

УДК: 519.8

## Стохастическая формализация газодинамической иерархии

С. В. Богомолов

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,  
Россия, 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 52, факультет ВМК

E-mail: bogomo@cs.msu.su

*Получено 30.12.2021, после доработки — 08.03.2022.*

*Принято к публикации 08.03.2022.*

Математические модели газовой динамики и ее вычислительная индустрия, на наш взгляд, далеки от совершенства. Мы посмотрим на эту проблематику с точки зрения ясной вероятностной микромодели газа из твердых сфер, опираясь как на теорию случайных процессов, так и на классическую кинетическую теорию в терминах плотностей функций распределения в фазовом пространстве; а именно, построим сначала систему нелинейных стохастических дифференциальных уравнений (СДУ), а затем обобщенное случайное и неслучайное интегро-дифференциальное уравнение Больцмана с учетом корреляций и флуктуаций. Ключевыми особенностями исходной модели являются случайный характер интенсивности скачкообразной меры и ее зависимость от самого процесса.

Кратко напомним переход ко все более грубым мезо-макроприближениям в соответствии с уменьшением параметра обезразмеривания, числа Кнудсена. Получим стохастические и неслучайные уравнения, сначала в фазовом пространстве (мезомодель в терминах СДУ по винеровским мерам и уравнения Колмогорова – Фоккера – Планка), а затем в координатном пространстве (макроуравнения, отличающиеся от системы уравнений Навье – Стокса и систем квазигазодинамики). Главным отличием этого вывода является более точное осреднение по скорости благодаря аналитическому решению стохастических дифференциальных уравнений по винеровской мере, в виде которых представлена промежуточная мезомодель в фазовом пространстве. Такой подход существенно отличается от традиционного, использующего не сам случайный процесс, а его функцию распределения. Акцент ставится на прозрачности допущений при переходе от одного уровня детализации к другому, а не на численных экспериментах, в которых содержатся дополнительные погрешности аппроксимации.

Теоретическая мощь микроскопического представления макроскопических явлений важна и как идейная опора методов частиц, альтернативных разностным и конечно-элементным.

Ключевые слова: уравнение Больцмана, уравнение Колмогорова – Фоккера – Планка, уравнение Навье – Стокса, уравнения стохастической газодинамики и квазигазодинамики, стохастические дифференциальные уравнения по бернуллиевой и винеровской мерам, методы частиц

UDC: 519.8

## Stochastic formalization of the gas dynamic hierarchy

S. V. Bogomolov

Lomonosov Moscow State University, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics,  
1/52 Leninskiye Gory, GSP-1, Moscow, 119991, Russia

E-mail: bogomo@cs.msu.su

*Received 30.12.2021, after completion — 08.03.2022.*

*Accepted for publication 08.03.2022.*

Mathematical models of gas dynamics and its computational industry, in our opinion, are far from perfect. We will look at this problem from the point of view of a clear probabilistic micro-model of a gas from hard spheres, relying on both the theory of random processes and the classical kinetic theory in terms of densities of distribution functions in phase space, namely, we will first construct a system of nonlinear stochastic differential equations (SDE), and then a generalized random and non-random integro-differential Boltzmann equation taking into account correlations and fluctuations. The key feature of the initial model is the random nature of the intensity of the jump measure and its dependence on the process itself.

Briefly recall the transition to increasingly coarse meso-macro approximations in accordance with a decrease in the dimensionalization parameter, the Knudsen number. We obtain stochastic and non-random equations, first in phase space (meso-model in terms of the Wiener — measure SDE and the Kolmogorov–Fokker–Planck equations), and then — in coordinate space (macro-equations that differ from the Navier–Stokes system of equations and quasi-gas dynamics systems). The main difference of this derivation is a more accurate averaging by velocity due to the analytical solution of stochastic differential equations with respect to the Wiener measure, in the form of which an intermediate meso-model in phase space is presented. This approach differs significantly from the traditional one, which uses not the random process itself, but its distribution function. The emphasis is placed on the transparency of assumptions during the transition from one level of detail to another, and not on numerical experiments, which contain additional approximation errors.

The theoretical power of the microscopic representation of macroscopic phenomena is also important as an ideological support for particle methods alternative to difference and finite element methods.

**Keywords:** Boltzmann equation, Kolmogorov–Fokker–Planck equation, Navier–Stokes equations, equations of stochastic gas dynamics and quasi-gas dynamics, stochastic differential equations with respect to Bernulli and Wiener measures, particle methods

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2022, vol. 14, no. 4, pp. 767–779 (Russian).

## Введение

Продолжая направление исследований, важность которых определили и А. А. Самарский, и О. М. Белоцерковский, мы рассматриваем микроскопические основания газовой динамики. Значительная часть творческой работы Олега Михайловича была посвящена вычислительному эксперименту, связанному с уравнением Больцмана, обоснованию методов Монте-Карло, прямого статистического моделирования. Мы коротко представим наше видение этой области.

Вероятностный подход, основанный на стохастических дифференциальных уравнениях, был разработан А. В. Скороходом, а применительно к кинетическим уравнениям — А. А. Арсеньевым при вычислительной поддержке А. В. Лукшина. Мы покажем, как простейшая, но далеко не тривиальная модель газа из твердых сфер приводит к микро-мезо-макроиерархии в порядке убывания числа Кнудсена благодаря переходам от описания с использованием скачкообразных случайных процессов к диффузионному приближению в шестимерном фазовом пространстве с последующей редукцией к трехмерному. Такая цепочка позволяет нам уточнить уравнения Больцмана [Богомолов, Захарова, 2021], Фоккера – Планка – Колмогорова и Навье – Стокса, а также позволяет нам строить сквозные алгоритмы в рамках унифицированных методов частиц, стохастических и детерминированных, что до сих пор нельзя назвать задачей решенной. Сильной мотивацией для нас послужили также впечатляющие квазигазодинамические вычислительные достижения, инспирированные Б. Н. Четверушкиным.

