

ИССЛЕДОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ N -ЧАСТИЧНОГО ЧИСЛЕННОГО СТАТИСТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА¹⁾

© 2024 г. Г. З. Лотова^{1,2,*}, Г. А. Михайлов^{1,2}, С. В. Рогазинский^{1,2}

¹630090 Новосибирск, пр-т Акад. Лаврентьева, 6, Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Россия

²630090 Новосибирск, ул. Пирогова, 2, Новосибирский государственный университет, Россия

*e-mail: lot@osmf.sccc.ru

Поступила в редакцию 27.11.2023 г.

Переработанный вариант 27.11.2023 г.

Принята к публикации 14.01.2024 г.

Основной целью работы является проверка гипотезы о том, что известный N -частичный статистический алгоритм дает оценку решения нелинейного уравнения Больцмана с погрешностью порядка $O(1/N)$. Для этого определяются практически важные оптимальные соотношения между значением N и числом n выборочных значений оценки. Численные результаты для задачи с известным решением подтверждают удовлетворительность сформулированных оценок и выводов. Библ.14. Табл.3.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, статистическое моделирование, уравнение Больцмана, N -частичная цепь Маркова, молекулярный хаос, метод мажорантной частоты.

DOI: 10.31857/S0044466924050121, **EDN:** YCXUYI

ВВЕДЕНИЕ

Для построения и обоснования метода прямого статистического моделирования с целью нахождения приближенного решения однородного по пространству нелинейного кинетического уравнения Больцмана может быть использовано линейное интегральное уравнение, которое эквивалентно N -частичному уравнению Каца [1]. Однако использовать это уравнение непосредственно для построения стандартных весовых модификаций моделирования [2] невозможно, так как его ядро представляет собой сумму взаимно сингулярных слагаемых [3]. Для определенности далее будет рассматриваться задача об однородной релаксации простого однокомпонентного газа, однако все построения весовой схемы носят общий характер и без труда переносятся на более общие случаи. Итак, рассматривается физический процесс однородной релаксации простого однокомпонентного газа, который описывается следующим нелинейным кинетическим уравнением Больцмана:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{v}, t) = \int [f(\mathbf{v}', t)f(\mathbf{v}'_1, t) - f(\mathbf{v}, t)f(\mathbf{v}_1, t)] \times w(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1 | \mathbf{v}, \mathbf{v}_1) d\mathbf{v}' d\mathbf{v}'_1 d\mathbf{v}_1. \quad (0.1)$$

Здесь $f(\mathbf{v}, t)$ — «одночастичная» функция плотности распределения по скорости $\mathbf{v}$ в момент времени t . В данном случае уравнение Больцмана записано с использованием условной плотности вероятности w перехода пары скоростей частиц от $(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1)$ к $(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1)$. Удобство этой формы заключается в том, что она позволяет произвести все построения в максимально общей форме и легко перейти к рассмотрению конкретного взаимодействия пары частиц.

Плотность $w(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1 | \mathbf{v}, \mathbf{v}_1)$ и дифференциальное сечение рассеяния частиц связаны следующим соотношением (см., например, [4]):

$$w(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1 | \mathbf{v}, \mathbf{v}_1) = \sigma(h, \Omega) \delta_1 \left(\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{v}_1)^2 - (\mathbf{v}' - \mathbf{v}'_1)^2}{2} \right) \times \delta_3 \left(\frac{\mathbf{v} + \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}' - \mathbf{v}'_1}{2} \right),$$

которое следует из того, что скорости $(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1)$ и $(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1)$ удовлетворяют законам сохранения импульса и энергии при столкновении:

$$\mathbf{v} + \mathbf{v}_1 = \mathbf{v}' + \mathbf{v}'_1, \quad \mathbf{v}^2 + \mathbf{v}_1^2 = \mathbf{v}'^2 + \mathbf{v}'_1^2.$$

¹⁾ Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания ИВМиМГ СО РАН (проект 0251-2022-0002).

Здесь $h = |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|$ — модуль относительной скорости сталкивающихся частиц, Ω — телесный угол поворота относительной скорости при столкновении, δ_1 и δ_3 — одно- и трехмерная дельта-функции, соответственно:

$$\int \delta_1(h)dh = 1, \quad \int \delta_3(\mathbf{v} + \mathbf{v}_1)d(\mathbf{v} + \mathbf{v}_1) = 1.$$

Функция $f(\mathbf{v}, t)$ удовлетворяет условию нормировки

$$\int f(\mathbf{v}, t)d\mathbf{v} = 1, \quad t \geq 0.$$

Присоединяя к (0.1) начальные данные

$$f(\mathbf{v}, t)|_{t=0} = f_0(\mathbf{v}), \quad t \in (0, T], \quad \mathbf{v} \in R^3, \quad (0.2)$$

получим задачу Коши для нелинейного уравнения Больцмана.

Численное решение задачи Коши (0.1), (0.2) мы будем понимать в смысле оценки линейных функционалов от функции $f(\mathbf{v}, t)$ (в среднеквадратичной метрике).

1. N -ЧАСТИЧНЫЙ АЛГОРИТМ, ОЦЕНКА ПАРАМЕТРА ПОГРЕШНОСТИ

Перепишем уравнение (0.1) в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{v}, t) = & - \int f(\mathbf{v}, t)f(\mathbf{v}_1, t)w(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1|\mathbf{v}, \mathbf{v}_1)d\mathbf{v}'d\mathbf{v}'_1d\mathbf{v}_1 + \\ & + \int f(\mathbf{v}', t)f(\mathbf{v}'_1, t)w(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1|\mathbf{v}, \mathbf{v}_1)d\mathbf{v}'d\mathbf{v}'_1d\mathbf{v}_1. \end{aligned} \quad (1.1)$$

Полученное таким образом уравнение можно рассматривать как итерационное соотношение баланса при условии, что плотность $f(\mathbf{v}_1, t)$ известна — это соответствует предположению о “переносе хаоса” (chaos propagation) при выводе уравнения (0.1) (см., например, [1]).

