

СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ОСНОВЕ ПРОЕКЦИОННОГО МЕТОДА ДЛЯ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА

С. В. Рогазинский^{1,2}

¹Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск

²Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 519.676

Построен алгоритм статистического моделирования для решения нелинейного кинетического уравнения Больцмана на основе проекционного метода. В качестве ортонормированного базиса использовались функции Эрмита. Алгоритм верифицировался на решении задачи однородной релаксации газа с известным решением.

Ключевые слова: ансамбль взаимодействующих частиц, цепь Маркова, прямое моделирование, оценка по столкновениям.

1 Вводная информация

В работе рассматривается решение задачи Коши для нелинейного кинетического уравнения Больцмана в пространственно однородном случае. Хорошо известно, что приближенное решение данной задачи можно оценивать методом Монте — Карло, моделируя марковский процесс эволюции соответствующего N -частичного ансамбля, фазовые состояния которого меняются вследствие парных взаимодействий частиц (см., например, [2, 5, 6]).

Пространственно однородная релаксация простого газа, описывается следующей задачей Коши для нелинейного уравнения Больцмана (в безразмерном виде) [3]:

$$\frac{\partial f(\mathbf{v}, t)}{\partial t} = \int [f(\mathbf{v}', t)f(\mathbf{v}_1', t) - f(\mathbf{v}, t)f(\mathbf{v}_1, t)]w(\mathbf{v}', \mathbf{v}_1' \rightarrow \mathbf{v}, \mathbf{v}_1)d\mathbf{v}'d\mathbf{v}_1'd\mathbf{v}_1,$$
$$f(\mathbf{v}, t) \Big|_{t=0} = f_0(\mathbf{v}),$$

где

$$w(\mathbf{v}', \mathbf{v}_1' \rightarrow \mathbf{v}, \mathbf{v}_1) = 4\sigma(g, \cos \vartheta)\delta^{(3)}(\mathbf{v}' + \mathbf{v}_1' - \mathbf{v} - \mathbf{v}_1)\delta\left(\frac{\mathbf{v}'^2 + \mathbf{v}_1'^2}{2} - \frac{\mathbf{v}^2 + \mathbf{v}_1^2}{2}\right),$$

и $g = |\mathbf{v}' - \mathbf{v}_1'|$, $\sigma(g, \cos \vartheta)$ — дифференциальное сечение рассеяния двух частиц, ϑ — угол поворота относительной скорости в системе центра инерции рассеивающихся частиц.

Здесь $f(\mathbf{v}, t)$ — плотность распределения частиц газа по скоростям $\mathbf{v} \in \mathbf{R}^3$ в момент времени $t \geq 0$, причем $\int f(\mathbf{v}, t)d\mathbf{v} = 1$.

Поставим задачу нахождения плотности распределения частиц по модулю скорости :

$$\varphi(|\mathbf{v}|, t) = |\mathbf{v}|^2 \int f(\mathbf{v}, t)d\omega, \quad \mathbf{v} = |\mathbf{v}| \cdot \omega.$$

В целях удобства введем обозначение $x = |\mathbf{v}|$.

Настоящая статья посвящена нахождению решения методом Монте — Карло сформулированной выше задачи Коши на основе проекционного метода.

2 Алгоритм метода Монте — Карло и оценка функционалов от решения нелинейного уравнения Больцмана

Алгоритм статистического моделирования для решения нелинейного уравнения Больцмана использует ансамбль взаимодействующих частиц [5]. Эволюция модельного ансамбля связана с N -частичным уравнением Каца [2]. В интегральном виде это уравнение для плотности столкновений в системе $\Phi(V, t)$, где $V = (\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_N)$, \mathbf{v}_i — скорость i -й частицы, имеет вид [8]:

$$\Phi(V, t) = \int_0^t \int_V \Phi(V', t') K(V', t' \rightarrow V, t) dV' dt' + \Phi_0(V, t), \quad (2.1)$$

