

Tt ed.

FORSCHUNG - AUSBILDUNG - WEITERBILDUNG

BERICHT NR. 11

SIMULATIONSMETHODEN ZUR LÖSUNG
DER BOLTZMANGLEICHUNG

H. Ploss
200 *

UNIVERSITÄT KAISERSLAUTERN
FACHBEREICH MATHEMATIK
ERWIN-SCHRÖDINGER-STRASSE
6750 KAISERSLAUTERN

AUGUST 1985

BERICHT ZUM DFG-PROJEKT (Ne 269/3-1)
"SIMULATIONSMETHODEN ZUR LÖSUNG
DER BOLTZMANNGLEICHUNG"

H. Ploss

1. Einleitung

Die Kontinuumsbehandlung eines Gasflusses ist nur begründet, solange sein kleinstes signifikantes Volumen eine genügend große Anzahl von Molekülen enthält um sinnvolle Mittelwerte zur Bestimmung makroskopischer Größen wie Dichte, Druck oder Temperatur bilden zu können. Wenn man die Knudsenzahl K_n mittels

$$K_n = \frac{\lambda}{D} = \frac{\text{mittlere freie Weglänge eines Moleküls}}{\text{charakteristische Dimension des Gasflusses}}$$

eingeführt, kann $K_n \ll 1$ als Bedingung für die Gültigkeit der Kontinuumsbeschreibung angesehen werden. Bei sehr großen Knudsenzahlen nähert man sich andererseits dem freien Molekülfluß (collisionless or free molecule limit). Im dazwischenliegenden Übergangsbereich (transition regime) - die mittlere freie Weglänge sei also weder sehr klein noch sehr groß verglichen mit der charakteristischen Ausdehnung des Gasflusses - wird das Verhalten eines Gases mit Hilfe der Boltzmann-Gleichung beschrieben. Ein gasdynamisches Problem kann in den Übergangsbereich fallen, wenn entweder eine geringe Dichte (rarefied gas) oder eine kleine charakteristische Dimension vorliegt. Meistens tritt der erste Fall ein und eine typische Anwendung wäre die Aerodynamik in der äußeren Atmosphäre. Auf den zweiten Fall stößt man z.B. beim Studium der inneren Struktur von Stoßwellen. Die enormen mathematischen Schwierigkeiten, die mit der vollen Boltzmann-Gleichung verknüpft sind, zwingen schon bei einfachsten Problemstellungen zu Näherungen und speziellen Annahmen. In der Literatur ausführlich behandelt werden die

Momentenmethode
Chapman-Enskog-Theorie
und die Methode der
Modellgleichungen
(BGK-GL).

Zur Produktion endgültiger
Resultate müssen in den meisten
Fällen noch zusätzlich numerische
Verfahren herangezogen werden.

Auch direkte numerische Verfahren zur Lösung der Boltzmann-gleichung, wie endliche Differenzenformulierung, werden angewendet.

Die Nachteile dieser Verfahren, die in unkontrollierbaren Näherungen und/oder enormem Rechenaufwand liegen, sind so schwerwiegend, daß die Suche nach neuen alternativen Methoden wohlbegründet war. Durch immer leistungsfähigere Rechenmaschinen wurde es möglich, Simulationsverfahren, die das Verhalten der Gase stochastisch "nachspielen", zu entwickeln. Dies wurde zuerst von G.A. Bird ([1], [2]) in den 60-er Jahren realisiert, und er nannte sein Verfahren "direct Monte Carlo simulation method". Dieser Birdalgorithmus wird bei Ingenieuraufgaben immer noch fast ausschließlich verwendet [3], obwohl Koura [4] 1970, Belotserkovskiy-Yanitzkiy [5] 1975, Deshpande [6] 1978 und Nanbu [7] 1980 theoretisch besser begründete Alternativen präsentierten. Der Grund liegt darin, daß das Birdverfahren gute Resultate im Vergleich mit Experimenten liefert und vom Rechenaufwand her seinen Konkurrenten weit überlegen ist. Der Rechenaufwand spielt bei diesen Simulationsrechnungen eine entscheidende Rolle und kompliziertere Probleme konnten bisher nur mit dem Birdverfahren gerechnet werden. Nanbu selbst greift in seiner neuesten Arbeit [8] auf den Birdalgorithmus zurück. Es ist uns nun gelungen, eine Variante zum Nanbualgorithmus zu finden, die von der Rechenzeit her mit dem Birdalgorithmus vergleichbar ist und den Vorteil hat, theoretisch besser handhabbar zu sein.

Wir werden hier den Birdalgorithmus, den Nanbualgorithmus und den modifizierten Nanbualgorithmus darstellen. Dabei folgen wir teilweise Neunzert [9]. Anhand von zwei Beispielen werden dann die Verfahren miteinander verglichen.

2. Grundlagen

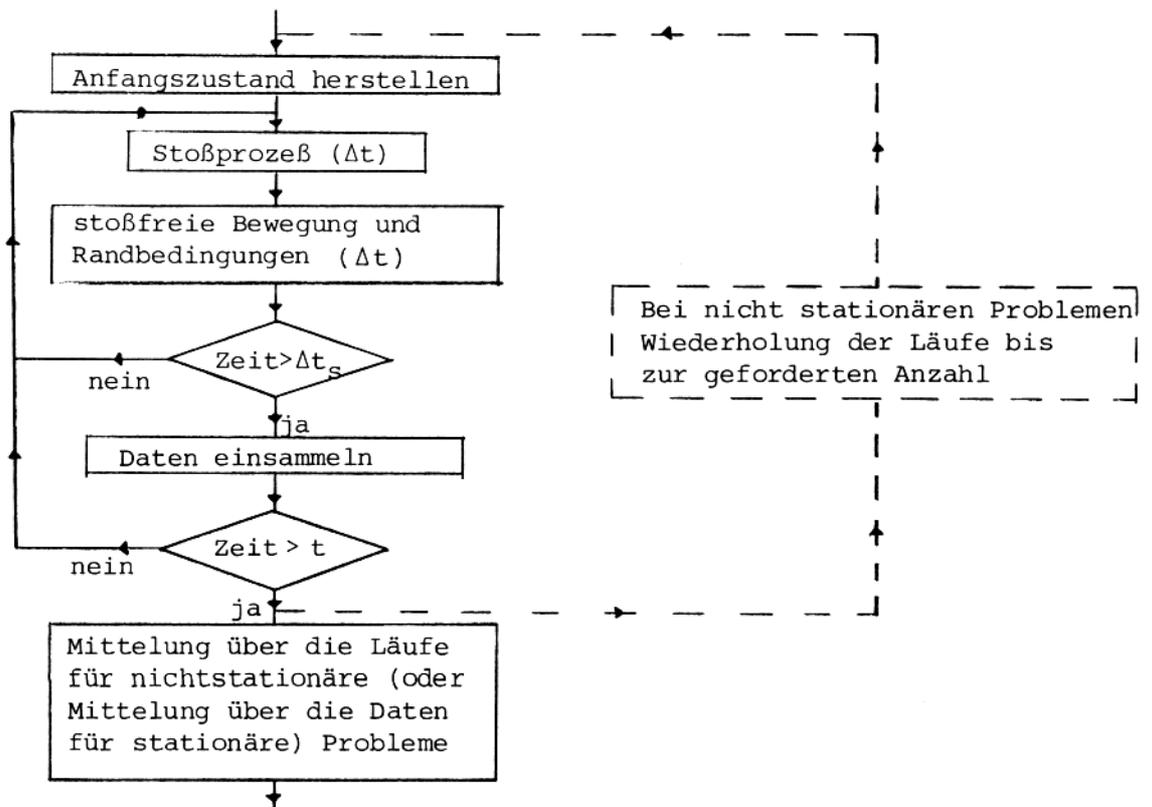
Die folgende auf Bird zurückgehende Vorgangsweise ist für das praktische Vorgehen bei Simulationsverfahren charakteristisch. Die simulierte Region des physikalischen Raumes wird in Zellen eingeteilt, deren Durchmesser so gewählt sind, daß innerhalb jeder Zelle der Gasfluß als nahezu homogen betrachtet werden kann. Das reale Gas wird repräsentiert durch einige tausend Testteilchen, die zu Beginn gemäß einer Anfangsbedingung verteilt sind. Eine dem Zeitintervall Δt , welches klein im Vergleich zur mittleren freien Stoßzeit eines Teilchens sein soll, entsprechende Menge von Stößen wird berechnet, und die Geschwindigkeiten der betroffenen Teilchen werden mit Hilfe des verwendeten Stoßmodells geändert. Dabei werden alle Teilchen, die innerhalb einer Zelle sind, ungeachtet ihrer relativen Positionen, als mögliche Stoßpartner betrachtet. Dann werden die Teilchen gemäß ihrer Geschwindigkeiten stoßfrei über das Zeitintervall Δt bewegt. Randbedingungen - etwa das Auftreffen der Teilchen auf feste Körper - werden geeignet berücksichtigt. Dieser Entkopplungsvorgang

