

mixtures with application to the thermogravitational column. *Physics of Fluids*, 2007. V. 19, 027101.

7. *Haugen K., Firoozabadi A.* Transient separation of multicomponent liquid mixtures in thermogravitational columns. // *J. Chem. Phys.*, 2007. V. 127, 154507.

8. *Kozlova S.V., Ryzhkov I.I.* On the separation of multicomponent mixtures in a cylindrical thermogravitational column. // *Journal of Chemical Physics* (submitted to the journal).

9. *Козлова С.В.* Исследование термодиффузионного разделения многокомпонентных смесей в цилиндрической колонне, научный журнал «Молодой ученый» №11(91), июнь-1 2015 г.

10. *Haugen K., Firoozabadi A.* On the unsteady-state species separation of a binary liquid mixture in a rectangular thermogravitational column. // *J. Chem. Phys.*, 2006. V. 124, 054502.

11. *Рыжков И.И.* Термодиффузия в смесях: уравнения, симметрии, решения и их устойчивость. Новосибирск: Издательство СО РАН, 2013. 200 с.

Detemination of the characteristic time of a binary mixture separation in a cylindrical thermogravitational column

Kozlova Sofya Vladimirovna, PhD student

*Ryzhkov Ilya Igorevich, Prof., Leading researcher
Institute of Computational Modeling SB RAS
Siberian Federal University*

In this paper, the unsteady-state binary mixture separation in a cylindrical thermogravitational column is considered. For this process, the dependence of the characteristic time of establishing the steady-state separation on the ratio of the cylinders radii is obtained. When the ratio is close to unity, the characteristic time corresponds to that of a flat-plate column.

Keywords: multicomponent mixture, heat and mass transfer, diffusion, thermal diffusion, thermogravitational column, unsteady-state problem, characteristic time.

УДК 519.6

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ МНОГОЧАСТИЧНЫХ АНСАМБЛЕЙ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ КИНЕТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Мария Андреевна Коротченко, к.ф.-м.н., научный сотрудник

Тел.: 8 383 330 7721, e-mail: kmaria@osmf.sccc.ru

Александр Васильевич Бурмистров, к.ф.-м.н., научный сотрудник

Тел.: 8 383 330 7756, e-mail: burm@osmf.sccc.ru

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН

www.sccc.ru

Новосибирский государственный университет

www.nsu.ru

Для решения ряда задач, не обязательно связанных с динамикой разреженного газа, но описываемых кинетическими уравнениями типа Больцмана, предлагается использовать аппарат интегральных уравнений второго рода и весовое моделирование цепей Маркова, которые однозначно определяются коэффициентами этих уравнений.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, парные взаимодействия, автотранспортный поток, уравнение коагуляции, формирование цены

Решение целого ряда задач математической физики и индустриальной математики можно свести к оценке линейных функционалов от решений интегральных уравнений.



А.В. Бурмистров

Это связано, прежде всего, с тем, что математическая модель таких задач строится на основе рассмотрения соответствующего скачкообразного и обрывающегося с вероятностью единица марковского процесса, чья переходная плотность является субстахостическим ядром интегрального оператора, описывающего динамику системы за один шаг. Одним из примеров таких задач является нелинейное



М.А. Коротченко

кинетическое уравнение Больцмана в динамике разреженного газа. Это нелинейное интегро-дифференциальное уравнение описывает поведение разреженного газа и было выведено Людвигом Больцманом в 1872 году, однако до сих пор остается основой кинетической теории газов. Нелинейность уравнения Больцмана заключается в интеграле столкновений – квадратичном операторе, который описывает парные столкновения (или взаимодействия) частиц.

Несмотря на то, что кинетические уравнения были сначала получены для релаксации газа, область их приложений оказалась намного шире. Уравнения типа Больцмана используются при исследовании процессов переноса излучения в веществе, нейтронов в ядерном реакторе, электронов в твердых телах и плазме, а также для изучения роста капель в облаках, дефектов в материалах, газовых пор в металлах и т.д. В данной работе мы расскажем об использовании нами кинетических моделей в динамике разреженного газа и еще в трех областях: движении автотранспортных потоков, коагуляции частиц и формировании цены на рынке. Во всех случаях использование интегрального уравнения и соответствующей цепи Маркова позволяет распространить хорошо разработанную теорию весовых методов Монте-Карло на рассматриваемый класс задач. Более того, это даёт возможность оценивать параметрические производные от решения, что особенно важно при численном исследовании влияния различных параметров на решение нелинейных кинетических уравнений.