Основы описания больших систем были заложены Максвеллом и Больцманом. Уравнение Больцмана получено [Boltzmann, 1872] исходя из баланса числа частиц, покидающих и наполняющих элемент шестимерного фазового пространства. Это эйлеров подход к моделированию сплошной среды с помощью плотности распределения частиц в фазовом пространстве, или функции распределения (по физической терминологии). Уравнение Больцмана представляет собой нелинейное интегро-дифференциальное уравнение для неслучайной функции распределения. Его вероятностные черты проявляются, пожалуй, только в гипотезе молекулярного хаоса (Stossanzahlansatz), означающей возможность замены двухчастичных функций распределения на произведение одночастичных, что и приводит к обрыванию цепочки ББГКИ (Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона).

В восьмидесятых годах оформился лагранжев подход к этой проблематике в виде построения траекторий частиц с использования аппарата стохастических дифференциальных уравнений, развитого А. В. Скороходом [Скороход, 1983] и примененного А. А. Арсеньевым [Арсеньев, 1987] к газовой динамике как к системе частиц, положения и скорости которых являются случайными величинами. Опираясь на эти идеи, мы построили иерархию по величине числа Кнудсена стохастических газодинамических моделей [Богомолов, Есикова, Кувшинников, 2016], при аккуратном усреднении которых получается неслучайная система уравнений, уточняющая систему уравнений Навье – Стокса, более мягкая для вычислений, что показано вычислительной практикой в рамках квазигазодинамики Б. Н. Четверушкина. Цепочка сквозных, многомасштабных микро-мезо-макромоделей, справедливых в различных подобластях, в которых решается рассматриваемая задача, возникает в соответствии с разными значениями малого параметра, роль которого выполняет число Кнудсена. Моделирование газодинамических явлений на основе различных иерархий микро-макромоделей давно уже стало классическим разделом теоретической физики и базой для суперкомпьютерных промышленных приложений. Более того, микро-макроиерархия имеет огромное значение для перехода к эксафлопным вычислениям и интеллектуальной обработке больших данных, потому что огромные вычислительные мощности предъявляют новые требования как к вычислительным алгоритмам, так и к уравнениям математической физики. Отметим, что ключевыми факторами успеха являются глубинная распараллеливаемость алгоритмов и их процессорная отказоустойчивость, чему прекрасно удовлетворяют вероятностные

модели — каждая из реализаций случайного процесса может протекать на отдельном процессоре независимо от других.

Оказалось, что даже стационарные решения отличаются от нормальных распределений, что не соответствует свойствам традиционного интеграла столкновений Больцмана. На наш взгляд, это вызвано более общим характером исходной столкновительной модели, предполагающей наличие корреляций по времени распределений пар сталкивающихся молекул и учитывающей флуктуации газодинамических функций распределения. Мы постараемся подтвердить этот несомненный с точки зрения физики факт, получив неслучайное уравнение Больцмана с учетом корреляций и флуктуаций. Возникающие распределения с тяжелыми хвостами являются более общими, чем нормальные, и часто встречаются в натуральных экспериментах, что привлекает интерес к их обоснованию и обработке, в частности в рамках теории смесей нормальных распределений.

Эти рассуждения подтверждают с точки зрения классической кинетической теории наличие дополнительных сглаживающих членов в мезо- и макроуравнениях газовой динамики, получение которых мы кратко напомним в последних разделах нашей статьи. Тем более что эти выкладки демонстрируют возможности подхода на основе СДУ, теперь уже не по скачкообразным, а по винеровским мерам.

Хотя здесь мы и не приводим результатов вычислительного эксперимента, все рассмотренные модели, как стохастические, так и детерминированные, имеют значение для построения соответствующих алгоритмов, связанных, иерархических, «сквозных», разной степени детализации в зависимости от необходимой точности. Построенные уравнения служат основой для внедрения различных вариантов случайных и неслучайных методов частиц, которые обладают большой вычислительной перспективой.

Мы представляем размышления о схеме микро-мезо-макроперехода [Богомолов, Захарова, 2021; Богомолов, Есикова, Кувшинников, 2016], которая полезна не только в газодинамическом контексте, но и для формализации агентно-ориентированных моделей в биологии, эпидемиологии, социологии, экономике.

## Микро-

Рассмотрим систему из  $N$  взаимодействующих частиц. В качестве наглядного примера возьмем газ из неустанно перемещающихся твердых сфер, взаимодействие между которыми происходит благодаря упругим столкновениям. Чтобы избежать чрезмерной информации о нашей системе, выражаемой точными положениями и скоростями входящих в нее частиц, самым продуктивным способом ее исследования является привлечение вероятностных представлений.

Положения и скорости частиц будем считать случайными величинами [Скорород, 1983; Арсеньев, 1987], что совершенно оправданно по физическим соображениям. Модель газа, молекулы которого представляются абсолютно упругими шариками, является простейшей, но не тривиальной. Людвиг Больцман выводил свое уравнение, опираясь на этот образ и начиная с детерминированной системы, вводя случайность на этапе принятия гипотезы молекулярного хаоса. А. В. Скорород изначально рассматривал системы, состоящие из большого числа случайно взаимодействующих частиц, и исследовал поведение таких систем при неограниченном возрастании их числа.

Формализуем **столкновения** частиц, которые и порождают процессы диффузии, вязкости и теплопроводности.

