

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. Ломоносова

Факультет Вычислительной Математики и Кибернетики

На правах рукописи

Богомолов Сергей Владимирович

**ИЕРАРХИЯ
СТОХАСТИЧЕСКИХ ДИФФУЗИОННЫХ МОДЕЛЕЙ
ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ**

Специальность 05.13.18 — математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва 2011

Диссертационная работа выполнена на кафедре вычислительных методов факультета вычислительной математики и кибернетики Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Официальные оппоненты: доктор физико – математических наук,
профессор Днестровский
Юрий Николаевич
доктор физико – математических наук,
профессор Галкин Валерий Алексеевич
доктор физико – математических наук,
профессор Иванов Михаил Федорович

Ведущая организация: Институт прикладной математики имени
М. В. Келдыша РАН

Защита состоится 5 октября 2011 г. в 15³⁰ на заседании диссертационного совета Д 501.001.43 при Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова по адресу: 119991, Москва, Ленинские горы, МГУ, 2-й учебный корпус, факультет вычислительной математики и кибернетики, ауд.685.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке факультета ВМК Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Научный консультант: доктор физико-математических наук,
профессор Алексей Алексеевич Арсеньев

Автореферат разослан 3 сентября 2011 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор физико-математических наук,
профессор

Захаров Евгений Владимирович

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. Развитие различных областей науки и современных высоких технологий происходит благодаря интенсивному использованию методов математического моделирования со все бóльшим включением микроскопических представлений об изучаемых процессах. Возникла целая отрасль вычислительного эксперимента, связанная с решением кинетических уравнений, основанная на довольно сложном теоретическом фундаменте и использовании новейшей высокопроизводительной вычислительной техники.

В математике это направление исследований, известное как шестая из проблем Гильберта, представленных им на Международном конгрессе математиков в 1900 году в Париже, опирается на работы Больцмана о принципах механики и состоит в построении "математического предельного процесса, который ведет от атомистического видения к законам движения континуума", а именно, получении единого описания газовой динамики, включая все уровни этого описания. Другими словами, важным является вопрос о том, могут ли макроскопические концепции, такие как вязкость или нелинейность, быть поняты микроскопически.

Мы сосредоточимся на *построении математических моделей*, пригодных для создания на их основе вычислительных методов, которые находятся на стыке между микро (мезо) – и макро – описаниями на примере газовой динамики.

Рассматриваемая проблематика возникает теоретически в любой задаче, решаемой численно. Никакой мощности компьютеров не хватит, чтобы решать задачи только на микроуровне. Многие процессы вполне достаточно изучать в их макроскопических проявлениях. С другой стороны, понятно, что в зада-

чах, решаемых на макроуровне присутствуют области, в которых нельзя обойтись без микроскопического описания (ударные, пограничные и начальные слои). Возникает проблема выделения соответствующих подобластей, или декомпозиции области, и согласования алгоритмов, имеющих различную как физическую, так и вычислительную, основу. Эффективность таких *иерархических* алгоритмов во многом зависит от качества *переходных* математических моделей.

Таким образом, развитие методов математического моделирования для решения задач на микро – макро уровнях, в частности, задач газовой динамики, представляет собой важную и актуальную задачу.

Цель работы. Целью работы является создание математических моделей и численных методов для исследования и компьютерного анализа процессов, происходящих в системах, сложность которых обусловлена огромным количеством объектов их составляющих, когда точность расчетов опирается не только на качество вычислительных методов, но и на качество иерархической системы моделей, как стохастических, так и детерминистических, лежащих в основе вычислительных экспериментов.

Методы исследования. В качестве основного аппарата решения поставленных в диссертационной работе задач были использованы аналитические и численные методы теории случайных процессов, стохастических дифференциальных уравнений, функционального анализа, кинетической теории, в частности, математической теории уравнения Больцмана, молекулярной газовой динамики, теории разностных схем и методов частиц, а также вычислительные эксперименты с помощью программных средств.

Научная новизна, основные результаты. В диссертации впервые получены следующие основные результаты:

1. Построена система нелинейных стохастических дифференциальных уравнений для случайного процесса, описывающего движение молекулы газа из твердых сфер в фазовом пространстве, из которой вытекает уравнение Больцмана как уравнение для плотности генерируемого этим случайным процессом вероятностной меры. Правая часть уравнения для скорости является стохастическим интегралом по пуассоновской мере. Воспроизведение реализаций этого процесса представляет собой основу методов Монте – Карло численного моделирования поведения разреженного газа. Тем самым, во – первых, эта модель является исходной для дальнейшего построения иерархии моделей по числу Кнудсена и, во – вторых, представляет собой математическое основание широко используемых в промышленной практике вычислительных методов.
2. Сделан переход к системе стохастических дифференциальных уравнений по винеровской мере при умеренных числах Кнудсена. Эта модель служит основой построения стохастического метода частиц. Предложено уравнение типа уравнения Колмогорова – Фоккера – Планка в фазовом пространстве, которое решается как с помощью разностных методов, так и с помощью детерминированного несглаживающего метода частиц. Для газа из твердых сфер аналитически вычислены коэффициенты, входящие в построенное уравнение Колмогорова – Фоккера – Планка, что приводит к значительно более простым моделям для описания переходных режимов в газовой динамике на мезо – уровне. Такая модель является математически обоснованной альтернативой

для широко используемых эвристических БГК – моделей и, в частности, lattice Boltzmann моделей. И главное для настоящей работы, она позволяет продвинуться дальше в сторону уменьшения числа Кнудсена.

3. На пути дальнейшего упрощения математических моделей в результате пространственно – временного усреднения получена система уравнений стохастической квазигазодинамики в вероятностном и детерминистическом видах, альтернативная по отношению как к другим квазигазодинамическим системам, так и к системе уравнений Навье – Стокса, непосредственно связанная с порождающими ее микроскопическими моделями и не требующая уравнений состояния для своего замыкания. Входящие в нее малые члены позволяют по – новому организовать и традиционные разностные методы, и методы частиц.
4. С целью преодоления вычислительных трудностей, характерных для задач рассматриваемого типа, построен и апробован новый бездиссипативный энтропийно – согласованный метод частиц, который, во – первых, размазывает разрыв на одну ячейку, что говорит о его точности (очень малой диссипативности), и, во – вторых, регуляризует исходную задачу подобно "энтропийному" условию. Сочетание гибкости методов частиц и набора моделей, как стохастических, так и детерминированных, позволяет в рамках одного класса вычислительных методов строить адаптирующиеся к особенностям решения алгоритмы, сквозные по отношению к микро – макро – описаниям физических явлений, обладающие повышенной точностью численного воспроизведения разрывных решений, экономичные для многомерных задач, легко распараллеливаемые в силу принципа их кон-

струирования и поэтому широко применимые. На примерах различных задач газовой динамики, обладающих разрывными решениями, и динамики несжимаемой жидкости, в которых именно несжимаемость порождает вычислительную сингулярность, исследованы две модификации метода — явная и основанная на методе суммарной аппроксимации, или расщепления.

