

# Семинар № 1: Кинетическое уравнение Больцмана. Вид интеграла столкновений.

## 1. Кинетическое уравнение Больцмана

В предыдущем пособии («Введение в основы разностных методов на примере уравнения газовой адвекции») изучалось одномерное уравнение газовой адвекции

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f}{\partial x} = 0$$

описывающее поведение газа в условии отсутствия столкновений между группами молекул, движущимися с разными скоростями. Уравнение адвекции адекватно описывает газ, в котором столкновения все же присутствуют, но средняя длина свободного пробега молекулы гораздо больше характерного размера описываемой системы:

$$L \ll \lambda$$

где  $L$  может быть расстоянием между пластинами, диаметром цилиндрической трубки и т.д. В качестве примера такой ситуации можно привести торможение космического аппарата в верхних слоях атмосферы или течение разряженного газа в микроканале. Однако в подавляющем большинстве задач нельзя пренебречь молекулярными столкновениями.

Пусть движение молекулы между столкновениями полностью определяется внешними силами и не зависит от положения и скоростей других молекул. То есть силы межмолекулярного взаимодействия являются быстроубывающими. Кроме того, предположим, что

$$d \ll \lambda$$

где  $d$  характерный размер действия межмолекулярных сил (сравнимый с радиусом молекул), что аналогично условию:

$$\tau_{\text{ст}} \ll \tau$$

Здесь  $\tau$  - время между столкновениями,  $\tau_{\text{ст}}$  - время самого столкновения. Оба эти условия хорошо выполняются в обычных газах для широкого класса задач.

Для наглядности приведем некоторые цифры. Так, эффективный размер молекул водорода - порядка двух ангстрем (он зависит от температуры):

$$d \approx 2.16 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 2.16 \text{ \AA}$$

Среднее расстояние между молекулами:

$$l \approx 1/\sqrt[3]{n}$$

Концентрация газа при нормальных условиях:

$$n = \frac{P}{kT} = \frac{10^5 \text{ Па}}{1.38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К} \cdot 300 \text{ К}} \approx 2.5 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}$$

что дает  $l \approx 3 \cdot 10^{-9} \text{ м} = 30 \text{ \AA}$ . На таком расстоянии взаимодействие молекул гарантировано отсутствует. Длина свободного пробега определяется формулой:

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2} \pi n d^2} \quad (1.1)$$

С приведенными цифрами это дает  $\lambda \approx 2.5 \cdot 10^{-7} \text{ м}$ , что в сотни раз превышает диаметр молекул. Итак, можно считать, что большую часть времени молекулы двигаются свободно и, соответственно, описание такого газа можно сделать на основе уравнения адвекции, дополненного членом, учитывающим столкновения между молекулами, так называемым, *интегралом столкновений*. Это, *кинетическое уравнение Больцмана*, в общем, трехмерном случае, имеет вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_x \frac{\partial f}{\partial x} + \xi_y \frac{\partial f}{\partial y} + \xi_z \frac{\partial f}{\partial z} = J(f) \quad (1.2)$$

Дополнительный член  $J(f)$  представляет собой нелинейный интегральный оператор. В следующем параграфе приведен его явный вид для газа, состоящего из одноатомных молекул одного сорта.

Граничные и начальные условия для (1.2) задаются так же, как и для уравнения адвекции.

## 2. Явный вид интеграла столкновений

Рассмотрим столкновение молекулы имеющей заданную скорость  $\xi$  ( $\xi$ -молекула), с молекулой, двигающейся со скоростью  $\xi_1$  (эта скорость имеет произвольное значение, поскольку является одной из переменных интегрирования в интеграле столкновения). Их относительная скорость сближения:

$$g = \xi_1 - \xi$$

Проведем через  $\xi$ -молекулу прямую, параллельную вектору относительной скорости. Примем эту линию за  $z$ -ось цилиндрической системы координат  $z, b, \varepsilon$ , где  $b$  - радиус,  $\varepsilon$  - азимутальный угол (см. рисунок). Пусть в результате столкновения, характеризуемого углом  $\varepsilon$  и прицельным расстоянием  $b$  (это, очевидно, прицельное расстояние налетающей  $\xi_1$ -молекулы),  $\xi$ - и  $\xi_1$ -молекулы приобретут, соответственно, скорости  $\xi'$  и  $\xi'_1$ , определяемые некоторым образом из начальных условий:

$$\xi' = \varphi(\xi, \xi_1, b, \varepsilon), \quad \xi'_1 = \varphi_1(\xi, \xi_1, b, \varepsilon) \quad (1.3)$$

где  $\varphi, \varphi_1$  - некоторые векторные функции определяемые потенциалом взаимодействия; их общий вид сейчас неважен. Окончательно, кинетическое уравнение Больцмана имеет вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_x \frac{\partial f}{\partial x} + \xi_y \frac{\partial f}{\partial y} + \xi_z \frac{\partial f}{\partial z} = \int (f' f'_1 - f f_1) g b db d\varepsilon d\xi_1 \quad (1.4)$$

где

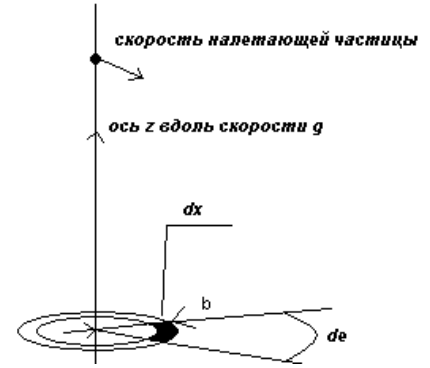
$$f = f(\mathbf{r}, \xi, t), \quad f_1 = f(\mathbf{r}, \xi_1, t), \quad f' = f(\mathbf{r}, \xi', t), \quad f'_1 = f(\mathbf{r}, \xi'_1, t) \\ \xi' = \varphi(\xi, \xi_1, b, \varepsilon), \quad \xi'_1 = \varphi_1(\xi, \xi_1, b, \varepsilon), \quad g = |\xi_1 - \xi|$$

Интеграл в (1.4) является многократным: интегрирование происходит по всем скоростям  $\xi_1$ , по прицельным расстояниям  $b$ , и азимутальным углам  $\varepsilon$ .

Вкратце скажем о ряде существенных предположений, которые косвенно используются при выводе интеграла (вывод можно найти в [1]). Во-первых, ограничиваются учетом только парных столкновений, что оправдано предположением, что  $\tau_{ст} \ll \tau$ . Во-вторых, предполагается, что функция распределения не изменяется на расстояниях порядка диаметра взаимодействия. Наконец, в третьих вероятности нахождения  $\xi$ -молекулы в фазовой точке  $(\xi, \mathbf{r})$  и  $\xi_1$ -молекулы в фазовой точке  $(\xi_1, \mathbf{r}_1)$ , считаются независимыми – так называемое *предположение о молекулярном хаосе*.

## 3. Элементы теории столкновения двух тел

В будущем нам потребуется явный вид функций (1.3). Найдем его. Пусть потенциал  $U(r)$  сталкивающихся молекул зависит только от расстояния между ними (центральное поле). Напомним, что в таком случае задача движения двух материальных точек сводится к свободному движению их центра масс и задаче движения одной частицы с приведенной массой  $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  в потенциале  $U(r)$ . Действительно, движение молекул подчинено уравнениям Ньютона



$$m_1 \ddot{\mathbf{r}}_1 = \mathbf{F}_1(r), \quad m_2 \ddot{\mathbf{r}}_2 = \mathbf{F}_2(r), \quad \mathbf{F}_1 = -\mathbf{F}_2$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \quad r = |\mathbf{r}|$$

Разделим первое уравнение на  $m_1$ , а второе на  $m_2$ . Вычитая получившееся первое уравнение из второго и применив третий закон Ньютона (третье уравнение), получим:

$$\ddot{\mathbf{r}} = \ddot{\mathbf{r}}_2 - \ddot{\mathbf{r}}_1 = \frac{1}{m_2} \mathbf{F}_2(r) - \frac{1}{m_1} \mathbf{F}_1(r) = \left( \frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_1} \right) \mathbf{F}_2(r)$$

Кроме того, сложив изначальные первое и второе уравнения, в результате получим

$$m_1 \ddot{\mathbf{r}}_1 + m_2 \ddot{\mathbf{r}}_2 = 0$$

Проделав несложные выкладки можно записать новую систему уравнений

$$\mu \ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}_2(r) = -\frac{\partial U}{\partial r} \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad m_1 \dot{\mathbf{r}}_1 + m_2 \dot{\mathbf{r}}_2 = \text{const}, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (1.5)$$

Относительная скорость молекул

$$\xi_{\text{отн}} = \dot{\mathbf{r}}_2 - \dot{\mathbf{r}}_1 \quad (1.6)$$

Введем обозначения

$$\dot{\mathbf{r}}_1(t=0) = \xi_1, \quad \dot{\mathbf{r}}_2(t=0) = \xi_2, \quad \dot{\mathbf{r}}_1(t=\infty) = \xi'_1, \quad \dot{\mathbf{r}}_2(t=\infty) = \xi'_2$$

$$\xi_{\text{отн}}(t=0) = \mathbf{g}, \quad \xi_{\text{отн}}(t=\infty) = \mathbf{g}' \quad (1.7)$$

Выпишем второе уравнение из (1.5):

$$m_1 \dot{\mathbf{r}}_1 + m_2 \dot{\mathbf{r}}_2 = m_1 \xi_1 + m_2 \xi_2$$

Воспользовавшись обозначениями (1.6) и (1.7), после несложных преобразований получим

$$\xi'_1 = \xi_c - \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{g}', \quad \xi'_2 = \xi_c + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{g}' \quad (1.8)$$

где  $\xi_c$  - скорость центра масс частиц:

$$\xi_c = \frac{m_1 \xi_1 + m_2 \xi_2}{m_1 + m_2}$$

Таким образом, вычислив с помощью первого уравнения из (1.5) эволюцию вектора  $\xi_{\text{отн}} = \dot{\mathbf{r}}$  можно узнать скорости разлета  $\xi'_1, \xi'_2$ .

Введем новую систему координат, задаваемую следующим базисом: вектором  $\mathbf{e}_g = \mathbf{g}/g$ , и некоторыми перпендикулярными ему векторами  $\mathbf{n}$  и  $\mathbf{l} = [\mathbf{n}, \mathbf{e}_g]$ . В выборе вектора  $\mathbf{n}$  существует определенный произвол, так как на его три компоненты (записанные в старой декартовой системе координат) наложены только два условия:

$$n_x g_x + n_y g_y + n_z g_z = 0, \quad n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1$$

(Условие перпендикулярности к  $\mathbf{e}_g$  и условие единичной нормировки). Наложим дополнительное ограничение на вектор  $\mathbf{n}$ : его z-компонента равна нулю. В результате, после несложных операций с имеющимися тремя условиями, получим:

$$n_x = \frac{g_y}{\sqrt{g_x^2 + g_y^2}}, \quad n_y = -\frac{g_x}{\sqrt{g_x^2 + g_y^2}}, \quad n_z = 0 \quad (1.9)$$

Используя (1.9) и общеизвестное выражение для векторного произведения (через детерминант), легко найдем, что:

$$l_x = -\frac{1}{g} \frac{g_x g_z}{\sqrt{g_x^2 + g_y^2}}, \quad l_y = -\frac{1}{g} \frac{g_y g_z}{\sqrt{g_x^2 + g_y^2}}, \quad l_z = \frac{\sqrt{g_x^2 + g_y^2}}{g}, \quad g = \sqrt{g_x^2 + g_y^2 + g_z^2} \quad (1.10)$$

При движении частицы с массой  $\mu$  в центральном поле сохраняется момент количества движения. Одним из следствий этого является то, что движение происходит в одной плоскости

повернутой на азимутальный угол  $\varepsilon$  (см. Рис.1), по которому идет интегрирование в (1.4).

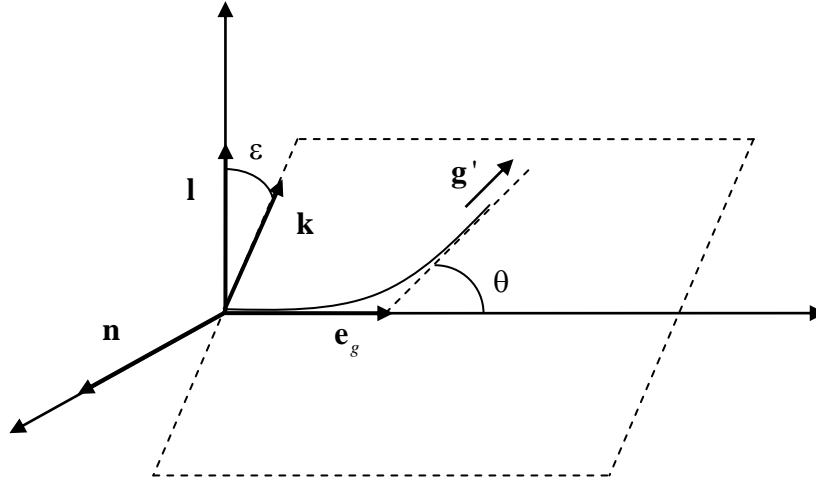


Рис. 1

Введем в этой плоскости декартову систему координат, задаваемую векторами  $\mathbf{e}_g$  и  $\mathbf{k}$ . Пусть вектор  $\mathbf{g}'$  отклонился от своего изначального положения на угол  $\theta$  (см. Рис.2).

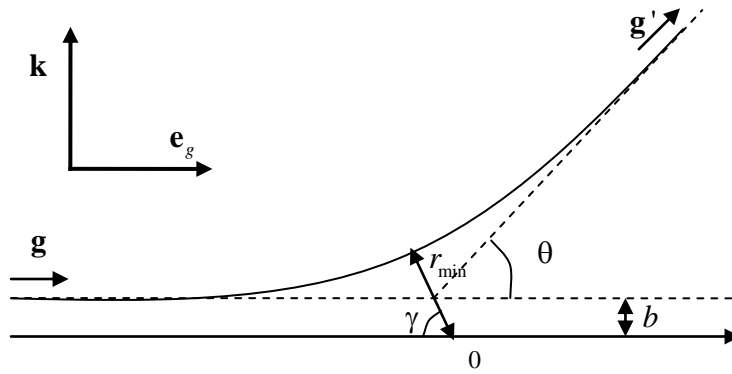


Рис. 2

В таком случае

$$\mathbf{g}' = g(\mathbf{e}_g \cos \theta + \mathbf{k} \sin \theta) = g \cos \theta + g \mathbf{k} \sin \theta$$

Но для вектора  $\mathbf{k}$  верно соотношение (см. Рис.1):

$$\mathbf{k} = \mathbf{n} \sin \varepsilon + \mathbf{l} \cos \varepsilon$$

Объединив эти два соотношения, получим что

$$\mathbf{g}' = g \cos \theta + g(\mathbf{n} \sin \varepsilon + \mathbf{l} \cos \varepsilon) \sin \theta \quad (1.11)$$

Окончательно, используя (1.9), (1.10) и (1.11), в случае если  $g_x^2 + g_y^2 \neq 0$ , получим:

$$\begin{aligned} g'_x &= g_x \cos \theta - (g_x g_z / g_{xy}) \cos \varepsilon \sin \theta + (g g_y / g_{xy}) \sin \varepsilon \sin \theta \\ g'_y &= g_y \cos \theta - (g_y g_z / g_{xy}) \cos \varepsilon \sin \theta - (g g_x / g_{xy}) \sin \varepsilon \sin \theta \\ g'_z &= g_z \cos \theta + g_{xy} \cos \varepsilon \sin \theta, \text{ где } g_{xy} = \sqrt{g_x^2 + g_y^2} \end{aligned} \quad (1.12 \text{ а})$$

В частном случае если  $g_{xy} = 0$ , т.е. вектор  $\mathbf{g}$  сонаправлен с осью z, выражение упрощается

$$\begin{aligned} g'_x &= g \sin \varepsilon \sin \theta \\ g'_y &= g \cos \varepsilon \sin \theta \\ g'_z &= g \cos \theta \end{aligned} \quad (1.12 \text{ б})$$

Угол отклонения  $\theta$  является только функцией прицельного расстояния  $b$  и относительной скорости  $g$ . Приведем ее без вывода, в готовом виде (вывод можно найти в [1])

$$\theta(b) = \pi - 2M \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{dr}{r \sqrt{2\mu r^2 (E - U(r)) - M^2}}, \quad M = gb\mu, \quad E = \frac{1}{2} \mu g^2, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (1.13)$$

где  $r_{\min}$  получается из уравнения

$$2\mu r_{\min}^2 (E - U(r_{\min})) - M^2 = 0$$

Для случая молекул в виде твердых сфер диаметра  $d$ , формула сильно упрощается:

$$\theta = \begin{cases} 2 \arccos(b/d) & b \leq d \\ 0 & b > d \end{cases} \quad (1.14)$$

Итак, скорости разлета вычисляются с помощью формул (1.8), (1.12), (1.13) или (1.14). При возвращении к обозначениям, введенным в предыдущем параграфе, следует проводить замену  $\xi_2 \rightarrow \xi_1$ ,  $\xi_1 \rightarrow \xi$ . Аналогичная замена для скоростей разлета. Кроме того  $m_1 = m_2$ .

