Имитационное моделирование и проблема обоснования его результатов

Сусляков Александр Сергеевич, гр. 522

Санкт-Петербургский государственный университет
Математико-механический факультет
Кафедра статистического моделирования

Научный руководитель: к.ф.-м.н. доц. Христинич В.Б.
Рецензент: д.ф.-м.н. проф. Ермаков С.М.

Санкт-Петербург
2008г.

Введение

Имитационное моделирование – метод исследования сложных систем, подразумевающий замену реальной системы на её математическую модель с последующим проведением экспериментов над полученной моделью, а не над самим изучаемым объектом.

Применение имитационного моделирования:

- невозможность проведения реального эксперимента,
- высокая стоимость эксперимента,
- трудоемкость эксперимента,
- наличие временных и пространственных ограничений,
- неприменимость аналитических методов решения.

Основные принципы и практическое применение

Основным принципом имитационного моделирования является многократное воспроизведение поведения системы при различных входных данных для получения статистики выходных данных.

Процесс компьютерного моделирования сопряжён со следующими практическими трудностями: потребность в больших вычислительных мощностях и расхождение реального времени и имитационного, зависящего от скорости процессора.

Рассмотрим одну из самых сложных и актуальных проблем – построение решения уравнения Больцмана – в связи с огромной важностью приложения. Впервые за 130 лет было построено точное решение и произведено его сравнение с прямыми методами моделирования (Бёрда). Сравнение с методом статистического имитационного моделирования ранее не проводилось, чему и посвящена данная работа.

Решение уравнения Больцмана, метод Бобылева

Состояние газа характеризуется одночастичной функцией $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)(t \geq 0)$ распределения скоростей $\mathbf{v} \in R^3$, значением которой является ожидаемое число частиц в единице объема фазового пространства $R^3 \times R^3$ в момент времени t, а ее эволюция описывается уравнением Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = I[f, f], \tag{1}$$

где $I[f, f]$ - интеграл столкновений (нелинейный интегральный оператор, действующий на $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ только по переменной $\mathbf{v}$).

$$\begin{aligned} I[f, f] = \int d\mathbf{w}\ d\mathbf{n} g\left(u, \frac{\mathbf{un}}{u}\right)\{f(\mathbf{v}')f(\mathbf{w}') - f(\mathbf{v})f(\mathbf{w})\}, \\ \mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{w}, \quad u = |\mathbf{u}|, \quad g(u, \mu) = u\sigma(u, \mu), \\ \mathbf{v}' = \frac{1}{2}(\mathbf{v} + \mathbf{w} + u\mathbf{n}), \quad \mathbf{w}' = \frac{1}{2}(\mathbf{v} + \mathbf{w} - u\mathbf{n}), \end{aligned}$$

σ – дифференциальное сечение рассеяния.

Решение уравнения Больцмана, метод Бобылева

Преобразование Фурье для уравнения Больцмана.

$$\varphi(\mathbf{x}, \mathbf{k}, t) = \int d\mathbf{v} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{v}} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t),$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + i \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \mathbf{k} \partial \mathbf{x}} = J[\varphi, \varphi] = \int d\mathbf{v} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{v}} I[f, f]. \tag{2}$$

Фурье-образ интеграла столкновений

$$J[\varphi, \varphi] = \int d\mathbf{v} I[f, f] e^{-i\mathbf{k}\mathbf{v}} =$$

$$= \int d\mathbf{n} g\left(\frac{\mathbf{k}\mathbf{n}}{k}\right) \left\{\varphi\left(\frac{\mathbf{k} + k\mathbf{n}}{2}\right) \varphi\left(\frac{\mathbf{k} - k\mathbf{n}}{2}\right) - \varphi(0)\varphi(\mathbf{k})\right\}.$$

Решение уравнения Больцмана, метод Бобылева

Постановка задачи однородной релаксации:

$$f = f(\mathbf{v}, t), \quad \frac{\partial f}{\partial t} = I[f, f], \quad f|_{t=0} = f_0(\mathbf{v}).$$

Функционалы для задачи релаксации:

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

Безразмерные величины введены так, чтобы

$$f(\mathbf{v}) \xrightarrow[t\to\infty]{} f_{\mathsf{M}}(\mathbf{v}) = (2\pi)^{-3/2} e^{-v^2/2}.$$

Исходная задача после преобразования Фурье:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = J[\varphi, \varphi], \quad \varphi|_{t=0} = \varphi_0(\mathbf{k}).$$

Для фурье-образа те же начальные условия имеют вид:

$$\varphi(0, t) = 1, \quad \frac{\partial_{\varphi}(\mathbf{k}, t)}{\partial \mathbf{k}}|_{k=0} = 0, \quad \frac{\partial^2_{\varphi}(\mathbf{k}, t)}{\partial \mathbf{k}^2}|_{k=0} = -3; \quad \varphi_{\mathsf{M}}(\mathbf{k}) = e^{-\frac{k^2}{2}}.$$