Достоверность результатов диссертации. Достоверность теоретических результатов обеспечивается использованием апробованного математического аппарата, проведением аналитического и компьютерного тестирования. Практические результаты, полученные в работе, подтверждены проведенным анализом результатов расчетов для модельных систем.

Практическое значение полученных результатов. Работа носит фундаментально – прикладной характер. Ее результаты могут быть использованы как в дальнейших исследованиях по математическому моделированию больших сложных систем, таких как газ и плазма, так и для решения широкого круга практических задач, связанных с различного рода процессами переноса и диффузии, возникающих и в гидроаэродинамике, и в физике плазмы, и в геологии, и в биологии, и в экономике, и в социологии.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на:

Международной конференции по научному компьютерингу в химической промышленности – Scientific Computing in der chemischen Verfahrenstechnik, (Hamburg, Germany, 1995 г.);

IV Европейском Конгрессе по вычислительным методам в прикладных науках и технике – IV European Congress on

Computational Methods in Applied Sciences and Engineering – ECCOMAS 2004 (Jyvaskyla, Finland, 2004 г.);

VI Международном Конгрессе по математическому моделированию, (Н. Новгород, 2004 г.);

Международной конференции "Современные проблемы вычислительной математики и математической физики" памяти академика Александра Андреевича Самарского, (Москва, 16 - 18 июня 2009 г.);

I Международной конференции по методам частиц – Particles 2009 – International Conference on Particle – Based Methods (Barcelona, Spain, 2009 г.);

V Международной конференции по вычислительной гидродинамике – V European Conference on Computational Fluid Dynamics ECCOMAS CFD 2010 (Lisbon, Portugal, 14-17 June 2010 г.);

V Международной Конференции "Математические идеи П.Л.Чебышева и их приложение к проблемам естествознания"(Обнинск, 14-18 мая 2011 г.);

научно – исследовательских семинарах кафедр автоматизации научных исследований, вычислительных методов, математической статистики, лаборатории математического моделирования в физике факультета ВМК МГУ имени М.В. Ломоносова, кафедры вычислительной математики механико – математического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, кафедр информатики и физической механики Московского физико-технического института, семинарах в Вычислительном центре имени А.А. Дородницына РАН, межвузовском семинаре "семи профессоров" , на семинаре Института механики МГУ "Актуальные проблемы геометрии и механики" имени профессора В. В. Трофимова, Ломоносовских чтениях, на семинаре Arbeitsgruppe Technomathematik TU Kaiserslautern, на семинаре

Института физики токамаков "Теория магнитного удержания плазмы" под руководством академика РАН В.Д. Шафранова, на семинаре под руководством А.А. Рухадзе в ИОФ РАН.

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 30 печатных работах. Из них 21 статья опубликована в журналах, входящих в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий ВАК РФ.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Общий объем работы — 278 страниц. Список литературы включает 307 наименования.

Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность темы диссертации, ставятся цели диссертационного исследования, а также кратко излагается содержание диссертации по главам.

Первая глава диссертации представляет собой краткое и упрощенное описание как рассматриваемой проблематики, так и основных этапов построения иерархии стохастических газодинамических моделей.

Первый параграф **главы 1** посвящен постановке задачи в традиционном виде как набора моделей на языке детерминированных функции распределения в фазовом пространстве и макроскопических газодинамических параметров в физическом пространстве.

Точность и эффективность вычислительных алгоритмов газовой динамики могут быть улучшены с помощью построения

иерархии математических моделей, основанных на микро – макро представлениях.

Микро – мезо – макро детерминистические модели.

В основу обычно кладут уравнение *Больцмана*

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}} = \frac{1}{Kn} Q(F, F)$$

с параметром Kn , зависящем от пространственной переменной x и времени t . При современных высоких требованиях к качеству вычислительных технологий вся область, в которой производится расчет, разбивается на подобласти, обладающие различными значениями числа Кнудсена. Если Kn – порядка единицы, то это – подобласть, требующая использования уравнения Больцмана. В тех областях, где Kn умеренно мал, можно воспользоваться уравнением типа уравнения *Колмогорова – Фоккера – Планка*

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}} + \frac{1}{Kn} \frac{\partial(\mathbf{a}(F)F)}{\partial \mathbf{v}} = \frac{1}{Kn} \frac{1}{2} \frac{\partial^2(\sigma^2(F)F)}{\partial \mathbf{v}^2}$$

в котором коэффициенты (вектор \mathbf{a} и матрица σ^2) определяются столкновительной моделью и при некоторых упрощающих предположениях могут быть вычислены в явном виде [5, 19, 25]. Это – нелинейное уравнение относительно семимерной функции распределения в фазовом пространстве, как и уравнение Больцмана, но с более простой структурой: вместо интеграла столкновений стоит оператор переноса с диффузией в пространстве скоростей, который можно называть модельным интегралом столкновений.

В диапазоне умеренных чисел Kn можно получить и макроскопическое описание – уравнения стохастической квазигазодинамики [24, 26, 27, 29]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho V}{\partial x} &= \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(Kn \frac{\overline{D^2}}{\gamma^2} \rho \right), \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho V) + \frac{\partial}{\partial x} (V \rho V) &= -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\overline{D^2}}{\gamma} \rho \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(Kn \frac{\overline{D^2}}{\gamma^2} \rho V \right), \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x} (V \rho E) &= -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\overline{D^2}}{\gamma} \rho V \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(Kn \frac{\overline{D^2}}{\gamma^2} \rho E \right).\end{aligned}$$

Здесь для простоты они написаны в одномерном виде и в случае, когда предполагается следующая связь с коэффициентами, входящими в приведенное выше уравнение Колмогорова – Фоккера – Планка, (для наглядности, в размерном виде)

$$a(\cdot) \equiv \gamma(x, t), \quad \sigma(\cdot) \equiv D(x, t), \quad D^2/\gamma = RT,$$

$$\rho E \equiv \frac{\rho V^2}{2} + \frac{1}{2} \rho RT.$$

Кстати сказать, для сопоставления с традиционными макро – уравнениями можно обозначить

$$\frac{\overline{D^2}}{\gamma} \rho \equiv p, \quad Kn \frac{\overline{D^2}}{\gamma^2} \rho \equiv \frac{\mu}{\rho_{loc}} \rho, \quad Kn \frac{\overline{D^2}}{\gamma^2} \rho E \equiv \frac{\kappa}{\rho_{loc}} \rho E;$$

черта означает усреднение.

