# 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

#### ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Научный руководитель: доктор физико-математических наук Сергей Владимирович Богомолов

Москва 2015

# Оглавление

Bl	ВЕДЕНИЕ	3
1	Коэффициенты сноса и диффузии в пространстве скоростей в предположении о локальной максвелловости	16
2	Линейная задача о пространственно - однородной релаксации в сферической системе координат	39
3	Пространственно – однородная релаксация для модели в форме системы стохастических дифференциальных уравнений с упро- щенными коэффициентами	48
4	Пространственно – однородная релаксация для модели в форме системы стохастических дифференциальных уравнений с нели- нейными коэффициентами	65
За	Заключение	

# введение

Гидро- и газо-динамика на протяжении многих лет являются одними важнейших из наиболее сложных отраслей математического моделирования. Задачи, касающиеся этих областей, встречаются повсеместно и в огромном диапазоне масштабов, начиная от уровня живой клетки, которая большей частью состоит из воды, заканчивая поведением атмосферы и звездной динамикой. Для описания процессов и явлений на каждом из уровней требуется своя адекватная математическая модель течения жидкости или газа, которая позволяет не упустить характерные для исследуемого масштаба эффекты и, вместе с тем, не является слишком сложной для решения.

Ранние попытки объяснить течение воды относят еще к XVII веку. Они были предприняты такими учеными, как Эванджелиста Торричелли, Эдме Мариоттом и Доменико Гульельмини еще в доньютоновскую эпоху. После принятия научным сообществом открытых Исааком Ньютоном законов началась новая эра в физике, и описание течений перешло на качественно новый уровень, что породило представление о жидкости, как о сплошной среде. Автором первой подобного рода модели, не учитывающей ни вязкость среды, ни ее сжимаемость, стал Леонард Эйлер. Далее развитие этих представлений привели к системе уравнений газовой динамики, названной в его честь. Затем для того чтобы учесть не только нормальные (давление), но и касательные силы, действующие на элементарный объем жидкости, Анри Навье ввел феноменологический коэффициент, тензор вязких напряжений, это позволило корректно описать "перемешивание" жидкости. Большой вклад в исследование получившейся системы внес Джордж Стокс, в результате чего она была названа уравнениями Навье - Стокса.

Между тем, к середине XIX века начала формироваться молекулярно - кинетическая теория (Крениг, Клазиус), постулирующая три основных положения: все тела состоят из частиц, частицы находятся в непрерывном хаотическом (тепловом) движении, частицы взаимодействую друг с другом путем абсолютно упругих столкновений. Максвелл применил к этой теории соображения математической статистики, введя распределение молекул газа по скоростям. Необходимость кинетического описания стала понятна из исследований взаимодействия течения с границей. В результате опытов и их последующего анализа, проделанных Стоксом (1851) и Максвеллом (1879), было установлено, что условия прилипания является верными, только если среда не разрежена. К концу XIX века Людвиг Больцман, обобщая все эти результаты, вывел свое знаменитое уравнение [37] и, тем самым породив новое направление исследований. Оно известно, как шестая из проблем Гильберта, представленных им на Международном конгрессе математиков в 1900 году в Париже, 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.

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

4

данными, что достигается с помощью как повышения точности существующих апробированных вычислительных методов, так и перехода к иерархическим, гибридным, многомасштабным (multiscale), многосеточным (multigrid) методам [33, 59, 87, 85, 70, 61, 75, 64]. Эта тематика является ведущей во всех журнал по прикладной математике. К слову, SIAM (Society for Industral 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 микроскопического описания. Возникает проблема выделения соответствующих подобластей, или декомпозициии 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 - это 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, соответствующих разным диапазонам изменения числа Кнудсена: приближение сплошной среды (Kn < 0.01), переходный режим (0.01 < Kn < 10), свободномолекулярное течение (Kn > 10). Нас будет интересовать в первую очередь переходный режим, 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 микрофлуидики, 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 ЕССОМАЅ 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 [50], 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 распараллелена для архитектуры SIMD (single instruction multiple

6

data), которая подразумевает одновременное выполнение одинаковых команд для множества однородных данных. Тем не менее, данная технология успешно применяется во многих областях вычислительной математики. Одной их таки областей служит стохастическое моделирование или моделирование методами Монте - Карло [30].

Многие задачи в области вычислительной гидро - и газо - динамики решаются в фазовом пространстве, в котором независимыми переменными являются как положения, так и скорости, что дает более полную и точную информацию о рассматриваемой системе.

#### Методы решения микроскопических уравнений

#### Прямое статистическое моделирование

Наиболее распространенным методом моделирования течений газа при умеренных и больших числах Кнудсена является решение уравнения Больцмана с использованием прямого статистического моделирования, Direct Simulation Monte Carlo (DSMC). Этот подход впервые был предложен Г. Бердом [15, 13, 41] и в последствии развит большим количеством авторов [17, 4, 6, 32, 7, 9, 8, 3, 23, 77, 33, 73, 52, 48, 40, 60, 67, 55]. На конференции по разреженной газовой динамике в 2012 г. RGD28 целая секция была посвящена DSMC. Идея метода состоит в том, чтобы смоделировать поведение большого числа молекул газа гораздо меньшей выборкой, т.е. вместо  $10^{25}$  использовать ( $10^3 - 10^6$ ) модельных агентов, их характер взаимодействия определяется столкновительной моделью, соответствующей ядру в интеграле столкновений. Ключевыми моментами данного метода являются алгоритм определения сталкивающихся частиц и выбор времени столкновения или временного интервала. Много усилий было потрачено на развитие схемы со "счетчиком времени", выдвинутой самим Бердом [15]. Позже, в результате ряда теоретических исследований, были найдены схемы, описывающие процесс столкновений, обладающие при этом лучшими свойствами: "Null - Collision" [65], "Ballot - Box" [17], "Modified - Nanbu" [32], "Majorant Collision Frequency" [7], "No Time Counter" (NTC) [15]. Последний стал наиболее широко применяемым. Несмотря на популярность и востребованность данного семейства методов, до сих пор остается открытым вопрос об их обосновании и контроле точности при их использовании. Можно сказать, что задача о сходимости этого метода привела к интенсивному развитию целого раздела теории вычислительных методов, а именно, теории аппроксимации задач для скачкообразных случайных процессов, которая восприняла и одновременно дала толчок к углублению соответствующей части теории случайных процессов [83, 82, 74, 19, 20, 21]. Кроме того, рассматриваемые схемы являются довольно дорогими с вычислительной точки зрения. И, хотя стохастическая природа данных методов дает широкие возможности для распараллеливания алгоритмов счета и использования современных архитектур, при уменьшении числа Кнудсена и приближении к нижней границе переходного режима (Kn 0.01) их использование вызывает определенные трудности.

#### Детерминированные разностные методы

Как отмечают многие ученые [87], методы статистического моделирования позволили решить ряд очень сложных и важных задач динамики разреженного газа (особенно для сверзвуковых течений), но эти популярные подходы, несмотря на несомненные достоинства, имеют недостатки. С помощью этих методов сложно решать нестационарные задачи; дозвуковые течения для моделирования методами Монте – Карло требуют больших затрат вычислительных ресурсов из – за статистического шума; в отличие от прямых методов статистические подходы с трудом могут быть обобщены для неявных схем и для схем с порядком точности выше, чем первый; построение гибридных схем, где статистические решения сращиваются с регулярными решениями по уравнениям Навье - Стокса требуют значительных усилий. Это является еще одним фактором, способствующим поиску эффективных методов прямого решения уравнения Больцмана [87]. В серии статей, одними из последних среди которых является цитируемые выше работы, описываются важнейшие черты построения прямых подходов и показаны основные направления приложения их в моделировании различных течений. Формулируются основные типы консервативных схем для кинетического уравнения: макроскопические, или гидродинамические, и микроскопические, или кинетические. Описываются схемы консервативного метода расщепления. Рассматривается детерминистический метод решения с точным интегрированием по углам в операторе столкновений. Освещаются принципы построения параллельных схем и способы их реализации с декомпозицией по процессорам в физическом или скоростном пространствах. Раскрывается смысл и способы конструкции кинетически – континуальных численных схем, позволяющих аппроксимировать уравнения сплошной среды (уравнения Эйлера и Навье – Стокса). Определяется методика создания гибридных методов, где в зависимости от степени неравновесности в области течения применяются либо кинетические, либо кинетически – континуальные численные схемы. Описываются особенности вводимого гибридного единого метода UFS (Unified Flow Solver). Приводятся примеры различных задач кинетической теории газов, изучаемых на основе прямых методов решения уравнения Больцмана. Эти работы демонстрируют не только важность проблемы численного решения последнего, но и показывают, что успех в моделировании поставленной задачи во всей ее полноте зависит от качества построения более простых моделей и их стыковки с микроскопическими моделями.

Многие работы посвящены спектральным методам, основанным на преобразовании Фурье и дискретизации Фурье – Галеркина в пространстве скоростей. Такого рода подходы давно применяются для разрешения столкновительного оператора в уравнении Больцмана. Например, в [76] авторами предложена простая форма столкновительного интеграла, зависящая только от модели. В [35]

9

Бобылев и Рязанов предлагают схожий подход, использующий Карлемановское представление интеграла столкновений и быстрое преобразование Фурье.

#### Модельные уравнения

Решение уравнения Больцмана является непростой задачей, как непосредственно с вычислительной точки зрения, так и с точки зрения построения алгоритма решения. Поэтому многие исследователи используют модельные члены, тем или иным образом, аппроксимирующие столкновительный член или макроскопические уравнения, базирующиеся на уравнениях Навье – Стокса, содержащие кинетические поправки или кинетически согласованные макроскопические уравнения.

Наиболее простым и широко используемым модельным уравнением является уравнение Больцмана со столкновительным членом в форме Бхатнагара – Гросса – Крука (БГК). Эта модель отражает единственное свойство уравнения Больцмана - экспоненциально быструю релаксацию функции распределения к максвеллиану, поэтому переходные процессы в газе, не находящемся в термодинамическом равновесии, не могут быть достаточно точно описаны таким приближением. Отметим также, что БГК - член содержит в себе экспоненциальную нелинейность, в то время как "настоящий" интеграл столкновений - квадратичную. В последнее время большой популярностью стал пользоваться метод решетчатых уравнений Больцмана, Lattice Boltzman Method (LBM). Этот подход также предполагает дискретизацию функции распределения в пространстве скоростей, но уже в небольшом количестве точек, строго определенных в каждом элементе пространства. Это определяет его высокую вычислительную эффективность, но в то же время значительно ограничивает область применимости задачами, близкими к равновесным, поэтому LBM эффективен для моделирования жидкости. Этот метод очень хорошо распараллеливается, особенно для архитектур, использующих графические процессоры, поэтому, чтобы

сохранить эффективность, разрабатывается множество модификаций метода, приемлемых также и для газодинамических расчетов [44, 29, 71, 69, 81, 54, 57].

Кроме модели БГК развиваются и другие модели интеграла столкновений: ЭС – модель, модель Шахова, современный обзор применения которых дается в статьях [84, 72, 39]. В последнее время возник вплеск интереса к модели дискретных ординат [36, 34, 31, 80, 78, 79].

Отдельно стоит отметить модельное уравнение Колмогорова – Фоккера – Планка, предложенное Чандрасекаром [42] для изучения звездной динамики. Эта модель является полностью эвристической и требует подбора коэффициентов, что остается отнюдь нетривиальной задачей. Возможно именно поэтому Фоккер – Планковский столкновительный член и не получил широкого распространения. Тем не менее, заслуживает внимания квадратичная нелинейность в его структуре, как и в самом интеграле столкновений Больцмана [13].

Часто используются всевозможные гибридные методы, то – есть методы, сочетающие в себе расчеты на основе микроскопических модельных уравнений с макроскопическими расчетами [26, 45, 46, 86, 53, 43, 66, 47, 49].

## Один подход к построение иерархии моделей газовой динамики

В данной работе мы будем рассматривать модель, предложенную С. В. Богомоловым [22], основанную на работах А. В. Скорохода [19] и А. А. Арсеньева [21], для умеренных чисел Кнудсена. Она является частью сквозной иерархической системы моделей переходной по числу Кнудсена. При построении этой иерархии сначала рассматривается система из конечного числа взаимодействующих друг с другом в фазовом (x, v) – пространстве частиц, для которой характерны только парные взаимодействия, простейшим примером таких частиц являются твердые сферы. Затем делается предельный переход при стремлении

количества частиц в системе к бесконечности. В этом случае столкновительный процесс является пуассоновским и, следовательно изменение скорости пробной частицы за интервал времени будет представлено в виде интеграла по пуассоновской мере. То есть, мы получим предельное уравнение движения одной частицы в самосогласованном поле, или уравнение для соответствующего случайного процесса, реализации которого можно интерпретировать как траектории движения моделирующих частиц. Также вводится понятие интенсивности пуассоновской меры, которая пропорциональна  $\frac{1}{Kn}$ , т.е. чем меньше число Кнудсена, тем чаще сталкиваются частицы в рассматриваемой системе. Это позволяет при умеренных числах Кнудсена перейти к более грубой, но более удобной в рассмотрении модели. Для этого мы аппроксимируем пуассоновский процесс диффузионным, что приводит нас к системе стохастических дифференциальных уравнений по винеровской мере или, применяя формулу Ито для плотности меры, уравнению диффузионного в пространстве скоростей процесса, которое можно считать уравнением Больцмана с модельным столкновительным членом в форме Колмогорова – Фоккера – Планка, о котором говорилось ранее.

Мы покажем, как с помощью аналитического вычисления ряда многократных интегралов можно получить в явном виде приближенные коэффициенты в уравнении Колмогорова – Фоккера – Планка в фазовом пространстве для моделирования газа из твердых сфер при переходных (от кинетического к макроскопическому описанию) числах Кнудсена.

Такие модели получаются на основе ряда допущений, точность которых оценить теоретически довольно сложно. Поэтому, безусловно, для определения места каждой модели необходимы вычислительные эксперименты. В частности, практически важным является вопрос о возможности ее использования для моделирования газа при числах Кнудсена, порядка 0,1 — 0,01. Мы обсудим это в дальнейшем на некоторых примерах.

12

#### Содержание работы

Первая глава диссертации посвящена выводу упрощенных коэффициентов для рассматриваемой модели. Упрощение заключается в том, что для вычисления коэффициентов в уравнении Колмогорова – Фоккера – Планка делается предположение о локальной максвелловости функции распределения по скоростям в каждой точке пространства. В этом случае выражения для восьмимерных интегралов по функции распределения, возникающих в столкновительном члене, могут быть выписаны в явном виде. Они выражаются довольно сложными формулами, которые содержат функцию ошибок (erf). Самым простым тестом для выяснения правомерности такого упрощающего предположения является задача о пространственно-однородной релаксации, которая рассмотрена многими авторами, например [28] и [87]. Последующие главы посвящены исследованию этой задачи для модельных и нелинейных коэффициентов.

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 нестационарной задачи, проведен вычислительный эксперимент (счет на установление) на неравномерной сетке [24], исследована сходимость решения.