Динамика разреженного газа

В пространственно-однородном случае уравнение Больцмана для однокомпонентного газа может быть записано [1] с использованием симметричной плотности $w = w(v', v'_1 | v, v_1)$ вероятности перехода пары скоростей частиц от (v', v'_1) к новым скоростям (v, v_1) :

$$\frac{\partial f}{\partial t}(v, t) = \int \{f(v', t)f(v'_1, t) - f(v, t)f(v_1, t)\} w dv' dv'_1 dv_1,$$

здесь $f(v, t)$ – одночастичная функция плотности распределения по скоростям в момент времени t . Плотность w является произведением дифференциального сечения рассеяния частиц и δ -функций, учитывающих физические законы сохранения (импульса и энергии) при парном взаимодействии частиц.

При использовании вероятностной модели эволюции многочастичной системы [2, 3] для приближенного решения нелинейного уравнения Больцмана методом Монте-Карло часто предполагается, что количество взаимодействующих частиц N не изменяется. При этом, согласно [2] модельный процесс стохастической кинетики системы из

N частиц является однородным марковским процессом, фазовые состояния которого меняются в результате элементарных парных взаимодействий частиц. Распределение времени между элементарными взаимодействиями в системе определяется состоянием всей системы и является обобщенным экспоненциальным. Однако, связанные с этим процессом стандартные базовые интегральные уравнения невозможно непосредственно использовать для построения весовых модификаций статистического моделирования, так как ядра этих уравнений представляют собой сумму взаимосингулярных слагаемых. Это затруднение было преодолено в [4] посредством расширением фазового пространства системы путем введения в число фазовых переменных номера пары, реализующей взаимодействие в системе. Такая процедура приводит к «расслоению» распределения взаимодействий в системе по номеру пары частиц $\pi = (i, j)$. Данный прием позволил в [4] сформулировать специальное интегральное уравнение второго рода на плотность столкновений в расширенной системе F :

$$F = KF + F_0.$$

На основе этого уравнения удобно строить стандартные весовые модификации статистического моделирования рассматриваемой многочастичной системы, поскольку ядро уравнения содержит сингулярности лишь в виде сомножителей. Оператор K , несмотря на наличие в ядре обобщенных функций, можно, как указано в [5], рассматривать действующим из L_1 в L_1 , причем ряд Неймана для интегрального уравнения сходится по норме L_1 . Известно, что в предположении «молекулярного хаоса» [2] нормированная плотность частиц в N -частичной системе асимптотически, при $N \rightarrow \infty$, удовлетворяет уравнению Больцмана, причем как правило соответствующая погрешность имеет порядок $O(N^{-1})$ (см., например, [3])

Линейный функционал (h, f) от решения исходного уравнения Больцмана (h – заданная весовая функция) оказывается равен линейному функционалу (\tilde{H}, F) от решения интегрального уравнения (\tilde{H} – напрямую связанная с h функция) [4]. Для последнего функционала стандартным образом строятся весовые модификации статистических оценок «по столкновениям» или «по поглощениям» [3]. В пространственно-неоднородном случае фазовыми координатами являются физические координаты и скорости всех частиц R и V , а также номер взаимодействующей пары π . Причем состояние $Z = (R, \pi, V)$ системы фиксируется непосредственно перед началом нового свободного пробега. При этом переход системы из состояния (Z', t') в состояние (Z, t) осуществляется следующим образом:

1. выбирается время τ свободного пробега системы согласно обобщенной экспоненциальной плотности, при этом $t = t' + \tau$;
2. вычисляются новые координаты всех частиц $R = R' + \tau V'$;
3. разыгрывается номер $\pi = (i, j)$ пары частиц, реализующей очередное взаимодействие;
4. определяются скорости V всех частиц: для частиц с номерами (i, j) новые скорости выбираются согласно полученной плотности распределения, а скорости остальных частиц не изменяются.

На основе описанного перехода к интегральному уравнению второго рода были построены алгоритмы коррелированного и весового моделирования для изучения зависимости решения кинетического уравнения Больцмана от начального и временного параметров. Кроме того, был разработан алгоритм весового моделирования начального распределения скоростей для решения уравнения Больцмана [3, 6].