Изменение скорости сталкивающихся частиц называется функцией скачка, которая легко получается из решения задачи о столкновении двух твердых сфер диаметром  $D$ , в качестве которого возьмем диаметр эффективного сечения рассеяния (рис. 1 слева):  $\mathbf{f}(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j, \omega) = \omega(\omega, \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)$ .

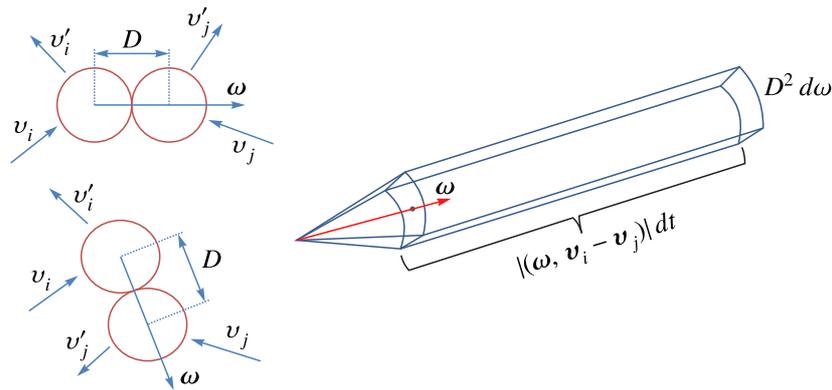


Рис. 1. Геометрия столкновений двух частиц с двумя вариантами «прицельного параметра» — вектора  $\omega$  (слева) и цилиндра для подсчета столкнувшихся/долетевших за время  $dt$  молекул  $N_{ij}^{reached}$  (справа)

Эволюция набора из  $N$  частиц описывается следующей системой уравнений **стохастической молекулярной динамики** [Богомолов, Захарова, 2021]:

$$\begin{aligned}
 dx_i(t) &= v_i(t)dt, \\
 dv_i(t) &= \sum_{j=1}^N \int_{\Omega} f(v_i, v_j, \omega) b_{ij} (d\omega \times dt), \\
 \lambda_{ij} &= \frac{N_{ij}^{collisions}}{N}, \quad i = 1, \dots, N,
 \end{aligned} \tag{1}$$

где  $x_i(t)$  — положения и  $v_i(t)$  — скорости частиц, являются случайными 3D-процессами,  $f(\cdot)$  — функция скачка, или приращение скорости  $v_i$  из-за столкновения с частицей скорости  $v_j$ ;  $b_{ij}$  — считающие (с результатом розыгрыша 0 или 1) независимые бернуллиевские меры (с интенсивностями, или вероятностями, выпадения 1,  $\lambda_{ij}$ , которые очень малы — редкие столкновения, разреженный газ); они указывают на факт столкновения или его отсутствие.

Подчеркнем, что использование вероятностной модели для описания столкновительных явлений является источником случайного поведения  $x_i(t)$ ,  $v_i(t)$  и ключом к построению эффективного математического формализма в отличие от альтернативного подхода детерминированных бильярдов.

Для подсчета числа столкновений  $N_{ij}^{collisions}$  воспользуемся (совершенно так же, как и при выводе уравнения Больцмана) идеей о том, что число ударивших по  $i$ -частице  $j$ -частиц равно их числу  $N_{ij}^{reached}$ , успевших за время  $dt$  до нее долететь, а оно равно числу частиц, содержащихся в цилиндре, изображенном справа на рис. 1:

$$N_{ij}^{collisions} = N_{ij}^{reached}. \tag{2}$$

Таким образом, мы построили исходную ступень нашей иерархии. С вычислительной точки зрения определение  $N_{ij}^{reached}$  на каждом шаге по времени — сложная алгоритмическая задача.

Как и в классической кинетической теории, она преодолевается переходом к сплошной среде в фазовом пространстве. Но только для вычисления  $\lambda_{ij}$ . Система же СДУ по скачкообразной мере остается прежней. Возникает новая ступенька в иерархии микроскопических моделей:

$$\lambda_{ij} = \frac{1}{N} \frac{1}{Kn} n(x_i, t) \Delta x_i,$$

$n$  — числовая плотность молекул;  $Kn(x, t) = \frac{1}{D^2 n_* x_*}$  — число Кнудсена,  $D$  — эффективный диаметр молекулы — твердой сферы (или сечения рассеяния),  $n_*$ ,  $x_*$  — характерные числовая плотность

и размер подобласти;  $Kn$  — параметр обезразмеривания, зависящий от пространственной подобласти; его физический смысл — отношение средней длины свободного пробега к характерному размеру подзадачи;  $\Delta x_i = |(\omega, v_i - v_j)| dt d\omega$  — объем нашего цилиндра (справа на рис. 1) (в размерных переменных —  $\Delta x_i = |(\omega, v_i - v_j)| dt D^2 d\omega$ ), тогда

$$\lambda_{ij} = \frac{1}{N} \frac{1}{Kn} \frac{1}{2} n(x_i, t) |(\omega, v_i - v_j)| dt d\omega. \quad (3)$$

$\frac{1}{2}$  появилась, потому что нас интересуют  $j$ -частицы в объеме  $\Delta x_i$ , которые летят «к частице», а не «от частицы» с номером  $i$ .

В областях с большими  $Kn$  наша модель может быть записана в виде уравнения Больцмана (с учетом флуктуаций и корреляций) для определяемой ниже плотности распределения в фазовом пространстве  $F$ , которая случайна так же, как и  $\lambda_{ij}$ . Важно отметить, что  $\lambda_{ij}$  (интенсивность меры) зависит от самих процессов  $v_i(t)$  и  $v_j(t)$ ; возникает существенная нелинейность сразу в исходной постановке. Это главное отличие от традиционной кинетической теории.