В заключении заметим, что в случае произвольного потенциала интегрирование по прицельным расстояниям в (1.4) идет от нуля до бесконечности. Как следствие, каждая часть интеграла

$$\int (f' f'_1 - ff_1) gbdbd\epsilon d\xi_1 = \int f' f'_1 gbdbd\epsilon d\xi_1 - \int ff_1 gbdbd\epsilon d\xi_1$$

стремится по отдельности к бесконечности. В то время как, действуя вместе, они дают конечную величину интеграла столкновений. Действительно, при больших прицельных расстояниях углы отклонения  $\theta$  пренебрежимо малы (гипотеза близкодействия межмолекулярного потенциала), в результате чего скорости разлета практически не отличаются от скоростей столкновения, и  $f' f'_1 - ff_1 \approx 0$ . Исключение составляет потенциалы с обрезанием, например, потенциал взаимодействия твердых сфер; только в этом случае запись по отдельности частей интеграла имеет смысл.

#### 4. Некоторые свойства интеграла столкновений

Ввиду сложной структуры интеграла столкновений известно очень небольшое число точных решений уравнения Больцмана. Наиболее важным точным решением является абсолютное максвелловское распределение, характеризующее газ, находящийся в равновесии:

$$f = n \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m}{2kT} \xi^2 \right\} \quad (1.15)$$

Действительно, в силу того, что максвелловское распределение пространственно однородно, при подстановке (1.15) в (1.4), левая часть кинетического уравнения автоматически равняется нулю. С другой стороны из закона сохранения механической энергии

$$\xi^2 + \xi_1^2 = \xi'^2 + \xi_1'^2$$

В свою очередь, это дает  $f' f'_1 = ff_1$  или равенство интеграла столкновений нулю. Подчеркнем, что это, конечно же, не означает, что межмолекулярные столкновения отсутствуют. Просто убыль молекул в результате столкновений из конкретной скоростной группы, полностью компенсируется притоком молекул из других скоростных групп.

В дальнейшем, равенство нулю численного интеграла столкновений на максвелловском распределении будет одним из критериев того, что он адекватно отображает физическую реальность (наравне с условием консервативности, о котором ниже).

Рассмотрим свойство симметрии интеграла столкновений, которое потребуется нам в дальнейшем. Входящий в правую часть уравнения Больцмана (1.4) интеграл столкновений

$$J(t, \mathbf{r}, \xi) = \int (f' f'_1 - ff_1) gbdbd\epsilon d\xi_1$$

является функцией  $t, \mathbf{r}, \xi$ . Проинтегрируем  $J$  с какой-либо весовой функцией от скоростей  $\phi(\xi)$

$$I_\phi = \int \phi(\xi) J(t, \mathbf{r}, \xi) d\xi = \int \phi(\xi) (f' f'_1 - ff_1) gbdbd\epsilon d\xi_1 d\xi$$

Этот интеграл, очевидно, равен интегралу:

$$I_{\phi'} = \int \phi(\xi')(ff_1 - f'f'_1)g'b'db'd\varepsilon'd\xi'_1 d\xi'$$

(мы просто провели замену обозначения переменных). Поскольку потенциал взаимодействия молекул сферически симметричен, из законов симметрии следует, что

$$g' = g, b = b', \varepsilon' = \varepsilon$$

(Напоминаем, что штрихами отмечены, соответственно, относительная скорость, прицельное расстояние и азимутальный угол после столкновения) Учитывая также соотношение  $d\xi d\xi_1 = d\xi' d\xi'_1$ , возникающее из теоремы Лиувилля о сохранении фазового объема, последний интеграл можно переписать в виде:

$$I_{\phi'} = - \int \phi(\xi')(f'f'_1 - ff_1)gbdbd\varepsilon d\xi_1 d\xi$$

Производя сложение  $I_{\phi'}$  и  $I_{\phi}$ , получим

$$I_{\phi} = \frac{1}{2} \int (\phi - \phi')(f'f'_1 - ff_1)gbdbd\varepsilon d\xi_1 d\xi \quad (1.16)$$

Полученный интеграл  $I_{\phi}$  симметричен относительно  $\xi$  и  $\xi_1$ . Поэтому

$$I_{\phi_1} = I_{\phi} = \int \phi(\xi_1)J(t, \mathbf{r}, \xi_1)d\xi_1 = \frac{1}{2} \int (\phi_1 - \phi_1')(f'f'_1 - ff_1)gbdbd\varepsilon d\xi_1 d\xi \quad (1.17)$$

Складывая (1.16) и (1.17), получим

$$I_{\phi} = \frac{1}{4} \int (\phi + \phi_1 - \phi' - \phi'_1)(f'f'_1 - ff_1)gbdbd\varepsilon d\xi_1 d\xi \quad (1.18)$$

Полученная симметрия понадобится в следующем семинаре при численном счете интеграла столкновений. Сейчас отметим, что из (1.18) легко получить физически очевидные свойства столкновений: суммарное количество (масса) частиц, импульс и энергия столкнувшихся молекул не изменяется при столкновении.

Действительно, рассмотрим пространственно однородное распределение (для того, что бы не учитывать перетоки газа и энергии в обычном пространстве, и рассматривать только перераспределение газа в скоростном пространстве – за счет столкновений). Возьмем следующие функции  $\phi(\xi)$ :

$$\phi_1(\xi) = 1, \phi_2(\xi) = \xi, \phi_3(\xi) = \xi^2 \quad (1.19)$$

Соответствующие им интегралы  $I_{\phi_{1,2,3}}$ , равны производным по времени от: концентрации молекул, их суммарного импульса и энергии в единице объема, соответственно.

$$\begin{aligned} \int J(t, \mathbf{r}, \xi) d\xi &= \int \frac{df}{dt} d\xi = \frac{1}{dt} \left( \int f dt \right) \\ \int \xi J(t, \mathbf{r}, \xi) d\xi &= \int \xi \frac{df}{dt} d\xi = \frac{1}{dt} \left( \int \xi f dt \right) \\ \int \xi^2 J(t, \mathbf{r}, \xi) d\xi &= \int \xi^2 \frac{df}{dt} d\xi = \frac{1}{dt} \left( \int \xi^2 f dt \right) \end{aligned}$$

Но, с другой стороны, для данных функций верно соотношение, проистекающее из механических законов сохранения:

$$\phi + \phi_1 = \phi' + \phi'_1$$

В соответствии с (1.18), это означает

$$I_{\phi_{1,2,3}} = 0 \quad (1.20)$$

что очевидно верно для пространственно однородного распределения.

При переходе к разностному аналогу интеграла столкновений в последующих семинарах, мы потребуем выполнение разностного аналога выражений (1.20), как условие консервативности разностного интеграла столкновений.

## 5. Практическая часть

Необходимо запрограммировать функции преобразования скоростей (1.3), в случае молекул в виде твердых сфер – в дальнейшем мы будем иметь дело только с этим видом потенциала.

Рассмотрим множество столкновений по отдельности. Каждое столкновение характеризуется восемью параметрами:

$$\{\xi_x, \xi_y, \xi_z; \xi_{1x}, \xi_{1y}, \xi_{1z}; b, \varepsilon\}$$

- скорости двух сталкивающихся молекул, прицельное расстояние и азимутальный угол.

Опишем, пошагово, действия, которые необходимо выполнить.

1) Создать двумерный массив  $a$  размером  $(8, n)$  заполненный случайными значениями, лежащими в интервале от 0 до 1. Здесь  $n$  - количество сталкивающихся пар молекул. Возьмите, например,  $n = 10000$ .

2) Осуществить нормировку массива.

А) Первые шесть координат первого измерения массива необходимо умножить на  $2\xi_{cut}$  и осуществит сдвиг:

$$a(1:6, 1:n) = 2\xi_{cut} a(1:6, 1:n) - \xi_{cut}$$

(Выражение, разумеется, записано не математически, а программно; используется синтаксис Фортрана.) Единица измерения скоростей такая же, как и в первом пособии:  $\xi_{кв} = \sqrt{kT/m}$ .

Скорость обрезания берется  $\xi_{кв} = 4.5 \div 5$ . Рекомендованное значение  $\xi_{кв} = 4.8$ . В дальнейших частях пособия такой выбор будет прокомментирован.

Б) Седьмая координата остается неизменной, поскольку единица измерения прицельных расстояний, которую мы будем использовать в дальнейшем – диаметр молекул  $d$ . Так как в случае выбранного нами потенциала, прицельное расстояние не имеет смысла, если оно больше  $d$ , то для всех прицельных расстояний:  $0 \leq b \leq d$ . Поэтому в выбранных единицах, значения по седьмой координате первого измерения массива все также лежат от нуля до единицы.

В) Восьмая координата, характеризующая азимутальный угол, очевидно, умножается на  $2\pi$ .

3) Вводим массив относительных скоростей (двумерный, размер  $(3, n)$ )

$$\mathbf{g} = \xi_1 - \xi$$

4) Вводим массив углов отклонения  $\theta$  (одномерный, размер  $(1, n)$ ), в соответствии с (1.14)

5) В соответствии с формулами (1.12 а,б), используя полученные массивы  $\mathbf{g}$  и  $\theta$ , а также заданный массив азимутальных узлов (нормированная восьмая координата массива  $a$ ), получить новый массив  $\mathbf{g}'$ . (Можно «перезалить» в старый массив  $\mathbf{g}$ ). Разумеется, необходимо использовать оператор ветвления (что бы проверять условие  $g_{xy} = 0$  - условие действия формулы (1.12 б))

6) И окончательно, используя выражение (1.8) получить два массива скоростей разлета (двумерные, размер  $(3, n)$  каждый). Выражение (1.8) при переходе от общего вида к частному случаю  $m_1 = m_2$ , упрощается:

$$\xi' = (\xi + \xi_1)/2 - \mathbf{g}'/2, \quad \xi'_1 = (\xi + \xi_1)/2 + \mathbf{g}'/2$$

7) После создания программы ее необходимо проверить. В случае правильного написания, с точностью ошибки машинного округления должны выполняться следующие условия:

$$|\mathbf{g}'| = |\mathbf{g}|, \quad \xi'^2 + \xi_1'^2 = \xi^2 + \xi_1^2$$

Полученная программка является частью большой программы описывающей интеграл столкновения, которая должна быть создана по окончании изучения данного пособия. Поэтому эта программа должна быть выполнена аккуратно, четко и экономично.

## Семинар № 2 Проекционный метод

### 1. Интегрирование методом Монте-Карло

Выпишем явный вид интеграла столкновений (1.4) в котором разлетные скорости выражены через функции вида (1.3); мы опустим в обозначениях несущественную сейчас зависимость функции распределения от времени и пространственной переменной:

$$I(\xi) = \int_0^{b_{\max}} \int_0^{2\pi} \int_{-\xi_{\text{cut}}}^{\xi_{\text{cut}}} \{f(\varphi(\xi, \xi_1, b, \varepsilon))f(\varphi_1(\xi, \xi_1, b, \varepsilon)) - f(\xi)f(\xi_1)\} |\xi_1 - \xi| b db d\varepsilon d\xi_1 \quad (2.1)$$

Это пятикратный интеграл, в котором скорость  $\xi$  выступает параметром (и при этом, напомним, является переменной кинетического уравнения). Интеграл (2.1) приближенный – мы заранее ввели конечные пределы интегрирования по скоростям и прицельному расстоянию, что бы в дальнейшем можно было осуществить переход к его численному аналогу.

Обоснованием обрезания интеграла по скоростям  $\xi_1$ , является тот факт, что функция распределения очень быстро спадает с увеличением скорости, и уже при скоростях равных нескольким среднеквадратичным их вкладом в интеграл можно пренебречь. Итак, при приближенном интегрировании, в (2.1) выполняется условие:

$$|\xi_1| = \sqrt{\xi_{1x}^2 + \xi_{1y}^2 + \xi_{1z}^2} \leq \xi_{\text{cut}}$$

Интегрирование по прицельному расстоянию идет до некоторого конечного  $b_{\max}$ . В случае потенциала с обрезанием этот предел возникает естественным образом: например, в случае взаимодействия твердых сфер, он, очевидно, равен их диаметру. Однако обрезание при интегрировании можно ввести и для потенциала произвольного вида. Дело в том, что при больших прицельных расстояниях скорости разлета практически не отличаются от скоростей столкновения, и  $f'f'_1 - ff_1 \approx 0$ , т.е. вкладом больших прицельных расстояний в интеграл столкновения можно пренебречь. На практике  $b_{\max}$  выбирается из таких соображений, что бы  $\theta$  - угол отклонения при разлете (см. семинар №1) был не больше  $1^\circ - 2^\circ$ .

Численное интегрирование многократных интегралов обычно осуществляют с помощью метода Монте-Карло. Кратко опишем его суть, оставив строгое математическое обоснование для самостоятельного изучения специальной литературы.

Положим необходимо найти интеграл функции  $y(\mathbf{z})$  по некоторой  $n$ -мерной области  $\Gamma$

$$I = \int_{\Gamma} y(\mathbf{z}) d\mathbf{z}$$

Пусть имеется в пределе равномерное распределение узлов интегрирования  $\{\mathbf{z}_v, v=1, \dots, N_v\}$  по области  $\Gamma$ . То есть, если взять ее произвольную подобласть  $K$ , количество узлов, которое попадет в  $K$ , при  $N_v \rightarrow \infty$  стремится к отношению  $n$ -мерных объемов  $K$  и  $\Gamma$ :

$$\lim_{N_v \rightarrow \infty} \frac{n_K}{N_v} = \frac{V_K}{V_\Gamma}$$

Несложно показать (см. Приложение), что для такой сетки:

$$I = \lim_{N_v \rightarrow \infty} \frac{V_\Gamma}{N_v} \sum_{v=1}^{N_v} y(\mathbf{z}_v) \quad (2.2)$$

Суть метода Монте-Карло заключается в том, что распределение узлов сетки интегрирования выбирается случайным образом (отсюда и происходит название метода). Одним из обоснований этого является то, что при упорядоченном выборе узлов, особенности функции могут совпасть с регулярностью сетки (см. Рис.3). Конечно, это не имеет значение в пределе, при  $N_v \rightarrow \infty$ ,

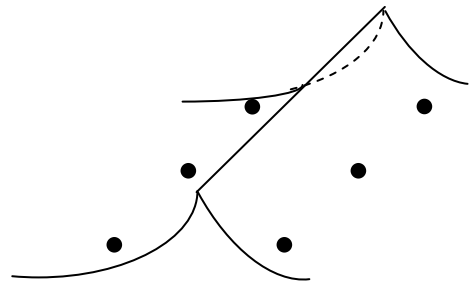


Рис. 3



однако на практике исследователю приходится работать с достаточно грубой сеткой и случайное распределение позволяет избежать неудачного выбора.

## 2. Попытка непосредственного перехода к численному интегралу столкновений. Неконсервативность.

Зададим равномерное случайное распределение узлов интегрирования по пятимерной области:

$$\{0 \leq \varepsilon \leq 2\pi\} \otimes \{0 \leq b \leq b_{\max}\} \otimes \{|\xi_1| \leq \xi_{\text{cut}}\}$$

В соответствии с (2.2) можно приближенно записать:

$$I(\xi) = \frac{2\pi b_{\max} V_{\text{sph}}}{N_v} \sum_{v=1}^{N_v} \{f(\varphi_v(\xi))f(\varphi_{1v}(\xi)) - f(\xi)f(\xi_{1v})\} |\xi - \xi_{1v}| b_v \quad (2.3)$$

$$\varphi_v(\xi) = \varphi(\xi, \xi_{1v}, b_v, \varepsilon_v), \quad \varphi_{1v}(\xi) = \varphi_1(\xi, \xi_{1v}, b_v, \varepsilon_v), \quad V_{\text{sph}} = (4\pi/3)\xi_{\text{cut}}^3$$

Напомним, что в разностном методе исследователь работает с функциями дискретного аргумента, и значения функции распределения известны лишь в ограниченном наборе точек фазового пространства – разностной сетке. Введем равномерную скоростную сетку:

$$\{\xi_{\alpha_x+1} = \xi_{\alpha_x} + \Delta\xi_x, \alpha_x = 1, \dots, N_{\xi_x}\} \times \{\xi_{\alpha_y+1} = \xi_{\alpha_y} + \Delta\xi_y, \alpha_y = 1, \dots, N_{\xi_y}\} \times \{\xi_{\alpha_z+1} = \xi_{\alpha_z} + \Delta\xi_z, \alpha_z = 1, \dots, N_{\xi_z}\}$$

Итак, функция непрерывного аргумента  $f(\xi)$  аппроксимируется  $f_\alpha$  - функцией дискретного аргумента (здесь и дальше, тройной индекс  $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ , для удобства обозначения записывается одним индексом); интеграл столкновения аппроксимируется своим дискретным аналогом  $I_\alpha$ .

Разумеется, при переходе к дискретному аргументу в пространстве скоростей, узлы интегрирования берутся уже из смешанной, дискретно-непрерывной, пятимерной области:

$$\{0 \leq \varepsilon \leq 2\pi\} \otimes \{0 \leq b \leq b_{\max}\} \otimes \{|\xi_\beta| \leq \xi_{\text{cut}}\}$$

В общем случае разлетные скорости не попадают на скоростные узлы, и в рамках разностного подхода, при аппроксимации выражения (2.3) необходимо осуществить некоторую интерполяцию возникающего члена

$$f(\varphi(\xi_\alpha, \xi_{\beta_v}, b_v, \varepsilon_v))f(\varphi_1(\xi_\alpha, \xi_{\beta_v}, b_v, \varepsilon_v))$$

через значения дискретной функции распределения в соседних с разлетными скоростями узлах сетки. Ниже описана так называемая степенная интерполяция.

