УДК 541.12.0122:539.213.3

ЧИСЛЕННО-ВЕРОЯТНОСТНЫЙ СПОСОБ РЕШЕНИЯ РЕЛАКСАЦИОННЫХ УРАВНЕНИЙ МАССОПЕРЕНОСА*

В. А. Сиренек

Кафедра системного анализа,
ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)», г. Санкт- Петербург;
wasirenek@gmail.com

Ключевые слова и фразы: гиперболические уравнения массопереноса; диффузионные процессы; метод Монте-Карло; релаксационные модели; случайный процесс.

Аннотация: На основе связи линейных гиперболических (релаксационных) уравнений массопереноса с моделями «случайного блуждания» (имитационными процессами) разработан численно-вероятностный способ решения диффузионных задач. Известный прием использования точного решения волнового уравнения при решении телеграфного уравнения (задача Коши) распространен на случай краевых задач. Вероятностные представления решений релаксационного уравнения, полученные в виде математического ожидания от «рандомизированных» (согласно случайному имитационному процессу) точных решений волнового уравнения, численно реализованы методом Монте-Карло.

Введение. При моделировании диффузионных процессов с релаксационным характером массопереноса широко используются гиперболические уравнения – волновые (релаксационные) модели [1]. Наиболее известное из них имеет вид

$$\tau c''_{tt} + c'_t = D^* c''_{xx}, \tag{1}$$

где $c(x, t)$ – концентрация; D^* – коэффициент диффузии; τ – время релаксации среды.

Гиперболические уравнения в отличие от параболических с постоянными коэффициентами (в том числе от классического уравнения диффузии Фика) учитывают конечность скорости распространения возмущений концентрации. Их решения позволяют адекватно описывать дифференциальные характеристики массопереноса, то есть профили концентрации целевого компонента с резко очерченным фронтом, проявляющим себя на начальной (релаксационной) стадии процесса. Решения уравнения Фика адекватно описывают стадию развитой диффузии с «размытым» фронтом профиля (практически при $t > 10\tau$).

При численном решении гиперболических уравнений универсальным методом конечных разностей сталкиваются с определенными трудностями, связанными с существенными искажениями крутых линий раздела фаз – эффекты дисси-

* По материалам доклада на конференции ММТТ-2014.

пации (изменение наклона фронта профиля) и дисперсии («выбросы» концентрации на фронте), возникающими при переходе от дифференциальных уравнений к разностным. Эффективным средством избежать подобных проблем служат основанные на методе Монте-Карло численно-вероятностные способы решения дифференциальных уравнений, не обладающие погрешностью, обусловленной дискретизацией задачи. Решение в этом случае сводится к осреднению некоторого функционала от реализаций моделируемого случайного процесса – имитационного или фиктивного (специально построенного) [2]. Представляющие собой модели «случайного блуждания» и лежащие в основе вывода дифференциальных уравнений массопереноса имитационные случайные процессы позволяют не только решать эти уравнения методом Монте-Карло, но и изучать вероятностную природу характеристик массопереноса [1]. Выигрышным в вычислительном отношении при решении какой-либо задачи математической физики является использование решений более простых задач. Применительно к гиперболическим уравнениям это – точные решения волнового уравнения. Данным приемом решались как линейные, так и нелинейные уравнения, при этом использовались имитационные и фиктивные случайные процессы [3, 4]. В статье решения различных краевых задач для уравнения (1) представлены в виде математического ожидания от «рандомизированных» (согласно имитационного процесса) точных решений волнового уравнения. Численная реализация таких представлений осуществлена методом Монте-Карло.

