

**МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. Ломоносова**

Факультет Вычислительной Математики и Кибернетики

На правах рукописи

Гудич Игорь Григорьевич

**ИССЛЕДОВАНИЕ
ОДНОЙ СТОХАСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ГАЗА
ПРИ УМЕРЕННЫХ ЧИСЛАХ КНУДСЕНА**

Специальность 05.13.18 — математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва 2015

Диссертационная работа выполнена на кафедре вычислительных методов факультета вычислительной математики и кибернетики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования "Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова".

Научный руководитель:

Богомолов Сергей Владимирович

доктор физико-математических наук, профессор кафедры вычислительных методов факультета вычислительной математики и кибернетики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования "Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова".

Официальные оппоненты:

Галкин Валерий Алексеевич

доктор физико-математических наук, профессор, директор политехнического института СурГУ.

Мартыненко Сергей Иванович

доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник ФГУП "Центральный институт авиационного моторостроения имени П.И. Баранова".

Ведущая организация:

Государственный научный центр федеральное государственное унитарное предприятие "Центральный аэрогидродинамический институт имени профессора Н.Е. Жуковского".

Защита диссертации состоится "23" сентября 2015 года в 15 час. 30 мин. на заседании диссертационного совета Д 501.001.43 при ФГБОУ ВПО "Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова" по адресу: 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, МГУ имени М. В. Ломоносова, д. 1, стр. 52, 2-й учебный корпус, факультет вычислительной математики и кибернетики, ауд. 685.

Желающие присутствовать на заседании диссертационного совета должны сообщить об этом за 2 дня по тел.: (495) 939-30-10 (для оформления заявки на пропуск).

С диссертацией и авторефератом можно ознакомиться в Научной библиотеке ФГБОУ ВПО "Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова" а также на официальном сайте факультета вычислительной математики и кибернетики МГУ им. М. В. Ломоносова: <http://cs.msu.ru> в разделе «Диссертации».

Автореферат разослан __ 2015 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета Д 501.001.43
доктор физико-математических наук,
профессор

Е. В. Захаров

Общая характеристика работы

Актуальность тематики

Многие современные научные и инженерные задачи в таких областях как исследование космоса, вакуумные технологии, разработка и проектирование микро-электро-механических систем требуют рассмотрения течений на всех уровнях от микро- до макро-масштаба. Состояние дел таково, что имеющиеся на рынке дорогостоящие пакеты прикладных программ такие, как FLUENT, OpenFOAM или ANSYS, несмотря на их огромные возможности, позволяющие использовать миллионы точек сетки, ее адаптацию к расчетной области, изощренный сервис для пользователя, тем не менее не справляются в полном объеме с задачами, которые необходимы инженерам для оптимизации конструируемых изделий. Требуется все большая точность вычислений, все большее количественное совпадение результатов расчетов с экспериментальными данными, что достигается с помощью как повышения точности существующих апробированных вычислительных методов, так и перехода к иерархическим, гибридным, многомасштабным (multiscale), многосеточным (multigrid) методам [9, 13, 21, 20, 18, 14, 19, 17]. Эта тематика является ведущей во всех журнал по прикладной математике. К слову, SIAM (Society for Industrial and Applied Mathematics) выпускает новый междисциплинарный журнал Multiscale Modeling and Simulation, посвященный такого сорта проблемам.

Рассматриваемая проблематика возникает теоретически в любой задаче, решаемой численно. Никакой мощности компьютеров не хватит, чтобы решать задачи только на микроуровне. Этого и не нужно: многие процессы вполне достаточно изучать в их макроскопических проявлениях. С другой стороны, становится все более понятно, что в задачах, решаемых на макроуровне часто присутствуют области, в которых нельзя обойтись без микро-скопического описания. 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.

Режим течения характеризуется числом Кнудсена (Kn), физический смысл которого - отношение длины свободного пробега молекулы к характерному размеру рассматриваемой задачи. Этой характеристикой и определяется правомерность использования той или иной математической модели для описания газа (или жидкости). Глобально выделяют три режима, соот-

ветствующих разным диапазонам изменения числа Кнудсена: приближение сплошной среды ($Kn < 0.01$), переходный режим ($0.01 < Kn < 10$), для которого диапазон чисел Kn может быть разбит на 2 части: $0.01 < Kn < 0.1$ - модели типа уравнения Колмогорова – Фоккера – Планка, $0.1 < Kn < 10$ - уравнение Больцмана, свободномолекулярное течение ($Kn > 10$). Нас будет интересовать в первую очередь режим при Kn от 0.01 до 0.1, который соответствует газу не находящемуся в термодинамическом равновесии.

Рассматриваемое нами направление математического моделирования возникло и развивается в ответ на потребность создания оптимальных средств математического моделирования явлений, связанных с движением большого числа микроскопических объектов разной природы. В этой работе мы не случайно акцентируем наше внимание именно на мезо-моделях, они становятся все более и более востребованными в индустрии не только как часть многомасштабных сквозных алгоритмов, необходимых для расчетов в аэрокосмической области или для исследования микро-электро-механических систем, но и сами по себе, например, в области микрофлюидики, которая применяется при создании различного рода химических анализаторов. Для такого рода задач микроскопические модели становятся слишком дорогими с точки зрения вычислительной сложности, а модели сплошной среды не позволяют вылавливать "тонкие" эффекты неравновесного газа, становящиеся существенными при числах Кнудсена, порядка 0,1. На VI Европейском Конгрессе по вычислительным методам в прикладных науках и технике ECCOMAS 2012 была выделена отдельная секция для обсуждения такого рода моделей и методов, там автором был сделан доклад.

Математическое моделирование в наши дни невозможно себе представить без использования вычислительных кластеров, которые могут обладать различными архитектурами и отличаться друг от друга по многим параметрам, таким как организация памяти, топология и мощность вычислительных элементов. Как отмечает в своих докладах Джек Донгарра [11], в последние годы основной тенденцией в конструировании суперкомпьютеров становится использование ускорителей, которые призваны увеличить производительность каждого вычислительного узла. Существует несколько технологий, способных решать такую задачу. На сегодняшний день ClearSpeed и IBM Cell уступают место Xeon Phi и различного рода видеоускорителям (GPU) (здесь безусловным лидером является компания NVidia). Нужно отметить, что использование GPU для вычислений не является простой задачей и требует разработки специальных алгоритмов, также, не любая вычислительная проблема может быть эффективно рас-

параллелена для архитектуры SIMD (single instruction multiple data), которая подразумевает одновременное выполнение одинаковых команд для множества однородных данных. Тем не менее, данная технология успешно применяется во многих областях вычислительной математики. Одной из таких областей служит стохастическое моделирование или моделирование методами Монте - Карло [8]

Целью диссертационной работы является верификация одной стохастической мезо - модели газа для умеренных чисел Кнудсена с упрощенными коэффициентами на основе вычислительного эксперимента, что требует создания алгоритма для решения системы стохастических дифференциальных уравнений, описывающих нашу диффузионную в пространстве скоростей модель при вычислении интегралов, возникающих в определении этих коэффициентов.