где

$$K(V', t' \rightarrow V, t) = \sum_{\pi} a(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j) A^{-1}(V') K_1(V' \rightarrow V | \pi) k(t' \rightarrow t | V),$$

$$K_1(V' \rightarrow V | \pi) = k(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j \rightarrow \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) \prod_{m=1, m \neq i, j}^N \delta(\mathbf{v}_m - \mathbf{v}'_m),$$

$$k(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j \rightarrow \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) = w(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j | \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) a(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j)^{-1},$$

$$A(V) = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N a(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j), \quad a(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) = \int w(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j | \mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j) d\mathbf{v}'_i d\mathbf{v}'_j.$$

$$k(t' \rightarrow t | V') = A(V') E(V', t - t'), \quad E(V, t) = \exp\{-tA(V)\},$$

$$\Phi_0(V, t) = \int f_0(V) \delta(t') k(t' \rightarrow t | V) dt', \quad f_0(V) = \prod_{i=1}^N f_0(\mathbf{v}_i).$$

Известно, что при $N \rightarrow \infty$ одночастичная плотность $f^{(1)}(\mathbf{v}, t)$, соответствующая решению уравнения Каца, при условии "молекулярного" хаоса удовлетворяет нелинейному уравнению Больцмана [2].

Обычно при решении уравнения (2.1) методом Монте — Карло вычисляют не само решение $\Phi(V, t)$, а следующие функционалы от $f^{(N)}(V, t) = A^{-1}(V) \Phi(V, t)$ — решения уравнения Каца в заданные моменты времени:

$$J_H(t) = \int H(V) f^{(N)}(V, t) dV = \int h(\mathbf{v}) f^{(1)}(\mathbf{v}, t) d\mathbf{v} = \int H(V) A^{-1}(V) \Phi(V, t) dV,$$

$$\text{где } H(V) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N h(\mathbf{v}_i).$$

Более удобным является интегральное уравнение, получающееся из (2.1), с использованием "расслоения" распределения взаимодействий в ансамбле по номеру пары взаимодействующих частиц $\pi = (i, j)$ [5], которое имеет вид:

$$F(Z, t) = \int_0^t \int_Z F(Z', t') K(Z', t' \rightarrow Z, t) dZ' dt' + F_0(Z) \delta(t), \quad (2.2)$$

где $Z = (V, \pi)$, $dZ = dV d\mu_0(\pi)$, причем интегрирование по мере μ_0 означает суммирование по всем различным парам $\pi = (i, j)$.

Ядро уравнения (2.2) имеет вид [5, 6]:

$$K(Z', t' \rightarrow Z, t) = k(t' \rightarrow t | V') \frac{a(\pi)}{A(V')} K_1(V' \rightarrow V | \pi).$$

Условная переходная плотность $K_1(V' \rightarrow V | \pi)$ определяет преобразование ансамбля частиц в результате взаимодействия пары с номером $\pi = (i, j)$, которое соответствует замене $(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j) \rightarrow (\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j)$ соответственно заданной индикатрисе.

Функционал $J_H(t)$ преобразуется к виду [5]:

$$J_H(t) = \int H(V) A^{-1}(V) \Phi(V, t) dV = \int_0^t \int_Z \tilde{H}(V, t - t') F(Z, t') dZ dt', \quad (2.3)$$

где $H(V) \in L_\infty$, $\tilde{H}(V, t) = H(V)E(V, t)$.

Рассмотрим цепь Маркова (Z_n, t_n) , $n \in 0, 1, \dots$ с нормированной плотностью перехода

$$P(Z', t' \rightarrow Z, t) = p(t' \rightarrow t|V')P_1(\pi|V')P_2(V' \rightarrow V|\pi)$$

и нормированной плотностью начального состояния $P_0(Z, t) = P_0(Z)\delta(t)$. Случайные веса вводятся по формулам

$$Q_0 = F_0(Z_0)/P_0(Z_0), \quad Q_n = Q_{n-1}Q(Z_{n-1}, t_{n-1}; Z_n, t_n) \quad \text{при } n \geq 1, \\ Q(Z', t'; Z, t) = K(Z', t' \rightarrow Z, t)/P(Z', t' \rightarrow Z, t).$$

Величина Q очевидным образом факторизуется. Для оценки функционала $J_H(t)$ (2.3) можно использовать весовой вариант оценки “по столкновениям” (в начале пробегов):

$$\xi = \sum_{i=0}^{\nu} Q_n \tilde{H}(V_n, T - t_n), \quad \nu = \max\{n : t_n < T, n = 0, 1, \dots\},$$

$E\xi = J_H(T)$, где T — момент времени, в который оценивается рассматриваемый функционал. Весовая оценка, в частности, полезна для исследования зависимости функционалов от параметров модели.

