ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК, 2019, том 484, № 5, с. 532–537

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 517.9

О ВОЗНИКНОВЕНИИ СТРУКТУР В НЕЛИНЕЙНЫХ ЗАДАЧАХ ФИЗИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

Академик РАН В. Б. Бетелин[1,*], В. А. Галкин[1, 2, 3, **]

Поступило 30.10.2018 г.

В настоящей работе выделен ряд явлений, связанных с образованием макроскопических структур за счёт высокой интенсивности взаимодействия элементов пространственно однородных систем, а также их возникновение за счёт линейного пространственного переноса в пространственно неоднородных системах. Характерной особенностью рассматриваемого класса задач является нарушение непрерывности операторов, описывающих эволюцию системы в естественных нормах, которые определяются локальными соотношениями сохранения.

Ключевые слова: физическая кинетика, законы сохранения, образование структуры.

DOI: https://doi.org/10.31857/S0869-56524845532-537

Вопросы структурообразования в физических, технических, информационных системах, связанные с возникновением на основе микроскопической динамики макроскопических кластеров с существенно обособленным поведением, восходят к классическим исследованиям по фазовым переходам, ударным волнам, явлениям самоорганизации с образованием порядка в неупорядоченных системах [1–5]. Типичным способом выделения “структур” служит возникновение пространственно-временных областей, в которых макроскопические параметры состояния системы приобретают сингулярности, a’priori не включенные в язык описания системы. Таким образом, имеет место неполнота языка математической модели, приводящая к понятиям обобщённых решений и требующая уточнения постановки исходной задачи. По существу это зачастую означает отсутствие корректности рассматриваемых задач в исходной постановке.

Математические модели физических систем, состоящих из статистически большого количества частиц (разреженные газы, дисперсные системы, плазма), а также модели механики сплошной среды основываются на фундаментальных соотношениях баланса, носящих общее название — законы сохранения. Значительное количество современных исследований по теории законов сохранения связано с вопросами корректности задач для систем нелинейных дифференциальных и интегродифференциальных уравнений Лиувилля

$$\frac{\partial f^{(\omega)}(x,t)}{\partial t}+\operatorname{div}_x(V^{(\omega)}(x,t)f^{(\omega)}(x,t))= \\ =S^{(\omega)}(f,x,t)+q^{(\omega)}(x,t), \\ x\in\mathbb{R}_n,\quad t>0,\quad \omega\in\Omega, \tag{1}$$

где $f=\{f^{(\omega)}\}$ — неизвестная вектор-функция. Скорость $V=\{V_j^{(\omega)}(x,t)\}$ непрерывного переноса в фазовом пространстве $x\in\mathbb{R}_n$, определение оператора столкновений S (задающего мгновенные разрывные изменения состояния частиц во множестве Ω при фиксированных пространственно-временных координатах x, t), вид источника частиц $q^{(\omega)}(x,t)\geq 0$ считаются заданными характером моделируемого физического процесса. Подчеркнём, что оператор S действует на f (в общем случае нелокально) только по аргументам состояния $\omega\in\Omega$. Оператор столкновений S выражает соотношение баланса “рождения” и “гибели” частиц по переменным ω в каждой пространственно-временной точке (x, t).

Приложения этих уравнений широко известны, в частности, в связи с газодинамикой и гидродинамикой, физической кинетикой. Система законов сохранения (1) дополняется начальными данными

$$f|_{t=0}=f_0,\ x\in\mathbb{R}_n,\ \omega\in\Omega. \tag{2}$$

[1] *Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской Академии наук, Москва*

[2] *Тюменский индустриальный университет*

[3] *Сургутский государственный университет*

* *E-mail: betelin@niisi.msk.ru*

** *E-mail: val-gal@yandex.ru*

Ограничения на оператор столкновений S в основном связаны со свойствами постоянства либо невозрастания нормы решения в пространстве L_1 по некоторой мере μ, а также неотрицательностью решения f, которое по своему физическому содержанию характеризует распределение числа частиц в системе среди возможных состояний $\omega \in \Omega$. Подчеркнём, что в общем случае S является разрывным в пространстве L_1.