На рис.4 показан фрагмент скоростной сетки, на котором изображено столкновение описывающее  $v$ -ый член в (2.3). Узлы скоростей столкновения  $\xi_\alpha$  и  $\xi_{\beta_v}$  выделены жирными точками, разлетные скорости  $\xi' = \varphi(\xi_\alpha, \xi_{\beta_v}, b_v, \varepsilon_v)$  и  $\xi'_1 = \varphi_1(\xi_\alpha, \xi_{\beta_v}, b_v, \varepsilon_v)$  отображены крестиками, соседние с ними узлы, взятые для интерполяции, выделены маленькими кружочками и обозначены индексами  $\lambda_v, \lambda_v + s_v$  и  $\mu_v, \mu_v + p_v$ , соответственно (компоненты векторов  $s_v$  и  $p_v$  могут принимать значения  $-1, 0, 1$ ). Круг, изображенный на рис.4, схематически показывает тот факт, что в скоростном пространстве процесс столкновения частиц можно представить как поворот вектора их относительной скорости вокруг скорости их центра масс (разумеется, в реальной трехмерной сетке вместо круга должна быть сфера).

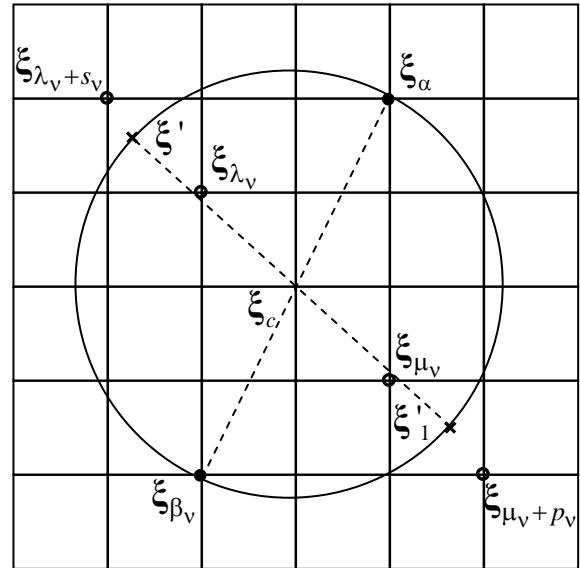


Рис. 4

Легко заметить, что с точностью до членов первого порядка произведение функций распределения в разлетных скоростях можно аппроксимировать следующим выражением:

$$\left(f_{\lambda_v} f_{\mu_v}\right)^{1-r_v} \left(f_{\lambda_v+s_v} f_{\mu_v+p_v}\right)^{r_v}$$

Выберем коэффициент  $r_v$  так, что бы он удовлетворял следующему соотношению:

$$E_0 = (1-r_v)E_1 + r_v E_2 \quad (2.4)$$

где  $E_0, E_1, E_2$  - энергии скоростей столкновения и интерполирующих узлов соответственно:

$$E_0 = \xi_\alpha^2 + \xi_{\beta_v}^2, E_1 = \xi_{\lambda_v}^2 + \xi_{\mu_v}^2, E_2 = \xi_{\lambda_v+s_v}^2 + \xi_{\mu_v+p_v}^2 \quad (2.5)$$

Обоснование такого выбора  $r_v$  следующее. В семинаре №1 показано, что точный интеграл столкновений равняется нулю при максвелловском равновесном распределении, которое описывается формулой (1.15). При конструировании численного интеграла столкновений разумно исходить из требования, что бы для него также выполнялось это важнейшее свойство. Используя (2.4), (2.5) и (1.15), легко получить, что в случае максвелловского распределения при таком выборе коэффициента интерполяции выполняется равенство

$$\left(f_{\lambda_v} f_{\mu_v}\right)^{1-r_v} \left(f_{\lambda_v+s_v} f_{\mu_v+p_v}\right)^{r_v} = f_\alpha f_{\beta_v}$$

то есть получившаяся в итоге аппроксимация выражения (2.3)

$$I_\alpha = \frac{2\pi b_{\max} V_{sph}}{N_v} \sum_{v=1}^{N_v} \left\{ \left(f_{\lambda_v} f_{\mu_v}\right)^{1-r_v} \left(f_{\lambda_v+s_v} f_{\mu_v+p_v}\right)^{r_v} - f_\alpha f_{\beta_v} \right\} |\xi_\alpha - \xi_{\beta_v}| b_v \quad (2.6)$$

будет зануляться на максвелловском распределении.

Из соображений устойчивости вытекает ограничение на коэффициент интерполяции:

$$0 \leq r_v \leq 1 \quad (2.7)$$

При нарушении этого условия в интерполяционном члене будут возникать отрицательные степени, что чревато серьезными искажениями при интерполяции в случае сильноменяющейся решений (а именно таковы все реальные функции распределения, так или иначе имеющие гауссиановское затухание по скоростям). Действительно, введя условный коэффициент

$$C = (f_{\lambda+s} f_{\mu+p} / f_\lambda f_\mu)$$

(индекс интегрирования  $v$  временно опущен) интерполяционный член можно переписать:

$$\left(f_\lambda f_\mu\right)^{1-r} \left(f_{\lambda+s} f_{\mu+p}\right)^r = \left(f_\lambda f_\mu\right)^{1-r} \left(C f_\lambda f_\mu\right)^r = C^r f_\lambda f_\mu$$

Пусть  $C < 1$ , тогда при  $r < 0$  возникает абсурдный результат:

$$\left(f_\lambda f_\mu\right)^{1-r} \left(f_{\lambda+s} f_{\mu+p}\right)^r > f_\lambda f_\mu > f_{\lambda+s} f_{\mu+p}$$

Хотя, по логике вещей, интерполяционный член должен быть больше чем  $f_{\lambda+s} f_{\mu+p}$ , но меньше чем  $f_\lambda f_\mu$ . При  $C \ll 1$  (сильных изменениях функции), интерполяционный член может принять очень большие значения и развалить решение. Для случая  $r > 1$  рассуждения аналогичны.

Используя (2.4) нетрудно показать, что условие (2.7) эквивалентно условию

$$E_1 < E_0 < E_2 \quad (2.8)$$

Это является важным ограничением на выбор пар интерполяционных узлов из имеющегося большого количества вариантов (каждая разлетная скорость лежит внутри куба образованного 8 узлами и именно их можно считать соседними):

Итак, (2.6) совместно с (2.4), (2.5) и (2.8) дает нам численный интеграл столкновений, имеющий первый порядок точности и зануляющийся на максвелловском распределении.

К сожалению (2.6) не удовлетворяет разностным аналогам законов сохранения вещества, импульса, энергии:

$$\sum_\alpha I_\alpha = 0, \quad \sum_\alpha \xi_\alpha I_\alpha = 0, \quad \sum_\alpha \xi_\alpha^2 I_\alpha = 0 \quad (2.9)$$

точнее, они выполняются лишь в пределе, при неограниченном мельчании скоростной сетки.

На грубых сетках, имеющихся в реальном распоряжении исследователя, возникают довольно существенные отклонения от консервативности пропорциональные шагу разбиения сетки. Опыт численных исследований показывает, что для широкого класса задач газовой динамики нарушение консервативности приводит к самым негативным последствиям, вплоть до полного обесценивания численных результатов. Это можно прокомментировать следующим образом – неконсервативность численного интеграла можно интерпретировать как появление «паразитных» источников плотности, импульса и энергии. Не обязательно, что решение при этом будет «разваливаться» (то есть достаточно быстро перестанет соответствовать какому либо физическому смыслу – возникнет экспоненциальное нарастание плотностей газа, появятся отрицательные значения функции распределений и т.д.), но оно может не соответствовать задаче: например газ будет нагреваться так, как если бы он получал энергию извне.

Можно привести еще один комментарий относительно важности консервативных схем. Накладывая на схему условие консервативности, мы, одновременно, существенным образом сужаем и класс ошибок – уменьшаем возможный спектр отклонений численного результата от истинных значений. Другими словами, консервативность «держит» решение в некоторой полосе в пространстве функций. Учитывая физическую осмысленность наложенного ограничения интуитивно ясно, что устойчивость решения и его точность при этом повышается.

### 3. Проекционный метод.

В этом параграфе мы сконструируем консервативную модификацию предыдущего варианта интеграла – так называемый «проекционный метод» счета интеграла столкновений, созданный Ф.Г. Черемисиным [2,3].

Используя известное свойство дельта-функции можно формально записать:

$$I(\xi_\gamma) = \int \delta(\xi - \xi_\gamma) I(\xi) d\xi = \int \delta(\xi - \xi_\gamma) \Omega(\xi, \xi_1, b, \varepsilon) db d\varepsilon d\xi_1 \quad (2.10)$$

Здесь, ради краткости записи введено обозначение

$$\Omega(\xi, \xi_1, b, \varepsilon) = (f' f_1' - f f_1) g b$$

Далее, следует заменить дельта-функцию приближенной ступенчатой функцией, поскольку предел (2.2), получен в предположении конечности подынтегральной функции (это нетрудно увидеть из доказательства (2.2)). Итак

$$\delta(\xi - \xi_\gamma) \approx \frac{1}{\delta V} \Delta_\gamma(\xi), \quad \Delta_\gamma(\xi) = \begin{cases} 1, & \xi \in \Gamma_\gamma \\ 0, & \xi \notin \Gamma_\gamma \end{cases}, \quad \xi_\gamma \in \Gamma_\gamma, \quad V_{\Gamma_\gamma} = \delta V \quad (2.11)$$

Множитель при ступенчатой функции в (2.11) введен, что бы главное свойство дельта-функции:

$$\int \delta(\xi - \xi_0) d\xi = 1$$

выполнялось и для ее ступенчатого аналога. С помощью  $\delta V$  обозначен тот объем области в скоростном пространстве, в котором ступенчатая функция не равна нулю; очевидно, чем он меньше, чем компактнее область  $\Gamma_\gamma$ , тем точнее (2.11) приближает дельта-функцию.

В предыдущем параграфе, при задании скоростной сетки, мы неявно определили, что для нее можно ввести понятие объема. Легко увидеть, что элементом объема (наименьшей единицей) в дискретном скоростном пространстве является  $\Delta V = \Delta \xi_x \Delta \xi_y \Delta \xi_z$ . Поясним, как происходит аппроксимация произвольной непрерывной области в скоростном пространстве. Вводятся скоростные ячейки с центрами в узлах скоростной сетки:

$$\Delta \Gamma_\beta(\xi) = \left\{ \xi_{\beta_x} - \Delta \xi_x / 2 < \xi_x < \xi_{\beta_x} + \Delta \xi_x / 2 \right\} \otimes \left\{ \xi_{\beta_y} - \Delta \xi_y / 2 < \xi_y < \xi_{\beta_y} + \Delta \xi_y / 2 \right\} \\ \otimes \left\{ \xi_{\beta_z} - \Delta \xi_z / 2 < \xi_z < \xi_{\beta_z} + \Delta \xi_z / 2 \right\}$$

Берутся все ячейки, так или иначе, связанные с интересующей нас областью. Например, такие, чьи центры лежат внутри нее, или только те ячейки, которые вписаны в эту область полностью – это уже зависит от вида выбранной нами аппроксимации объемов. Получившаяся фигура является дискретным аналогом изначальной области. Отсюда ясно, что при задании

ступенчатых функций (2.11), следует брать  $\Gamma_\gamma = \Delta\Gamma_\gamma$ , как наименьшую область, которая при аппроксимации не изменит ни формы, ни объема.

Вообще говоря, приближенное равенство (2.11) можно обобщить следующим образом

$$\delta(\xi - \xi_0) \approx \frac{1}{\Delta V} \sum_i a_i \Delta_{\sigma_i}(\xi) \quad (2.12)$$

где  $\{\sigma_i\}$  - некоторое количество узлов лежащих по соседству с произвольной скоростью  $\xi_0$ , а на произвольные коэффициенты  $a_i$  наложено только одно ограничение:

$$\sum_i a_i = 1 \quad (2.13)$$

Действительно, для произвольной кусочно-гладкой функции  $y(\xi)$ , верно

$$\begin{aligned} \int y(\xi) \delta(\xi - \xi_0) d\xi &= y(\xi_0) = \sum_i a_i y(\xi_0) = \sum_i a_i y(\xi_{\sigma_i}) + O(\Delta\xi) = \\ &= \sum_i a_i \frac{1}{\Delta V} \int y(\xi) \Delta_{\sigma_i}(\xi) d\xi + O(\Delta\xi) = \int y(\xi) \left( \frac{1}{\Delta V} \sum_i a_i \Delta_{\sigma_i}(\xi) \right) d\xi + O(\Delta\xi) \end{aligned}$$

что приводит к (2.12). В соответствии с (1.18), формулу (2.10) можно переписать:

$$I(\xi_\gamma) = \int \phi_\gamma(\xi, \xi_1) \Omega(\xi, \xi_1, b, \varepsilon) db d\varepsilon d\xi d\xi_1 \quad (2.14)$$

где

$$\phi_\gamma(\xi, \xi_1) = \frac{1}{4} \left[ \delta(\xi - \xi_\gamma) + \delta(\xi_1 - \xi_\gamma) - \delta(\xi' - \xi_\gamma) - \delta(\xi'_1 - \xi_\gamma) \right] \quad (2.15)$$

Зададим равномерное случайное распределение узлов интегрирования

$$\{\varepsilon_v, b_v, \xi_{\alpha_v}, \xi_{\beta_v}; v = 1, \dots, N_v\}$$

по восьмимерной области:

$$\{0 \leq \varepsilon \leq 2\pi\} \otimes \{0 \leq b \leq b_{\max}\} \otimes \{|\xi_\alpha| \leq \xi_{cut}\} \otimes \{|\xi_\beta| \leq \xi_{cut}\}$$

Введем обозначение для получающихся разлетных скоростей

$$\xi'_{\alpha_v} = \varphi(\xi_{\alpha_v}, \xi_{\beta_v}, b_v, \varepsilon_v), \quad \xi'_{\beta_v} = \varphi(\xi_{\alpha_v}, \xi_{\beta_v}, b_v, \varepsilon_v)$$

В соответствии с (2.2) запишем

$$I(\xi_\gamma) \approx \frac{1}{4} \frac{2\pi b_{\max} V_{sph}^2}{N_v \Delta V} \sum_{v=1}^{N_v} \left\{ \delta(\xi_{\alpha_v} - \xi_\gamma) + \delta(\xi_{\beta_v} - \xi_\gamma) - \delta(\xi'_{\alpha_v} - \xi_\gamma) - \delta(\xi'_{\beta_v} - \xi_\gamma) \right\} \Omega(\xi_{\alpha_v}, \xi_{\beta_v}, b_v, \varepsilon_v)$$

Заменим первые две дельта-функции стоящие под знаком суммы на ступенчатые функции, используя (2.11). Третью и четвертую дельта-функции мы заменим с помощью (2.12), для этого для каждой пары разлетных скоростей  $\xi'_{\alpha_v}$  и  $\xi'_{\beta_v}$  нужно ввести некоторое множество соседних с ними узлов  $\{\sigma_{iv}, i = 1, \dots, m\}$  и  $\{\eta_{iv}, i = 1, \dots, m\}$ , соответственно. Используя очевидное свойство ступенчатой функции:  $\Delta_k(\xi_l) = \delta_{k,l}$ , где  $\delta_{kl}$  - символ Кронекера, в результате получим:

$$I(\xi_\gamma) \approx \frac{1}{4} \frac{2\pi b_{\max} V_{sph}^2}{N_v \Delta V} \sum_{v=1}^{N_v} \left\{ \delta_{\alpha_v, \gamma} + \delta_{\beta_v, \gamma} - \sum_{i=1}^m a_{iv} \delta_{\sigma_{iv}, \gamma} - \sum_{i=1}^m b_{iv} \delta_{\eta_{iv}, \gamma} \right\} \Omega(\xi_{\alpha_v}, \xi_{\beta_v}, b_v, \varepsilon_v)$$

Переходя от функций непрерывного аргумента к их дискретным аналогам, запишем

$$I_\gamma = \frac{\pi b_{\max} V_{sph}}{2} \frac{N_0}{N_v} \sum_{v=1}^{N_v} \left\{ \delta_{\alpha_v, \gamma} + \delta_{\beta_v, \gamma} - \sum_{i=1}^m a_{iv} \delta_{\sigma_{iv}, \gamma} - \sum_{i=1}^m b_{iv} \delta_{\eta_{iv}, \gamma} \right\} \Omega_v \quad (2.16)$$

$$\Omega_v = \left\{ \left( f_{\lambda_v} f_{\mu_v} \right)^{1-r_v} \left( f_{\lambda_v + s_v} f_{\mu_v + p_v} \right)^{r_v} - f_{\alpha_v} f_{\beta_v} \right\} |\xi_{\alpha_v} - \xi_{\beta_v}| b_v$$

Здесь  $N_0 = V_{sph} / \Delta V$  - количество скоростных узлов лежащих в сфере радиуса  $\xi_{cut}$ , а функция распределения в разлетных скоростях получена степенной интерполяцией.