Соотношение (1.1) формально можно записать в виде линейного кинетического уравнения:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{v}, t) = -\mathbf{v}(\mathbf{v})f(\mathbf{v}, t) + \int f(\mathbf{v}', t)[f(\mathbf{v}'_1, t)w(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1|\mathbf{v}, \mathbf{v}_1)d\mathbf{v}'d\mathbf{v}'_1]d\mathbf{v}', \quad (1.2)$$

где $\mathbf{v}(\mathbf{v}) = \int f(\mathbf{v}_1, t)w(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1|\mathbf{v}, \mathbf{v}_1)d\mathbf{v}'d\mathbf{v}'_1d\mathbf{v}_1$.

По аналогии с линейным кинетическим уравнением соотношение (1.2) формально задает “нелинейный” марковский процесс [5], в котором изменения системы за время dt определяется ее состоянием в момент времени t . На этой основе строятся “пошаговые” дискретные вычислительные схемы, которые принято называть методом Берда [6, 7]. Соотношение (1.2) фактически также позволило построить рассматриваемую математическую N -частичную модель.

В связи с этим для физического процесса однородной релаксации простого однокомпонентного газа хорошо известна математическая модель [5], в основу которой положено представление о газе как об ансамбле конечного числа взаимодействующих частиц. При выполнении определенных требований, накладываемых на характеристики этого ансамбля и на стохастический процесс его эволюции во времени можно исследовать вопрос о степени аппроксимации данной математической моделью рассматриваемого физического процесса. Однородная релаксация простого газа описывается нелинейным кинетическим уравнением Больцмана (0.1) и его решением является одночастичная функция распределения по скоростям. Для его приближенного решения используется линейное интегродифференциальное уравнение, описывающее эволюцию ансамбля N частиц во времени, так называемое “основное” кинетическое уравнение [4].

Используя условную плотность вероятности $w(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j|\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) = w(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j|\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j)$ перехода пары скоростей частиц от $(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j)$ к $(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j)$, уравнение типа (0.1) для N -частичной модели можно записать в виде [4]:

$$\frac{\partial}{\partial t} f_N(t, V) = \frac{1}{N-1} \sum_{i < j} \int \{f_N(t, V'_{ij}) - f_N(t, V)\} w(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j|\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j)d\mathbf{v}'_i d\mathbf{v}'_j, \quad (1.3)$$

где $V = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N)$ есть $3N$ -мерный вектор,

$$V'_{ij} = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}'_i, \dots, \mathbf{v}'_j, \dots, \mathbf{v}_N),$$

$(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j)$ и $(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j)$ — скорости пары частиц до и после столкновения соответственно, удовлетворяющие законам сохранения момента и энергии, $\int f_N(t, V) dV = 1$. Плотность w и дифференциальное сечение $\sigma(h_{ij}, \chi_{ij})$ связаны следующим соотношением:

$$w(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j | \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) = \rho \sigma(h_{ij}, \chi_{ij}) \delta_1 \left(\frac{(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)^2 - (\mathbf{v}'_i - \mathbf{v}'_j)^2}{2} \right) \times \delta_3 \left(\frac{\mathbf{v}_i + \mathbf{v}_j - \mathbf{v}'_i - \mathbf{v}'_j}{2} \right),$$

где ρ — плотность среды; $h_{ij} = |\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j|$, χ_{ij} — угол рассеяния.

Как указано в [1], модельный процесс стохастической кинетики системы из N частиц представляет собой однородную цепь Маркова, переходы в которой осуществляются в результате элементарных парных взаимодействий. Плотность распределения времени между элементарными взаимодействиями в системе определяется состоянием системы и является экспоненциальным. Участок N -частичной траектории, соответствующей прямолинейному движению всех частиц между двумя последовательными элементарными взаимодействиями, называется *свободным пробегом системы*. Вероятность элементарного взаимодействия в системе N частиц за время dt равна $v(V)dt$, где

$$v(V) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \int w(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j | \mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j) d\mathbf{v}'_i d\mathbf{v}'_j = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N a(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \rho h_{ij} \sigma_t(h_{ij}),$$

а

$$\sigma_t(h) = \int \sigma(h, \Omega) d\Omega.$$

Вероятность того, что столкновение в системе N частиц реализует пара частиц с номерами i и j равна $a(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j)/v(V)$, причем распределение новых скоростей частиц $(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j)$ определяется дифференциальным сечением столкновения пары

$$k(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j \rightarrow \mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j) = w(\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j | \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) [\rho h_{ij} \sigma_t(h_{ij})]^{-1}, \quad (1.4)$$

а скорости остальных частиц не изменяются. Время свободного пробега системы распределено с экспоненциальной плотностью $p(t) = v(V) \exp(-t v(V))$.

Этот алгоритм прямого моделирования хорошо известен. Он был эвристически сформулирован на основе марковского характера стохастического процесса эволюции N -частичной системы [1].