Для очень малых Kn эти уравнения примыкают к уравнениям Навье – Стокса.

Во втором параграфе главы 1 приведенный микро – макро мостик, записанный на языке детерминистических уравнений, строится с помощью теории случайных процессов, что мы сейчас схематично опишем. При этом возникают стохастические модели, связанные с упомянутыми детерминистическими, но им не идентичные.

Стохастические модели и их связь с детерминистическими.

Микро.

Мы рассматриваем уравнение Больцмана как уравнение для плотности вероятности случайного процесса $\{x_1(t), v_1(t)\}$, описывающего движение некоторой частицы (этим объясняется использование индекса "1") в шестимерном фазовом пространстве и удовлетворяющего системе стохастических дифференциальных уравнений:

$$dx_1(t) = v_1(t)dt, \quad (1)$$

$$dv_1(t) = \int \int \int f(\theta, x_1(t), v_1(t), x, v)p(d\theta \times dx \times dv \times dt),$$

где f — функция скачка, p — пуассоновская случайная мера с математическим ожиданием:

$$\mathbf{E}p(d\theta \times dx \times dv \times dt) = \frac{1}{Kn}m(d\theta)\lambda_t(dx, dv)dt,$$

$m(d\theta)$ — заданная функция, определяющая столкновительную модель, $\lambda_t(dx, dv)$ — мера, порождаемая процессом $\{x_1(t), v_1(t)\}$, что относит рассматриваемую задачу к классу нелинейных марковских систем. Параметр Kn возникает при обезразмеривании задачи:

$$Kn(x, t) = 1/(d^2n_{loc}(x, t)x_*).$$

Его физический смысл — отношение локальной средней длины свободного пробега (в качестве которой с точностью до константы $\sqrt{2}\pi/4 \approx 1,11$ можно взять $1/d^2n_{loc}(x, t)$, d — диаметр молекул, $n(x, t)$ — их числовая плотность) к характерному размеру задачи x_* .

Введем центрированную меру

$$q(d\theta \times dx \times dv \times dt) = p(d\theta \times dx \times dv \times dt) - \frac{1}{Kn}m(d\theta)\lambda_t(dx, dv)dt,$$

и представим

$$\int \int \int f(\theta, x_1(s), (s), x, v) m(d\theta) \lambda_s(dx, dv) \equiv -a(|c|)c,$$

где $c = v_1 - V$ – тепловая скорость, а $a(\cdot)$ – в нашем случае, функция. Такое представление появляется естественным образом, например, для газа из твердых сфер; оператор в левой части при упрощающих предположениях о виде меры $\lambda_s(dx, dv)$ становится скалярной функцией модуля тепловой скорости в результате того, что удастся вычислить этот, вообще говоря, восьмикратный интеграл, о чем будет более подробно сказано в четвертом параграфе главы 3.

Тогда получим второе уравнение системы (1):

$$dv_1(t) = -\frac{1}{Kn} a(|c|)(v_1 - V)dt + \\ + \int \int \int f(\theta, x_1(s), v_1(s), x, v) q(d\theta \times dx \times dv \times ds).$$

Мезо.

Преобразуем его согласно А.В. Скороходу:

$$\frac{a}{Kn} v_1 dt = \frac{a}{Kn} V dt + \\ + \int \int \int f(\theta, x_1(s), v_1(s), x, v) q(d\theta \times dx \times dv \times ds) - dv_1,$$

или, с учетом первого уравнения нашей системы,

$$dx_1(t) = V dt + \\ + a^{-1} Kn \int \int \int f(\theta, x_1(s), v_1(s), x, v) q(d\theta \times dx \times dv \times ds) \\ - a^{-1} Kn dv_1,$$

что представляет собой сокращенную запись выражения:

$$x_1(t + \Delta t) = x_1(t) + \int_t^{t+\Delta t} V dt +$$

$$+ \int_t^{t+\Delta t} a^{-1}Kn \int \int \int f(\theta, x_1(s), v_1(s), x, v)q(d\theta \times dx \times dv \times ds) \\ - \int_t^{t+\Delta t} a^{-1}Kndv_1.$$

В рассматриваемой ситуации параметр Kn является малым, поэтому, в контексте центральной предельной теоремы, предположим, что случайную величину

$$\int_t^{t+\Delta t} a^{-1}Kn \int \int \int f(\theta, x_1(s), v_1(s), x, v)q(d\theta \times dx \times dv \times ds)$$

можно приблизить величиной

$$a^{-1}Kn\left(\frac{1}{Kn}\sigma^2(t)\right)^{1/2} \cdot \Delta w(t),$$

где $\Delta w(t)$ — приращение стандартного трехмерного винеровского процесса, а матрица

$$\sigma^2(s) \equiv \int \int \int f^2(\theta, x_1(s), v_1(s), x, v)m(d\theta)\lambda_s(dx, dv).$$

Предполагая, что последний член в уравнении для $x_1(t)$ является величиной более высокого порядка малости по Δt , чем предыдущие члены, учитывать его не будем. Таким образом, мы приходим к системе:

$$\begin{aligned} dx_1(t) &= V(\cdot)dt + a^{-1}(\cdot)\sqrt{Kn}\sigma(\cdot)dw(t), \\ dv_1(t) &= -\frac{1}{Kn}a(\cdot)(v_1(t) - V(\cdot))dt + \frac{1}{\sqrt{Kn}}\sigma(\cdot)dw(t), \end{aligned} \quad (2)$$

где матрица σ является квадратным корнем из матрицы σ^2 : $\sigma = (\sigma^2)^{1/2}$, а стохастические дифференциалы понимаются в смысле Ито.

Процесс $\{x_1(t), v_1(t)\}$ порождает меру, плотность F которой удовлетворяет уравнению Колмогорова – Фоккера – Планка:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial(V_i F)}{\partial x_i} - \frac{1}{Kn} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial(a_i(F)(v_i - V_i)F)}{\partial v_i} \\
& = \frac{1}{Kn} \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial^2(\sigma_{ij}^2(F)F)}{\partial v_i \partial v_j} \\
& + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \left[\frac{\partial^2(a^{-1}\sqrt{Kn}\sigma)_{ij}^2 F}{\partial x_i \partial x_j} + 2 \frac{\partial^2(a^{-1}\sigma)_{ij}\sigma_{ji} F}{\partial x_i \partial v_j} \right],
\end{aligned}$$

где дополнительные два члена в правой части малы по Kn по сравнению с первым.

Макро.

