было уделено задаче о фронте ударной волны.

Постановка задачи о стационарной ударной волне в модельном газе выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} v_x\dfrac{\partial f}{\partial x}=\int d\vec{w}\, g(u)\left[f\left(\dfrac{\vec{w}+\vec{v}+u\vec{n}_\perp}{2}\right)f\left(\dfrac{\vec{w}+\vec{v}-u\vec{n}_\perp}{2}\right)-f(\vec{v})f(\vec{w})\right]=J_{cm}. \\ f_1(v_x<0,x\to+\infty)=\dfrac{n_1}{2\pi T_1}\exp\left(-\dfrac{(v_x-u_1)^2+v_y^2}{2T_1}\right); f_2(v_x>0,x\to-\infty)=\dfrac{n_2}{2\pi T_2}\exp\left(-\dfrac{(v_x-u_2)^2+v_y^2}{2T_2}\right) \end{cases}$$

Здесь $n_{1,2}$; $u_{1,2}$; $T_{1,2}$ - плотность, средняя скорость и температура газа перед и за фронтом ударной волны соответственно.

Численное решение этой задачи искалось методом установления как решение следующей задачи Коши:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f}{\partial t}+v_x\dfrac{\partial f}{\partial x}=J_{cm}. \\ f(\vec{v},x\geq 0,t=0)=\dfrac{n_1}{2\pi T_1}\exp\left[-\dfrac{(v_x-u_1)^2+v_y^2}{2T_1}\right]; f(\vec{v},x<0,t=0)=\dfrac{n_2}{2\pi T_2}\exp\left[-\dfrac{(v_x-u_2)^2+v_y^2}{2T_2}\right] \end{cases}$$

Стационарное решение получается в результате итераций (шагов по времени) от начального разрыва. Для получения хорошо установившегося решения требуется проведение 200-400 итераций. Мы считаем решение установившимся, когда значения потоков массы, импульса и энергии отличаются не более, чем на несколько процентов от равновесных значений соответствующих потоков. Расчеты проводились для волн разной интенсивности; число Маха волны ($M = u_1/c_1$, c_1 - скорость звука в газе перед фронтом ударной волны) варьировалось от $M=2$ до $M=\infty$. Расчеты проводились для газа максвелловских молекул $g(u,\theta)=g_0\cdot\frac{1}{2}\cdot[\delta(\theta-\frac{\pi}{2})+\delta(\theta+\frac{\pi}{2})]$ и для газа частиц, взаимодействующих как твердые шары: $g(u,\theta)=\tau_0|\vec{u}|\cdot\frac{1}{2}[\delta(\theta-\frac{\pi}{2})+\delta(\theta+\frac{\pi}{2})]$ (всюду $u=|\vec{u}|$ - модуль относительной скорости сталкивающихся частиц). Результаты проведенных расчетов обсуждаются в §8, там же проводится сравнение численного решения с приближенным аналитическим решением Мотт-Смита $(Q=V_x^2)$. Во всех случаях численное решение получается более пологим, чем решение Мотт-Смита. В случае ударной волны бесконечной интенсивности ($M=\infty$) расхождение по ширине волны Γ составляет порядка 50 % ($\Gamma=(n_2-n_1)/(\frac{dn}{dx})_{max}$, где $(dn/dx)_{max}$ - максимальный градиент в волне).

Расчеты задачи о структуре ударной волны с помощью регулярного метода потребовали большого объема вычислительной работы, так как в этом случае целью было получить как можно более точные результаты для проверки существующего широко используемого приближенного решения. Для получения максимально точного решения была проведена серия расчетов на различных сетках, в том числе и очень подробных (§9).

<u>Глава вторая</u> "Уравнение Смолуховского. Задача о коагуляционном фазовом переходе и кинетическая модель агрегации в двухкомпонентной системе" состоит из 5 параграфов.

В §I вводится уравнение Смолуховского.

Рассмотрим систему N частиц с массами $m_1,\dots,m_N$, способных вступать в парные взаимодействия. Взаимодействие между частицами, имеющими массы m_i и m_j , приводит к тому, что они слипаются, то есть образуют частицу с массой (m_i+m_j). Вероятность такого слипания в единицу времени характеризуется ядром $\beta(m_i,m_j)$, причем $\beta(m_i,m_j)=\beta(m_j,m_i)$.