Относительно основного кинетического уравнения (1.3) известно (см. [1]), что оно асимптотически при $N \rightarrow \infty$ эквивалентно уравнению Больцмана в предположении молекулярного хаоса, которое фактически определяет форму интеграла столкновений в (0.1). Однако в [1] не приведена оценка скорости сходимости по N решения “основного” кинетического уравнения, т. е. плотности соответствующего одночастичного распределения к решению уравнения Больцмана. По-видимому, напрямую она не может быть получена из приведенного там доказательства. В связи с этим актуальна задача исследования зависимости решения N -частичного уравнения (1.3) от числа модельных частиц N , решению которой, как и работа [8], посвящена настоящая статья.

В [8] для простой модельной задачи были впервые получены результаты, позволяющие предположить, что погрешность N -частичного алгоритма имеет порядок $O(N^{-1})$ (хотя эвристически можно было ожидать порядок $O(N^{-1/2})$). На этой основе рассмотрим какой-либо функционал G_N от решения $f_N(V, t)$ уравнения (1.3). Предполагая аналитическую зависимость G_N от $1/N$, представим его в следующем виде:

$$G_N = G_\infty + \frac{\gamma}{N} + O\left(\frac{1}{N^2}\right). \quad (1.5)$$

Отсюда получаем оценку точного значения G_∞ по двум уравнениям с $N = N_1, N_2$:

$$G_\infty \approx G_{N_2} + \frac{N_1}{N_2 - N_1} (G_{N_2} - G_{N_1}). \quad (1.6)$$

Значение разности $G_{N_2} - G_{N_1}$ может оказаться малым по сравнению со значениями G_{N_2}, G_{N_1} , поэтому для ее вычисления, при сравнительно небольших N_1, N_2 , целесообразно применять метод коррелированной выборки (см. далее разд. 2).

Из (1.5) получаем также оценку величины γ :

$$\gamma = N_1 N_2 \frac{G_{N_2} - G_{N_1}}{N_1 - N_2}, \quad (1.7)$$

которая в [8] не вычислялась, так как проводились расчеты для сравнительно малых значений N_1, N_2 .

2. N -ЧАСТИЧНЫЙ АЛГОРИТМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОРРЕЛИРОВАННОЙ ВЫБОРКИ И “МАЖОРАНТНОЙ ЧАСТОТЫ”

В работе [8] была использована так называемая “локальная оценка”, которая дает вклады в некоторый искомый функционал $z(t)$ от всех столкновений. Исследования, проведенные в [9] для решения задач переноса “со временем”, показали, что алгоритм прямого подсчета числа частиц в заданные моменты времени может обеспечивать не меньшую точность и тем самым быть менее трудоемким. Далее предварительно детально излагается такой алгоритм для псевдомаксвелловских молекул. Моделирование N -частичной цепи Маркова производится согласно описанию, данному в разд. 1.

1. Предполагается, что система из N частиц стартует в момент времени $t = 0$, причем начальные скорости частиц $\mathbf{v}_i^{(0)}$, $i = 1, 2, \dots, N$, выбираются соответственно заданной плотности $f_0(\mathbf{v})$.

Для реализации используемой далее коррелированной выборки рассматриваются два варианта системы: с $N = N_1$ и $N = N_2$, $N_1 > N_2$, причем N_1 начальных значений скорости частиц получаются дополнением предварительно выбранных N_2 значений.

2. Поскольку для псевдомаксвелловских молекул $a(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) \equiv a_0$, то время τ свободного пробега соответствующей системы выбирается соответственно плотности

$$p_1(t) = (Na_0/2) \exp[-(Na_0/2)t].$$

В случае, если рассматриваются не псевдомаксвелловские молекулы, то используется метод мажорантной частоты [4], в котором разыгрывается альтернатива: с вероятностью $a(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j)/M$ — столкновение реальное, где M удовлетворяет неравенству $a(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) \leq M$, т.е. происходит изменение скоростей; с дополнительной вероятностью — фиктивное столкновение, т.е. скорости частиц не изменяются.

3. Для реализации коррелированной выборки длины пробега в статье [8] предложен следующий алгоритм.

Временной шаг τ моделируется соответственно плотности $\sigma \exp(-\sigma\tau)$, причем $a_0N_2/2 \leq \sigma \leq a_0N_1/2$. После выбора τ веса Q_1, Q_2 , соответствующие ансамблям объемов N_1, N_2 пересчитываются по формулам:

$$Q_1 = Q'_1 \frac{a_0N_1}{2\sigma} \exp(-(a_0N_1/2 - \sigma)\tau), \quad Q_2 = Q'_2 \frac{a_0N_2}{2\sigma} \exp(-(a_0N_2/2 - \sigma)\tau).$$

Здесь Q'_1, Q'_2 — веса на предыдущем шаге. Если на очередном свободном пробеге происходит пересечение заданной временной границы T , то веса домножаются на отношения вероятностей этого события, т.е. на величины

$$\exp(-(a_0N_1/2 - \sigma)(T - t')), \quad \exp(-(a_0N_2/2 - \sigma)(T - t')),$$

где t' — момент столкновения, непосредственно предшествующего указанному пересечению. С учетом равенства $\mathbf{E}Q_1 = \mathbf{E}Q_2 = 1$, очевидно, что целесообразно подобрать σ так, чтобы достигался следующий минимум: $\min_{\sigma} \{ \mathbf{E}Q_1^2(T), \mathbf{E}Q_2^2(T) \}$. Простые вычисления дают равенства

$$\mathbf{E}Q_i^2(T) = \exp((a_0N_i/2 - \sigma)^2 T / \sigma), \quad i = 1, 2.$$

Ясно, что рассматриваемый минимум достигается при $\mathbf{E}Q_1^2(T) = \mathbf{E}Q_2^2(T)$. Отсюда получаем требуемое минимальное значение $\sigma = \sigma^* = a_0(N_1 + N_2)/4$.