Рассмотрим простейший пример системы (2):

$$a(\cdot) = \text{const}(x, t) \equiv \gamma, \quad \sigma(\cdot) = \text{const}(x, t) \equiv D.$$

Обратный оператор a^{-1} превращается в оператор умножения на величину $1/\gamma$; γ и матрица D зависят от x и t . Такой выбор коэффициентов часто используется, например, в контексте модельного интеграла столкновений в форме Фоккера – Планка. Кроме того, для модели газа из твердых сфер это представление имеет место для малых тепловых скоростей. Выражение для этих коэффициентов можно также получить на основе термодинамических соображений и флуктуационно – диссипационной теоремы Эйнштейна.

Представим схему вывода уравнений стохастической квази-газодинамики для этого набора коэффициентов.

Это означает, что нам надо построить уравнение для мер μ_t, ν_t, ϵ_t , которые порождаются случайными процессами $x_1(t)$ и $v_1(t)$. Физический смысл этих мер — эволюция распределений массы, импульса и энергии.

Определим стохастическую эмпирическую меру $\mu_t(dx)$ соотношением: для любой функции $\psi \in C_b^{(2)}(\mathbf{R}^3)$ (пространству дважды непрерывно дифференцируемых финитных функций)

$$\int \psi(x) \mu_t(dx) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \psi(x_i(t)). \quad (3)$$

Тогда по формуле Ито

$$d\psi = \frac{\partial \psi}{\partial x} dx + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} (dx)^2,$$

где стохастический дифференциал dx берется из системы (2)

$$\begin{aligned} dx &= V dt + \sqrt{Kn} \frac{D}{\gamma} dw, \\ (dx)^2 &= Kn \frac{D^2}{\gamma^2} dt, \end{aligned}$$

получим:

$$\begin{aligned} & d \int \psi(x) \mu_t(dx) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left\{ \left[\frac{\partial \psi}{\partial x}(x_i(t)) V(x_i(t)) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x_i(t)) \left(\sqrt{Kn} \frac{D}{\gamma} \right)^2 \right] dt \right. \\ & \quad \left. + \frac{\partial \psi}{\partial x}(x_i(t)) \sqrt{Kn} \frac{D}{\gamma} dw(t) \right\}, \end{aligned}$$

ИЛИ

$$\begin{aligned} d \int \psi(x) \mu_t(dx) &= \int \left\{ \left[V(x, t) \frac{\partial \psi}{\partial x}(x) + \frac{1}{2} Kn \frac{D^2}{\gamma^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x) \right] dt \right. \\ & \quad \left. + \sqrt{Kn} \frac{D}{\gamma} \frac{\partial \psi}{\partial x}(x) dw(t) \right\} \mu_t(dx). \end{aligned}$$

Предположив наличие плотности $\rho(x, t)$ у стохастической эмпирической меры $\mu_t(dx)$, получим стохастическое уравнение неразрывности в виде:

$$d\rho = \left[-\frac{\partial \rho V}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(Kn \frac{D^2}{\gamma^2} \rho \right) \right] dt - \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\sqrt{Kn} \frac{D}{\gamma} \rho \right) \right] dw,$$

а взяв математическое ожидание — детерминированное уравнение неразрывности для детерминированной плотности $\rho(x, t)$:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho V}{\partial x} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (Kn \frac{D^2}{\gamma^2} \rho),$$

справедливое для малых чисел Кнудсена. Присутствие правой части отражает "след", оставляемый тепловым движением молекул, или диффузию.

Аналогично, для импульса определим векторную меру $\nu_t(dx)$:

$$\int \psi(x) \nu_t(dx) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N v(x_i(t)) \psi(x_i(t)),$$

а для энергии — скалярную меру $\epsilon_t(dx)$:

$$\int \psi(x) \epsilon_t(dx) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{v^2}{2}(x_i(t)) \psi(x_i(t)),$$

рассматривая процесс $v_1(t)$, являющийся решением системы (2), как функцию от $x_1(t)$.

Используя стохастическую формулы дифференцирования произведения

$$\begin{aligned} d(v\psi) &= \psi dv + v d\psi + dv d\psi, \\ d\left(\frac{v^2}{2}\psi\right) &= \psi d\left(\frac{v^2}{2}\right) + \frac{v^2}{2} d\psi + d\left(\frac{v^2}{2}\right) d\psi, \\ d\left(\frac{v^2}{2}\right) &= v dv + \frac{1}{2}(dv)^2, \end{aligned}$$

систему (2)

$$\frac{1}{2}(dv)^2 = \frac{1}{2} \frac{D^2}{Kn} dt$$

и формулу Ито, где стохастические дифференциалы dx и dv берутся из системы (2)

$$\begin{aligned} dx &= V dt + \sqrt{Kn} \frac{D}{\gamma} dw, \\ dv &= -\frac{\gamma}{Kn}(v - V) dt + \frac{D}{\sqrt{Kn}} dw \end{aligned}$$

и

$$dv dv \psi = \frac{D^2}{\gamma} \frac{\partial \psi}{\partial x} dt,$$

$$d\left(\frac{v^2}{2}\psi\right) = \psi v dv + \frac{v^2}{2} d\psi + v dv dv \psi + \psi \frac{1}{2} \frac{D^2}{Kn} dt,$$

получим уравнение для мер $\nu_t(dx)$ и $\epsilon_t(dx)$. Обозначив через $\rho V(x, t)$ плотность меры $\nu_t(dx)$ и через $\rho E(x, t)$ плотность меры $\epsilon_t(dx)$, придем сначала к стохастическим дифференциальным уравнениям движения и энергии, а затем, взяв математическое ожидание, получим детерминированные квазигазодинамические уравнения для плотностей импульса и энергии:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho V) + \frac{\partial}{\partial x}(V \rho V) = -\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{D^2}{\gamma} \rho\right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(Kn \frac{D^2}{\gamma^2} \rho V\right),$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \frac{\partial}{\partial x}(V \rho E) = -\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{D^2}{\gamma} \rho V\right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(Kn \overline{\frac{D^2}{\gamma^2}} \rho E\right),$$

если числа Кнудсена малы.

Для идеального газа в силу флуктуационно – диссипационной теоремы $D^2/2\gamma = T$, и можно обозначить величину $\rho D^2/\gamma$ через p , придав ей физический смысл давления в соответствии с уравнением состояния идеального газа. Кроме того, при выводе уравнения для энергии мы воспользовались определением полной энергии (в одномерном случае)

$$\rho E = \frac{\rho V^2}{2} + \frac{1}{2} \rho RT.$$

Таким образом, получается целый спектр как детерминированных, так и стохастических, моделей газа (в частности, газа из твердых сфер). Все они порождают свои собственные

вычислительные методы.