Выделим класс операторов столкновений S в уравнении (1), который включает в себя при некоторых ограничениях операторы столкновений в моделях Больцмана и Смолуховского [6, 7].

Определим требования на множество Ω, являющиеся естественным обобщением свойств множества состояний частиц для моделей Больцмана и Смолуховского.

Положим Ω — локально компактное сепарабельное метрическое пространство, которое σ-конечно относительно плотной борелевой меры μ. Эта мера предполагается конечной на компактах в Ω, строго положительной на открытых множествах в Ω. (Борелева мера называется плотной, если $\mu(E) = \sup\limits_{E \supset K \in R} \mu(K)$, где R — класс компактных подмножеств из пространства Ω.)

Пусть $B(\Omega)$ — совокупность борелевых функций на множестве $\Omega = \{\omega\}$ состояний элементов моделируемой физической системы; обозначим $\overset{\circ}{B}$ — множество финитных ограниченных борелевых функций на топологическом пространстве Ω, $L_1^{\mathrm{loc}}(A, \mu)$ — множество классов эквивалентных борелевых функций на множестве A, локально суммируемых по борелевой мере μ; $L_1 = L_1(\Omega, \mu)$ — множество элементов из $L_1^{\mathrm{loc}}(\Omega, \mu)$, суммируемых по борелевой мере μ на множестве Ω; $\langle f, \mu \rangle$ — интеграл Лебега функции f из $L_1(\Omega, \mu)$ по мере μ на множестве Ω; норма $\| f \|_{L_1} \overset{\mathrm{def}}{=} \langle | f |, \mu \rangle$. Индекс + у символа множества функций означает, что рассматриваются только неотрицательные функции.

Пусть S — частично определённое на $B(\Omega)$ отображение со значениями в $B(\Omega)$. Положим

$$G_\mu(S) = S^{-1}\left(L_1(\Omega, \mu)\right),$$

пусть множество $\overset{\circ}{B}$ — плотное в L_1 относительно топологии, заданной нормой $\| f \|_{L_1}$.

Множество $K_\mu \subset G_\mu(S)$ назовём множеством μ-сохранения оператора S, если для каждого $f \in K_\mu$ справедливо равенство (соотношение сохранения)

$$\langle S(f), \mu \rangle = 0. \tag{3}$$

Считаем, что оператор $S\colon G_\mu(S) \to B(\Omega)$ обладает свойством μ-сохранения, если множество $\overset{\circ}{B} \cap G_\mu(S) \subset K_\mu$ плотное в $G_\mu(S)$ относительно нормы $\| f \|_{L_1}$.

Множеством μ-диссипации оператора S: $G_\mu(S) \to B(\Omega)$ назовём семейство $D_\mu \subset G_\mu(S)$ такое, что для каждого $f \in D_\mu$ выполнено соотношение диссипации

$$\langle S(f), \mu \rangle \le 0. \tag{4}$$

Если множество $\overset{\circ}{B}_+ \cap G_\mu(S) \subset D_\mu$ плотное в $G_\mu(S) \cap L_1^+(\Omega, \mu)$ в норме $\| \cdot \|_{L_1}$, то S считаем обладающим свойством μ-диссипации.

Пусть $G_\mu(S)$ — область определения оператора S, содержит множество $\overset{\circ}{B}$. Будем говорить, что оператор S удовлетворяет условию положительности, если для каждой функции $f \in \overset{\circ}{B}_+$ можно указать такое число

$$H\left(\|f\|_{L_1}, \operatorname{supp} f\right) \ge 0$$

(символ supp означает носитель функции f), что выполнено неравенство

$$S(f) + Hf \ge 0. \tag{5}$$

Функционал H без ограничения общности можно считать монотонно возрастающим по своим аргументам.