В данном случае “вес” является глобальным [3] и определяется разностью сильно растущих при $T \rightarrow \infty$ величин для больших значений N . Поэтому здесь весовой алгоритм целесообразно применять, как в [8], лишь для малых значений $N_1, N_2 \approx 10$ с целью определения начальных тестовых значений N (см. далее разд. 5).

4. Коррелированный выбор номеров $\pi_1 = (i_1, j_1)$, $\pi_2 = (i_2, j_2)$ пар частиц, взаимодействующих в рассматриваемых системах в момент времени t , реализуется с помощью следующего алгоритма.

Далее в тексте через $\{\alpha_i\}$ будут обозначаться независимые случайные числа, равномерно распределенные в интервале $(0, 1)$. Сначала выбираем $\pi_1 = \pi_2$:

$$i_1 = i_2 = [\alpha_1 N_2] + 1, \quad j' = [\alpha_2 (N_2 - 1)] + 1,$$

$$\text{если } j' < i_2, \text{ то } j_1 = j_2 = j', \text{ иначе } j_1 = j_2 = j' + 1.$$

Если $\alpha_3 > N_2(N_2 - 1)/(N_1(N_1 - 1))$, то i_1 принимает другое значение:

$$i_1 = [\alpha_1 (N_1 - N_2)] + N_2 + 1.$$

Если же при этом $\alpha_3 > 1 - (N_1 - N_2)(N_1 - N_2 - 1)/(N_1(N_1 - 1))$, то меняется и j_1 :

$$j' = [\alpha_2 (N_1 - N_2 - 1)] + N_2 + 1, \quad \text{если } j' < i_1, \text{ то } j_1 = j', \text{ иначе } j_1 = j' + 1.$$

Здесь квадратные скобки $[]$ означают взятие целой части числа.

5. Соответственно заданной индикатрисе рассеяния (1.4) (см. также разд. 4) моделируются новые скорости $\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j$, остальные остаются без изменений.

6. Значение линейного функционала $G(T) = \int f(\mathbf{v}, T)q(\mathbf{v})d\mathbf{v}$ оценивается средним

$$\tilde{G}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Q(T)q(\mathbf{v}_i),$$

где $\{\mathbf{v}_i\}$ — скорости частиц в момент времени T . С целью уменьшения трудоемкости вычислений можно получать эту сумму пересчетом предыдущей суммы для $T' < T$ путем добавления к ней вкладов $\{Q(T)q(\mathbf{v}_i)\}$ “новых” частиц (скорости которых изменились за это время), предварительно удалив вклады “старых” частиц с теми же номерами. Для упрощения алгоритма в настоящей работе такой пересчет оценки осуществлялся после каждого столкновения.

3. ОПТИМИЗАЦИЯ N -ЧАСТИЧНОЙ ОЦЕНКИ

Обозначим через $\tilde{G}_N$ случайное значение N -частичной оценки G_N функционала $G = G(t) = \int f(\mathbf{v}, t)q(\mathbf{v})d\mathbf{v}$. Для построения достаточно точной статистической оценки величины G_N реализуется выборка значений $\{\tilde{G}_N^{(i)}\}$, $i = 1, \dots, n$, и вычисляется величина

$$\tilde{G}_{N,n} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \tilde{G}_N^{(i)} \approx G_N.$$

Трудоемкость такой оценки можно минимизировать, используя подходящую связь между величинами N и n . Полагая, что $|G - G_N| = \gamma/N$, получаем соотношение:

$$E(\tilde{G}_{N,n} - G)^2 = D\tilde{G}_{N,n} + \frac{\gamma^2}{N^2} \approx \frac{d}{nN} + \frac{\gamma^2}{N^2}.$$

Следовательно, оптимизация трудоемкости здесь достигается в результате минимизации величины $S = nNs_1$ при условии

$$\frac{d}{nN} + \frac{\gamma^2}{N^2} = \epsilon^2, \quad (3.1)$$

где ϵ — требуемая среднеквадратическая погрешность оценки $\tilde{G}_{N,n}$, $s_1 = \nu Ts_0$, s_0 — трудоемкость розыгрыша столкновения. Из (3.1) в предположении, что $\gamma^2/N^2 \leq \epsilon^2$, $N \geq 1$, $n \geq 1$, получаем

$$nN = \frac{d}{\epsilon^2 - \gamma^2/N^2}. \quad (3.2)$$

Минимальное значение этой величины достигается при $N = N_0 = +\infty$, причем надо полагать $n = n_0 = 1$. Однако вследствие ограниченности компьютерной памяти имеет место ограничение $N \leq N_m$, которое в наилучшем случае позволяет реализовать оценку лишь с

$$\epsilon^2 = \frac{d}{nN_m} + \frac{\gamma^2}{N_m^2}$$

при

$$n = n_m = \frac{d}{\epsilon^2 N_m - \gamma^2/N_m}.$$

Можно также уменьшать трудоемкость оценки, уравнивая, как это иногда делается в математической статистике, слагаемые в (3.1). При этом $n = n_2 = dN_2/\gamma^2$, $N = N_2 = \gamma\sqrt{2}/\epsilon$ и $n_2N_2 = 2d/\epsilon^2$.

Неравенство

$$n_m N_m = d/(\epsilon^2 - \gamma^2/N_m^2) < 2d/\epsilon^2 = n_2 N_2$$

выполняется, если $\epsilon^2 - \gamma^2/N_m^2 \geq \epsilon^2/2$, т.е. при $N_m > 2\gamma/\epsilon$, причем выигрыш в трудоемкости при оптимальных значениях n_m и N_m получается не более, чем в два раза. Учитывая универсальность способа уравнивания можно рекомендовать его для практического использования.