Для достижения этой цели были решены следующие **задачи**:

1. Получены аналитические выражения упрощенных коэффициентов модели в предположении о локальной максвелловости в пространстве скоростей при вычислении интегралов, возникающих в определении этих коэффициентов.
2. Впервые получено уравнение Больцмана с интегралом столкновений в форме Колмогорова - Фоккера - Планка (КФП) в сферической системе координат для пространственно - однородной задачи о релаксации газа из твердых сфер.
3. Численно решена стационарная задача о пространственно - однородной релаксации.
4. Получено стационарное решение в задаче о пространственно - однородной релаксации.
5. Численно решена задача о пространственно - однородной релаксации для трехмерного случайного процесса в декартовых координатах.
6. Построен и реализован консервативный алгоритм численного решения нелинейной трехмерной задачи о пространственно - однородной релаксации с использованием архитектуры CUDA.
7. Численно решена задача о пространственно - однородной релаксации с коэффициентами исходной модели (без упрощений).

Научная новизна и практическая ценность:

Для рассматриваемой стохастической модели газа при умеренных числах Кнудсена впервые сформулирована и исследована задача о пространственно-однородной релаксации. Кроме того, методами вычислительного эксперимента показана близость модели с упрощенными коэффициентами и нелинейной диффузионной в пространстве скоростей модели газа из твердых сфер для умеренных чисел Кнудсена.

Достоверность и обоснованность полученных результатов гарантируется строгостью используемого математического аппарата и подтверждается как сравнением между собой результатов, полученных различными методами, так и сравнением с модельными расчетами других авторов.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Вывод упрощенных коэффициентов для стохастической модели газа при умеренных числах Кнудсена.
2. Численное исследование задачи о пространственно - однородной релаксации для стохастических моделей газа.
3. Построение и реализация консервативного метода частиц для системы стохастических дифференциальных уравнений в пространстве скоростей для нелинейной модели.

Апробация работы

Основные результаты работы докладывались и обсуждались на:

1. 28 Международной конференции по разреженной газовой динамике – Rarified Gas Dynamics 28 , (Saragosa, Spain, 2012 г.);
2. VI Европейском Конгрессе по вычислительным методам в прикладных науках и технике – VI European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering – ECCOMAS 2012 (Viena, Austria, 2012 г.);
3. Конференции "Ломоносовские чтения"(Москва, 2012, 2013 г.г.);
4. Конференции "Тихоновские чтения"(Москва, 2013, 2014 г.г.)
5. Международная конференция "Математика и информационные технологии в нефтегазовом комплексе"(Сургут, 2014 г.)

6. Современные проблемы вычислительной математики и математической физики: Международная конференция памяти А.А. Самарского (Москва, 2014 г.)
7. Научно – исследовательских семинарах кафедр математической статистики, вычислительных методов факультета ВМК МГУ имени М.В. Ломоносова, кафедры математики физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, кафедры механики композитов механико – математического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, на семинаре ИПМ им. М. В. Келдыша под руководством Е. Н. Аристовой.

Личный вклад.

Все исследования, изложенные в диссертационной работе, проведены лично соискателем в процессе научной деятельности. Весь заимствованный материал обозначен в работе соответствующими ссылками.

Публикации

Основные результаты диссертации опубликованы в 2 статьях в рецензируемых журналах перечня ВАК и еще 5 печатных работах.

Структура и объем работы.

Состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 89 страницах. Список литературы включает 88 наименований.

Содержание работы

Во **введении** приведена краткая история проблемы моделирования течений газа, описана общепринятая методика построения соответствующих моделей, в зависимости от пространственных масштабов, рассмотрены и обсуждены основные классы вычислительных методов, применяемых для решения возникающих задач.

В **первой главе** кратко описана стохастическая модель газа, как набор реализаций случайного процесса в фазовом пространстве, являющаяся базовой для данной работы. Подчеркнуто, что коэффициенты в уравнениях, описывающих эту модель, сложны для вычислений, т.к. представляют собой многомерные интегралы в фазовом пространстве координат -

скоростей. Далее приведен вывод упрощенных коэффициентов. Упрощение заключается в том, что для вычисления этих интегралов распределение молекул газа по скоростям предполагается максвелловским. Это позволяет записать их в виде аналитических выражений, содержащих функции ошибок (*erf*).

Мы рассматриваем модель [4], справедливую при умеренных Kn , которая является переходной между молекулярным описанием и представлением о газе, как о сплошной среде. Она основана на системе стохастических дифференциальных уравнений (СДУ) по винеровской мере $dw(t)$, описывающей движение частицы ($x(t)$ - ее координата, $v(t)$ - скорость) в фазовом пространстве при умеренно малых Kn :

$$\begin{aligned} dx(t) &= Vdt + \sqrt{Kn}[a^{-1}(c)\tilde{\sigma}]dw(t), \\ dv(t) &= -\frac{1}{Kn}a(c)(v(t) - V)dt + \frac{1}{\sqrt{Kn}}\sigma(c)dw(t), \end{aligned} \quad (1)$$

где $c \equiv |v(t) - V|$ - модуль тепловой скорости, $V(x, t)$ - макроскопическая скорость, $\tilde{\sigma} = \sigma(c) - \sigma(0)$, а коэффициенты, вектор $\mathbf{a}(c) = a(c)\mathbf{c}$ ($\mathbf{c} \equiv v(t) - V$ - тепловая скорость) и матрица $\sigma(c)$, будут определены ниже (3), (4).