Получившийся интеграл будет консервативен по веществу. Действительно:

$$\begin{aligned}\sum_{\gamma} I_{\gamma} &= C \sum_{\gamma} \sum_{v=1}^{N_v} \left\{ \delta_{\alpha_v, \gamma} + \delta_{\beta_v, \gamma} - \sum_{i=1}^m a_{i v} \delta_{\sigma_{i v}, \gamma} - \sum_{i=1}^m b_{i v} \delta_{\eta_{i v}, \gamma} \right\} \Omega_v = \\ &= C \sum_{v=1}^{N_v} \Omega_v \sum_{\gamma} \left\{ \delta_{\alpha_v, \gamma} + \delta_{\beta_v, \gamma} - \sum_{i=1}^m a_{i v} \delta_{\sigma_{i v}, \gamma} - \sum_{i=1}^m b_{i v} \delta_{\eta_{i v}, \gamma} \right\} = C \sum_{v=1}^{N_v} \Omega_v \left\{ 1 + 1 - \sum_{i=1}^m a_{i v} - \sum_{i=1}^m b_{i v} \right\} = 0\end{aligned}$$

Использовалось: перестановка знаков суммирования, очевидное свойство индексов Кронекера

$$\sum_k \delta_{n,k} = 1$$

и условие (2.13) наложенное на коэффициенты  $a_i$  и  $b_i$ .

Однако в общем случае (2.16) не является консервативным по энергии, и по импульсу. Эта проблема решается правильным выбором соседних, к разлетным скоростям, узлов и коэффициентов к ним. Для обеспечения консервативности достаточно двух соседних узлов для каждой из разлетных скоростей, т.е.  $m = 2$ . Чтобы не усложнять, без нужды, схему интеграла, возьмем узлы, используемые для степенной интерполяции функции распределения, т.е.

$$\sigma_{1v} = \lambda_v, \sigma_{2v} = \lambda_v + s_v \text{ и } \eta_{1v} = \mu_v, \eta_{2v} = \mu_v + p_v$$

Если выбрать коэффициенты  $a_i, b_i$  следующим образом:

$$a_{1v} = 1 - r_v, a_{2v} = r_v \text{ и } b_{1v} = 1 - r_v, b_{2v} = r_v$$

где  $r_v$  - энергетический коэффициент удовлетворяющий (2.4)-(2.5), то получившийся интеграл

$$I_{\gamma} = \frac{\pi b_{\max} V_{sph}}{2} \frac{N_0}{N_v} \sum_{v=1}^{N_v} \left\{ \delta_{\alpha_v, \gamma} + \delta_{\beta_v, \gamma} - \left( (1 - r_v) \delta_{\lambda_v, \gamma} + r_v \delta_{\lambda_v + s_v, \gamma} \right) - \left( (1 - r_v) \delta_{\mu_v, \gamma} + r_v \delta_{\mu_v + p_v, \gamma} \right) \right\} \Omega_v \quad (2.17)$$

будет консервативным по энергии. Действительно:

$$\begin{aligned}\sum_{\gamma} \xi_{\gamma}^2 I_{\gamma} &= C \sum_{\gamma} \xi_{\gamma}^2 \sum_{v=1}^{N_v} \left\{ \delta_{\alpha_v, \gamma} + \delta_{\beta_v, \gamma} - \left( (1 - r_v) \delta_{\lambda_v, \gamma} + r_v \delta_{\lambda_v + s_v, \gamma} \right) - \left( (1 - r_v) \delta_{\mu_v, \gamma} + r_v \delta_{\mu_v + p_v, \gamma} \right) \right\} \Omega_v = \\ &= C \sum_{v=1}^{N_v} \Omega_v \sum_{\gamma} \xi_{\gamma}^2 \left\{ \delta_{\alpha_v, \gamma} + \delta_{\beta_v, \gamma} - \left( (1 - r_v) \delta_{\lambda_v, \gamma} + r_v \delta_{\lambda_v + s_v, \gamma} \right) - \left( (1 - r_v) \delta_{\mu_v, \gamma} + r_v \delta_{\mu_v + p_v, \gamma} \right) \right\} = \\ &= C \sum_{v=1}^{N_v} \Omega_v \left\{ \xi_{\alpha_v}^2 + \xi_{\beta_v}^2 - \left( (1 - r_v) \xi_{\lambda_v}^2 + r_v \xi_{\lambda_v + s_v}^2 \right) - \left( (1 - r_v) \xi_{\mu_v}^2 + r_v \xi_{\mu_v + p_v}^2 \right) \right\} = \\ &= C \sum_{v=1}^{N_v} \Omega_v \left\{ \xi_{\alpha_v}^2 + \xi_{\beta_v}^2 - (1 - r_v) (\xi_{\lambda_v}^2 + \xi_{\mu_v}^2) - r_v (\xi_{\lambda_v + s_v}^2 + \xi_{\mu_v + p_v}^2) \right\} = 0\end{aligned}$$

Для обеспечения консервативности интеграла (2.17) по импульсу, узлы  $\lambda_v, \lambda_v + s_v$  и  $\mu_v, \mu_v + p_v$ , необходимо выбирать так, что бы удовлетворялись векторные равенства

$$\begin{aligned}\xi_{\lambda_v} + \xi_{\mu_v} &= \xi_{\alpha_v} + \xi_{\beta_v} \\ \xi_{\lambda_v + s_v} + \xi_{\mu_v + p_v} &= \xi_{\alpha_v} + \xi_{\beta_v}\end{aligned} \quad (2.18)$$

Доказательство импульсной консервативности при выборке узлов (2.18) аналогично вышеприведенному доказательству энергетической консервативности.

В силу кратности всех скоростей и их сумм шагу сетки, узлы удовлетворяющие (2.18) можно подобрать всегда. На практике, некоторым образом выбираются  $\lambda_v, \lambda_v + s_v$ , далее, получается

$$\mu_v = \alpha_v + \beta_v - \lambda_v \quad (2.19)$$

Из второго равенства в (2.18), можно получить, что  $p_v = -s_v$ . Действительно.

$$\mu_v + p_v = \alpha_v + \beta_v - (\lambda_v + s_v) = \mu_v - s_v$$

Отметим, что эти рассуждения верны только в случае равномерной сетки. В случае неравномерной сетки сконструированный интеграл не сохранял бы импульс.

Итак, запишем окончательную версию интеграла

$$I_\gamma = \frac{\pi b_{\max} V_{sph}}{2} \frac{N_0}{N_v} \sum_{v=1}^{N_v} \left\{ \delta_{\alpha_v, \gamma} + \delta_{\beta_v, \gamma} - (1 - r_v) (\delta_{\lambda_v, \gamma} + \delta_{\mu_v, \gamma}) - r_v (\delta_{\lambda_v + s_v, \gamma} + \delta_{\mu_v - s_v, \gamma}) \right\} \Omega_v$$

$$\Omega_v = \left\{ \left( f_{\lambda_v} f_{\mu_v} \right)^{1-r_v} \left( f_{\lambda_v + s_v} f_{\mu_v - s_v} \right)^{r_v} - f_{\alpha_v} f_{\beta_v} \right\} |\xi_{\alpha_v} - \xi_{\beta_v}| b_v$$

$$r_v = \frac{E_{0v} - E_{1v}}{E_{2v} - E_{1v}}, \quad E_{0v} = \xi_{\alpha_v}^2 + \xi_{\beta_v}^2, \quad E_{1v} = \xi_{\lambda_v}^2 + \xi_{\mu_v}^2, \quad E_{2v} = \xi_{\lambda_v + s_v}^2 + \xi_{\mu_v - s_v}^2$$

Узлы  $\lambda_v, \lambda_v + s_v$  выбираются так, что бы выполнялись неравенства (2.8),  $\mu_v$  - равенство (2.19).

Полученный численный интеграл консервативен по импульсу, энергии и веществу, а также зануляется на максвелловском распределении. Именно (2.20) является главнейшим инструментом численного решения широкого класса задач динамики разряженных газов, с которыми студентам, изучающим данный курс, предстоит столкнуться в будущем. Целью дальнейших семинаров пособия является овладение этим инструментом.

#### 4. Практическая часть

Непосредственное вычисление интеграла столкновений будет осуществляться в последующих частях пособия, а целью практического материала данного семинара является создание сетки интегрирования для (2.20) и нахождения интерполирующих узлов.

1) Создайте трехмерную равномерную скоростную сетку. Очевидно, ее следует выбрать симметричной относительно начала координат (у нас нет априорных предпочтений, к какому либо полупространству). Кроме того, не должно быть узлов со скоростями, имеющими какую либо компоненту равной нулю – решение уравнения адвекции (левой части кинетического уравнения) с такими скоростями не будет перемещаться в пространстве по данному направлению. Отсюда получается сетка вида (выберем, для примера, ось  $\xi_x$ ):

$$\left\{ \xi_{\alpha_x} = -\xi_{cut} + (\alpha_x - 0.5) \Delta \xi_x, \quad \alpha_x = 1, \dots, N_{\xi_x} \right\} \quad \Delta \xi_x = 2\xi_{cut} / N_{\xi_x} \quad (2.21)$$

Для остальных осей аналогично. Мы будем использовать кубическую сетку, однако для общности возьмите  $N_{\xi_x}, N_{\xi_y}, N_{\xi_z}$  независимыми. Поставьте  $N_{\xi_x} = N_{\xi_y} = N_{\xi_z} = 20$ .

2) Далее выполняются первый и второй пункт практического занятия семинара №1 – случайным образом создаются 8-мерные узлы интегрирования. Итог

$$\{\xi_v, \xi_{1v}, b_v, \varepsilon_v\}$$

3) Получившиеся значения скоростей столкновения «подгоняются» к ближайшим от них узлам скоростной сетки (т.е. заменяются значениями скоростей в этих узлах). Итог

$$\{\xi_{\alpha_v}, \xi_{\beta_v}, b_v, \varepsilon_v\}$$

4) Узлы интегрирования со скоростями столкновения, лежащими за пределами скорости обрезания, убираются. Итог

$$\{\xi_{\alpha_v}, \xi_{\beta_v}, b_v, \varepsilon_v; |\xi_{\alpha_v}| \leq \xi_{cut}, |\xi_{\beta_v}| \leq \xi_{cut}\}$$

В дальнейшем, ради краткости, и чтобы не иметь путаницы терминов «узел интегрирования» и «узел скоростной сетки», 8-мерный узел интегрирования называется «столкновением».

5) Далее выполняются пункты 3)-7) семинара №1 – находятся разлетные скорости. Примечание: перед этим отсейте такие столкновения, для которых относительная скорость равна нулю.

6) Для каждой пары разлетных скоростей находится узлы  $\lambda_v, \lambda_v + s_v$  и  $\mu_v, \mu_v - s_v$ . Для этого:

А) Найдем узлы ближайшие к разлетным скоростям. Пусть это  $\eta_{near}$  для  $\xi'_{\alpha_v}$ , и  $\eta_{near1}$  для  $\xi'_{\beta_v}$ .

Нетрудно подметить, что  $\xi_{\eta_{near}} + \xi_{\eta_{near1}} = \xi'_{\alpha_v} + \xi'_{\beta_v} = \xi_{\alpha_v} + \xi_{\beta_v}$ , т.е.  $\eta_{near}$  и  $\eta_{near1}$  удовлетворяют (2.18). Эти узлы – первая пара интерполирующих узлов. Если  $|\xi_{\eta_{near}}| > \xi_{cut}$  или  $|\xi_{\eta_{near1}}| > \xi_{cut}$  то

столкновение отсеивается. Такой отсев оправдан тем, что функция распределения в таких узлах пренебрежимо мала из-за ее экспоненциального затухания от скорости. Добавим, что в позднейших семинарах будет использоваться функция распределения определенная только на узлах лежащих внутри сферы радиуса  $\xi_{cut}$ , иначе говоря, у нас «не будет» значений функции распределения для узлов с модулями скоростей большими чем  $\xi_{cut}$ .

Б) Рассмотрим одну из разлетных скоростей, например  $\xi'_{\alpha_v}$ . Находятся 8 узлов, которые непосредственно ее окружают. Проще всего это сделать так. С помощью операции округления находится узел отсчета. Например

$$(\eta_{center})_x = \text{floor}((\xi'_{\alpha})_x / \Delta\xi_x + 0.5N_{\xi_x} + 0.5)$$

Используя равенство (2.21) нетрудно заметить, что проекция  $(\xi'_{\alpha})_x$  лежит между узлами с  $(\eta_{center})_x$  и  $(\eta_{center})_x + 1$ . Аналогично, для остальных осей. Отсюда получаются 8 соседних узлов

$$\eta_{i,j,k} = \eta_{center} + e_{i,j,k}, \quad e_{i,j,k} = (i, j, k), \quad i = 0, 1, j = 0, 1, k = 0, 1$$

Одним из этих узлов является, очевидно,  $\eta_{near}$ . Его «координата» равна:  $e_{near} = \eta_{near} - \eta_{center}$ .

В) Составляются кинетические энергии этих узлов. Когда рассматривается только одна разлетная скорость, энергию необходимо отсчитывать от скорости центра масс:  $\xi_{c_v} = (\xi_{\alpha_v} + \xi_{\beta_v}) / 2$ . Дело в том, что кинетическая энергия двух произвольных скоростей равна

$$\xi_1^2 + \xi_2^2 = 2\xi_{c12}^2 + (\xi_1 - \xi_{c12})^2 + (\xi_2 - \xi_{c12})^2 = 2\xi_{c12}^2 + 2(\xi_1 - \xi_{c12})^2, \quad \xi_{c12} = (\xi_1 + \xi_2) / 2$$

Скорости центра масс интересующих нас пар скоростей:  $(\xi_{\alpha_v}, \xi_{\beta_v})$ ,  $(\xi_{\lambda_v}, \xi_{\mu_v})$  и  $(\xi_{\lambda_v + s_v}, \xi_{\mu_v - s_v})$ , одинаковы, поэтому кинетическую энергию скорости центра масс можно принять за начало отсчета энергии (конечно, для данного столкновения). И вместо того, что бы находить суммарную энергию каждой из пар, достаточно взять энергию одной из скорости пары, отложенную от скорости центра масс. Итак, составляется массив из 8-ми значений энергии

$$\{E_{i,j,k} = (\xi_{\eta_{i,j,k}} - \xi_{c_v})^2, \quad i = 0, 1, j = 0, 1, k = 0, 1\}, \quad \xi_{c_v} = (\xi_{\alpha_v} + \xi_{\beta_v}) / 2$$

Г) Используя этот массив, находится  $E_{near}$  - энергия узла  $\eta_{near}$  (напомним, что у нас есть его «координата»  $e_{near}$ ). Записываем энергию точной разлетной скорости

$$E_0 = (\xi'_{\alpha_v} - \xi_{c_v})^2 = 0.25(\xi_{\alpha_v} - \xi_{\beta_v})^2$$

Возможны три варианта соотношения  $E_0$  и  $E_{near}$

1.  $E_0 = E_{near}$ , в таком случае  $\lambda_v = \lambda_v + s_v = \eta_{near}$ ,  $\mu_v = \mu_v - s_v = \eta_{near1}$ ,  $r_v = 1$ .
2.  $E_0 < E_{near}$ . В таком случае  $\lambda_v + s_v = \eta_{near}$ ,  $\mu_v - s_v = \eta_{near1}$
3.  $E_0 > E_{near}$ . В таком случае  $\lambda_v = \eta_{near}$ ,  $\mu_v = \eta_{near1}$

Д) Осталось найти вторую пару интерполяционных узлов и  $r_v$  в случае 2 и 3 предыдущего пункта. В соответствии с (2.8) для случая 2 нужно найти такую выборку из соседних узлов, для которых верно  $E_{i,j,k} \leq E_0$ , аналогично для случая 3 составляется выборка узлов с  $E_{i,j,k} \geq E_0$ . В каждом из случаев второй интерполяционный узел для  $\xi'_{\alpha_v}$  ищется в пределах этих выборок. Кроме того, в выборке нужно оставить только те узлы, модуль скорости которых и модуль скорости парных к ним узлов (т.е. удовлетворяющих (2.18)), меньше чем  $\xi_{cut}$ . Если таких узлов нет, столкновение отсеивается.

Е) Далее мы вольны взять узел из оставшейся выборки по своему усмотрению, в соответствии с какими либо соображениями. Приведем два метода, у которых наиболее ясное обоснование.

1. Выбирается узел наиболее близкий к разлетной скорости. Каждому из узлов выборки сопоставляется расстояние  $|\xi_{\eta} - \xi'_{\alpha_v}|$  (более удобен эквивалентный ему квадрат расстояния) и определяется узел с наименьшим расстоянием.

2. Выбирается узел максимизирующий вклад ближайшего узла в (2.20). Если  $\eta_{near} = \lambda_v$ , то он входит в (2.20) с весом  $1 - r_v$ , если  $\eta_{near} = \lambda_v + s_v$  то с весом  $r_v$ . Соответственно, в первом случае из выборки берется узел, дающий минимальное значение  $r_v$ , во втором - максимальное. Численный эксперимент (см. задание к семинару №3 – сходимость по шагу скоростной сетки) показывает, что первый метод дает большую точность интеграла. Запрограммируйте его. Ж) С помощью (2.18) получить узел парный к найденному узлу.