4. АЛГОРИТМ ОЦЕНКИ РЕШЕНИЯ МОДЕЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА С ПРОСТРАНСТВЕННО-ОДНОРОДНЫМИ НАЧАЛЬНЫМИ УСЛОВИЯМИ

В работах [10, 11] представляется точное решение пространственно-однородного уравнения Больцмана для максвелловских молекул. В этом случае уравнение Больцмана можно записать в виде

$$\frac{\partial f(\mathbf{v}, t)}{\partial t} = \int g \left(\frac{(\mathbf{u}, \mathbf{n})}{|\mathbf{u}|} \right) [f(\mathbf{v}', t)f(\mathbf{v}_1', t) - f(\mathbf{v}, t)f(\mathbf{v}_1, t)] d\mathbf{v}_1 d\mathbf{n}, \quad (4.1)$$

где $\mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_1$; $g(\cos \theta) = g \left(\frac{(\mathbf{u}, \mathbf{n})}{|\mathbf{u}|} \right) = \sigma(|\mathbf{u}|, \Omega)|\mathbf{u}|$ — произведение дифференциального сечения рассеяния на модуль относительной скорости; $\mathbf{n}$ — единичный вектор направления относительной скорости частиц после столкновения; $d\mathbf{n} = \sin \theta d\theta d\varphi$.

Скорости частиц после столкновения имеют вид

$$\mathbf{v}' = \frac{\mathbf{v} + \mathbf{v}_1}{2} + \frac{|\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|}{2} \mathbf{n}; \quad \mathbf{v}_1' = \frac{\mathbf{v} + \mathbf{v}_1}{2} - \frac{|\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|}{2} \mathbf{n}. \quad (4.2)$$

В [10] рассматривается задача Коши для уравнения (4.1) с начальным условием

$$f(\mathbf{v}, 0) = f_0(\mathbf{v}) = \frac{\exp \left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2(1-\beta)} \right)}{(2\pi(1-\beta))^{3/2}} \left[\frac{\beta}{(1-\beta)} \left(\frac{\mathbf{v}^2}{2(1-\beta)} - \frac{3}{2} \right) + 1 \right], \quad (4.3)$$

которое удовлетворяет следующим условиям нормировки:

$$\int f(\mathbf{v}, 0) d\mathbf{v} = 1, \quad \int f(\mathbf{v}, 0) \mathbf{v} d\mathbf{v} = 0, \quad \int f(\mathbf{v}, 0) \mathbf{v}^2 d\mathbf{v} = 3.$$

Решение этого уравнения Больцмана, которое получено в [10], имеет вид

$$f(\mathbf{v}, t) = (2\pi\tau)^{-\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2\tau} \right) \left[\frac{1-\tau}{\tau} \left(\frac{\mathbf{v}^2}{2\tau} - \frac{3}{2} \right) + 1 \right], \quad (4.4)$$

где

$$\tau = \tau(t) = 1 - \beta e^{-\lambda t}, \quad \lambda = \frac{\pi}{2} \int_0^\pi g(\cos \theta) \sin^3 \theta d\theta, \quad t \geq 0, \quad 0 \leq \beta \leq 0.4.$$

Моделирование цепи Маркова для оценки решения задачи Коши (4.1), (4.3) производится согласно алгоритму, описанному в разд. 2.

1. Предполагается, что система из N частиц стартует в момент времени $t = 0$, начальные скорости частиц $\mathbf{v}_i$, $i = 1, \dots, N$, выбираются соответственно плотности $f_0(\mathbf{v})$.

Моделирование согласно плотности $f_0(\mathbf{v})$ осуществляется методом суперпозиции (см., например, [12]) на основе представления:

$$f_0(\mathbf{v}) = p_1 f_1(\mathbf{v}) + p_2 f_2(\mathbf{v}),$$

где

$$p_1 = 1 - \frac{3\beta}{2(1-\beta)}; \quad p_2 = \frac{3\beta}{2(1-\beta)}; \quad \sigma = \sqrt{1-\beta};$$

$$f_1(\mathbf{v}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}\sigma^3} \exp \left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2\sigma^2} \right); \quad f_2(\mathbf{v}) = \frac{\mathbf{v}^2}{3(2\pi)^{3/2}\sigma^5} \exp \left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2\sigma^2} \right).$$

Для вывода формулы моделирования соответственно плотности $f_2(\mathbf{v})$, сделаем замену переменных $\mathbf{v} = v\omega$, где $v = |\mathbf{v}|$. Плотность распределения вектора (ω, v) выражается формулой:

$$\tilde{f}_2(\omega, v) = \frac{1}{4\pi} \frac{4\pi v^4}{3(2\pi)^{3/2}\sigma^5} \exp \left(-\frac{v^2}{2\sigma^2} \right) = \frac{1}{4\pi} p_{\chi_5(\sigma)}(v),$$

где $p_{\chi_5(\sigma)}(v)$ — плотность распределения случайной величины $\chi_5(\sigma) = \left(\sum_{i=1}^5 \xi_i^2 \right)^{1/2}$. Величины ξ_i , $i = 1, \dots, 5$, имеют нормальное распределение $N(0, \sigma^2)$ и независимы в совокупности. Соответственно выражению плотности

$\tilde{f}_2(\omega, v)$, следует выбрать единичный изотропный вектор ω и значение модуля вектора по формуле (см. [12], п. 1.9.1)

$$v = \sigma \sqrt{-2 \ln(\alpha_1 \alpha_2) - 2 \sin^2(2\pi \alpha_3) \ln \alpha_4}.$$

2. В задаче Коши (4.1), (4.3) рассматривается случай максвелловских молекул, т.е. $a(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) = \text{const} = a_0$, $i, j = 1, \dots, N$. Следовательно, как указано в разд. 2, время свободного пробега τ выбирается соответственно плотности $p_1(t) = (Na_0/2) \exp(-(Na_0/2)t)$, т.е. временная координата нового столкновения вычисляется по формуле: $t = t' - 2 \ln \alpha / (Na_0)$.