Представим **схему перехода от дискретного описания к непрерывному**. Предварительно опишем последовательность наших рассуждений на простейшем примере получения уравнения переноса, уравнения в частных производных, из системы обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих поведение (положения в пространстве с течением времени  $x_i(t)$ ) большого числа частиц, движущихся с заданными скоростями  $v_i(x, t)$ :

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = v_i, \quad x_i(0) = x_i^0, \quad i = 1, \dots, N.$$

Назовем эту систему микромоделью.  $N$  велико, поэтому обычно переходят к макроскопическому описанию, вводя меру с плотностью  $u(x, t)$ , которая порождается совокупностью траекторий  $x_i(t)$  по формуле ( $\varphi(x)$  — достаточно гладкая финитная функция):

$$\forall \varphi(x): \int \varphi(x) u(x, t) dx = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \varphi(x_i(t)). \quad (4)$$

Для того чтобы написать уравнение, которому удовлетворяет  $u(x, t)$ , продифференцируем ее определение (4) по  $t$ :

$$\int \varphi \frac{\partial u}{\partial t} dx = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_i} \frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_i} v_i.$$

Последнее выражение в соответствии с (4), если читать его справа налево и в качестве  $\varphi$  взять  $v \frac{\partial \varphi}{\partial x}$ , превратится в  $\int \frac{\partial \varphi}{\partial x} (vu) dx$ .

Мы приходим к обобщенному уравнению переноса:

$$\int \varphi \frac{\partial u}{\partial t} dx = \int \frac{\partial \varphi}{\partial x} (vu) dx.$$

Проинтегрировав по частям его правую часть:

$$\int \varphi \left( \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial vu}{\partial x} \right) dx = 0$$

и учитывая произвольность  $\varphi$ , получим макроуравнение в частных производных:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial vu}{\partial x} = 0.$$

Этой схемой мы будем пользоваться в дальнейшем, когда исходными для получения обобщенных, а затем дифференциальных уравнений будут выступать скачкообразные и диффузионные (шести- и трехмерные) микромоделли.

Кроме того, схема эта является обоснованием метода частиц для решения уравнения переноса: вместо того чтобы аппроксимировать уравнение в частных производных, решается система обыкновенных уравнений (метод молекулярной динамики), но не для всех молекул, а для меньшего числа «частиц».

**Обобщенное стохастическое уравнение Больцмана** получится, если ввести функцию распределения  $F(\cdot)$  (как ее принято называть в физической литературе), или плотность распределения (по терминологии теории вероятностей), которая определяется как обобщенная случайная функция:

$$\forall \varphi(x, v): \int \varphi(x, v) F(x, v, t) dx dv = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \varphi(x_i(t), v_i(t)), \quad (5)$$

$F(\cdot)$  — плотность меры, порожденной процессом  $(x(t), v(t))$ .

Возьмем стохастический дифференциал от обеих частей определения (5):

$$\forall \varphi(x, v): \int \varphi(x, v) d_t F(x, v, t) dx dv = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N d_t \varphi(x_i(t), v_i(t)). \quad (6)$$

В правой части используем формулу Ито для дифференциала по скачкообразной мере:

$$d_t \varphi(x_i(t), v_i(t)) = \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} dx_i + \sum_{j=1}^N \int_{\Omega} [\varphi'_{ij} - \varphi_i] b_{ij} (d\omega \times dt), \quad (7)$$

$\varphi_i = \varphi(x_i, v_i)$ ,  $\varphi'_{ij} = \varphi(x_i, v'_{ij})$ ,  $v'_{ij} = v_i + f(v_i, v_j, \omega)$ . Штрих означает «после столкновения (скачка)».

Введем центрированную (обладающую нулевым математическим ожиданием) меру  $q$ :

$$b_{ij} = \lambda_{ij} + q_{ij}, \quad (8)$$

$$d_t \varphi(x_i(t), v_i(t)) = \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} dx_i + \sum_{j=1}^N \int_{\Omega} [\varphi'_{ij} - \varphi_i] \lambda_{ij} (d\omega \times dt) + \sum_{j=1}^N \int_{\Omega} [\varphi'_{ij} - \varphi_i] q_{ij} (d\omega \times dt). \quad (9)$$

И далее, после ряда преобразований [Богомолов, Захарова, 2021], приходим к обобщенному стохастическому уравнению Больцмана (с учетом корреляций и флуктуаций):

$$\int \varphi d_t F dx dv = \int \frac{\partial \varphi}{\partial x} v F dx dv dt + \iiint_{\Omega} [\varphi' - \varphi] \frac{1}{Kn} \frac{1}{2} n |(\omega, v - \bar{v})| F \bar{F} d\omega dx dv d\bar{v} dt + \iiint_{\Omega} [\varphi' - \varphi] F \delta \bar{F} d\omega dx dv d\bar{v} dt. \quad (10)$$

Произведем редукцию нашей задачи, усреднив ее по времени. Чтобы получить упрощенное **обобщенное неслучайное уравнение** Больцмана с корреляциями, возьмем математическое ожидание, принимая во внимание, что для нахождения математического ожидания произведения случайных величин  $F$  и  $\bar{F}$  справедливы следующие соотношения:  $\mathbf{E}(\bar{F} \cdot F) = \mathbf{E}(\mathbf{E}(\bar{F} \cdot F|F)) = \mathbf{E}(F \mathbf{E}(\bar{F}|F))$ .