Отметим, что из этого неравенства следует, что $S(0) = 0$, а также неотрицательность значений оператора столкновений вне носителя неотрицательной финитной функции f:

$$S(f)\big|_\omega \ge 0, \ \ \omega \in \Omega \setminus \operatorname{supp} f.$$

Для сокращённого описания динамики (1) используются конечномерные проекции решения f уравнения (1), основанные на макроскопических средних распределения частиц. Пусть источник $q = 0$, и предположим, что для некоторого семейства мер μ_β, $\beta \in C$, на решении уравнения (1) выполняются соотношения сохранения (3). Тогда формальное интегрирование обеих частей уравнения (1) по этому семейству мер на множестве параметров $\omega \in \Omega$ приводит к формальной (вообще говоря, незамкнутой) системе уравнений механики сплошной среды относительно неизвестных средних величин:

$$\langle f, \mu_\beta \rangle \overset{\mathrm{def}}{=} u_\beta(x,t) = \int\limits_\Omega f^{(\omega)}(x,t) \mu_\beta(d\omega), \ \ \beta \in C, \tag{6}$$

и тогда получается незамкнутая система законов сохранения механики сплошной среды для неизвестных $u = \{u_\beta\}_{\beta \in C}$:

$$\frac{\partial u_\beta(x,t)}{\partial t}+\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial F_j^{(\beta)}}{\partial x_j}=0,\ \ x\in\mathbb{R}_n,\ \ t>0,\ \ \beta\in C.$$

Относительно вектора потоков $F = \{F_j^{(\beta)}\}$ делаются дополнительные (замыкающие) предположения, которые постулируют зависимость $F_j^{(\beta)}$ от набора $u=\{u_\beta\}_{\beta\in C}$. Преимущество такого подхода связано, как правило, с конечномерностью вектора переменных $u=\{u_\beta\}_{\beta\in A}$. В частности, таким образом получают систему Навье–Стокса в газовой динамике, систему Эйлера для несжимаемой жидкости и т.п.

Отметим, что описанная формальная схема получения конечномерных проекций на некоторых классах решений задачи Коши (1), (2) может привести к неверным результатам за конечное время эволюции (1). В частности, этот эффект наблюдается на стационарных пространственно однородных решениях уравнения (1) с оператором столкновений Смолуховского [7].

В силу соотношения (5) типичным свойством оператора столкновений S является то, что в уравнении (1) он является источником частиц, находящихся в состояниях, которые не содержатся в исходном множестве supp f. Последнее приводит к мгновенному “размыванию” области определения решения на все аргументы $\omega\in\Omega$ (свойство нелокальности S). Это означает, что любая локализация вычислительных процессов для уравнения (1) на компактах в Ω автоматически превращает соотношение сохранения (3) при интегрировании по компактному носителю функции f в соотношение диссипации $\langle S(f)\times I_{\operatorname{supp} f},\mu\rangle\le 0$, где $I_{\operatorname{supp} f}$ — индикатор-функция носителя. Следовательно, в рамках любого вычислительного процесса для уравнения (1), основанного на учёте частиц в заданной компактной области состояний частиц, неизбежна его неконсервативность. Данный эффект делает предпочтительными методы прямого моделирования кинетических процессов, приводящих к уравнениям баланса (1).

Особенно интересно свойство нелокальности операторов S проявляется в случае, когда множество возможных состояний частиц $\omega\in\Omega=\mathbb{R}_n$. В этом случае возможна эволюция, описываемая уравнением (1), которая может за конечное время привести к массовому уходу частиц из состояний $\omega\in\Omega=\mathbb{R}_n$, что проявляется в некоторый критический момент времени $t_c\ge 0$ как переход соотношений сохранения в соотношения диссипации макроскопических средних, описывающих систему. Последнее интерпретируется как спонтанное выделение структуры в кинетической системе, наличие которой не предполагалось в начальный момент времени в условиях (2); при этом по умолчанию предполагается отсутствие взаимодействия выделившейся структуры с частицами, которые находятся в состояниях $\omega\in\Omega=\mathbb{R}_n$.