(i) Stoßprozeß

(ii) stoßfreie molekulare Bewegung

wird fortlaufend wiederholt. Zu vorgegebenen Zeiten $\Delta t_s = k \cdot \Delta t$ werden die Daten eingesammelt. Nach Bird kann man folgendes schematisches Flußdiagramm für das Verfahren angeben:

Fig. 1



In [2] (p. 123) diskutiert Bird mögliche Interpretationen der Simulationsmethode. So kann jedes Testteilchen als Repräsentant vieler "realer Teilchen" angesehen werden, oder man betrachtet einen der Menge der Testteilchen entsprechenden schmalen Ausschnitt des Gasflusses, wobei letztere Interpretation bei dreidimensionalen Simulationen nicht mehr möglich ist.

Bird entwickelte sein Verfahren auf Grund physikalischer Überlegungen, und seine Intention ist mehr auf die Lösung von Ingenieurproblemen als auf eine mathematische Fundierung seines Algorithmus gerichtet. Die Bestätigung für seine Vorgangsweise holt sich Bird durch den Vergleich seiner Resultate mit experimentellen Messungen ([10], [2]). Dieser Standpunkt ist für einen Ingenieur sicher legitim, doch von mathematischer Seite ist man am Zusammenhang der Simulationsverfahren mit der Boltzmann-Gleichung interessiert.

Wir schreiben die Boltzmann-Gleichung in der Form

$$(1) \quad \frac{\partial f}{\partial t} + \langle v, \text{grad}_x f \rangle = J f$$

mit

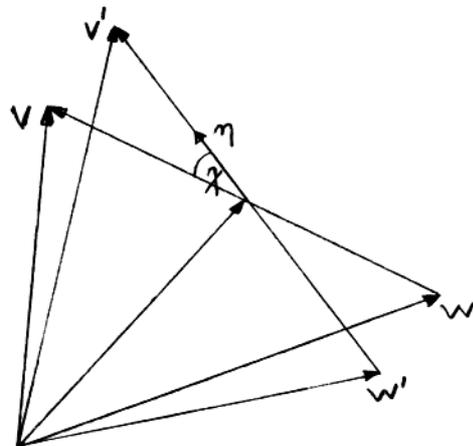
$$Jf(t, x, v) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} \{ f(t, x, v') f(t, x, w') - f(t, x, v) f(t, x, w) \} \cdot \sigma(\eta, g) g \, d\omega \, dw$$

$\sigma(\eta, g)$ ist der differentielle Wirkungsquerschnitt, $g = \|v - w\|$

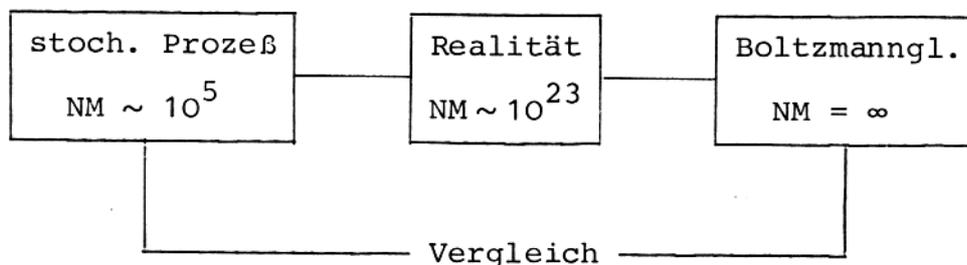
$$v' = \frac{1}{2}[(v+w) + g\eta]$$

Fig. 2

$$w' = \frac{1}{2}[(v+w) - g\eta]$$



Die Grundidee der Simulationsmethode kann man nun so formulieren: Man konstruiere einen stochastischen Prozeß für ein NM-Teilchensystem derart, daß die NM-Teilchenverteilung zur Zeit t "nahe" bei der Lösung $f(t, \cdot, \cdot)$ der Boltzmann-Gleichung ist.



Entkopplung von Stoßprozeß und freier molekularer Bewegung über den Zeitschritt Δt :

Mit (1) können wir

$$\int_0^{\Delta t} (f_t + \langle v, \text{grad}_x f \rangle)(t, x+tv, v) dt = \int_0^{\Delta t} Jf(t, x+tv, v) dt \approx \Delta t Jf(0, x, v)$$

schreiben. Die linke Seite läßt sich berechnen.

$$\begin{aligned} \int_0^{\Delta t} (f_t + \langle v, \text{grad}_x f \rangle)(t, x+tv, v) dt &= \int_0^{\Delta t} \frac{d}{dt} f(t, x+tv, v) dt \\ &= f(\Delta t, x+\Delta tv, v) - f(0, x, v). \end{aligned}$$

Dann folgt

$$f(\Delta t, x, v) \approx f(0, x-\Delta tv, v) + \Delta t Jf(0, x-\Delta tv, v).$$

Und mit

$$Tf(\cdot, x, v) := f(\cdot, x-\Delta tv, v)$$

erhalten wir

$$f(\Delta t, x, v) \approx T(1+\Delta t J)f(0, x, v).$$

Um also $f(\Delta t, x, v)$ zu berechnen, geht man in mehreren Schritten vor.