Вторая глава посвящена рассмотрению исходной для нашего исследования модели газа (1), молекулы которого представляются абсолютно упругими шариками, является простейшей, но не тривиальной, то – есть, основные математические проблемы адекватного описания такой большой системы частиц в ней содержатся. Людвиг Больцман выводил свое уравнение, опираясь на этот образ и начиная с детерминированной системы, вводя случайность на этапе принятия гипотезы молекулярного хаоса – *Stossanzahlansatz*. А.В. Скороход изначально рассматривает системы, состоящие из большого числа случайно взаимодействующих частиц, и исследует поведение таких систем при неограниченном возрастании их числа. Существенным отличием подобных систем от систем, рассматриваемых в статистической физике, является именно случайность взаимодействия, тогда как в статистической физике случайность входит только через начальное положение.

В предположении, что взаимодействия между различными парами частиц независимы, и число взаимодействий на одну частицу в единицу времени остается ограниченным, можно исследовать предельное поведение системы при неограниченном возрастании числа частиц. Уравнения движения такой системы в отсутствие (для ясности изложения) внешних полей и сил "дальнодействия" будут стохастическими дифференциальными уравнениями вида

$$\begin{aligned} dx_i(t) &= v_i(t)dt, \\ dv_i(t) &= \sum_{j=1}^n \int f(\theta, x_i(t), v_i(t), x_j, v_j) p_{ij}^{(n)}(d\theta \times dt), \end{aligned} \quad (4)$$

где x_i и v_i являются векторами положения и скорости i – той

частицы в фазовом пространстве $R^3 \times R^3$ (для краткости обозначим его через Z , а пару $(x_i(t), v_i(t))$ – через $z_i(t)$), интеграл по стохастической пуассоновской мере $p_{ij}^{(n)}$ на $\Theta \times [0, \infty)$ (Θ – поверхность единичной сферы) представляет собой импульсную случайную силу взаимодействия, которая меняет состояние частиц скачкообразно (скачком меняются импульсы взаимодействующих частиц), а именно, скорость i – той частицы в результате столкновения с j – той частицей изменяется на величину $f(\theta, x_i(t), v_i(t), x_j, v_j)$, и функция f называется функцией скачка. Решение уравнения $(x_1(t), v_1(t), \dots, x_n(t), v_n(t))$ будет марковским процессом. Уравнение Колмогорова для распределения процесса (прямое уравнение) играет роль уравнения Лиувилля. Введем “статистическую” функцию распределения:

$$\mu_t^{(n)}(A) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \chi_A(x_i(t), v_i(t))$$

(χ_A – индикатор борелевского множества A нашего фазового пространства) и изучим предельное поведение этой случайной меры при $n \rightarrow \infty$.

Пусть

$$\mathbf{E}p_{ij}^{(n)}(d\theta \times dt) = \frac{1}{n} m(d\theta) dt,$$

где m – конечная мера на Θ (ее конкретный вид мы установим позднее). Тогда в предположении некоторой гладкости коэффициентов уравнения справедливы следующие утверждения 1) и 2).

1) Мера $\mu_t^{(n)}(A)$ слабо сходится к некоторой неслучайной мере $\lambda_t(A)$, для которой выполнено уравнение

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int \phi(z) \lambda_t(dz) &= \int \left(\frac{\partial}{\partial x} \phi(z), v \right) \lambda_t(dz) \\ &+ \int \int \int [\phi(z + f(\theta, z, z')) - \phi(z)] m(d\theta) \lambda_t(dz') \lambda_t(dz), \end{aligned}$$

которое можно рассматривать как обобщенное уравнение Больцмана, что конкретизируется в первом параграфе главы 2.

Во втором параграфе главы 2 изучается предельное поведение отдельной частицы в фазовом пространстве на основании утверждения

2) Пусть начальные значения функций $z_1^{(n)}(t), \dots, z_k^{(n)}(t)$ (это решение системы уравнений (4) при данном n) сходятся к $z_1^{(n)}(0), \dots, z_k^{(n)}(0)$. Тогда совместное распределение процессов $(z_1^{(n)}(t), \dots, z_k^{(n)}(t))$ при $n \rightarrow \infty$ сходится к совместному распределению k независимых процессов $(z_1(t), \dots, z_k(t))$, каждый из которых является марковским процессом, удовлетворяющим системе стохастических дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} dx_i(t) &= v_i(t)dt, & (5) \\ dv_i(t) &= \int f(\theta, x_i(t), v_i(t), x', v') \hat{p}(d\theta \times dx' \times dv' \times dt), \end{aligned}$$

где \hat{p} – пуассоновская мера на $\Theta \times Z \times [0, \infty)$, для которой

$$\mathbf{E} \hat{p}(d\theta \times dz \times dt) = m(d\theta) \lambda_t(dz) dt.$$

Отсюда, в частности, вытекает, что частичные функции распределения являются в пределе произведениями одночастичных функций распределения.

Если в уравнении (5) формально положить

$\theta = \xi, \xi \in \Xi, \Theta = \Xi$ – единичная сфера,

$\xi = \{\cos \epsilon \sin \alpha, \sin \epsilon \sin \alpha, \cos \alpha\}$,

$m(d\theta) = d^2 |v' - v| |\cos \alpha| \sin \alpha d\alpha d\epsilon$, d – диаметр молекул,

$0 < \alpha < \pi, 0 < \epsilon < 2\pi$ – углы локальной сферической системы

координат, ось z которой совпадает с вектором $v' - v$,

а функцию скачка взять в виде $f(\cdot) = \xi(v - v', \xi)$,

(\cdot, \cdot) – скалярное произведение,

то уравнении (5) превратится в обобщенное уравнение Больцмана для газа из твердых сфер. Условия доказанных А.В. Скороходом теорем при таком выборе f и m оказываются не выполненными и требуют дальнейшего развития, которое проводится в книге А.А. Арсеньева "Лекции о кинетических уравнениях".

Итак, нашей базовой моделью является система стохастических дифференциальных уравнений (1) для случайного процесса $\{x_1(t), v_1(t)\}$, описывающего движение частицы в шестимерном фазовом пространстве.

В **третьей главе** с помощью схемы, изложенной в главе 1, но в ее более подробной многомерной версии, в подобластях с умеренными числами Кнудсена делается переход от системы (1) к системе (2), вернее, к ее более точной модификации. Полученная в предыдущем разделе модель (1) основана на представлении о редких столкновениях между частицами, что математически выражается использованием меры Пуассона для ее формулировки. Поэтому можно сказать, что она применима для описания разреженного газа, или в тех областях, где число Кнудсена $Kn(x, t)$ – порядка единицы, где существенны сильно неравновесные эффекты и где не обойтись без численного решения уравнения Больцмана. Это отдельная отрасль вычислительной газовой динамики. Нас интересует вопрос о том, как трансформируется эта модель при уменьшении числа Кнудсена. Основная гипотеза состоит в том, что с уменьшением числа Кнудсена, а значит, ростом интенсивности пуассоновской меры, скачкообразный обобщенный пуассоновский процесс – решение нашей системы (1) – приближается к диффузионному процессу, коэффициенты которого выражаются через коэффициенты исходного уравнения.