Реализации этого процесса (набор траекторий) порождают эмпирическую меру $\tilde{\lambda}_t(x, v, t)$, которая при стремлении количества траекторий к бесконечности сходится к мере $\lambda_t(x, v, t)$, плотность F которой удовлетворяет уравнению типа уравнения Колмогорова – Фоккера – Планка в фазовом пространстве:

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

Коэффициенты этих уравнений представляют собой восьмикратные интегралы:

$$\begin{aligned}
& \mathbf{a}(x_1(t), v_1(t), t) \equiv \\
& \int \int \int \mathbf{f}(\theta, x_1(s), v_1(s), x, v) m(d\theta) F dx dv, \\
& \mathbf{a} \equiv a(c) \mathbf{c}
\end{aligned} \tag{3}$$

$$\begin{aligned}
& \sigma^2(x_1(t), v_1(t), t) \equiv \\
& \int \int \int f^2(\theta, x_1(s), v_1(s), x, v) m(d\theta) F dx dv.
\end{aligned} \tag{4}$$

Здесь $\mathbf{f}$ - функция скачка (приращение скорости одной молекулы в результате столкновения с другой), θ - прицельный параметр, m - интенсивность случайного процесса, v, v_1 - векторы скорости, x, x_1 - координаты.

В [4] предполагается аппроксимировать уравнение Больцмана при умеренных числах Кнудсена уравнением Колмогорова – Фоккера – Планка (2). Это уравнение (точнее, его главная часть без последних двух членов) давно известно [10], [15], [3] как эвристическое (без какого-либо математического обоснования) модельное уравнение Больцмана с интегралом столкновений в форме Фоккера – Планка.

С вычислительной точки зрения модель (2), (1) довольно сложна. Ее можно значительно упростить для конкретного примера газа из твердых сфер, сделав при этом еще существенное предположение о том, что коэффициенты a (вектор сноса) и σ (ковариационную матрицу) можно вычислять, беря под интегралами в выражениях (3), (4) в качестве плотности меры $\lambda_t(dx, dv)$ локальный максвеллиан. Эти коэффициенты в уравнениях (1), (2) получаются в следующем виде:

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}(|\mathbf{c}|) = & -\frac{\mathbf{c}}{|\mathbf{c}|} n' T'^{1/2} \frac{\sqrt{\pi}}{4} [\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(|c|) (2|c|^2 + 2 - \frac{1}{2|c|^2}) \\
& + e^{-|c|^2} (2|c| + \frac{1}{|c|})],
\end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{ii}^2(|c|) &= n'T'^{3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{4} [P(|c|) + |c|_i^2 S(|c|)], \\
\sigma_{ij}^2(|c|) &= n'T'^{3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{4} c_i c_j S(|c|), \\
P(c) &= \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(|c|) \left(\frac{c^3}{3} + \frac{3}{2}|c| + \frac{3}{4|c|} - \frac{1}{8|c|^3} \right) + e^{-|c|^2} \left(\frac{|c|^2}{3} + \frac{4}{3} + \frac{1}{4|c|^2} \right), \\
S(|c|) &= \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(|c|) \left(|c| + \frac{3}{2|c|} - \frac{3}{4|c|^3} + \frac{3}{8|c|^5} \right) + e^{-|c|^2} \left(1 + \frac{1}{|c|^2} - \frac{3}{4|c|^4} \right);
\end{aligned}$$

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

Во **второй главе** исследуется задача о пространственно-однородной релаксации в пространстве скоростей в предположении о сферической симметрии функции распределения, что приводит к сферически симметричной постановке для уравнения Колмогорова – Фоккера – Планка с упрощенными коэффициентами. Был сделан переход в сферическую систему координат, что позволило свести исходные уравнения для трех переменных к одномерному уравнению, где значение плотности распределения в точке зависит только от переменной r , расстояния от этой точки до начала координат, или с физической точки зрения от модуля "тепловой скорости" молекулы. В первую очередь нас интересовал вид стационарного решения полученной задачи. Явным методом Эйлера найден стационар, также построена консервативная разностная схема для линейной нестационарной задачи, проведен вычислительный эксперимент (счет на установление) на неравномерной сетке [5], исследована сходимость решения.

Мы получили в явном виде упрощенные коэффициенты для диффузионной модели газа при умеренных числах Kn . Но открытым остается вопрос о применимости полученных результатов, т.е. о том, насколько сильно отличается такая модель от исходной (без упрощения коэффициентов).

Самым сложным местом в решении уравнения Больцмана или модельных уравнений является аппроксимация столкновительного оператора, поэтому для тестирования и верификации моделей и методов часто используют пространственно-однородную задачу о релаксации. По сути она является простейшим тестом для нашей модели. Решение этой задачи обсуждается в работах [7, 21, 6] .

Мы можем рассматривать нашу модель либо как систему стохастиче-

ских дифференциальных уравнений, либо детерминистически, как уравнение Колмогорова – Фоккера – Планка. Для поставленной задачи поиска стационарного решения в задаче о релаксации в пространстве скоростей второе представление оказывается более удобным, т.к. сферическая симметрия позволяет свести задачу к одномерной, и для уравнения в частных производных, в отличие от стохастических уравнений, есть возможность рассматривать стационарную задачу, а не проводить счет на установление.

Рассматриваемое уравнение:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial(\mathbf{a}(c)F(c))}{\partial v_i} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial^2(\sigma^2(c)F(c))}{\partial v_i \partial v_j}, \quad (6)$$

где вектор $\mathbf{a}$ и матрица σ^2 выписаны в (5), в сферической системе координат будет выглядеть следующим образом:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial(r^3 a F)}{\partial r} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2(r^4 S F)}{\partial r^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial(PF)}{\partial r} \right) \right) \right) = 0 \quad (7)$$

В данной постановке отсутствует множитель $\frac{1}{Kn}$, который просто линейно внесен в переменную t .

Нас интересует стационарное решение, поэтому рассмотрим задачу Коши:

$$\begin{cases} F'(r) = \lambda(r)F(r); \\ F(0) = const. \end{cases} \quad (8)$$

$$\lambda \equiv \frac{2ar^3 - r^2 \frac{\partial P}{\partial r} - 4r^3 S - 2r^4 \frac{\partial S}{\partial r}}{P + r^4 S}$$

А также рассмотрим нестационарную задачу для начального распределения в форме "горба" отнесенного от начала координат:

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial(r^3 a F)}{\partial r} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2(r^4 S F)}{\partial r^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial(PF)}{\partial r} \right) \right) \right) = 0 \\ F(x, 0) = 0.4 * \exp(-10 * (x - 1)^2); \\ F'(t, 0) = 0; \\ F(t, l) = 0. \end{cases} \quad (9)$$