Вероятностный способ решения телеграфного уравнения (задача Коши). Вероятностным аналогом уравнения (1) можно считать уравнение

$$c''_{tt} + 2ac'_t = w^2 c''_{xx}, \quad a = 1/2\tau, \quad w = \sqrt{D^*/\tau}, \tag{2}$$

известное в литературе как телеграфное [5]. Этому уравнению соответствует случайное блуждание (имитационный случайный процесс), в котором фиктивная частица движется по прямой с постоянной скоростью w, изменяя направление движения с некоторой интенсивностью a. Исходя из принципов «случайного блуждания», уравнение (2) получено при моделировании различных физических процессов [6]. Подобные случайные процессы изучались также и теоретически [7]. Решение уравнения (2) с начальными условиями

$$c\,|_{t=0} = \Phi(x), \quad c'_t\,|_{t=0} = \Psi(x), \quad x \in [-\infty, +\infty]$$

получено в виде математического ожидания $\mathrm{E}\{\ldots\}$ от «рандомизированной» формулы Даламбера, доказаны его единственность и существование [5]:

$$c(x,t) = \mathrm{E}\left\{\frac{\Phi(x_+^{(t)}) + \Phi(x_-^{(t)})}{2} + \frac{1}{2w}\int_{x_-^{(t)}}^{x_+^{(t)}} \Psi(y)dy\right\}, \quad x_\pm^{(t)} = x \pm w\tilde{t}, \quad \tilde{t} = \int_0^t (-1)^{N_a(s)} ds, \tag{3}$$

где $N_a(s)$ – число перемен скорости «частицы» за время s (процесс Пуассона с параметром a), значения $(-1)^{N_a(s)}$ чередуются (+ или –); $\tilde{t}$ – «рандомизированное время» (случайная величина). Вычисление $c(x,t)$ осуществляется методом Монте-Карло, то есть осреднением выражения в фигурных скобках при достаточно большом числе M реализаций $\tilde{t}$ ($\tilde{t} \in (-t, t]$). При этом m-я реализация $\tilde{t}$ ($m = 1, 2, \ldots, M$) есть $\tilde{t}_m = \sum_{j=1}^{J_m} (-1)^{j+1} \Delta t_j$, где $\Delta t_j = t_j - t_{j-1}$; t_j – моменты перемен скорости «частицы»; j – номер скачка; $t_0=0$; J_m – число перемен скорости за время t в m-й реализации $\tilde{t}$ (определяется условием $\sum_{j=1}^{J_m}\Delta t_j=t$); Δt_j – показательно распределенная величина с плотностью вероятности $a\exp(-at)$ и рассчитывается как $\Delta t=-\ln r/a$, где r – случайная величина, равномерно распределенная на (0, 1). В дальнейшем в целях повышения эффективности метода Монте-Карло вероятностные представления решений выражены в виде суммы двух слагаемых, соответствующих двум противоположным случайным событиям $L=\{N_a(s)=0\}$ и $\bar{L}=\{N_a(s)\ge 1\}$; при этом $P\{L\}=\exp(-at)$ и $P\{\bar{L}\}=$ $=1-\exp(-at)$ – вероятности этих событий. Первая ситуация детерминирована ($x=x\pm wt$); вторая ситуация обеспечивается условием $t_1<t$, где $t=\Delta t=$ $=-(1/a)\ln(1-r(1-\exp(-at)))$ – время до первого изменения скорости.

Модель случайного блуждания, порождающая уравнение (2), исследовалась в обобщенном виде как теоретически [8], так и при описании различных процессов тепломассопереноса [9, 10]. В общем случае за фазовое пространство имитационного случайного процесса можно принять объединение двух параллельных прямых на плоскости (x, v) с заданными на этих прямых скоростями w_1 и w_2. Переключение скорости w_i происходит с интенсивностью (частотой) a_i, а «гибель частицы» – с интенсивностью k. В уравнение переноса, кроме членов из (2), могут входить c''_{xt}, c'_x, c. Решение такого уравнения с помощью детерминированной замены переменных может быть сведено к решению уравнения (2) [10].