Остановимся на условиях существования неотрицательных решений $f^{(\omega)}\ge 0$ пространственно однородного уравнения (1), которое в этом случае принимает вид

$$S(f)+q=0. \tag{7}$$

Задача (7) в случае стационарного источника $q^{(\omega)}\ge 0$ является крайне важной и трудной задачей физической кинетики. Причина в том, что эти решения сосредоточены на множестве точек разрыва оператора S. Действительно, пусть для некоторой меры μ_β, $\beta\in C$, связанной с соответствующим свойством сохранения оператора столкновений $S(f)$ на множестве финитных функций $\varphi\in\mathring{B}$, справедливо соотношение сохранения (3): $\langle S(\varphi),\mu_\beta\rangle=0$. Выберем последовательность финитных функций $\varphi_n\to f$ в норме $\|\cdot\|_{L_1}$ при $n\to\infty$. Поскольку на финитных функциях φ_n выполняется соотношение сохранения $\langle S(\varphi_n),\mu_\beta\rangle=0$, а на решении уравнения (7) для $q>0$ имеет место строгое неравенство $\langle S(f),\mu_\beta\rangle<0$, то указанное решение f является точкой разрыва для оператора S в норме $\|\cdot\|_{L_1}$. Таким образом, разрывность оператора столкновений на решениях уравнения (7) создаёт существенные трудности для отыскания искомых решений.

В связи с рассмотренным выше явлением перехода соотношения сохранения в соотношение диссипации представляет интерес изучение решений стационарной задачи (7) в случае коагуляции непрерывных масс $\omega\in\mathbb{R}^+$ с оператором столкновений $S=S_\Phi^{(\omega)}(f)$ Смолуховского:

$$S_\Phi^{(\omega)}(f)=\frac{1}{2}\int_0^\omega\Phi(\omega-\omega_1,\omega_1)f^{(\omega-\omega_1)}f^{(\omega_1)}d\omega_1-$$
$$-f^{(\omega)}\int_0^\infty\Phi(\omega,\omega_1)f^{(\omega_1)}d\omega_1. \tag{8}$$

Заданная интенсивность парного слияния частиц $\Phi(\omega,\omega_1)\ge 0$. Оператор столкновений Смолуховского (8) в случае локально ограниченных измеримых функций $\Phi(\omega,\omega_1)\equiv\Phi(\omega_1,\omega)$ удовлетворяет соотношению сохранения с мерой $\mu_1(d\omega)=\omega d\omega$ и соотношению диссипации с мерой $\mu_2(d\omega)=d\omega$, где $d\omega$ — лебегова мера на числовой прямой. В этом случае уравнение (7) записывается в виде

$$S_\Phi^{(\omega)}(f)+q^{(\omega)}=0,\ \ \omega\in\Omega=\mathbb{R}^+, \tag{9}$$

где неотрицательная величина $q^{(\omega)}$ определяет интенсивность, с которой частицы массы $\omega\ge 0$ вводятся в коагулирующую систему.

Рассмотрим вопрос о построении решения стационарного уравнения коагуляции (9) в частном случае, когда ядро Φ имеет мультипликативное представление

$$\Phi(\omega,\omega_1)=\alpha(\omega)\alpha(\omega_1),\ \ \alpha(\omega)>0,\ \ \omega,\omega_1\in\mathbb{R}^+.$$

Сразу подчеркнём, что в случае мультипликативной функции Φ следующая замена независимой переменной

$$\alpha f\mapsto f$$

приводит уравнение (9) к стандартному виду:

$$\frac{1}{2}(f*f)^{(\omega)}-f^{(\omega)}\int\limits_0^\infty f^{(\omega_1)}d\omega_1+q^{(\omega)}=0,\ \ \omega\in\mathbb{R}^+, \quad (10)$$

где символ $*$ означает свёртку. Очевидно, вопрос о построении решения интегрального уравнения (10) связан с определением величины интеграла $\int\limits_0^\infty f^{(\omega_1)}d\omega_1$. Если функция f удовлетворяет (10), то непосредственным интегрированием по $\omega\in\mathbb{R}^+$ получаем

$$\int\limits_0^\infty f^{(\omega_1)}d\omega_1=\left\{2\int\limits_0^\infty q^{(\omega)}d\omega\right\}^{1/2}\overset{\text{def}}{=}Q,$$

если считать заданную функцию $q\geq 0$ суммируемой на $\mathbb{R}^+$. Для построения решения уравнения (10) используем монотонно возрастающий итерационный метод последовательных приближений

$$\begin{gathered}f=\lim_{n\to\infty}\varphi_n,\ \ \varphi_0=0,\\ \varphi_{n+1}=Q^{-1}\left[\frac{1}{2}\varphi_n*\varphi_n+q\right],\ \ n\geq 0.\end{gathered} \quad (11)$$