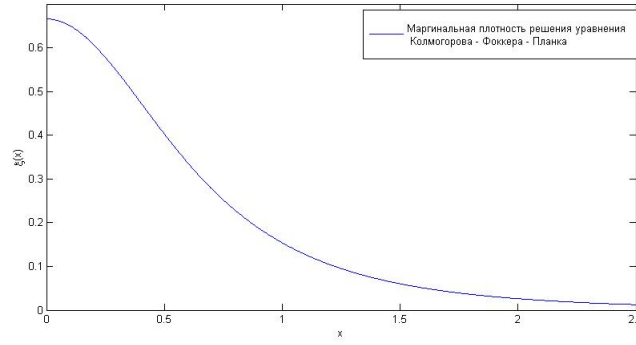


Рис. 1: Стационарное решение

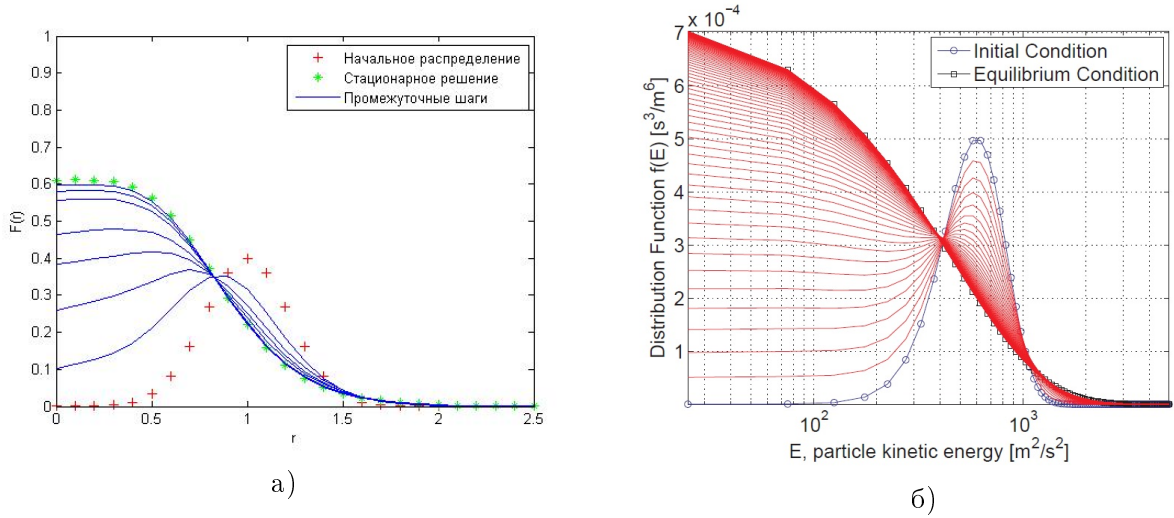


Рис. 2: Эволюция "одногогорбого" начального распределения к стационарному решению а) полученная в расчетах , б) полученная в [7]

Задача с аналогичными начальными данными была рассмотрена Р. Asinagi в [7], где была получена похожая динамика, (рисунок 2).

В **третьей главе** задача с упрощенными коэффициентами решается уже для трех декартовых координат.

Для многомерных расчетов в фазовом пространстве решение системы СДУ является более приемлемым методом, нежели решение уравнения Колмогорова – Фоккера – Планка. Такой подход использован, например, в [16], [12], [1].

В пространственно однородном случае нам необходимо решить только второе уравнение из системы (1), которое, на самом деле, представляет из себя систему уравнений (напомним, что $v(t)$ - трехмерный вектор):

$$dv(t) = -a(v(t))v(t)dt + \sigma(v(t))dw(t). \quad (10)$$

В этой системе отсутствует малый параметр Kn , т.к. он линейно внесен в независимую переменную t . Макроскопическая скорость V , фигурирующая в (1), равна 0. Чтобы решить стохастические дифференциальные уравнения, нам необходимо "разбить" начальную функцию распределения на мелкие частицы или "раскидать" такие частицы так, чтобы они аппроксимировали $F(v, t)$. Тем самым мы получим начальные условия для (10). Каждая частица обладает фазовой "массой". Затем, для каждой из частиц нам необходимо решить несколько стохастических уравнений движения, т.е. построить несколько реализаций случайного процесса, или несколько траекторий в фазовом пространстве, в нашем случае это уравнения (10). Для их решения воспользуемся простейшим (нас интересует лишь качественное отличие линейной и нелинейной задач) методом Эйлера - Маруямы:

$$v(t + \Delta t) = v(t) - a(v(t))\Delta t + \sigma(v(t))\Delta w, \quad (11)$$

где Δw приращение стандартного трехмерного винеровского процесса, т.е. вектор с компонентами - независимыми случайными величинами $\eta = N(0, 1)\sqrt{\Delta t}$, где $N(0, 1)$ - нормально распределенная случайная величина со средним 0 и дисперсией 1:

$$\Delta w = (\eta_1, \eta_2, \eta_3). \quad (12)$$

Для того, чтобы получить значение плотности распределения в некоторой точке, нам необходимо просуммировать "массы" всех частиц, содержащихся в некотором объеме и разделить на величину этого объема.

Для того, чтобы можно было изобразить решение в виде одномерных графиков, мы будем рассматривать решения в терминах маргинальных плотностей $\xi()$ трехмерных функций распределения также, как это сделано в [2]: так как задача изотропна, решение F может быть представлено в виде произведения трех одинаковых плотностей по декартовым координатам:

$$F(v_x, v_y, v_z) = \xi(v_x)\xi(v_y)\xi(v_z). \quad (13)$$

Начнем рассмотрение с линейных коэффициентов (6). Сравним решения задачи о пространственно - однородной релаксации, полученное стохастическим методом (трехмерная задача), точнее, плотность функции распределения, генерируемой этим решением, с решением задачи (8) в сферически - симметричном случае, полученным конечно - разностным методом. Начальные условия возьмем в виде нормального распределения. На рисунке 3 видно, что решения совпадают.

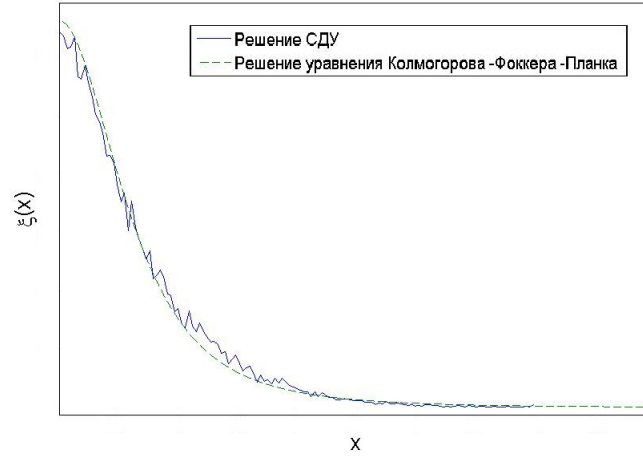


Рис. 3: Стационарные решения сферически - симметричного уравнения КФП и системы СДУ.