3. Номера пары частиц $\pi = (i, j)$, моделируются по формулам:

$$i = [\alpha_1 N] + 1, \quad j' = [\alpha_2 (N - 1)] + 1, \quad \text{если } j' < i, \text{ то } j = j', \text{ иначе } j = j' + 1.$$

Если необходимо коррелировать оценки для $N = N_1, N_2$, то используется алгоритм (3) из разд. 2.

4. Вычисляются направляющие косинусы a, b, c вектора $\mathbf{n}$ по стандартным формулам (см. [12]), причем можно полагать $a' = b' = 0, c' = 1$, т.к. $\mathbf{n}$ — изотропный вектор. Для вариантов с $N = N_1, N = N_2$ этот вектор повторяется.

Величина $\mu = \cos \theta$ моделируется соответственно плотности, пропорциональной функции $g(\cos \theta)$ из уравнения (4.1), $\varphi = 2\pi\alpha$, т.е. имеет равномерное на промежутке $(0, 2\pi)$ распределение. Приведенный алгоритм вытекает из того, что углы φ и θ соответствуют сферической системе координат с осью $(0, 0, 1)$. Новые скорости $\mathbf{v}'_i, \mathbf{v}'_j$, которые частицы приобретают после столкновения, вычисляются согласно формуле (4.2). Скорости частиц, не участвующих в столкновении, не меняются.

5. Вычисляется результирующая оценка (как в п.6 из разд. 2):

$$\tilde{G}_N(T) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Q(T) q(\mathbf{v}_i).$$

5. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

В качестве функционалов от решения задачи Коши (4.1), (4.3) рассматриваются четные моменты скоростей частиц

$$z_m(t) = \frac{1}{(2m+1)!!} \int f(\mathbf{v}, t) |\mathbf{v}|^{2m} d\mathbf{v}, \quad m = 0, 1, \dots,$$

где $f(\mathbf{v}, t)$ — точное решение этой задачи.

В [11] приведены формулы для записанных выше функционалов. Они имеют вид

$$z_0 = z_1 = 1, \quad z_m(t) = (1 - \beta e^{-\lambda t})^{m-1} [1 + (m-1)\beta e^{-\lambda t}].$$

В численных экспериментах использовалась модель молекул, соответствующая случаю псевдомаквелловских молекул [11], т.е. произведение дифференциального сечения рассеяния на модуль относительной скорости частиц было постоянным, а угловое распределение относительной скорости частиц после столкновения определялась индикатрисой: $g(\cos \theta) = 1/(4\pi)$, $-1 \leq \cos \theta \leq 1$, т.е. рассеяние изотропно.

Для исследования зависимости функционала $z_5(t)$ рассмотрим задачу Коши для уравнения (4.1) с начальным условием (4.3) и параметрами $\beta = 0.4, \lambda = 1/6$. Решение этой задачи $f(\mathbf{v}, t)$ имеет вид (4.4).

Рассмотрим теперь результаты расчетов для сформулированной тестовой задачи об оценке функционала $z_5(t)$. В табл. 1 даны статистические оценки $\tilde{z}_5(t)$ этого функционала для различных значений N и n при $t = 12$, а также соответствующие оценки значения γ по формуле $\tilde{\gamma} = N(z_5 - \tilde{z}_5)$, где z_5 — точное значение. Полная погрешность оценки здесь и в табл. 2 вычислена соответственно формуле $\Delta = \sqrt{D\tilde{G}_{N,n} + \gamma^2/N^2}$. Видно, что $\gamma \approx 2.32$. Отклонение от этого значения для $N = 10, 11$ связано с полной погрешностью оценок.

Для уточнения реальных расчетов с помощью выбора подходящих значений N, n и особенно с помощью экстраполяции по формуле (1.6), целесообразно использовать тестовые значения N , в какой-то степени близкие к $N = N^{(e)}$, такому, что $|z_5 - \tilde{z}_5(N^{(e)})| \leq \epsilon$, где ϵ — требуемая погрешность. Такие значения N можно предварительно определять при $t = t_{\max}$ с помощью представленных в разд. 2 малотрудоемких зависимых испытаний, например, для $N_1 = 11, N_2 = 10$, как в [8]. При этом тестовое значение N определяется соотношением $\tilde{\gamma}/N = \epsilon$, т.е. $N = \tilde{\gamma}/\epsilon$, где $\tilde{\gamma}$ вычисляется по формуле (1.7) для $t = t_{\max}$. Расчеты, проведенные при $n = 10^7, N_1 = 11, N_2 = 10$ в рассматриваемой задаче для $\epsilon = 0.001$ дали $\tilde{\gamma} = 1.56$ и $N = 1560$. Поэтому для реализации экстраполяционной оценки (1.6) были выбраны значения $N_1 = 2000$ и $N_2 = 1000$. Соответствующие независимые оценки функционала $z_5(t)$, их статистическая погрешность и значения γ даны в табл. 3. Видно, что экстраполяция уменьшает полную погрешность примерно на порядок.