Точные решения волнового уравнения. На основе интегрального уравнения колебаний получены аналитические решения различных краевых задач для волнового уравнения на $[0, X]$:

$$\hat{c}''_{tt}=w^2\hat{c}''_{xx}; \tag{4}$$

$$\hat{c}\,|_{t=0}=\varphi(x),\quad \hat{c}'_t\,|_{t=0}=\xi(x),\quad x\in(0,X); \tag{5}$$

а) $$\hat{c}\,|_{x=0}=\gamma_1(t),\qquad \hat{c}'_x\,|_{x=X}=\gamma_2(t),\quad t>0; \tag{6}$$

б) $$\hat{c}\,|_{x=0}=\gamma_1(t),\qquad \hat{c}\,|_{x=X}=\gamma_3(t),\quad t>0; \tag{7}$$

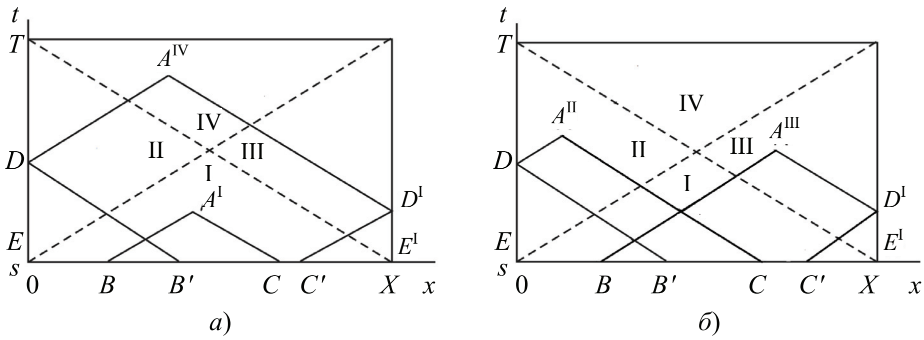
в) $$\hat{c}'_x\,|_{x=0}=\gamma_4(t),\quad \hat{c}'_x\,|_{x=X}=\gamma_2(t),\quad t>0, \tag{8}$$

$s=0$, $B(x_1,0)$, $B'(-x,0)$, $C(x_2,0)$, $C'(x,0)$, $D(0,t)$, $D'(X,t)$, $E(0,0)$, $E'(X,0)$, $x_1=x-wt$, $x_2=x+wt$, $x_3=2X-x-wt$, $t_1=t-x/w$, $t_2=t-(X-x)/w$.

Выражения $\hat{c}(x,t)$ для $t>T$, где $T=X/w$, выводятся через формулы для $t\le T$. Область $\Omega=\{0\le t\le T; 0\le x\le X\}$, не допускающая более одного отражения характеристик уравнения (4), по типу формул для ее точек диагоналями разбивается на четыре зоны (рисунок). Выражения $\hat{c}\left(A^Z\right)$, где верхний индекс Z = I, II, Ш, IV – номер зоны области Ω, для задачи (4), (5), (6) имеют вид:

$$\hat{c}(A^I)=(1/2)\left[\varphi(B)+\varphi(C)\right]+(1/2w)\int_B^C\xi(y)dy; \tag{9}$$

$$\hat{c}(A^{II})=(1/2)\left[-\varphi(B')+\varphi(C)\right]+(1/2w)\int_{B'}^C\xi(y)dy+\gamma_1(D); \tag{10}$$



Поведение характеристик волнового уравнения (4)
в зонах A^{I}, A^{IV} (*а*) и A^{II}, A^{III} (*б*)

$$\hat{c}(A^{\mathrm{III}}) = (1/2)\left[\varphi(B) + \varphi(C')\right] + (1/2w)\int_B^{C'} \xi(y)dy + + (1/w)\int_{C'}^{X} \xi(y)dy + w\int_{E'}^{D'} \gamma_2(y)dy; \tag{11}$$

$$\hat{c}\left(A^{\mathrm{IV}}\right) = (1/2)\left[\varphi(C') - \varphi(B')\right] + (1/2w)\int_{B'}^{C'} \xi(y)dy + + (1/w)\int_{C'}^{X} \xi(y)dy + \gamma_1(D) + w\int_{E'}^{D'} \gamma_2(y)dy. \tag{12}$$