Для вычисления условного математического ожидания  $\mathbf{E}(\bar{F}|F)$  необходимо сделать дальнейшие предположения, введя коэффициент корреляции  $\rho$  между  $F$  и  $\bar{F}$ . Продемонстрируем это

в случае, когда совместная плотность распределения зависимых (из-за равноправного вхождения  $v_i$  и  $v_j$  в вычисление интенсивности столкновений  $\lambda_{ij}$ , что является главной отличительной чертой нашего рассмотрения) случайных функций  $F$  и  $\bar{F}$  является двумерным нормальным распределением:  $(F, \bar{F}) \sim N_2(a, b, \sigma_1^2, \sigma_2^2, \rho)$ , тогда (см. [Богомолов, Захарова, 2021])  $\mathbf{E}(\bar{F}|F) = b + \rho \left(\frac{\sigma_2}{\sigma_1}\right) \cdot (F - a)$ , а условная дисперсия случайной величины  $\bar{F}$  равна  $\mathbf{D}(\bar{F}|F) = \sigma_2^2(1 - \rho^2)$ . Поэтому

$$\mathbf{E}(\bar{F} \cdot F) = \mathbf{E}\left(F \left(b + \rho \left(\frac{\sigma_2}{\sigma_1}\right) \cdot (F - a)\right)\right) = b \mathbf{E}F + \rho \left(\frac{\sigma_2}{\sigma_1}\right) \mathbf{D}F = ab + \rho \sigma_1 \sigma_2.$$

Возьмем  $a = \bar{F}$ ,  $b = \bar{\bar{F}}$ .

Точно так же можно учесть и флуктуации, если предположить, что  $(F, \delta\bar{F}) \sim N_2(a, b, \sigma_1^2, \sigma_{fluct}^2, \rho_{fluct})$ ,  $a = \bar{F}$ ,  $b = \bar{\delta\bar{F}}$ .

В итоге получим неслучайное обобщенное уравнение Больцмана с учетом корреляции между  $F$  и  $\bar{F}$ , а также  $F$  и  $\delta\bar{F}$ , в предположении о нормальности их совместного распределения:

$$\begin{aligned} \int \varphi \frac{\partial \bar{F}}{\partial t} dx dv &= \int \frac{\partial \varphi}{\partial x} v \bar{F} dx dv + \iiint_{\Omega} [\varphi' - \varphi] \frac{1}{Kn} \frac{1}{2} \bar{n} |(\omega, v - \bar{v})| d\omega \bar{F} \bar{F} dx dv d\bar{v} + \\ &+ \iiint_{\Omega} [\varphi' - \varphi] \frac{1}{Kn} \frac{1}{2} \bar{n} |(\omega, v - \bar{v})| d\omega \rho \sigma_1 \bar{\sigma}_2 dx dv d\bar{v} + \iiint_{\Omega} [\varphi' - \varphi] d\omega \bar{F} \bar{\delta\bar{F}} dx dv d\bar{v} + \\ &+ \iiint_{\Omega} [\varphi' - \varphi] d\omega \rho_{fluct} \sigma_1 \sigma_{fluct} dx dv d\bar{v}, \quad (11) \end{aligned}$$

где  $\bar{n}(x, t) = \int \bar{F}(x, v, t) dv$ . Подчеркнем, что  $\rho$  и  $\sigma$  зависят от  $v$ ,  $\bar{v}$ , потому что корреляции по времени проявляются через корреляции по  $v$ ,  $\bar{v}$  и порождены тем, что физическая модель столкновений приводит к равноправной зависимости  $\lambda_{ij}$  от  $v_i(t)$ ,  $v_j(t)$ . Естественно считать, что все  $\sigma^2$  порождены тепловым движением, поэтому зависят от температуры.

Если же предположить, что  $F$ ,  $\bar{F}$  и  $\delta\bar{F}$  независимы (гипотеза молекулярного хаоса), то  $\rho, \rho_{fluct} = 0$ , и это уравнение превращается в классическое.

Так же как в стандартной кинетической теории, пользуясь инволютивностью (равенством единице якобиана) преобразования  $(v, \bar{v}) \rightarrow (v', \bar{v}')$ , получим из обобщенного уравнения **интегро-дифференциальное уравнение** в частных производных (с корреляциями и флуктуациями):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{F}}{\partial t} + v \frac{\partial \bar{F}}{\partial x} &= \frac{1}{Kn} \frac{1}{2} \bar{n} \iint_{\Omega} [\bar{F}' \bar{F}' - \bar{F} \bar{F}] |(\omega, v - \bar{v})| d\omega d\bar{v} + \\ &+ \frac{1}{Kn} \frac{1}{2} \bar{n} \iint_{\Omega} [\rho' (\sigma_1' \bar{\sigma}_2' + \sigma_2' \bar{\sigma}_1') - \rho (\sigma_1 \bar{\sigma}_2 + \sigma_2 \bar{\sigma}_1)] |(\omega, v - \bar{v})| d\omega d\bar{v} + \\ &+ \iint_{\Omega} [\bar{F}' \bar{\delta\bar{F}}' + \bar{\delta\bar{F}}' \bar{F}' - \bar{\delta\bar{F}} \bar{F} - \bar{F} \bar{\delta\bar{F}}] d\omega d\bar{v} + \\ &+ \iint_{\Omega} [\rho'_{fluct} (\sigma_1' \bar{\sigma}'_{fluct} + \sigma'_{fluct} \bar{\sigma}_1) - \rho_{fluct} (\sigma_1 \bar{\sigma}_{fluct} + \sigma_{fluct} \bar{\sigma}_1)] d\omega d\bar{v}. \quad (12) \end{aligned}$$

Здесь мы, естественно, считаем  $\rho$  симметричными. По поводу флуктуации функции распределения  $\bar{\delta\bar{F}}$  можно предположить, что она удовлетворяет линеаризованному относительно  $\bar{F}$  уравнению Больцмана.