Der Ortsraum ist in Zellen eingeteilt,

$$f_C(0, x, v) := \begin{cases} f(0, x, v) & x \in C \\ 0 & x \notin C \end{cases} \quad \text{für jede Zelle } C.$$

Die Größe der Zellen wird so gewählt, daß räumliche Homogenität

in jeder Zelle angenommen werden kann:

$x \mapsto f_C(0, x, v)$ ist konstant.

$f_C(0, v) := f_C(0, x, v)$ für jede Zelle C

(i) Man berechne

$$\tilde{f}_C(\Delta t, v) = (1 + \Delta t J) f_C(0, v) \quad \text{für jede Zelle C (Stoßprozeß)}$$

Das ist eine Zeitschrittapproximation für die räumlich homogene Boltzmann-Gleichung. Damit wird die Änderung der Geschwindigkeiten während des Zeitintervalls Δt beschrieben.

$$\tilde{f}(\Delta t, x, v) := \sum_{\text{Zellen}} (1 + \Delta t J) f_C(0, v)$$

(ii) $f(\Delta t, x, v) \approx T\tilde{f}(\Delta t, x, v) = \tilde{f}(\Delta t, x - \Delta t v, v)$ (stoßfreie Bewegung)

Bemerkung: Bei der Simulation mit einem NM-Teilchensystem werden während des Stoßprozesses die Positionen der Teilchen innerhalb einer Zelle "vergessen". Bei der nachfolgenden freien Strömung "erinnert" man sich wieder daran.

Mit Ausnahme des Schemas von Belotserkovskiy-Yanitskiy (B-Y-Schema), das eine Random-Walk-Methode benützt, wird die stoßfreie Bewegung bei allen Verfahren gleich gehandhabt: Alle Testteilchen werden auf Grund ihrer Geschwindigkeiten um $\Delta t \cdot v$ verschoben. Unterschiedliche Vorgangsweisen findet man bei der Behandlung des Stoßprozesses.

Wir klären jetzt noch einige im folgenden verwendete Schreibweisen.

2.1 Notationen

Die Verteilungsfunktion f sei so normiert, daß

$$\int_{\text{Zelle}} \int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, v) dv dx = N_C = \text{Anzahl der Teilchen in der Zelle C zur Zeit } t \text{ gilt.}$$

$$\left(\sum_{\text{Zellen}} N_C = NM \right)$$

Dann folgt

$$\int_{\mathbb{R}^3} f_C(O, v) dv = \frac{N_C}{V_C} =: n_C$$

mit V_C als dem Volumen der Zelle und n_C der Anzahldichte in der Zelle.

Wir unterdrücken ab nun den Index C.

Damit gilt

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{n} f(O, v) dv = 1; \quad \text{d.h.} \quad \frac{1}{n} f(O, v) \quad \text{ist die Wahrscheinlichkeitsdichte im Geschwindigkeitsraum.}$$

Wir werden Wahrscheinlichkeit oft mit W . abkürzen; W .-Dichte bedeute Wahrscheinlichkeitsdichte, usw.

$\sigma(\eta, g)$ bezeichne den differentiellen,

$$\sigma_\tau(g) = \int_{S^2} \sigma(\eta, g) d\omega(\eta) \quad \text{den totalen Wirkungsquerschnitt für } g.$$

Bei Zentralkräften zwischen den Teilchen gilt

$$\sigma_\tau(g) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sigma(\chi, g) \sin \chi d\chi d\epsilon = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\chi, g) \sin \chi d\chi .$$

$$\chi = \angle(v-w, v'-w'), \quad \text{vgl. Fig. 2.}$$

Die im folgenden angeführten Größen sind als Erwartungswerte, und das Zeitintervall Δt ist klein gegenüber der mittleren freien Stoßzeit eines Teilchens zu verstehen.

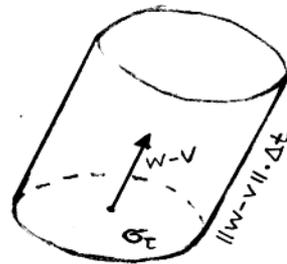
$f(O, v) dv$ ist die Anzahl der Teilchen mit Geschwindigkeiten zwischen v und $v+dv$ pro Volumen.

Dann ist

Fig. 3

$$f(O, v) dv \sigma_\tau(\|w-v\|) \|w-v\| \Delta t$$

die Anzahl der Stöße eines Teilchens der Geschwindigkeit w mit " v -Teilchen" im Zeitintervall Δt ;



$$(2) \quad q(A, w) := \int_{\mathbb{R}^3} f(O, v) \int_{ANS_{w, v}} \sigma(\eta, \|w-v\|) \|w-v\| d\omega(\eta) dv$$

die Anzahl der Stöße eines "w-Teilchens" pro Zeit, bei denen die Geschwindigkeit nach dem Stoß in $A \subseteq \mathbb{R}^3$ liegt, wenn $S_{w,v}$ die Sphäre mit Mittelpunkt $\frac{1}{2}(w+v)$ und Radius $\frac{1}{2}\|w-v\|$ bezeichne (vgl. Fig. 2); und

$$(3) \quad q(w) := q(\mathbb{R}^3, w) = \int_{\mathbb{R}^3} f(O, v) \sigma_{\tau}(\|w-v\|) \|w-v\| dv$$

die Anzahl der Stöße eines "w-Teilchens" pro Zeit.

Für die Anzahl der Stöße pro Volumen und Zeit erhalten wir

$$\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} q(w) f(O, w) dw.$$

Der Symmetriefaktor $\frac{1}{2}$ ist notwendig, um die Stöße nicht doppelt zu zählen.

Die Gesamtzahl der Stöße in der Zelle während Δt ergibt sich zu

$$\begin{aligned} N_S &= \Delta t \frac{V}{2} \int_{\mathbb{R}^3} q(w) f(O, w) dw \\ &= \Delta t \frac{V}{2} n^2 \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \sigma_{\tau}(\|w-v\|) \cdot \|w-v\| \cdot \frac{1}{n} f(O, v) \cdot \frac{1}{n} f(O, w) dv dw. \end{aligned}$$

Mit $g = \|w-v\|$ und $\overline{\sigma_{\tau}(g)g} := \frac{1}{n^2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \sigma_{\tau}(g) g f(O, v) f(O, w) dv dw$

als dem Mittelwert von $\sigma_{\tau}(g)g$ bezüglich der Verteilung $\frac{1}{n^2} f(O, v) f(O, w)$ können wir

$$(4) \quad N_S = \Delta t \frac{V}{2} n^2 \overline{\sigma_{\tau}(g)g} \quad \text{schreiben.}$$

$$(5) \quad \Delta t_C := \frac{\Delta t}{N_S} = \frac{2}{nN \overline{\sigma_{\tau}(g)g}} \quad \text{nennen wir die mittlere freie Zeit zwischen zwei Stößen;}$$

während die mittlere freie Stoßzeit eines Teilchens

$$(6) \quad T_{\text{frei}} = \frac{1}{n \overline{\sigma_{\tau}(g)g}} \quad \text{ist.}$$