Для задачи (4), (5), (7) выражения $\hat{c}\left(A^{\mathrm{III}}\right)$ и $\hat{c}\left(A^{\mathrm{IV}}\right)$ принимают вид:

$$\hat{c}\left(A^{\mathrm{III}}\right) = (1/2)\left[\varphi(B) - \varphi(C')\right] + (1/2w)\int_B^{C'} \xi(y)dy + \gamma_3(D'); \tag{13}$$

$$\hat{c}\left(A^{\mathrm{IV}}\right) = -(1/2)\left[\varphi(B') + \varphi(C')\right] + (1/2w)\int_{B'}^{C'} \xi(y)dy + \gamma_1(D) + \gamma_3(D'). \tag{14}$$

Для задачи (4), (5), (8) выражения $\hat{c}\left(A^{\mathrm{II}}\right)$ и $\hat{c}\left(A^{\mathrm{IV}}\right)$ имеют вид:

$$\hat{c}\left(A^{\mathrm{II}}\right) = (1/2)\left[\varphi(B') + \varphi(C)\right] + (1/2w)\int_{B'}^{C} \xi(y)dy + (1/w)\int_E^{B'} \xi(y)dy - w\int_E^{D} \gamma_4(y)dy; \tag{15}$$

$$\hat{c}\left(A^{\mathrm{IV}}\right) = (1/2)\left[\varphi(B') + \varphi(C')\right] + (1/2w)\int_{B'}^{C'} \xi(y)dy + (1/w)\int_{C'}^{X} \xi(y)dy + + (1/w)\int_E^{B'} \xi(y)dy + w\int_{E'}^{D'} \gamma_2(y)dy - w\int_E^{D} \gamma_4(y)dy. \tag{16}$$

Формулы (9) – (16), полученные для различных краевых задач и всех зон области Ω, проверены на функциях, удовлетворяющих уравнению (4).

Способ решения релаксационного уравнения (краевые задачи). Реализованы два способа решения диффузионных задач на основе уравнения (1), фактически (2), во взаимосвязи с моделью «случайного блуждания»:

1) посредством сведения исходных краевых задач к задаче Коши с последующим осреднением «рандомизированной» (по времени) формулы Даламбера;

2) непосредственным осреднением «рандомизированных» точных решений волнового уравнения, соответствующих исходным краевым условиям.

Первым способом с использованием «продолжения начальных условий на всю ось *x*» решены две задачи о переносе вещества в полуограниченный и ограниченный образцы [3]. В статье предложен второй способ.

Решение уравнения (2) по формуле (21)
при сравнении с точным решением $c^*(x,t)$

x	t	Z	Точное решение $c^*(x,t)$	Типы краевых задач (граничных условий)								
				(18)			(19)			(20)		
				$c(x,t)$	$3\bar{\sigma}/\sqrt{M}$	δ, %	$c(x,t)$	$3\bar{\sigma}/\sqrt{M}$	δ, %	$c(x,t)$	$3\bar{\sigma}/\sqrt{M}$	δ, %
0,6	0,1	I	0,811	0,808	0,003	0,4	0,806	0,003	0,6	0,813	0,003	0,2
0,6	0,7	II	0,732	0,712	0,02	2,7	0,722	0,02	1,4	0,702	0,02	4,0
0,6	1,0	IV	0,695	0,684	0,02	1,6	0,682	0,02	1,9	0,686	0,02	1,3
0,9	0,1	I	0,611	0,609	0,02	0,3	0,605	0,02	1,0	0,609	0,02	0,3
0,9	0,7	III	0,551	0,549	0,02	0,4	0,565	0,02	2,5	0,535	0,02	2,9
0,9	1,0	IV	0,524	0,516	0,02	1,5	0,512	0,02	2,3	0,530	0,02	1,1

Для уравнения (2) рассмотрены краевые задачи с начальными условиями общего вида (17) и комбинациями граничных условий 1-го и 2-го рода (18) – (20):

$$c\,|_{t=0} = c^*\,|_{t=0} = \varphi(x), \quad c'_t\,|_{t=0} = (c^*)'_t\,|_{t=0} = \xi(x), \quad x \in (0, X); \tag{17}$$

а) $$c\,|_{x=0} = c^*\,|_{x=0} = \gamma_1(t), \quad c'_x\,|_{x=X} = (c^*)'_x\,|_{x=X} = \gamma_2(t), \quad t > 0; \tag{18}$$