**Проверка №1.** Для полученного массива  $r_v$  проверьте выполнение неравенств (2.7). Проверьте также, что бы с машинной точностью выполнялся закон сохранения импульса:

$$\xi_{\lambda_v} + \xi_{\mu_v} = \xi_{\lambda_v + s_v} + \xi_{\mu_v - s_v} = \xi_{\alpha_v} + \xi_{\beta_v}$$

**Проверка №2.** Ориентируйтесь на следующие цифры сокращения узлов интегрирования. Пусть в начале было  $n = 20000$  узлов. После выполнения пункта 4) должно остаться около  $N_v \approx 5000$  узлов (объем сферы примерно вдвое меньше куба, в который она вписана, соответственно при выполнении обоих условий  $|\xi_{\alpha_v}| \leq \xi_{cut}$ ,  $|\xi_{\beta_v}| \leq \xi_{cut}$  останется примерно вчетверо меньше узлов). Численная практика показывает, что в случае потенциала твердых сфер после отсеивания в пункте 7) остается  $\tilde{N}_v \approx 3000 - 3500$  узлов. Если цифры (точнее пропорции) существенно иные - ищите ошибку.

**Замечание №1.** Легко заметить, что при программировании этого задания нужно использовать массивы переменного размера (динамические массивы).

**Замечание №2** Важный нюанс. Хотя суммирование в (2.20) проходит по столкновениям, которые остаются после отсева (обозначим количество таких узлов  $\tilde{N}_v$ ), во множителе  $(1/2)\pi b_{\max} V_{sph} (N_0 / N_v)$ , который стоит перед знаком суммы в (2.20), должно использоваться старое значение количества узлов интегрирования (до отсева) -  $N_v$ . Т.е. интеграл выглядит как

$$I_v = \frac{\pi b_{\max} V_{sph}}{2} \frac{N_0}{N_v} \sum_{v=1}^{\tilde{N}_v} \{ \dots \}$$

Объяснение таково – формально суммирование происходит все также по  $N_v$  узлам, однако для отсеянных узлов приближенно принималось  $\Omega_v = 0$ , и они выкидывались из суммирования.

**Замечание №3.** Разумеется, не обязательно детально копировать приведенный алгоритм. Главное, соблюсти его основную логику: 1) в качестве одной пары интерполяционных узлов – обязательно брать ближайшие, 2) удовлетворение неравенств (2.8), и 3) выполнение пункта Е).

## Семинар № 3 Задача релаксации

В этом семинаре мы осуществим первое практическое использование полученного численного интеграла (2.20) на простейшей задаче - релаксация пространственно однородного неравновесного состояния газа. При отсутствии пространственной адвекции уравнение Больцмана (1.2) серьезно упрощается:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = I(f) \quad (3.1)$$

Решение уравнения (3.1) очевидно также является пространственно однородным во все моменты времени, поэтому при численном счете этой задачи не нужно вводить пространственную сетку и достаточно иметь дело только со скоростной сеткой. Благодаря этому задача релаксации не требует серьезных вычислительных мощностей и считается быстро. С помощью нее, опираясь на качественно известное поведение решения, можно провести простейшую физическую проверку интеграла запрограммированного учащимся. Это будет составлять содержательную часть практического задания этого семинара.

Однако перед этим мы модифицируем способ получения массива узлов интегрирования, и перепишем кинетическое уравнение в безразмерных единицах.



## 1. Сетки Коробова

Интуитивно ясно, что чем большее количество узлов интегрирования используется в (2.20), тем меньшей будет погрешность численного интегрирования. Для метода Монте-Карло она обратно пропорциональна корню из числа узлов:

$$\Delta I \sim O(N_v^{-0.5}) \quad (3.2)$$

Возникает практический вопрос – можно ли найти зависимость спадающую более быстро? Поскольку зависимость (3.2) универсальна для любого вероятностного метода, ответ на этот вопрос лежит в плоскости регуляризации распределения сетки интегрирования, т.е. задания ее с помощью некоторой аналитической зависимости. С другой стороны, как это указывалось в предыдущем семинаре, использование регулярной сетки чревато сильными локальными отклонениями погрешности от гладкой степенной зависимости – когда регулярности сетки совпадают или еще каким либо образом коррелируют с особенностями функции (см. Рис.3). На наш взгляд, компромиссом является использование так называемых сеток Коробова.

Идея сеток Коробова базируется на понятии дробного остатка. Введем для него обозначение:

$$\{1.2341\} = 0.2341 \text{ или } \{7.3852\} = 0.3852$$

(В дальнейшем фигурные скобки будут использоваться нами только для этого обозначения.) Возьмем некоторое простое число  $p$  и произвольное натуральное  $a$ , такое что  $a < p$ . Нетрудно показать (см. [4]), что распределение:

$$x_k = \{ak / p\}, \quad k = 1, 2, \dots, p$$

является в пределе равномерным на интервале  $[0,1]$ . Аналогично, в случае произвольной размерности  $s$ , распределение

$$\mathbf{x}_k = \left\{ \frac{a_1 k}{p}, \frac{a_2 k}{p}, \dots, \frac{a_s k}{p} \right\}, \quad k = 1, 2, \dots, p \quad (3.3)$$

где  $(a_1, a_2, \dots, a_s)$  – набор натуральных чисел меньших чем  $p$ , является в пределе равномерным в  $s$ -мерном единичном кубе  $[0,1] \times \dots \times [0,1]$ . Сетки вида (3.3) называют *параллелепипедальными*.

Пусть  $C(m_1, \dots, m_s)$  – коэффициенты Фурье функции  $y(x_1, \dots, x_s)$ :

$$y(x_1, \dots, x_s) = \sum_{m_1=-\infty}^{\infty} \dots \sum_{m_s=-\infty}^{\infty} C(m_1, \dots, m_s) e^{2\pi i(m_1 x_1 + \dots + m_s x_s)}$$

Будем говорить, что функция  $y(x_1, \dots, x_s)$  принадлежит классу  $E_s^\alpha(C)$ , если для ее коэффициентов Фурье выполняется следующая оценка:

$$|C(m_1, \dots, m_s)| \leq \frac{C}{(|\bar{m}_1| |\bar{m}_2| \dots |\bar{m}_s|)^\alpha}, \quad \bar{m}_i = \max(1, |m_i|)$$

К примеру, одномерная ступенчатая функция

$$y(x) = \begin{cases} 1, & x \in [x_0 - \Delta x / 2, x_0 + \Delta x / 2] \\ 0, & x \notin [x_0 - \Delta x / 2, x_0 + \Delta x / 2] \end{cases}, \quad x_0 - \Delta x / 2 \in [0,1], \quad x_0 + \Delta x / 2 \in [0,1] \quad (3.4)$$

имеет следующие коэффициенты Фурье

$$C_m = \int_0^1 y(x) e^{-2\pi i m x} dx = \int_{x_0 - \Delta x / 2}^{x_0 + \Delta x / 2} e^{-2\pi i m x} dx = -\frac{1}{2\pi i m} e^{-2\pi i m x} \Big|_{x_0 - \Delta x / 2}^{x_0 + \Delta x / 2} = -e^{-2\pi i m x} \frac{1}{\pi i m} \sin(\pi m \Delta x)$$

и, для любых  $C_m$  выполняется неравенство

$$|C_m| \leq 1/\bar{m}$$

т.е. функция (3.4) принадлежит к классу  $E_1^1(1)$ . Для  $s$ -мерной ступенчатой функции рассуждения аналогичны и ее класс соответственно  $E_s^1(1)$ .

Коробовым, в монографии «Тригонометрические суммы и их приложения» [4], была доказана

**Теорема (Коробов)** Пусть  $y(\mathbf{x}) \in E_s^\alpha(C)$ . Для каждого  $p > s$  можно выбрать такой набор  $(a_1, a_2, \dots, a_s)$ , что на соответствующей ему параллелепипедальной сетке для погрешности квадратурной формулы

$$\int_0^1 \dots \int_0^1 y(\mathbf{x}) dx_1 \dots dx_s = \frac{1}{p} \sum_{k=1}^p y(\mathbf{x}_k) + \Delta I_p[y] \quad (3.5)$$

при любом  $\alpha > 1$ , выполняется оценка

$$|\Delta I_p[y]| \leq C_1 C \frac{\ln^\gamma(p)}{p^\alpha}, \quad \gamma = \alpha s \quad (3.6)$$

где  $C_1 = C_1(\alpha, s)$  - константа, которая зависит только от  $\alpha$  и  $s$ .

Такие параллелепипедальные сетки самим Коробовым названы *оптимальными параллелепипедальными сетками*, хотя мы в дальнейшем будем называть их сетками Коробова. Наборы  $(a_1, a_2, \dots, a_s)$  для оптимальных сеток находятся специальными алгоритмами. Один из таких алгоритмов описан в практической части этого семинара.

Заметим, что оптимальной является также изначальная сетка Коробова, периодически сдвинутая на некоторый вектор  $\mathbf{R}$ :

$$\mathbf{x}_k = \left\{ \left\{ \frac{a_1 k}{p}, \frac{a_2 k}{p}, \dots, \frac{a_s k}{p} \right\} + \mathbf{R} \right\}, \quad k = 1, 2, \dots, p \quad (3.7)$$

Действительно, применение таких сеток, можно интерпретировать как интегрирование обычными сетками Коробова – т.е. вида (3.3), соответствующе сдвинутой функции. Нетрудно показать, что у сдвинутой функции модули коэффициентов Фурье такие же, как и у изначальной функции, т.е. для нее выполняется такая же оценка (3.6). В дальнейшем мы будем использовать именно сетки (3.7), устраивая сдвиг на случайный вектор.

Одна из основополагающих теорем Фурье-анализа связывает быстроту затухания коэффициентов Фурье с гладкостью периодической функции. Таким образом, из (3.6) видно, что чем более гладкой будет периодическая функция полученная продолжением подынтегральной функции, тем более точные результаты даст квадратурная формула (3.5).

Покажем преимущество сеток Коробова перед методом Монте-Карло на примере интеграла

$$I = \int_{-3}^3 \dots \int_{-3}^3 e^{-(x_1^2 + \dots + x_8^2)} dx_1 \dots dx_8 = \int_0^1 \dots \int_0^1 e^{-36((x_1-0.5)^2 + \dots + (x_8-0.5)^2)} dx_1 \dots dx_8 \quad (3.9)$$

На Рис.5(а) отображена зависимость относительной погрешности вычисления (3.9) от числа узлов сетки. Для каждого исследуемого  $p$  создавался набор из  $N_{stat}$  соответствующих сеток Коробова отличающихся сдвигом на случайный вектор

$$\mathbf{x}_k^{(i)} = \left\{ \left\{ \frac{a_1 k}{p}, \frac{a_2 k}{p}, \dots, \frac{a_s k}{p} \right\} + \mathbf{R}_i \right\}, \quad k = 1, 2, \dots, p; \quad i = 1, \dots, N_{stat}$$

На каждой сетке с помощью квадратурной формулы (3.5) получался численный интеграл  $I_i$ . В итоге, для набора составлялась среднеквадратичная относительная погрешность  $\delta$

$$\delta = \frac{1}{I} \sqrt{\frac{1}{N_{stat}} \sum_{i=1}^{N_{stat}} \delta_i^2} = \frac{1}{I} \sqrt{\frac{1}{N_{stat}} \sum_{i=1}^{N_{stat}} (I_i - I)^2} \approx \frac{1}{\bar{I}} \sqrt{\frac{1}{N_{stat}} \sum_{i=1}^{N_{stat}} (I_i - \bar{I})^2}, \quad \bar{I} = \frac{1}{N_{stat}} \sum_{i=1}^{N_{stat}} I_i \quad (3.10)$$

характеризующая среднеожидаемую погрешность вычисления интеграла на сетке Коробова с заданным  $p$ . В (3.10) точное значение интеграла  $I$  заменяется средним значением численного интеграла по набору, что оправданно при больших  $N_{stat}$  (отличие  $I$  от  $\bar{I}$  порядка  $\sim \delta / \sqrt{N_{stat}}$ ).

Зеленым цветом отображена погрешность на сетках Коробова, синим – для метода Монте-Карло. Красным цветом отображена линейная интерполяция погрешности для сеток Коробова – поскольку графики построены в логарифмических шкалах, степенная зависимость превращается в линейную. При составлении графиков бралось  $N_{stat} = 400$ .

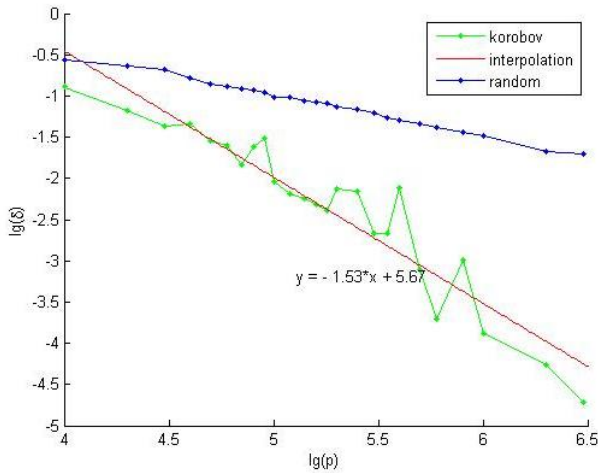


Рис. 5 (а)

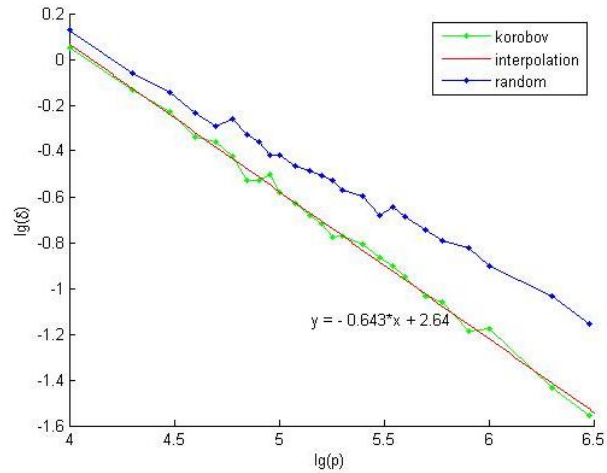


Рис. 5 (б)

Итак, для интеграла (3.9), поведение погрешности можно качественно описать формулой

$$\delta \sim p^{-1.53}$$

Это заведомо лучше, чем зависимость для метода Монте-Карло:  $\delta \sim 1/\sqrt{p}$ , что наглядно видно на графике. Как уже упоминалось выше, использование регулярных сеток может дать заметные отклонения  $\delta$  от гладкой степенной зависимости - так на Рис.5(а), погрешность сеток Коробова имеет довольно сильные осцилляции, в то время как метод Монте-Карло дает гладкий спад.

Поскольку ступенчатая функция принадлежит к классу  $E_1^1(1)$ , действие теоремы Коробова на нее не распространяется (для этого должно быть  $\alpha > 1$ ) и оценка погрешности будет иной нежели (3.6). Однако, как это видно из Рис.5(б), на котором отображены погрешности вычисления интеграла от ступенчатой функции:

$$I = \int_0^1 \dots \int_0^1 \Delta(\mathbf{x}) dx_1 \dots dx_8, \Delta(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{x} \in \Gamma = [0.35, 0.65] \times \dots \times [0.35, 0.65] \\ 0, & \mathbf{x} \notin \Gamma \end{cases} \quad (3.11)$$

даже в этом случае использование сеток Коробова дает лучшие результаты. Это важно для нас, так как при построении интеграла (2.20) использовались ступенчатые функции. Заметим, что для (3.11) сетки являются уже достаточно густыми и осцилляции погрешности исчезают.

## 2. Непрерывно эволюционирующая разностная схема

Перед тем как записать разностную схему для дифференциального уравнения (3.1), перейдем к следующим безразмерным переменным, удобным при численном счете:

$$\tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r} / \lambda, \tilde{\xi} = \xi / \xi_{\kappa\theta}, \tilde{n} = n / n_0, \tilde{f} = f / (n_0 \xi_{\kappa\theta}^{-3}), \tilde{t} = t / \tau_\lambda, \text{ где } \tau_\lambda = \lambda / \xi_{\kappa\theta} \quad (3.12)$$

Здесь  $\xi_{\kappa\theta} = \sqrt{kT_0/m}$  - среднеквадратичная скорость молекул, где  $T_0$  - максимальная из характерных температур задачи,  $n_0$  - некоторая характерная концентрация,  $\lambda$  - средняя длина свободного пробега молекул, взятая при  $T_0, n_0$ .

Следует сказать несколько слов о понятии длины свободного пробега. Из курса общей физики вам должно быть известно, что для газа молекул в виде твердых сфер диаметром  $d$ , при концентрации  $n_0$ , средняя длина свободного пробега (т.е. пробега без столкновений), равна

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2} \pi n_0 d^2} \quad (3.13)$$

В случае необрезанного потенциала взаимодействия молекул, понятие столкновения сильно размывается, поскольку молекулы, вообще говоря, взаимодействуют все время (хотя и с разной интенсивностью). Поэтому, в случае произвольного межмолекулярного потенциала поступают следующим образом: рассматриваемый газ моделируется газом из твердых сфер, имеющим те

же температуру, концентрацию и какой либо параметр, завязанный на молекулярный размер. После чего, длина свободного пробега исходного газа определяется как длина свободного пробега получившегося газа из твердых сфер. В качестве такого параметра была выбрана вязкость. Для газа из твердых сфер диаметром  $d$  вязкость равна (см. [5])

$$\eta = \frac{5}{16d^2} \sqrt{\frac{kTm}{\pi}} \quad (3.14)$$

Итак, подставив в левую часть этого выражения вязкость, которую имеет рассматриваемый газ с произвольным межмолекулярным потенциалом (ее можно получить теоретическими или экспериментальными средствами) найдем  $d_{\text{eff}}$  - характерный диаметр его молекул. Подставив его в (3.13) получим длину свободного пробега.