Wenn wir $f(O, v)$ durch $\frac{n}{N} \sum_{j=1}^N \delta(v-v_j)$ approximieren, erhalten wir

als Näherungen

$$\begin{aligned} \overline{\sigma_{\tau}(g)g} &\approx \frac{1}{n^2} \frac{n^2}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \sigma_{\tau}(g) g \delta(v-v_i) \delta(w-v_j) dv dw \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N \sigma_{\tau}(g_{ij}) g_{ij} \quad \text{mit } g_{ij} = \|v_i - v_j\| ; \end{aligned}$$

$$(4') \quad N_S \approx \Delta t \cdot \frac{N \cdot n}{2} \left(\frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N \sigma_{\tau}(g_{ij}) g_{ij} \right) ;$$

$$(5') \quad \Delta t_C \approx \frac{2}{nN \left(\frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N \sigma_{\tau}(g_{ij}) g_{ij} \right)} ;$$

$$(2') \quad q(A, v_i) \approx \frac{n}{N} \sum_{j=1}^N \int_{A \cap S_{v_i, v_j}} \sigma(n, g_{ij}) g_{ij} d\omega(n) \quad \text{und}$$

$$(3') \quad q(v_i) \approx \frac{n}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_{\tau}(g_{ij}) g_{ij} .$$

3. Der Stoßprozeß in einer Zelle

Von entscheidender Bedeutung für die Simulationsmethode ist die Realisierung des Stoßprozesses in einer Zelle. Darin unterscheiden sich auch die einzelnen Verfahren.

Zuerst approximiere man $f(0, v)$ durch $\frac{n}{N} \sum_{j=1}^N \delta(v-v_j)$.

Dabei ist (v_1, \dots, v_N) eine Stichprobe für die W.-Dichte $\frac{1}{n} f(0, v)$, und gibt die Anfangsgeschwindigkeiten für die N Testteilchen wieder. Die Aufgabe ist nun, ein stochastisches Spiel zu konstruieren, das (v_1, \dots, v_N) in $(v_1(\Delta t), \dots, v_N(\Delta t))$ überführt, so daß $\frac{n}{N} \sum_{j=1}^N \delta(v-v_j(\Delta t))$ eine Approximation für $\tilde{f}(\Delta t, v)$ ist.

3.1 Zum Stoßprozeß nach Bird

Bei N Teilchen in der Zelle haben wir $\binom{N}{2}$ mögliche Stoßpaare. Unter der Bedingung, daß ein Stoß stattfindet, setzt Bird die Wahrscheinlichkeit $p_{ij}^{(0)}$ für einen Stoß des i -ten Teilchens mit

dem j-ten Teilchen proportional zu $\sigma_{\tau}(g_{ij})g_{ij}$ mit $g_{ij} = \|v_i - v_j\|$ an:

$$p_{ij}^{(0)} = k \sigma_{\tau}(g_{ij})g_{ij}$$

Aus $\sum_{1 \leq i < j \leq N} p_{ij}^{(0)} = 1$ folgt $k = \frac{1}{\sum_{1 \leq i < j \leq N} \sigma_{\tau}(g_{ij})g_{ij}}$

und damit $p_{ij}^{(0)} = \frac{\sigma_{\tau}(g_{ij})g_{ij}}{\sum_{1 \leq i < j \leq N} \sigma_{\tau}(g_{ij})g_{ij}}$.

Die Auswahl eines Stoßpaares (ℓ, m) - d.h. von zwei Teilchen mit den Geschwindigkeiten v_{ℓ} bzw. v_m - von der W.-Verteilung $\{p_{ij}^{(0)}; 1 \leq i < j \leq N\}$ kann durch eine acceptance-rejection Methode realisiert werden. Man bestimme

$$g^* \geq (\sigma_{\tau}(g)g)_{\max} := \max\{\sigma_{\tau}(g_{ij})g_{ij}; 1 \leq i < j \leq N\},$$

generiere eine auf $[0,1]$ gleichverteilte Zufallszahl R_f und akzeptiere ein zufällig herausgegriffenes Paar (ℓ, m) , wenn

$$\frac{\sigma_{\tau}(g_{\ell m})g_{\ell m}}{g^*} \geq R_f \quad \text{erfüllt ist;}$$

andernfalls wiederhole man den Vorgang mit einem neuen R_f , bis ein Stoßpaar gefunden ist. Wenn (ℓ, m) ein akzeptiertes Stoßpaar ist, so werden die Geschwindigkeiten gemäß dem verwendeten Stoßmodell ersetzt:

$$\begin{cases} v_{\ell} \rightarrow v'_{\ell} \\ v_m \rightarrow v'_m \end{cases}$$

Nun sind wieder alle Relativgeschwindigkeiten und damit eine neue Verteilung $\{p_{ij}^{(1)}; 1 \leq i < j \leq N\}$ bekannt, und der Vorgang kann wiederholt werden.

Während des Zeitschritts Δt ereignen sich im Mittel N_S Stöße. Bird bestimmt nun N_S nicht nach Formel (4') - es müßten $\binom{N}{2}$ Terme $\sigma_{\tau}(g_{ij})g_{ij}$ berechnet werden (N^2 -Aufwand) - sondern erhält ein \tilde{N}_S durch die Bedingung

$$(7) \quad \begin{cases} \tau_1 + \tau_2 + \dots + \tau_{\tilde{N}_S - 1} < \Delta t \\ \tau_1 + \tau_2 + \dots + \tau_{\tilde{N}_S - 1} + \tau_{\tilde{N}_S} \geq \Delta t \quad ; \text{ wobei} \end{cases}$$

$$\tau_k := \frac{2}{nN\sigma_\tau(g_{rs})g_{rs}} \text{ , wenn } (r,s) \text{ das } k\text{-te akzeptierte Stoßpaar ist.}$$

(Man vergleiche den Ausdruck für τ_k mit der Formel (5) für Δt_C .)

Die $\tau_1, \dots, \tau_{\tilde{N}_S}$ sind Realisierungen von Zufallsvariablen $T_1, \dots, T_{\tilde{N}_S}$

mit folgender W.-Verteilung:

$$P\{T_k = \frac{2}{nN\sigma_\tau(g_{ij})g_{ij}}\} = p_{ij}^{(k-1)} \text{ , } 1 \leq i \leq j < N; 1 \leq k \leq \tilde{N}_S$$

Damit ergibt sich für den Erwartungswert von T_1 , wenn man

$$\binom{N}{2} \approx \frac{N^2}{2} \text{ , } g_{ij} = g_{ji} \text{ und } g_{jj} = 0 \text{ beachtet}$$

$$E[T_1] = \sum_{1 \leq i < j \leq N} \left[\frac{2}{nN\sigma_\tau(g_{ij})g_{ij}} \frac{\sigma_\tau(g_{ij})g_{ij}}{\sum_{1 \leq i < j \leq N} \sigma_\tau(g_{ij})g_{ij}} \right]$$

$$\approx \frac{2}{nN \left(\frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N \sigma_\tau(g_{ij})g_{ij} \right)} \approx \Delta t_C \quad [\text{vgl. (5')}]$$

Wenn $\Delta t \ll T_{\text{frei}}$ ist, finden nur wenig Stöße - im Vergleich zur Anzahl N der Teilchen - innerhalb eines Entkopplungsintervalls Δt statt, und man kann annehmen, daß die Erwartungswerte der T_k 's nur wenig verschieden sind. (Es läuft darauf hinaus, daß sich

$\sum_{1 \leq i < j \leq N} \sigma_\tau(g_{ij})g_{ij}$ durch Stöße der Teilchen nur wenig ändert -

$\sum_{1 \leq i < j \leq N} g_{ij}^2$ ist diesbezüglich sogar eine Erhaltungsgröße):

$$(8) \quad E[T_k] \approx E[T_1] \approx \Delta t_C \quad \text{für } 1 \leq k \leq \tilde{N}_S$$

Einerseits gilt nun nach (7) $\Delta t \approx \frac{\tau_1 + \dots + \tau_{\tilde{N}_S}}{\tilde{N}_S} \cdot \tilde{N}_S$;

andererseits gilt nach (5) $\Delta t = \Delta t_C \cdot N_S$.

