

МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО.

Упрощенный пример из аэродинамики разреженных газов

Рассмотрим следующую задачу о сопротивлении среды в аэродинамике разреженных газов. Пусть имеется тело с поверхностью, заданной уравнением $f(x, y, z) = 0$, с проекцией S на плоскость Oyz , а уравнение $x = g(y, z)$ описывает левую часть поверхности. Слева движется однородный поток частиц (параллельно оси Ox). При столкновении с поверхностью тела частица передает ему импульс, пропорциональный косинусу угла между направлением движения и нормалью к поверхности. Предполагается, что частицы не взаимодействуют между собой и не сталкиваются с телом более одного раза. Найдем силу потока частиц, действующего на тело, если на вертикальную границу единичной площади он действует с единичной силой.

Уравнение нормали к поверхности имеет вид

$$\vec{n} = \frac{\left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}\right)}{\sqrt{\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial z}\right)^2}},$$

а частицы движутся параллельно оси Ox . Получаем¹

$$F = \int_S \frac{-\frac{\partial f}{\partial x}(x, y, z) dy dz}{\sqrt{\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial z}\right)^2}(x, y, z)}, \quad x = g(y, z).$$

Пусть тело имеет форму шара единичного радиуса, его поверхность задана уравнением

$$x^2 + y^2 + z^2 = 1,$$

тогда

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 2x, \quad \frac{\partial f}{\partial y} = 2y, \quad \frac{\partial f}{\partial z} = 2z,$$

$$S = \{(y, z) : y^2 + z^2 \leq 1\}, \quad x = -\sqrt{1 - (y^2 + z^2)}.$$

¹Знак “минус” возникает в силу выбора направления нормали наружу тела, против движения частиц.

Получаем

$$F = \int_S \frac{-x dy dz}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = \int_{y^2 + z^2 \leq 1} \sqrt{1 - (y^2 + z^2)} dy dz = \frac{2\pi}{3} \approx 2,094$$

(половина объема единичного шара).

Пусть теперь тело имеет менее тривиальную форму и его поверхность задана уравнением

$$x^4 + y^4 + z^4 = 1$$

(между шаром и кубом $K = [-1, 1]^3$), тогда

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 4x^3, \quad \frac{\partial f}{\partial y} = 4y^3, \quad \frac{\partial f}{\partial z} = 4z^3, \\ S = \{(y, z) : y^4 + z^4 \leq 1\}, \quad x = -(1 - (y^4 + z^4))^{1/4}.$$

Получаем

$$F = \int_{y^4 + z^4 \leq 1} \frac{-x^3 dy dz}{\sqrt{x^6 + y^6 + z^6}} = \int_{y^4 + z^4 \leq 1} \frac{(1 - (y^4 + z^4))^{3/4} dy dz}{\sqrt{(1 - (y^4 + z^4))^{3/2} + y^6 + z^6}},$$

а такой интеграл в явном виде уже не берется. Однако его можно оценить с помощью метода Монте-Карло.

Обозначим подынтегральное выражение через $h(y, z)$ и отметим, что $0 \leq h(y, z) \leq 1$. Интеграл представляется как объем области

$$A = \{(y, z, w) : y^4 + z^4 \leq 1, 0 \leq w \leq h(y, z)\},$$

которую можно вложить в параллелепипед

$$\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1] \times [0, 1],$$

имеющий объем $|\Omega| = 4$. Тогда вероятность $P(A)$, бросая точку в Ω , попасть в A , равна $F/4$. Для оценки $P(A)$ можно бросать точки в Ω (на практике, с помощью генератора случайных чисел на компьютере) и считать долю $\hat{P}(A)$ точек, попавших в A . Тогда в качестве оценки F можно взять $\hat{F} = 4\hat{P}(A)$.

Таким образом, по набору случайных точек (Y_i, Z_i, W_i) , $1 \leq i \leq n$, из Ω , вычисляем

$$\hat{F} = \frac{4}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{I}\{Y_i^4 + Z_i^4 \leq 1, 0 \leq W_i \leq h(Y_i, Z_i)\}.$$

Приближение по 100000 точек дало результат $\hat{F} \approx 2,94$, что закономерно больше, чем у шара, и меньше, чем у куба K , для которого $F = 4$.