б) $$c\,|_{x=0} = c^*\,|_{x=0} = \gamma_1(t), \quad c\,|_{x=X} = c^*\,|_{x=X} = \gamma_3(t), \quad t > 0; \tag{19}$$

в) $$c'_x\,|_{x=0} = (c^*)'_x\,|_{x=0} = \gamma_4(t), \quad c'_x\,|_{x=X} = (c^*)'_x\,|_{x=X} = \gamma_2(t), \quad t > 0, \tag{20}$$

где $c^*(x,t)$ – контрольное решение уравнения (2), в соответствии с которым задавались условия (17) – (20). Решения задач (2), (17), (18) – (20) имеют вид

$$c(x,t) \approx \mathrm{e}^{-at}\hat{c}(x,t) + (1 - \mathrm{e}^{-at})(1/M)\sum_{m=1}^{M} \hat{c}(x, \tilde{t}_m), \tag{21}$$

где $\hat{c}(x,t)$ – аналитические решения задач (4), (5), (6) – (8) для волнового уравнения – формулы (9) – (16). Одним из решений уравнения (2) является функция $c^*(x,t) = \cos x \exp\left[t\left(\sqrt{a^2 - w^2} - a\right)\right]$. Результаты расчета при $a = 3$, $w = 1$, $X = \pi/2$ по формуле (21) методом Монте-Карло ($M = 10^4$) представлены в таблиц, где $\bar{\sigma}$ – выборочное среднеквадратическое отклонение случайной величины $\hat{c}(x,\tilde{t})$ от $c^*(x,t)$, значение $3\bar{\sigma}/\sqrt{M}$ определяет доверительный интервал. Относительная погрешность расчета δ при $t < \tau$ – менее 1,5 %, при $t < 7\tau$ – менее 4 %.

Список литературы

1. Таганов, И. Н. Волновая диффузия : монография / И. Н. Таганов, В. А. Сиренек ; Рос. АН, Рус. Географ. о-во, С.-Петерб. гос. технол. ин-т. – СПб. : [б. и.], 2000. – 209 с.

2. Ермаков, С. М. Случайные процессы для решения классических уравнений математической физики / С. М. Ермаков, В. В. Некруткин, А. С. Сипин. – М. : Наука, 1984. – 205 с.

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

4. Сиренек, В. А. Вероятностное решение квазилинейных гиперболических уравнений на основе обращения дифференциального оператора / В. А. Сиренек // Журн. вычисл. математики и мат. физики. – 2000. – Т. 40, № 3. – Р. 417 – 427.

5. Kisynski, J. On M.Kac's Probabilistic Formula for the Solution of the Telegraphist's Equations / J. Kisynski //Annales polonici mathematici. – 1974. – Vol. 29. – P. 259 – 271.

6. Фок, В. А. Решение одной задачи теории диффузии по методу конечных разностей и приложение его к диффузии света / В. А. Фок // Тр. Гос. оптич. института. – 1926. – Т. 4, вып. 34. – С. 1 – 32.

7. Колмогоров, А. Н. Об аналитических методах в теории вероятностей / А. Н. Колмогоров // Успехи мат. наук. – 1938. – Вып. 5. – С. 5 – 41.

8. Hersh, R. Stochastic Solution of Hyperbolic Equations / R. Hersh // Lect. Notes Math. – 1975. – Vol. 446. – P. 283 – 300.

9. Волновая модель продольного перемешивания / К. Р. Вестертерп [и др.] // Теорет. основы хим. технологии. – 1995. – Т. 29, № 6. – С. 580.

10. Вероятностный подход к исследованию волновой модели продольного перемешивания / В. А. Сиренек [и др.] // Теорет. основы хим. технологии. – 1999. – Т. 33, № 5. – С. 539 – 546.

Numerical Probabilistic Method of Solving Mass Transfer Relaxation Equations

V. A. Sirenek

Department of System Analysis,
St. Petersburg State Institute of Technology (Technical University), St. Petersburg;
wasirenek@gmail.com

Key words and phrases: diffusion processes; hyperbolic mass transfer equations; Monte-Carlo method; relaxation models; random process.