Also wird N_S durch \tilde{N}_S gut approximiert, wenn

$$\Delta t_C \approx \frac{\tau_1 + \dots + \tau_{\tilde{N}_S}}{\tilde{N}_S}$$

gilt.

Nach (8) ist aber diese Bedingung erfüllt, wenn der Mittelwert der freien Zeit zwischen zwei Stößen in Bezug auf die tatsächlich berechneten Stöße nahe beim Erwartungswert für die Zeit zwischen zwei Stößen ist.

Der N^2 -Aufwand, den Bird hiermit umgeht, tritt implizit bereits bei der Auswahl eines Stoßpaares auf. Denn bei der Bestimmung von $(\sigma_\tau(g)g)_{\max}$ müssten $\binom{N}{2}$ Terme $\sigma_\tau(g_{ij})g_{ij}$ berechnet werden und $(\sigma_\tau(g)g)_{\max}$ kann sich sogar bei jedem durchgeführten Stoß ändern. Bird vermeidet den N^2 -Aufwand auch hier, indem er ein geschätztes g^* vorgibt, und falls während des Programmablaufs ein $\sigma_\tau(g)g > g^*$ auftauchen sollte, ersetzt dieser Wert g^* usw.. Wenn nun g^* zu groß gewählt wird, steigert dies den Aufwand beträchtlich, ein zu kleines g^* hingegen ist eine Fehlerquelle bezüglich der Auswahl eines Stoßpaares. Die Praktiker allerdings meinen [3], daß bei jedem Simulationsproblem ein geeignetes g^* während einer Adjustierungsperiode schnell gefunden wird.

Zusammenfassend können wir nun den Stoßalgorithmus nach Bird wie folgt beschreiben:

3.2 Der Birdalgorithmus

(1) Auswahl eines Stoßpaares:

Man generiere eine Zufallszahl R_f und akzeptiere ein zufällig ausgewähltes Paar (ℓ, m) als Stoßpaar, wenn

$$\frac{\sigma_\tau(g_{\ell m})g_{\ell m}}{g^*} \geq R_f \quad \text{erfüllt wird.}$$

Andernfalls wiederhole man den Auswahlvorgang.

(2) Vorrückung des Zeitzählers.

(ℓ, m) sei ein akzeptiertes Paar. Dann wird der Zeitzähler um den Betrag

$$\tau_1 = \frac{2}{nN\sigma_\tau (g_{\ell m}) g_{\ell m}}$$

vorgerückt.

(3) Änderung der Geschwindigkeiten der stoßenden Teilchen.

$$\begin{cases} v_\ell \mapsto v'_\ell = \frac{1}{2}[(v_\ell + v_m) - \eta \cdot g_{\ell m}] \\ v_m \mapsto v'_m = \frac{1}{2}[(v_\ell + v_m) + \eta \cdot g_{\ell m}] \end{cases}$$

mit $\eta \in S^2$ gemäß einer dem verwendeten Stoßmodell entsprechenden Verteilung gewählt. Beim Hartkugelmodell z.B. ist η gleichmäßig auf der Einheitssphäre verteilt.

(4) Die Schritte (1) - (3) werden wiederholt bis die Bedingung

$$\tau_1 + \tau_2 + \dots + \tau_{\tilde{N}_S} \geq \Delta t \quad \text{erfüllt ist.}$$

Dieser Algorithmus ist von Bird nur heuristisch begründet. Zudem wird der lineare Aufwand in der Teilchenzahl N durch Näherungen erkauft, deren Auswirkungen nur schwer zu überschauen sind. Allerdings sind bereits etwas kompliziertere Probleme nur auf Grund dieses linearen Aufwands überhaupt rechenbar, und das Birdverfahren bringt Resultate, die in sehr guter Übereinstimmung mit gemessenen Daten liegen. Nur ein solcher Vergleich ist möglich, denn bei den allermeisten Problemen gibt es keine Hoffnung auf eine analytische Lösung der Boltzmanngleichung.

Bemerkung: Beim Studium von Bird's Buch [2] bekommt man den Eindruck, daß ihn in entscheidendem Maße auch die Absicht, jeden N^2 -Aufwand zu vermeiden, zu seinem Algorithmus führte. Wie wichtig der lineare Aufwand ist, wurde schon betont. Zudem aber erhält sein Verfahren einen interessanten "dynamischen Charakter", und wir neigen zur Ansicht, daß insbesondere bei verhältnismäßig großem Δt N_S eher eine Näherung an \tilde{N}_S ist als umgekehrt. In diesem Zusammenhang ist folgender Hinweis interessant:

Nambu stuft in [11] den Birdalgorithmus als eine Näherung an den Stoßalgorithmus des B-Y-Schemas ein. Sznitman konstruiert in [12] einen stochastischen Prozeß für ein N -Teilchensystem, dessen Realisierung dem Stoßalgorithmus des B-Y-Schemas entspricht und dessen W.-Verteilung mit $N \rightarrow \infty$ gegen eine W.-Verteilung konvergiert, deren Dichte Lösung der homogenen Boltzmanngleichung ist.

3.3 Die Herleitung von K. Nanbu

Im Unterschied zur intuitiven Vorgangsweise bei Bird wird hier versucht, ein Simulationsschema für den Stoßprozeß aus der homogenen Boltzmann-Gleichung abzuleiten. Wir verweisen auf die Originalarbeit von Nanbu [7] und skizzieren hier nur die Vorgangsweise. Um

$$(9) \quad \tilde{f}(\Delta t, v) = (1 + \Delta t J) f(0, v) \quad \text{mit} \quad f(0, v) = \frac{n}{N} \sum_{j=1}^N \delta(v - v_j)$$

zu erhalten, wird formal

$$J \left(\frac{n}{N} \sum_{j=1}^N \delta(v - v_j) \right) = \frac{n^2}{N^2} \sum_{i,j=1}^N \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} \sigma(\eta, g) g [\delta(v' - v_i) \delta(w' - v_j) - \delta(v - v_i) \delta(w - v_j)] \cdot d\omega(\eta) d\omega =: \frac{n^2}{N^2} \sum_{i,j=1}^N (S_{ij} - T_{ij}) \quad \text{berechnet.}$$