**Мезо-**

Для перехода к макроскопическому описанию движения совокупности микроскопических частиц будем уменьшать число Кнудсена [Богомолов, Есикова, Кувшинников, 2016] и при умеренных числах Кнудсена получим следующую ступень нашей иерархии между молекулярным описанием и представлением о газе как о сплошной среде. Она основана на системе СДУ по винеровской мере  $dw(t)$ , описывающей движение частицы ( $x(t)$  – ее координата,  $v(t)$  – скорость) в фазовом пространстве:

$$\begin{aligned} dx(t) &= v(t)dt, \\ dv(t) &= -\frac{1}{Kn}a(c)(v(t) - V) dt + \frac{1}{\sqrt{Kn}}\sigma(c) dw(t), \end{aligned} \tag{13}$$

где  $c$  – модуль безразмерной тепловой скорости  $\mathbf{c} \equiv v(t) - V$ ,  $V(x, t)$  – макроскопическая скорость, которая, как и коэффициенты во втором уравнении, вектор  $\mathbf{a}(c) = a(c)\mathbf{c}$  и матрица  $\sigma(c)$ , будет определена ниже.

Она получена благодаря замене нашего скачкообразного процесса диффузионным, определяемым первыми двумя моментами процесса исходного. Ее можно интерпретировать как движение частицы в среднем самосогласованном поле.

Реализации этого процесса (набор траекторий) порождают меру, плотность  $F(x, v, t)$  (5) которой удовлетворяет уравнению типа уравнения Колмогорова – Фоккера – Планка в фазовом пространстве:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial v_i F}{\partial x_i} = \frac{1}{Kn} \left( \sum_{i=1}^3 \frac{\partial a_i(F)(v_i - V_i)F}{\partial v_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial^2 \sigma_{ij}^2(F)F}{\partial v_i \partial v_j} \right). \tag{14}$$

Это уравнение давно известно как эвристическое модельное уравнение Больцмана с интегралом столкновений в форме Фоккера – Планка. Однако ранее не конкретизировались его коэффициенты  $\mathbf{a}$ ,  $\sigma^2$  и пределы применимости такого приближения.

При малых числах Кнудсена для газа из твердых сфер (в приближении, когда при вычислении вектора «сноса»  $\mathbf{a}$  и матрицы «диффузии»  $\sigma^2$  в пространстве скоростей делается упрощение, аналогичное процедуре Чепмена – Энскога, в виде локальной максвелловости и изотропности по тепловой скорости  $\mathbf{c}$  функции распределения  $F$  внутри соответствующих интегралов), эти коэффициенты в уравнениях (13), (14) получаются в следующем виде:

$$\begin{aligned} a(c) &= \frac{1}{c} T^{1/2} \frac{\sqrt{\pi}}{4} \left[ \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(c) \left( 2c^2 + 2 - \frac{1}{2c^2} \right) + e^{-c^2} \left( 2c + \frac{1}{c} \right) \right], \\ \sigma_{ij}^2(c) &= T^{3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{4} [\delta_{ij} P(c) + c_i c_j S(c)], \\ P(c) &= \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(c) \left( \frac{c^3}{3} + \frac{3}{2}c + \frac{3}{4c} - \frac{1}{8c^3} \right) + e^{-c^2} \left( \frac{c^2}{3} + \frac{4}{3} + \frac{1}{4c^2} \right), \\ S(c) &= \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(c) \left( c + \frac{3}{2c} - \frac{3}{4c^3} + \frac{3}{8c^5} \right) + e^{-c^2} \left( 1 + \frac{1}{c^2} - \frac{3}{4c^4} \right), \end{aligned} \tag{15}$$

$T$  – безразмерная температура,  $\delta_{ij}$  – символ Кронекера.

Квадратный корень  $\sigma$  из матрицы  $\sigma^2$  находится стандартным образом с использованием ортонормированного базиса из собственных векторов:

$$\sigma_{ij}(c) = \frac{T^{3/4} \pi^{1/4}}{2} \left[ \delta_{ij} \sqrt{\lambda_2} + \frac{c_i c_j}{c^2} \left( \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} \right) \right], \quad \lambda_1 = c^2 S(c) + P(c), \quad \lambda_2 = \lambda_3 = P(c).$$

Было показано с помощью численных расчетов, что такие коэффициенты вполне годятся для представления газа при умеренных числах Кнудсена.

В последнее время все большее внимание уделяется мезомоделям в фазовом пространстве, называемым чаще всего уравнениями Колмогорова – Фоккера – Планка. Такие модели используются и теоретиками, и вычислителями, правда, для максвелловских молекул (не имеющих физической интерпретации), а не для газа из твердых сфер. Вычислительные эксперименты показывают, что эти две модели существенно отличаются друг от друга. Подчеркнем, наши рассуждения относятся к взаимодействиям типа упругих шаров, лежащим в основе кинетической теории столкновительных явлений.

## Макро-

Далее напомним [Богомолов, Есикова, Кувшинников, 2016], как получить более точные, чем система уравнений Навье – Стокса, макроскопические уравнения газовой динамики. Более высокая точность основана на аналитическом решении системы (13), вернее ее упрощенного варианта.

Отметим также, что наш подход с применением аппарата СДУ отличается от других подходов получения уравнений квазигазодинамики, связанных с использованием детерминированных уравнений для функции распределения в фазовом пространстве.

В этом разделе мы преобразуем систему (13) таким образом, чтобы получить из нее макроскопические уравнения, сохраняя при этом как можно больше микроскопической информации. Система (13) является системой уравнений для неизвестных функций  $x(t)$  и  $v(t)$ . Выразим  $v(t)$  через  $x(t)$  из второго уравнения и подставим в первое, получив тем самым уравнение только относительно  $x(t)$ , из которого и последуют макроскопические уравнения. Аналитическое решение СДУ является довольно сложным. Нам известно лишь несколько успешных примеров. Для этого мы сделали ряд упрощений [Богомолов, Есикова, Кувшинников, 2016].

