

УДК 519.6:530.1

© 1996 г. Б.В. ПАВЛОВ, О.Е. РОДИОНОВА

(Москва)

МЕТОДИКА УСРЕДНЕНИЯ ПРИ ДИСКРЕТИЗАЦИИ КИНЕТИЧЕСКОГО ИНТЕГРОДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ

Описывается методика дискретизации интегродифференциального уравнения кинетического типа, в которой не требуется аппроксимации ядра уравнения, что позволяет существенно уменьшить размерность системы обыкновенных дифференциальных уравнений, приближающей исходное уравнение. Методика применена для анализа двух задач феноменологической теории неравновесных химических процессов.

§ 1. Кинетическое интегродифференциальное уравнение

Рассмотрим уравнение

$$(1) \quad \frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = \int_0^\infty [K(s, x)n(s, t) - K(x, s)n(x, t)]ds, \quad n(x, 0) = n_0(x),$$

где

$$(x, t) \in (0, \infty) \times (0, \infty), \quad 0 \leq K(x, s) < \infty, \quad \int_0^\infty K(x, s)ds = \omega(x) < \infty, \quad \omega(x) > 0.$$

Если функция $K(s, x)$ такова, что кратный интеграл

$$\int_0^\infty \int_0^\infty K(s, x)y(s)dsdx$$

существует и конечен для любой функции $y(s) \in L_1(0, \infty)$, то соотношение

$$f_2(x) = \int_0^\infty [K(s, x)f_1(s) - K(x, s)f_1(x)]ds$$

определяет действующий в $L_1(0, \infty)$ линейный ограниченный оператор $K: f_1(x) \rightarrow f_2(x)$, $f_1, f_2 \in L_1(0, \infty)$, для которого справедлива оценка

$$\|K\|_{L_1 \rightarrow L_1} < 2\tilde{\omega} = 2 \sup_{x \in (0, \infty)} \omega(x).$$

В этих терминах (1) примет вид

$$dn/dt = Kn, \quad n(0) = n_0, \quad n_0 \in L_1(0, \infty).$$

Решение этой задачи, как известно, существует, единственно и может быть записано в виде $n(t) = \exp(Kt)n_0$, где $\exp(Kt)$ (оператор, действующий из $L_1(0, \infty)$ в $L_1(0, \infty)$)

определяется сходящимся по норме операторов рядом

$$\exp(Kt) = E + Kt + K^2 t^2 / 2 + \dots + K^m t^m / m! + \dots$$

"Кинетическая" структура правой части (1) определяет общие свойства решения.

1. Н е о т р и ц а т е л ь н о с т ь р е ш е н и я. Если $n_0(x) \geq 0$, то $n(x, t) \geq 0$ при всех $t > 0$.

Справедливость этого утверждения следует из эквивалентного представления (1):

$$(2) \quad n(x, t + \tau) = e^{-\omega(x)\tau} n(x, t) + \int_0^\infty K(s, x) \left[\int_0^\tau e^{\omega(x)(\xi - \tau)} n(s, t + \xi) d\xi \right] ds.$$

Итерационный процесс

$$n_{k+1}(x, t + \tau) = e^{-\omega(x)\tau} n_k(x, t) + \int_0^\infty K(s, x) \left[\int_0^\tau e^{\omega(x)(\xi - \tau)} n_k(s, t + \xi) d\xi \right] ds,$$

$$k = 0, 1, \dots, \quad n_0(x, t + \tau) = e^{-\omega(x)\tau} n_0(x, t),$$

заведомо сходится при $\tau \in [0, h]$, где $0 < h < 1/\bar{\omega}$. Поскольку любая итерация $n_k(x, t + \tau) \geq 0$, если $n(x, t) \geq 0$, то и $n(x, t + \tau) \geq 0$ для всех $\tau \in [0, h]$. Очевидно, что это же справедливо и для $t_1 = t + h$: $n(x, t + h + \tau) \geq 0$ при $\tau \in [0, h]$, поскольку $n(x, t + h) \geq 0$.

Отсюда по индукции следует неотрицательность $n(x, t)$ для всех $(t, x) \in (0, \infty)^2$.

2. Л и н е й н а я к о н с е р в а т и в н о с т ь. Для всех решений (1) справедливо

$$N(t) = \int_0^\infty n(x, t) dx = \int_0^\infty n(x, 0) dx = N_0 \quad \forall t > 0.$$

Интегрируя (1) по x , получаем

$$\frac{dN(t)}{dt} = \frac{d}{dt} \int_0^\infty n(x, t) dx = \int_0^\infty \left[\int_0^\infty K(s, x) n(s, t) ds \right] dx - \int_0^\infty n(x) \left[\int_0^\infty K(s, x) ds \right] dx = 0,$$

поскольку $K(s, x)n(s, t)$ суммируема в области $(x, s) \in (0, \infty)^2$ и, согласно теореме Фубини, повторные интегралы существуют и равны друг другу. Отсюда следует $N(t) = N(0) = N_0$.

3. У с т о й ч и в о с т ь. Из (2) следует, что

$$|n(x, t + \tau)| \leq e^{-\omega(x)\tau} |n(x, t)| + \int_0^\infty K(s, x) \left[\int_0^\tau e^{\omega(x)(\tau - \xi)} |n(s, t + \xi)| d\xi \right] ds$$

и

$$\frac{\partial |n(x, t)|}{\partial t} \leq \int_0^\infty [K(s, x) |n(s, t)| - K(x, s) |n(x, t)|] ds.$$

Интегрируя последнее соотношение по x , получаем

$$\frac{d||n(x, t)||}{dt} \leq 0, \quad ||n(x, t)|| = \int_0^\infty |n(x, t)| dx.$$

Отсюда следует, что $\operatorname{Re} \lambda(K) \leq 0$.

§ 2. Физическая модель

Численное решение (1) предполагает его конечномерную аппроксимацию, которая потребует определенных ограничений на свойства решения $n(x, t)$ и функцию $K(x, s)$. Основания для таких ограничений можно получить, связав уравнение (1) с какой-то (абстрактной) физической моделью. В качестве такой модели будем рассматривать некоторый «квазихимический» процесс превращения вещества $\hat{n}(x)$ со свойством x и концентрацией $n(x)$ при отсутствии явлений переноса. Этому процессу сопоставляется такая кинетическая схема:

а) $\hat{n}(x) \rightarrow \hat{n}(s)$, $K(x, s)n(x)$ – скорость исчезновения $\hat{n}(x)$,

б) $\hat{n}(s) \rightarrow \hat{n}(x)$, $K(s, x)n(s)$ – скорость образования $\hat{n}(x)$.

Скорости "элементарных" процессов а) и б) записываются в виде $W_{x,s} = K(x, s)n(x)$ и $W_{s,x} = K(s, x)n(s)$. Суммирование этих скоростей и дает (1).

Не изменяя физического содержания модели, можно ограничиться рассмотрением таких $K(x, s)$, для которых вся область $(x, s) \in (0, \infty)^2$ может быть разделена на конечное число областей, в каждой из которых $K(x, s)$ непрерывна. Если при этом непрерывны функции

$$n_0(x) = n(x, 0), \quad \omega(x) \text{ и } \int_0^\infty K(s, x)y(s)ds, \quad y(s) \in C[0, \infty) \cap L_1(0, \infty),$$

то и решение $n(x, t)$ будет непрерывным. Далее, рассматривая процедуру дискретизации, будем считать эти условия выполненными.