В пределе $N\to\infty$ систему можно описать функцией распределения $n(m,t)$, выражающей плотность числа частиц с массой m в момент времени t .

$$\frac{\partial n(m)}{\partial t} = \frac{1}{2}\int_0^m dm'\beta(m-m',m')n(m-m')n(m')-n(m)\int_0^\infty dm'\beta(m,m')n(m')$$

$$0\le m<\infty,\ t>0$$

В §2 рассматривается уравнение Смолуховского с ядром, пропорциональным произведению масс сталкивающихся частиц: $\beta(m,m')=\alpha m m'$. Для такого случая уравнения Смолуховского аналитическое решение было выписано сравнительно недавно. Оказывается,что решение этого уравнения, начиная с некоторого момента времени $t=t_*$, обращает в бесконечность все моменты функции распределения, начиная со второго ($n\geqslant 2$, $M_n(t)=\int_0^\infty dm\, m^n\cdot n(m,t)$). По всей видимости это решение при $t>t_*$ нефизично и уравнение Смолуховского не описывает систему при $t>t_*$. Встают естественные вопросы: I) почему уравнение перестает описывать систему слипающихся частиц, начиная с некоторого момента времени t_* , 2) как продолжить решение в область $t>t_*$? В литературе на сегодняшний день существуют два решения задачи для

Для того,чтобы посмотреть,что реально происходит в системе большого, но конечного числа попарно слипающихся частиц, в данной работе процесс коагуляции моделировался с помощью метода Монте-Карло. Проведено сравнение результатов моделирования с существующими аналитическими решениями (§ 2).

В §3-§5 рассматривается кинетическая модель агрегации в двухкомпонентной системе поливалентных частиц.

Физическая модель задачи возникла у экспериментаторов - иммунологов в результате изучения процесса агглютинации клеток антителами. (Агглютинацией в иммунологии называют процесс агрегации одного сорта частиц за счет их "сшивки" частицами другого сорта).

Схематично постановку задачи можно описать следующим образом: в начальный момент времени ($t=0$) в системе имеются частицы двух сортов: поливалентные частицы (назовем их клетками) и двухвалентные частицы (назовем этот сорт частиц лигандом). Клетки по размеру значительно крупнее частиц лиганда. Клетки способны соединяться в образования больших размеров (агрегаты) посредством частиц лиганда. В этом случае лиганд играет роль "цемента" для клеток. В системе параллельно идут два процесса: связывание частиц лиганда с клетками и "слипание" клеток в агрегаты (§ 3). В работе этот процесс описывается с помощью системы уравнений, основным в которой является уравнение Смолуховского для концентрации клеток в системе. Математическая постановка задачи выписана в § 3. Там же оговариваются допущения при написании модели. В § 4 получено аналитическое решение предложенной модели. Решение дает зависимость от времени концентрации агрегатов и клеток ($N(t)$) в системе в зависимости от соотношения концентрации клеток и концентрации лиганда в начальный момент времени ($\mathcal{E} = N_A(0)/N(0)$). Дело в том,что как при недостатке лиганда в системе, так и при его избытке, образование агрегатов из клеток в системе невозможно, и лишь в некоторой области соотношений $\mathcal{E}$ ($\mathcal{E} = N_A(0)/N(0)$) возможна агрегация в системе.

В § 5 проводится сравнение аналитических результатов с экспериментальными данными по агглютинации бактериальных клеток *Bacillus subtilis* бивалентными антителами *IgG*

Математическая модель предсказывает резкий пороговый характер реакции агглютинации в системе. Это соответствует экспериментально наблюдаемым закономерностям: визуальные микроскопические наблюдения показывают, что небольшое изменение $\mathcal{E}$ (примерно в два раза) приводит к резкому (в I00-I000 раз) изменению размеров агрегатов в реакционной смеси. Аналитическое решение также хорошо предсказывает границы агглютинации.

Таким образом, можно считать,что полученная кинетическая модель качественно описывает процесс агглютинации, то есть основные факторы, влияющие на агглютинацию в реальных системах учтены правильно. Для получения более детального совпадения аналитического решения с экспериментальным возможно дальнейшее уточнение модели на основе новых экспериментальных данных.

Третья глава "Уравнение переноса нейтрино с учетом квантовой статистики. Расчет основных характеристик нейтринного импульса от коллапсирующей звезды в диффузионном приближении" состоит из 4-х параграфов.

В §I описывается физическая модель исследуемого процесса, выписывается математическая постановка задачи. Основным уравнением в математической постановке является нелинейное уравнение переноса нейтрино, выписанное с учетом квантовой статистики.

Теоретическая оценка закона излучения нейтрино при нейтронизации вещества в коллапсирующей звезде - одна из классических задач нейтринной астрофизики. Решению этой задачи в рамках различных физических моделей посвящено большое число работ. В данной работе приводится подробный вывод диффузионного приближения рассматриваемой задачи в рамках обычной процедуры Чепмена-Энскога (§ 2).