Коэффициенты (15) при больших  $c$  ведут себя как  $\mathbf{a}(c) \sim a_1 c \mathbf{e}$  ( $a_1 \equiv \frac{\pi}{2}$ ) и  $\sigma \sim \sigma_1 c^{3/2}$  ( $\sigma_1 \equiv \frac{2\sqrt{\pi}}{3\sqrt{3}} T^{1/4}$ ), поэтому, благодаря некоторым предположениям [Богомолов, Есикова, Кувшинников, 2016], выпишем аналитическое решение второго уравнения (13):

$$v = V + \frac{\sigma_0 \sqrt{Kn} w_t}{a_0 t}.$$

Подставим это решение в уравнение для  $x$ :

$$x = \int v dt = x_0 + Vt + \frac{\sigma \sqrt{Kn}}{a_0} \int_0^t \frac{w_s}{s} ds.$$

Вычисление интеграла  $\int_0^t \frac{w_s}{s} ds$  приводится в [Богомолов, Есикова, Кувшинников, 2016, приложение 3]:

$$\int_0^t \frac{w_s}{s} ds = \sqrt{t}(\varepsilon + \bar{\varepsilon}),$$

где  $\varepsilon, \bar{\varepsilon} \sim \mathcal{N}(0, 1)$  — независимые случайные величины, имеющие нормальное распределение с нулевым средним и единичной дисперсией. И вместо (13) мы приходим к макросистеме:

$$\begin{cases} dx(t) = V dt + \sqrt{Kn} \bar{\sigma} (dw + d\bar{w}), \\ dv(t) = -\frac{1}{Kn} a(c)(v(t) - V) dt + \frac{1}{\sqrt{Kn}} \sigma(c) dw, \end{cases} \quad (16)$$

где (см. [Богомолов, Есикова, Кувшинников, 2016]) можно взять

$$\tilde{\sigma}_{ij} \equiv \frac{\sigma_{0ij}}{a_{0i}} = \frac{3}{2\sqrt{3}} T^{1/4}. \tag{17}$$

Во втором уравнении вместо  $a(c)$  и  $\sigma(c)$  из (15) для дальнейшего упрощения нашей иерархии возьмем их, усредненные по локальному максвеллиану в пространстве скоростей, значения, полученные численно:

$$a \approx 3T^{1/2}, \quad \sigma \approx \sqrt{3}T^{3/4}. \tag{18}$$

Выбор коэффициентов, зависящих только от  $x$  и  $t$ , часто используется, например, в контексте модельного интеграла столкновений в форме Фоккера – Планка. Из (18) следует, что в рассматриваемых нами упрощениях выполняется флуктуационно-диссипационное соотношение Эйнштейна (в размерном виде):  $\frac{\sigma^2}{a} = 2RT$ .

Нетривиальным, на наш взгляд, является наличие приращения стохастического члена в первом уравнении (16) в виде суммы двух независимых процессов, которое возникло при вычислении  $\int_0^t \frac{w_s}{s} ds$ .

Получим систему уравнений новой стохастической газодинамики для этого набора коэффициентов. Это означает, что нам надо построить уравнение для мер в трехмерном  $x$ -пространстве, которые порождаются случайными процессами  $x(t)$  и  $v(t)$ , протекающими в шестимерном фазовом пространстве. Физический смысл этих мер — эволюция распределений массы, импульса и энергии. Здесь мы приведем только получение уравнения для плотности массы — уравнение неразрывности с самодиффузией.

Определим стохастическую эмпирическую меру  $\mu_t(dx)$  (массу объема  $dx$ ) соотношением: для любой функции  $\psi \in C_b^{(2)}(\mathbf{R}^3)$  (пространство дважды непрерывно дифференцируемых финитных функций)

$$\int \psi(x)\mu_t(dx) = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \psi(x_l(t)). \tag{19}$$

Чтобы получить уравнение для меры  $\mu_t(dx)$ , возьмем стохастический дифференциал от обеих частей (19). Для этого воспользуемся формулой Ито дифференцирования сложной функции

$$d\psi(x) = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial\psi}{\partial x_i} dx_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial^2\psi}{\partial x_i \partial x_j} dx_i dx_j,$$

где стохастические дифференциалы  $dx_i$  берутся из системы (16), а в силу определения приращения стандартного трехмерного винеровского процесса, малость которого есть  $\sqrt{dt}: dw_i dw_j = \delta_{ij} dt, dw_i dt = 0, dt^2 = 0$ , что приводит к

$$dx_i dx_j = 2Kn \sum_{m,n=1}^3 (\tilde{\sigma}_{im} \tilde{\sigma}_{jn}) \delta_{mn} dt = 2Kn \sum_{m=1}^3 (\tilde{\sigma}_{im} \tilde{\sigma}_{jm}) dt \equiv 2Kn \tilde{\sigma}_{ij}^2 dt,$$

формула Ито в нашем случае получается в виде

$$d\psi(x) = \left( \sum_{i=1}^3 V_i \frac{\partial\psi}{\partial x_i} + Kn \sum_{i,j=1}^3 \tilde{\sigma}_{ij}^2 \frac{\partial^2\psi}{\partial x_i \partial x_j} \right) dt + \sqrt{Kn} \sum_{i,j=1}^3 \tilde{\sigma}_{ij} \frac{\partial\psi}{\partial x_i} (dw_j + d\bar{w}_j). \tag{20}$$

Тогда получим стохастический дифференциал от обеих частей (19):

$$d \int \psi(x) \mu_t(dx) = \int \left[ \left( \sum_{i=1}^3 V_i(x, t) \frac{\partial \psi}{\partial x_i}(x) + Kn(x, t) \sum_{i,j=1}^3 \tilde{\sigma}_{ij}^2(x, t) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i \partial x_j}(x) \right) dt \right] \mu_t(dx) + \\ + \int \left\{ \sqrt{Kn(x, t)} \left[ \sum_{i,j=1}^3 \tilde{\sigma}_{ij}(x, t) \frac{\partial \psi}{\partial x_i}(x) \right] (dw_j + d\tilde{w}_j) \right\} \mu_t(dx),$$

что представляет собой обобщенное стохастическое уравнение неразрывности.