§ 3. Дискретизация уравнения (1)

Главной проблемой при аппроксимации (1) является сохранение его основных свойств: консервативности и положительности решения.

Конечномерным аналогом (1) является система обыкновенных дифференциальных уравнений (о.д.у.) специальной структуры, которую будем называть кинетической:

$$(3) \quad g_i \frac{dn_i(t)}{dt} = \sum_{k=0}^L [W_{ki}n_k(t) - W_{ik}n_i(t)],$$

где $g_i > 0$, $W_{ki} \geq 0$, $i = 0, 1, \dots, L$, $n_i(0) = n_i^0$, или в векторном виде:

$$dn/dt = \hat{K}n, \quad n(0) = n^0, \quad n(t) = e^{\hat{K}t}n^0,$$

где

$$n = (n_0, \dots, n_L), \quad \hat{K}_{ik} = g_i^{-1}W_{ki}, \quad \hat{K}_{ii} = -g_i^{-1} \sum_{k \neq i} W_{ik}.$$

Легко проверить, что (3) сохраняет основные свойства (1):

1) неотрицательность решения: $n_i(t) \geq 0$, если $n_i(0) = n_i^0 \geq 0$;

2) линейная консервативность:

$$N(t) = \sum_{i=0}^L g_i n_i(t) = \sum_{i=0}^L g_i n_i^0 = N_0;$$

3) устойчивость: $\|n(t)\| \leq \|n^0\|$, где $\|n\| = \sum_{i=0}^L g_i |n_i|$.

Понятно, что (3) является уравнением материального баланса для некоторого процесса с кинетической схемой

$$\hat{n}_i \rightarrow \hat{n}_k, \quad n_i W_{ik} / g_i - \text{скорость исчезновения } \hat{n}_i,$$

$$\hat{n}_k \rightarrow \hat{n}_i, \quad n_k W_{ki} / g_i - \text{скорость образования } \hat{n}_i.$$

Таким образом, структуры и свойства (1) и (3) совершенно одинаковы, поэтому потребуем, чтобы в результате дискретизации (1) получалось (3). Процедура дискретизации (1) осуществляется в несколько этапов.

Э т а п 1. Ограничение области интегрирования в (1).

Бесконечный предел интегрирования в (1) заменяется достаточно большой величиной x_L , конкретное значение которой определяется характером решаемой задачи. Такая замена не приведет к существенной ошибке в $n(x, t)$, если $n(x, t) \sim 0$ при $x > x_L$. Ограничение области осуществляется заменой ядра уравнения $K(x, s)$ на усеченную форму $\bar{K}(x, s) \equiv K(x, s)$, если точка (x, s) находится внутри квадрата $x, s \in (0, x_L]$, и $\bar{K}(x, s) \equiv 0$, если (x, s) лежит вне этого квадрата. Пространства $L_1(0, \infty)$ и $L_1(G)$, $G: x, s \in (0, \infty)$, заменяются на $L_1(0, x_L)$ и $L_1(G_L)$, $G_L: x, s \in (0, x_L)$.

Э т а п 2. Аппроксимация функций.

Аппроксимацию функций $y(x) \in \hat{L}_1(0, x_L)$ будем проводить путем кусочно-полиномиальной интерполяции на системе узлов $\{x_i\}$. Формулу лагранжева сплайна удобно записать в виде

$$\tilde{y}(x, x_i) = \sum_{i=0}^L y_i \psi_i(x),$$

где $y_i = y(x_i)$, $\psi_i(x_i)$ функции, определяемые при конструировании сплайн-интерполяции. Для нас важны следующие свойства $\psi_i(x)$: $\psi_i(x_i) = 1$, $\psi_i(x_k) = 0$ при $k \neq i$, $\psi_i(x) \equiv 0$ вне области d_i , где $d_i \in (0, x_L)$ определяется конкретной конструкцией сплайна.

Используя $\tilde{y}(x, x_i)$ для приближенного вычисления интегралов, получаем

$$\int_0^{x_L} y(x) dx \approx \int_0^{x_L} \tilde{y}(x, x_i) dx = \sum_{i=0}^L y_i g_i, \quad g_i = \int_{d_i} \psi_i(x) dx.$$

Если $g_i > 0$, то формула

$$\int_0^{x_L} y(x) dx \approx \sum_{i=0}^L y_i g_i$$

является квадратурной и определяет правила приближенного интегрирования.

Для функции двух переменных $q(x, s) \in L_1(G_L)$ аналогичным образом получим сплайн-функцию двух переменных

$$\tilde{q}(x, s, \{x_i\}) = \sum_{i=0}^L \sum_{k=0}^L q(x_i, x_k) \psi_i(x) \psi_k(s)$$

и для двойного интеграла получим квадратурную формулу

$$\int_{G_L} q(s, x) ds dx = \sum_{i=0}^L \sum_{k=0}^L q(x_i, x_k) g_i g_k.$$

Э т а п 3. Аппроксимация кинетического оператора.

Проекционный метод. Для функций, фигурирующих в (1), формулы аппроксимации имеют вид

$$n(x, t) \sim \tilde{n}(x, t) = \sum_{i=0}^L n_i(t) \psi_i(x), \quad n_i(t) = n(x_i, t),$$

$$K(s, x)n(s, t) - K(x, s)n(x, t) \approx \sum_{i=0}^L \sum_{k=0}^L [K(x_k, x_i)n_k(t) - K(x_i, x_k)n_i(t)] \psi_i(x) \psi_k(s).$$

Заменяя в (1) функции их приближениями, получаем уравнение

$$\sum_{i=0}^L \psi_i(x) \frac{dn_i(t)}{dt} = \sum_{i=0}^L \psi_i(x) \sum_{k=0}^L [K(x_k, x_i)n_k(t) - K(x_i, x_k)n_i(t)] g_k,$$

которое можно рассматривать как проекцию (1) на конечномерный компакт, образуемый множеством сплайн-функций. Уравнение, очевидно, выполняется при любых x , если $n_i(t)$ удовлетворяет уравнению (3), в котором

$$W_{ki} = K(x_k, x_i) g_i g_k.$$

Это соотношение и устанавливает связь между ядром $K(s, x)$ и матрицей W_{ki} .

Ограничение области интегрирования $(0, \infty) \rightarrow (0, x_L)$ обоснованно для всех $t > 0$, если (1) имеет устойчивое решение $\varphi(x)$:

$$n(x, t) \rightarrow \varphi(x) \text{ при } t \rightarrow \infty, \quad \int_0^{\infty} n(x, t) dx = N_0, \quad n(x, 0) \rightarrow 0 \text{ при } x \rightarrow \infty,$$

$$\int_0^{\infty} \varphi(x) dx = N_0, \quad \varphi(x) \rightarrow 0 \text{ при } x \rightarrow \infty.$$

В ином случае такая аппроксимация носит локальный по t характер: $t \in (0, T)$, $T < \infty$, но решение может быть продолжено для $t > T$ увеличением x_L . Такая ситуация возникает, например, для треугольного ядра $K(x, s) \equiv 0$ при $s < x$, когда решение (1) имеет характер расплывающейся бегущей волны.