В первом параграфе главы 3 мы получаем систему

$$\begin{aligned}
dx_1(t) &= V dt + \sqrt{Kn} \left[a^{-1}(c) (\sigma(c) - \sigma(0)) \right] dw(t), \\
dv_1(t) &= -\frac{1}{Kn} a(c) (v(t) - V) dt + \frac{1}{\sqrt{Kn}} \sigma(c) dw(t),
\end{aligned} \tag{6}$$

$$\int \int \int f(\theta, x_1(s), v_1(s), \tilde{x}, \tilde{v}) m(d\theta) \lambda_s(d\tilde{x}, d\tilde{v}) \equiv -a(|c|)c,$$

$$\sigma^2(c)(s) \equiv \int \int \int f^2(\theta, x_1(s), v_1(s), \tilde{x}, \tilde{v}) m(d\theta) \lambda_s(d\tilde{x}, d\tilde{v}).$$

где матрица $\sigma = (\sigma^2)^{1/2}$, а стохастические дифференциалы понимаются в смысле Ито. Обозначим:

$$\tilde{\sigma} \equiv \sigma(c) - \sigma(0).$$

Эта система отличается от более грубой системы (2) присутствием в правой части первого уравнения для $x_1(t)$ величины $\sigma(0)$.

Во втором параграфе главы 3 с помощью формулы Ито мы показываем, что случайный процесс $\{x_1(t), v_1(t)\}$, являющийся решением системы (6), порождает меру $\lambda_t(dx, dv)$, плотность $F(x, v, t)$ которой удовлетворяет уравнению типа уравнения Колмогорова – Фоккера – Планка (мы сохраняем то же обозначение для меры, хотя теперь эта мера порождается диффузионным, а не пуассоновским, процессом, но по – прежнему, протекающим в фазовом пространстве):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial V_i F}{\partial x_i} - \frac{1}{Kn} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial (a_i(F)(v_i - V_i) F)}{\partial v_i} \\
= \frac{1}{Kn} \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial^2 (\sigma_{ij}^2(F) F)}{\partial v_i \partial v_j} \\
+ \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \left[\frac{\partial^2 (a^{-1} \sqrt{Kn} \tilde{\sigma})_{ij}^2 F}{\partial x_i \partial x_j} + 2 \frac{\partial^2 (a^{-1} \tilde{\sigma})_{ij} \sigma_{ji} F}{\partial x_i \partial v_j} \right],
\end{aligned}$$

где дополнительные два слагаемых в правой части малы по Kn по сравнению с первым.

В третьем параграфе главы 3 мы рассматриваем вопрос о консервативности, а именно, выполнение законов сохранения массы, импульса и энергии как моментов функции распределения $F(x, v, t)$, удовлетворяющей полученному в предыдущем параграфе уравнению *Колмогорова – Фоккера – Планка*.

В четвертом параграфе главы 3 вычисляются коэффициенты в правой части уравнения *Колмогорова – Фоккера – Планка*, которые можно называть вектором "сноса" \mathbf{a} и матрицей "диффузии" σ^2 в пространстве скоростей, в приближении, когда при их вычислении для газа из твердых сфер делается упрощение в виде локальной максвелловости и изотропности по тепловой скорости \mathbf{c} функции распределения F внутри соответствующих пятикратных интегралов. Эти коэффициенты получаются в следующем виде:

$$\mathbf{a}(\mathbf{c}) = -\frac{\mathbf{c}}{c} n' T'^{1/2} \frac{\sqrt{\pi}}{4} \left[\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(c) \left(2c^2 + 2 - \frac{1}{2c^2} \right) + e^{-c^2} \left(2c + \frac{1}{c} \right) \right], \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{11}^2(c) &= n' T'^{3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{4} [P(c) + c_1^2 S(c)], \\ \sigma_{12}^2(c) &= n' T'^{3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{4} c_1 c_2 S(c), \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} P(c) &= \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(c) \left(\frac{c^3}{3} + \frac{3}{2}c + \frac{3}{4c} - \frac{1}{8c^3} \right) + e^{-c^2} \left(\frac{c^2}{3} + \frac{4}{3} + \frac{1}{4c^2} \right), \\ S(c) &= \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(c) \left(c + \frac{3}{2c} - \frac{3}{4c^3} + \frac{3}{8c^5} \right) + e^{-c^2} \left(1 + \frac{1}{c^2} - \frac{3}{4c^4} \right); \end{aligned}$$

остальные элементы ковариационной матрицы $\sigma^2(F)$ выглядят аналогично приведенным. σ^2 зависит от F , потому что \mathbf{c} зависит

от F . В выражениях для \mathbf{a} и σ^2 обозначено: $c \equiv c'/\sqrt{T'}$, где n' , c' и T' — безразмерные числовая плотность, тепловая скорость и температура,

$$\operatorname{erf}(\beta) \equiv 2/\sqrt{\pi} \int_0^\beta e^{-\gamma^2} d\gamma.$$

Глава 4 посвящена проблеме перехода из фазового пространства положений и скоростей в физическое пространство, или от кинетических уравнений к уравнениям газовой динамики, или от микро (мезо) – к макро – описаниям. Схема этого перехода содержится в главе 1 и приведена выше.

В первом параграфе главы 4 мы получаем, применяя формулу Ито, уравнение неразрывности с самодиффузией, которое является следствием обобщенного уравнения для стохастической эмпирической меры $\mu_t(dx)$ (3) и стохастического в частных производных уравнения неразрывности, как схематично это было сделано выше.

Второй и третий параграфы главы 4 посвящены получению трехмерных уравнений эволюции импульса и энергии, а также их плотностей, стохастических и детерминированных.

В четвертом параграфе главы 4 мы выписываем полученную стохастическую квазигазодинамическую систему в декартовых координатах в развернутом виде:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \rho + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho V_j) = \\ & = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \left(Kn \left(\frac{\widetilde{D^2}}{\gamma^2} \right)_{ij} \rho \right), \\ & \frac{\partial}{\partial t} (\rho V_i) + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} (V_j \rho V_i) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\left(\frac{D^2}{\gamma} \right)_{ij}} \rho \right) + \frac{1}{2} \sum_{k,j=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_j} \left(Kn \overline{\left(\frac{D^2}{\gamma^2} \right)_{kj}} \rho V_i \right), \\
& \hspace{15em} (i = 1, 2, 3), \quad (9) \\
& \frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} (V_j \rho E) = \\
& - \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\left(\frac{D^2}{\gamma} \right)_{ij}} \rho V_i \right) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \left(Kn \overline{\left(\frac{D^2}{\gamma^2} \right)_{ij}} \rho E \right)
\end{aligned}$$

