

Результаты работ по проектам РФФИ

Проект РФФИ № 13-01-00746-а “Разработка комплекса параллельно реализуемых весовых алгоритмов статистического моделирования для численного исследования течений химически реагирующих газов, включая процессы горения и образования наночастиц”.

Руководитель проекта – д.ф.-м.н. Рогазинский С.В.

Рассмотрен весовой алгоритм для приближенного решения нелинейного кинетического уравнения Больцмана. С целью уменьшения дисперсии оценки решения предложена весовая модификация с ветвлением и рандомизацией, эффективность которой подтверждена на примере численно-статистического решения задачи о релаксации смеси двух газов с сильно различающимися концентрациями. Получены новые результаты для задачи статистического моделирования траекторий ветвящихся процессов на гибридных суперкомпьютерах с графическими сопроцессорами (NVidia GPU). Предложен способ отображения соответствующих алгоритмов на архитектуру графических процессоров. Для решения пространственно неоднородных кинетических уравнений Больцмана с учетом химических реакций рассмотрен и апробирован на гибридных суперкомпьютерах с графическими сопроцессорами параллельный алгоритм статистического моделирования, в котором эффективно реализуется геометрия задачи. Разработан трехмерный параллельно реализуемый алгоритм метода Монте-Карло для моделирования развития электронных лавин в газе. Составными частями алгоритма являются специальные методы моделирования распределений, лексикографическая схема реализации “ветвления” траекторий, “рулетка”, обоснованное построение гистограммы и полигона частот и вычисление вероятностной погрешности оценок функционалов. Численные результаты, полученные для азота, удовлетворительно согласуются с опубликованными ранее теоретическими и экспериментальными данными. Получены формулы для выбора временного шага в алгоритме численного статистического моделирования переноса заряженных частиц под влиянием взаимодействий с частицами среды и внешнего силового поля. Критерием выбора является подходящая детерминированная погрешность статистических оценок изучаемых интегральных характеристик. Полученные теоретические результаты относятся к общей постановке такой задачи. Построена смещенная «оценка по столкновениям» для линейного функционала от решения линейного интегрального уравнения второго рода с заведомо конечной дисперсией на основе n -кратного итерационного весового метода для некоторого приближенного решения. Получены оценка нормы смещения и интегральное уравнение для второго момента построенной смещенной оценки. Рассмотрены три подхода к построению верхней границы статистической погрешности метода ПСМ для решения нелинейного уравнения Больцмана: 1) приближенные формулы для дисперсий оценок метода ПСМ, полученные на основе теории равновесной статистической физики; 2) асимптотические формулы для дисперсий оценок метода ПСМ с уменьшением размера ячеек при фиксированном полном числе частиц в области; 3) формулы для асимптотических доверительных интервалов для оценок метода ПСМ на основе центральной предельной теоремы для Марковских процессов. Проведен их теоретический и численный анализ. Построены весовые алгоритмы для оценки линейных функционалов от решения уравнения Смолуховского с линейными коэффициентами коагуляции,

зависящими от двух параметров. Предложены алгоритмы, позволяющие одновременно оценивать как функционалы для различных наборов параметров, так и параметрические производные. Разработаны ценностные алгоритмы и показана их эффективность для вычисления необходимых функционалов.