Der Verlustterm $\frac{n^2}{N^2} \sum_{i,j=1}^N T_{ij}$ läßt sich einfach umformen:

$$T_{ij} = \sigma_\tau(g_{ij}) g_{ij} \delta(v - v_i) \quad \text{mit} \quad g_{ij} = \|v_i - v_j\|.$$

Um den Gewinnterm $\frac{n^2}{N^2} \sum_{i,j=1}^N S_{ij}$ zu berechnen, wird

$$\delta(v) \quad \text{durch} \quad \frac{1}{(\pi\epsilon)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{1}{\epsilon} \|v\|^2} \quad \text{approximiert.}$$

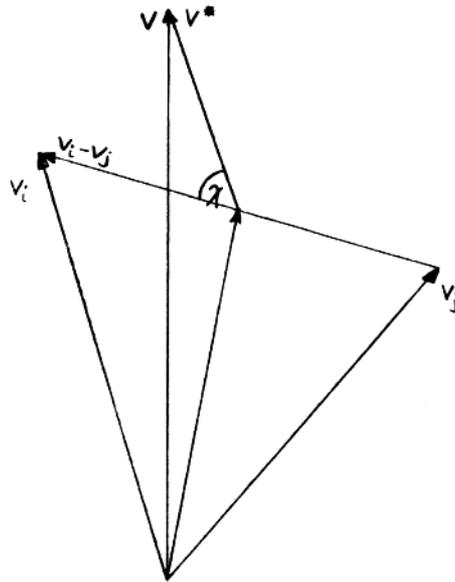
$$S_{ij}^\epsilon := \frac{1}{(\pi\epsilon)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} e^{-\frac{1}{\epsilon} [\|v' - v_i\|^2 + \|w' - v_j\|^2]} \sigma(\eta, g) g \, d\omega(\eta) d\omega.$$

Dieser Ausdruck kann geeignet umgeformt und mit Hilfe einer Sattelpunktmethode der $\lim_{\epsilon \rightarrow 0}$ durchgeführt werden. Man erhält

$$S_{ij} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} S_{ij}^\epsilon = \frac{4}{g_{ij}} \delta(\|v^*\| - \frac{1}{2}g_{ij}) \sigma(\chi, g_{ij})$$

mit $v^* = v - \frac{1}{2}(v_i + v_j)$ und $\chi = \kappa((v_i - v_j), v^*)$.

Fig. 4



Das heißt, der Beitrag, den S_{ij} liefert, ist auf einer Sphäre mit Mittelpunkt $\frac{1}{2}(v_i + v_j)$ und Radius $\frac{1}{2}g_{ij}$ konzentriert. Die Flächendichte wird von $\sigma(\chi, g_{ij})$ und damit vom verwendeten Stoßmodell bestimmt.

Einsammeln der Terme und einsetzen in (9) ergibt:

$$\tilde{f}(\Delta t, v) = \frac{n}{N} \sum_{i=1}^N [(1-P_i) \delta(v-v_i) + Q_i] \quad \text{mit}$$

$$P_i = \Delta t \frac{n}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_{\tau}(g_{ij}) g_{ij}$$

$$Q_i(v) = \Delta t \frac{4n}{N} \sum_{j \neq i} \frac{1}{g_{ij}} \delta(\|v^*\| - \frac{1}{2}g_{ij}) \sigma(\chi, g_{ij}) =: \sum_{j \neq i} Q_{ij}(v)$$

Indem man Polarkoordinaten mit der Richtung von $v_i - v_j$ als Achse einführt, $dv = dv^*$ beachtet und $\|v^*\| = r$ setzt, erhält man

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} Q_i(v) dv &= \Delta t \frac{4n}{N} \sum_{j \neq i} \int_0^{\infty} \int_{S^2} \frac{1}{g_{ij}} \delta(r - \frac{1}{2}g_{ij}) \sigma(\chi, g_{ij}) r^2 \sin \chi \, d\chi d\epsilon dr \\ &= \Delta t \frac{n}{N} \sum_{j=1}^N \int_{S^2} g_{ij} \sigma(\chi, g_{ij}) \sin \chi \, d\chi d\epsilon \\ (10) \quad &= \Delta t \frac{n}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_{\tau}(g_{ij}) g_{ij} = P_i \end{aligned}$$

und damit

$$\int_{\mathbb{R}^3} [(1-P_i) \delta(v-v_i) + Q_i(v)] dv = 1 \quad \text{für } i=1, \dots, N.$$

Daraus folgt, daß $\frac{1}{n} \tilde{f}(\Delta t, v)$ eine W.-Dichte ist und eine W.-Verteilung definiert, nach der v den Wert v_i mit W. $\frac{1}{N}(1-P_i)$ annehmen kann. Daher kann man $1-P_i$ als W. dafür auffassen, daß das i -te Teilchen während des Zeitintervalls Δt nicht gestoßen hat. Umgekehrt ist dann P_i die W. für einen Stoß des i -ten Teilchens.

$$P_i = \sum_{j=1}^N P_{ij} \quad \text{mit} \quad P_{ij} = \Delta t \frac{n}{N} \sigma_{\tau}(g_{ij}) g_{ij}$$

Wir können nun weiters P_{ij} als die W. für einen Stoß zwischen dem i -ten und dem j -ten Teilchen interpretieren.

$$P_{ij} = \int_{S^2} \Delta t \frac{n}{N} \sigma(\chi, g_{ij}) g_{ij} \sin \chi \, d\chi \, d\epsilon$$

Daher ist

$$\frac{\Delta t \frac{n}{N} \sigma(\chi, g_{ij}) g_{ij} \sin \chi \, d\chi \, d\epsilon}{P_{ij}} = \frac{\sigma(\chi, g_{ij})}{\sigma_{\tau}(g_{ij})} \cdot \sin \chi \, d\chi \, d\epsilon \quad (11)$$

die bedingte W. dafür, daß bei einem Stoß zwischen dem i -ten und dem j -ten Teilchen v^* in der Richtung $\sin \chi \, d\chi \, d\epsilon$ liegt (in Bezug auf die Achse $v_i - v_j$).

Damit erhalten wir (in Übereinstimmung mit der Dynamik von Zweierstößen)

$$v_i \mapsto v_i' = v^* + \frac{v_i + v_j}{2} = \|v^*\| \cdot \eta + \frac{v_i + v_j}{2} = \frac{1}{2}[(v_i + v_j) + \eta g_{ij}]$$

mit $\eta \in S^2$ gemäß der Verteilung (11) gewählt.

Im Hartkugelfall gilt

$$\frac{\sigma(\chi, g_{ij})}{\sigma_{\tau}(g_{ij})} = \frac{\frac{1}{4} d^2}{\pi d^2} = \frac{1}{4\pi} \quad (d \dots \text{Durchmesser eines Teilchens});$$

das heißt, wir haben Gleichverteilung auf der Einheitssphäre.

Es fällt auf, daß wir $Q_i(v) = \sum_{j \neq i} Q_{ij}(v)$ bei der Interpretation nicht explizit verwendet haben. Wegen $P_{ij} = \int_{\mathbb{R}^3} Q_{ij}(v) dv$ [vgl. (10)]

kann $Q_{ij}(v)$ als Maß für die Verteilung von v_i' nach einem Stoß des i -ten mit dem j -ten Teilchen aufgefaßt werden, und man erkennt leicht den Einklang mit obiger Deutung.