Структура сплайна должна обеспечить не просто хорошую аппроксимацию $n(x, t) \sim \tilde{n}(x, t)$, но и строгую ее неотрицательность: $\tilde{n}(x, t) \geq 0$. Однако из $n_i(t) \geq 0$, что обеспечивается системой (3), еще не следует неотрицательность

$$\tilde{n}(x, t) = \sum_{i=0}^L n_i(t) \psi_i(x)$$

при промежуточных значениях $x_i < x < x_{i+1}$, где $i = 0, 1, \dots, L-1$. Легко показать, что положительность лагранжевой сплайн-интерполяции

$$\tilde{y}(x, x_i) = \sum_{i=0}^L y(x_i) \psi_i(x) \text{ при } y(x_i) > 0$$

гарантируется только в двух очевидных случаях: либо если $\tilde{y}(x)$ определяется как постоянная функция $\tilde{y}(x) = y(x_i)$ при $x \in (x_i, x_{i+1}]$, либо при линейной интерполяции, которая и используется в дальнейшем:

$$\tilde{y}(x) = y(x_i) \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} + y(x_{i+1}) \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}, \quad x \in [x_i, x_{i+1}].$$

Распределение узлов $\{x_i\}$ определяется аппроксимацией функций $n(x, t)$ и $\{K(s, x)n(s, t) - K(x, s)n(x, t)\}$. Для «сосредоточенных» ядер, которые существенно отличаются от нуля лишь в области $|s - x| < \Delta$, интервалы $(x_i - x_{i-1})$ должны быть меньше Δ , иначе все $W_{ki} = g_i g_k K(x_k, x_i)_{k \neq i}$ окажутся близкими к нулю и аппроксимирующая система (3) потеряет всякую связь с исходным уравнением (1). В «плохих» случаях, когда Δ очень мала («узкие ядра»), число узлов может оказаться существенно больше, чем нужно для приближения решения $n(x, t)$, а это приведет к неоправданно большой размерности системы (3). Таким образом, аппроксимация ядра является причиной неэффективности рассмотренной методики «прямого» проецирования.

Проблема «узких ядер» оказывается сложнее, чем может показаться на первый взгляд, поскольку дискретизация должна обеспечить кинетическую структуру аппроксимирующей системы о.д.у. Так, очевидный способ дискретизации, который не требует аппроксимации ядра, но обеспечивает положительность решения, сводится к подстановке в (1) вместо функции $n(x, t)$ ее аппроксимации и требованию равенства нулю невязки (1) в узлах сетки (метод коллокации):

$$\tilde{n}(x, t) = \sum_{i=0}^L n_i(t) \psi_i(x).$$

Но этот метод приводит к системе о.д.у., не обладающей линейной консервативностью:

$$g_i \frac{dn_i(t)}{dt} = \sum_{k=0}^L [P_{ki} n_k(t) - R_{ik} n_i(t)], \text{ где } g_i = \int_{d_i} \psi_i(x) dx,$$

$$P_{ik} = g_i \int_{d_k} K(s, x_i) \psi_k(s) ds, \quad R_{ik} = g_i \int_{d_k} K(x_i, s) \psi_k(s) ds, \quad 1 \equiv \sum_{k=0}^L \psi_k(s).$$

Поскольку матрицы $P = \{P_{ik}\}$ и $R = \{R_{ik}\}$, $k = 0, 1, \dots, L$, не совпадают, линейная консервативность системы может быть лишь случайным фактом.

Причина неудачи заключается в том, что дискретизация ядра $K(s, x)$ производится неодинаково по переменным x и s : переменная x фиксируется ($x = x_i$), а по переменной s производится усреднение с весовой функцией $\psi_k(s)$. Далее рассматривается методика, которая основана на усреднении ядра по обоим переменным и обеспечивает кинетическую структуру аппроксимирующей системы о.д.у. при любом распределении узлов.

§ 4. Методика усреднения

Идея этой методики заключается в том, что вместо уравнения (1) дискретизируется в каком-то смысле эквивалентное ему уравнение, как это сделано в [1]:

$$(4) \quad \frac{\partial}{\partial t} \int_0^\infty \kappa(x) n(x, t) dx = \int_0^\infty \kappa(x) \left\{ \int_0^\infty [K(s, x) n(s, t) - K(x, s) n(x, t)] ds \right\} dx,$$

где $\kappa(x)$ – произвольная функция такая, что обеспечивается существование интегралов.

Проекционная методика. Заменяя в (4) функции их приближениями

$$n(x, t) \sim \tilde{n}(x, t) = \sum_{i=0}^L n_i(t) \psi_i(x), \quad \kappa(x) \sim \sum_{i=0}^L \kappa_i \psi_i(x),$$

$$\kappa(x)n(x,t) \sim \sum_{i=0}^L \kappa_i n_i(t) \psi_i(x), \quad \kappa_i = \kappa(x_i),$$

$$\int_0^{x_L} K(x,s)ds \equiv \sum_{k=0}^L \int_{d_k} K(x,s) \psi_k(s)ds,$$

получаем проекцию (4) на конечномерный компакт:

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=0}^L \kappa_i n_i(t) g_i = \sum_{i=0}^L \kappa_i \sum_{k=0}^L [W_{ki} n_k(t) - n_i(t) W_{ik}],$$

где

$$g_i = \int \psi_i(x) dx, \quad W_{ki} = \int \int_{d_i \cdot d_k} \psi_i(x) K(s,x) \psi_k(s) ds dx.$$

Приравнявая нулю в последнем уравнении коэффициенты при произвольных κ_i , получаем систему

$$(5) \quad g_i \frac{dn_i(t)}{dt} = \sum_{k=0}^L [W_{ki} n_k(t) - W_{ik} n_i(t)],$$

в которой элементы W_{ki} представляют собой значения $K(x,s)$, усредненные по области $x \in \{d_i\}$, $s \in \{d_k\}$ с весовой функцией $\gamma_{ik}(x,s) = \psi_i(x) \psi_k(s)$.

Если элемент лагранжевой сплайн-функции строится более чем на двух узлах, то весовая функция $\kappa_{ik}(x,s) = \psi_i(x) \psi_k(s)$ принимает отрицательные значения в определенных частях области $x \in \{d_i\}$, $s \in \{d_k\}$, а это снимает гарантии неотрицательности интеграла

$$W_{ki} = \int \int_{d_i \cdot d_k} \gamma_{ik}(x,s) K(s,x) ds dx.$$

По этой причине выбор локального приближения $n(x,t)$ ограничивается двумя простейшими формулами:

а) ступенчатое приближение

$$\psi_i(x) = \begin{cases} 1, & x_i \leq x \leq x_{i+1}, \\ 0, & x < x_i, x > x_{i+1} \end{cases};$$

б) кусочно-линейное приближение $\tilde{n}(x,t)$.

Тогда $\psi_i(x) > 0$, $x_{i-1} < x < x_{i+1}$. В этих случаях $\psi(x) \geq 0$, а следовательно, $W_{ki} \geq 0$. Таким образом, система (5) становится «кинетической» независимо от распределения узлов $\{x_i\}$, что обеспечивает положительность решения и линейную консервативность аппроксимирующей системы о.д.у.