В третьей главе задача с упрощенными коэффициентами решается уже для трех декартовых координат. При переходе в многомерное пространство методы

Монте - Карло дают выигрыш как в удобстве разработки и реализации вычислительных алгоритмов, так и в скорости вычислений, именно поэтому промышленным методом для решения уравнения Больцмана является метод прямого статистического моделирования, предложенный [15], как эвристический метод. Его математическая формализация в виде стохастических дифференциальных уравнений по пуассоновской мере была дана в [20], что позволило дать оценки сходимости этого метода [5]. Переход к стохастическим дифференциальным уравнениям по винеровской мере привел к рассматриваемой постановке. В нашем же случае постановка в виде уравнений для случайного процесса по винеровской мере является более естественной, исходя из способа получения модели, чем уравнение Колмогорова – Фоккера – Планка для плотности распределения. Кроме того, она дает возможность использовать все плюсы стохастических методов в трехмерном пространстве. Построен и реализован алгоритм, который представляет собой стохастический метод частиц. Получено стационарное решение, хорошо совпадающее с решением эквивалентной задачи в сферических координатах, описанной в главе 2, что явилось тестом для трехмерного алгоритма

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. Дополнительной сложностью в этой задаче является вычисление трехмерных интегралов. Для их расчета так же используется стохастический бессеточный метод. Вычислительная сложность полученного алгоритма оказывается велика, поэтому для расчетов написана реализация под архитектуру CUDA, которая очень хорошо подходит для решения подобного сорта задач, ввиду возможности исполнять большое количество "легких" нитей одновременно. Еще одна проблема, возникшая при работе над этой задачей, это флуктуации энергии в системе, что может являться следствием "стохастического нагрева" усиленного нелинейностью задачи. В связи с этим, в алгоритм был введен дополнительный шаг коррекции энергии. В результате было получено стационарное решение для задачи о пространственно-однородной релаксации с интегральными коэффициентами, которое оказалось близким к стационару линейной задачи, рассмотренному в предыдущих главах, что дает возможность сделать вывод о правомерности и целесообразности использования упрощающих предположений для изучаемой модели газа.

В Заключении приведены основные результаты, выносимые на защиту.

## Глава 1

# Коэффициенты сноса и диффузии в пространстве скоростей в предположении о локальной максвелловости

В настоящей работе мы рассматриваем модель [22], 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:

$$dx(t) = Vdt + \sqrt{Kn}[a^{-1}(c)\tilde{\sigma}]dw(t),$$
  
$$dv(t) = -\frac{1}{Kn}a(c)(v(t) - V)dt + \frac{1}{\sqrt{Kn}}\sigma(c)dw(t),$$
 (1.1)

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.

Реализации этого процесса (набор траекторий) порождают меру эмпирическую  $\tilde{\lambda}_t(x, v, t)$ , 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:

$$\frac{\partial \lambda_t}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial V_i F}{\partial x_i} - \frac{1}{Kn} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial (a_i(F)(v_i - V_i)F)}{\partial v_i} = \frac{1}{Kn} \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial^2 (\sigma_{ij}^2(F)F)}{\partial v_i \partial v_j} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 [\frac{\partial^2 (a^{-1}\sqrt{Kn}\tilde{\sigma})_{ij}^2 F}{\partial x_i \partial x_j} + \frac{2\frac{\partial^2 (a^{-1}\tilde{\sigma})_{ij}\sigma_{ji}F}{\partial x_i \partial v_j}].$$
(1.2)

Коэффициенты этих уравнений представляют собой интегралы в фазовом пространстве:

$$\mathbf{a}(x_1(t), v_1(t), t) \equiv \int \int \int \mathbf{f}(\theta, x_1(s), v_1(s), x, v) m(d\theta) F dx dv,$$
$$\mathbf{a} \equiv a(c) \mathbf{c} \tag{1.3}$$

$$\sigma^2(x_1(t), v_1(t), t) \equiv \int \int \int f^2(\theta, x_1(s), v_1(s), x, v) m(d\theta) F dx dv.$$
(1.4)

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

В [22] показано, что уравнение Больцмана при умеренных числах Кнудсена можно приблизить уравнением Колмогорова – Фоккера – Планка (1.2). Это уравнение (точнее его главная часть без последних двух членов) давно известно [42], [62], [14] как эвристическое модельное уравнение Больцмана с интегралом столкновений в форме Фоккера – Планка.

С вычислительной точки зрения модель (1.2), (1.1) довольно сложна. Ее можно значительно упростить для конкретного примера газа из твердых сфер, сделав при этом еще существенное предположение, что коэффициенты a (вектор сноса) и  $\sigma$  (ковариационную матрицу) можно вычислять, беря под интегралами в выражениях (1.3), (1.4) в качестве плотности меры  $\lambda_t(dx, dv)$  локальный максвеллиан. Для газа из твердых сфер следует взять [5], [?]:

$$\begin{split} \theta &= \xi \times \eta, \, \xi \in \Xi, \, \Xi - \text{единичная сфера, } \eta \in [0,1), \\ f(\cdot) &= \chi \{\eta < \frac{h(\xi, v_1, v)}{Hb(\xi)} \} \psi(\xi, v_1, v) \delta(x - x_1), \\ m(d\theta) &= Hb(\xi) \omega(d\xi) d\eta, \, \chi - \text{индикатор борелевского множества,} \\ \delta &- \phi \text{ункция Дирака,} \\ h(\cdot) &= b(\xi) min\{ \mid v_1 - v \mid, H \}, \, H = const, \\ b(\xi) &= d^2 \mid \cos \alpha \mid, \\ \xi &= \{\cos \epsilon \cdot \sin \alpha, \sin \epsilon \cdot \sin \alpha, \cos \alpha\}, \, 0 < \alpha < \pi/2, \, 0 < \epsilon < 2\pi, \\ d - \text{диаметр молекулы (при обезразмеривании эта величина пропадет)} \\ \omega(d\xi) &= \sin \alpha d\alpha d\epsilon - \text{равномерное распределение на единичной сфере,} \\ \psi(\cdot) &= \xi(v - v_1, \xi), \, (\cdot, \cdot) - \text{скалярное произведение.} \\ \text{Займемся сначала вектором сноса } a(\cdot). \end{split}$$

Благодаря разделению переменных в функции  $h(\cdot)$ , имеем:

$$\int_{0}^{1} d\eta \int_{\mathbf{R}^{3}} \chi \{\eta < \frac{\min\{|v_{1} - v|, H\}}{H}\}(\cdots) dv =$$

$$= \int_{0}^{1} d\eta \int_{\eta H < |v - v_{1}| < +\infty} (\cdots) dv =$$

$$= \int_{0 < |v - v_{1}| < H} dv \int_{0}^{\frac{|v_{1} - v|}{H}} (\cdots) d\eta + \int_{H < |v - v_{1}| < +\infty} dv \int_{0}^{1} (\cdots) d\eta =$$

$$= \int_{0 < |v - v_{1}| < H} dv \frac{|v_{1} - v|}{H} (\cdots) + \int_{H < |v - v_{1}| < +\infty} dv,$$

где через (· · · ) мы обозначили выражение:

$$(\cdots) = \int \psi(\xi, v_1, v) \delta(x - x_1) H b(\xi) \omega(d\xi) \lambda_t(dx, dv)$$

Подставив вместо функции скачка  $\psi(\cdot)$  ее конкретное выражение для твердых сфер, получим вектора сноса в виде:

$$a(\cdot) = \int d\xi \int_{0 < |v-v_1| < H} dv \mid v_1 - v \mid (\cdots)$$
$$+H \int d\xi \int_{H < |v-v_1| < +\infty} dv (\cdots).$$

Постоянная H в описании модели газа из твердых сфер была введена для того, чтобы избежать бесконечности в сечении рассеяния. Стандартная модель ([13], глава II) получится, если устремить H к бесконечности. Тогда в последнем равенстве второе слагаемое устремится к нулю в силу быстрого (наверное, всегда экспоненциального) убывания функции распределения при увеличении значения скорости, а первое будет таким же, как в [13] с той лишь разницей, что интеграл по углам у нас берется по всей области их изменения, а не только по параметрам, описывающим скользящие столкновения.

Итак, для газа из твердых сфер вектор сноса *а* можно приблизить выражением:

$$a(x_{1}(t), v_{1}(t), t) = -\int_{\mathbf{R}^{3}} \int_{0}^{\pi/2} \int_{0}^{2\pi} \xi(v_{1} - v, \xi) \mid v_{1} - v \mid b(\xi)$$
  
$$\delta(x - x_{1})\lambda_{t}(dx, dv) \sin \alpha d\alpha d\epsilon,$$

причем в системе отсчета с осью z, направленной вдоль  $v_1 - v$ , имеем (формула (9.27) главы II в [13]):

$$\xi(v_1 - v, \xi) = |v_1 - v| (\sin \alpha \cos \alpha \cos \epsilon, \sin \alpha \cos \alpha \sin \epsilon, \cos^2 \epsilon).$$

После интегрирования по углу  $\epsilon$  получим (как и в (9.30) из [13]):

$$a(x_{1}(t), v_{1}(t), t) = -\int_{\mathbf{R}^{3}} (v_{1} - v)G(|v_{1} - v|) \\ \delta(x - x_{1})\lambda_{t}(dx, dv),$$
(1.5)

где через  $G(\mid v_1 - v \mid)$  мы обозначили так же, как и в [17] (формула (9.29)), выражение:

$$G(|v_1 - v|) = 2\pi \int_0^{\pi/2} \cos^2 \alpha |v_1 - v| d^2 \cos \alpha \sin \alpha d\alpha.$$

Здесь стоит множитель  $2\pi$ , который был потерян в (9.29) при интегрировании по  $\epsilon$ . Диаметр молекул d мы выписали в этой формуле для удобства сравнения с [13], хотя его не должно здесь быть, так как для появления числа Кнудсена в явном виде мы перешли к безразмерным переменным в (1.5).

Таким образом, для газа с умеренными числами Кнудсена мы получили уравнение Фоккера — Планка, аналогичное классическому, но и отличающееся от него как по способу вывода, так и по параметрам интегрирования, что приводит к дальнейшему упрощению:

$$G(|v_1 - v|) = \frac{\pi}{2}d^2 |v_1 - v|$$

Теперь введем еще одно приближение в векторе сноса a — заменим точное решение уравнения Фоккера — Планка  $\lambda_t(dx, dv)$  локальным максвеллианом, тогда (опять в "размерном"виде для наглядности):

$$a(x_1(t), v_1(t), t) = -\pi/2 \frac{n_1}{(2\pi R T_1)^{3/2}} d^2 \int_{\mathbf{R}^3} (v_1 - v) \mid v_1 - v \mid e^{-\frac{(v - V_1)^2}{2R T_1}} dv.$$
(1.6)

Нам остается взять следующий интеграл:

$$\int_{\mathbf{R}^3} (v_1 - v) \mid v_1 - v \mid e^{-(v - V_1)^2} dv.$$
(1.7)

Сделаем замену переменных  $w \equiv v - V_1$  и выберем оси координат w таким образом, чтобы ось  $w_z$  совпала с направлением вектора тепловой скорости

$$c \equiv v_1 - V_1.$$

Тогда  $w_x$  - и  $w_y$  - составляющие нашего интеграла будут равны нулю как интегралы от нечетных функций в симметричных пределах. Компоненту  $w_z$ (то - есть, вектор, направленный вдоль, а точнее — против из-за знака "минус"перед интегралом в (1.6), вектора тепловой скорости c, что соответствует физическому смыслу задачи) преобразуем введением цилиндрических координат  $w_x = \rho \sin \varphi, w_y = \rho \cos \varphi, w_z = z$ . После интегрирования по углу  $\varphi$  получим значение компоненты  $w_z$ :

$$\frac{c}{|c|} 2\pi \int \int (|c|-z) \sqrt{\rho^2 + (|c|-z)^2} e^{-z^2} e^{-\rho^2} \rho d\rho dz,$$

или после замены  $\rho^2$  на r:

$$\frac{c}{\mid c \mid} \pi \int \int (\mid c \mid -z) \sqrt{r + (\mid c \mid -z)^2} e^{-z^2} e^{-r} dr dz.$$
$$\int_0^\infty \sqrt{r + \alpha} e^{-r} dr,$$

где  $\alpha \equiv (|c| - z)^2$ , и берется с помощью замены  $\sqrt{r + \alpha} \equiv y$  и интегрирования по частям:

$$= e^{\alpha} \left[ \sqrt{\alpha} e^{-\alpha} + \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} e^{-y^2} dy \right].$$
(1.8)

Приведем ниже несколько полезных интегралов.

Введем обозначения:

$$\beta \equiv \alpha - |c|,$$
  

$$\gamma \equiv \alpha + |c|,$$

$$(1.9)$$

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

тогда, учитывая (1.9),

$$\int_0^\infty e^{-\alpha^2 + 2|c|\alpha - c^2} d\alpha = \int_0^\infty e^{-(\alpha - |c|)^2} d\alpha$$
$$= \int_{-|c|}^\infty e^{-\beta^2} d\beta.$$
(1.10)

$$\int_0^\infty e^{-\alpha^2 - 2|c|\alpha - c^2} d\alpha = \int_0^\infty e^{-(\alpha + |c|)^2} d\alpha$$
$$= \int_{|c|}^\infty e^{-\gamma^2} d\gamma.$$
(1.11)

$$\int_{0}^{\infty} e^{-\alpha^{2}+2|c|\alpha-c^{2}} \alpha d\alpha = \int_{-|c|}^{\infty} e^{-\beta^{2}} (\beta+|c|) d\beta =$$

$$= -\frac{1}{2} \int_{-|c|}^{\infty} de^{-\beta^{2}} + \int_{-|c|}^{\infty} |c|e^{-\beta^{2}} d\beta =$$

$$= \frac{1}{2} e^{-|c|^{2}} + \int_{-|c|}^{\infty} |c|e^{-\beta^{2}} d\beta \qquad (1.12)$$

$$\int_{0}^{\infty} e^{-\alpha^{2}-2|c|\alpha-c^{2}} \alpha d\alpha = \int_{|c|}^{\infty} e^{-\gamma^{2}} (\gamma - |c|) d\gamma =$$
  
$$= -\frac{1}{2} \int_{|c|}^{\infty} de^{-\gamma^{2}} - \int_{|c|}^{\infty} |c|e^{-\gamma^{2}} d\gamma =$$
  
$$= \frac{1}{2} e^{-|c|^{2}} - \int_{|c|}^{\infty} |c|e^{-\gamma^{2}} d\gamma \qquad (1.13)$$

$$\int_{0}^{\infty} e^{-\alpha^{2}+2|c|\alpha-c^{2}} \alpha^{2} d\alpha = \int_{-|c|}^{\infty} e^{-\beta^{2}} (\beta+|c|)^{2} d\beta =$$

$$= \int_{-|c|}^{\infty} e^{-\beta^{2}} (\beta^{2}+2\beta|c|+|c|^{2}) d\beta =$$

$$= \int_{-|c|}^{\infty} \beta^{2} e^{-\beta^{2}} d\beta - |c| \int_{-|c|}^{\infty} de^{-\beta^{2}} + |c|^{2} \int_{-|c|}^{\infty} e^{-\beta^{2}} d\beta =$$

$$= \left(-\frac{1}{2}|c|e^{-|c|^{2}} + \frac{1}{2} \int_{-|c|}^{\infty} e^{-\beta^{2}} d\beta\right) +$$

$$+ |c|e^{-|c|^{2}} + |c|^{2} \int_{-|c|}^{\infty} e^{-\beta^{2}} d\beta =$$

$$= \frac{1}{2}|c|e^{-c^{2}} + (\frac{1}{2}+c^{2}) \int_{-|c|}^{\infty} e^{-\beta^{2}} d\beta \qquad (1.14)$$

$$\int_{0}^{\infty} e^{-\alpha^{2}-2|c|\alpha-c^{2}}\alpha^{2}d\alpha = \int_{|c|}^{\infty} e^{-\gamma^{2}}(\gamma-|c|)^{2}d\gamma =$$

$$= \int_{|c|}^{\infty} e^{-\gamma^{2}}(\gamma^{2}-2\gamma|c|+|c|^{2})d\gamma =$$

$$= \int_{|c|}^{\infty} \gamma^{2}e^{-\gamma^{2}}d\gamma + |c| \int_{|c|}^{\infty} de^{-\gamma^{2}} + |c|^{2} \int_{|c|}^{\infty} e^{-\gamma^{2}}d\gamma =$$

$$= (\frac{1}{2}|c|e^{-|c|^{2}} + \frac{1}{2} \int_{|c|}^{\infty} e^{-\gamma^{2}}d\gamma) - |c|e^{-|c|^{2}} + |c|^{2} \int_{|c|}^{\infty} e^{-\gamma^{2}}d\gamma =$$

$$= -\frac{1}{2}|c|e^{-c^{2}} + (\frac{1}{2}+c^{2}) \int_{|c|}^{\infty} e^{-\gamma^{2}}d\gamma \qquad (1.15)$$