Bemerkungen:

(i) Nanbu gibt an, daß $\Delta t \ll T_{\text{frei}} = \frac{1}{n \overline{\sigma_{\tau}(g)g}}$ gewählt werden soll und damit

$$P_i = \Delta t n \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_{\tau}(g_{ij}) g_{ij} < 1 \text{ garantiert ist.}$$

(ii) Es gilt $P_i = \Delta t q(v_i)$ und

$$\int_A Q_i(v) dv = \Delta t q(A, v_i) \quad [\text{vgl. (2')} \text{ und (3')}]$$

mit $q(v_i)$ und $q(A, v_i)$ aus 2.1.

(iii) Es gelten die Erhaltungsgleichungen

$$\bar{M}(\Delta t) = \bar{M}(0)$$

$$\text{mit } \bar{M}(t) := \int_{\mathbb{R}^3} M(v) \tilde{f}(v, t) dv$$

und $M(v) = 1, v$ oder v^2 .

(iv) Für den Erwartungswert der Anzahl der Stöße $E[ST]$ gilt:

$$E[ST] = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N P_i = \Delta t \frac{Nn}{2} \left(\frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N \sigma_{\tau}(g_{ij}) g_{ij} \right) = N_S$$

[vgl. (4')]

Die Ergebnisse seiner Herleitung setzt Nanbu in folgenden Algorithmen für den Stoßprozeß um.

3.4 Der Nanbualgorithmus

(1) Für das i -te Teilchen mit Geschwindigkeit v_i berechne man

$$P_i = \Delta t \frac{n}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_{\tau}(g_{ij}) g_{ij}.$$

Man generiere eine Zufallszahl $R_f \in [0, 1]$ und

wenn $\begin{cases} R_f > P_i & (\text{rejected}) \rightarrow v_i' = v_i \quad (\text{also kein Stoß}) \\ R_f < P_i & (\text{accepted}) \text{ gehe man zu (2) und anschließend (3).} \end{cases}$

(2) Auswahl eines Stoßpartners (j) von der bedingten W.-Verteilung

$\{P_{ik}^*; k=1,2,\dots,i-1,i+1,\dots,N\}$ mit

$$P_{ik}^* = \frac{P_{ik}}{P_i}, \quad P_{ik} = \Delta t \frac{n}{N} \sigma_\tau (g_{ik}) g_{ik}$$

Die folgende Bedingung bestimmt (j):

$$\sum_{k=1}^{j-1} P_{ik}^* < R_f^i \leq \sum_{k=1}^j P_{ik}^*$$

mit R_f^i als einer weiteren Zufallszahl.

(3) Nachdem der Stoßpartner (j) des Teilchens (i) bekannt ist, berechne man

$$v_i' = \frac{1}{2} [(v_i + v_j) + \eta g_{ij}]$$

mit $\eta \in S^2$ gemäß der Verteilung (11) gewählt.

Dieses Verfahren führe man für alle N Teilchen durch.

Die Unterschiede zur Realisierung des Stoßprozesses bei Bird fallen ins Auge. Die Wahrscheinlichkeit, ob ein Teilchen stößt, wird hier ohne Spezifizierung des Stoßpartners bestimmt. Ein Teilchen, das selbst nicht stößt, kann als Stoßpartner auftreten (dummy collision partner). Im Schritt (3) wird auch nur die neue Geschwindigkeit des betrachteten Teilchens und nicht die seines Partners berechnet. Das hat zur Konsequenz, daß in Nanbu's Schema Energie und Impuls nur mehr im Mittel erhalten bleiben; die Korrelationen zwischen den Geschwindigkeiten aber reduziert werden. Und während in Bird's Schema die neuen Geschwindigkeiten nach einem Stoß sofort in Kraft treten, werden sie hier abgespeichert, bis der komplette Stoßprozeß in der Zelle beendet ist. Der Erwartungswert der Anzahl von stoßenden Teilchen allerdings ist bei beiden Strategien der gleiche. (Das gilt übrigens auch für die anderen hier nicht näher diskutierten Verfahren.)

Ein schwerwiegender Nachteil des Nanbualgorithmus ist praktischer Natur. Es müssen $P_i = \Delta t \frac{n}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_\tau (g_{ij}) g_{ij}$ für $i=1,\dots,N$; d.h. sämtliche Relativgeschwindigkeiten g_{ij} berechnet werden (N^2 -Aufwand). Das bringt bei etwas komplizierterer Aufgabenstellung einen enormen Verbrauch an Rechenzeit mit sich. So konnte Nanbu z.B. das Problem einer ebenen Stoßwelle nur im

Spezialfall von Maxwellmolekülen [$\sigma_\tau(g_{ij})g_{ij}$ ist dann unabhängig von (i,j)] rechnen und keinen sinnvollen Vergleich seiner Resultate mit Messungen durchführen [13].

3.5 Zur Herleitung von H. Babovsky

Wir greifen hier die Idee von Babovsky auf - argumentieren aber heuristisch. Bezüglich einer strengen Vorgangsweise verweisen wir auf die Originalarbeit [14].

Um die Lösung der räumlich homogenen Boltzmann-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t, v) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} \sigma(n, g) g \{ f(t, v') f(t, w') - f(t, v) f(t, w) \} d\omega(n) dw$$

mit $f(0, v) = f_0(v)$

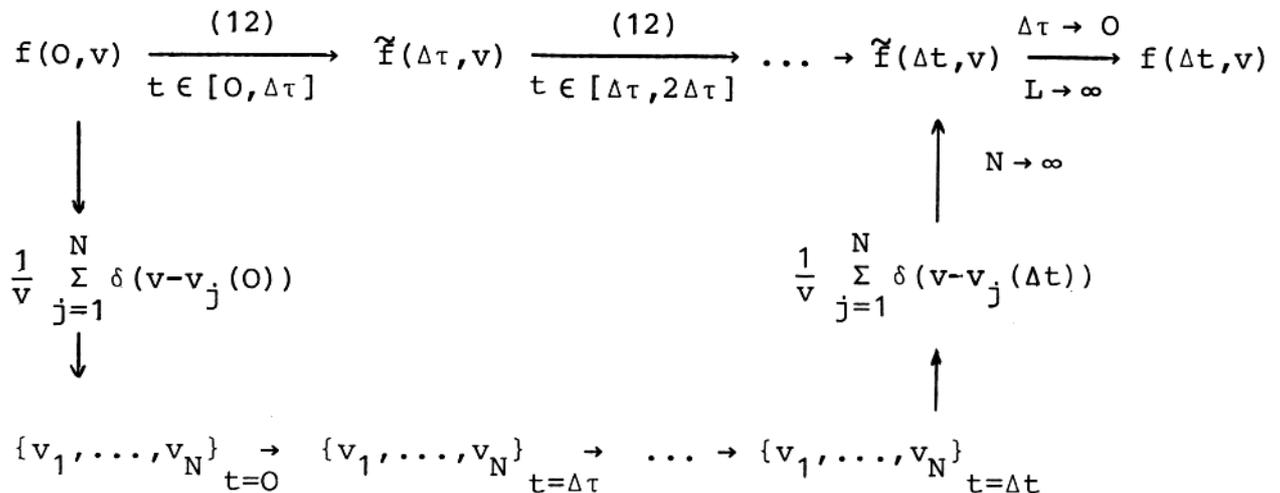
zur Zeit $t = \Delta t$ zu approximieren, betrachten wir folgenden Iterationsprozeß.