Для среднего квадрата оценки ξ , как следует из теории весовых методов Монте — Карло (см., например [7]), выполняется соотношение

$$E\xi^2 = (\chi, \tilde{H}[2F^* - \tilde{H}]),$$

где χ — ряд Неймана для уравнения

$$\chi = \mathbf{K}_p \chi + \{F_0^2/P_0\}\delta(t),$$

а \mathbf{K}_p — интегральный оператор с ядром $Q(Z', t'; Z, t)K(Z', t' \rightarrow Z, t)$. Здесь $F^* = \mathbf{K}F^* + \tilde{H}$, причём

$$F^*(Z, t) = E\xi_Z,$$

где ξ_Z — оценка по столкновениям для $Z_0 = Z$ и $Q_0 = 1$ при $t_0 = 0$. В случае прямого моделирования, то есть $Q_n \equiv 1$, $n \geq 0$, величина $D\xi$ конечна для любого конечного временного интервала.

3 Проекционная оценка плотности

Из кинетической теории газов, известно разложение плотности распределения частиц по скоростям в виде ряда по функциям Эрмита [9] в трехмерном случае. В данном случае искомая плотность $\varphi(x, t)$ является одномерной. Положив $\varphi(x, t) = 0$ при $x < 0$, представим полученную таким образом функцию в виде ряда по функциям Эрмита [10]:

$$\varphi(x, t) = \sum_{i=0}^{\infty} C_i(t) \psi_i(x), \quad (3.1)$$

где $\psi_i(x)$ — ортонормированные функции Эрмита в $L_2(-\infty, \infty)$:

$$\psi_i(x) = \alpha_i P_i(x) \exp(-x^2/2). \quad (3.2)$$

причем $P_i(x)$ — полиномы Эрмита. Напомним, что скалярное произведение в $L_2(-\infty, \infty)$ определяется следующей формулой:

$$(\varphi, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) \psi(x) dx, \quad \varphi(x), \psi(x) \in L_2(-\infty, \infty).$$

Функции Эрмита (3.2) удовлетворяют условиям:

$$(\psi_i, \psi_j) = \delta_{ij}, \quad (\psi_i, \psi_i) = \alpha_i^2 \cdot 2^i i! \sqrt{\pi} = 1.$$

Используя условие ортонормированности функций Эрмита, из (3.1) находим:

$$C_i(t) = \int \psi_i(x) \varphi(x, t) dx.$$

Коэффициенты разложения в ряд (3.1) по функциям Эрмита имеют вид функционалов (2.3). Данное обстоятельство позволяет использовать метод Монте — Карло (см. п. 2) для приближенного нахождения $\varphi(x, t)$.

4 Решение тестовой задачи

Сформулированная в п. 1 задача Коши в случае максвелловских молекул $\sigma(g, \cos \vartheta) = q(\cos \vartheta)/g$ и специальных начальных данных имеет точное решение, которое было найдено в [1]:

$$f(\mathbf{v}, t) = (2\pi\tau)^{-\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2\tau}\right) \left[\frac{1-\tau}{\tau} \left(\frac{\mathbf{v}^2}{2\tau} - \frac{3}{2} \right) + 1 \right],$$