Автотранспортный поток (АТП)

Для решения ряда автотранспортных задач авторы в своей работе использовали кинетическую модель АТП, предложенную в [7]. Отличительной особенностью вы-

бранной модели является внесение ускорения в число фазовых координат, описывающих состояние автомобиля, наряду со скоростью и пространственной координатой, традиционно используемыми в кинетических моделях. Такое преобразование фазового пространства позволило распространить кинетическую модель на достаточно плотные АТП. В рамках рассматриваемой модели, одночастичная плотность $f(a, v, t)$ распределения автомобилей с ускорением a и скоростью v удовлетворяет интегро-дифференциальному уравнению Больцмановского типа

$$\frac{\partial f}{\partial t}(a, v, t) + a \frac{\partial f}{\partial v}(a, v, t) = \int \{ \Sigma(a | a', v, \bar{a}, \bar{v}) f(a', v, t) - \Sigma(a' | a, v, \bar{a}, \bar{v}) f(a, v, t) \} f(\bar{a}, \bar{v}, t) d\bar{a} d\bar{v} da',$$

здесь \bar{a} и \bar{v} – ускорение и скорость лидера, соответственно. Под лидером здесь понимаем автомобиль, находящийся непосредственно перед «текущим»; между этими двумя автомобилями и происходит взаимодействие (ускорение, торможение или обгон). Функция $\Sigma(\cdot)$ – заданная взвешенная плотность взаимодействий.

Следует отметить несколько отличий модели от газовой динамики. Прежде всего, в результате введения ускорения в число фазовых координат в данной модели при парных взаимодействиях скачкообразно меняется не скорость, а ускорение автомобиля. Кроме того, при взаимодействии двух автомобилей лидер не меняет своего ускорения, что выражено в несимметричности функции $\Sigma(\cdot)$. Поэтому взаимодействующие автомобили нужно представлять упорядоченными парами $\pi = (i, j)$. Для определенности можно полагать, что первый индекс i – номер преследователя, то есть автомобиля, следующего за лидирующим, а второй индекс j – номер лидера. Заметим также, что, в отличие от уравнения Больцмана, в случае АТП при парных взаимодействиях законы сохранения момента и энергии не выполняются. Используемое в данной модели предположение об «автомобильном хаосе» дополнительно подтверждается тем, что изменения ускорения зависят не только от типа автомобиля, но также от поведения и навыков каждого конкретного водителя, что вносит дополнительную случайность в модель. Это предположение используется в кинетических моделях АТП и является аналогичным предположению о «молекулярном хаосе» в газовой динамике.

В данной модели фазовыми координатами являются скорости и ускорения всех частиц (автомобилей) V и A , и опять же номер взаимодействующей пары π : $Z = (V, A, \pi)$. При этом переход системы из состояния (Z', t') в состояние (Z, t) осуществляется следующим образом:

1. выбирается время τ свободного пробега системы согласно обобщенной экспоненциальной плотности, при этом $t = t' + \tau$;
2. вычисляются новые скорости всех автомобилей $V = V' + \tau A'$;
3. разыгрывается номер $\pi = (i, j)$ пары автомобилей, реализующей очередное взаимодействие;
4. определяются ускорения A всех автомобилей: у преследователя i новое ускорение выбирается согласно полученной плотности распределения, а ускорения лидера j и остальных автомобилей не изменяются.

Авторами были рассмотрены профили взаимодействия с пороговыми функциями, зависящими от скоростей автомобилей в паре лидер-преследователь. Разработаны алгоритмы оценки распределения скорости и ускорения в однородном по пространству случае. С помощью численных экспериментов продемонстрирована практическая целесообразность и эффективность использования интегрального уравнения и моделирования соответствующих цепей Маркова при решении автотранспортных задач [8].

Уравнение коагуляции

Уравнение Смолуховского описывает широкий класс процессов коагуляции (слипания) в различных физических системах, состоящих из частиц с целочисленными размерами (мы рассматриваем пока такой случай, и именно поэтому вместо интегралов в

уравнении появляются суммы). Предположим, что при заданных коэффициентах коагуляции K_{kl} вероятность взаимодействия (или столкновения) частиц с размерами k и l в течение временного интервала Δt равна $K_{kl}\Delta t$. Будем называть k -мером частицу размера k . Тогда, в пространственно однородном случае, концентрация k -меров $n_k(t)$ в момент времени t удовлетворяет следующему кинетическому уравнению:

$$\frac{\partial n_k(t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \sum_{l+m=k} K_{lm} n_l(t) n_m(t) - \sum_{l \geq 1} K_{kl} n_k(t) n_l(t).$$

Это уравнение представляет скорость изменения концентрации k -меров по времени в виде суммы двух слагаемых: первое слагаемое – это скорость, с которой k -меры появляются в результате слипания частиц меньшего размера (множитель $1/2$ необходим для того, чтобы каждое такое взаимодействие было учтено только один раз); второе слагаемое описывает уменьшение концентрации k -меров за счет их слипания с другими частицами.

