Численно-вероятностный метод решения гиперболических уравнений массоэнергопереноса с использованием решений волнового уравнения

В. А. Сиренек
Санкт-Петербургский государственный технологический институт
e-mail: sirenek@sa.lti-gti.ru

А. А. Мусаев
Санкт- Петербургский государственный технологический институт
e-mail: amusaev@technolog.edu.ru

Аннотация. **Краевые задачи для одномерных гиперболических уравнений (релаксационных моделей массоэнергопереноса) сводятся к интегральным уравнениям, ядра которых выражаются через эволюционный оператор волнового уравнения для исходной краевой задачи. Строится случайный марковский процесс и функционал от него, с помощью которого интегральные уравнения решаются методом Монте-Карло.**

Ключевые слова: гиперболические уравнения массопереноса; интегральные уравнения; случайный процесс; точные решения волнового уравнения; метод Монте-Карло

При моделировании процессов массоэнергопереноса с учётом релаксационных эффектов часто используются гиперболические уравнения второго порядка – релаксационные (или волновые) модели, отличающиеся от классических моделей (параболических уравнений) наличием второй производной по времени [1,2]:

$$c''_{tt} = w^2 \cdot c''_{xx} + f(x,t,c,c'_t,c'_x)\,, \quad (1)$$

где $c(x,t)$ – потенциал переносимого физического поля; w – скорость распространения возмущений поля; c''_{tt} и c''_{xx} – вторые производные по времени t и по пространству x.

Вероятностные способы решения дифференциальных уравнений лишены недостатков других численных методов решения, в том числе разностных. На основе работ по установлению связи между теорией вероятностей и гиперболическими уравнениями, разрабатывались способы решения этих уравнений методом Монте-Карло. При этом как при решении одномерного в [3], так и многомерного в [4] телеграфного уравнения использовались решения волнового уравнения. Этот метод развивается в настоящей работе. Метод основан на обращении дифференциального оператора [5]. С позиций обобщённого решения абстрактного эволюционного уравнения в функциональном пространстве краевая задача для (1) сведена к задаче Коши для системы интегральных уравнений, ядра в которых выражены через эволюционный оператор для волнового уравнения с аналогичными для (1) начальными и граничными условиями. Система интегральных уравнений решена методом Монте-Карло, т.е. осреднением мультипликативного функционала от построенного случайного процесса.

Рассмотрена смешанная задача для абстрактного эволюционного уравнения относительно вектор-функции $V(t)$ в функциональном (банаховом) пространстве E :

$$dV(t)/dt = A(t)V(t) + B(t)V(t);\, V(0) = V_0;\, V(t) \in Z_t,\ \forall t\,, \quad (2)$$

оператор $A(t)$ – линейный, $B(t)$ – непрерывный, вообще говоря, нелинейный. $V(t) \in Z_t$ – абстрактный аналог линейных неоднородных (аффинных) граничных условий, т.е. подпространство $Z_t \subset E$ при $\forall\ t$ – аффинное и является результатом параллельного переноса линейного (направляющего) подпространства функций $\tilde{Z}_t \subset E$, удовлетворяющих линейным однородным граничным условиям. Следуя положениям теории, считаем обобщенным решением задачи (2) решение интегрального уравнения:

$$V(t) = U(t,0)V_0 + \int_0^t \tilde{U}(t,s)B(s)V(s)ds\,, \quad (3)$$

$U(t,s)$: $Z_s \to Z_t$ – эволюционный оператор для “невозмущенной” задачи (2), т.е. при $B(t)V(t)\equiv 0$. Оператор $U(t,s)$ – аффинный, непрерывный, т.е. для любых $V\in Z_s$, $W\in \tilde{Z}_s$ имеет место соотношение $U(V+W) = U(V) + \tilde{U}(W)$, где $\tilde{U}(t,s)$: $\tilde{Z}_s \to \tilde{Z}_t$ – линейный оператор, называемый ассоциированным с $U(t,s)$. Предполагается, что “возмущающий” оператор $B(t)$: $Z_t \to \tilde{Z}_t$ – не нарушает граничных условий. Введена вектор-функция $W(t)=U(0,t)\, V(t)$. Начальные условия имеют вид: $W_0 = W(0) = V(0) = V_0$. Интегральное уравнение (3) эквивалентно системе уравнений:

$$W_1(t) = W_0 + \int_0^t \tilde{U}(0,s)W_2(s)ds,\ W_2(t) = B(t)W_3(t),\ W_3(t) = U(t,0)W_1(t). \quad (4)$$