В дополнение к безразмерным переменным (3.12), введем безразмерное прицельное расстояние

$$\tilde{b} = b / d_{\text{eff}} \quad (3.15)$$

Используя замены (3.12) и (3.15) перепишем кинетическое уравнение

$$\frac{\xi_{\kappa\theta}}{\lambda} (n_0 \xi_{\kappa\theta}^{-3}) \frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} + \frac{\xi_{\kappa\theta}}{\lambda} (n_0 \xi_{\kappa\theta}^{-3}) \tilde{\xi} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{\mathbf{r}}} = (n_0 \xi_{\kappa\theta}^{-3})^2 \xi_{\kappa\theta}^4 d_{\text{eff}}^2 \int (\tilde{f}' f_1' - \tilde{f} f_1) \tilde{g} \tilde{b} d\tilde{b} d\tilde{\epsilon} d\tilde{\xi}_1$$

или, после сокращения одинаковых множителей и используя (3.13)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int (f' f_1' - f f_1) g b d b d \epsilon d \xi_1 \quad (3.16)$$

Здесь и далее, для удобства и краткости обозначений, знак тильды опущен. Выполним еще одно важное преобразование - перейдем от переменной  $b$ , к ее квадрату  $S = b^2$ :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \int (f' f_1' - f f_1) g d S d \epsilon d \xi_1 \quad (3.17)$$

$$f' = f(\varphi(\xi, \xi_1, \sqrt{S}, \epsilon)), f_1' = f(\varphi_1(\xi, \xi_1, \sqrt{S}, \epsilon))$$

Поясним смысл последнего преобразования. Численное интегрирование происходит тем точнее, чем слабее изменяется на области интегрирования подынтегральная функция. В качестве предельного примера можно рассмотреть  $y(\mathbf{x}) = \text{const}$  - очевидно, что для нее квадратурная формула (3.5) имеет нулевую погрешность. В отличие от (3.16), интеграл в записи (3.17) не имеет явной зависимости подынтегральной функции от прицельного расстояния, и можно ожидать, что точность его вычисления будет большей. Численный эксперимент подтверждает это предположение. На Рис.6, в логарифмических шкалах показана погрешность вычисления численного интеграла (в случае функции распределения вида (3.35)) в зависимости от числа узлов сетки Коробова. Из рисунка наглядно видно преимущество (3.17).

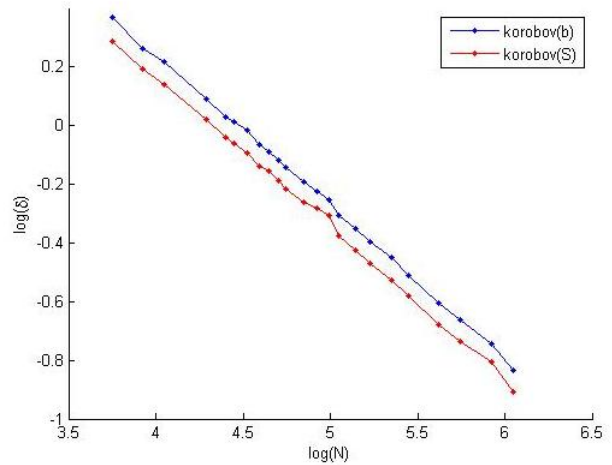


Рис. 6

В новых переменных численный интеграл столкновений будет иметь вид

$$I_\gamma = \frac{b_{\text{max}}^2 V_{\text{sph}}}{4\sqrt{2}} \frac{N_0}{N_v} \sum_{v=1}^{\tilde{N}_v} \left[ \delta_{\alpha_v, \gamma} + \delta_{\beta_v, \gamma} - (1 - r_v) (\delta_{\lambda_v, \gamma} + \delta_{\mu_v, \gamma}) - r_v (\delta_{\lambda_v + s_v, \gamma} + \delta_{\mu_v - s_v, \gamma}) \right] \Omega_v \quad (3.18)$$

Здесь вклады  $\Omega_v$ , в отличие от (2.20), уже без прицельного расстояния. Запишем дифференциальное уравнение (3.1) в следующем виде

$$\frac{f(t + \tau) - f(t)}{\tau} = I(t) + O(\tau)$$

где  $\tau$  - некоторый выбранный временной шаг. Или, после элементарного преобразования

$$f(t + \tau) = f(t) + \tau I(t) + O(\tau^2) \quad (3.19)$$

Окончательно, аппроксимируя функции их дискретными аналогами, запишем:

$$f_{\gamma}^{j+1} = f_{\gamma}^j + \tau I_{\gamma}^j \quad (3.20)$$

Верхний индекс обозначает временной слой. Получившаяся схема явная – вклады в интеграл вычисляются в ней через функции распределения с нижнего временного слоя:

$$\Omega_v^j = \left[ \left( f_{\lambda_v}^j f_{\mu_v}^j \right)^{1-r_v} \left( f_{\lambda_v+s_v}^j f_{\mu_v-s_v}^j \right)^{r_v} - f_{\alpha_v}^j f_{\beta_v}^j \right] \left| \xi_{\alpha_v} - \xi_{\beta_v} \right|$$

Из (3.19) видно, что если  $f_{\gamma}^0 = f(\xi_{\gamma}, t = 0)$ , погрешность численного решения на одном шаге

$$f^1 - f(\tau) = O(\tau^2) + \tau O(\Delta \xi) + \tau O(N_v^{-\alpha})$$

Член  $\tau O(\Delta \xi)$  возникает из-за того, что при составлении интеграла (3.18) использовались приближения первого порядка точности по шагу сетки. Член  $\tau O(N_v^{-\alpha})$  возникает из-за погрешностей вычисления самого интеграла (3.18) (в случае метода Монте-Карло  $\alpha = 0.5$  для любых интегрируемых функций, см. предыдущий параграф), и является случайной величиной, поскольку положение узлов интегрирования случайно – в методе Монте-Карло по определению, при использовании сеток Коробова (3.7) из-за наличия случайного вектора  $\mathbf{R}$ . Если бы это отличие накапливалось линейно от количества шагов по времени, ошибка аппроксимации решения (3.1) схемой (3.20) вычислялась бы как

$$\delta[f] \sim (O(\tau^2) + \tau O(\Delta \xi) + \tau O(N_v^{-\alpha})) / \tau = O(\tau) + O(\Delta \xi) + O(N_v^{-\alpha})$$

Однако, из-за своей вероятностной природы, члены  $\tau O(N_v^{-\alpha})$  на каждом шаге могут компенсировать друг друга, и складываться должны квадраты их ошибок. На шаге  $n$  получим

$$f^{n+1} - f(n\tau) = nO(\tau^2) + n\tau O(\Delta \xi) + \sqrt{n}\tau O(N_v^{-\alpha})$$

Погрешность аппроксимации схемы (3.20) следует вычислять как отличие решения за такой промежуток времени, в течение которого решение меняется значимым образом, т.е. за  $n = O(1/\tau)$  шагов. Отсюда для погрешности

$$\delta[f] = O(\tau) + O(\Delta \xi) + O(\sqrt{\tau})O(N_v^{-\alpha}) \quad (3.21)$$

Можно улучшить схему, меняя функцию распределения не скачком, как в (3.20) - после полного суммирования в интеграле (3.18), а непрерывно - в процессе самого суммирования:

$$\begin{aligned} f_{\gamma}^{(v+1)} &= f_{\gamma}^{(v)} + \tau \delta I_{\gamma}^{(v)}, \quad v = 1, \dots, \tilde{N}_v, \quad f_{\gamma}^{(1)} = f_{\gamma}^j, \quad f_{\gamma}^{(\tilde{N}_v+1)} = f_{\gamma}^{j+1} \\ \delta I_{\gamma}^{(v)} &= \frac{b_{\max}^2 V_{sph}}{4\sqrt{2}} \frac{N_0}{N_v} \left[ \delta_{\alpha_v, \gamma} + \delta_{\beta_v, \gamma} - (1-r_v) \left( \delta_{\lambda_v, \gamma} + \delta_{\mu_v, \gamma} \right) - r_v \left( \delta_{\lambda_v+s_v, \gamma} + \delta_{\mu_v-s_v, \gamma} \right) \right] \Omega_v \\ \Omega_v &= \left[ \left( f_{\lambda_v}^{(v)} f_{\mu_v}^{(v)} \right)^{1-r_v} \left( f_{\lambda_v+s_v}^{(v)} f_{\mu_v-s_v}^{(v)} \right)^{r_v} - f_{\alpha_v}^{(v)} f_{\beta_v}^{(v)} \right] \left| \xi_{\alpha_v} - \xi_{\beta_v} \right| \end{aligned} \quad (3.22)$$

В Приложении показывается, что схема (3.22) имеет погрешность аппроксимации

$$\delta[f] = O(\Delta \xi) + O(\sqrt{\tau}) \sqrt{O(N_v^{-2\alpha}) + \tau^2 O(N_v^{-1})}$$

Или, при не слишком больших временных шагах

$$\delta[f] = O(\Delta \xi) + O(\sqrt{\tau})O(N_v^{-\alpha}) \quad (3.23)$$

Это меньше чем (3.21) на член  $O(\tau)$ , и в дальнейшем мы будем использовать схему (3.22).

В доказательстве формулы (3.23), приводимом в Приложении, показывается, что эта формула верна только при случайно перемешанном порядке узлов сетки Коробова (легко заметить, что в отличие от схемы (3.20) порядок следования узлов в (3.22) влияет на результат). Первому узлу сетки присваивается случайный порядковый номер  $n_1$ , второму узлу – номер  $n_2$ , который случайно берется уже из  $n \in [1, \dots, n_1 - 1, n_1 + 1, \dots, N_v]$  и т.д.

Из самого вида интегрируемой функции – наличия символов Кронекера (иначе говоря, ступенчатых функций в скоростном пространстве) легко увидеть, что более подробной записью для ошибки интегрирования будет выражение

$$O((N_v / N_0)^{-\alpha})$$

Действительно, зафиксируем конкретный узел  $\gamma$  скоростной сетки. Среднее количество узлов сетки Коробова, которые дают вклад в интеграл в этом узле будет  $\bar{N} \sim (N_v / N_0)$ . Остальные узлы сетки Коробова никак не влияют на  $I_\gamma$ , т.е. ошибка определяется именно  $\bar{N}$ . В этой записи  $O(1)$  уже близка к величине самого интеграла. Кроме того, для узких ступенчатых функций коэффициент  $\alpha \approx 0.5$ . Так, после выполнения практического задания семинара вы убедитесь, что для функций вида (3.35), (3.36) ошибка составляет  $\approx I_\gamma C \sqrt{N_0 / N_v}$ ,  $C = 1.5 - 3$ .

Вспоминая, что  $N_0 = V_{sph} / \Delta \xi^3$  (для простоты взята кубическая сетка), окончательно запишем

$$\delta[f] = O(\Delta \xi) + O(\sqrt{\tau}) O(\Delta \xi^{-3/2} N_v^{-1/2})$$

Отсюда видно, что размер сетки Коробова должен браться

$$N_v = O(\Delta \xi^{-5}) \quad (3.24)$$

То есть, вдвое уменьшая шаг скоростной сетки, сетку Коробова нужно увеличить в 32 раза, что бы ошибки  $O(\Delta \xi)$  и  $O(N_v^{-\alpha})$  уменьшились одинаково – в два раза. Это наглядно показывает, как дорого дается дробление скоростных сеток, и почему их берут довольно грубыми.

### 3. Ограничение на размер используемых сеток Коробова

Интуитивно ясно, что чем больше свойств изначальной непрерывной функции сохраняет ее дискретный аналог, тем лучше отображает физическую реальность разностная схема. Поэтому, дискретная функция распределения  $f_\gamma^j$  так же, как и ее непрерывный аналог, должна в любой момент времени и в каждом узле скоростной сетки удовлетворять условию неотрицательности:

$$f_\gamma^j \geq 0 \quad (3.25)$$

Кроме того, неотрицательность функции распределения косвенно использовалась при выводе точного интеграла, соответственно, для адекватной работы его дискретного аналога также необходимо выполнение условия (3.25). Наконец, в (3.22) используется возведение функции распределения в степень, что невозможно при ее отрицательных значениях.

Вклад в интеграл столкновения  $\delta I_\gamma^{(v)}$  может принимать отрицательные значения, и при достаточно большом  $\tau$  схема (3.22) может нарушить условие (3.25). Что бы найти максимально допустимое значение временного шага, изучим нижние пределы для  $\delta I_\gamma^{(v)}$ . Пусть  $\Omega_v < 0$

$$\begin{aligned} \delta I_\gamma^{(v)} &\geq \frac{b_{\max}^2 V_{sph}}{4\sqrt{2}} \frac{N_0}{N_v} (\delta_{\alpha_v, \gamma} + \delta_{\beta_v, \gamma}) \Omega_v \geq -\frac{b_{\max}^2 V_{sph}}{4\sqrt{2}} \frac{N_0}{N_v} (\delta_{\alpha_v, \gamma} + \delta_{\beta_v, \gamma}) f_{\alpha_v}^{(v)} f_{\beta_v}^{(v)} g_v \geq \\ &\geq -f_\gamma^{(v)} f_{\max}^{(v)} \frac{b_{\max}^2 V_{sph}}{2\sqrt{2}} \frac{N_0}{N_v} \xi_{cut} \end{aligned} \quad (3.26)$$

Здесь  $f_{\max}^{(v)}$  - максимум функции распределения на  $v$ -ой итерации. При выводе использовался тот факт, что  $\alpha_v \neq \beta_v$ , откуда  $\delta_{\alpha_v} \neq \delta_{\beta_v}$ , и неравенство  $g_v \leq 2\xi_{cut}$ . Рассмотрим случай  $\Omega_v > 0$

$$\begin{aligned} \delta I_\gamma^{(v)} &\geq \frac{b_{\max}^2 V_{sph}}{4\sqrt{2}} \frac{N_0}{N_v} \left[ -(1-r_v) (\delta_{\lambda_v, \gamma} + \delta_{\mu_v, \gamma}) - r_v (\delta_{\lambda_v + s_v, \gamma} + \delta_{\mu_v - s_v, \gamma}) \right] \Omega_v \geq \\ &\geq \frac{b_{\max}^2 V_{sph}}{4\sqrt{2}} \frac{N_0}{N_v} \left[ -(1-r_v) (\delta_{\lambda_v, \gamma} + \delta_{\mu_v, \gamma}) - r_v (\delta_{\lambda_v + s_v, \gamma} + \delta_{\mu_v - s_v, \gamma}) \right] \left( f_{\lambda_v}^{(v)} f_{\mu_v}^{(v)} \right)^{1-r_v} \left( f_{\lambda_v + s_v}^{(v)} f_{\mu_v - s_v}^{(v)} \right)^{r_v} g_v \end{aligned}$$

Пусть нет совпадающих интерполирующих узлов, т.е. никакие символы Кронекера в выражении не равняются единице одновременно; взяв, для определенности,  $\delta_{\lambda_v, \gamma} = 1$ , запишем

$$\begin{aligned} \delta I_{\gamma}^{(k)} &\geq -\frac{b_{\max}^2 V_{sph}}{4\sqrt{2}} \frac{N_0}{N_v} (1-r_v) \left( f_{\gamma}^{(v)} f_{\mu_v}^{(v)} \right)^{1-r_v} \left( f_{\gamma+s_v}^{(v)} f_{\mu_v-s_v}^{(v)} \right)^{r_v} g_v \geq \\ &\geq -f_{\gamma}^{(v)} f_{\max}^{(v)} \frac{b_{\max}^2 V_{sph}}{2\sqrt{2}} \frac{N_0}{N_v} \xi_{cut} (1-r_v) \left( f_{\gamma+s_v}^{(v)} / f_{\gamma}^{(v)} \right)^{r_v} \end{aligned} \quad (3.27)$$

Возможна ситуация, когда пара интерполирующих узлов совпадает, например  $\lambda_v = \mu_v$  (Рис.7), и ненулевой вклад в  $\delta I_{\gamma}^{(v)}$  дают два символа Кронекера одновременно. В таком случае

$$\begin{aligned} \delta I_{\gamma}^{(v)} &\geq -(1-r_v) \frac{b_{\max}^2 V_{sph}}{2\sqrt{2}} \frac{N_0}{N_v} \left( f_{\gamma}^{(v)} \right)^{2(1-r_v)} \left( f_{\gamma+s_v}^{(v)} f_{\gamma-s_v}^{(v)} \right)^{r_v} g_v \geq \\ &\geq -f_{\gamma}^{(v)} f_{\max}^{(v)} \frac{b_{\max}^2 V_{sph}}{2\sqrt{2}} \frac{N_0}{N_v} (1-r_v) \left( f_{\gamma+s_v}^{(v)} / f_{\gamma}^{(v)} \right)^{r_v} g_v \geq -f_{\gamma}^{(v)} f_{\max}^{(v)} \frac{b_{\max}^2 V_{sph}}{2\sqrt{2}} \frac{N_0}{N_v} 2\sqrt{3}\Delta\xi(1-r_v) \left( f_{\gamma+s_v}^{(v)} / f_{\gamma}^{(v)} \right)^{r_v} \end{aligned}$$

Здесь мы учли тот факт, что совпадение интерполирующих узлов возможно только в случае, изображенном на Рис.7, когда разлетные и интерполирующие скорости лежат в кубе размера  $2\Delta\xi$  построенным вокруг совпадающих узлов (для простоты мы взяли кубическую скоростную сетку). Как следствие, относительная скорость не может быть больше чем  $2\sqrt{3}\Delta\xi$  - диагональ этого куба.