В случае уравнения Смолуховского интегральное уравнение связано с уравнением Колмогорова, которое представляет собой вероятностное описание эволюции системы из N частиц и даёт приближённое решение соответствующего нелинейного кинетического уравнения [9]. Заметим, что, в отличие от уравнения Больцмана, количество частиц в системе является переменным.

В данной модели фазовыми координатами являются текущее количество частиц N в системе, а также набор целочисленных размеров этих частиц $L_N = (l_1, \dots, l_N)$, и опять же номер взаимодействующей пары $\pi: Z = (N, L_N, \pi)$. При этом переход системы из состояния (Z', t') в состояние (Z, t) осуществляется следующим образом:

1. выбирается время τ свободного пробега системы согласно обобщенной экспоненциальной плотности, при этом $t = t' + \tau$;
2. разыгрывается номер $\pi = (i, j)$ пары частиц, реализующей очередное взаимодействие;
3. происходит преобразование в системе, которое состоит в замене взаимодействующих частиц i и j одной частицей с размером $l = l_i + l_j$. Таким образом, в результате взаимодействия число частиц в системе уменьшается, т.е. $N = N' - 1$.

Авторы исследовали уравнение Смолуховского с линейными коэффициентами коагуляции, зависящими от двух параметров. Для численной оценки линейных функционалов от решения рассматриваемого уравнения разработаны весовые алгоритмы, позволяющие на одном наборе траекторий оценивать функционалы для различных параметров, а также параметрические производные по этим параметрам. Кроме того, построены ценностные модификации алгоритма выбора номера взаимодействующей пары частиц в процессе коагуляции, что позволило существенно уменьшить трудоемкости для оценок искомых функционалов [10].

Формирование цены на рынке

В заключении данной статьи мы рассмотрим систему двух кинетически уравнений типа Больцмана, которая возникает в соответствующей модели формирования цены [11]. В данной модели, кроме наличия двух типов частиц (покупатель и продавец), есть еще одно отличие от предыдущих уравнений: присутствуют случайные флуктуации цены, которые описываются второй производной и могут моделироваться с помощью расщепления винеровским процессом. Типы частиц характеризуются плотностями $f(x, t)$ и $g(x, t)$. Здесь x – цена спроса или предложения для покупателей и продавцов соответственно. Взаимодействие (сделка) между покупателем в состоянии x и продавцом в состоянии y происходит с некоторой вероятностью, зависящей от их состояний. После сделки покупатель и продавец меняются ролями (купивший становится продав-

цом и желает продать актив по большей цене, а продавший – наоборот). Система уравнений имеет следующий вид [11]:

$$\frac{\partial f}{\partial t}(x,t) - \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \int [K(x',y',x,y)f(x',t)g(y',t) - K(x,y,x',y')f(x,t)g(y,t)]dydx'dy',$$

$$\frac{\partial g}{\partial t}(x,t) - \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} = \int [K(x',y',y,x)f(y',t)g(x',t) - K(y,x,x',y')f(y,t)g(x,t)]dydx'dy'.$$

Ядро $K = K(x, y, x', y')$ показывает количество сделок за единицу времени между покупателями, желающими купить по цене x и после сделки перепродать по цене x' , и продавцами, желающими продать по цене y и после сделки снова купить по цене y' . Для численного решения системы уравнений предлагается использовать моделирование изменений цен на рынке, представленном большим количеством покупателей и продавцов. При этом сделки являются результатом взаимодействия пары покупатель-продавец в соответствующей цепи Маркова.

В данной модели фазовой координатой является набор цен спроса и цен предложения $X = (x_1, \dots, x_N)$, а также номер пары π , участвующей в сделке: $Z = (X, \pi)$. При этом переход системы из состояния (Z', t') в состояние (Z, t) осуществляется следующим образом:

1. выбирается время τ свободного пробега системы согласно обобщенной экспоненциальной плотности, при этом $t = t' + \tau$;
2. разыгрывается номер $\pi = (i, j)$ пары, участвующей в сделке;
3. происходит преобразование в системе, учитывающее цену сделки и изменение x_i и x_j в соответствии с заданной плотностью.

В настоящий момент мы разрабатываем весовые алгоритмы метода Монте-Карло для изучения параметрических зависимостей искомых функционалов (например, от частоты сделок или цены транзакции), а также их асимптотического поведения при возрастании частоты сделок и уменьшении цены транзакции.