Пусть u = |c| - z. С учетом (1.8) интеграл (1.7) станет таким:

$$\frac{c}{|c|}\pi \int_{-\infty}^{\infty} ue^{u^{2}}[|u|e^{-u^{2}} + \int_{|u|}^{\infty} e^{-y^{2}}dy]e^{-(u-|c|)^{2}}du 
= \frac{c}{|c|}\pi (I_{1} + I_{2})$$
(1.16)
$$I_{1} = \int_{-\infty}^{\infty} ue^{u^{2}} |u|e^{-u^{2}}e^{-(u-|c|)^{2}}du 
= \int_{-\infty}^{\infty} u |u|e^{-(u-|c|)^{2}}du 
= -\int_{-\infty}^{0} u^{2}e^{-(u-|c|)^{2}}du + \int_{0}^{\infty} u^{2}e^{-(u-|c|)^{2}}du 
= -\int_{0}^{\infty} u^{2}e^{-(u+|c|)^{2}}du + \int_{0}^{\infty} u^{2}e^{-(u-|c|)^{2}}du$$

Учитывая (1.14) и (1.15)

$$= |c|e^{-c^{2}} + (\frac{1}{2} + c^{2})(\int_{-|c|}^{|c|} e^{-u^{2}} du) = |c|e^{-c^{2}} + (1 + 2c^{2})(\int_{0}^{|c|} e^{-u^{2}} du)$$
(1.17)

$$I_2 = e^{-c^2} \int_{-\infty}^{\infty} u e^{2|c|u} du \int_{|u|}^{\infty} e^{y^2} dy$$
(1.18)

Меняя порядок интегрирования, получим:

$$=e^{-c^{2}}\int_{0}^{\infty}e^{-y^{2}}(\int_{-y}^{y}ue^{2|c|u}du)dy=e^{-c^{2}}\int_{0}^{\infty}e^{-y^{2}}I_{*}dy$$
(1.19)

$$\alpha = 2|c|u; I_* = \frac{1}{4c^2} \int_{-2|c|y}^{2|c|y} \alpha e^{\alpha} d\alpha$$
  
=  $\frac{1}{4c^2} (\alpha e^{\alpha}|_{-2|c|y}^{2|c|y} - \int_{-2|c|y}^{2|c|y} e^{\alpha} d\alpha)$   
=  $\frac{1}{4c^2} (e^{2|c|y} (2|c|y-1) + e^{-2|c|y} (2|c|y+1))$  (1.20)

Подставляя (1.20) в (1.19)

$$I_2 = \frac{1}{4c^2} \int_0^\infty \left( e^{-(y-|c|)^2} (2|c|y-1) + e^{-(y+|c|)^2} (2|c|y+1) \right)$$

Применив (1.10) - (1.13)

$$I_2 = \int_0^{|c|} e^{-u^2} du + \frac{1}{2|c|} e^{-c^2}$$

Итак, мы вычислили  $I_1$  и  $I_2$ , и теперь вместо (1.6) получаем следующее выражение для безразмерного коэффициента сноса *a*:

$$a(x_{1}(t), v_{1}(t), t) = -\frac{c}{|c|} \frac{\pi}{2} n_{1} [\frac{1}{2} erf(|c|)(2c^{2} + 2 - \frac{1}{2c^{2}}) + \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-c^{2}} (|c| - \frac{1}{2|c|})].$$
(1.21)

Отметим, что при малых c модуль этого вектора мал (слабое торможение), а при больших c ведет себя, как  $c^2$ .

Вычислим теперь величину  $\sigma_{xx}^2$ .

$$\sigma_{xx}^2(x_1(t), v_1(t), t) =$$

$$\int \int \int f_x^2(\theta, x_1(t), v_1(t), x, v) m(d\theta) \lambda_t(dx, dv). \qquad (1.22)$$

Для газа из твердых сфер следует взять:

 $heta = \xi, \xi \in \Xi, \Xi -$ единичная сфера,  $\xi = \{\cos \epsilon \sin \alpha, \sin \epsilon \sin \alpha, \cos \alpha\},$   $m(d\theta) = |v_1 - v| |\cos \alpha |\sin \alpha d\alpha d\epsilon, 0 < \alpha < \pi,$   $0 < \epsilon < 2\pi -$ углы локальной сферической системы координат, ось z которой совпадает с вектором $v_1 - v$ ,

функция скачка  $f(\cdot) = \xi(v - v_1, \xi), (\cdot, \cdot)$  — скалярное произведение,

 $\lambda_t(dx, dv) = F_M \delta(x - x_1) dx \cdot dv, F_M = (n_1/(\pi T_1)^{3/2}) exp(-(v - V_1)^2/T_1) -$ локальный максвеллиан,  $\delta$  — функция Дирака,  $n_1, V_1, T_1$  — числовая плотность молекул, макроскопические скорость и температура.

Для более удобного вычисления интеграла (1) мы сделаем замену  $v \equiv v'' \sqrt{T'_1}$ , тогда локальный максвеллиан внутри интеграла примет вид

$$F_M = (1/\pi^{3/2})exp(-(v-V_1)^2),$$

и становятся понятными обозначения для с в выражениях (1.45)и (1.46).

Чтобы получить выражение для x-компоненты функции скачка  $f_x$  в локальной сферической системе координат, надо проделать замену переменных для этой компоненты единичного вектора  $\xi_x$ . Пусть в глобальной сферической системе координат он имеет координаты, определяемые полярным углом  $\psi$  и азимутальным  $\delta$ . Тогда переход из глобальной системы в локальную

$$\xi = A \cdot \xi_{loc}$$

проводится с помощью матрицы поворота

$$A = \begin{pmatrix} \cos \delta \cos \psi & -\sin \psi & \sin \delta \cos \psi \\ \cos \delta \sin \psi & \cos \psi & \sin \delta \sin \psi \\ \sin \delta & 0 & \cos \delta \end{pmatrix},$$

которая является произведением

$$A = A_3(\psi) \cdot A_2(\delta)$$

матриц поворота на угол  $\psi$  вокруг ос<br/>иz



$$A_3(\psi) = \begin{pmatrix} \cos\psi & -\sin\psi & 0\\ \sin\psi & \cos\psi & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

а затем на угол  $\delta$  вокруг оси y



$$A_2(\delta) = \begin{pmatrix} \cos \delta & 0 & \sin \delta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \delta & 0 & \cos \delta \end{pmatrix}.$$

Отсюда

 $\xi_x = \cos\epsilon\sin\alpha\cos\delta\cos\psi - \sin\epsilon\sin\alpha\sin\psi + \cos\alpha\sin\delta\cos\psi,$ 

$$f_x = \xi_x \mid v_1 - v \mid \cos \alpha.$$

Таким образом, для газа из твердых сфер и локально максвелловского распределения

$$\sigma_{xx}^2 = \frac{1}{2} \int_{R^3} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \xi_x^2 |v_1 - v|^3 \cos^2 \alpha |\cos \alpha| F_M \sin \alpha d\epsilon d\alpha d^3 v.$$

Множитель 1/2 возникает из-за того, что интеграл надо брать по полусфере  $(v - v_1, \xi) > 0$ , что означает движение навстречу друг другу двух молекул (в результате которого и происходит столкновение), а удобнее его брать по всей сфере. Это стандартный прием, используемый при выводе уравнения Больцмана.

Интегрируя по углам  $\epsilon$  и  $\alpha$  и вводя обозначения  $v - v_1 \equiv w$  и  $v_1 - V_1 \equiv c$ (тепловая скорость), получим:

$$\sigma_{xx}^2 = \frac{\pi}{4} \frac{1}{\pi^{3/2}} \int_{R^3} |w|^3 (1/3 + \sin^2 \delta \cos^2 \psi) exp(-(c-w)^2) d^3w,$$

ИЛИ

$$\sigma_{xx}^2 = \frac{1}{4\pi^{1/2}} \int_{R^3} ((1/3) \mid w \mid^3 + w_x^2 \mid w \mid) exp(-(c-w)^2) d^3w.$$

Кстати, такое же выражение получится, если использовать представление столкновений молекул в терминах прицельного параметра и угла рассеяния, а

также соображения тензорной размерности, как это делалось Б.А. Трубниковым для кулоновского взаимодействия в [16], где также приводится подробное обсуждение физической интерпретации получаемых уравнений.

Для вычисления этого интеграла перейдем в систему координат, ось z которой совпадает с вектором c тепловой скорости. Такое преобразование делается с помощью той же матрицы поворота A с заменой углов  $\psi$  и  $\delta$  на углы  $\varphi$  и  $\theta$ , определяющие вектор c в глобальной системе координат:

$$w = A \cdot w_{loc}, \quad w_{loc} \equiv \{x, y, z\}^T.$$

Тогда

$$w_x = \cos\theta\cos\varphi \, x - \sin\varphi \, y + \sin\theta\cos\varphi \, z.$$

В новой системе вектор  $c = \{0, 0, |c|\}^T$ , а длины векторов и элемент трехмерного интегрирования не изменятся.

Вычисляя с помощью перехода в цилиндрическую систему координат

$$\int \int \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \ e^{-x^2 - y^2 - (|c| - z)^2} dx dy dz =$$
  
= 
$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} r^2 \cos^2 \phi \sqrt{r^2 + z^2} \ e^{-r^2 - (|c| - z)^2} d\phi r dr dz =$$
  
= 
$$\pi \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(|c| - z)^2} \int_{0}^{\infty} r^2 \sqrt{r^2 + z^2} \ e^{-r^2} r dr dz \qquad (1.23)$$

Рассмотрим

$$I = \int_{0}^{\infty} r^{2} \sqrt{r^{2} + z^{2}} e^{-r^{2}} r dr =$$
  
=  $\frac{1}{2} \int_{0}^{\infty} \rho \sqrt{\rho + z^{2}} e^{-\rho} d\rho,$  (1.24)

где

$$\rho = r^2.$$

Сделаем замену переменных:

$$\sqrt{\rho + z^2} \equiv \alpha,$$

тогда

$$\rho = \alpha^2 - z^2, \ d\rho = 2\alpha d\alpha,$$

a

$$I = \frac{1}{2} \int_{|z|}^{\infty} (\alpha^{2} - z^{2}) \alpha e^{-\alpha^{2} + z^{2}} 2\alpha d\alpha =$$

$$= \frac{1}{2} e^{z^{2}} \left[ \int_{|z|}^{\infty} \alpha^{3} e^{-\alpha^{2}} d\alpha^{2} - z^{2} \int_{|z|}^{\infty} \alpha e^{-\alpha^{2}} d\alpha^{2} \right] =$$

$$= \frac{1}{2} e^{z^{2}} \left[ -|z|^{3} e^{-z^{2}} - \frac{3}{2} (-|z| e^{-z^{2}} - (-|z| e^{$$

Осталось проинтегрировать:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} \cos^{2} \phi \ e^{-(|c|-z)^{2}} \ I \ d\phi dz =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\pi}{4} \ [3|z| +$$

$$+ \frac{1}{2} e^{z^{2}} (\frac{3}{2} - z^{2}) \int_{|z|}^{\infty} e^{-\alpha^{2}} d\alpha ] e^{-(|c|-z)^{2}} dz =$$

$$= \frac{\pi}{4} (3I_{1} + I_{2}), \qquad (1.26)$$

где

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} |z| e^{-(|c|-z)^2} dz, \qquad (1.27)$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} e^{z^2} (\frac{3}{2} - z^2) (\int_{|z|}^{\infty} e^{-\alpha^2} d\alpha) \ e^{-(|c|-z)^2} dz.$$
(1.28)

Рассмотрим

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} |z| e^{-(|c|-z)^2} dz = -\int_{-\infty}^{0} z e^{-(|c|-z)^2} dz + \int_{0}^{\infty} z e^{-(|c|-z)^2} dz.$$

Положим  $z - |c| \equiv u$ , тогда

$$I_{1} = -\int_{-\infty}^{|c|} (u+|c|)e^{-u^{2}}du + \int_{-|c|}^{\infty} (u+|c|)e^{-u^{2}}du =$$
$$= 2\int_{|c|}^{\infty} ue^{-u^{2}} + \int_{-|c|}^{|c|} (u+|c|)e^{-u^{2}}du =$$
$$e^{-c^{2}} + \sqrt{\pi}|c|\operatorname{erf}(|c|).$$
(1.29)

#### Далее рассмотрим

$$I_{2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} e^{z^{2}} (\frac{3}{2} - z^{2}) (\int_{|z|}^{\infty} e^{-\alpha^{2}} d\alpha) e^{-(|c|-z)^{2}} dz =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} (\frac{3}{2} - z^{2}) (\int_{|z|}^{\infty} e^{-\alpha^{2}} d\alpha) e^{(2|c|z-c^{2})} dz =$$

$$= \frac{1}{2} e^{-c^{2}} \int_{0}^{\infty} e^{-\alpha^{2}} (\int_{-\alpha}^{\alpha} (\frac{3}{2} - z^{2}) e^{2|c|z} dz) d\alpha =$$

$$= \frac{1}{2} e^{-c^{2}} \int_{0}^{\infty} e^{-\alpha^{2}} (\int_{-\alpha}^{\alpha} \frac{3}{2} e^{2|c|z} dz + \int_{-\alpha}^{\alpha} -z^{2} e^{2|c|z} dz) d\alpha.$$
(1.30)



$$\int_{-\alpha}^{\alpha} \frac{3}{2} e^{2|c|z} dz = \frac{3}{2} \frac{1}{2|c|} e^{2|c|z} dz \Big|_{-\alpha}^{\alpha} = \frac{3}{4|c|} (e^{2|c|\alpha} - e^{-2|c|\alpha})$$
(1.31)

(1.32)

$$\begin{split} &-\int_{-\alpha}^{\alpha} z^{2} e^{2|c|z} dz = -\frac{1}{2|c|} (z^{2} e^{2|c|z}|_{-\alpha}^{\alpha} - \int_{-\alpha}^{\alpha} e^{2|c|z} 2z dz) = \\ &= -\frac{1}{2|c|} (\alpha^{2} (e^{2|c|\alpha} - e^{-2|c|\alpha}) - \frac{1}{|c|} \int_{-\alpha}^{\alpha} z de^{2|c|z}) = \\ &-\frac{1}{2|c|} (\alpha^{2} (e^{2|c|\alpha} - e^{-2|c|\alpha})) + \frac{1}{|c|} (\alpha (e^{2|c|\alpha} - e^{-2|c|\alpha})) - \\ &-\frac{1}{2|c|} (e^{2|c|\alpha} - e^{-2|c|\alpha}))) = -\frac{\alpha^{2}}{2|c|} \left( e^{2|c|\alpha} - e^{-2|c|\alpha} \right) + \\ &+\frac{\alpha}{2|c|^{2}} \left( e^{2|c|\alpha} + e^{-2|c|\alpha} \right) - \frac{1}{4|c|^{3}} \left( e^{2|c|\alpha} - e^{-2|c|\alpha} \right) \end{split}$$