Т е о р е м а 1. *Пусть функция q — неотрицательная суммируемая по мере Лебега на $\mathbb{R}^+$. Тогда уравнение* (10) *имеет неотрицательное суммируемое решение f, являющееся пределом монотонно возрастающих итераций* (10) *при $Q>0$, и решение $f=0$ при $Q=0$. Это решение единственное с точностью до эквивалентности в пространстве $L^1_{[0,\infty]}$.*

Ясно, что такие решения не принадлежат множеству консервативности оператора столкновений Смолуховского (9), а лежат во множестве его диссипативности в силу неотрицательности источника.

Такого рода задачи возникают при описании роста пор в металлах при облучении потоком быстрых нейтронов, которые, выбивая атомы из кристаллической решётки, служат причиной возникновения пор [8]. Аналогичные явления возникают при описании роста связей в информационных системах. При описании работы реактивных двигателей приходится учитывать коагуляцию слипающихся частичек, которые возникают в процессе горения топлива, т.е. здесь источником коагулирующих частиц является химическая реакция, протекающая во внешней среде. Важный класс задач связан с коагуляцией пор в поровом пространстве нефтегазовых пластов при пульсации давления в залежи при управляющем воздействии на динамику жидкости за счёт изменения геометрии течения [9].

Вопрос об устойчивости стационарного решения для нестационарной задачи в общем случае не решён. Можно показать, что для ядра Φ, равного положительной постоянной, устойчивость имеет место. Если порядок роста ядра на бесконечности равен единице, т.е. $\Phi(\omega,\cdot)\sim\omega$ при $\omega\to\infty$, то стационарное решение неустойчиво, ибо решение нестационарной задачи притягивается к нулю. Тождественный нуль, естественно, не удовлетворяет стационарной задаче с ненулевым источником.

Наличие особенности ядра Φ в окрестности $\omega,\ \omega_1=0$ для коагуляции непрерывных масс может обусловить существование стационарного положительного решения при нулевом источнике. Пример такой ситуации даёт ядро

$$\begin{gathered}\Phi(\omega,\omega_1)=\alpha(\omega)\alpha(\omega_1)(\omega+\omega_1)^{-3},\\ \omega,\omega_1>0,\ \ \alpha>0,\end{gathered} \quad (12)$$

которому соответствует решение

$$f^{(\omega)}\equiv\alpha^{-1}(\omega),\ \ \omega>0,\ \ \alpha>0, \quad (13)$$

для уравнения

$$S_\Phi^{(\omega)}(f)=0. \quad (14)$$

Результаты теоремы 1 и замечания к ней дают возможность построения явных решений уравнения (1) в пространственно однородном случае, с оператором столкновений Смолуховского (8) обладающих свойством автомодельности, монотонно убывающих по времени. (На этих решениях не выполняется соотношение сохранения, начиная с критического времени $t_c=0$. В этом случае структурообразование в коагулирующей системе начинается мгновенно. Явление структурообразования в данном случае означает процесс полимеризации, когда из “микрофазы” частиц с конечными размерами во множестве состояний $\Omega=\mathbb{R}_+$, начиная с критического момента времени t_c с положительной вероятностью образуются частицы неограниченных размеров, которые не взаимодействуют с частицами в Ω, т.е. “выпадают” из системы подобно осадкам.)

Действительно, рассмотрим решение уравнения Смолуховского (1), (8) в виде

$$f^{(\omega)}(t) = q^{(\omega)} \times (t+1)^{-1}, \quad \omega, t \geq 0, \tag{15}$$

где $q^{(\omega)} > 0$ при $\omega \geq 0$, и удовлетворяет условиям теоремы 1. Подставляя (15) в (1), получаем, что функция q необходимо должна удовлетворять уравнению

$$S_{\Phi}^{(\omega)}(q) + q^{(\omega)} = 0, \ \ \omega \in \Omega = \mathbb{R}^{+}, \tag{16}$$