Заключение

В данной работе авторы впервые систематизировали свои примененные подходы и полученные результаты в области моделирования многочастичных систем для разных задач математической физики: динамики разреженного газа, движения автотранспорта, коагуляции частиц и ценообразования на бирже.

Литература

1. *Иванов М.С., Рогазинский С.В.* Метод прямого статистического моделирования в динамике разреженного газа. Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1988.
2. *Кац М.* Вероятность и смежные вопросы в физике. М.: Мир, 1965.
3. *Коротченко М.А., Михайлов Г.А., Рогазинский С.В., Иванов М.С.* Глобально-весовой метод Монте-Карло для нелинейного уравнения Больцмана // Журнал вычисл. матем. и матем. физики. 2005. Т. 45. № 10. С. 1860-1870.
4. *Михайлов Г.А., Рогазинский С.В.* Весовые методы Монте-Карло для приближенного решения уравнения Больцмана // Сиб. мат. журн. 2002. Т. 43. № 3. С. 620-628.
5. *Mikhailov G.A.* Parametric estimates by the Monte Carlo method. Utrecht: VSP, 1999.
6. *Коротченко М.А., Михайлов Г.А., Рогазинский С.В.* Модификации весовых алгоритмов метода Монте-Карло для решения нелинейных кинетических уравнений // Журн. вычисл. мат. и мат. физики. 2007. Т. 47. № 12. С. 2110-2121.
7. *Waldeer K.T.* The direct simulation Monte Carlo method applied to a Boltzmann-like vehicular traffic flow model // Comput. Phys. Commun. 2003. V. 156. No. 1. P. 1-12.
8. *Burmistrov A., Korotchenko M.* Monte Carlo Algorithm for Simulation of the Vehicular Traffic Flow Within the Kinetic Model with Velocity Dependent Thresholds // Springer Proc. Math. Stat. 2014. Vol. 114. P. 109-117.

9. Лушников А.А. Некоторые новые аспекты теории коагуляции // Изв. АН СССР, Физ. атмосферы и океана. 1978. Т. 14. № 10. С. 1048-1055.

10. Бурмистров А.В., Коротченко М.А. Весовые алгоритмы метода Монте-Карло для оценки и параметрического анализа решения кинетического уравнения коагуляции // Сиб. журн. вычисл. математики. 2014. Т. 17. № 2. С. 125-138.

11. Burger M., Caffarelli L., Markowich P., Wolfram M.T. On a Boltzmann-type price formation model // Proc. R. Soc. A 2013. V. 469. No. 2157. 20130126.

Simulation of dynamics of multiparticle systems for kinetic model consideration

Mariya Korotchenko, PhD, Research Associate, Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS

Aleksandr Burmistrov, PhD, Research Associate, Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS

We consider four problems, three of which are not related to rarefied gas dynamics, but are described by the Boltzmann type equations. To solve these problems, we propose to use the integral equation of the second kind approach and the weight simulation of Markov chain, the latter is uniquely determined by the coefficients of the integral equations.

Keywords: Monte Carlo method, pair interactions, vehicular traffic flow, coagulation equation, price formation

УДК 512.554

О ГИПОТЕЗЕ ЛЕВОПРИМИТИВНОСТИ КОНЕЧНОГО ПОЛУПОЛЯ

Ольга Вадимовна Кравцова, к. ф.-м.н., доцент

Тел. 8 902 925 08 40, E-mail: ol71@bk.ru

Сибирский федеральный университет

<http://www.sfu-kras.ru>

Изучаются алгебраические свойства полуполя порядка 64 , представляющего один из двух известных контрпримеров к гипотезе Г. Вена о левопримитивности конечного полуполя. Описаны подполя, автоморфизмы, спектр, доказана однопорожденность мультипликативной лупы ненулевых элементов.

Ключевые слова: полуполе, спектр полуполя, левопримитивность, автоморфизм.

*Работа выполнена при финансовой поддержке
РФФИ, гранты 15-01-04897 А, 16-01-00707*



О.В. Кравцова

Конечным полуполем W называется конечное неассоциативное кольцо с единицей e , такое, что множество ненулевых элементов $W^* = W \setminus \{0\}$ является лупой по умножению. Полуполе является векторным пространством над ассоциативно-коммутативным центром и имеет порядок p^n , где p – простое число. Описание строения мультипликативной лупы W^* произвольного конечного полуполя W является открытой проблемой. В частности, если W – конечное поле, то W^* – циклическая группа. В 1991 году Г. Вена предположил, что мультипликативная лупа всякого конечного полуполя является либо левопримитивной, либо правопримитивной [1].