Решение $W_1(t)$ системы (4) определяет решение задачи (2): $V(t) = U(t,0)W_1(t)$. Оператор $U(0,t)$ аннулирует действие $U(t,0)$. Уравнение (1) с заданными начальными и граничными условиями сводится к задаче (2) с последующим переходом к системе (4), фактически к (3). Рассмотрим для примера типовую краевую задачу на $[0,X]$:

$$c\big|_{t=0} = c_0(x),\ \ c'_t\big|_{t=0} = c_{t0}(x),\ \ x\in[0,X];\ \ c\big|_{x=0} = \gamma_1(t),\ \ c'_x\big|_{x=X} = \gamma_2(t),\ \ t\in[0,T] \quad (5)$$

$$c_0 \in C^1[0,X],\ c_{t0}\in C[0,X],\ \gamma_1 \in C^1[0,T],\ \gamma_2 \in C[0,T]$$

и выполнены условия согласования. Предполагается, что функция f из (1) непрерывна по x, интегрируема по t. Введено пространство E функций $\varphi(x,i)$, $x\in[0,X]$, i=1,2,3, непрерывных по x и таких, что $\varphi(x,3) = \varphi'_x(x,1)$; E наделяется нормой. В полученном функциональном пространстве E определены операторы A и B(t) применительно к уравнению (2):

$$A\varphi(x,1) = \varphi(x,2),\ A\varphi(x,2) = w^2\varphi'_x(x,3) = w^2\varphi''_{xx}(x,1),\ A\varphi(x,3) = \varphi'_x(x,2) \quad (6)$$

$$B(t)\varphi(x,1) = 0,\ B(t)\varphi(x,2) = f(x,t,\varphi(x,1),\varphi(x,2),\varphi(x,3)),\ B(t)\varphi(x,3) = 0.$$

При этом уравнение (1) эквивалентно абстрактному (2) для вектор-функции $V(t)(x,i)\in E$, которая связана с решением c(x,t) уравнения (1) соотношениями:

$$V(t)(x,1) = c(x,t),\ V(t)(x,2) = c'_t(x,t),\ V(t)(x,3) = c'_x(x,t) \quad (7)$$

$$V(0)(x,1) = V_0(x,1) = c_0(x),\ V(0)(x,2) = V_0(x,2) = c_{t0}(x),\ V(0)(x,3) = V_0(x,3) = dc_0(x)/dx.$$

Подпространство $Z_t \subset E$ состоит из всех $\varphi\in E$, удовлетворяющих условиям:

$$\varphi(0,1) = \gamma_1(t),\ \varphi(0,2) = d\gamma_1(t)/dt,\ \varphi(X,3) = \gamma_2(t). \quad (8)$$

Для задачи (1),(5) в виде (2) выполнены все условия. Решение понимается как решение (3). $U(t,s)$ – эволюционный оператор для однородного волнового уравнения, который можно выписать явно, пользуясь точными решениями волнового уравнения и производными от них. Точные решения $\hat{c}$ неоднородного волнового уравнения:

$$\hat{c}''_{tt} = w^2\hat{c}''_{xx} + \hat{f}(x,t), \quad (9)$$

выводятся из интегрального уравнения колебаний:

$$\int_L \left(\frac{\partial\hat{c}}{\partial t}dx + w^2\frac{\partial\hat{c}}{\partial x}dt\right) + \iint_G \hat{f}(x,t)dxdt = 0, \quad (10)$$