где $\tau = \tau(t) = 1 - \theta e^{-\lambda t}$; $\lambda = \frac{\pi}{2} \int_0^\pi q(\cos \vartheta) \sin^3 \vartheta d\vartheta$, $t \geq 0$, $0 \leq \theta \leq 2/5$. В качестве начальных данных полагают

$$f_0(\mathbf{v}) = f(\mathbf{v}, t) \Big|_{t=0}.$$

В качестве тестовой задачи была решена задача со следующими параметрами: $q(\cos \vartheta) = 1.0$, $\theta = 0.4$. Результаты расчетов приведены в таблице 1 при $t = 0$ и в таблице 2 при $t = 5$. В расчетах использовались: $N = 50$, число траекторий равно 10^6 . Символом σ в таблицах 1, 2 обозначены среднеквадратические статистические погрешности оценок. В предварительных расчетах были проведены исследования по влиянию объема модельного ансамбля на значения искомых функционалов (коэффициентов $C_i(t)$), которые показали, что при $N \geq 50$ изменения этих функционалов становятся незначимыми. Необходимо заметить, что все коэффициенты $C_i(t)$, $i = 0, \dots, 10$, при $t = 0.0, 5.0$ вычислялись на одной траектории. Это обстоятельство позволяет понизить трудоемкость вычислений и тем самым повысить эффективность проекционного метода. На рис. 1 и рис. 2 приведены графики функции $\varphi_n(x, t)$ в моменты времени $t = 0$ и $t = 5$ при $n = 6$ и $n = 10$. Приведенные в этих таблицах и на рисунках 1, 2 результаты показывают, что при решении задач рассматриваемого типа с числом траекторий 10^6 целесообразно использовать разложение с $n = 10$.

Таблица 1: Оценка коэффициентов $C_i(t)$ $N = 50$, число траекторий 10^6 , $t = 0$

	$E(\xi_i)$	$D(\xi_i)$	σ_i
C_0	0.231973	0.00049	0.000022
C_1	0.427434	0.00063	0.000025
C_2	0.451066	0.00061	0.000025
C_3	0.261731	0.00208	0.000046
C_4	0.008850	0.00271	0.000052
C_5	-0.117091	0.00203	0.000045
C_6	-0.074989	0.00192	0.000044
C_7	0.018070	0.00184	0.000043
C_8	0.045990	0.00167	0.000041
C_9	0.009595	0.00159	0.000040
C_{10}	-0.020357	0.00150	0.000039

Таблица 2: Оценка коэффициентов $C_i(t)$ $N = 50$, число траекторий 10^6 , $t = 5$

	$E(\xi_i)$	$D(\xi_i)$	σ_i
C_0	0.246115	0.03109	0.000176
C_1	0.422896	0.09030	0.000301
C_2	0.414891	0.08731	0.000295
C_3	0.224770	0.02837	0.000168
C_4	0.012830	0.00369	0.000061
C_5	-0.075834	0.00612	0.000078
C_6	-0.043625	0.00393	0.000063
C_7	0.009787	0.00276	0.000052
C_8	0.019991	0.00275	0.000052
C_9	0.002395	0.00238	0.000049
C_{10}	-0.006676	0.00226	0.000047