При  $\Delta\xi \leq \xi_{cut} / (2\sqrt{3})$  оценка (3.27) включает получившуюся оценку. Мы будем использовать даже более мелкие сетки.

Итак, мы имеем оценки (3.26) и (3.27), которые отличаются на множитель  $(1-r_v) \left( f_{\gamma+s_v}^{(v)} / f_{\gamma}^{(v)} \right)^{r_v}$ . Вообще, он может принимать любые значения и определяющей является оценка (3.27). Однако мы рассмотрим такие функции распределения, для которых

$$f_{\gamma+s_v}^{(v)} / f_{\gamma}^{(v)} \leq e \approx 2.718 \quad (3.28)$$

В таком случае при любых  $r_v$ , множитель будет меньше единицы (это легко получить, изучая на максимум функцию  $z(x, y) = (1-x)y^x$ ,  $0 \leq x \leq 1$ ), и (3.26) включает оценку (3.27).

Применяя оценку (3.26) к схеме (3.22), запишем условие неотрицательности (3.25) для  $f_{\gamma}^{(v+1)}$ :

$$f_{\gamma}^{(v+1)} = f_{\gamma}^{(v)} + \tau \delta I_{\gamma}^{(v)} \geq f_{\gamma}^{(v)} - f_{\gamma}^{(v)} f_{\max}^{(v)} \frac{b_{\max}^2 V_{sph}}{2\sqrt{2}} \frac{N_0}{N_v} \xi_{cut} \tau = f_{\gamma}^{(v)} \left( 1 - f_{\max}^{(v)} \frac{b_{\max}^2 V_{sph}}{2\sqrt{2}} \frac{N_0}{N_v} \xi_{cut} \tau \right) \geq 0$$

Отсюда, учитывая, что  $f_{\gamma}^{(v)} \geq 0$ , получим неравенство

$$f_{\max}^{(v)} b_{\max}^2 V_{sph} (N_0 / N_v) \xi_{cut} \tau / 2^{3/2} \leq 1$$

Неравенство должно выполняться при любом  $v=1, \dots, \tilde{N}_v$ , поэтому в нем следует поставить  $\left( f_{\max}^{(v)} \right)^{\max}$  - максимальное значение среди всех  $f_{\gamma}^{(v)}$ . Вообще говоря, оно нам неизвестно, но учитывая, что временной шаг берется достаточно малым и функция распределения меняется на нем достаточно слабо, предположим, что  $\left( f_{\max}^{(v)} \right)^{\max} \approx f_{\max}^{(1)} = f_{\max}^j$ . В итоге можно записать

$$\frac{N_v}{\tau} \geq W_{\min}^j = \frac{1}{2\sqrt{2}} f_{\max}^j b_{\max}^2 V_{sph} \xi_{cut} N_0 \quad (3.29)$$

Поскольку  $N_v$  является величиной, которую мы можем выбирать по своему усмотрению, мы, по сути, получили условие не на максимальный временной шаг, а на минимальное значение

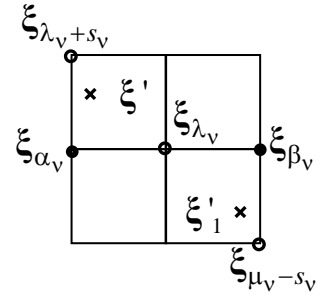


Рис. 7

выбрасываемых на нем узлов интегрирования (термин «выбрасывать» узлы идет из метода Монте-Карло, по аналогии с «выбрасывать кости»).

Так как мы использовали предположение (3.28) (которое, на грубых сетках доступных в нашем распоряжении, обычно не выполняется для всех узлов) и приближение  $(f_{\max}^{(v)})^{\max} = f_{\max}^j$ , выполнение (3.29), вообще говоря, не приводит гарантированно к  $f_{\gamma}^{(v+1)} \geq 0$ . Поэтому, после каждой  $v$ -ой итерации получившаяся функция распределения должна проверяться на неотрицательность, и если для некоторого столкновения  $v_0$  получается  $f_{\gamma}^{(v_0+1)} \leq 0$ , такое столкновение не принимается во внимание и выбрасывается из расчетов, а функции распределения возвращается старое значение, бывшее до итерации.

Однако, для подавляющего большинства  $v=1, \dots, \tilde{N}_v$ , условие неотрицательности будет выполняться. Дело в том, что оценки (3.26) и (3.27) серьезно занижены. Так, например, для относительных скоростей использовалась явно завышенная оценка  $g_{\max} = 2\xi_{cut}$ . Действительно, если максимум функции распределения расположен вблизи начала координат скоростного пространства (как это обычно и бывает), то реальная оценка составит  $g_{\max} \approx \xi_{cut}$ . Завышенной является и оценка прицельных расстояний, поскольку  $\Omega_v^{(v)} \approx 0$  при больших  $b$  (см. семинар №1). Кроме того, напомним, что вблизи термодинамического равновесия члены  $(f_{\lambda_v}^{(v)} f_{\mu_v}^{(v)})^{1-r_v} (f_{\lambda_v+s_v}^{(v)} f_{\mu_v-s_v}^{(v)})^{r_v}$  и  $f_{\alpha_v}^{(v)} f_{\beta_v}^{(v)}$  большей частью компенсируют друг друга, что также повышает реальную оценку для  $\delta I_{\gamma}^{(v)}$ . Итак, условие (3.29) следует воспринимать как хороший ориентир для определения необходимого количества узлов интегрирования. При выполнении практического задания одним из его пунктов будет исследование доли отсеянных узлов.

В качестве иллюстрации произведём конкретную оценку для молекул в виде твердых сфер, взяв в качестве  $f_{\max}$  максимальное значение максвелловской функции

$$f = n(2\pi\tilde{T})^{-3/2} \exp(-0.5\xi^2/\tilde{T})$$

(используется безразмерная температура  $\tilde{T} = T/T_0$ , в дальнейшем знак тильды как обычно будет опускаться). Приняв  $n=1$  и  $T=1$

$$f_{\max} = 1/(2\pi)^{3/2}$$

Для твердых сфер  $b_m = 1$ . Возьмем  $\xi_{cut} = 4.8$ ,  $N_0 = 4224$  (такое количество узлов лежит в сфере радиуса  $\xi_{cut}$ , если в сетке вида (2.21) взять  $N_{\xi_x} = N_{\xi_y} = N_{\xi_z} = 20$ ). В соответствии с (3.29)

$$W_{\min} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{4\pi\xi_{cut}^3/3}{2\sqrt{2}} \xi_{cut} N_0 = \frac{N_0 \xi_{cut}^4}{6\sqrt{\pi}} \approx 210840$$

(вообще говоря, следует брать  $V_{sph} = N_0(\Delta\xi)^3$ , что лишь приблизительно равняется  $4\pi\xi_{cut}^3/3$ , но в данном случае отличие составляет один процент). Если взять  $\tau = 0.1$  (т.е. одна десятая времени свободного пробега  $\tau_{\lambda}$  - характерное время релаксации функции распределения), то получим

$$N_v = 21084$$

Это означает, что используемая сетка Коробова имеет  $p \approx 4 \cdot 21084 \approx 84000$  начальных узлов. (Напомним, что узлы сетки Коробова, лежащие за пределами  $\xi_{cut}$ , отбрасываются, это сокращает количество используемых узлов примерно вчетверо т.е.  $p \approx 4N_v$ )

Из оценки видно, что надо стремиться к максимально возможному сужению области интегрирования в пространстве скоростей, поскольку  $W_{\min}$  зависит от  $\xi_{cut}$  в четвертой степени. Отметим дополнительное преимущество интеграла (3.18) перед интегралом (2.20) (с явной зависимостью от прицельных расстояний) - для (2.20) ограничение (3.29) будет вдвое большим.



#### 4. Модельное уравнение

Из-за сложной нелинейной структуры интеграла столкновений, уравнение Больцмана очень трудно решать и анализировать. Как правило, качественное исследование свойств его решений проводят на упрощенном уравнении. Самым известным из них является *модельное уравнение*, обладающее многими свойствами полного уравнения, но не следующее из него строго.

Пусть неравновесное состояние газа описывается некоторой функцией распределения  $f$ .

Введем такое локальное максвелловское распределение

$$f_M = n(2\pi T)^{-3/2} \exp\{-0.5(\xi - \mathbf{u})^2 / T\} \quad (3.30)$$

макропараметры которого  $n, T, \mathbf{u}$ , такие же, как и у исследуемой функции распределения  $f$

$$n = \int f d\xi, \quad \mathbf{u} = \frac{1}{n} \int \xi f d\xi, \quad T = \left( \frac{1}{n} \int \xi^2 f d\xi - \mathbf{u}^2 \right) / 3 \quad (3.31)$$

В модельном уравнении точный интеграл столкновений приближается выражением

$$I = (p/\mu)(f_M - f) \quad (3.32)$$

где  $p$  - давление, а  $\mu$  - вязкость газа. В [1] можно найти обоснование этого приближения.

Применяя (3.12), (3.13) и (3.14), а также  $p = nkT$ , легко получить, что для газа твердых сфер

$$p/\mu = (16/5)n\sqrt{T/(2\pi)}$$

В случае задачи релаксации пространственный перенос отсутствует, и, в соответствии с законами сохранения, концентрация и температура газа не меняется. Поэтому уравнение (3.1) превращается в простейшее дифференциальное уравнение

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{t_0}(f_M - f), \quad t_0 = \frac{5\sqrt{2\pi}}{16} \frac{1}{n\sqrt{T}} \quad (3.33)$$

имеющее экспоненциально затухающее решение

$$f(t) = f_M + (f(0) - f_M) \exp(-t/t_0) \quad (3.34)$$

Решение (3.34) дает возможность основополагающей проверки программы построенной на основе схемы (3.22) и описывающей задачу релаксации: при  $T \sim 1$  и  $n \sim 1$ , должна наблюдаться релаксация численного решения с характерным временем затухания  $t_{rel} \sim 1$ .

#### 5. Практическая часть

##### 1. Алгоритм для нахождения коэффициентов сеток Коробова

1) Найдите нужное вам простое число  $p$  классическим алгоритмом - «решето Эратосфена».

2) Определите функцию  $H(z)$  следующим равенством:

$$H(z) = \sum_{k=1}^{(p-1)/2} \left(1 - 2\{kz/p\}\right)^2 \left(1 - 2\{kz^2/p\}\right)^2 \dots \left(1 - 2\{kz^s/p\}\right)^2$$

3) Найдите массив значений  $H(z)$  для всех целых  $z$  из интервала  $1 \leq z \leq (p-1)/2$

4) Найдите такое целое число  $b$ , при котором этот массив достигает минимума

5) Набор коэффициентов определяется как

$$a_1 = 1, a_2 = b, a_3 = \text{mod}(b^2, p), \dots, a_n = \text{mod}(b^{n-1}, p), \dots$$

Для выполнения алгоритма необходимо провести  $O(p^2)$  операций. Нюансы алгоритма:

а) Число  $kz^s$  может стать настолько большим, что не найдется соответствующего разряда целых чисел. Что бы обойти это затруднение, взятие дробных остатков проводите итерационно:

$$\{kz^n/p\} = \left\{ \left( kz^{n-1}/p \right) z \right\} = \left\{ \{kz^{n-1}/p\} z \right\}$$

б) Однако, здесь существует тонкость – при получении каждого дробного остатка, результат известен с погрешностью равной машинной точности, и эта погрешность будет увеличиваться

при каждом домножении на  $z$ . В результате полученный остаток  $\{kz^n / p\}$  не будет иметь никакого отношения к настоящему. Поэтому используйте итерационную формулу

$$\{kz^n / p\} = \text{mod}(kz^n, p) / p = \text{mod}(z \text{ mod}(kz^{n-1}, p), p) / p$$

Целочисленные остатки находятся точно и накопления ошибок происходить не будет.

в) Чисел, при которых  $H(z)$  достигает своего глобального минимума, может быть несколько:

$$H(b^{(1)}) = H(b^{(2)}) = \dots = H(b^{(l)}) = H_{\min}$$

Каждое число  $b^{(i)}$  даст свой набор  $(a_1, \dots, a_s)$ , т.е. для одного  $p$  может быть несколько сеток Коробова. В качестве окончательного результата алгоритм можете выбрать любую из них.

Ниже приведена таблица коэффициентов при разных  $p$ . В случае больших значений  $p$  она избавит вас от длительных вычислений. Малые  $p$  даны для проверки написанной программы (помните о неоднозначности нахождения  $b$  и при сравнении рассматривайте все  $b^{(i)}$ ).

Таблица 1

$p$	$a_2$	$a_3$	$a_4$	$a_5$	$a_6$	$a_7$	$a_8$
50021	11281	7537	39218	32534	11977	5816	32765
100003	15120	7542	31620	80060	70888	94409	21258
200003	47369	188507	54145	156036	158419	37051	42494
300017	81575	103565	136172	101475	54078	262899	170731
400009	193141	206577	390670	296791	20804	14959	331221
500009	42535	193663	307439	182488	487373	37415	418387
800011	27580	645950	656052	65373	562557	708737	297697
1000003	417564	171019	163483	410620	615303	611111	188073
1500007	413996	388189	943278	1496508	434758	733031	985685
2000003	832685	1269182	1228431	532894	174792	458201	527381
3000017	368334	166765	2871452	407635	979274	1865572	2703215
4000037	72362	210611	92212	583028	681897	2974319	1680656

## 2. Программирование схемы (3.22). Задача релаксации.

1) Создайте массив  $f$  размером  $(N_{\xi_x}, N_{\xi_y}, N_{\xi_z})$ . Возьмите  $N_{\xi_x} = N_{\xi_y} = N_{\xi_z} = N = 20$ . Строится скоростная сетка. Находиться  $N_0$ . Вводится шаг интегрирования  $\tau$ . Для общности введите  $b_{\max}$ , после чего подставьте  $b_{\max} = 1$ , для используемого нами потенциала твердых сфер.

2) Если для узла скоростной сетки выполняется  $|\xi_\gamma| \leq \xi_{cut}$ , то соответствующему элементу массива присваивается значение начальной функции распределения. Например, вида

$$f_1(\xi_\gamma) = \exp(-0.5\xi_\gamma^2) + \tilde{T}^{-3/2} \exp(-0.5\xi_\gamma^2 / \tilde{T}) \quad (3.35)$$

Остальные элементы массива приравняйте нулю. Легко понять, что они являются лишними – сконструированный нами интеграл столкновения по определению в них равен нулю, и их наличие обусловлено только форматом созданного массива. В дальнейшем, когда все узлы скоростной сетки будут записываться в одно измерение массива, необходимость в них отпадет. Пропишите также, в качестве возможного начального условия, функцию вида

$$f_2(\xi_\gamma) = \begin{cases} \exp(-0.5\xi_\gamma^2) & \xi_i > 0 \\ \tilde{T}^{-3/2} \exp(-0.5\xi_\gamma^2 / \tilde{T}) & \xi_i < 0 \end{cases}, i = \gamma_x \quad (3.36)$$

Отнормируйте функции так, что бы численная концентрация газа была  $n=1$ , т.е. разделите (3.35) и (3.36) на соответствующие им  $\sum_\gamma f_\gamma \Delta \xi^3$

При  $\tilde{T} = 1$  начальные условия будут равновесными функциями распределения. Меняя  $\tilde{T}$  можно увеличивать степень неравновесности. В дальнейшем, если не оговорено особо, берите  $\tilde{T} = 0.5$ .

3) В соответствии с формулой (3.29) определяется минимальный размер сетки:  $p_{\min} \approx 4W_{\min}\tau$  и строится сетка Коробова размера  $p \approx \min(p_{\min}, p_0)$  где  $p_0$  - задаваемый параметр размера требуемой сетки. Помните, что вместо прицельного расстояния у нас уже переменная  $S = b^2$ . Соответственно седьмая координата, в отличие от того как это делалось в семинаре №1, нормируется на  $b_{\max}^2$ .

4) Выполняется операция «перетасовки» сетки, описанная во втором параграфе. Нет нужды тасовать узлы «поштучно» - достаточно перетасовать блоки сетки размером  $\sim p/100$ , что бы добиться хорошей равномерности любой значимой части сетки. Это сэкономит вычисления.

5) Далее следует программа практического задания семинара №2, которая даст интерполирующие узлы  $\lambda_v, \mu_v, \lambda_v + s_v, \mu_v - s_v$  и коэффициенты  $r_v$ . Помните, что угол отклонения  $\theta$  необходимый для (1.12 а)- (1.12 б) определяется уже через  $\sqrt{S}$ .

6) Вычисляется значение  $C = (1/2^{5/2})b_{\max}^2 V_{sph}(N_0/N_v)\tau = (1/2^{5/2})b_{\max}^2 \Delta\xi_x \Delta\xi_y \Delta\xi_z (N_0^2/N_v)\tau$ .

7) Ядро программы: выполнение схемы (3.22). Это цикл размера  $\tilde{N}_v$ . Действия в цикле:

А) Находиться  $\Omega_v$ . Значения массива  $f$  в элементах соответствующих узлам  $\alpha_v, \beta_v, \lambda_v, \mu_v, \lambda_v + s_v, \mu_v - s_v$  изменяются на  $C\Omega_v, -(1-r_v)C\Omega_v, -r_vC\Omega_v$ , соответственно.