Из (1.31) и (1) получаем:

$$I_{2} = \frac{1}{2}e^{-c^{2}} \int_{0}^{\infty} e^{-\alpha^{2}} \left( \frac{3}{4|c|} \left( e^{2|c|\alpha} - e^{-2|c|\alpha} \right) - \frac{\alpha^{2}}{2|c|} \left( e^{2|c|\alpha} - e^{-2|c|\alpha} \right) + \frac{\alpha}{2|c|^{2}} \left( e^{2|c|\alpha} + e^{-2|c|\alpha} \right) - \frac{1}{4|c|^{3}} \left( e^{2|c|\alpha} - e^{-2|c|\alpha} \right) \right) d\alpha$$

$$(1.33)$$

Подставляя (1.10) - (1.15) в (1.33) получим:

$$I_2 = \frac{\sqrt{\pi}}{2|c|} \operatorname{erf}(|c|)(4 - c^2 - \frac{1}{c^2}) + e^{-c^2}(\frac{1}{|c|} - 3).$$
(1.34)

Подставляя (1.29) и (1.34) в (1.26), имеем:

$$\int \int \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \ e^{-x^2 - y^2 - (|c| - z)^2} dx dy dz = \frac{\pi}{4} \left[ \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(|c|)(2|c| + \frac{2}{|c|} - \frac{1}{2|c|^3}) + e^{-c^2}(2 + \frac{2}{c^2}) \right]$$
(1.35)

Рассмотрим теперь

$$\int \int \int_{-\infty}^{\infty} z^2 \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \ e^{-x^2 - y^2 (|c| - z)^2} dx dy dz =$$

Вновь перейдем в целиндрическую систему координат

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} z^{2} \sqrt{r^{2} + z^{2}} e^{-r^{2} - (|c| - z)^{2}} r dr d\phi dz.$$
(1.36)

Рассмотрим

$$I = \int_0^\infty \sqrt{r^2 + z^2} e^{-r^2} r dr = \frac{1}{2} \int_0^\infty \sqrt{\rho + z^2} e^{-\rho} d\rho,$$

где  $\rho = r^2$ . Положим  $\sqrt{\rho + z^2} = u$ , тогда  $\rho = u^2 - z^2$ , а  $d\rho = 2udu$ 

$$I = \frac{1}{2}e^{z^2} \int_{|z|}^{\infty} u e^{-u^2} 2u du = \frac{1}{2}e^{z^2} (|z|e^{-z^2} + \int_{|z|}^{\infty} e^{-u^2} du)$$

Теперь осталось проинтегрировать

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(z-|c|)^2} z^2 \left( \frac{1}{2} e^{z^2} (|z|e^{-z^2} + \int_{|z|}^{\infty} e^{-u^2} du) \right) dz =$$
  
=  $I_3 + I_4,$  (1.37)

где

$$I_{3} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(z-|c|)^{2}} z^{2} \frac{1}{2} e^{z^{2}} |z| e^{-z^{2}} dz$$
  
$$= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(z-|c|)^{2}} |z|^{3} dz = \frac{1}{2} (I_{+} + I_{-})$$
(1.38)

И

$$I_4 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(z-|c|)^2} z^2 \frac{1}{2} e^{z^2} (\int_{|z|}^{\infty} e^{-u^2} du) dz.$$
(1.39)

$$I_{+} = \int_{0}^{\infty} e^{-(z-|c|)^{2}} z^{3} dz =$$

вспоминая (1.9)

$$= \int_{-|c|}^{\infty} e^{-\beta^{2}} (\beta + |c|)^{3} d\beta =$$

$$= \int_{-|c|}^{\infty} e^{-\beta^{2}} \beta (\beta + |c|)^{2} d\beta + |c| \int_{-|c|}^{\infty} e^{-\beta^{2}} (\beta + |c|)^{2} d\beta =$$

$$= -\frac{1}{2} e^{-\beta^{2}} (\beta + |c|)^{2} \Big|_{-|c|}^{\infty} - \int_{-|c|}^{\infty} e^{-\beta^{2}} (\beta + |c|) d\beta +$$

$$+ |c| \int_{-|c|}^{\infty} e^{-\beta^{2}} (\beta + |c|)^{2} d\beta =$$

принимая во внимание (1.12), (1.14) получим:

$$=e^{-c^{2}}\frac{1}{2}(1+c^{2})+\left(-\frac{3}{2}|c|-|c|^{3}\right)\int_{-|c|}^{\infty}e^{-\beta^{2}}d\beta$$
(1.40)

Аналогичным образом, принимая во внимание (1.9), (1.13) и (1.15)

$$I_{-} = \int_{0}^{\infty} e^{-(z-|c|)^{2}} z^{3} dz +$$
  
=  $e^{-c^{2}} \frac{1}{2} (1+c^{2}) + (\frac{3}{2}|c|+|c|^{3}) \int_{|c|}^{\infty} e^{-\gamma^{2}} d\gamma$  (1.41)

Подставляя (1.40), (1.41) в (1.38), получим:

$$I_{3} = 2\left(\frac{3}{2}|c| + |c|^{3}\right) \int_{0}^{|c|} e^{-\beta^{2}} d\beta + 2e^{-c^{2}} + \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(|c|)\left(\frac{3}{2}|c| + |c|^{3}\right) + 2e^{-c^{2}}$$
(1.42)

Поменяв порядок интегрирование в *I*<sub>4</sub> (1.39) получим:

$$I_{4} = e^{-c^{2}} \int_{0}^{\infty} e^{-u^{2}} \left( \int_{-u}^{u} \frac{1}{2} z^{2} e^{|c|z} dz \right) du =$$

$$e^{-c^{2}} \int_{0}^{\infty} \frac{1}{2} \left( \left( \frac{\alpha^{2}}{2|c|} \left( e^{2|c|\alpha} - e^{-2|c|\alpha} \right) \right) - \frac{\alpha}{2|c|^{2}} \left( e^{2|c|\alpha} + e^{-2|c|\alpha} \right) + \frac{1}{4|c|^{3}} \left( e^{2|c|\alpha} - e^{-2|c|\alpha} \right) \right) du =$$
(1.43)

вспоминая (1.10)-(1.15),

$$\frac{1}{2|c|} \left( e^{-c^2} (|c| - \frac{1}{|c|}) + \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(|c|) (c^2 - \frac{1}{2} + \frac{1}{2c^2}) \right)$$

Складывая (1.42) и (1.43), получаем:

$$\int \int \int_{-\infty}^{\infty} z^2 \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \ e^{-x^2 - y^2 (|c| - z)^2} dx dy dz =$$
  
=  $\left[ \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(|c|) (|c|^3 + 2|c| - \frac{1}{4|c|} + \frac{1}{4|c|^3}) + e^{-c^2} (c^2 + 3/2 - \frac{1}{2c^2}) \right],$  (1.44)

откуда следует выражение для  $\sigma_{xx}^2$ . Компонента  $\sigma_{xy}^2$  и другие компоненты матрицы диффузии вычисляются совершенно аналогично.

Итак, при малых чисел Кнудсена для газа из твердых сфер (в приближении, когда при вычислении вектора "сноса"**а** и матрицы "диффузии"  $\sigma^2$  в пространстве скоростей делается упрощение в виде локальной максвелловости и изотропности по тепловой скорости **с** функции распределения  $\lambda_t$  внутри соответствующих пятикратных интегралов), эти коэффициенты в уравнениях (1.1),(1.2) получаются в следующем виде:
$$\mathbf{a}(\mathbf{c}) = -\frac{\mathbf{c}}{c} n' T'^{1/2} \frac{\sqrt{\pi}}{4} [\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(c)(2c^2 + 2 - \frac{1}{2c^2}) + e^{-c^2}(2c + \frac{1}{c})], \qquad (1.45)$$

$$\sigma_{xx}^{2}(c) = n'T'^{3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{4} [P(c) + c_{x}^{2}S(c)],$$

$$\sigma_{xy}^{2}(c) = n'T'^{3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{4} c_{x}c_{y}S(c),$$

$$P(c) = \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(c) (\frac{c^{3}}{3} + \frac{3}{2}c + \frac{3}{4c} - \frac{1}{8c^{3}}) + e^{-c^{2}}(\frac{c^{2}}{3} + \frac{4}{3} + \frac{1}{4c^{2}}),$$

$$S(c) = \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(c) (c + \frac{3}{2c} - \frac{3}{4c^{3}} + \frac{3}{8c^{5}}) + e^{-c^{2}}(1 + \frac{1}{c^{2}} - \frac{3}{4c^{4}});$$

$$(1.46)$$

остальные элементы ковариационной матрицы  $\sigma^2(\lambda_t)$  выглядят аналогично приведенным.  $\sigma^2$  зависит от  $\lambda_t$ , потому что **с** зависит от  $\lambda_t$ . В выражениях для **а** и  $\sigma^2$  обозначено (это будет ясно из дальнейшего):  $c \equiv c'/\sqrt{T'}$ , где n', c' и T' – безразмерные числовая плотность, тепловая скорость и температура.



Рис. 1.1: Безразмерные коэффициенты (n' = 1, T = 1) a(|c|) и  $\sigma_{xx}(|c|)$  в предположении о локальной максвелловости функции распределения.

Приведенные соображения показывают, что система стохастических дифференциальных уравнений (1.1) или уравнение в частных производных (1.2) могут служить вполне приемлемой (как с точки зрения убедительности ее вывода, так и с точки зрения вычислительной сложности) моделью уравнения Больцмана при малых числах Кнудсена и быть использованы в численном моделировании.

### Глава 2

### Линейная задача о пространственно однородной релаксации в сферической системе координат

Итак, 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.

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 [28, 87, 27].

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

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial (\mathbf{a}(c)F(c))}{\partial \mathbf{v}} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 (\sigma^2(c)F(c))}{\partial \mathbf{v}^2}$$
(2.1)

Где вектор **a** и матрица  $\sigma^2$  выписаны в (1.45). В данной постановке отсутствует множитель  $\frac{1}{Kn}$ , который просто линейно внесен в переменную t.

Поскольку *F*, *P*, *S* и *а* зависит от модуля тепловой скорости, удобно перейти в сферическую систему координат.

Сначала рассмотрим член

$$\frac{\partial^2(\sigma^2 F)}{\partial \mathbf{v}^2} = \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial^2(\sigma_{ij}^2 F)}{\partial v_i \partial v_j}.$$
(2.2)

Переобозначим  $v_1 = c_x = x, v_2 = c_y = y, v_3 = c_z = zc = r$ , тогда

$$F = F(r); \ P = P(r); \ S = S(r);$$

$$\frac{\partial^2(\sigma_{11}^2 F)}{\partial v_1 \partial v_1} = \frac{\partial^2(\sigma_{xx}^2 F)}{\partial x^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{4} \left[ \frac{\partial^2((P(c) + x^2 S(c))F)}{\partial x^2} \right]$$
(2.3)

с учетом (1.4)

Сделаем стандартную замену переменных для перехода в сферическую систему координат:

$$x = r \sin \theta \cos \phi;$$
  

$$y = r \sin \theta \sin \phi;$$
  

$$z = r \cos \theta.$$
  
(2.4)

Соответственно:

$$r = \sqrt{x^{2} + y^{2} + z^{2}}; \quad \theta = \arctan(y(\frac{\sqrt{x^{2} + y^{2}}}{z}))$$

$$\phi = \arctan(y(\frac{y}{x}));$$

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \sin \theta \cos \phi; \quad \frac{\partial r}{\partial y} = \sin \theta \sin \phi;$$

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \cos \theta;$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{\cos \theta \cos \phi}{r}; \quad \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\cos \theta \sin \phi}{r};$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{-\sin \theta}{r};$$

$$\frac{\partial^{2} r}{\partial x^{2}} = \frac{1 - \sin^{2} \theta \cos^{\phi}}{r}; \quad \frac{\partial^{2} r}{\partial y^{2}} = \frac{1 - \sin^{2} \theta \sin^{2} \phi}{r};$$

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \frac{1 - \cos^{2} \theta}{r};$$

$$\frac{\partial^{2} r}{\partial z^{2}} = -\frac{\sin^{2} \theta \sin \phi \cos \phi}{r}; \quad \frac{\partial^{2} r}{\partial x \partial z} = -\frac{\sin \theta \cos \theta \cos \phi}{r};$$

$$\frac{\partial^{2} r}{\partial y \partial z} = -\frac{\sin \theta \cos \theta \sin \phi}{r}.$$
(2.5)

$$\frac{\partial^2 ((P(c) + x^2 S(c))F)}{\partial x^2} = \underbrace{\frac{\partial^2 PF}{\partial x^2}}_{D_1} + \underbrace{\frac{\partial^2 x^2 SF}{\partial x^2}}_{D_2}.$$

Обозначим PF = G; SF = H, тогда:

$$D_{1} = \frac{\partial^{2}G(r)}{\partial x^{2}} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial G}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} \right)$$
$$= \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial G}{\partial r} \right) \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial r} \frac{\partial^{2} r}{\partial x^{2}}$$
$$= \frac{\partial^{2}G}{\partial r^{2}} \left( \frac{\partial r}{\partial x} \right)^{2} + \frac{\partial G}{\partial r} \frac{\partial^{2} r}{\partial x^{2}}, \qquad (2.6)$$

$$D_{2} = \frac{\partial^{2} x^{2} H(r)}{\partial x^{2}} = x^{2} \frac{\partial^{2} H}{\partial x^{2}} + 4x \frac{\partial H}{\partial x} + 2H =$$

$$x^{2} \left( \frac{\partial^{2} H}{\partial r^{2}} \left( \frac{\partial r}{\partial x} \right)^{2} + \frac{\partial H}{\partial r} \frac{\partial^{2} r}{\partial x^{2}} \right) + 4x \left( \frac{\partial H}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} \right) + 2H$$

$$= \frac{\partial^{2} H}{\partial r^{2}} \left( x^{2} \left( \frac{\partial r}{\partial x} \right)^{2} \right) + \left( x^{2} \frac{\partial^{2} r}{\partial x^{2}} + 4x \frac{\partial r}{\partial x} \right) + 2H, \qquad (2.7)$$

$$\frac{\partial^{2} (xyH(r))}{\partial x \partial y} = xy \frac{\partial^{2}H}{\partial x \partial y} + y \frac{\partial H}{\partial y} + x \frac{\partial H}{\partial x} + H$$

$$= xy \left( \frac{\partial^{2}H}{\partial r^{2}} \left( \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial r}{\partial x} \right) + \frac{\partial H}{\partial r} \frac{\partial^{2}r}{\partial x \partial y} \right)$$

$$+ y \left( \frac{\partial H}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial y} \right) + x \left( \frac{\partial H}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} \right) + H$$

$$= \frac{\partial^{2}H}{\partial r^{2}} \left( xy \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial r}{\partial x} \right) + H.$$

$$\frac{\partial H}{\partial r} \left( y \frac{\partial r}{\partial y} + xy \frac{\partial^{2}r}{\partial x \partial y} + x \frac{\partial r}{\partial x} \right) + H.$$
(2.8)

Остальные члены (2.2) получаются аналогично. Таким образом, используя

(2.5), получаем в коэффициенты перед

*H* будет 12;

перед 
$$\frac{\partial H}{\partial r}$$
 будет  $8\left(x\frac{\partial r}{\partial x} + y\frac{\partial r}{\partial y} + z\frac{\partial r}{\partial z}\right) + \left(x^2\frac{\partial^2 r}{\partial x^2} + y^2\frac{\partial^2 r}{\partial y^2} + z^2\frac{\partial^2 r}{\partial z^2} + 2xy\frac{\partial^2 r}{\partial x\partial y} + 2xz\frac{\partial^2 r}{\partial x\partial z} + 2yz\frac{\partial^2 r}{\partial y\partial z}\right)$   
=  $8r;$ 