Обобщение методики усреднения оператора. Пусть оператор K задан интегральным соотношением

$$Kn(x) = y(x) = \int_0^{x_L} [K(s,x)n(s) - K(x,s)n(x)]ds,$$

$$y(x), n(x) \in C[0, x_L] \cap L_1(0, x_L).$$

Усреднение с произвольной весовой функцией $\kappa(x)$ дает

$$\int_0^{x_L} \kappa(x) y(x) dx = \int_0^{x_L} \kappa(x) \left\{ \int_0^{x_L} [K(s,x)n(s) - K(x,s)n(x)] ds \right\} dx;$$

полагая $\kappa(x) = \sum_{i=0}^L \psi_i(x)\kappa_i$, $\kappa_i = \kappa(x_i)$, $\psi_i(x)$ – элемент сплайн-функции, $\sum_{i=0}^L \psi_i(x) \equiv 1$, получаем

$$(6) \quad g_i \bar{y}_i = \sum_{k=0}^L \int_{d_i} \int_{d_k} [K(s, x)n(s) - K(x, s)n(x)] \psi_i(x) \psi_k(s) ds dx,$$

где

$$g_i = \int_{d_i} \psi_i(x) dx, \quad \bar{y}_i = g_i^{-1} \int_{d_i} \psi_i(x) y(x) dx.$$

Если в областях d_i , d_k вариации функций $y(x)$, $n(s)$ и $n(x)$ малы, то, полагая в (6), что $\bar{y}_i \approx y(x_i) = y_i$, $n(s) \approx n(x_k) = n_k$, $n(x) \approx n(x_i) = n_i$, получаем формулу, соответствующую проекционному методу:

$$g_i y_i = \sum_{k=0}^L [W_{ki} n_k - W_{ik} n_i], \quad W_{ki} = \int_{d_i} \int_{d_k} K(s, x) \psi_i(x) \psi_k(s) ds dx.$$

Условие малости вариаций функций на отрезке локального приближения характерно для методики усреднения, и оно задает параметры сетки $\{x_i\}$. При этом формулу (6) можно конструктивно использовать для контроля за точностью, а также для уточнения формул проекционной методики (см. § 5). При малых изменениях $n(s)$ на d_k можно положить

$$n(s) = \sum_{k=0}^L \psi_k(s) n_k, \quad n_k = n(x_k).$$

Тогда из определяющего оператор соотношения следует

$$y(x_i) = \sum_{k=0}^L L_k(x_i) n_k - \hat{\omega}(x_i) n_i,$$

где

$$L_k(x) = \int_{d_k} K(s, x) \psi_k(s) ds, \quad \hat{\omega}(x) = \int_0^L K(x, s) ds.$$

С другой стороны,

$$\bar{y}_i = g_i^{-1} \sum_{k=0}^L W_{ki} n_k - g_i^{-1} \sum_{k=0}^L W_{ik} n_i.$$

Но

$$W_{ki} = \int_{d_i} \psi_i(x) L_k(x) dx, \quad \sum_{k=0}^L W_{ik} = \int_{d_i} \psi_i(x) \hat{\omega}(x) dx,$$

и если

$$g_i^{-1} \int_{d_i} \psi_i(x) L_k(x) dx \approx L_k(x_i), \quad g_i^{-1} \int_{d_i} \psi_i(x) \hat{\omega}(x) dx \approx \hat{\omega}(x_i),$$

то $\bar{y}_i \approx y_i$. Таким образом, малость вариации $n(x)$, $L_k(x)$ и $\hat{\omega}(x)$ на d_i является достаточным условием, при котором (5) можно рассматривать как аппроксимацию (1).

§ 5. Сложная молекула в газовом термостате

Рассмотрим задачу (1) с ядром специального типа $K(x, s) = H(x, s)f(s)$, где $H(s, x) = H(x, s)$, $0 \leq H(x, s) < \infty$, $(x, s) \in (0, \infty)^2$, $0 < f(s) \in C[0, \infty) \cap L_1(0, \infty)$. Кроме того, положим, что

$$\int_0^x K(x, s)ds, \quad \int_x^\infty K(x, s)ds$$

положительны для всех $x > 0$. Делая замену переменных $n(x, t) = f(x)\rho(x, t)$, получаем

$$(7) \quad f(x) \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \int_0^\infty G(x, s)[\rho(s, t) - \rho(x, t)]ds,$$

где $G(x, s) = G(s, x) = f(x)H(x, s)f(s)$. Нетрудно показать, что

$$\frac{d}{dt} \int_0^\infty f(x)\rho^2(x, t)dx = - \int_D \int G(x, s)[\rho(s, t) - \rho(x, t)]^2 dsdx, \quad D: x, s \in (0, \infty).$$

Заметим, что из уравнения $dg(t)/dt = -b(t)$, где $g(t) > 0$, $b(t)$ – непрерывная положительная функция с ограниченной производной, вытекает следующее:

- 1) $g(t) \rightarrow \text{const}$ при $t \rightarrow \infty$,
- 2) $b(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$.

Это доказывается таким образом. Для любой последовательности $t_k: t_{k+1} - t_k \geq h > 0$ имеем ограниченную, монотонную и, таким образом, сходящуюся последовательность $g(t_k)$:

$$g(t_{k+1}) - g(t_k) = - \int_{t_k}^{t_{k+1}} b(t)dt,$$

откуда и имеем

$$\int_{t_k}^\infty b(t)dt \rightarrow 0 \text{ при } t \rightarrow \infty, \quad b(t) \rightarrow 0 \text{ при } t \rightarrow \infty.$$

Это значит, что

$$\int_D \int G(x, s)[\rho(s, t) - \rho(x, t)]^2 dsdx \rightarrow 0 \text{ при } t \rightarrow \infty.$$

Отсюда следует, что $\rho(x, t) = \text{const}$ является устойчивой стационарной точкой (7).

Поскольку $\int_0^\infty f(x)\rho(x, t)dx = N_0$, то, полагая $\int_0^\infty f(x)dx = 1$, получаем $\rho(x, t) \rightarrow N_0 = \rho(x)_{\text{ст}}$, $n(x, t) \rightarrow f(x)N_0 = n(x)_{\text{ст}}$ при $t \rightarrow \infty$. Уравнение (7) можно записать в виде $\partial \rho / \partial t = K\rho$, $\rho(0) = \rho_0$, где K – оператор кинетического типа:

$$K\rho = \int_0^\infty K(x, s)[\rho(s) - \rho(x)]ds.$$

Если определить скалярное произведение функций $y_1(x)$, $y_2(x)$ формулой

$$(y_1, y_2) = \int_0^\infty f(x)y_1(x)y_2(x)dx,$$

то введением нормы $\|y\|^2 = (y, y)$ определяется пространство $L_2^f(0, \infty)$ функций, квадратично интегрируемых на $(0, \infty)$ с весом $f(x)$. В этом пространстве K является самосопряженным оператором, у которого точки спектра действительны и неположительны: $\lambda \leq 0$, поскольку $(y, Ky) \leq 0$.

Если $f(x)$ – распределение Максвелла – Больцмана (М.Б.), то уравнение (7) моделирует процесс установления равновесного распределения по значениям внутренней энергии x сложных молекул, помещенных в газовый термостат.