Abstract: On the basis of the relationship between linear hyperbolic (relaxation) mass transfer equations and models of random walk (imitation processes) the numerical probabilistic way of solving diffusion tasks was developed. The well-known technique of using exact solution of the wave equation when solving the telegraph equation (Cauchy problem) is extended to the case of boundary value problems. Probabilistic representations of the solutions of the relaxation equation obtained in the form of mathematical expectations from the randomized (according to random imitating process) exact solutions of the wave equation are realized by the Monte-Carlo method.

References

1. Taganov I.N., Sirenek V.A. *Volnovaya diffuziya* (Wave Diffusion), Saint Petersburg, 2000, 209 p.

2. Ermakov S.M., Nekrutkin V.V., Sipin A.S. *Sluchainye protsessy dlya resheniya klassicheskikh uravnenii matematicheskoi fiziki* (Random processes for solving the classical equations of mathematical physics), Moscow: Nauka, 1984, 205 p.

3. Sirenek V.A., Kryuchkov A.F. *Matematicheskoe modelirovanie*, 1998, vol. 10, no. 6, pp. 107-117.

4. Sirenek V.A. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2000, vol. 40, no. 3, pp. 396-407.
5. Kisynski J. *Annales polonici mathematici*, 1974, vol. 29, pp. 259-271.
6. Fok V.A. *Trudy gosudarstvennogo opticheskogo instituta*, 1926, vol. 4, issu 34, pp. 1-32.
7. Kolmogorov A.N. *Uspekhi matematicheskikh nauk*, 1938, Issue 5, pp. 5-41.
8. Hersh R. *Lect. Notes Math*, 1975, vol. 446, pp. 283-300.
9. Vesterterp K.R., Dil'man V.V., Kronberg A.E., Benneker A. *Teoreticheskie osnovy khimicheskoi tekhnologii*, 1995, vol. 29, no. 6, pp. 580.
10. Sirenek V.A., Sidorov V.A., Sukhanov M.B., Kholodnov V.A. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 1999, vol. 33, no. 5, pp. 487-494.

Numerischwahrscheinliche Weise der Lösung der Relaxationsngleichungen der Massenübertragung

Zusammenfassung: Aufgrund der Verbindung der linearen hyperbolischen Relaxationsgleichungen der Massenübertragung mit den Modellen “des zufälligen Wanderung” (von den Imitationprozessen) ist die numerischwahrscheinliche Weise der Lösung der Diffusionsaufgaben entwickelt. Das bekannte Verfahren der Nutzung der genauen Lösung der Wellengleichung bei der Lösung der Telegrafengleichung (der Aufgabe von Cauchy) ist für den Falle der Ortsaufgaben verbreitet. Die wahrscheinlichen Vorstellungen der Lösungen der Relaxationsgleichung, die in Form der mathematischen Erwartung von den “randomisierten”(laut dem zufälligen Imitationprozess) genauen Lösungen der Wellengleichung erhalten sind, sind numerisch von der Methode von Monte Carlo realisiert.

Moyen numérique-probabiliste de la solution des équations de relaxion du transfert de masse

Résumé: A la base du lien des équations aux dérivées partielles hyperboliques (de relaxion) avec les modèles de marche aléatoire (processus d’imitation) est élaboré le moyen numérique-probabiliste de la solution des problèmes de diffusion. Est connu le moyen de l’emploi de la solution exacte de l’équation d’onde lors de la solution de l’équation des télégraphistes (problème de Cauchy) qui se rapporte à la solution des Conditions aux limites. Les représentations probabilistes sont réalisées par la méthode Monte-Carlo.

Автор: ***Сиренек Валерий Анатольевич*** – кандидат технических наук, доцент кафедры системного анализа, ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)», г. Санкт- Петербург.

Рецензент: ***Туголуков Евгений Николаевич*** – доктор технических наук, профессор кафедры «Техника и технологии производства нанопродуктов», ФГБОУ ВПО «ТГТУ».