Таблица 1. Значения оценки и полной погрешности при $t = 12$

N	n	$\tilde{z}_5 \pm \Delta$	$\tilde{\gamma}$
10	10^8	0.7864 ± 0.1874	1.873
11	10^8	0.7999 ± 0.1739	1.912
100	10^8	0.9512 ± 0.0226	2.251
200	10^8	0.9622 ± 0.0116	2.308
300	10^8	0.9660 ± 0.0078	2.322
500	10^7	0.9690 ± 0.0047	2.290
1000	10^7	0.9714 ± 0.0023	2.320
2000	10^7	0.9726 ± 0.0012	2.320

Таблица 2. Значения оптимизированной (при $t = 12$) оценки функционала и полной погрешности

t	При $\varepsilon = 0.001$, $N = 3268$, $n = 65500$	При $\varepsilon = 0.0001$, $N = 32680$, $n = 655000$	Точное решение
0	0.33697 ± 0.00016	0.33695 ± 0.00002	0.33696
1	0.45054 ± 0.00023	0.45055 ± 0.00002	0.45055
2	0.55571 ± 0.00032	0.55595 ± 0.00003	0.55593
3	0.64815 ± 0.00041	0.64838 ± 0.00004	0.64839
4	0.72603 ± 0.00049	0.72617 ± 0.00005	0.72625
5	0.78880 ± 0.00061	0.78971 ± 0.00006	0.78980
6	0.83967 ± 0.00065	0.84035 ± 0.00007	0.84043
7	0.87928 ± 0.00074	0.87997 ± 0.00007	0.88000
8	0.90956 ± 0.00082	0.91043 ± 0.00008	0.91046
9	0.93257 ± 0.00086	0.93362 ± 0.00009	0.93363
10	0.95072 ± 0.00083	0.95108 ± 0.00008	0.95106
11	0.96332 ± 0.00095	0.96416 ± 0.00010	0.96408
12	0.97341 ± 0.00100	0.97378 ± 0.00010	0.97374

Далее будет дано полуэвристическое объяснение этого эффекта, фактически связанного почти с занулением детерминированной погрешности. В связи с этим в табл. 3 даны оценки статистической погрешности. В табл. 2 даны результаты расчетов для оптимальных значений $N = N_2$, $n = n_2$ (см. разд. 3), вычисленных при $t = 12$ для $\varepsilon = 0.001$ и $\varepsilon = 0.0001$.

Теперь дадим полуэвристическое объяснение эффекта экстраполяции. Для этого формулу (1.6) перепишем в виде

$$\tilde{G}_\infty \approx -\frac{N_2}{N_1 - N_2} \tilde{G}_{N_2} + \frac{N_1}{N_1 - N_2} \tilde{G}_{N_1}.$$

Подстановка сюда выражений $\tilde{G}_{N_i} \approx G_\infty + \gamma/N_i$ дает равенство $\tilde{G}_\infty = G_\infty$, т.е. в линейном (по $1/N$) приближении детерминированная погрешность уменьшается до нуля. В то же время дисперсия экстраполяционной оценки σ_e^2 может не сильно возрасти. Это можно получить из соотношения

$$\sigma_e^2 = D(\tilde{G}_\infty) = \frac{N_2^2}{(N_1 - N_2)^2} D\tilde{G}_{N_2} + \frac{N_1^2}{(N_1 - N_2)^2} D\tilde{G}_{N_1}$$

особенно в случае $N_2 \ll N_1$. Величина $D\tilde{G}_\infty$ оценивается численно и определяет статистическую оценку погрешности, приведенную в табл. 3. Простые вычисления здесь дают соотношение $\sigma_e \approx \sqrt{6}\sigma_1 \approx 2.4\sigma_1$, где

Таблица 3. Значения независимых оценок функционала $z_5(t)$ и статистические погрешности (одна σ)

t	$N_2 = 1000, n = 10^7$	$N_1 = 2000, n = 10^7$	Точное решение	Экстраполяция	γ	d
0	0.33697 ± 0.00002	0.33696 ± 0.00001	0.33696	0.33694	0.0320	5
1	0.45046 ± 0.00003	0.45051 ± 0.00002	0.45055	0.45057	0.1140	12
2	0.55572 ± 0.00004	0.55583 ± 0.00003	0.55593	0.55595	0.2333	20
3	0.64795 ± 0.00005	0.64817 ± 0.00003	0.64839	0.64840	0.4437	31
4	0.72548 ± 0.00006	0.72582 ± 0.00004	0.72625	0.72616	0.6847	43
5	0.78870 ± 0.00007	0.78927 ± 0.00005	0.78980	0.78984	1.1399	55
6	0.83915 ± 0.00008	0.83971 ± 0.00005	0.84043	0.84027	1.1205	66
7	0.87847 ± 0.00008	0.87919 ± 0.00006	0.88000	0.87991	1.4359	76
8	0.90864 ± 0.00009	0.90952 ± 0.00006	0.91046	0.91040	1.7584	85
9	0.93170 ± 0.00009	0.93262 ± 0.00006	0.93363	0.93355	1.8499	92
10	0.94913 ± 0.00009	0.94994 ± 0.00007	0.95106	0.95075	1.6241	98
11	0.96185 ± 0.00010	0.96292 ± 0.00007	0.96408	0.96399	2.1405	103
12	0.97142 ± 0.00010	0.97258 ± 0.00007	0.97374	0.97374	2.3108	107

$\sigma_1 = \sqrt{D\tilde{G}_{N_1}}$. Погрешность экстраполяционной оценки $\tilde{z}_5^{(e)}(t)$ лишь для значений $t = 6, 10$ несколько превышает σ_e :

$$|\tilde{z}_5^{(e)}(6) - z_5(6)| \approx 1.3\sigma_e, \quad |\tilde{z}_5^{(e)}(10) - z_5(10)| \approx 1.8\sigma_e.$$

Анализ оценок из таблиц 2, 3 с учетом выражения $S = CnN$ среднего числа арифметических операций (см. разд. 3) показывает, что оптимизационные оценки являются менее трудоемкими.