Подчеркнуто,что взаимодействие нейтрино с вырожденными электронами не дает вклада в коэффициент диффузии. Переход к диффузионному приближению позволяет свести задачу к системе двух нелинейных уравнений в частных производных, численное решение которых уже совсем просто (соответствующая методика и результаты описаны в § 3). Оказывается, однако, что задача допускает дальнейшие упрощения и может быть сведена к одному нелинейному уравнению параболического типа, имеющему в соответствующих безразмерных переменных вид

$$\partial \bar{\delta}/\partial t = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\frac{r^2}{\rho(r)}\frac{\partial \bar{\delta}}{\partial r}$$

Таким образом, в случае высоких плотностей решение весьма громоздкой задачи может быть доведено до очень простых явных формул. Границей применимости этих формул, выражающих степенной (по времени) закон нейтринного излучения звезды, следует считать значения плотности в центре звезды порядка 10^{13}-10^{14} г/см^3 , экстраполяция на более низкие плотности может носить лишь качественный характер. Разумеется, это справедливо только в рамках рассматриваемой физической модели.

Диффузионная модель позволяет описать лишь грубые характеристики (интенсивность, среднюю энергию) нейтринного излучения при достаточно высоких плотностях, но, возможно она окажется полезной в качестве ориентира и при проведении более детальных кинетических расчетов.

В заключении сформулированы основные результаты диссертации.

I. Выполнена серия численных расчетов пространственно однородной релаксации псевдомаксвелловского газа методом Бёрда. Проведено подробное сравнение полученных численных результатов с точными аналитическими следствиями уравнения Больцмана (моментами функции распределения и "нормальными координатами").

2. Построен регулярный численный метод расчета двумерного уравнения Больцмана с сечением рассеяния специального вида $\sigma(u,\theta) = \sigma(u)\cdot\frac{1}{2}\cdot[\delta(\theta-\frac{\pi}{2})+\delta(\theta+\frac{\pi}{2})]$.

3. С помощью регулярного численного метода исследовалась задача о структуре фронта ударной волны произвольной интенсивности в двумерном больцмановском газе. Результаты расчетов были использованы для проверки точности приближенного аналитического решения Мотт-Смита. Сделан вывод,что в случае ударной волны бес-

конечной интенсивности решение Мотт-Смита не может считаться хорошим приближением решения задачи о стационарной ударной волне (так как расхождение этого решения с численным решением по ширине волны составляет около 50 %).

4. Предложена математическая модель процесса агрегации в двухкомпонентной системе поливалентных частиц. Построено аналитическое решение одного из вариантов модели. Аналитические результаты сравнивались с экспериментальными данными по агглютинации бактерий антителами. Такое сравнение продемонстрировало хорошее качественное совпадение теоретических и экспериментальных кривых.

5. Приведен подробный вывод диффузионного приближения задачи о переносе нейтрино в вырожденном веществе коллапсирующей звезды на заключительной стадии ее развития. Получены зависимости от времени основных характеристик нейтринного импульса от звезды, а именно потока числа нейтрино от звезды и их средней энергии. Выписано также автомодельное решение вблизи границы звезды, которое позволяет аналитически получить характеристики нейтринного импульса от звезды.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

I. Бобылев А.В., Долгошеина Е.Б. Приближенный расчет характеристик нейтринного излучения коллапсирующей звезды. - препринт ИПМ им. М.В.Келдыша АН СССР, I987, № 209.
2. Долгошеина Е.Б. Сравнение результатов расчета релаксации методом Бёрда с точными следствиями уравнения Больцмана для псевдомаксвелловских молекул. - препринт ИМП им. М.В.Келдыша АН СССР, I988, № I94.
3. Бобылев А.В., Долгошеина Е.Б. Регулярное численное решение задачи о структуре ударной волны при произвольных числах Маха в двумерном больцмановском газе. - препринт ИМП им. М.В.Келдыша АН СССР, I989, № I03.
4. Бобылев А.В., Долгошеина Е.Б., Карулин А.Ю. Кинетическая модель процесса агрегации в двухкомпонентной системе поливалентных частиц. - препринт ИПМ им.М.В.Келдыша АН СССР, I989, № II0.
5. Бобылев А.В., Долгошеина Е.Б. Регулярное численное решение задачи о структуре ударной волны в двумерном больцмановском газе. - тезисы докладов X Всесоюзной конференции по динамике разреженных газов, Москва, I989.

Автор выражает глубокую благодарность научному руководителю А.В.Бобылеву за руководство данной работой.