З а м е ч а н и е. Для многоатомной молекулы в газовой фазе распределение М.Б. имеет вид

$$f(x) = C e^{-x} d\Gamma(x) / dx, \quad C = \left\{ \int_0^\infty [d\Gamma(x) / dx] e^{-x} dx \right\}^{-1},$$

где $\Gamma(x)$ – фазовый объем изолированной молекулы с энергией x . Приближенно $\Gamma(x) = (1 + \alpha)^p$, где $\alpha > 0$, $p \geq 1$ – параметры, определяемые конкретным видом гамильтониана молекулы.

Основой модели является кинетическая схема

$$\hat{n}(x) + \hat{M} \rightarrow \hat{n}(s) + \hat{M},$$

$$\hat{n}(s) + \hat{M} \rightarrow \hat{n}(x) + \hat{M},$$

где $\hat{n}(x)$ и \hat{M} – символы сложной молекулы с внутренней энергией x и молекулы газовой среды, а $n(x)$ и M – соответствующие концентрации. Предполагается, что

$\int_0^\infty n(x) dx = N \ll M$, и по этой причине в схему не включены нелинейные процессы

$$\hat{n}(x) + \hat{n}(s) \rightarrow \hat{n}(x_1) + \hat{n}(s_1).$$

Предполагается также, что в термостате установилось равновесное распределение по скоростям частиц и однородное распределение концентраций $n(x)$ и M по пространству. Тогда скорость $W_{x,s}$ элементарного процесса $\hat{n}(x) + \hat{M} \rightarrow \hat{n}(s) + \hat{M}$ в соответствии с теорией столкновений можно записать в виде

$$W_{x,s}(n(x), M) = \bar{v} \sigma(x, s) M n(x, t),$$

где \bar{v} – средняя скорость теплового относительного движения частиц $\hat{n}(x)$ и \hat{M} , $\sigma(x, s)$ – дифференциальное сечение неупругого столкновения. Тогда

$$K(x, s) = \bar{v} M \sigma(x, s) \text{ и } \omega(x) = \int_0^\infty K(x, s) ds = \bar{v} M \sigma(x), \text{ где } \sigma(x) - \text{полное сечение неупругого}$$

столкновения.

Запишем $\sigma(x, s)$ в виде $\sigma(x, s) = h(x, s) f(s)$, $h(x, s) = h(s, x)$. Очевидно, что $H(x, s) = \bar{v} M h(x, s)$. Тогда в стационарном состоянии реализуется динамическое равновесие $W_{x,s}(n(x)_{\text{ст}}, M) = W_{s,x}(n(s)_{\text{ст}}, M)$, поскольку $f(x) h(x, s) f(s) \equiv f(s) h(s, x) f(x)$.

Будем аппроксимировать уравнение (7), имея в виду, что $\rho(x, t) \rightarrow \text{const}$ при $t \rightarrow \infty$ и, следовательно, является более простой, т.е. легче аппроксимируемой, чем $n(x, t)$, функцией, по крайней мере при больших t . Приближая $\rho(x, t)$ сплайн-функцией

$$\tilde{\rho}(x, t) = \sum_{i=0}^L \rho_i(t) \psi_i(x),$$

для $n(x, t)$ получаем

$$n(x, t) \sim \tilde{n}(x, t) = \sum_{i=0}^L f(x) p_i(t) \psi_i(x).$$

Тогда

$$N = \int_0^\infty n(x, t) dx \sim \sum_{i=0}^L g_i p_i(t), \text{ где } g_i = \int_{d_i} f(x) \psi_i(x) dx.$$

Проведя дискретизацию (7) проекционным методом усреднения, получим

$$(8) \quad g_i \frac{dp_i}{dt} = \sum_{k=0}^L W_{ki} [p_k(t) - p_i(t)] = \sum_{k=0}^L B_{ik} p_k,$$

$$W_{ik} = W_{ki} = \int_{d_i} \int_{d_k} \psi_i(x) G(x, s) \psi_k(s) ds dx \geq 0.$$

Вследствие симметричности $W_{ki} = W_{ik}$ справедливо следующее соотношение:

$$(9) \quad \frac{d}{dt} \sum_{i=0}^L g_i p_i^2(t) = - \sum_{i=0}^L \sum_{k=0}^L W_{ki} [p_k(t) - p_i(t)]^2.$$

Из (8) и (9) имеем следующее:

а) $p_i(t) \geq 0$, $t \in (0, \infty)$, если $p_i(0) \geq 0$;

$$б) \sum_{i=0}^L g_i p_i(t) = \sum_{i=0}^L g_i p_i(0) = \tilde{N}_0, \quad \tilde{N}_0 \approx N_0 = \int_0^\infty f(x) p(x, 0) dx;$$

$$в) p_i(x) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \tilde{N}_0 \left(\sum_{i=0}^L g_i \right)^{-1} = \tilde{N}_0 \left[\int_0^{x_L} f(x) dx \right]^{-1} \approx N_0, \quad \int_0^{x_L} f(x) dx \approx 1;$$

г) собственные значения матрицы (B_{ik}/g_i) действительны, так как она симметризуется диагональным преобразованием подобия.

Модель «сильных столкновений». В качестве иллюстрации применения метода усреднения рассмотрим так называемую модель сильных столкновений, в которой полагается $K(x, s) = \omega f(s)$, где $\omega \neq \text{const} > 0$. Эта модель, вообще говоря, не имеет сколько-нибудь серьезной физической основы, но позволяет получить аналитическое решение уравнения (7) и поэтому часто применяется в приложениях:

$$(10) \quad \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = \omega \int_0^\infty f(s) [p(s, t) - p(x, t)] ds = \omega N - \omega p(x, t),$$

где

$$N = \int_0^\infty f(s) p(s, t) ds = \int_0^\infty f(s) p(s, 0) ds = N_0.$$

Решением этого уравнения, очевидно, является функция

$$(11) \quad p(x, t) = \exp(-\omega t) p(x, 0) + N_0 [1 - \exp(-\omega t)], \quad n(x, t) = f(x) p(x, t).$$

В рассматриваемом примере структура решения (11) такова, что аппроксимация $p(x, t)$ не ухудшается с ростом t . Поэтому, задавая начальное распределение $p(x, 0)$ в виде кусочно-линейной функции из L кусков

$$p(x, 0) = \sum_{i=0}^L p_i(0) \psi_i(x), \quad p(x, 0) = 0 \text{ при } x > x_L,$$

и применяя методику усреднения, получаем систему о.д.у. с размерностью $L + 1$, решение которой, как можно ожидать, будет весьма близким к точному при любом заданном $L \geq 1$. Проведя процедуру усреднения, получим

$$(12) \quad g_i \frac{d\rho_i(t)}{dt} = \omega \sum_{k=0}^L g_i g_k [\rho_k(t) - \rho_i(t)], \quad \rho_i(0) = \rho_i^0, \quad i = 0, 1, \dots, L,$$

$$\rho(x, 0) = \sum_{i=0}^L \rho_i^0(0) \psi_i(x), \quad \rho(x, t) = \sum_{i=0}^L \rho_i(t) \psi_i(x),$$

$$g_i = \int_{d_i} f(x) \psi_i(x) dx, \quad \sum_{i=0}^L g_i = \int_0^{x_L} f(x) dx = \eta \approx 1.$$

Поскольку

$$\sum_{k=0}^L g_k \rho_k(t) = \sum_{k=0}^L g_k \rho_k^0 = \int_0^\infty f(x) \rho(x, 0) dx = N_0,$$