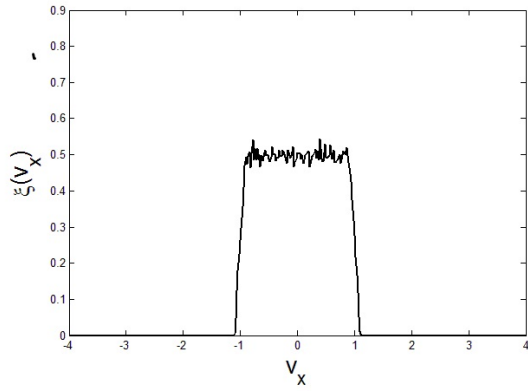
Теперь проследим эволюцию "двугорбого" распределения, зависящего от расстояния до начала координат, подобного описанному в [21], [7], рисунок (4). В трехмерном случае такого рода распределение будет представлять из себя шаровой слой. Для простоты возьмем начальные условия вида:

$$\begin{cases} f_0(v_x, v_y, v_z) = \text{const}, r < \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2} < R \\ f_0(v_x, v_y, v_z) = 0, \text{ в остальной части пространства} \end{cases} \quad (14)$$

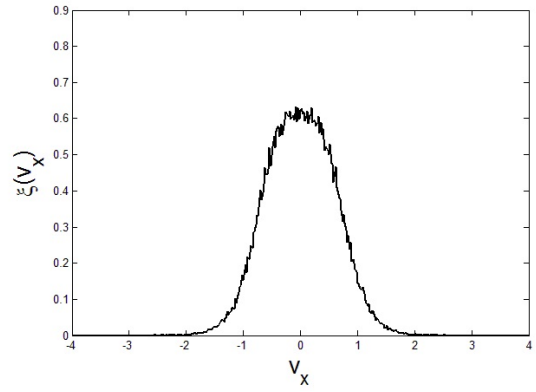
Видно, что решение нашего уравнения сходится к найденному стационару даже в случае более сложных, по сравнению с максвеллианом, начальных условий, что говорит о его независимости от начальных данных.

В последней **четвертой главе** рассмотрена нелинейная задача о пространственно - однородной релаксации как решение системы стохастических дифференциальных уравнений по винеровской мере, с коэффициентами в виде интегралов по плотности распределения.

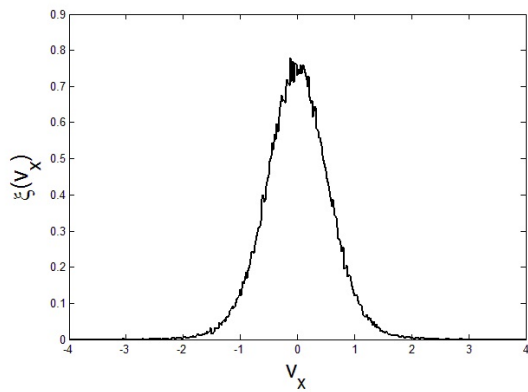
Из предыдущей главы видно, что численное интегрирование стохастических дифференциальных уравнений сводится к генерации множества тра-



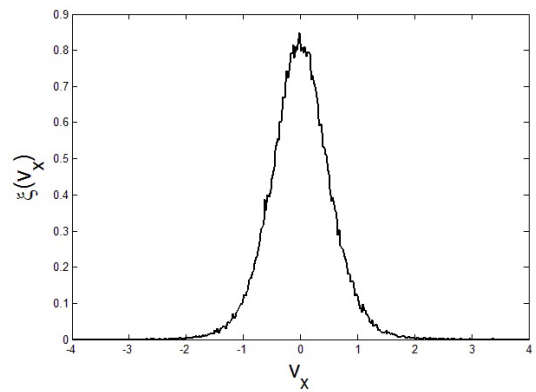
а)



б)



в)



г)

Рис. 4: Эволюция функции распределения с начальными условиями в виде сферического слоя:
а) $t = 0$, б) $t = 0.2$, в) $t = 0.3$, г) $t = 0.5$

екторий в трехмерном пространстве, иными словами мы имеем множество частиц, раскиданных по пространству и образующих выборку, которая аппроксимирует плотность распределения, являющуюся исследуемым объектом, а затем мы сдвигаем эти частицы по определенным правилам в соответствии с коэффициентами уравнений. Такая задача как нельзя лучше ложится на программно - аппаратную архитектуру современных видеокарт, как и многие алгоритмы типа Монте - Карло.

В случае рассматриваемой нелинейной задачи дело осложняется вычислением коэффициентов в уравнениях, которые имеют вид:

$$a(v_1(t), t) = -\frac{\pi}{2} \int_{\mathbf{R}^3} (v_1 - v) |v_1 - v| F dv \quad (15)$$

$$\sigma_{ii}^2(v_1(t), t) = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \int_{\mathbf{R}^3} \left(\frac{1}{3} |v_1 - v|^3 + (v_i - v_{1i})^2 |v_1 - v| \right) F dv. \quad (16)$$

Воспользуемся здесь методом Монте - Карло вычисления интеграла, т.к. мы уже имеем набор точечных масс (N - количество частиц), представляющих функцию распределения на текущем временном слое, и их можно использовать в качестве узлов квадратурной формулы. Тогда:

$$a(v(t), t) \approx -\frac{\pi}{2} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (v - v_j) |v - v_j|,$$

$$\sigma_{ii}^2(v(t), t) \approx \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left(\frac{1}{3} |v - v_j|^3 + (v_i - v_{ji})^2 |v - v_j| \right).$$

Такое суммирование может быть также легко распараллелено для обработки на графической плате. Для этого на k - ом шаге цикла суммирования будем вычислять члены сумм для i -ой и $(i + k) \bmod N$ - ой частиц, как это показано на рисунке 5, и добавлять результат к соответствующей сумме. Всего нам понадобится N шагов цикла.

На рисунке 6 показана сходимость вышеуказанных сумм к аналитическим значениям интегралов с увеличением количества частиц для нормального распределения, z - модуль максимального отклонения от аналитических значений. Эти результаты соответствуют теоретическим оценкам, дающим сходимость порядка $\frac{1}{\sqrt{N}}$.