и делаем упрощающие замечания относительно коэффициентов $\overline{\left(\frac{D^2}{\gamma} \right)_{ij}}$ и $\overline{\left(\frac{D^2}{\gamma^2} \right)_{ij}}$ (с использованием результатов (7), (8) четвертого параграфа главы 3), что позволяет в наиболее простом случае записать (обезразмеренную) стохастическую квазигазодинамическую систему (9) следующим образом:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \rho + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho V_j) = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 (\mu / \rho_{loc}) \rho}{\partial x_j^2}, \\
& \frac{\partial}{\partial t} (\rho V_i) + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} (V_j \rho V_i) = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 ((\mu / \rho_{loc}) \rho V_i)}{\partial x_j^2}, \quad (10) \\
& \hspace{15em} (i = 1, 2, 3), \\
& \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} (V_j \rho E) = \\
& - \sum_{j=1}^3 \frac{\partial (p V_j)}{\partial x_j} + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 ((\kappa / \rho_{loc}) \rho E)}{\partial x_j^2}.
\end{aligned}$$

Присутствие малого диффузионного члена в правой части уравнения неразрывности является математическим следствием исходной вероятностной модели и использования стандартных методов стохастического анализа, в частности, формулы Ито. С точки зрения физики, этот член отражает сглаживание градиента плотности за счет теплового движения молекул — фундаментального свойства, присущего газовой среде. Если

в газе провести виртуальную границу между соседними областями, обладающими различными термодинамическими свойствами, и мысленно "раскрасить" в разные цвета молекулы, в них находящиеся, то процесс диффузии станет совершенно очевидным. В теории диффузионных процессов имеется теорема о возможности бесконечно долгого пребывания траектории на границе.

Полученная стохастическая квазигазодинамическая система (9) или (10) отличается от системы уравнений Навье – Стокса не только по способу построения, но и по своей структуре.

Мы провели некоторые вычислительные эксперименты с помощью достаточно простых и хорошо известных разностных методов, чтобы продемонстрировать связь стохастической квазигазодинамики с распространенными моделями и показать возможность использования в газодинамических расчетах иерархии моделей (1), (6), (9), о чем мы сообщаем в пятом параграфе главы 4. Приведенные примеры расчетов тестовых задач показывают, что уравнения стохастической квазигазодинамики (10), рассматриваемые в данной работе, могут служить моделью динамики вязкого газа и основой вычислительных алгоритмов. Двумерное течение в каверне демонстрирует количественное совпадение решения с эталоном. Структура фронта одномерной ударной волны проявляет качественное соответствие физической картине. Поскольку коэффициенты в уравнениях (10) взяты в первом приближении, и новая макроскопическая модель не претендует на описание процессов с числом Кнудсена, близким к единице, результат следует считать весьма хорошим.

Глава 5 посвящена развитию вычислительного инструментария для рассматриваемых задач [6, 8, 21]. Методы частиц явля-

ются ведущими в численном моделировании явлений, описываемых кинетическими уравнениями. Что же касается макроскопических уравнений, прежде всего уравнений газовой динамики, методы частиц, которые изначально были изобретены именно для газовой динамики, сталкиваются с проблемой искусственных флуктуаций, характерных для задач гиперболического типа. Как правило, такие задачи, в следствие их многомерности и нелинейности, предъявляют повышенные требования к применяемым вычислительным методам, что особенно остро проявляется последнее время в связи с супервычислениями, когда обилие и подробность получаемых результатов ставят вопросы о наличии и величине содержащихся в них артефактов.

В первом параграфе главы 5 детерминированный метод частиц выделяется из других вычислительных методов (конечно - разностного и конечных элементов) по способу дискретизации искомой функции, метод частиц строится для уравнения переноса, для которого он является наиболее естественным и поэтому продуктивным, приводятся основные факты по его обоснованию, дается понятие о стохастических (по пуассоновской и винеровской мерам) методах частиц, дается классификация методов частиц по способам получения правых частей в системе уравнений движения частиц и предлагается новый энтропийно - согласованный бездиссипативный метод частиц, который, во - первых, размывает разрыв на одну ячейку, что говорит о его точности, очень малой диссипативности, и, во - вторых, регуляризует исходную задачу подобно "энтропийному" условию. С алгоритмической точки зрения, метод отличается малым числом обменов после этапа сдвига частиц и большим числом независимых операций при перестройках частиц на этапе коррекции, что естественным образом делает его особенно привлекательным для распараллеливания.

Суть метода частиц поясним на простейшем примере линейного уравнения переноса. Она состоит в том, что исходный (в данном случае детерминированный) процесс, N реализаций которого являются решением системы

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = a(t, x_i(t)), \quad (11)$$

порождает меру с плотностью $u(x, t)$ по формуле

$$\forall \varphi : \int u(x, t) \varphi(x) dx = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \varphi(x_i(t)), \quad (12)$$

или

$$u(x, t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i(t)), \quad (13)$$

дифференцируя которую с использованием правила дифференцирования сложной функции (или формулы Ито в стохастическом случае)

$$\frac{\partial}{\partial t} \varphi(x_i(t)) = \varphi'(x_i) \frac{dx_i(t)}{dt} = \varphi'(x_i) a(t, x_i(t)),$$

и формулы (12), где вместо φ берется φ' ,

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \varphi'(x_i) a(t, x_i(t)) = \int a(t, x) u(x, t) \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} dx,$$

мы приходим к обобщенному

$$\frac{\partial}{\partial t} \int u(x, t) \varphi(x) dx - \int a(t, x) u(x, t) \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} dx = 0, \quad (14)$$

а затем (после интегрирования по частям) дифференциальному

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial (a(t, x) u(x, t))}{\partial x} = 0, \quad (15)$$

уравнению переноса.

Таким образом, если координаты частиц (или узлы квадратурной формулы (12)) изменяются в соответствии с (11), верным оказывается уравнение (14). Решая систему обыкновенных дифференциальных уравнений (11), мы получаем слабое решение уравнения переноса.

Во втором параграфе главы 5 предложенный метод частиц развивается применительно к системе уравнений, откуда появляется альтернатива использования либо явного метода, либо метода суммарной аппроксимации (или расщепления). Рассматривается система уравнений газовой динамики без вязкости – уравнений Эйлера, так как проблема моделирования разрывных решений возникает для такой задачи, а малая естественная вязкость этой проблемы не снимает.

Дальнейшее продвижение метода дается в третьем параграфе главы 5 и состоит в решении двумерных задач, а также задач несжимаемой жидкости, в которых возникают дополнительные трудности, связанные с несжимаемостью.

Все вопросы построения и исследования методов частиц решаются на основе созданного программного комплекса, возможности которого демонстрируются результатами тестирования программ и сравнения с другими известными методами и эталонными решениями.