область G ограничена кривой L. Формулы для $\hat{c}$ при $z > T$, $z = t - s$, $T = X/w$ основаны на $\hat{c}$, соответствующих $z \le T$ из области □=$\{0\le z\le T;\ 0\le x\le X\}$. Точки □ не имеют более одного отражения характеристик от границ. Рассмотрим случай $G\subset$ □. Диагоналями $x - wz = 0$ и $x + wz = X$ область □ разбивается на четыре зоны:

I. $\{0\le z\le X/2w,\ \ wz\le x\le X - wz\}$;

II. $\{0\le z\le X/2w,\ 0\le x\le wz\}\cup\{X/2w < z\le X/w, 0\le x\le X - wz\}$;

III. $\{0\le z\le X/2w, X - wz < x\le X\}\cup\{X/2w < z\le X/w, wz\le x\le X\}$

IV. $\{X/2w < z\le X/w,\ X - wz < x < wz\}$;

Обозначим точки зон:

$$A^I(x,z)\in I,\ A^{II}(x,z)\in II,\ A^{III}(x,z)\in III,\ A^{IV}(x,z)\in IV, \quad (11)$$

$B(x_1,s)$, $B'(-x_1,s)$, $C(x_2,s)$, $C'(x_3,s)$, $D(0,t_1)$, $D'(X,t_2)$, $E'(X,s)$, $x_1 = x - wz$, $x_2 = x + wz$, $x_3 = 2X - x - wz$, $t_1 = z - x/w$, $t_2 = z - (X - x)/w$.

Для точек $A^I(x,z)$ нет отражений характеристик от границ, для $A^{II}(x,z)$ есть отражение характеристики $x - wz = const$ от границы x=0, для $A^{III}(x,z)$ есть отражение $x + wz =$ const от x=X, для $A^{IV}(x,z)$ есть отражение обеих характеристик от границ.

Рассмотрим для примера краевую задачу для уравнения (9) с условиями (5):

$$\hat{c}\,|_{t=0} = c_0(x),\ \hat{c}'_t\,|_{t=0} = c_{t0}(x),\ x\in(0,X);\quad \hat{c}\,|_{x=0} = \gamma_1(t)\quad \hat{c}'_x\,|_{x=X} = \gamma_2(t),\ t>0. \quad (12)$$

Выражения $\hat{c}$, а также полученные из них дифференцированием выражения $\hat{c}'_t$ и $\hat{c}'_x$ для $z\le T$ для точек зоны $A^{IV}(x,z)$ имеют вид:

$$\hat{c}(A^{IV}) = [c_0(C') - c_0(B')]/2 + (1/2w)\cdot\int_{B'}^{C'} c_{t0}(y)dy + (1/w)\cdot\int_{C'}^{X} c_{t0}(y)dy + {}$$
$$+\gamma_1(D) + w\int_{E'}^{D'}\gamma_2(y)dy + (1/w)\left((1/2)\iint_{A^{IV}DB'C'D'} + \iint_{D'C'E'}\right)\hat{f}(x,t)dxdt; \quad (13)$$

$$\hat{c}'_t(A^{IV}) = -(w/2)\cdot[dc_0(B')/dx + dc_0(C')/dx] + (1/2)\cdot[c_{t0}(C') - c_{t0}(B')] + {}$$
$$+d\gamma_1(D)/dt + w\gamma_2(D') \quad +(1/2)\cdot\left(\int_D^{A^{IV}} + \int_{D'}^{A^{IV}} + \int_{C'}^{D'} - \int_{B'}^{D}\right)\hat{f}(x,t)dt;$$

$$\hat{c}'_x(A^{IV}) = (1/2)\cdot[dc_0(B')/dx - dc_0(C')/dx] + (1/2w)\cdot[c_{t0}(B') + c_{t0}(C')] - {}$$
$$-(1/w)\cdot d\gamma_1(D)/dt + \gamma_2(D') \; +(1/2w)\cdot\left(\int_{D'}^{A^{IV}} + \int_{B'}^{D} - \int_D^{A^{IV}} + \int_{C'}^{D'}\right)\hat{f}(x,t)dt.$$