решение (12) имеет вид

$$(13a) \quad \rho_i(t) = \exp(-\eta \omega t) \rho_i(0) + \tilde{N}_0 [1 - \exp(-\eta \omega t)] \eta^{-1},$$

$$(13b) \quad \tilde{\rho}(x, t) = \exp(-\eta \omega t) \rho(x, 0) + \tilde{N}_0 [1 - \exp(-\eta \omega t)] \eta^{-1}, \quad \tilde{n}(x, t) = f(x) \tilde{\rho}(x, t).$$

Так как $f(x_L) \sim 0$, $f(x > x_L) < f(x_L)$ при $x_L \gg 1$, $\eta \approx 1$, то приближенное решение $\tilde{n}(x, t)$ уравнения (13) мало отличается от точного $n(x, t)$ для (11) при любом $L \geq 1$. Если, например, $\rho(x, 0)$ задано в виде линейной функции $\rho(x, 0) = ax + b$, то размерность приближающей системы о.д.у. будет равна двум. Заметим, что «прямая» дискретизация (10) потребовала бы аппроксимации функции $f(s)\rho(s, t)$, в которой присутствует множитель $\exp(-s)$. Из-за этого при кусочно-линейной аппроксимации $f(s)\rho(s, t)$ необходимо, чтобы $x_{i+1} - x_i < 1$. При $x_L = 50$, например, это требование привело бы к системе о.д.у. размерностью не менее 50.

Таким образом, достижением в методе усреднения является возможность понижения размерности приближающей системы о.д.у. при переходе от $n(x, t)$ к более простой функции $\rho(x, t)$, при этом эффект может быть весьма значительным.

Модель «слабых столкновений». Более реалистической является модель, в которой ядро сосредоточено в конечной области диаметром Δ : $K(x, s) \sim 0$, если $|s - x| > \Delta$. Величина Δ может быть очень малой, например, для столкновения простой и сложной частиц в условиях теплового равновесия $\Delta \ll 1$. Вычисление коэффициентов W_{ki} в этом случае требует определенных уточнений, поскольку проекционная методика не дает нужного результата.

Для оператора, определенного соотношением

$$(14) \quad f(x)z(x) = \int_0^\infty G(x, s)[\rho(s) - \rho(x)]ds, \quad z(x), \rho(x) \in C[0, \infty),$$

имеет место эквивалентная форма

$$(15) \quad f(x)z(x) = \frac{d}{dx} \int_0^\infty \hat{H}(x, \xi) \frac{d\rho(\xi)}{d\xi} d\xi, \quad \text{если } \rho(x) \in C^1(0, \infty),$$

где $\hat{H}(x, \xi) = \hat{H}(\xi, x)$ определена следующим образом:

$$\hat{H}(x, \xi) = \begin{cases} \int_0^{\xi} \left(\int_x^{\infty} G(\tau, s) ds \right) d\tau & \text{при } \xi \leq x, \\ \int_x^{\xi} \left(\int_0^{\infty} G(\tau, s) ds \right) d\tau & \text{при } \xi > x. \end{cases}$$

Если $K(x, s) = 0$ при $|x - s| > \Delta$, то и $\hat{H}(x, \xi) = 0$ при $|x - \xi| > \Delta$ и при $\Delta \ll 1$.

Для трижды дифференцируемых по ξ функций $\rho(\xi, t)$ справедливо следующее:

$$\frac{d}{dx} \int_0^{\infty} \hat{H}(x, \xi) \frac{d\rho(\xi)}{d\xi} d\xi \approx \frac{d}{dx} D(x) \frac{d\rho(x)}{dx} + P(x) \frac{d^2\rho(x)}{dx^2},$$

где (при $x > \Delta$)

$$D(x) = \int_0^{\infty} \hat{H}(x, \xi) d\xi \sim \omega(x) f(x) \Delta^2,$$

$$P(x) = \int_0^{\infty} \hat{H}(x, \xi) (\xi - x) d\xi \sim \Delta^4 \omega(x) \frac{df(x)}{dx}.$$

Отсюда следует, что

$$f(x) z(x) \approx \frac{d}{dx} D(x) \frac{d\rho}{dx}.$$

Полагая

$$z(x) = \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t},$$

получаем уравнение в частных производных

$$f(x) \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} D(x) \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial x},$$

которое при $\Delta \ll 1$ (слабые столкновения) моделирует процесс установления равновесного распределения как диффузию изображающей точки в энергетическом пространстве сложной молекулы (уравнение Фоккера – Планка), если $\partial \rho(x, t) / \partial x = 0$ при $x = 0$ и $D(x) \partial \rho(x, t) / \partial x \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \infty$.

Полагая

$$\rho(x, t) = \sum_{k=0}^L \psi_k(x) \rho_k(t)$$

и применяя проекционную методику усреднения с весовой функцией

$$\kappa(x) = \sum_{i=0}^L \kappa_i \psi_i(x),$$

получаем систему о.д.у., приближающую уравнение (7) при $\Delta \ll 1$:

$$g_i \frac{d\rho_i(t)}{dt} = \sum_{k=0}^L V_{ki} (\rho_k - \rho_i),$$

где $V_{ki} = 0$ при $|k - i| \geq 2$,

$$V_{i-1,i} = \frac{1}{(x_i - x_{i-1})^2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} D(x) dx \approx \frac{1}{(x_i - x_{i-1})^2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \omega(x) f(x) \Delta^2 dx,$$

$$V_{i+1,i} = \frac{1}{(x_{i+1} - x_i)^2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} D(x) dx \approx \frac{1}{(x_{i+1} - x_i)^2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \omega(x) f(x) \Delta^2 dx.$$

Полученный результат резко отличается от того, что дает проекционный метод, согласно которому

$$\begin{aligned} W_{i-1,i} &= \int_{d_i} \int_{d_{i-1}} \psi_i(x) \psi_{i-1}(s) G(s, x) ds dx \approx \\ &\approx (x_i - x_{i-1})^{-2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \omega(x) f(x) (x - x_{i-1})(x_i - x) dx. \end{aligned}$$

Сравнение показывает, что

$$V_{i-1,i} \sim \Delta^2 W_{i-1,i} \ll W_{i-1,i}, \quad V_{i+1,i} \sim \Delta^2 W_{i+1,i} \ll W_{i+1,i}.$$

Аналогичный результат можно получить путем усреднения (15). Положив

$$\rho(\xi) = \sum_{k=0}^L \rho_k \psi_k(\xi)$$

для весовой функции

$$\kappa(x) = \sum_{i=0}^L \kappa_i \psi_i(x),$$

получим

$$(16) \quad g_i z_i = \sum_{k=0}^L V_{ki} (\rho_k - \rho_i),$$

где

$$V_{ki} = - \int_{d_i} \int_{d_k} \hat{H}(x, \xi) \frac{d\psi_i(x)}{dx} \frac{d\psi_k(\xi)}{d\xi} dx d\xi, \quad \sum_{k=0}^L V_{ki} = 0.$$

Подставляя значения $d\psi_i(x)/dx$ и $d\psi_k(\xi)/d\xi$, получаем

$$V_{ki} = P_{k,i+1} - P_{k+1,i+1} - P_{ki} + P_{k+1,i},$$

где

$$P_{ki} = P_{ik} = (x_k - x_{k-1})^{-1} (x_i - x_{i-1})^{-1} Q_{ki}, \quad Q_{ki} = \int_{x_{k-1}}^{x_k} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \hat{H}(x, \xi) dx d\xi.$$

Нетрудно проверить, что для $|k - i| \geq 2$

$$V_{ki} = W_{ki} = \int_{d_i} \int_{d_k} G(s, x) \psi_i(x) \psi_k(s) ds dx.$$

При этом $V_{i-1,i}$ и $V_{i+1,i}$ для достаточно малых Δ , $\Delta \ll 1 \ll x_i - x_{i-1}$, имеют правильную асимптотику $V_{i-1,i} \approx P_{i-1,i} \sim \Delta^2$, $V_{i+1,i} \approx P_{i+1,i} \sim \Delta^2$. Однако $V_{i-1,i}$, $V_{i+1,i}$ при $\Delta > x_i - x_{i-1} > 1$ становятся отрицательными и (16) теряет требуемую «кинетическую» структуру.