Другой подход, приводящий в пределе к тому же результату, заключается в использовании оценки

$$F^* = \frac{4}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{I}\{Y_i^4 + Z_i^4 \leq 1\} h(Y_i, Z_i)$$

по набору случайных точек (Y_i, Z_i) , $1 \leq i \leq n$, из $[-1, 1]^2$. Здесь можно сказать, что мы моделируем появления частиц с координатами (Y_i, Z_i) в плоскости Oyz , движущихся параллельно Ox , и суммируем импульсы, переданные телу теми частицами, которые попали по телу и не пролетели мимо (с точностью до нормирующего множителя).

Для определения точности и надежности полученных оценок интеграла нужны более тонкие вероятностно-статистические методы, можно использовать центральную предельную теорему.

Исходя из “правила трех сигм”, с надежностью 99,73% получаем асимптотическую точность оценки интеграла (при $n \rightarrow \infty$)

$$\hat{\delta} = 3\sqrt{\frac{F(4-F)}{n}}$$

в первом случае и

$$\delta^* = 3\sqrt{\frac{G - F^2}{n}}, \quad G = \int_S h^2(y, z) dy dz.$$

во втором. Далее в первом случае вместо F можно подставить $\hat{F}$, откуда получаем $\hat{\delta} \approx 5,3/\sqrt{n}$, а во втором нужно дополнительно оценить интеграл G .

В заключение отметим, что рассмотренная модель сопротивления среды была введена и изучалась еще самим Ньютоном в его книге “Математические начала натуральной философии” (1687). Ньютон решал следующую задачу: найти тело вращения (относительно оси Ox) заданной длины и ширины, испытывающее наименьшее сопротивление. При этом тело представляется симметричным относительно плоскости Oyz , длина тела — это его длина по оси вращения, ширина тела — радиус срединного сечения. Вопреки очевидности, оптимальным оказывается тело не заостренной и не обтекаемой формы, а с “затупленным” концом! На протяжении более 250 лет модель и вытекающий из нее результат казались

не соответствующими действительности, бесполезными, “заблуждениями гения”. Однако физические допущения Ньютона и сама его аэродинамическая задача оказались на самом переднем крае науки в середине 1950-х годов — в тот момент, когда настала эра сверхзвуковых и сверхвысотных летательных аппаратов, движущихся в достаточно разреженной среде².

ЛИТЕРАТУРА

Учебники по методам Монте-Карло:

1. *И. М. Соболев*. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973.
2. *Г. А. Михайлов, А. В. Войтишек*. Численное статистическое моделирование. Методы Монте-Карло. М.: Академия, 2006.

Некоторые статьи по методам Монте-Карло в механике:

1. *В. Е. Яницкий*. Применение стохастического процесса Пуассона для расчета столкновительной релаксации неравновесного газа // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1973, том 13, номер 2, 505–510.
2. *В. Е. Яницкий*. Применение процессов случайных блужданий для моделирования свободномолекулярного движения газа // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1974, том 14, номер 1, 259–262.
3. *О. М. Белоцерковский, В. Е. Яницкий*. Статистический метод частиц в ячейках для решения задач динамики разреженного газа. I. Основы построения метода // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1975, том 15, номер 5, 1195–1208.
4. *О. М. Белоцерковский, В. Е. Яницкий*. Статистический метод частиц в ячейках для решения задач динамики разреженного газа. II. Вычислительные аспекты метода // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1975, том 15, номер 6, 1553–1567.
5. *О. М. Белоцерковский, С. А. Иванов, В. Е. Яницкий*. Прямое статистическое моделирование некоторых задач турбулентности // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1998, том 38, номер 3, 489–503.
6. *О. М. Белоцерковский, Ю. И. Хлопков*. Методы Монте-Карло в прикладной математике и вычислительной аэродинамике // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 2006, том 46, номер 8, 1494–1518.
7. *О. М. Белоцерковский, В. А. Жаров, Т. Тун, Ю. И. Хлопков*. Моделирование турбулентного перехода в пограничном слое методом Монте-Карло // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 2009, том 49, номер 5, 923–928.

²Заключительный абзац по *Тихомиров В.М.* Рассказы о максимумах и минимумах. М.: МЦНМО, 2006. С. 68–82.