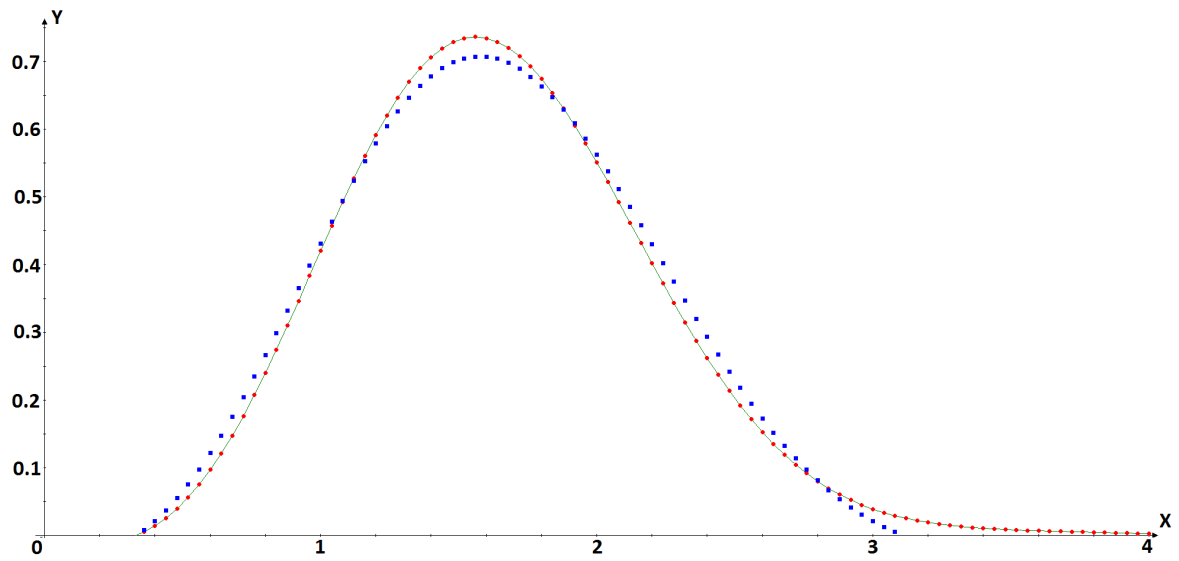


Рис. 1: График функции $\varphi_n(x, t)$ при $n = 6$ (синие квадраты), при $n = 10$ (жирные красные точки), сплошная черная линия — точное решение. Момент времени $t = 0$.

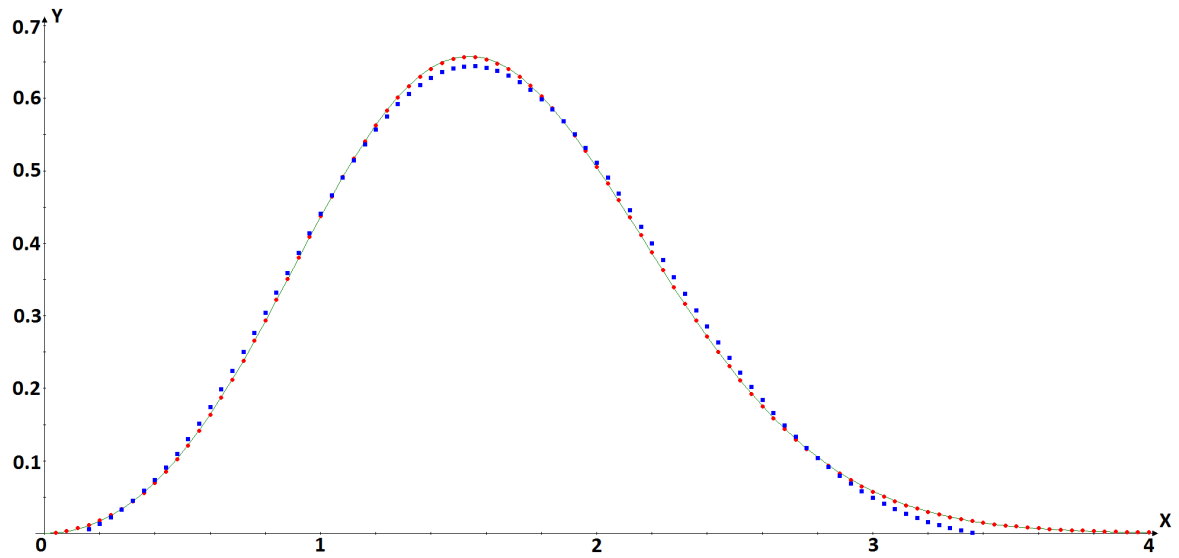


Рис. 2: График функции $\varphi_n(x, t)$ при $n = 6$ (синие квадраты), при $n = 10$ (жирные красные точки), сплошная черная линия — точное решение. Момент времени $t = 5$.

Вычисления проводились методом прямого моделирования для уравнения (2.2). В качестве функции $h_i(\mathbf{v})$, определяющей функционал (2.3) и соответствующий коэффициент $C_i(t)$ в разложении (3.1), использовались функции Эрмита в виде (3.2). Ряд (3.1) обрывался после $n = 10$.