перед 
$$\frac{\partial^2 H}{\partial r^2}$$
 будет  
 $x^2 \left(\frac{\partial r}{\partial x}\right)^2 + y^2 \left(\frac{\partial r}{\partial y}\right)^2 + z^2 \left(\frac{\partial r}{\partial z}\right)^2 + 2xy \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial r}{\partial y} + 2xz \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial r}{\partial z} + 2yz \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial r}{\partial z} = \left(x \frac{\partial r}{\partial x} + y \frac{\partial r}{\partial y} + z \frac{\partial r}{\partial z}\right)^2 = r^2;$ 

перед 
$$\frac{\partial G}{\partial r}$$
 будет  $\left(\frac{\partial^2 r}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 r}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 r}{\partial z^2}\right) = \frac{2}{r};$ 

перед 
$$\frac{\partial^2 G}{\partial r^2}$$
 будет  $\left( \left( \frac{\partial r}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial r}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial r}{\partial z} \right)^2 \right) = 1.$  (2.9)

Собирая все вместе получим:

$$\sum_{i,j=1}^{3} \frac{\partial^2 (\sigma_{ij}^2(F)F)}{\partial v_i \partial v_j} = 12H + 8r \frac{\partial H}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2 H}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial G}{\partial r} + \frac{\partial^2 G}{\partial r^2} = \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial^2 (Hr^4)}{\partial r^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial G}{\partial r} \right) \right) = \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial^2 (SFr^4)}{\partial r^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial PF}{\partial r} \right) \right).$$
(2.10)

Теперь рассмотрим член

$$\frac{\partial(a\mathbf{c}F)}{\partial\mathbf{v}} = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial(c_i aF)}{\partial c_i}.$$
(2.11)

Введем те же обозначения, что и при рассмотрении предыдущего члена:

$$\frac{\partial(c_1 a F)}{\partial v_1} = \frac{\partial(x a F)}{\partial x} = \frac{\partial(x a F)}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial(x a F)}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial(x a F)}{\partial \psi} \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

Учитывая, что а и F зависят только от r,

$$= \left(aF\frac{\partial r}{\partial x} + x\frac{\partial aF}{\partial r}\right)\frac{\partial r}{\partial x} + aF\frac{\partial x}{\partial \theta}\frac{\partial \theta}{\partial x} + aF\frac{\partial x}{\partial \psi}\frac{\partial \psi}{\partial x}.$$

Остальные члены суммы(2.11) выписываются аналогичным образом. Запишем коэффициенты при aF и  $\frac{\partial aF}{\partial r}$ , с учетом (2.5):

$$aF: \left(\frac{\partial x}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial x}{\partial \theta}\frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial x}{\partial \psi}\frac{\partial \psi}{\partial x}\right) + \left(\frac{\partial y}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial y}{\partial \theta}\frac{\partial \theta}{\partial y} + \frac{\partial y}{\partial \psi}\frac{\partial \psi}{\partial y}\right) \\ + \left(\frac{\partial z}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial z} + \frac{\partial z}{\partial \theta}\frac{\partial \theta}{\partial z} + \frac{\partial z}{\partial \psi}\frac{\partial \psi}{\partial z}\right) = 3;$$

$$\frac{\partial aF}{\partial r}: x\frac{\partial r}{\partial x} + y\frac{\partial r}{\partial y} + z\frac{\partial r}{\partial z} = r.$$

Таким образом, получим, что сумма (2.11) равна

$$3aF + r\frac{\partial aF}{\partial r} = \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial(r^3 aF)}{\partial r}\right). \tag{2.12}$$

Учитывая представления (2.10) и (2.12), пространственно однородное уравнение Колмогорова-Фоккера-Планка (2.1) в сферических координатах примет вид:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{1}{Kn} \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial (r^3 a F)}{\partial r} - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 (r^4 S F)}{\partial r^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial (PF)}{\partial r} \right) \right) \right) = 0$$
(2.13)

Возникает вопрос о том, как выглядит стационарное решение уравнения (3.15):

$$\frac{\partial(r^3 aF)}{\partial r} - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2(r^4 SF)}{\partial r^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial(PF)}{\partial r} \right) \right) = 0$$
(2.14)

Проинтегрируем это уравнение по переменной r, учитывая, что молекул с бесконечно большой скорость нет, то F будет стремится к 0 на бесконечности, следовательно константа при интегрировании C = 0.

$$r^{3}aF - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial(r^{4}SF)}{\partial r} + r^{2}\frac{\partial(PF)}{\partial r}\right) + C = 0$$

Еще одним важным свойством стационарного решения, помимо стремления к нулю на бесконечности, будет равенство нулю второй производной в начале координат. раздифференцировав, получим:

$$\frac{\partial F}{\partial r} = F \frac{2ar^3 - r^2 \frac{\partial P}{\partial r} - 4r^3 S - 2r^4 \frac{\partial S}{\partial r}}{P + r^4 S} = \lambda F$$
(2.15)

Так будет выглядеть коэффициент  $\lambda$ ,график хорошо отражает свойства решения, описанные выше:

Рассмотрим задачу Коши:

$$\begin{cases} F'(r) = \lambda(r)F(r); \\ F(0) = const. \end{cases}$$
(2.16)

Ниже приведено решение, полученное неявным методом Эйлера, в сравнении с соответствующим максвеллианом.



Рис. 2.1:  $\lambda$ 

Теперь рассмотрим нестационарную задачу для начального распределения в форме "горба; отнесенного от начала координат:

$$\begin{aligned} r^3 aF & -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial (r^4 SF)}{\partial r} + r^2 \frac{\partial (PF)}{\partial r} \right) = 0, x \in [0, l]; \\ F(x, 0) &= 0.4 * exp(-10 * (x - 1)^2); \\ F'(t, 0) &= 0; \\ F(t, l) &= 0. \end{aligned}$$



Рис. 2.2: Стационарное решение



Рис. 2.3: Эволюция "одногорбого" начального распределения к стационарному решению а) полученная в расчетах , б) полученная в [28]

# Пространственно – однородная релаксация для модели в форме системы стохастических дифференциальных уравнений с упрощенными коэффициентами

Глава 3

В этой главе мы будем рассматривать задачу о пространственно – однородной релаксации, но уже в трехмерной постановке, и использовать для ее решения стохастический метод частиц.

Прежде чем переходить к описанию алгоритма численного решения системы (1.1), покажем связь между системой СДУ с уравнением в частных производ-

ных (1.2).

Покажем, что процесс  $\{x_1(t), v_1(t)\}$ , протекающий в фазовом пространстве и описываемый (1.1), порождает меру  $\lambda_t(dx, dv)$ , плотность F(x, v, t) которой удовлетворяет уравнению типа уравнения Колмогорова – Фоккера – Планка [18]:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial V_i F}{\partial x_i} - \frac{1}{Kn} \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial (a_i(F)(v_i - V_i)F)}{\partial v_i}$$
$$= \frac{1}{Kn} \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3} \frac{\partial^2 (\sigma_{ij}^2(F)F)}{\partial v_i \partial v_j}$$
$$+ \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3} \left[ \frac{\partial^2 (a^{-1}\sqrt{Kn}\widetilde{\sigma})_{ij}^2 F}{\partial x_i \partial x_j} + 2 \frac{\partial^2 (a^{-1}\widetilde{\sigma})_{ij}\sigma_{ji}F}{\partial x_i \partial v_j} \right], \qquad (3.1)$$

где последние два члена в правой части малы по Kn по сравнению с первым, и при малых Kn ими можно пренебречь.

Сначала мы должны построить уравнение случайной для меры  $\lambda_t(dx, dv)$  в шестимерном фазовом пространстве, которая генерируется случайным процессом  $\{x_1(t), v_1(t)\}$  (обозначим его через z(t)), протекающим в нашем фазовом пространстве. Эта мера  $\lambda_t(dz)$  имеет смысл вероятности пребывания молекулы в элементе dz фазового пространства или количества находящихся в нем молекул в данный момент времени.

Число молекул, находящихся в области  $D \times \mathbf{R}^3$ , выражается через интеграл по мере:

$$\frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N}\chi(z_{l}(t)\in D\times\mathbf{R}^{3})=\int_{D\times\mathbf{R}^{3}}\lambda_{t}dz,$$

где  $\chi$  – характеристическая функция. Общее число молекул в системе N можно рассматривать как число реализаций случайного процесса z(t), представляю-

щего собой решение системы (1.1).

Ограничимся задачей Коши. Определим стохастическую эмпирическую меру  $\lambda_t(dz)$  соотношением: для любой функции  $\psi \in C_b^{(2)}(\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^3)$  (пространству дважды непрерывно дифференцируемых финитных функций в фазовом пространстве)

$$\int \psi(z)\lambda_t(dz) = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \psi(z_l(t)).$$
(3.2)

Это выражение, связывающее распределение меры с реализациями положений частиц в фазовом пространстве в момент времени *t*, является, если читать ее слева направо, квадратурной формулой Чебышева (веса  $\frac{1}{N}$  известны, узлы – параметры, подлежащие определению).

Чтобы получить уравнение для меры  $\lambda_t(dz)$ , возьмем стохастический дифференциал от обеих частей (3.2).

Для этого воспользуемся формулой Ито дифференцирования сложной функции

$$d\psi(z) = \sum_{m=1}^{6} \frac{\partial\psi}{\partial z_m} dz_m + \frac{1}{2} \sum_{m,n=1}^{6} \frac{\partial^2\psi}{\partial z_m \partial z_j} dz_m dz_n, \qquad (3.3)$$

где стохастические дифференциалы  $dz_m$  берутся из системы (1.1):

$$dx_{i} = V_{i}dt + \sqrt{Kn}\sum_{j=1}^{3} \frac{\tilde{\sigma}_{ij}}{a}dw_{j}, \qquad (i = 1, 2, 3),$$
  
$$dv_{i} = -\frac{a}{Kn}(v_{i} - V_{i})dt + \frac{1}{\sqrt{Kn}}\sum_{j=1}^{3} \sigma_{ij}dw_{j}, \qquad (i = 1, 2, 3),$$

ИЛИ

$$dz_m = a_m dt + \sum_{n=1}^{6} b_{mn} dw_n, \qquad (1 \le m \le 6), \tag{3.4}$$

где

$$a_{m} \equiv V_{m}, \ (1 \leq m \leq 3),$$

$$a_{m} \equiv -\frac{1}{Kn}(v_{m-3} - V_{m-3}), \ (4 \leq m \leq 6),$$

$$b_{mn} \equiv \sqrt{Kn} \frac{\tilde{\sigma}_{mn}}{a}, \ (1 \leq m, n \leq 3),$$

$$b_{mn} \equiv \frac{1}{\sqrt{Kn}} \sigma_{m-3,n-3}, \ (4 \leq m, n \leq 6),$$

$$b_{mn} = 0, \quad (1 \leq m \leq 3; 4 \leq n \leq 6) or(4 \leq m \leq 6; 1 \leq n \leq 3).$$

По определению прираращения стандартного трехмерного винеровского процесса, малость которого есть  $\sqrt{dt}$ , для получения формулы Ито используется такое правило [25]:

$$dw_i dw_j = \delta_{ij} dt, \qquad dw_i dt = 0, \qquad dt^2 = 0, \qquad (3.5)$$

 $\delta_{ij}$  – символ Кронекера. Тогда

$$dz_m dz_n = \left(\sum_{k=1}^{6} b_{mk} dw_k\right) \left(\sum_{l=1}^{6} b_{nl} dw_l\right) = \sum_{k,l=1}^{6} b_{mk} b_{nl} \delta_{kl} dt$$
$$= \sum_{k=1}^{6} b_{mk} b_{nk} dt = b_{mn}^2 dt,$$

а элементы матрицы  $b^2$  выражаются следующим образом:

$$b_{mn}^{2} = Kn \frac{\widetilde{\sigma}_{mn}^{2}}{a^{2}}, \ (1 \le m, n \le 3),$$
  
$$b_{mn}^{2} = \frac{1}{\sqrt{Kn}} \sigma_{m-3,n-3}^{2}, \ (4 \le m, n \le 6),$$
  
$$b_{mn}^{2} = \frac{\widetilde{\sigma}_{m,n-3}^{2}}{a}, \ (1 \le m \le 3; 4 \le n \le 6)$$
  
$$b_{mn}^{2} = \frac{\widetilde{\sigma}_{m-3,n}^{2}}{a} \ (4 \le m \le 6; 1 \le n \le 3).$$

Следовательно, формула Ито получается в виде

$$d\psi(z) = \left(\sum_{m=1}^{6} a_m \frac{\partial \psi}{\partial z_m} + \frac{1}{2} \sum_{m,n=1}^{6} b_{mn}^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_m \partial z_n}\right) dt + \sum_{m,n=1}^{6} b_{mn} \frac{\partial \psi}{\partial z_m} dw_n.$$
(3.6)

Если вернуться к обозначению точки фазового пространства через (x, v) вместо z, то получим:

$$d\psi(x,v) = \sum_{i=1}^{3} \left( V_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} - \frac{a}{Kn} (v_i - V_i) \frac{\partial \psi}{\partial v_i} \right) dt$$
$$+ \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3} \left( Kn \frac{\widetilde{\sigma}_{ij}^2}{a^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i \partial x_j} + 2 \frac{\widetilde{\sigma}_{ij} \sigma_{ji}}{a} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i \partial v_j} + \frac{1}{Kn} \sigma_{ij}^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial v_i \partial v_j} \right) dt$$
$$+ \sum_{i,j=1}^{3} \left( \sqrt{Kn} \frac{\widetilde{\sigma}_{ij}}{a} \frac{\partial \psi}{\partial x_i} + \frac{1}{\sqrt{Kn}} \sigma_{ij} \frac{\partial \psi}{\partial v_i} \right) dw_j.$$

Тогда получим стохастический дифференциал от обеих частей (3.2):

$$\begin{split} d\int \psi(x,v)\lambda_t(dx,dv) \\ &= \frac{1}{N}\sum_{l=1}^N \left( \left[ \sum_{i=1}^3 \left( V_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} - \frac{a}{Kn} (v_i - V_i) \frac{\partial \psi}{\partial v_i} \right) \right] \\ &+ \left[ \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^3 \left( Kn \frac{\widetilde{\sigma}_{ij}^2}{a^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i \partial x_j} + 2 \frac{\widetilde{\sigma}_{ij} \sigma_{ji}}{a} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i \partial v_j} + \frac{1}{Kn} \sigma_{ij}^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial v_i \partial v_j} \right) \right] \\ &\quad (x_l(t))dt \\ &+ \frac{1}{N}\sum_{l=1}^N \left\{ \left[ \sum_{i,j=1}^3 \left( \sqrt{Kn} \frac{\widetilde{\sigma}_{ij}}{a} \frac{\partial \psi}{\partial x_i} + \frac{1}{\sqrt{Kn}} \sigma_{ij} \frac{\partial \psi}{\partial v_i} \right) \right] (x_l(t))dw_j \right\}, \end{split}$$

или, используя формулу (3.2) справа налево для правой части последнего выражения,

$$\begin{split} d\int \psi(x,v)\lambda_t(dx,dv) \\ &= \int (\left[\sum_{i=1}^3 \left(V_i\frac{\partial\psi}{\partial x_i} - \frac{a}{Kn}(v_i - V_i)\frac{\partial\psi}{\partial v_i}\right)\right]dt \\ &\quad + \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^3 (Kn\frac{\widetilde{\sigma}_{ij}^2}{a^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_i\partial x_j} \\ &\quad + 2\frac{\widetilde{\sigma}_{ij}\sigma_{ji}}{a}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_i\partial v_j} + \frac{1}{Kn}\sigma_{ij}^2\frac{\partial^2\psi}{\partial v_i\partial v_j})dt \\ &\quad + \left[\sum_{i,j=1}^3 \left(\sqrt{Kn}\frac{\widetilde{\sigma}_{ij}}{a}\frac{\partial\psi}{\partial x_i} + \frac{1}{\sqrt{Kn}}\sigma_{ij}\frac{\partial\psi}{\partial v_i}\right)\right]dw_j)\lambda_t(dx,dv), \end{split}$$

которое является обобщенным стохастическим уравнением Колмогорова – Фоккера – Планка.