Отметим, что этот цикл самая затратная по времени часть программы (по крайней мере, так будет, когда у функции распределения появится пространственная составляющая и цикл будет включен в цикл по пространственным узлам) и должен быть написан максимально экономично. Например, операция взятия степени очень затратная, и нужно сократить ее количество до одной

$$\left(f_{\lambda_v}^{(v)} f_{\mu_v}^{(v)}\right)^{1-r_v} \left(f_{\lambda_v+s_v}^{(v)} f_{\mu_v-s_v}^{(v)}\right)^{r_v} = f_{\lambda_v}^{(v)} f_{\mu_v}^{(v)} \left(f_{\lambda_v+s_v}^{(v)} f_{\mu_v-s_v}^{(v)} / f_{\lambda_v}^{(v)} f_{\mu_v}^{(v)}\right)^{r_v}$$

Проверяйте величину  $f_{\lambda_v}^{(v)} f_{\mu_v}^{(v)}$  на равенство нулю, что бы избежать ошибки деления на ноль.

Б) Выполняется проверка на неотрицательность новых значений массива в этих шести узлах. Если хотя бы одно отрицательное – массив получает старые значения во всех шести узлах.

8) Поместите пункты № 3 - № 7 в цикл по временным шагам.

### Проверка №1. Консервативность интеграла.

После выполнения цикла концентрация, суммарные энергия и импульс должны остаться неизменными (разумеется, с машинной точностью). Если этого не происходит – ищите ошибку.

### Проверка №2. Симметрия интеграла.

Легко заметить, что функция (3.35) обладает зеркальной симметрией относительно осей координат  $\xi_x, \xi_y, \xi_z$ , а (3.36) относительно осей  $\xi_y, \xi_z$ . В таком случае, интеграл столкновений также должен быть симметричен (разумеется, с точностью до ошибки интегрирования).

1) Запишите начальное условие в массив  $f_0$ . Возьмите малый временной шаг, например  $\tau = 10^{-6}$ , чтобы функция распределения в ходе выполнения временного цикла практически не изменялась, самую большую сетку Коробова из таблицы (на 4 млн. узлов) и проведите вычисления на временном интервале  $t = 100\tau$ . После чего вычислите интеграл:  $I = (f - f_0)/t$ .

Здесь и далее, при сравнении дискретных функций мы будем использовать норму

$$\|y\| = \sqrt{\Delta\xi_x \Delta\xi_y \Delta\xi_z \sum_{i,j,k} y_{i,j,k}^2} \quad (3.37)$$

Она возникает как дискретный аналог нормы для непрерывных функций

$$\|y(x)\| = \sqrt{\int_a^b y(x)^2 dx}$$

общеупотребительной в теории функциональных пространств.

2) Вычислите относительное отклонение от зеркальной симметрии

$$\|y\| = \sqrt{\sum_{j,k=1}^N \sum_{i=1}^{N/2} (I_{i,j,k} - I_{N-i+1,j,k})^2} / \sqrt{0.5 \sum_{i,j,k=1}^N I_{i,j,k}^2}$$

Если она близка к нулю, а также уменьшается при увеличении точности вычислений (проверьте это, взяв  $t = 200\tau$ ) проверка на симметрию пройдена. Проверьте все виды симметрий.

Обсчет 100 сеток Коробова на 4 млн. узлов занимает около 10 мин. на 2 ГГц процессоре.

### Проверка №3. Сходимость интеграла по шагу скоростной сетки.

1) В силу того, что для начальных условий известны точные аналитические формулы, интеграл столкновений при  $t = 0$  можно очень точно вычислить напрямую. Например, для (3.35)

$$\bar{I}_\gamma^0 = \frac{4\pi\xi_{cut}^3/3}{\sqrt{2}N_v} \sum_{v=1}^{\tilde{N}_v} (f_1(\xi'_v)f_1(\xi'_{lv}) - f_1(\xi_\gamma)f_1(\xi_{lv})) |\xi_\gamma - \xi_{lv}|, |\xi_\gamma| \leq \xi_{cut}$$

$$\xi'_v = \varphi(\xi_\gamma, \xi_{lv}, \sqrt{S_v}, \varepsilon_v), \quad \xi'_{lv} = \varphi_1(\xi_\gamma, \xi_{lv}, \sqrt{S_v}, \varepsilon_v)$$

А) Используйте пятимерные сетки Коробова, размером порядка  $p = 200$  тыс. узлов. Проводите аналогичное отсеивание столкновений с  $|\xi_{lv}| > \xi_{cut}$ ,  $|\xi'_{lv}| > \xi_{cut}$ ,  $|\xi'_v| > \xi_{cut}$ .

Б) В случае (3.35) умножьте  $f_1(\xi)$  на  $0.5/(2\pi)^{3/2}$ , в случае (3.36) умножьте  $f_2(\xi)$  на  $1/(2\pi)^{3/2}$ .

В) Учитывайте симметрию интеграла – в случае (3.35) достаточно вычислить  $\bar{I}^0$  только для одной восьмой сферы, в случае (3.36) для одной четверти.

Г) Проверьте  $\bar{I}^0$  на консервативность - достаточную малость величин

$$\sum_\gamma \bar{I}_\gamma^0 \Delta \xi^3 / \sqrt{\sum_\gamma (\bar{I}_\gamma^0)^2 \Delta \xi^3}, \quad \sum_\gamma \xi_\gamma \bar{I}_\gamma^0 \Delta \xi^3 / \sqrt{\sum_\gamma (\bar{I}_\gamma^0)^2 \Delta \xi^3}, \quad \sum_\gamma \xi_\gamma^2 \bar{I}_\gamma^0 \Delta \xi^3 / \sqrt{\sum_\gamma (\bar{I}_\gamma^0)^2 \Delta \xi^3}$$

Д) Проверьте  $\bar{I}^0$  на зануление на максвелловском распределении (функция (3.35) при  $\tilde{T} = 1$ )

Е) Полученный точный интеграл сохраните на диск. Прodelайте это для сеток с  $N = 30$  и  $N = 40$ . Повторите вычисления для (3.36). Итог – шесть сохраненных на диск массивов.

2) Получите численный интеграл. Используйте симметрию – по выполнению расчета проведите усреднение интеграла по симметричным узлам. Например, для (3.36)

$$\text{цикл } i = 1, \dots, N; j, k = 1, \dots, N/2$$

$$I_{i,j,k} = 0.5(I_{i,j,k} + I_{i,N-j+1,k})$$

$$I_{i,j,k} = 0.5(I_{i,j,k} + I_{i,j,N-k+1})$$

конец цикла

(Разумеется, запись не математическая, а программная). Для (3.35) в цикле три усреднения. Операция усреднение по симметрии, очевидно, позволяет вычислить интеграл более точно.

Используйте 100, 400, 1500 сеток Коробова, с 4 млн. узлов (иначе говоря, введите такое количество временных шагов) для скоростных сеток  $N = 20$ ,  $N = 30$ ,  $N = 40$ , соответственно. Сохраните полученный интеграл (он потребуется в следующем задании).

3) Найдите относительное отклонение  $\Delta = \|\bar{I}^0 - I\| / \|\bar{I}^0\|$ . Сравните это с относительной

погрешностью вычисления самого  $I$ , которая равняется  $\delta_n = \delta_1 / \sqrt{n}$ , где  $n$  - число взятых сеток, а  $\delta_1$  - погрешность вычисления на одной сетке (способ ее расчета описан в следующем задании).

В случае если  $\delta_n$  в несколько раз меньше  $\Delta$  (достаточно, что бы она была меньше в три-четыре раза, поскольку ошибки в выбранной норме складываются среднеквадратично), отклонение  $\Delta$  характеризует член  $O(\Delta \xi)$  в (3.23). Постройте графики  $\Delta$  от шага  $\Delta \xi$ .

4) Проверка считается выполненной, если для обоих начальных условий наблюдается сходимость интеграла - уменьшение  $\Delta$  при дроблении скоростной сетки.

Выполнение этого задания занимает немало машинного времени, однако является необходимым - проверка на сходимость является основополагающей в численных методах.

**Проверка №4. Исследование точности сеток Коробова на интеграле столкновений.**

Исследуем точность счета интеграла в зависимости от числа узлов сетки интегрирования.

- 1) Поставьте  $N = 20$ . Получите интеграл  $\tilde{I}$  для (3.35) используя большое количество сеток Коробова. Усредните по симметричным узлам. Можно использовать интеграл, оставшийся с прошлой проверки. Считаем  $\tilde{I}$  точным численным интегралом (т.е. с  $N_v \rightarrow \infty$ ).
- 2) Получите интеграл для (3.35) на одной сетке с исследуемым  $p$ . Усредните его по симметричным узлам. С помощью нормы (3.37) найдите относительное отклонение от  $\tilde{I}$ .
- 3) Повторите пункт №1- №2 для  $N_{stat} \sim 50-100$  сеток Коробова с таким же  $p$ , но с другим случайным вектором. Найдите среднеквадратичное отклонение.
- 4) Повторите пункты №1- №3 для сеток с другими  $p$ . Составьте в логарифмических шкалах график  $\langle \delta \rangle$  от  $p$ . Убедитесь, что ошибка спадает от  $N_v \approx p/4$  по степенному закону  $\sim 1/N_v^{0.5}$ .
- 5) Повторите пункты №1-№3 с сетками Монте-Карло (Погрешности будут примерно те же).
- 6) Прodelайте пункты №1 - №4 (можно без Монте-Карло) для сетки с  $N = 30$ . Убедитесь, что ошибка зависит и от количества скоростных узлов:  $\langle \delta \rangle \sim (N_0 / N_v)^{0.5}$ .

**Исследование доли столкновений дающих отрицательные решения**

Исследуйте долю отброшенных узлов для (3.35) и (3.36), поставив  $\tilde{T} = 0.3$ . Найдите такое  $W = N_v / \tau$ , при котором доля имеет приемлемые значения  $\sim 1\%$ . Сравните с долей при  $W_{min}$ .

**Исследование релаксации решения.**

- 1) В соответствии с (3.30)-(3.31), составьте массив  $f_M(N_{\xi_x}, N_{\xi_y}, N_{\xi_z})$ . Это является далеко не такой тривиальной задачей как может показаться. Запишем дискретный аналог (3.31):

$$\mathbf{u} = \sum_{\gamma} \xi_{\gamma} f_{\gamma} \Delta \xi^3, \quad T = \left( \sum_{\gamma} \xi_{\gamma}^2 f_{\gamma} \Delta \xi^3 - \mathbf{u}^2 \right) / 3$$

(Напомним, что концентрация принята равной единице). Если в соответствии с (3.30) мы построим максвелловскую равновесную функцию распределения следующим образом:

$$f_{M\gamma} = \exp \left\{ -\frac{(\xi_{\gamma} - \mathbf{u})^2}{2T} \right\} / \left( \sum_{\gamma} \exp \left\{ -\frac{(\xi_{\gamma} - \mathbf{u})^2}{2T} \right\} \Delta \xi^3 \right), \quad |\xi_{\gamma}| \leq \xi_{cut}$$

ее собственные значения макропараметров скорости и температуры будут стремиться к  $\mathbf{u}$ ,  $T$  только при неограниченном мельчании скоростной сетки. Необходимо найти такие  $\mathbf{u}^*$ ,  $T^*$ , что

$$\sum_{\gamma} \xi_{\gamma} f_{M\gamma} \Delta \xi^3 = \mathbf{u}, \quad \frac{1}{3} \left( \sum_{\gamma} \xi_{\gamma}^2 f_{M\gamma} \Delta \xi^3 - \mathbf{u}^2 \right) = T, \quad f_{M\gamma} = \exp \left\{ -\frac{(\xi_{\gamma} - \mathbf{u}^*)^2}{2T^*} \right\} / \left( \sum_{\gamma} \exp \left\{ -\frac{(\xi_{\gamma} - \mathbf{u}^*)^2}{2T^*} \right\} \Delta \xi^3 \right)$$

Это осуществляется посредством численных методов - с помощью *метода Ньютона*:

- А) Итак необходимо найти значения  $u_x^*$ ,  $T^*$  (в нашем случае  $\mathbf{u} = (u_x, 0, 0)$  - для начального условия (3.36); для (3.35) макроскопическая скорость отсутствует) при которых функции

$$y_1(u^*, T^*) = (\overline{\xi^2} - u_x^{*2}) / 3 - T, \quad y_2(u^*, T^*) = \overline{\xi_x} - u_x$$

равны нулю. Верхнее подчеркивание обозначает операцию усреднения по распределению:

$$\bar{z} = \sum_{\gamma} z_{\gamma} f_{M\gamma} \Delta \xi^3$$

- Б) Выпишем частные производные этих функций (несложные выкладки опущены)

$$\begin{aligned} \frac{\partial y_1}{\partial T^*} &= \frac{1}{6T^{*2}} \left[ \overline{\xi^4} - 2u_x^* \overline{\xi^2 \xi_x} - (\overline{\xi^2})^2 + 2u_x^* \overline{\xi^2 \xi_x} \right], \quad \frac{\partial y_1}{\partial u^*} = \frac{1}{3T^*} \left[ \overline{\xi^2 \xi_x} - \overline{\xi^2} \overline{\xi_x} \right] \\ \frac{\partial y_2}{\partial T^*} &= \frac{1}{T^{*2}} \left[ \overline{\xi^2 \xi_x} - 2u_x^* \overline{\xi_x} - \overline{\xi^2} \overline{\xi_x} + 2u_x^* (\overline{\xi_x})^2 \right], \quad \frac{\partial y_2}{\partial u^*} = \frac{1}{T^*} \left[ \overline{\xi_x} - (\overline{\xi_x})^2 \right] \end{aligned}$$

В) Искомым параметрам приписываются начальные значения  $T^{*0} = T$ ,  $u^{*0} = u_x$

Г) В соответствии с методом Ньютона составляется итерационный алгоритм

$$\frac{\partial y_1^k}{\partial T^*} (T^{*k+1} - T^{*k}) + \frac{\partial y_1^k}{\partial u^*} (u^{*k+1} - u^{*k}) = -y_1^k$$

$$\frac{\partial y_2^k}{\partial T^*} (T^{*k+1} - T^{*k}) + \frac{\partial y_2^k}{\partial u^*} (u^{*k+1} - u^{*k}) = -y_2^k$$

Решая систему, на основе старых значений  $T^{*k}$ ,  $u^{*k}$ , находятся  $T^{*k+1}$ ,  $u^{*k+1}$ . Цикл заканчивается, когда относительные изменения параметров меньше заданной точности. Сходимость алгоритма очень быстрая – обычно достаточно трех-четырех шагов.

Д) Проведите проверку на равенство нулю функций  $y_1$  и  $y_2$ .

2) Выберите начальное условие (3.35). Сделайте его слабо неравновесным:  $\tilde{T} = 0.95$ . Поставьте  $\tau = 0.02$ . Возьмите из таблицы максимальную сетку. Найдите решение на интервале  $t = 0.4$ .

3) Решение модельного уравнения (3.34) имеет время затухания  $t_0$  одинаковое для всех скоростей. Для точного кинетического уравнения это, конечно же, не так, поэтому мы введем следующие дифференцированные нормы

$$\|y\|_k = \sqrt{\Delta \xi_x \Delta \xi_y \Delta \xi_z \sum_{\gamma} y_{\gamma}^2}, \quad (k-1)\xi_{cut}/3 \leq |\xi_{\gamma}^2| \leq k\xi_{cut}/3, \quad k=1,2,3 \quad (3.38)$$

На основе них составим относительные отклонения

$$\delta_k(j) = \|f^j - f_M\|_k / \|f^0 - f_M\|_k, \quad k=1,2,3$$

которые, как нетрудно заметить, характеризуют отклонение решения от равновесного распределения, в первом, втором и третьем слое сферы радиуса  $\xi_{cut}$ , соответственно.

4) Нанесите на один график  $\ln(\delta_k(j))$  для всех  $k$ . Сравните их с соответствующим графиком затухания решения (3.34)

$$\ln(\delta_k(j)) = -t_j \frac{16}{5\sqrt{2\pi}} \sqrt{T}$$

5) Прodelайте пункты №2-№4 на временном интервале  $t = 2$ .

6) Прodelайте пункты №2-№5 в случае начального условия (3.35).

7) Результат выполнения этого задания - проверка качественного выполнения формулы (3.34). Если времена релаксации  $\delta_k$  во много раз отличаются от  $t_0$  из (3.33) - имеется ошибка.

## Семинар № 4 Одномерное кинетическое уравнение. Задача теплопередачи. Ударная волна.

В этом семинаре, дополнив численный интеграл разностным уравнением переноса, мы создадим схему позволяющую найти численное решение одномерного уравнения Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_x \frac{\partial f}{\partial x} = I(f) \quad (4.1)$$

Задачи описываемые (4.1), уже достаточно серьезны и реальны, в то же время, их решение не зависит от двух пространственных переменных, что серьезно облегчает численный счет. С помощью полученного алгоритма, мы сможем провести дополнительную проверку запрограммированного ранее интеграла, сравнивая ключевые параметры решений задач теплопроводности и распространения ударной волны, с теоретическими предсказаниями.

### 1. Анализ результатов предыдущего семинара

Перед тем как перейти к дальнейшему освоению интеграла, обсудим результаты выполнения практического занятия предыдущего семинара. Предполагается, что все основополагающие проверки - на консервативность, симметрию и сходимость - были успешно пройдены.