В заключение заметим, что полученные результаты убедительно подтверждают соотношение

$$G_N(t) = z_5(t; N) \approx z_5(t) + \gamma(t)/N.$$

Ясно, что это соотношение связано с квадратичным порядком $O(N^2)$ числа столкновений частиц вследствие chaos propagation, однако строгое доказательство здесь пока не получено. Можно также отметить, что много-частичный алгоритм является важной составной частью методики mean field game, возникнув ранее появления этого термина.

Отметим, что в [13] проведен сравнительный анализ дифференциальной и соответствующей стохастической пуассоновской SEIR моделей [14] для тестовой задачи моделирования пандемии COVID-19 в Новосибирске с 23 марта по 21 июня 2020 г. с начальной численностью $N = 2\,798\,170$. Путем варьирования начальной численности вида $N_k = kN$ при $k \geq 2$ было показано, что среднестатистические числа случаев выявления заболевших меньше (начиная с 7 апреля) соответствующих дифференциальных значений на величину, статистически неотличимую от $C(t)/k$, причем для 21 июня значение $C \approx 27.3$; это соотношение позволяет использовать стохастическую модель для больших значений N . Исследовалось также влияние на прогноз введения запаздывания, т.е. инкубационного периода, соответствующего пуассоновской модели.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кац М. Вероятность и смежные вопросы в физике. М.: Мир, 1965. 408 с.
2. Михайлов Г.А. Весовые методы Монте-Карло. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000. 248 с.
3. Михайлов Г.А., Рогазинский С.В. Весовые методы Монте-Карло для приближённого решения нелинейного уравнения Больцмана // Сиб. матем. журнал. 2002. Т. 48. № 3. С. 620–621.
4. Ivanov H.S., Rogasinsky S.V. Analysis of numerical techniques of the direct simulation Monte Carlo method in the rarefied gas dynamics // Sov. J. Numer. Anal. Math. Modeling. 1988. Vol. 3. № 6. P. 453–465.

5. Денисюк С.А., Лебедев С.Н., Малама Ю.Г. Об одной проверке нелинейной схемы метода Монте-Карло // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1971. Т.11. № 3. С. 783–785.
6. Бёрд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981.
7. Королев А.Е., Яницкий В.Е. Прямое статистическое моделирование столкновительной релаксации в смесях газов с большим различием в концентрациях // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1983. Т. 23. № 3. С. 674–680.
8. Иванов М.С., Коротченко М.А., Михайлов Г.А., Рогазинский С.В. Глобально-весовой метод Монте-Карло для нелинейного уравнения Больцмана // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2005. Т.45. № 10. С. 1860–1870.
9. Лотова Г.З., Михайлов Г.А. Исследование сверхэкспоненциального роста среднего потока частиц в случайной размножающей среде // Сиб. ж. вычисл. матем. 2023. Т. 26. № 4. С. 401–413.
10. Бобылев А.В. О точных решениях уравнения Больцмана // Докл. АН СССР. 1975. Т. 225. № 6. С. 1296–1299.
11. Бобылев А.В. Точные решения нелинейного уравнения Больцмана и теория релаксации максвелловского газа // Теор. и матем. физ. 1984. Т. 60. № 2. С. 280–310.
12. Михайлов Г.А., Войтушек А.В. Численное статистическое моделирование, методы Монте-Карло. М.: Академия, 2006. 367 с.
13. Lotova G.Z., Lukinov V.L., Marchenko M.A., Mikhailov G.A., and Smirnov D.D. Numerical-statistical study of the prognostic efficiency of the SEIR model // Rus. J. Numer. Analysis Math. Modelling. 2021. Vol. 36. № 6. P. 337–345.
14. Pertsev N.V., Loginov K.K., Topchii V.A. Analysis of a stage-dependent epidemic model based on a non-Markov random process // J. Appl. Industr. Math. 2020. V. 14. № 3. P. 566–580.

INVESTIGATION AND OPTIMIZATION OF THE N -PARTIAL NUMERICAL STATISTICAL ALGORITHM FOR SOLVING THE BOLTZMANN EQUATION

G. Z. Lotova^{a,b,*}, G. A. Mikhailov^{a,b}, S. V. Rogazinsky^{a,b}

^a Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS, Academician Lavrentyev Ave., 6,
Novosibirsk, 630090, Russia

^b Novosibirsk State University, Pirogov st., 2, Novosibirsk, 630090, Russia

*e-mail: lot@osmf.ssc.ru

Received 27 November, 2023

Revised 27 November, 2023

Accepted 14 January, 2024

Abstract. The primary goal of the study is to test the hypothesis that the known N -partial statistical algorithm provides an estimate of the solution to the nonlinear Boltzmann equation with an error of order $O(1/N)$. To achieve this, practically important optimal relationships between the value of N and the number n of sample estimates are determined. Numerical results for a problem with a known solution confirm the adequacy of the formulated estimates and conclusions.

Keywords: Monte Carlo method, statistical modeling, Boltzmann equation, N -partial Markov chain, molecular chaos, majorant frequency method.