В **Заключении** приведены основные результаты, выносимые на защиту.

Основные публикации по теме диссертации

- [1] *С.В. Богомоллов*. О сходимости метода суммарной аппроксимации для системы уравнений Власова. // Дифференц. уравнения, 1981, т.17, No. 3, с. 510 – 518.

- [2] *С.В. Богомолов.* Сходимость метода суммарной аппроксимации для уравнения Больцмана. // Журнал вычисл. матем. и матем. физики, 1988, т.28, No.1, с. 119 – 126.
- [3] *С.В. Богомолов.* Флуктуация метода частиц для уравнения Власова. // Журнал вычисл. матем. и матем. физики, 1988, т.28, No. 2, с. 290 – 292.
- [4] *С.В. Богомолов, В.А.Лебедев.* Сходимость разностной схемы Эйлера решения системы стохастических дифференциальных уравнений метода частиц для уравнения Больцмана. // Журнал вычисл. матем. и матем. физики, 1988, т. 28, No. 8, с. 1264 – 1267.
- [5] *С.В. Богомолов.* Стохастическая модель гидродинамики. // Математическое моделирование, 1990, т. 2, No.11, с. 85 – 88.
- [6] *С.В. Богомолов.* Метод частиц для уравнения Бюргерса. // Математическое моделирование, 1991, т. 3, No.12, с. 115 – 119.
- [7] *S. V. Bogomolov.* Stochastic Model of Hydro Dynamics. // Mathematical models and computer simulations, 1993, v.1, No.2, p. 113 – 117.
- [8] *С.В. Богомолов.* Метод частиц с весами для уравнения Бюргерса // Математическое моделирование, 1994, т.6, No.5, с. 77 – 81.
- [9] *S.V. Bogomolov.* MikroSIM: A Toolbox for Dynamical Processes Simulation. – Proc. Scient. Comp. in der chemisch. Verfahrenstechnik, Hamburg, 1995.
- [10] *С.В. Богомолов, А.А. Замаева, Х.Карабелли, К.В. Кузнецов.* Консервативный метод частиц для квазилинейного

- уравнения переноса. // Журнал вычисл. матем. и матем. физики, 1998, т.38, No.9, с. 1602 – 1610.
- [11] *С.В. Богомолов, К. В. Гаврилюк, С. И. Мухин.* Течение газа в трубопроводах при наличие стока. // Математическое моделирование, 1998, т.10, No.10, с. 8 – 18.
- [12] *С.В. Богомолов, К.В. Кузнецов.* Метод частиц для системы уравнений газовой динамики. // Математическое моделирование, 1998, т.10, No.7, с. 93 – 100.
- [13] *С.В.Богомолов, Д.Н.Михайлов.* Численные расчеты распространения сейсмических волн на основе нелинейной вязкоупругой модели. // Физика Земли, 1999, No.3, с. 18 – 24.
- [14] *С.В. Богомолов.* Повышение точности метода расщепления для уравнения Больцмана. // Математическое моделирование, 1999, т.11, No.10, с. 100 – 105.
- [15] *Ya. V. Kudryavtsev, A.D. Litmanovich, A.G. Makeev, S.V. Bogomolov.* Macromolecular reaction and interdiffusion in a compatible polymer blend. The role of H – bonding. //Macromol. Theory Simul., 1999, v.8, p. 161 – 171.
- [16] *С.В.Богомолов, Е.В.Захаров, С.В.Зеркаль.* Моделирование волн на мелкой воде методом частиц. // Математическое моделирование, 2002, т.14, No.3, с.103 – 116.
- [17] *С.В.Богомолов.* Метод частиц. Несжимаемая жидкость. // Математическое моделирование, 2003, т.15, No.1, с. 46 – 58.
- [18] *С.В.Зеркаль, Е.В.Захаров, С.В. Богомолов.* Моделирование движения потоков различной природы по наклонной поверхности методом частиц. // Вісник Харківського національного університету. Серія "Матем. моделюв.. Інформ.

- техн.. Автомат. системи управління. 2003, No. 590, с. 114 – 123.
- [19] *С.В. Богомолов.* Уравнение Фоккера – Планка для газа при умеренных числах Кнудсена. // Математическое моделирование, 2003, т.15, No.4, с. 16 – 22.
- [20] *S. V. Bogomolov.* An Entropy Consistent Particle Method for Navier-Stokes Equations. *Proc. IV European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering - ECCOMAS 2004*, Jyvaskyla, Finland.
- [21] *С.В.Богомолов.* К обоснованию несглаживающего метода частиц.// Математическое моделирование, 2004, т. 16, No. 7, с. 92 – 101.
- [22] *С.В.Богомолов.* Non – Smoothing Entropy Consistent Particle Method. VI Международный конгресс по математическому моделированию, Н. Новгород, 2004.
- [23] *С.В.Богомолов, Д.С. Звенков.* Явный метод частиц, несглаживающий газодинамические разрывы. // Математическое моделирование, 2007, т. 19, No. 3, с. 74 – 86.
- [24] *С.В. Богомолов.* Об одном подходе к получению стохастических моделей газодинамики.//ДАН, 2008, т. 423, No. 4, с. 458 – 461. *S. V. Bogomolov.* An Approach to Deriving Stochastic Gas Dynamics Models, *Doklady Mathematics*, **78**, 2008, p. 929 – 931.
- [25] *С.В. Богомолов.* О модели Фоккера – Планка для интеграла столкновений Больцмана при умеренных числах Кнудсена. // Математическое моделирование, 2009, т.21, No. 1, с. 111 – 117.

- [26] *С.В. Богомолов*. Уравнения квазигазодинамики. // Математическое моделирование, 2009, т.21, No. 12, с. 145 – 151.
- [27] *С.В.Богомолов*. Стохастические модели газовой динамики. Международная научная конференция "Современные проблемы вычислительной математики и математической физики" памяти академика Александра Андреевича Самарского, Москва, 16 - 18 июня 2009.
- [28] *S. V. Bogomolov*. Stochastic Models of Gas Dynamics and Particle Methods. – Proc. Particles 2009 - International Conference on Particle-Based Methods, E. Oñate and D.R.J. Owen (Eds), CIMNE, Barcelona, 2009.
- [29] *S. V. Bogomolov*. Stochastic Quasi Gas Dynamics Equations as a Base for Particle Methods. – Proc. V European Conference on Computational Fluid Dynamics ECCOMAS CFD 2010, J. C. F. Pereira and A. Sequeira (Eds), Lisbon, Portugal, 14-17 June 2010.
- [30] *С.В.Богомолов, Л.В. Дородницын*. Уравнения стохастической квазигазодинамики. Случай вязкого газа.// Математическое моделирование, 2010, т.22, No. 12, с. 49 – 64.