Предположим существование плотности F(x, v, t) у стохастической эмпирической меры  $\lambda_t(dx, dv)$  и обращение в нуль F, vF и  $v^2F$  на границах нашей (бесконечной) области, тогда, проинтегрировав один и два раза по частям в соответствующих местах, получим:

$$d\int \psi(x,v)F(x,v,t)dxdv$$

$$= \int \psi(x,v) \left[ \left[ -\sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(V_{i}F\right) + \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial v_{i}} \left(\frac{a}{Kn}(v_{i}-V_{i})F\right) \right] dt$$

$$+ \left[ \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3} \left(\frac{\partial^{2}}{\partial x_{i}\partial x_{j}} \left(Kn\frac{\tilde{\sigma}_{ij}^{2}}{a^{2}}F\right) + \frac{2}{\partial x_{i}\partial v_{j}} \left(\frac{\tilde{\sigma}_{ij}\sigma_{ji}}{a}F\right) + \frac{\partial^{2}}{\partial v_{i}\partial v_{j}} \left(\frac{1}{Kn}\sigma_{ij}^{2}F\right) \right] dt$$

$$- \left[ \sum_{i,j=1}^{3} \left(\frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\sqrt{Kn}\frac{\tilde{\sigma}_{ij}}{a}F\right) + \frac{\partial}{\partial v_{i}} \left(\frac{1}{\sqrt{Kn}}\sigma_{ij}F\right) \right) \right] dw_{j} dxdv, \qquad (3.7)$$

справедливое для любой пробной функции  $\psi$ , откуда следует стохастическое уравнение Колмогорова – Фоккера – Планка в частных производных:

$$dF = \left[ -\sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_{i}} (V_{i}F) + \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial v_{i}} \left( \frac{a}{Kn} (v_{i} - V_{i})F \right) \right] dt \\ + \left[ \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3} \left( \frac{\partial^{2}}{\partial x_{i} \partial x_{j}} \left( Kn \frac{\widetilde{\sigma}_{ij}^{2}}{a^{2}}F \right) \right. \right. \\ \left. + 2 \frac{\partial^{2}}{\partial x_{i} \partial v_{j}} \left( \frac{\widetilde{\sigma}_{ij} \sigma_{ji}}{a}F \right) + \frac{\partial^{2}}{\partial v_{i} \partial v_{j}} \left( \frac{1}{Kn} \sigma_{ij}^{2}F \right) \right] dt \\ \left. - \left[ \sum_{i,j=1}^{3} \left( \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left( \sqrt{Kn} \frac{\widetilde{\sigma}_{ij}}{a}F \right) + \frac{\partial}{\partial v_{i}} \left( \frac{1}{\sqrt{Kn}} \sigma_{ij}F \right) \right) \right] dw_{j},$$

а усреднив по времени (взяв математическое ожидание и учитывая обращение в нуль математических ожиданий членов, содержащих  $dw_j$  ([25], теорема 3.2.1)) — детерминированное уравнение Колмогорова — Фоккера — Планка для усредненной по времени детерминированной функции распределения  $\overline{F}(x, v, t)$ :

$$\frac{\partial \overline{F}}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left( \overline{V_{i}F} \right) - \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial v_{i}} \left( \frac{\overline{a}}{Kn} (v_{i} - V_{i})F \right) \\
= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3} \left[ \frac{\partial^{2}}{\partial x_{i} \partial x_{j}} \left( Kn \frac{\overline{\sigma}_{ij}^{2}}{a^{2}}F \right) \right] \\
+ 2 \frac{\partial^{2}}{\partial x_{i} \partial v_{j}} \left( \frac{\overline{\sigma}_{ij} \sigma_{ji}}{a}F \right) + \frac{\partial^{2}}{\partial v_{i} \partial v_{j}} \left( \frac{1}{Kn} \overline{\sigma}_{ij}^{2}F \right) \right],$$
(3.8)

справедливое для малых чисел Кнудсена.

Законы сохранения являются важной частью системы с физической точки зрения, а также необходимо учитывать их наличие при конструировании численного метода, что в следующей главе окажется довольно важным. Покажем их выполнение для рассматриваемой модели.

Сохранение массы вытекает из уравнения (3.7), если положить  $\psi(x, v) \equiv 1$ :

$$\begin{split} d\int F(x,v,t)dxdv\\ = \int dx \int dv \Big( \left[ -\sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(V_{i}F\right) + \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial v_{i}} \left(\frac{a}{Kn}(v_{i}-V_{i})F\right) \right] dt\\ + \left[\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{3} \left(\frac{\partial^{2}}{\partial x_{i}\partial x_{j}} \left(Kn\frac{\widetilde{\sigma}_{ij}^{2}}{a^{2}}F\right) \right. \right. \\ \left. + 2\frac{\partial^{2}}{\partial x_{i}\partial v_{j}} \left(\frac{\widetilde{\sigma}_{ij}\sigma_{ji}}{a}F\right) + \frac{\partial^{2}}{\partial v_{i}\partial v_{j}} \left(\frac{1}{Kn}\sigma_{ij}^{2}F\right) \Big] dt\\ - \left[\sum_{i,j=1}^{3} \left(\frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\sqrt{Kn}\frac{\widetilde{\sigma}_{ij}}{a}F\right) + \frac{\partial}{\partial v_{i}} \left(\frac{1}{\sqrt{Kn}}\sigma_{ij}F\right) \right) \right] dw_{j} = 0, \end{split}$$

в силу дивергентного вида всех подынтегральных функций, а также их обращения в нуль на границах и существования всех повторных интегралов.

Получим закон сохранения импульса.

Для этого нам потребуется уравнение, описывающее его эволюцию. Коли-

чество движения газа, находящегося в рассматриваемой области, свяжем с векторной мерой  $\nu_t(dx, dv)$  следующим соотношением:  $\forall \psi(x, v) \in C_b^{(2)}(\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^3)$ 

$$\int \psi(x,v)\nu_{t,i}(dx,dv) = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^{N} v_{i,l}\psi(x_l(t),v_l(t)) \ (i=1,2,3).$$
(3.9)

Приведем схему доказательства на примере одномерной задачи:

$$\int \psi(x,v)\nu_t(dx,dv) = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N v_l \psi(x_l(t),v_l(t)).$$
(3.10)

Возьмем стохастический дифференциал от обеих частей этого равенства. По формуле дифференцирования произведения ([25])

$$d(v\psi) = vd\psi + \psi dv + dvd\psi,$$

из (1.1):

$$dx = Vdt + \sqrt{Kn}a^{-1}\tilde{\sigma}dw,$$
$$dv = -\frac{1}{Kn}a(v-V)dt + \frac{1}{\sqrt{Kn}}\sigma dw,$$

$$(dx)^{2} = Kn\frac{\tilde{\sigma}^{2}}{a^{2}}dt,$$
$$(dv)^{2} = \frac{1}{Kn}\sigma^{2}dt,$$
$$dxdv = \frac{\tilde{\sigma}\sigma}{a}dt,$$

а по формуле Ито (3.7)

$$\begin{aligned} d\psi &= \left( V \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{a}{Kn} (v - V) \frac{\partial \psi}{\partial v} \right) dt \\ &+ \frac{1}{2} \left( Kn \frac{\widetilde{\sigma}^2}{a^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + 2 \frac{\widetilde{\sigma} \sigma}{a} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial v} + \frac{1}{Kn} \sigma^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial v^2} \right) dt \\ &+ \left( \sqrt{Kn} \frac{\widetilde{\sigma}}{a} \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{1}{\sqrt{Kn}} \sigma \frac{\partial \psi}{\partial v} \right) dw, \end{aligned}$$

поэтому

$$\begin{split} d(v\psi) &= dt [v(\left(V\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{a}{Kn}(v-V)\frac{\partial\psi}{\partial v}\right) \\ &+ \frac{1}{2}\left(Kn\frac{\widetilde{\sigma}^2}{a^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + 2\frac{\widetilde{\sigma}\sigma}{a}\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial v} + \frac{1}{Kn}\sigma^2\frac{\partial^2\psi}{\partial v^2}\right)) \\ &- \frac{1}{Kn}a(v-V)\psi + \frac{\widetilde{\sigma}\sigma}{a}\frac{\partial\psi}{\partial x}] \\ &+ dw[\cdots]. \end{split}$$

Мы не выписываем члены при dw, потому что в дальнейшем они пропадут после осреднения по времени.

Тогда, после стохастического дифференцирования уравнения (3.9), использования квадратурной формулы (3.10) справа налево и предположения о существовании плотности vF(x, v, t) меры  $\nu_t(dx, dv)$ , обобщенное уравнение для импульса получится в виде:

$$\begin{split} d\int \psi(x,v)vF(x,v,t)dxdv\\ = dt\int dx\int dvF[v(\left(V\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{a}{Kn}(v-V)\frac{\partial\psi}{\partial v}\right)\right)\\ + \frac{1}{2}\left(Kn\frac{\tilde{\sigma}^2}{a^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + 2\frac{\tilde{\sigma}\sigma}{a}\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial v} + \frac{1}{Kn}\sigma^2\frac{\partial^2\psi}{\partial v^2}\right))\\ - \frac{1}{Kn}a(v-V)\psi + \frac{\tilde{\sigma}\sigma}{a}\frac{\partial\psi}{\partial x}]\\ + dw\int[\cdots], \end{split}$$

откуда, если проинтегрировать (в том числе, и нужное число раз по частям), положить  $\psi(x,v)\equiv 1$  и учесть, что

$$\int dv F \frac{a}{Kn} (v - V) = \int dv v F \frac{a}{Kn} - V \int dv F \frac{a}{Kn} = 0,$$

следует сохранение импульса.

Аналогично выводится закон сохранения энергии.

Определим меру  $\epsilon_t(dx, dv)$ :  $\forall \psi \in C_b^{(2)}(\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^3)$ 

$$\int \psi(x,v)\epsilon_t(dx,dv) = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \frac{v_l^2(t)}{2} \psi(x_l(t),v_l(t)).$$

Воспользуемся стохастической формулой дифференцирования произведения

$$d(\frac{v^2}{2}\psi) = \psi d(\frac{v^2}{2}) + \frac{v^2}{2}d\psi + d(\frac{v^2}{2})d\psi,$$

$$d(\frac{v^2}{2}) = vdv + \frac{1}{2}(dv)^2,$$

системой (1.1), формулой Ито (3.7) и соотношениями

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

Остальные выкладки проводятся так же, как и для массы или импульса. Они немного более громоздки.

Справедливость *H* – теоремы Больцмана в силу диффузионного вида интеграла столкновений также представляется не вызывающей сомнений.

Самым простым объектом для изучения рассматриваемой модели является задача о пространственно однородной релаксации [87], [28]. Нас будет интересовать стационарное решение. Эта задача не является в полном смысле тестовой, так как нас интересует асимптотика по Kn, а в пространственно однородной задаче Kn скрыт в масштабировании по времени. Для многомерных расчетов в фазовом пространстве решение системы СДУ является более приемлемым методом, нежели решение уравнения Колмогорова – Фоккера – Планка. Такой подход использован, например, в [63], [56], [10].

В пространственно однородном случае нам необходимо решить только второе уравнение из системы (1.1), которое, на самом деле, представляет из себя систему уравнений (напомним, что v(t) - трехмерный вектор):

$$dv(t) = -a(v(t))v(t)dt + \sigma(v(t))dw(t).$$
(3.11)

В этой системе отсутствует малый параметр Kn, т.к. он линейно внесен в независимую переменную t, макроскопическая скорость V, фигурирующая в (1.1), 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 (3.11). 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 (3.11). Для их решения воспользуемся простейшим (нас интересует лишь качественное отличие линейной и нелинейной задач) методом Эйлера - Маруямы:

$$v(t + \Delta t) = v(t) - a(v(t))\Delta t + \sigma(v(t))\Delta w, \qquad (3.12)$$

где  $\Delta w$  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:

$$\Delta w = (\eta_1, \eta_2, \eta_3). \tag{3.13}$$

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.

При вычислении матрицы  $\sigma = \sqrt{\sigma^2}$  мы поступим также, как это сделано в [10]. В случае представления компонент  $\sigma^2$  в виде (1.46) собственными значениями  $\sqrt{\sigma^2}$ , будут:

$$\lambda_1 = \lambda_2 = a = P(c),$$
$$\lambda_3 = b = c^2 S(c) + P(c),$$

тогда

$$\sigma = c_0 E + c_1 \sigma^2,$$
  
$$c_0 = (ab)^{1/2} (a^{1/2} + b^{1/2})^{-1}, c_1 = (a^{1/2} + b^{1/2})^{-1},$$

E - единичная матрица. Справедливость этого утверждения в нашем случае доказывается простой проверкой  $\sigma^2 = \sigma \cdot \sigma$ .

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 [11]: так как задача изотропна, решение F может быть представлено в виде произведения трех одинаковых плотностей по декартовым координатам:

$$F(v_x, v_y, v_z) = \xi(v_x)\xi(v_y)\xi(v_z).$$
(3.14)

Начнем рассмотрение с линейных коэффициентов (1.46). Сравним решения задачи о пространственно однородной релаксации, полученное стохастическим методом (трехмерная задача), с решением той же задачи в сферически - симметричном случае (одномерная задача), описанной в [11], полученным конечно - разностным методом. Уравнение (1.2) для задачи о пространственно однородной релаксации в этом случае будет выглядеть так:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{1}{Kn} \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial (r^3 a F)}{\partial r} - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 (r^4 S F)}{\partial r^2} + \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial (PF)}{\partial r} \right) \right) \right) = 0$$
(3.15)

Начальные условия возьмем в виде нормального распределения. Сравним стационар, полученный при решении сферически - симметричного уравнения Колмогорова – Фоккера – Планка конечно-разностным методом, со стационарным решением СДУ (3.11), точнее, с плотностью функции распределения, генерируемой этим решением.

Теперь проследим эволюцию "двугорбого" распределения, зависящего от расстояния до начала координат, подобного описанному в [87], [28], рисунок (3.2). В трехмерном случае такого рода распределение будет представлять из себя шаровой слой. Для простоты возьмем начальные условия вида:

$$\begin{cases} f_0(v_x, v_y, v_z) = const, r < \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2} < R \\ f_0(v_x, v_y, v_z) = 0, \text{ в остальной части пространства} \end{cases}$$
(3.16)



Рис. 3.1: Стационарное решения сферически - симметричного уравнения КФП и системы СДУ.

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.

Как уже говорилось выше, задача о пространственно-однородной релаксации является простейшим тестом для задач, связанных с разреженным газом. Однако, подобные уравнения порой возникают в областях, напрямую не связанных с физикой. Например, в так называемой эконофизике, модели больцмановского типа используются для изучения распределения богатства на простых рынках. Основная идея, изложенная в работах Мандельброта [68], состоит в том, что законы статистической механики описывают поведение большого числа взаимодействующих друг с другом агентов, точно так же как молекулы газа. Классическая кинетическая теория газов может быть легко применена в контексте экономики: молекулы и их скорости заменяются агентами и их богатством, а вместо сооударений происходит торговля между участниками рынка. Моделируя такую систему можно восстановить макроскопическое распределение богатства, такой подход рассматривается, например, в [51].