Свойства преобразования и решения уравнения Больцмана

- **Свойство симметрии.**
  Уравнение

$$f_t = I[f, f] = \int d\mathbf{w} d\mathbf{n} g(\frac{\mathbf{un}}{u})\{f(\mathbf{v}')f(\mathbf{w}') - f(\mathbf{v})f(\mathbf{w})\}$$

  инвариантно относительно однопараметрической полугруппы преобразований

$$T_\theta f = e^{\frac{\theta}{2}\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}^2}} f = (2\pi\theta)^{-3/2} \int d\mathbf{w} f(\mathbf{w}, t) e^{-\frac{(\mathbf{v}-\mathbf{w})^2}{2\theta}}, \, \theta \geq 0,$$

  оставляющих функцию распределения неотрицательной.

- **Конечность моментов решения.**
  Преобразование Фурье возможно, поскольку

$$||f||^2 = (2\pi)^{3/2} \int d\mathbf{v} e^{v^2/2} |f(\mathbf{v})|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n+1)!!}{(2n)!!} |u_n|^2 < \infty.$$

Получение решения и моментов

Решение в фурье-образе:

$$\varphi(x,t) = (1-\theta x e^{-\lambda t})\exp[-x(1-\theta e^{-\lambda t})],$$

$$\lambda = \beta_{2,3} = \int\limits_0^1 ds\,\rho(s)s(1-s).$$

Решение после обратного преобразования Фурье:

$$f(\mathbf{v},t) = (2\pi\tau)^{-3/2}\exp\left(-\frac{v^2}{2\tau}\right)\left(\frac{1-\tau}{2\tau^2}\,v^2 + \frac{5\tau-3}{2\tau}\right),$$

$$\tau = \tau(t) = 1-\theta e^{-\lambda t},\ \lambda = (\pi/2)\int\limits_{-1}^{1} d\mu g(\mu)(1-\mu^2), \quad t \geq 0,$$

причем $f(v,t) \geq 0$ при $0 \leq \theta \leq 2/5$.
Возможно получение точных выражений для моментов:

$$z_0 = z_1 = 1,\ z_n(t) = (1-\theta e^{-\lambda t})^{n-1}[1+(n-1)\theta e^{-\lambda t}];$$
$$u_n(t) = (1-n)\theta^n e^{-n\lambda t};\ \lambda = \lambda_2/2 = \lambda_3/3,\ n = 2,3,\ldots.$$

Решение уравнения Больцмана, метод Крука – Ву

Моменты

$$M_k \equiv \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k+1}\Gamma(k+\frac{3}{2})}\int \mathbf{v}^{2k} f(\mathbf{v},t)d^3\mathbf{v}, \quad k=0,1,2,\dots$$

нормированы так, чтобы $M_k(\infty)=1, \quad k=0,1,2,\dots$.
Уравнение

$$\frac{dM_k}{dt}+M_k=\frac{1}{k+1}\sum_{m=0}^{k} M_m M_{k-m}, \quad k=0,1,2,\dots$$

прямому решению не подлежит, так как для нахождения k-того момента необходимы значения всех предыдущих моментов, то есть последовательность нерасщепляющаяся. Для решения системы вводится производящая функция моментов

$$G(\xi,t)\equiv\sum_{k=0}\xi^k M_k(t).$$

$G(\xi,\mathbf{t})$ удовлетворяет следующему дифференциальному уравнению в частных производных:

$$\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial G}{\partial\mathbf{t}}+\xi G\right)=G^2(\xi,\mathbf{t}).$$

Свойства решения уравнения Больцмана в задаче релаксации

В результате получаем решение в том же виде, что и в работе Бобылева:

$$f(\mathbf{v},t) = (2\pi\tau)^{-3/2}\exp\left(-\frac{v^2}{2\tau}\right)\left(\frac{1-\tau}{2\tau^2}\,v^2 + \frac{5\tau-3}{2\tau}\right),\ \tau = 1 - e^{-t/6}.$$

В силу того, что решение неотрицательно, вводится ограничение на t:

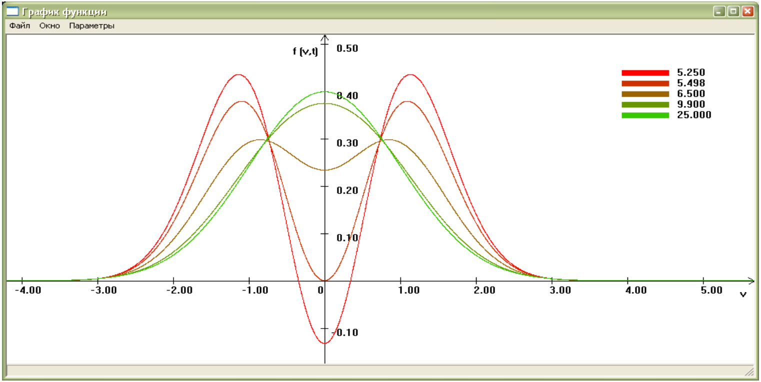
$$\tau \geq \frac{3}{5}, \quad t \geq t_0 \equiv 6\ln\frac{5}{2} \sim 5.498.$$

Также для бесконечных скоростей решение представимо в виде

$$f(\mathbf{v},t) = f(\mathbf{v},\infty)e^{-\zeta}(1 - \frac{22}{3}\zeta + \frac{44}{3}\zeta^2),\ \zeta = (45/22t)\mathbf{v}^2.$$

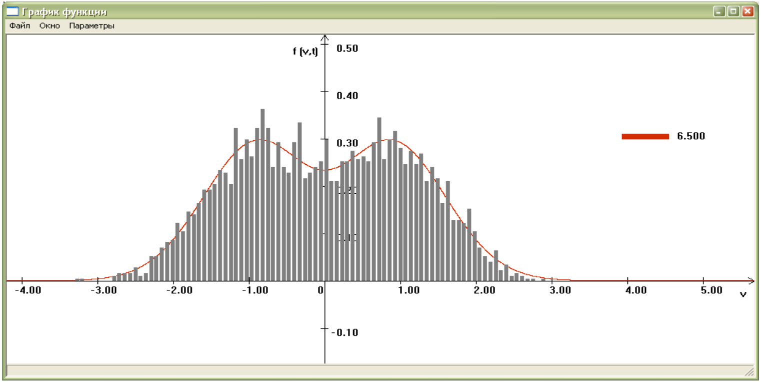
Точное решение

Функция $f(\mathbf{v}, t)$, удовлетворяющая исходному уравнению, при различных значениях t выглядит следующим образом:



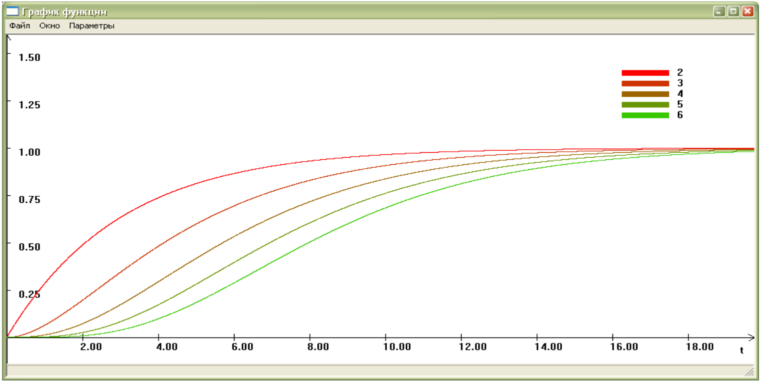
Моделирование

Результаты моделирования точного решения при $t = 10$:



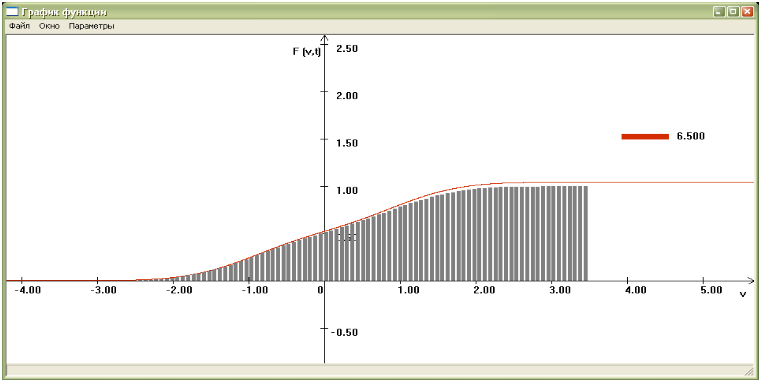
Моменты

Моменты функции при различных значениях n:



Функция распределения

График функции распределения:



Заключение

В дипломной работе изложены два метода построения точного решения задачи о релаксации (метод Бобылева и метод Крука – Ву). Описано упрощение исходного уравнения Больцмана для максвелловских молекул, позволяющее построить точное решение в задаче релаксации. Оба метода переработаны и приведены к единым обозначениям. Произведено сравнение точного решения и результатов его моделирования методом отбора и методом смеси. Разработана программа для исследования точного решения.