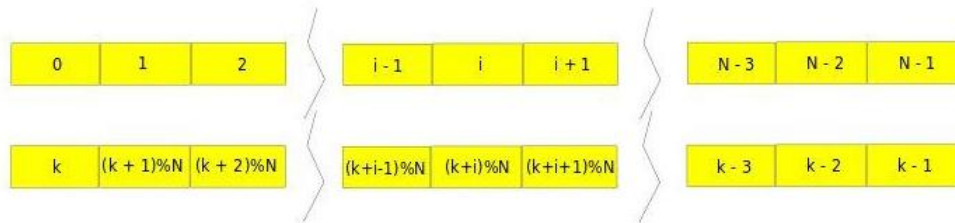


Рис. 5: Схема вычисления сумм для коэффициентов нелинейной задачи, k - ый шаг цикла.

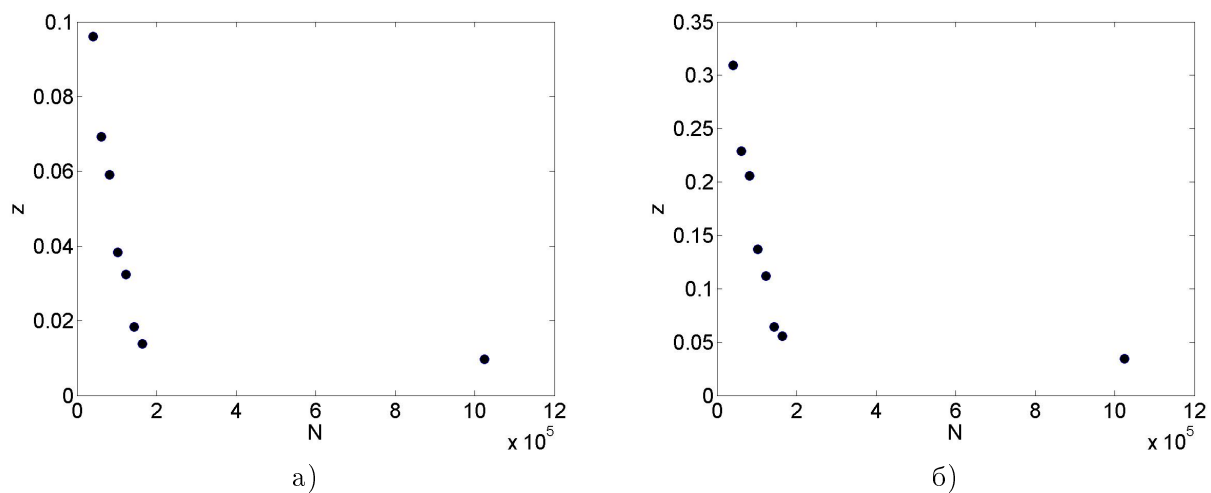


Рис. 6: Зависимость погрешности вычисления коэффициентов методом Монте - Карло от количества точек, моделирующих распределение а) для элементов вектора a (максимальная погрешность z из z_1, z_2, z_3), б) для элементов матрицы σ (максимальная погрешность z из $z_{ij}, i = 1, 2, 3; j = 1, 2, 3$).

В отличие от линейного случая, в случае с нелинейными коэффициентами численно достичь стационара сначала не удавалось. Результатом накопления вычислительной ошибки является так называемый ”стохастический нагрев”, или численная диффузия. Значительно улучшает ситуацию введение этапа коррекции распределения с целью соблюдения закона сохранения энергии, который делает вычислительный метод полностью (не только по массе, что обеспечивается постоянством числа частиц, но и по энергии) консервативным:

$$\begin{aligned} E^k &= \sum_{j=1}^N |v_j^k|^2 \\ \Delta E &= E^{k+1} - E^k, \\ \delta E &= \frac{\Delta E}{N}, \\ \tilde{v}_j^{k+1} &= \sqrt{\frac{|v_j|^2 + \delta E}{|v_j|^2}} v_j^{k+1}, \end{aligned} \quad (17)$$

где E^k - суммарная энергия системы на k -ом шаге по времени, δE - коррекционная добавка к энергии одной частицы, $\tilde{v}_j^{k+1}$ - скорректированная скорость частицы.

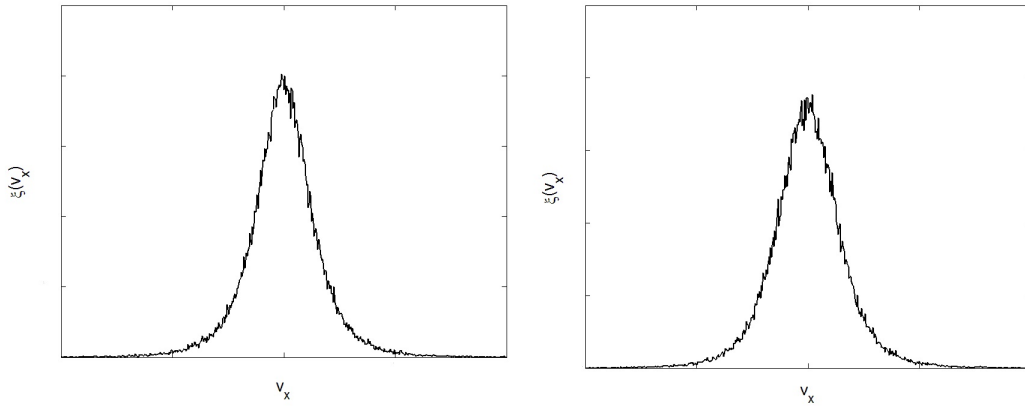


Рис. 7: Стационарные решения СДУ а) линейный случай , б) нелинейный случай.

Из рисунков 7 и 8 видно, что стационарное решение, полученное в линейном случае, близко к решению нелинейного уравнения. Динамика сходимости к стационару в обоих случаях также близка (рисунки 9 и 10). Это позволяет надеяться в задачах, неоднородных по пространству, на хорошие результаты при использовании упрощенных коэффициентов (полученных из предположения о локальной максвеллизации в интегралах), а это, в свою очередь, дает возможность рассчитывать на построение вычислитель-