где оператор S_{Φ} определён формулой (8). При заданном положительном q найдём симметричные неотрицательные ядра Φ, для которых (16) обращается в тождество, т.е. решаем обратную задачу. Рассмотрим её решение в классе мультипликативных ядер, полагая

$$\Phi(\omega, \omega_1) = \alpha(\omega)\alpha(\omega_1), \ \ \omega, \omega_1 \geq 0. \tag{17}$$

Обозначим

$$f^{(\omega)} = \alpha(\omega) q^{(\omega)}, \ \ \omega \geq 0, \tag{18}$$

и подставим (18) в (16), выражая величины α и q в операторе S_{Φ} через неизвестную f, получаем уравнение (10) из теоремы 1. Следовательно, для рассматриваемых положительных q существует единственное положительное решение f уравнения (10) и, значит, ядро Φ отыскивается по формулам (17), (18).

Класс построенных мультипликативных ядер можно расширить за счёт формул (12)–(14), добавляя к мультипликативному ядру Φ функцию

$$\bar{\Phi}(\omega, \omega_1) = \frac{1}{q^{(\omega)} q^{(\omega_1)} (\omega + \omega_1)^3}, \quad \omega, \omega_1 > 0.$$

Поскольку справедливо тождество

$$S_{\bar{\Phi}}^{(\omega)}(q) = 0, \ \ \omega > 0,$$

то выполняется равенство

$$S_{\bar{\Phi}+\Phi}^{(\omega)}(q) + q^{(\omega)} = 0, \ \ \omega > 0.$$

Аналогичная модель образования “осадков”, не взаимодействующих с частицами системы, имеет место для пространственно неоднородной задачи (1), (2), когда взаимодействие свободного переноса и столкновений частиц может привести к образованию областей, в которых соотношение сохранения переходит в соотношение диссипации в некоторой пространственно-временной области [10].

Источник финансирования. Работа выполнена при поддержке РФФИ, гранты 16–29–15105, 18–01–00343, 18–47–860004.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Гельфанд И.М.* Некоторые задачи теории квазилинейных уравнений // УМН. 1959. Т. 14. В. 2 (86). С. 87–158.
2. *Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966. 687 с.
3. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. Ч. 1. Сер. Теоретическая физика. М., 1976. Т. 5.
4. *Николис Г., Пригожин И.* Самоорганизация в неравновесных системах. От диссипативных структур к упорядоченности через флуктуации. М.: Мир, 1979. 512 с.
5. *Рождественский Б.Л., Яненко Н.Н.* Системы квазилинейных уравнений и их приложения к газовой динамике. М.: Наука, 1978.
6. Неравновесные явления. Уравнение Больцмана / Под ред. Д.Л. Либовица, Е.У. Монтролла. М.: Мир, 1986.
7. *Галкин В.А.* Уравнение Смолуховского. М.: Физматлит, 2001. 336 с.
8. *Багдасарова И.Р., Галкин В.А.* Моделирование периодических структур в распределении дефектов, возникающих в конструкционных материалах ЯЭУ, под действием стационарного источника // Изв. вузов. Ядерная энергетика. 1999. № 1. С. 85–93.
9. *Бетелин В.Б., Галкин В.А.* Задачи управления параметрами несжимаемой жидкости при изменении во времени геометрии течения // ДАН. 2015. Т. 463. № 2. С. 149–151.
10. *Галкин В.А.* Обобщенное решение уравнения Смолуховского для пространственно неоднородных систем // ДАН. 1987. Т. 293. № 1. С. 74–77.

ON THE FORMATION OF STRUCTURES IN NONLINEAR PROBLEMS OF PHYSICAL KINETICS

Academician of the RAS V. B. Betelin[1], V. A. Galkin[1,2,3]

[1] Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation
[2] Industrial University of Tyumen, Tyumen, Russian Federation
[3] Surgut State University, Surgut, Russian Federation

Received October 30, 2018

A number of phenomena associated with the formation of macroscopic structures due to the high interaction intensity of elements of spatially homogeneous systems and due to linear spatial transport in spatially inhomogeneous systems are addressed. A characteristic feature of the considered class of problems is the violation of the continuity of the operators describing the evolution of a system in natural norms determined by local conservation relations.

Keywords: physical kinetics, conservation laws, structure formation.