Аналогичные формулы, полученные для других краевых задач и всех зон области □, проверены на функциях, удовлетворяющих волновому уравнению [6]. Для построения эволюционного оператора $U(t,s)$ из (2) использованы формулы типа (13) при $\hat{f}\equiv 0$ для $0\le t - s\le X/w$. Приведем результат действия $U(t,s)$ на функцию $\varphi(x,i)$, (i=1,2,3) в зависимости от зон области □ с учётом (8). Для точек зоны $A^{IV}(x,z)$:

$$U(t,s)\varphi(x,1)=\frac{\varphi(x_3,1)}{2}-\frac{\varphi(-x_1,1)}{2}+\frac{1}{2w}\int_{-x_1}^{x_3}\varphi(y,2)dy+\frac{1}{w}\int_{x_3}^{X}\varphi(y,2)dy+\gamma(t_1,1)+w\int_s^{t_2}\gamma(y,2)dy,$$

$$U(t,s)\varphi(x,2)=-\frac{w(\varphi(-x_1,3)+\varphi(x_3,3))}{2}+\frac{\varphi(x_3,2)}{2}-\frac{\varphi(-x_1,2)}{2}+\gamma(t_1,3)+w\gamma(t_2,2)$$

$$U(t,s)\varphi(x,3)=\frac{\varphi(-x_1,3)-\varphi(x_3,3)}{2}+\frac{\varphi(-x_1,2)}{2w}+\frac{\varphi(x_3,2)}{2w}-\frac{1}{w}\gamma(t_1,3)+\gamma(t_2,2), \quad (14)$$

где, $\gamma(t,2)=\gamma_2(t)$, $\gamma(t,3)=d\gamma_1(t)/dt$. Функция $U(t,s)\varphi(x,i)$ в точке (x,i) выражается в виде линейной комбинации значений функций φ и γ в определённых точках и интегралов от этих функций по определенным промежуткам. То и другое объединяется понятием интеграла по мере. Обозначив $\bar{x}=(x,i)$, $\bar{t}=(t,i)$, получаем $\bar{x}\in\bar{X}=[0,X]\times\{1,2,3\}$, $\bar{t}\in\bar{T}=[0,T]\times\{1,2,3\}$. Формулы типа (14) принимают вид:

$$U(t,s)\ \varphi(\bar{x})=\int_{\bar{X}}Q_{t,s}(\bar{x};d\bar{y})\ \varphi(\bar{y})+\int_{\bar{T}}Q_{t,s}^{\text{гр}}(\bar{x};d\bar{t})\ \gamma(\bar{t}), \quad (15)$$

ядро $Q_{t,s}$ не учитывает границы, ядро $Q_{t,s}^{\text{гр}}$ – учитывает. Оператор $\tilde{U}(t,s)$, ассоциированный с $U(t,s)$, выражается интегралом с ядром $Q_{t,s}$. Решение (3) реализовано методом Монте-Карло через решение (4) с интегралами по вероятностным мерам P{$\cdots$}:

$$w_1(\bar{x},t)=w_0(\bar{x})+\int_0^t \mathrm{P}^{\text{вр}}\{t\to ds\}\alpha^{\text{вр}}(t;s)\int_{\bar{X}}\mathrm{P}_{0,s}\{\bar{x}\to d\bar{y}\}\alpha_{0,s}(\bar{x};\bar{y})w_2(\bar{y},s), \quad (16)$$

$w_2(\bar{x},t)=\{f(x,t,w_3(x,1,t),w_3(x,2,t),w_3(x,3,t))$ при $\bar{x}=(x,2)$; 0 при $\bar{x}=(x,1)$, $\bar{x}=(x,3)$ $\}$,

$$w_3(\bar{x},t)=\int_{\bar{X}}\mathrm{P}_{t,0}\{\bar{x}\to d\bar{y}\}\alpha_{t,0}(\bar{x};\bar{y})w_1(\bar{y},t)+\int_{\bar{T}}\mathrm{P}_{t,0}^{\text{гр}}\{\bar{x}\to d\bar{t}\}\alpha_{t,0}^{\text{гр}}(\bar{x};\bar{t})\gamma(\bar{t})$$