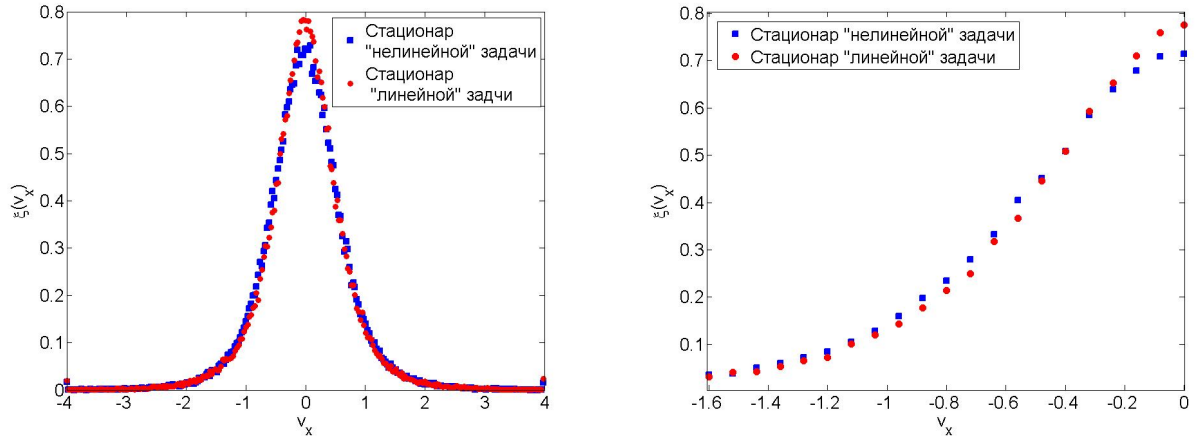


Рис. 8: Сравнение стационарных решений в линейном и нелинейном случаях.

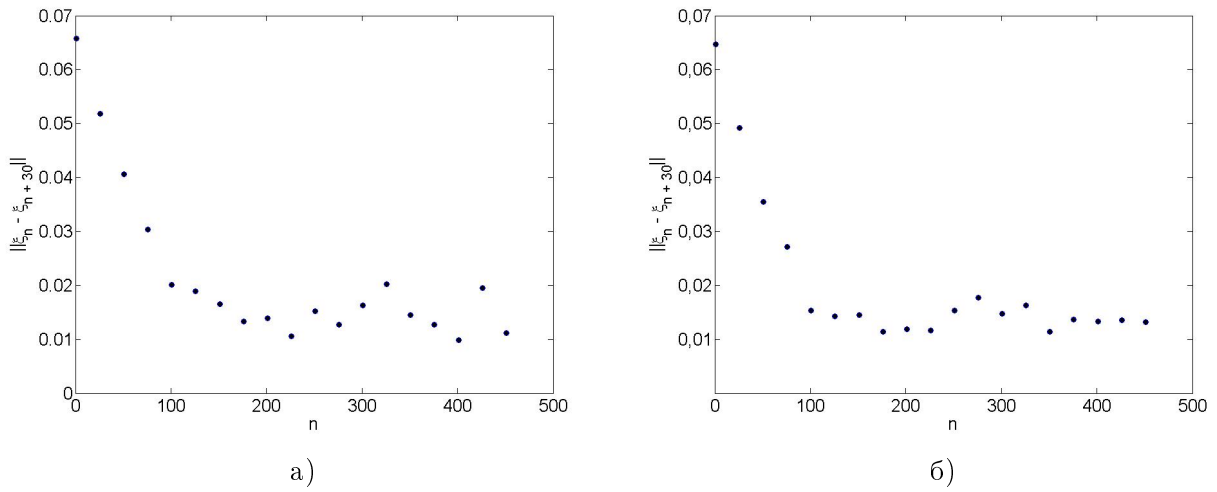


Рис. 9: Сходимость решения к стационарному от начальных данных в форме максвелловского распределения в а) линейном и б) нелинейном случаях, шаг по времени $\Delta t = 0.001$, количество частиц $N = 100000$. $\|\xi_n - \xi_{n+j}\|$ нормированная разность между решениями на n -ом и $n+j$ -ом шагах по времени.

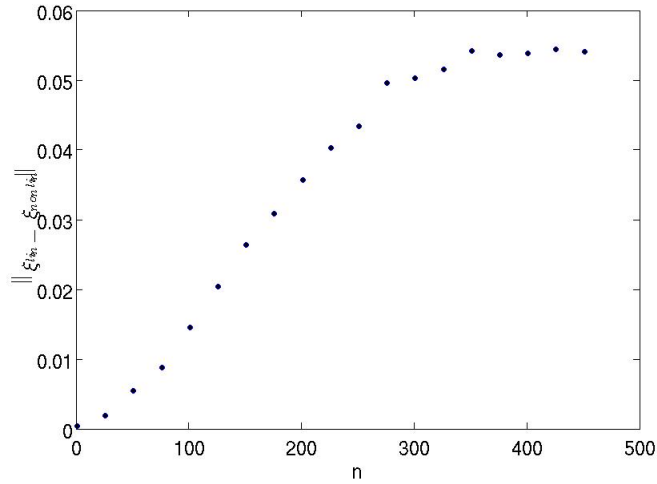


Рис. 10: Различие решений стационарной и нестационарной задач в зависимости от шага по времени. $\|\xi_{lin} - \xi_{nonlin}\|_k$ нормированная разность между решениями линейной и нелинейной задачи на n - ом шаге по времени.

но простого и надежного алгоритма сквозного счета микро - мезо - макро на базе стохастической модели. Стационарное решение получилось в виде распределения с "тяжелыми хвостами". Этот факт является следствием того, что мы рассматриваем сложный стохастический процесс Леви. Кстати, если в нашей модели взять усредненные коэффициенты (константы, удовлетворяющие флуктуационно - диссипационной теореме), то стационарное решение получится в виде максвеллиана.

В **заключении** приведены основные результаты работы, которые состоят в следующем:

1. Получены аналитические выражения упрощенных коэффициентов системы стохастических дифференциальных уравнений, описывающих движение частиц в фазовом пространстве при умеренных числах Кнудсена как в декартовых так и в сферических координатах пространства скоростей. Упрощение состоит в том, что вместо самой функции распределения, что приводит к нелинейности, при взятии интегралов для вычисления коэффициентов использовалось соответствующее максвелловское распределение.
2. Получено уравнение Больцмана с интегралом столкновений в форме Колмогорова - Фоккера - Планка (КФП) в сферической системе координат для пространственно - однородной задачи о релаксации газа из твердых сфер в случае зависимости его коэффициентов только от тепловой скорости. Найдено численно стационарное решение.

3. Численно решена эквивалентная предыдущей по постановке задача о пространственно-однородной релаксации для трехмерного случайного процесса в декартовых координатах. Показано, что стационарное решение трехмерной задачи, полученное стохастическим методом частиц, совпадает с стационаром одномерной задачи в сферических координатах.
4. Построен и реализован консервативный алгоритм численного решения нелинейной трехмерной задачи о пространственно - однородной релаксации с использованием архитектуры CUDA. Показано, что стационарное решение для нелинейной модели близко к стационару линейной задачи, когда коэффициенты зависят только от тепловой скорости. Это делает возможным использование коэффициентов более простой структуры при решении пространственно - неоднородных задач газовой динамики в фазовом пространстве, что существенно для экономии вычислительных ресурсов.