Предположив наличие плотности  $\rho(x, t)$  у стохастической эмпирической меры  $\mu_t(dx)$ , получим дифференциальное стохастическое уравнение неразрывности в виде

$$d\rho = \left[ - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (V_i \rho) + \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (Kn \tilde{\sigma}_{ij}^2 \rho) \right] dt - \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (\sqrt{Kn} \tilde{\sigma}_{ij} \rho) (dw_j + d\tilde{w}_j),$$

а усреднив по времени (взяв математическое ожидание и учитывая обращение в нуль математических ожиданий членов, содержащих  $dw_j$ ,  $d\tilde{w}_j$ ), получим детерминированное **уравнение неразрывности с учетом самодиффузии** для усредненной по времени детерминированной плотности  $\bar{\rho}(x, t)$ :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (V_i \rho) = \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (Kn \overline{\tilde{\sigma}_{ij}^2} \rho),$$

справедливое для малых чисел Кнудсена. Черту над  $\rho(x, t)$  мы отбросили.

Присутствие правой части отражает «след», оставляемый тепловым движением молекул, или самодиффузию, и не нарушает консервативности, потому что описывает диффузию и имеет дивергентный вид.

Если провести наши выкладки для модели газа из максвелловских молекул, «самодиффузионная» поправка в правой части получится исчезающе малой.

Вычисления с учетом (17), (18) дают  $\overline{\tilde{\sigma}_{ij}^2} = 0,085T^{1/2}$ , и комбинацию  $Kn \overline{\tilde{\sigma}_{ij}^2}$  можно назвать кинематической вязкостью. Подчеркнем, что уравнение состояния нам не требуется, все коэффициенты в наших уравнениях получаются как следствие вероятностной модели твердых сфер.

## Выводы

Мы постарались показать, что физически оправданное описание поведения газа из твердых сфер приводит к вероятностной модели, представляющей собой систему нелинейных СДУ, которая может быть трансформирована в интегро-дифференциальное уравнение Больцмана, дополненное корреляционными и флуктуационными членами, а значит, более богатое, чем классическое. Та же исходная вероятностная модель при уменьшении числа Кнудсена ведет к мезо- и макроуравнениям, более тонким, чем обычные, и более мягким для вычислительных целей. Построенная стохастическая иерархия представляет собой последовательный набор упрощений, которые можно и нужно снимать с помощью вычислительного эксперимента, благодаря приведенной обозримой схеме перехода от подробных моделей ко все более грубым.

## Список литературы (References)

- Арсеньев А. А.* О приближении решения уравнения Больцмана решениями стохастических дифференциальных уравнений Ито // Журнал вычисл. матем. и матем. физики. — 1987. — Т. 27, № 3. — С. 400–410.
- Arsen'yev A. A.* O priblizhenii resheniya uravneniya Bol'tsmana resheniyami stokhasticheskikh differentsial'nykh uravneniy Ito [On the approximation of the solution of the Boltzmann equation by solutions of the Ito stochastic differential equations] // USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 1987. — Vol. 27, No. 2. — P. 400–410 (in Russian).
- Богомолов С. В., Есикова Н. Б., Кувшинников А. Е.* Микро-макромодели Фоккера–Планка–Колмогорова для газа из твердых сфер // Математическое моделирование. — 2016. — Т. 28, № 2. — С. 65–85.
- Bogomolov S. V., Esikova N. B., Kuvshinnikov A. E.* Micro-macro Fokker–Planck–Kolmogorov models for a hard sphere gas // Mathematical Models and Computer Simulations. — 2016. — Vol. 8, No. 5. — P. 533–547. (Original Russian paper: *Bogomolov S. V., Esikova N. B., Kuvshinnikov A. E.* Mikro-makromodeli Fokkera–Planka–Kolmogorova dlya gaza iz tverdykh sfer // Matematicheskoye modelirovaniye. — 2016. — Vol. 28, No. 2. — P. 65–85.)
- Богомолов С. В., Захарова Т. В.* Уравнение Больцмана без гипотезы молекулярного хаоса // Математическое моделирование. — 2021. — Т. 33, № 1. — С. 3–24.
- Bogomolov S. V., Zakharova T. V.* Boltzmann equation without the molecular chaos hypothesis // Mathematical Models and Computer Simulations. — 2021. — Vol. 13, No. 5. — P. 743–755. (Original Russian paper: *Bogomolov S. V., Zakharova T. V.* Uravneniye Bol'tsmana bez gipotezy molekulyarnogo khaosa // Matematicheskoye modelirovaniye. — 2021. — Vol. 33, No. 1. — P. 3–24.)
- Скоруход А. В.* Стохастические уравнения для сложных систем. — М.: Наука, 1983. — 192 с.
- Skorokhod A. V.* Stochastic Equations for Complex Systems — Dordrecht: Kluwer, 1988. — 192 p. (Russ. ed.: *Skorokhod A. V.* Stokhasticheskiye uravneniya dlya slozhnykh sistem. — Moscow: Nauka, 1983. — 192 p.)
- Boltzmann L.* Weitere Studien ueber das Waerme gleichgewicht unfer Gasmolaekuler // Sitzungsberichte der Akademie der Wissenschaften — 1872. — Vol. 66. — P. 275–370.