Другое приложение однородного уравнения Больцмана, появившееся не так давно, это получение количественных оценок в сфере формирования обществен-



Рис. 3.2: Эволюция функции распределения с начальными условиями в виде сферического слоя: a) t = 0, б) t = 0.2, в) t = 0.3, г) t = 0.5

ного мнения в социологии, социодинамика или социофизика [88]. На данный момент в социологии стоит задача создания структуры для построения широкого класса моделей, описывающих коллективные динамические явления в обществе, в том числе, и формирование общественного мнения, что, безусловно, имеет важное значение для политики и может быть использовано для предсказания результатов голосования и тенденций общественных предпочтений [88]. Задавая правила парных взаимодействий изменения мнений, мы можем получать уравнения, подобные однородному уравнению Больцмана для социофизики [58]. Фоккер – Планковские модели также имеют место в рассмотренной тематике [38].

Из вышесказанного видно, что задача о пространственно однородной релаксации имеет важное практическое значение, а следовательно, необходимо развивать методы ее решения.

## Пространственно – однородная релаксация для модели в форме системы стохастических дифференциальных уравнений с нелинейными коэффициентами

Глава 4

Теперь перейдем к обсуждению нелинейной задачи с коэффициентами в виде интегралов (1.3),(1.4). Дополнительной сложностью в этой задаче является расчет вышеуказанных коэффициентов. Переход в сферическую систему координат, как это было сделано в [11], представляется слишком трудоемким, поэтому сосредоточимся на трехмерной задаче. Кроме того, нашей главной целью является построение вычислительных методов, применимых к широкому кругу задач. Для ускорения расчетов алгоритм был реализован для архитектуры CUDA, что представляется весьма логичным для структуры нашей задачи (один поток на одну частицу).

Как отметил в своем докладе [50] Джек Донгарра, современные тенденции в построении высокопроизводительных гетерогенных вычислительных архитектур ведут к все более частому использованию разного рода аппаратных ускорителей в вычислительных узлах. Одним из перспективных направлений является применение графических процессоров общего назначения (GPGPU). В десятке самых производительных систем по данным на 2013 г. присутствует 2 компьютера, использующих графические карты в качестве сопроцессоров 4.1. И их популярность неуклонно растет в течение последних пяти лет 4.2, что обусловлено низкой стоимостью и высокой эффективностью рассматриваемых ускорителей по сравнению с альтернативами.

				$\square$				1
Rank	Site	Computer	Country	Cores	Rmax [Pflops]	% of Peak	Power [MW]	MFlops /Watt
1	National University of Defense Technology	Tianhe-2 NUDT, Xeon 12C 2.2GHz + IntelXeon Phi (57c) + Custom	China	3,120,000	33.9	62	18	1902
2	DOE / OS Oak Ridge Nat Lab	Titan, Cray XK7 (16C) + Nvidia Kepler GPU (14c) + Custom	USA	560,640	17.6	65	8.3	2143
3	DOE / NNSA L Livermore Nat Lab	Sequoia, BlueGene/Q (16c) + custom	USA	1,572,864	17.1	85	7.9	2177
4	RIKEN Advanced Inst for Comp Sci	K computer Fujitsu SPARC64 VIIIfx (8c) + Custom	Japan	705,024	10.5	93	13	830
5	DOE / OS Argonne Nat Lab	Mira, BlueGene/Q (16c) + Custom	USA	786,432	8.58	85	3.9	2177
6	Texas Advanced Computing Center	Stampede, Dell Intel (8c) + Intel Xeon Phi (61c) + IB	USA	204,900	5.16	61	4.5	1146
7	Forschungszentrum Juelich (FZJ)	JuQUEEN, BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.6GHz+Custom	Germany	458,752	5.01	85	2.3	2177
8	DOE / NNSA L Livermore Nat Lab	Vulcan, BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.6GHz+Custom	USA	393,216	4.29	85	2.0	2177
9	Leibniz Rechenzentrum	SuperMUC, Intel (8c) + IB	Germany	147,456	2.90	91*	3.4	846
10	Nat. SuperComputer Center in Tianjin	Tianhe-1A, NUDT Intel (6c) + Nvidia Fermi GPU (14c) + Custom	China	186,368	2.57	55	4.0	635

### June 2013: The TOP10

Рис. 4.1: 10 самых производительных систем на июнь 2013г. [50].

Изначально видеокарты (графические процессоры) были сконструированы для решения задачи растризации изображения, т.е. перевода треугольников в



Рис. 4.2: Использование различных ускорителей при построении высокопроизводительных систем. [50].

массивы пикселей), с поддержкой буфера глубины и наложения текстур. Обработка вершин проводилась на центральном процессоре, а графический ускоритель получал на вход уже спроектированные вершины. Именно эту простую задачу можно было решать очень быстро, используя видеокарту, как сопроцессор, что и обусловило дальнейшее их развитие.

Традиционные задачи рендеринга и работы с пиксельным изображением имеют высокую степень параллелизма, заключающуюся в независимой обработке каждого элемента. Это и определило основные принципы построения архитектуры графического ускорителя.

Вместе с ростом производительности видеокарт изменялась и увеличивалась их функциональность. Главным прорывным свойством графического процессора стала возможность программировать алгоритм обработки элементов изображения. Видеокарта является SIMD - процессором. SIMD (single instruction multiple data) - метод обработки данных, при котором одна и та же операция применяется независимо ко всем элементам, подлежащим обработке 4.3.



Рис. 4.3: SIMD архитектура.

Раньше для видеокарт разрабатывались API, ориентированные на работу только с графическими данными, но в последние годы на смену им пришли программные системы, адаптированные именно для вычислительных задач: CUDA, Direct Compute, OpenCL. Лидером в этой области на данный момент является компания nVidia, разрабатывающая CUDA, а так же специальную ветку процессоров (Tesla, Fermi, Kepler), предназначенных в большей степени для вычислений, нежели чем для использования по прямому назначению.

Из предыдущей главы видно, что численное интегрирование стохастических дифференциальных уравнений, сводится к генерации множества траекторий 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:

$$a(v_1(t), t) = -\frac{\pi}{2} \int_{\mathbf{R}^3} (v_1 - v) \mid v_1 - v \mid F dv$$
(4.1)

$$\sigma_{ii}^2(v_1(t), t) = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \int_{\mathbf{R}^3} (\frac{1}{3} \mid v_1 - v \mid^3 + (v_i - v_{1i})^2 \mid v_1 - v \mid) F dv.$$
(4.2)

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:

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

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) mod N - ой частиц, как это показано на рисунке (4.4) и добавлять результат к соответствующей сумме, всего нам понадобится N шагов цикла.



Рис. 4.4: Схема вычисления сумм для коэффициентов нелинейной задачи, k ый шаг цикла.

На рисунке (4.5) 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. 4.5: Зависимость погрешности вычисления коэффициентов методом Монте - Карло от количества точек, моделирующих распределение а) для элементов вектора а (максимальная погрешность z из  $z_1$ ,  $z_2$ ,  $z_3$ ), б) для элементов матрицы  $\sigma$  (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:

$$E^{k} = \sum_{j=1}^{N} |v_{j}^{k}|^{2}$$

$$\Delta E = E^{k+1} - E^{k},$$

$$\delta E = \frac{\Delta E}{N},$$

$$\tilde{v}_{j}^{k+1} = \sqrt{\frac{|v_{j}|^{2} + \delta E}{|v_{j}|^{2}}} v_{j}^{k+1},$$
(4.3)

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

Рассматриваемая нами система является флуктуационной. Согласно [1] релаксацию такой системы из начального состояния к стационарному можно рассматривать как затухание равновесных флуктуаций. Связь между этим затуханием и динамикой неравновесного процесса устанавливается различного рода флуктуационно – диссипационными теоремами. В частности для нашей системы, которая имеет сходство (на самом деле является более общим случаем) с уравнениями Ланжевена, описывающими движение броуновской частицы,

$$\dot{V} = -\gamma V(t) + R(t);$$
$$\langle R_i(t1)R_j(t2) \rangle = 2D\delta_{ij}\delta(t_1 - t_2).$$

Здесь V - скорость движения, R случайная сила действующая с интенсивностью D, ее приращение удовлетворяет всем свойствам приращения винеровского процесса. Интенсивность D Ланжевеновского источника в данной системе считается постоянной, не зависящей от мгновенной скорости частицы, введение такого рода зависимости, как отмечает Репке в [1], ссылаясь на [2], приводит к определенным математическим трудностям.

Решение данного стохастического уравнения при начальных условиях  $v(t_0) = v_0$  может быть получено формальным интегрированием:

$$v(t) = v_0 e^{-\gamma(t-t_0)} + e^{-\gamma(t-t_0)} \int_{t_0}^t dt' e^{-\gamma(t'-t_0)} r(t'),$$

r(t) - реализация случайного процесса R(t), каждой r(t) - соответствует v(t). Для среднего значения случайного процесса V(t) имеем:

$$\langle V(t) \rangle = v_0 e^{-\gamma(t-t_0)} + e^{-\gamma(t-t_0)} \int_{t_0}^t dt' e^{\gamma(t'-t_0)} \langle R(t') \rangle,$$

Для второго момента, получаем:

$$\langle V^2(t) \rangle = v_0^2 e^{-2\gamma(t-t_0)} + e^{-2\gamma(t-t_0)} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^t dt'' e^{\gamma(t'+t'')} \langle R(t')R(t'') \rangle$$

учитывая свойства винеровского процесса R(t):

$$\langle V_i^2(t) \rangle = v_{i,0}^2 e^{-2\gamma(t-t_0)} + \frac{D}{\gamma} (1 - e^{-2\gamma(t-t_0)})$$

Для этой системы флуктуационно - диссипационная теорема дает так называемое соотношение Эйнштейна, полученное исходя из сохранения энергии в системе при ее стремлении к равновесному состоянию:

$$\lim_{t \to \infty} \langle V_i^2 \rangle = \frac{D}{\gamma}.$$
(4.4)

Такое соотношение в некотором усредненном смысле должно выполняться и для нашего стационарного решения. С учетом обезразмеривания и начальных данных (дисперсия максвелловского распределения для каждой из компонент скорости, т.е.  $\langle V_i^2 \rangle = \sqrt{2}$ ) оно будет иметь вид:  $D = \sqrt{2}\gamma$ , где D получено путем усреднения компонент матрицы  $\sigma^2$  по функции распределения, причем
$\sigma_{ii}^2 \approx D, \ i = 1, 2, 3; \ \sigma_{ij}^2 \approx 0, \ i, j = 1, 2, 3, \ i \neq j, \ a \ \gamma$  - усреднением величины  $\sqrt{\sum_{i=1}^3 (\frac{a_i^2}{v_i^2})}, \ a_i$  - компоненты вектора  $\mathbf{a} = a(c)\mathbf{c}, \ v_i$  - компоненты вектора тепловой скорости  $\mathbf{v} = \mathbf{c}, \$ т.к макроскопическая скорость V = 0. Получилось  $D \approx 4.18, \ \gamma \approx 2.95, \$ т.е.  $D \approx 1.41\gamma$ 



Рис. 4.6: Стационарные решения СДУ а) линейный случай, б) нелинейный случай.



Рис. 4.7: Сравнение стационарных решений в линейном и нелинейном случаях.

Из рисунков 4.6 и 4.7 видно, что стационарное решение, полученное в линейном случае, близко к решению нелинейного уравнения. Динамика сходимости к стационару в обоих случаях также близка, рисунки 4.8 и 4.9. Это позволяет надеяться в задачах, неоднородных по пространству, на хорошие результаты при использовании коэффициентов, полученных из предположения о локаль-



Рис. 4.8: 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. 4.9: Различие решений стационарной и нестационарной задач в зависимости от шага по времени.  $\|\xi_{lin} - \xi_{nonlin}\|$  нормированная разность между решениями линейной и нелинейной задачи на n - ом шаге по времени.

ной максвеллизации, а это, в свою очередь, дает возможность рассчитывать на построение вычислительно простого алгоритма сквозного счета микро - мезо - макро на базе стохастической модели. На первый взгляд кажется странным, что стационарное решение получилось в виде распределения с "тяжелыми хвостами". Сделаем некоторые замечания по этому поводу. Кстати, если в нашей модели взять усредненные коэффициенты (константы, удовлетворяющие флуктуационно - диссипационной теореме), то стационарное решение получится в виде максвеллиана.

В литературе [12] рассматриваются процессы (обобщенные процессы Кокса), для которых справедливо представление:

$$Z^{n}(t) = \sum_{i=1}^{N_{1}^{(n)}(\Lambda_{n}(t))} X_{n,i}, \qquad (4.5)$$

т.е. процесс можно представить в виде предела скачкообразного процесса. Здесь где  $\{N_1^{(n)}(t), t > 0\}_{n>1}$  – последовательность пуассоновских процессов с единичной интенсивностью; при каждом n = 1, 2, ... случайные величины  $X_{n,1}, X_{n,2}, ...$  одинаково распределены, причем при каждом n > 1 величины  $X_{n,1}, X_{n,2}, ...$  и процесс  $N_1^{(n)}(t), t > 0$ , независимы; при каждом  $n = 1, 2, ...\Lambda_n(t), t > 0, -$  это процесс Леви. Тогда случайные блуждания, порожденные указанными обобщенными процессами Кокса, слабо сходятся к некоторому процессу Леви Z(t), порождающему распределение, отличное от нормального. Рассматриваемая в данной работе модель получена как асимптотика по числу Кнудсена системы СДУ, описанной в [22]:

$$dx_1(t) = v_1(t)dt,$$
  
$$dv_1(t) = \int \int \int \int f(\theta, x_1(t), v_1(t), x, v) p(d\theta \times dx \times dv \times dt),$$

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. Здесь  $x_1$  и  $v_1$  определяют положение и скорость частицы в фазовом пространстве. Интеграл по стохастической пуассоновской мере описывает импульсную случайную силу взаимодействия, которая меняет состояние частиц скачкообразно (скачком меняются импульсы взаимодействующих частиц) в случайные неоднородно распределенные, как следствие неоднородности по пространству рассматриваемой модели, моменты времени. Решение этой системы представляет собой случайные блуждания, аналогичные (4.5), но устроенные более сложным образом, и распределения с тяжелыми хвостами могут считаться естественными асимптотическими аппроксимациями для такого рода процессов. В случае, если  $N_1^{(n)}(t)$ , количество рассматриваемых частиц, будет оставаться неизменным, мы придем к ситуации, соответствующей классическому уравнению Больцмана.

## Заключение

Основные результаты диссертации приведены ниже.

- Получены аналитические выражения упрощенных коэффициентов системы стохастических дифференциальных уравнений, описывающих движение частиц в фазовом пространстве при умеренных числах Кнудсена в предположении о локальной максвелловости функции распределения как в декартовых так и в сферических координатах пространства скоростей.
- 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 численное стационарное решение.
- 3. Численно решена эквивалентная по постановке задача о пространственнооднородной 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 сэкономит вычислительные ресурсы.

Близость стационарных решений линейной и нелинейной задач о пространственно – однородной релаксации позволяет надеяться на хорошие результаты при использовании коэффициентов, полученных из предположения о локальной максвеллизации для неоднородного по пространству случая, а это, в свою очередь, дает возможность рассчитывать на построение вычислительно простого алгоритма сквозного счета микро - мезо - макро. Поэтому главным направлением для развития данной работы видится верификация рассматриваемой стохастической модели газа при умеренных числах Кнудсена на пространственно – неоднородных задачах, а так же разработка эффективных вычислительных алгоритмов, адаптированных к современным аппаратным архитектурам, на ее базе.