Публикации

- [1] *С.В. Богомолов, И.Г. Гудич.* О диффузионной модели газа в фазовом пространстве при умеренных числах Кнудсена, // Математическое моделирование, 2012, том 24, No 8, с. 45 - 64.
S. V. Bogomolov, I. G. Gudich Diffusion Model of Gas in a Phase Space for Moderate Knudsen Numbers, //Mathematical Models and Computer Simulations, 2013, Vol. 5, No. 2, pp. 130-144.
- [2] *С.В. Богомолов, И.Г. Гудич.* К верификации стохастической диффузионной модели газа, // Математическое моделирование, 2013, том 25, No 1, с. 17 - 35.
Bogomolov S., Gudich I. Verification of a stochastic diffusion gas model // Mathematical Models and Computer Simulations. – 2014. – Vol. 6, no. 3. – P. 305 – 316.
- [3] *S. V. Bogomolov, I. G. Gudich* Hierarchy of stochastic gas dynamic models, // Conf. RGD 28 theses, Saragosa ,2012.
- [4] *С.В. Богомолов, И.Г. Гудич.* Стохастическое решение трехмерного нелинейного уравнения Колмогорова Ψ Фоккера – Планка с использованием GPU, // Тезисы конференции Ломоносовские чтения 2013.
- [5] *С.В. Богомолов, И.Г. Гудич.* К верификации стохастической диффузионной модели газа, //Конференция Тихоновские чтения, 2013, тезисы докладов.
- [6] *Богомолов С., Гудич И., Есикова Н.* Уравнения газовой динамики с "тепловым следом" // Современные проблемы вычислительной математики и математической физики: Международная конференция, Москва, 16-17 июня 2014 г.: Тезисы докладов. – МАКС Пресс Москва, МГУ имени М. В. Ломоносова, 2014. – С. 32 – 33.
- [7] *Богомолов С., Гудич И., Есикова Н.* Уравнения газовой динамики при умеренных числах Кнудсена // Сборник тезисов докладов Международной Конференции "Математика и информационные технологии в нефтегазовом комплексе. – г. Сургут, 2014. – С. 32 – 33.

Список цитируемой литературы.

- [1] Иванов М. Ф., Гальбурт В. А. Стохастический подход к численному решению уравнений Фоккера-Планка // Математическое моделирование. — 2008. — Vol. 20, no. 11. — P. 3–27.
- [2] Богомолов С. В., Гудич И. Г. О диффузионной модели газа в фазовом пространстве при умеренных числах Кнудсена // Математическое моделирование. — 2012. — Vol. 24, no. 8. — P. 45–64.
- [3] Теория и приложения уравнения Больцмана: Пер. с англ / К. Черчиньяни, Э. А. Гурмузова, В. П. Мемнонов, Р. Г. Баранцев. — Мир, 1978.
- [4] Богомолов С. В. Об одном подходе к получению стохастических моделей газовой динамики. — 2008. — Vol. 423, no. 4.
- [5] Калиткин Н. Н. Численные методы. 2 изд. — БХВ-Петербург, 2011.
- [6] Alekseenko A., Josyula E. Deterministic solution of the spatially homogeneous Boltzmann equation using discontinuous Galerkin discretizations in the velocity space // Journal of Computational Physics. — 2014. — URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999114002186>.
- [7] Asinari P. Nonlinear Boltzmann equation for the homogeneous isotropic case: Minimal deterministic Matlab program // Computer Physics Communications. — 2010. — Vol. 181, no. 10. — P. 1776–1788.
- [8] Babich R., Clark M. A., Joó B. Parallelizing the QUDA library for multi-GPU calculations in lattice quantum chromodynamics // High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC), 2010 International Conference for / IEEE. — 2010. — P. 1–11.
- [9] Belotserkovskii O. M., Zharov V. A. Monte Carlo Simulation of Boundary Layer Transition. — Vol. 49, no. 5. — P. 887.
- [10] Chandrasekhar S. Stochastic problems in physics and astronomy // Reviews of modern physics. — 1943. — Vol. 15, no. 1. — P. 1.
- [11] Dongarra J. Algorithmic and software challenges when moving towards exascale. — 2013.
- [12] Gorji M. H., Torrilhon M., Jenny P. Fokker-Planck model for computational studies of monatomic rarefied gas flows // Journal of Fluid Mechanics. — 2011. — Vol. 680. — P. 574–601.
- [13] Heterogeneous multiscale methods: A review / B. Engquist, X. Li, W. Ren et al. // Communications in Computational Physics. — 2007. — Vol. 2, no. 3. — P. 367–450.

- [14] Hu G., Li D.g. Multiscale phenomena in microfluidics and nanofluidics // Chemical Engineering Science. — 2007. — Vol. 62, no. 13. — P. 3443–3454.
- [15] Irving J. H., Kirkwood J. G. The statistical mechanical theory of transport processes. IV. The equations of hydrodynamics // The Journal of Chemical Physics. — 2004. — Vol. 18, no. 6. — P. 817–829.
- [16] Jenny P., Torrilhon M., Heinz S. A solution algorithm for the fluid dynamic equations based on a stochastic model for molecular motion // Journal of Computational Physics. — 2010. — Vol. 229, no. 4. — P. 1077–1098.
- [17] Klar A., Marheineke N., Wegener R. Hierarchy of mathematical models for production processes of technical textiles // ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik. — 2009. — Vol. 89, no. 12. — P. 941–961.
- [18] Morinishi K. Numerical simulation for gas microflows using Boltzmann equation // Computers & fluids. — 2006. — Vol. 35, no. 8. — P. 978–985.
- [19] Ostermeyer G-P. The mesoscopic particle approach // Tribology International. — 2007. — Vol. 40, no. 6. — P. 953–959.
- [20] Titarev V. A. Numerical method for computing two-dimensional unsteady rarefied gas flows in arbitrarily shaped domains // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 2009. — Vol. 49, no. 7. — P. 1197–1211.
- [21] Unified solver for rarefied and continuum flows with adaptive mesh and algorithm refinement / V. I. Kolobov, R. R. Arslanbekov, V. V. Aristov et al. // Journal of Computational Physics. — 2007. — Vol. 223, no. 2. — P. 589–608.