Общий случай. Из сказанного следует, что проекционная методика усреднения, обеспечивая кинетическую форму аппроксимации, неприменима при $\Delta \rightarrow 0$, в то же время усреднение «диффузионной» формы (15), обеспечивая правильную асимптотику при $\Delta \rightarrow 0$, не сохраняет кинетическую структуру аппроксимации при $x_i - x_{i-1} > \Delta$. Для того чтобы получить «равномерную» кинетическую аппроксимацию (14), применим уже рассмотренный в § 3 прием. Усреднение (14) дает форму, аналогичную (6):

$$g_i \bar{z}_i = \sum_{k=0}^L M_{ki},$$

где

$$g_i = \int_{d_k} f(x) \psi_i(x) dx, \quad \bar{z}_i = g_i^{-1} \int_{d_k} f(x) \psi_i(x) z(x) dx,$$

$$M_{ki} = \int_{d_i} \int_{d_k} G(s, x) [\rho(s) - \rho(x)] \psi_i(x) \psi_k(s) ds dx.$$

Такая запись позволяет, используя «грубое» локальное приближение для $\rho(s)$, $\rho(x)$, добиться кинетической формы аппроксимации (14) независимо от величины Δ .

При вычислении M_{ki} , $|k - i| \geq 2$, положим $\rho(s) - \rho(x) \approx \rho_k - \rho_i$. Тогда для $|k - i| \geq 2$

$$(17) \quad M_{ki} = W_{ki}(\rho_k - \rho_i), \quad W_{ki} = \int_{d_i} \int_{d_k} G(s, x) \psi_i(x) \psi_k(s) ds dx,$$

что совпадает с формулами проекционной методики.

Если $x_i - x_{i-1} < \Delta$, то приближение $\rho(s) - \rho(x) \approx \rho_k - \rho_i$ можно считать удовлетворительным при условии малости вариации $\rho(x)$ на d_i, d_k .

Если $\Delta < x_i - x_{i-1}$, то аппроксимация $\rho(s) - \rho(x) \approx \rho_k - \rho_i$ существенно ухудшается, но это не имеет значения, так как тогда $M_{ki} \sim 0$ для $|k - i| \geq 3$, а M_{ki} для $|k - i| = 2$ имеет правильный порядок по Δ .

Эти рассуждения неприменимы для $M_{i-1,i}$, $M_{i+1,i}$, поскольку область интегрирования для них включает в себя квадраты $x, s \in [x_{i-1}, x_i]$, $x, s \in [x_i, x_{i+1}]$, в которых $\rho(s) - \rho(x)$ заведомо меняет знак и для правильного вычисления $M_{i-1,i}$, $M_{i+1,i}$ требуется более аккуратное приближение $\rho(s) - \rho(x)$.

В области $s \in d_{i-1}$, $x \in d_i$ положим

$$(18) \quad \rho(x) = \begin{cases} \frac{\rho_{i-1}(x_i - x) + \rho_i(x - x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}, & x \in [x_{i-1}, x_i], \\ \rho_i, & x \in [x_i, x_{i+1}], \end{cases}$$

$$\rho(s) = \begin{cases} \frac{\rho_{i-1}(x_i - s) + \rho_i(s - x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}, & s \in [x_{i-1}, x_i], \\ \rho_{i-1}, & s \in [x_{i-2}, x_{i-1}]. \end{cases}$$

В области $s \in d_{i+1}$, $x \in d_i$ положим

$$\rho(x) = \begin{cases} \frac{\rho_{i+1}(x_{i+1} - x) + \rho_{i+1}(x - x_i)}{x_{i+1} - x_i}, & x \in [x_i, x_{i+1}], \\ \rho_i, & x \in [x_{i-1}, x_i]; \end{cases} \quad (18')$$

$$\rho(s) = \begin{cases} \frac{\rho_i(x_{i+1} - s) + \rho_{i+1}(s - x_i)}{x_{i+1} - x_i}, & s \in [x_i, x_{i+1}], \\ \rho_{i+1}, & s \in [x_{i+1}, x_{i+2}]. \end{cases}$$

При этом по-прежнему предполагается малость изменения $\rho(x)$ на d_i . Используя эти формулы, получаем $M_{i-1,i} = \bar{W}_{i-1,i}(\rho_{i-1} - \rho_i)$, $M_{i+1,i} = \bar{W}_{i+1,i}(\rho_{i+1} - \rho_i)$, где $\bar{W}_{i-1,i} > 0$ и $\bar{W}_{i+1,i} > 0$ – суммы интегралов по соответствующим областям аппроксимации $\rho(s)$, $\rho(x)$. При малых Δ , $\Delta \ll 1 < x_i - x_{i-1}$, получим

$$\begin{aligned} \bar{W}_{i-1,i} &\approx \int_{x_{i-1}}^{x_i} \int_{x_{i-1}}^{x_i} G(s, x) \frac{(x-s)}{x_i - x_{i-1}} \psi_i(x) \psi_{i-1}(s) ds dx + O(\Delta^3) \approx \\ &\approx \int_{x_{i-1}}^{x_i} \int_{x_{i-1}}^{x_i} G(s, x) \frac{(x-s)^2}{(x_i - x_{i-1})^2} ds dx \sim (x_i - x_{i-1})^{-2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \omega(x) f(x) \Delta^2 dx. \end{aligned}$$

Аналогично,

$$\bar{W}_{i+1,i} \sim (x_{i+1} - x_i)^{-2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \omega(x) f(x) \Delta^2 dx.$$

Эти результаты согласуются с теми, что дает диффузионная модель слабых столкновений.

Итак, решением поставленной задачи о конечномерной аппроксимации уравнения (7) является кинетическая система

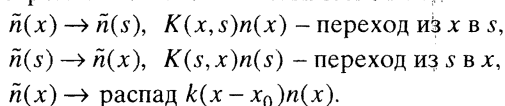
$$(19) \quad g_i \frac{d\rho_i}{dt} = \sum_{k=0}^L \bar{W}_{ki} [\rho_k(t) - \rho_i(t)],$$

где $\bar{W}_{ki} = W_{ki}$ для $|k - i| \geq 2$ определяется по формуле (17), а $\bar{W}_{i-1,i}$ и $\bar{W}_{i+1,i}$ – на базе формул (18), (18').

Заметим, что построение системы (19) проводилось в предположении малости изменения $\rho(x)$ на d_i ; это предположение и является условием аппроксимации исходного уравнения (7) кинетической системой (19).