α – “веса” (“вр” и “гр” – время и граница). Для построения $\mathrm{P}\{\bar{x}\to ...\}$ коэффициенты комбинаций (14) заменяются на положительные числа, сумма которых =1. Предполагается разложение функции f из (1) в ряд, сходящийся при любых a_1, a_2, a_3:

$$f(x,t,a_1,a_2,a_3)=\sum\beta_{\lambda,\mu,\nu}(x,t)p_{\lambda,\mu,\nu}(x,t)a_1^{\lambda}a_2^{\mu}a_3^{\nu};\ \lambda,\mu,\nu\in\{0,1,2,..\},$$

$$p_{\lambda,\mu,\nu}\geq 0 \text{ – вероятности; } \sum p_{\lambda,\mu,\nu}=1;\ \beta_{\lambda,\mu,\nu} \text{ – “веса”.}$$

Задаются $p_{\text{н}}(\bar{x},t)$ и $p_{\text{гр}}(\bar{x},t)$ –вероятности выхода моделируемого в методе Монте-Карло процесса на начальные и граничные условия, а также величины $q_{\text{н}}(\bar{x},t)=1-p_{\text{н}}(\bar{x},t)$, $q_{\text{гр}}(\bar{x},t)=1-p_{\text{гр}}(\bar{x},t)$. Состояние процесса – конечный набор Q точек (“частиц”). Реализация процесса – последовательность состояний $\{Q_n\}$, n=0,1,2,…, где n играет роль времени. Моделирование начинается с 3-го уравнения (16). При нелинейной (степенной) зависимости f от аргументов c, c'_t, c'_x моделируется ветвящийся процесс. R – произведение всех “весов”, соответствующих переходам “частиц” в (16) и ветвлениям, а также значений w_0 и γ, соответствующих исчезновениям “частиц” при выходе процесса на начальные условия или на границы [0,X]. Перед началом работы алгоритма задается набор Q из одной точки $(\bar{x},t)=(x,i,t)$. Через конечное число шагов алгоритм закончит работу; результатом является R, Решением задачи (1),(5) является математическое ожидание $\mathrm{E}\{R\}$. Если в начале в 3-ем уравнении (16) i=1, то $c(x,t)=\mathrm{E}\{R\}$; если i=2, то $c'_t(x,t)=\mathrm{E}\{R\}$; если i=3, то $c'_x(x,t)=\mathrm{E}\{R\}$. Эффективность алгоритма зависит от выбора вероятностей в (16).

Проведена апробация метода [5]. Брались уравнения типа (1) (с переменными коэффициентами, кроме коэффициентов при старших производных, имеющие постоянные значения, и нелинейные) с известными аналитическими (тестовыми) решениями, в соответствии с которыми задавались начальные и граничные условия. Использовано 10000 реализаций моделируемого процесса. Относительная погрешность – менее 5 %.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Таганов И.Н., Сиренек В.А. Волновая диффузия. НИИХ СПбГУ. 2000. 209 с.

[2] Сиренек В.А., Сидоров В.А. и др. Вероятностный подход к исследованию волновой модели продольного перемешивания // Теоретические основы химической технологии. 1999. Т.33. N5. С. 539-546.

[3] Сиренек В.А., Крючков А.Ф. Вероятностное решение начально-краевой задачи для гиперболического уравнения массопереноса // Математическое моделирование. 1998. Т.10. № 6. С.107-117.

[4] Крючков А.Ф., Сиренек В.А. О численно-вероятностных методах решения трехмерного гиперболического уравнения диффузии // Ж. вычислительной математики и математической физики 1998. Т.38. №1. С.107-114.

[5] Сиренек В.А. Вероятностное решение квазилинейных гиперболич. уравнений на основе обращения дифференциального оператора // Ж. вычислит. математики и математической физики 2000. Т.40. №3. С.417-427.

[6] Сиренек В.А. и др. Программный комплекс решения гиперболич. уравнений диффузии методом Монте-Карло с использованием аналитических решений волнового уравнения “Rela Cale” // М.: ОФЭР НиО. №21927.