## Литература

- Репке Г., Тищенко С. В., Зубарев Д. Н. Неравновесная статистическая механика: Пер. с нем. — Мир, 1990.
- [2] Индуцированные шумом переходы: Теория и применение в физике, химии и биологии: Пер. с англ / В. Хорсткеме, Р. Лефевр, Ю. А. Данилов et al. — Мир, 1987.
- [3] Имитационное моделирование струйных течений и диссипативных потоков методом переменных весовых множителей / М. Я. Маров, А. Е. Королцв, В. П. Осипов, А. А. Самылкин // Математическое моделирование. — 2009. — Vol. 21, по. 9. — Р. 34–42.
- [4] Белоцерковский О. М., Яницкий В. Е. Статистический метод частиц в ячейках для решения задач динамики разреженного газа. І. Основы построения метода // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 1975. — Vol. 15, по. 5. — Р. 1195–1209.
- [5] Лукшин Ан. В., Смирнов С. Н. Об одном стохастическом методе решения уравнения Больцмана // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 1988. — Vol. 28, no. 2. — Р. 293–297.
- [6] Лукшин Ан. В., Смирнов С. Н. Об одном эффективном стохастическом алгоритме решения Больцмана // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 1989. — Vol. 29, no. 1. — Р. 118–124.

- [7] Иванов М. С., Рогазинский С. В. Экономичные схемы прямого статистического моделирования течений разреженного газа // Математическое моделирование. — 1989. — Vol. 1, по. 7. — Р. 130–145.
- [8] Хисамутдинов А. И., Сидоренко Л. Л. Алгоритмы метода Монте-Карло с непрерывным временем для кинетического уравнения разреженных газов // Математическое моделирование. — 1994. — Vol. 6, no. 2. — Р. 47–60.
- [9] Михайлов Г. А., Рогазинский С. В. Весовые методы Монте-Карло для решения многочастичных задач, связанных с уравнением Больцмана // Международная конференция по вычислительной математике MKBM-2002. — 2002. — Р. 24–28.
- [10] Иванов М. Ф., Гальбурт В. А. Стохастический подход к численному решению уравнений Фоккера-Планка // Математическое моделирование. — 2008. — Vol. 20, по. 11. — Р. 3–27.
- [11] Богомолов С. В., Гудич И. Г. О диффузионной модели газа в фазовом пространстве при умеренных числах Кнудсена // Математическое моделирование. — 2012. — Vol. 24, по. 8. — Р. 45–64.
- [12] Закс Л. М., Королев В. Ю. Обобщенные дисперсионные гаммараспределения как предельные для случайных сумм // Информатика и еч применения. — 2013. — Vol. 7, no. 1. — Р. 105–115.
- [13] Теория и приложения уравнения Больцмана: Пер. с англ / К. Черчиньяни,
  Э. А. Гурмузова, В. П. Мемнонов, Р. Г. Баранцев. Мир, 1978.
- [14] Теория и приложения уравнения Больцмана: Пер. с англ / К. Черчиньяни,
  Э. А. Гурмузова, В. П. Мемнонов, Р. Г. Баранцев. Мир, 1978.
- [15] Молекулярная газовая динамика: Пер. с англ / Г. Берд, А. И. Ерофеев,
   О. Г. Фридлендер et al. Мир, 1981.

- [16] Трубников Б. А. Столкновения частиц в полностью ионизованной плазме // Вопросы теории плазмы. Вып. — 1963. — Vol. 1. — Р. 98–182.
- [17] Яницкий В. Е. Применение стохастического процесса Пуассона для расчета столкновительной релаксации неравновесного газа // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 1973. — Vol. 13, no. 2. — Р. 505–510.
- [18] Королюк В. С. Справочник по теории вероятностей и математической статистике. — Наук. думка, 1978.
- [19] Скороход А. В. Стохастические уравнения для сложных систем. "Наука, "Глав. ред. физико-математической лит-ры, 1983.
- [20] Арсеньев А. А. О приближении решения уравнения Больцмана решениями стохастических дифференциальных уравнений Ито // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 1987. — Vol. 27, no. 3. — Р. 400–410.
- [21] Арсеньев А. А. Лекции о кинетических уравнениях. "Наука Главная редакция физико-математической литературы, 1992.
- [22] Богомолов С. В. Об одном подходе к получению стохастических моделей газовой динамики. 2008. Vol. 423, no. 4.
- [23] Якобовский М. В. Параллельный алгоритм генерации последовательностей псевдослучайных чисел // Математическое моделирование. — 2009. — Vol. 21, no. 6. — Р. 59–68.
- [24] Калиткин Н. Н. Численные методы. 2 изд. БХВ-Петербург, 2011.
- [25] Оксендаль Б. Стохастические дифференциальные уравнения. Введение в теорию и приложения. — АСТ М., 2003.

- [26] A 1D coupled Schrödinger drift-diffusion model including collisions / M. Baro,
   N. B. Abdallah, P. Degond, A. El Ayyadi // Journal of Computational Physics. - 2005. - Vol. 203, no. 1. - P. 129–153.
- [27] 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.
- [28] 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.
- [29] Asinari P., Ohwada T. Connection between kinetic methods for fluiddynamic equations and macroscopic finite-difference schemes // Computers & Mathematics with Applications. - 2009. - Vol. 58, no. 5. - P. 841-861.
- [30] 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.
- [31] Babovsky H. A numerical model for the Boltzmann equation with applications to micro flows // Computers & Mathematics with Applications. — 2009. — Vol. 58, no. 4. — P. 791–804.
- [32] Babovsky H., Neunzert H. On a simulation scheme for the Boltzmann equation // Mathematical Methods in the Applied Sciences. -1986. Vol. 8, no. 1. P. 223–233.
- [33] Belotserkovskii O. M., Zharov V. A. Monte Carlo Simulation of Boundary Layer Transition. — Vol. 49, no. 5. — P. 887.

- [34] Bernhoff N., Bobylev A. et al. Weak shock waves for the general discrete velocity model of the Boltzmann equation // Communications in Mathematical Sciences. - 2007. - Vol. 5, no. 4. - P. 815-832.
- [35] Bobylev A. V., Rjasanow S. Fast deterministic method of solving the Boltzmann equation for hard spheres // European Journal of Mechanics-B/Fluids. – 1999. – Vol. 18, no. 5. – P. 869–887.
- [36] Bobylev A. V., Vinerean M. C. Construction of discrete kinetic models with given invariants // Journal of Statistical Physics. — 2008. — Vol. 132, no. 1. — P. 153–170.
- [37] Boltzmann L. Uber die Prinzipien der Mechanik: Zwei Akademische Antrittsreden.
- [38] Boltzmann and Fokker-Planck equations modelling opinion formation in the presence of strong leaders / B. Düring, P. Markowich, J.-F. Pietschmann, M.-T. Wolfram // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Science. - 2009. - Vol. 465, no. 2112. - P. 3687-3708.
- [39] Brykina I. G., Rogov B. V., Tirskiy G. A. Continuum models of rarefied gas flows in problems of hypersonic aerothermodynamics // Journal of applied mathematics and mechanics. - 2006. - Vol. 70, no. 6. - P. 888-911.
- [40] Burt J. M., Boyd I. D. A low diffusion particle method for simulating compressible inviscid flows // Journal of Computational Physics. – 2008. – Vol. 227, no. 9. – P. 4653–4670.
- [41] Cercignani Carlo. Rarefied gas dynamics: from basic concepts to actual calculations. — Cambridge University Press, 2000. — Vol. 21.
- [42] Chandrasekhar S. Stochastic problems in physics and astronomy // Reviews of modern physics. - 1943. - Vol. 15, no. 1. - P. 1.

- [43] Cheng G. C., Koomullil R. P., Soni B. K. Multidisciplinary and multi-scale computational field simulations #Algorithms and applications // Mathematics and Computers in Simulation. - 2007. - Vol. 75, no. 5. - P. 161-170.
- [44] Comparison of implementations of the lattice-Boltzmann method / K. Mattila,
  J. Hyväluoma, J. Timonen, T. Rossi // Computers & Mathematics with Applications. - 2008. - Vol. 55, no. 7. - P. 1514-1524.
- [45] Crouseilles N., Degond P., Lemou M. A hybrid kinetic/fluid model for solving the gas dynamics Boltzmann-BGK equation // Journal of Computational Physics. - 2004. - Vol. 199, no. 2. - P. 776-808.
- [46] Crouseilles N., Degond P., Lemou M. A hybrid kinetic-fluid model for solving the Vlasov-BGK equation // Journal of Computational Physics. - 2005. - Vol. 203, no. 2. - P. 572-601.
- [47] Degond P., El Ayyadi A. A coupled Schrödinger drift-diffusion model for quantum semiconductor device simulations // Journal of Computational Physics. - 2002. - Vol. 181, no. 1. - P. 222-259.
- [48] Density distribution for a dense hard-sphere gas in micro/nano-channels: Analytical and simulation results / S. V. Nedea, AJ. H. Frijns, A. A. Van Steenhoven et al. // Journal of Computational Physics. — 2006. — Vol. 219, no. 2. — P. 532–552.
- [49] Desvillettes L. Some aspects of the modeling at different scales of multiphase flows // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. - 2010. -Vol. 199, no. 21. - P. 1265-1267.
- [50] Dongarra J. Algorithmic and software challenges when moving towards exascale. -2013.
- [51] Düring B., Matthes D., Toscani G. Kinetic equations modelling wealth

redistribution: a comparison of approaches // Physical Review E. -2008. - Vol. 78, no. 5. - P. 056103.

- [52] Filbet F., Russo G. High order numerical methods for the space nonhomogeneous Boltzmann equation // Journal of Computational Physics. – 2003. – Vol. 186, no. 2. – P. 457–480.
- [53] Fujita M., Yamaguchi Y. Mesoscale modeling for self-organization of colloidal systems // Current Opinion in Colloid & Interface Science. - 2010. - Vol. 15, no. 1. - P. 8-12.
- [54] Ginzburg I., Verhaeghe F., d'Humieres D. Two-relaxation-time lattice Boltzmann scheme: About parametrization, velocity, pressure and mixed boundary conditions // Communications in computational physics. — 2008. — Vol. 3, no. 2. — P. 427–478.
- [55] Goodman J. B., Lin K. K. Coupling control variates for Markov chain Monte Carlo // Journal of Computational Physics. — 2009. — Vol. 228, no. 19. — P. 7127–7136.
- [56] 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.
- [57] He X., Duckwiler G., Valentino D. J. Lattice Boltzmann simulation of cerebral artery hemodynamics // Computers & Fluids. — 2009. — Vol. 38, no. 4. — P. 789–796.
- [58] Helbing D. Quantitative sociodynamics. Springer, 1995.
- [59] 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.

- [60] Homolle T. M. M., Hadjiconstantinou N. G. A low-variance deviational simulation Monte Carlo for the Boltzmann equation // Journal of Computational Physics. - 2007. - Vol. 226, no. 2. - P. 2341-2358.
- [61] Hu G., Li D.g. Multiscale phenomena in microfluidics and nanofluidics // Chemical Engineering Science. - 2007. - Vol. 62, no. 13. - P. 3443-3454.
- [62] 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.
- [63] 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.
- [64] 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.
- [65] Koura K. Null-collision technique in the direct-simulation Monte Carlo method // Physics of Fluids (1958-1988). - 1986. - Vol. 29, no. 11. - P. 3509-3511.
- [66] Lantermann U., Hänel D. Particle Monte Carlo and lattice-Boltzmann methods for simulations of gas-particle flows // Computers & fluids. - 2007. - Vol. 36, no. 2. - P. 407-422.
- [67] Longo S., Diomede P. A Monte Carlo model for seeded atomic flows in the transition regime // Journal of Computational Physics. – 2009. – Vol. 228, no. 10. – P. 3851–3857.

- [68] Mandelbrot B. The Pareto-Levy law and the distribution of income // International Economic Review. - 1960. - Vol. 1, no. 2. - P. 79-106.
- [69] Marié S., Ricot D., Sagaut P. Comparison between lattice Boltzmann method and Navier–Stokes high order schemes for computational aeroacoustics // Journal of Computational Physics. – 2009. – Vol. 228, no. 4. – P. 1056–1070.
- [70] Morinishi K. Numerical simulation for gas microflows using Boltzmann equation // Computers & fluids. - 2006. - Vol. 35, no. 8. - P. 978-985.
- [71] New model and scheme for compressible fluids of the finite difference lattice Boltzmann method and direct simulations of aerodynamic sound / M. Tsutahara, T. Kataoka, K. Shikata, N. Takada // Computers & Fluids. – 2008. – Vol. 37, no. 1. – P. 79–89.
- [72] Numerical comparison between the Boltzmann and ES-BGK models for rarefied gases / P. Andries, J.-F. Bourgat, P. Le Tallec, B. Perthame // Computer methods in applied mechanics and engineering. — 2002. — Vol. 191, no. 31. — P. 3369–3390.
- [73] Numerical solutions of the Boltzmann equation: comparison of different algorithms / P. Kowalczyk, A. Palczewski, G. Russo, Z. Walenta // European Journal of Mechanics-B/Fluids. - 2008. - Vol. 27, no. 1. - P. 62-74.
- [74] Oelschlager K. A martingale approach to the law of large numbers for weakly interacting stochastic processes // The Annals of Probability. — 1984. — P. 458– 479.
- [75] Ostermeyer G-P. The mesoscopic particle approach // Tribology International. - 2007. - Vol. 40, no. 6. - P. 953-959.
- [76] Pareschi L., Perthame B. A Fourier spectral method for homogeneous

Boltzmann equations // Transport Theory and Statistical Physics. — 1996. — Vol. 25, no. 3-5. — P. 369–382.

- [77] Pulvirenti M., Wagner W., Rossi M. Convergence of particle schemes for the Boltzmann equation // European Journal of Mechanics Series B Fluids. – 1994. – Vol. 13. – P. 339–339.
- [78] Scherer C. S., Prolo Filho J. F., Barichello L. B. An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in rarefied gas dynamics. I. Flow problems // Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik. — 2009. — Vol. 60, no. 1. — P. 70–115.
- [79] Scherer C. S., Prolo Filho J. F., Barichello L. B. An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in rarefied gas dynamics. II. Heat transfer problems // Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik. — 2009. — Vol. 60, no. 1. — P. 651–678.
- [80] Sharipov F., Cumin L. M., Kalempa D. Heat flux between parallel plates through a binary gaseous mixture over the whole range of the Knudsen number // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. — 2007. — Vol. 378, no. 2. — P. 183–193.
- [81] Szalmas L. Multiple-relaxation time lattice Boltzmann method for the finite Knudsen number region // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. - 2007. - Vol. 379, no. 2. - P. 401-408.
- [82] Sznitman A.-S. Équations de type de Boltzmann, spatialement homogenes // Zeitschrift für Wahrscheinlichkeitstheorie und verwandte Gebiete. — 1984. — Vol. 66, no. 4. — P. 559–592.
- [83] Tanaka H. Probabilistic treatment of the Boltzmann equation of Maxwellian molecules // Probability Theory and Related Fields. - 1978. - Vol. 46, no. 1. -P. 67-105.

- [84] Titarev V. A. Conservative numerical methods for model kinetic equations // Computers & fluids. -2007. Vol. 36, no. 9. P. 1446–1459.
- [85] 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.
- [86] Tiwari S., Klar A., Hardt S. A particle-particle hybrid method for kinetic and continuum equations // Journal of Computational Physics. - 2009. - Vol. 228, no. 18. - P. 7109-7124.
- [87] 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.
- [88] Weidlich W. Sociodynamics-a systematic approach to mathematical modelling in the social sciences // NONLINEAR PHENOMENA IN COMPLEX SYSTEMS-MINSK-. - 2002. - Vol. 5, no. 4. - P. 479-487.