§ 6. Неравновесная теория мономолекулярных реакций

Теория строится на основе кинетической схемы



В этой схеме добавлен процесс спонтанного превращения сложной молекулы с энергией $x > x_0$, константа скорости которого $k(x - x_0)$ определяется статистической

теорией мономолекулярных реакций (см. [2, с. 99–124]) $k(x - x_0) = 0$ при $x < x_0$, $k(x - x_0) = a(x - x_0)^p$, $x \geq x_0$, где $a > 0$, $p > 0$ – константы теории, $x_0 \gg 1$.

Уравнение, описывающее этот процесс, имеет вид

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = \int_0^\infty [K(s, x)n(s, t) - K(x, s)n(x, t)]ds - k(x - x_0)n(x, t).$$

После замены $n(x, t) = f(x)\rho(x, t)$ получим

$$(20) \quad f(x) \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \int_0^\infty G(x, s)[\rho(s, t) - \rho(x, t)]ds - f(x)k(x - x_0)\rho(x, t),$$

где $G(x, s) = G(s, x) = f(x)K(x, s) = f(s)K(s, x)$.

Результаты теории мало изменятся, если положить $k(x - x_0)$ постоянной при достаточно больших x :

$$k(x - x_0) = \begin{cases} a(x - x_0)^p & \text{при } a(x - x_0)^p < C\tilde{\omega}, \\ C\tilde{\omega} & \text{при } a(x - x_0)^p \geq C\tilde{\omega}, \quad 1 \ll C < \infty. \end{cases}$$

При этом (20) становится уравнением с ограниченным самосопряженным оператором K , действующим в $L_2^f(0, \infty)$:

$$K\rho(x) = \int_0^\infty K(x, s)[\rho(s) - \rho(x)]ds + k(x - x_0)\rho(x).$$

Поскольку из (20) следует, что

$$\begin{aligned} \frac{d(\rho(t), \rho(t))}{dt} &= - \int_0^\infty \int_0^\infty G(x, s)[\rho(s, t) - \rho(x, t)]^2 ds dx - \\ &- 2 \int_0^\infty f(x)k(x - x_0)\rho^2(x, t)dx < 0, \end{aligned}$$

то точки спектра $\lambda(K)$ действительны и отрицательны.

Задачей теории является вычисление величины «мономолекулярной константы скорости» k :

$$k = k(t, M) = \left| N^{-1} \frac{dN}{dt} \right| = N^{-1} \int_{x_0}^\infty k(x - x_0)n(x, t)dx, \quad N(t) = \int_0^\infty n(x, t)dx,$$

M – концентрация инертного газа в термостате.

При $t|\lambda_1| \gg 1$ имеем $k(t, M) \approx |\lambda_0(M)|$, где $\lambda_0(M)$ и $\lambda_1(M)$ – максимальное и следующее за ним собственное значения кинетического оператора K . График $k(t, M)$ от t позволяет определить величину λ_0 и оценить λ_1 .

Дискретизация (20) методом усреднения дает

$$g_i \frac{dp_i}{dt} = \sum_{k=0}^L \bar{W}_{ki}[\rho_k(t) - \rho_i(t)] - b_i \rho_i(t),$$

где

$$b_i = \int_{d_i} f(x)k(x - x_0)\psi_i(x)dx,$$

а \bar{W}_{ik} , \bar{W}_{ki} и g_i определены в § 5.

Приближенное значение для мономолекулярной константы скорости определяется формулой

$$\tilde{k} = \tilde{k}(t, M) = \left[\sum_{i=0}^L b_i \rho_i(t) \left[\sum_{i=0}^L g_i \rho_i(t) \right]^{-1} \right].$$

Подбор сетки. Определение $\lambda_0(M)$ является основной целью теории. При $|\lambda_1 t| \gg 1$ имеем $n(x, t) \approx \exp(\lambda_0 t) u_0(x)$, где $u_0(x)$ – собственная функция, соответствующая λ_0 . Поэтому при аппроксимации (20) достаточно, чтобы система узлов обеспечивала хорошее приближение $u_0(x)$. Представим $u_0(x)$ в виде $u_0(x) = f(x) \rho_0(x)$, тогда задача выбора сетки сведется к аппроксимации $\rho_0(x)$. Для $\rho_0(x)$ можно получить приближенное аналитическое выражение и использовать его как для выбора «хорошей» сетки $\{x_i\}$, так и для характеристики точности численного решения. Поскольку $\rho_0(x)$ является монотонно убывающей функцией, то при хорошо подобранном распределении узлов вариация $\rho(x)$ на интервале локального приближения составляет $|\delta \rho(x)| \sim L^{-1} \rho_{\max}(x)$. Это можно считать приемлемым при $L > 10$ по крайней мере для участков «существенных» значений $\rho(x)$, если в качестве таковых принять $\rho(x) > L^{-1} \rho_{\max}(x)$. Нами были проведены численные расчеты для модели, описанной в [3], с числом узлов $L = 12$. Система линейных о.д.у. решалась методом, изложенным в [4]. Полученные результаты, а именно $\rho(x, t)$ и $k(M, t)$, оказались более предпочтительными, несмотря на то, что в [3] использовалась очень подробная сетка, содержащая 200 узлов. Это, по-видимому, связано с неконсервативностью примененной в [3] вычислительной схемы дискретизации интегродифференциального уравнения.

Заключение

Задача дискретизации кинетического интегродифференциального уравнения не является тривиальной. Необходимость аппроксимации ядра в традиционной методике дискретизации приводит к большим системам о.д.у., решение которых само по себе представляет непростую задачу. В этом отношении рассмотренный здесь метод усреднения, несмотря на ограничения, связанные с требованием положительности решения, имеет несомненные достоинства, поскольку он не требует аппроксимации ядра. Это свойство позволяет существенно понизить размерность дискретизированной системы о.д.у., используя асимптотические свойства решения исходного уравнения. В связи с этим авторы полагают, что применение предлагаемой методики имеет хорошие перспективы при теоретическом исследовании поведения сложных химико-физических объектов, моделирование которых при неравновесных условиях в настоящее время удастся осуществить лишь при сильно упрощающих предположениях.

Метод применим к широкому классу эволюционных уравнений, но наиболее эффективным, по нашему мнению, он оказывается при конечномерной аппроксимации уравнений кинетического типа. Подобным образом можно дискретизировать как нелинейные кинетические интегродифференциальные уравнения, так и уравнения в частных производных диффузионного типа:

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} D(x) \frac{\partial n(x, t)}{\partial x}.$$

В последнем случае усреднение будет особенно полезно, если коэффициент диффузии $D(x)$ является быстро меняющейся пространственной функцией.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Павлов Б.В. Методы математического моделирования в химической кинетике: Дис. докт. физ.-матем. наук. М.: Ин-т хим. физ. АН СССР, 1986.
2. Кузнецов Н.М. Кинетика мономолекулярных реакций. М.: Наука, 1982.
3. Павлов Б.В., Гольденберг М.Я. Численное решение интегро-дифференциального уравнения теории мономолекулярных реакций // Хим. физ. 1982. № 4. С. 509–512.
4. Павлов Б.В., Родионова О.Е. Численное решение систем линейных обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1994. Т. 34. № 4. С. 622–627.

Поступила в редакцию 23.05.94

Переработанный вариант 08.08.95