Первые одиннадцать полиномов Эрмита записываются следующим образом:

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1 \\ P_1(x) &= 2x \\ P_2(x) &= 4x^2 - 2 \\ P_3(x) &= 8x^3 - 12x \\ P_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12 \end{aligned}$$

$$P_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x$$

$$P_6(x) = 64x^6 - 480x^4 + 720x^2 - 120$$

$$P_7(x) = 128x^7 - 1344x^5 + 3360x^3 - 1680x$$

$$P_8(x) = 256x^8 - 3584x^6 + 13440x^4 - 13440x^2 + 1680$$

$$P_9(x) = 512x^9 - 9216x^7 + 48384x^5 - 80640x^3 + 30240x$$

$$P_{10}(x) = 1024x^{10} - 23040x^8 + 161280x^6 - 403200x^4 + 302400x^2 - 30240$$

Моделирование цепи Маркова и вычисление случайных оценок ξ_i для величин $C_i(t)$ производилось по следующей схеме.

1. Полагаем $\xi_i = 0$, ($i = 0, 1, \dots, n$), $t_0 = 0$, $k = 0$. Моделируются начальное состояние V_0 соответственно плотности $f_0(V)$, номер взаимодействующей пары согласно вероятности $p(\pi) = \frac{a(\pi)}{A(V_0)}$; состояние цепи $Z_0 = (V_0, \pi)$, полагаем $\xi_i = \xi'_i + \tilde{H}_i(V_0, T)$, ($i = 0, 1, \dots, n$).
2. Согласно $k(t_k \rightarrow t_{k+1}|V_k)$, т.е. согласно экспоненциальной плотности $A(V_k)E(V_k, t_{k+1} - t_k)$, выбирается t_{k+1} , а также согласно вероятности $p(\pi) = \frac{a(\pi)}{A(V_k)}$ номер взаимодействующей пары; моделируется изменение скоростей выбранной пары согласно $K_1(V_k \rightarrow V_{k+1}|\pi)$, далее полагаем $Z_{k+1} = (V_{k+1}, \pi)$.
3. Если $t_{k+1} < T$, то вычисляется вклад в оценку $\xi_i = \xi'_i + \tilde{H}_i(V_{k+1}, T - t_{k+1})$, ($i = 0, 1, \dots, n$), и осуществляется переход к п.2 с $k = k' + 1$; иначе цепь обрывается.

Автор выражает благодарность члену-корреспонденту РАН Г.А. Михайлову за полезные советы и замечания, и д.ф.-м.н. С.А. Ухинову за сделанные замечания.

Список литературы

- [1] Бобылев А.В. О точных решениях уравнения Больцмана // Доклады Академии наук СССР, 1975, Т. 225, No. 6, С. 1296–1299
- [2] Кас М. Probability and related topics in physical sciences [Russian translation], Mir, Moscow (1965).
- [3] Коган М.Н. Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967.
- [4] Михайлов Г.А., Медведев И.Н. Оптимизация весовых алгоритмов статистического моделирования. — Новосибирск: Омега Принт, 2011. — 304с.
- [5] Mikhailov G.A., Rogasinsky S.V. Weghted Monte Carlo methods for approximate solution of a nonlinear Boltzmann equation // Siberian Mathematical Journal, 2002, Vol. 43, No. 2, pp. 71–78.
- [6] Mikhailov, G. A., Rogazinskii, S. V. Probabilistic model of many-particle evolution and estimation of solutions to a nonlinear kinetic eqution // Russian journal of numerical analysis and mathematical modelling, 2012, Vol. 27, No. 3, P. 229–242
- [7] Михайлов Г.А., Войтишек А.В. Численное статистическое моделирование. Методы Монте—Карло. М.: Издательский центр “Академия”, 2006.
- [8] Иванов М.С., Рогазинский С.В. Экономичные схемы статистического моделирования течений разреженного газа. // Математическое моделирование. 1989, т.1, стр. 130–145
- [9] Grad H. On the kinetic theory of rarefied gases // Comm. Pure and Appl. Math. 1949, v. 2, p. 331–407.
- [10] Колмогоров А. Н., Фомин С. В. Элементы теории функций и функционального анализа — М.: Наука, 2004

Сергей Валентинович Рогазинский — д.ф.-м.н., зав. лабораторией Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: svr@osmf.sscc.ru.

Дата поступления — 26 мая 2017 г.