Man unterteile Δt in L Intervalle der Größe $\Delta\tau$: $t = L\Delta\tau$ und löse die Gleichung

$$(12) \begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{f}(t, v) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} \sigma \cdot g \{ \tilde{f}(t, v') f(0, w') - \tilde{f}(t, v) f(0, w) \} d\omega(n) dw \\ \tilde{f}(0, v) = f(0, v) = f_0(v) \end{cases}$$

in $[0, \Delta\tau]$. Dann ersetzt man $f(0, w)$ durch $\tilde{f}(\Delta\tau, w)$ und löse (12) in $[\Delta\tau, 2\Delta\tau]$; und so weiter.

Für die Simulation haben wir folgendes Diagramm im Auge:



Also versuchen wir ein Simulationsschema für

$$(v_1(k\Delta\tau), \dots, v_N(k\Delta\tau)) \rightarrow (v_1((k+1)\Delta\tau), \dots, v_N((k+1)\Delta\tau))$$

zu finden, das in Beziehung zur Gleichung (12) steht.

Wir spezialisieren auf $k = 0$.

Gleichung (12) ist eine lineare Transportgleichung und beschreibt die zeitliche Entwicklung einer Verteilungsfunktion für Testteilchen, die zur Zeit $t=0$ gemäß $f(0,v)$ verteilt sind und an "Hostteilchen", die während des Zeitintervalls $\Delta\tau$ gemäß $f(0,v)$ verteilt sind, stoßen.

Andersausgedrückt: Zur Zeit $t=0$ denken wir uns die Verteilung $f(0,v)$ dupliziert. Eine Kopie ist während $\Delta\tau$ fixiert und dient als "Hintergrundgas". Die zweite Kopie wird interpretiert als Anfangsbedingung für ein Testteilchen, das sich durch das Hintergrundgas bewegt.

Sei $h(t,v)$ die Geschwindigkeitsverteilungsfunktion für die Testteilchen, die in $[0,t]$ nicht gestoßen haben:

$$\int_{\mathbb{R}^3} h(t,v) dv dx = M(t) = \text{Erwartungswert der Anzahl der "stoßfreien Testteilchen" in der Zelle zur Zeit } t;$$

$$\text{bzw. } \int_{\mathbb{R}^3} h(t,v) dv = \frac{M(t)}{V} \text{ und } h(0,v) = f(0,v).$$

Die zeitliche Änderung von $h(t,v)$ erhalten wir mit Hilfe des Verlustterms von Gleichung (12) zu

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} h(t,v) = -h(t,v) \int_{\mathbb{R}^3} \sigma_{\tau}(\|v-w\|) \|v-w\| f(0,w) dw = -h(t,v) q(v) \\ h(0,v) = f(0,v). \end{cases}$$

Bemerkung: Nach (3) aus 2.1 ist $q(v)$ gerade die Stoßrate eines Teilchens der Geschwindigkeit v in einem Hintergrundgas mit der Verteilung $f(0,w)$.

$$\text{Dann folgt } h(t,v) = h(0,v) e^{-q(v) \cdot t}.$$

$$\text{Mit } h(0,v) = f(0,v) = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N \delta(v-v_i) \text{ erhalten wir}$$

$$h(t, v) = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N e^{-q(v)t} \delta(v-v_i) = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N e^{-q(v_i)t} \delta(v-v_i)$$

und daher
$$M(t) = \sum_{i=1}^N e^{-q(v_i)t}.$$

Da das i -te Teilchen unabhängig vom j -ten Teilchen in $[0, t]$ stößt oder nicht stößt, können wir $e^{-q(v_i)t}$ als Wahrscheinlichkeit dafür interpretieren, daß ein Teilchen mit Geschwindigkeit v_i in $[0, t]$ nicht gestoßen hat.

$B_1^{(i)}$ bezeichne das Ereignis, daß das Testteilchen mit Geschwindigkeit v_i in $[0, \Delta\tau]$ nicht stößt; $B_2^{(i)}$ daß das Teilchen einmal stößt. $(v_i \rightarrow A, \Delta\tau)$ bezeichne das Ereignis, daß das Teilchen nach $\Delta\tau$ eine Geschwindigkeit $v_i' \in A$, $A \subseteq \mathbb{R}^3$ hat.

Unter der Annahme, daß das Teilchen während $\Delta\tau$ höchstens einmal stößt, gilt dann

$$P(v_i \rightarrow A, \Delta\tau) = P(v_i \rightarrow A, \Delta\tau | B_1^{(i)}) P(B_1^{(i)}) + P(v_i \rightarrow A, \Delta\tau | B_2^{(i)}) P(B_2^{(i)}).$$

Mit $P(B_1^{(i)}) = e^{-q(v_i)\Delta\tau}$; $P(B_2^{(i)}) = 1 - P(B_1^{(i)}) = 1 - e^{-q(v_i)\Delta\tau}$;

$$P(v_i \rightarrow A, \Delta\tau | B_1^{(i)}) = \begin{cases} 1 & v_i \in A \\ 0 & v_i \notin A \end{cases} =: \chi_A(v_i), \text{ und wenn wir}$$

$$P(v_i \rightarrow A, \Delta\tau | B_2^{(i)}) = \frac{q(A, v_i)}{q(v_i)} = \left[\frac{\text{Stoßrate eines "v}_i\text{-Teilchens" mit } v_i' \in A}{\text{Stoßrate eines "v}_i\text{-Teilchens"}} \right]$$

vgl. (2) aus 2.1]

setzen, können wir schreiben

$$P(v_i \rightarrow A, \Delta\tau) = \chi_A(v_i) e^{-q(v_i)\Delta\tau} + \frac{q(A, v_i)}{q(v_i)} (1 - e^{-q(v_i)\Delta\tau}).$$

Mit der Näherung $e^{-q(v_i)\Delta\tau} \approx 1 - q(v_i)\Delta\tau$ und $q(v_i)$ gemäß (3') bzw. $q(A, v_i)$ gemäß (2') eingesetzt erhalten wir

$$\begin{aligned} P(v_i \rightarrow A, \Delta\tau) &= \chi_A(v_i) (1 - \Delta\tau \frac{1}{V} \sum_{j=1}^N \sigma_\tau(g_{ij}) g_{ij}) \\ &\quad + \frac{\Delta\tau}{V} \sum_{j=1}^N \int_{A \cap S_{v_i, v_j}} \sigma(n, g_{ij}) g_{ij} d\omega(n) \\ &= \chi_A(v_i) (1 - P_i) + \int_A Q_i(v) dv \end{aligned}$$

mit P_i und $Q_i(v)$ wie bei Nanbu definiert, wenn wir $L=1$, d.h. $\Delta\tau = \Delta t$ setzen.

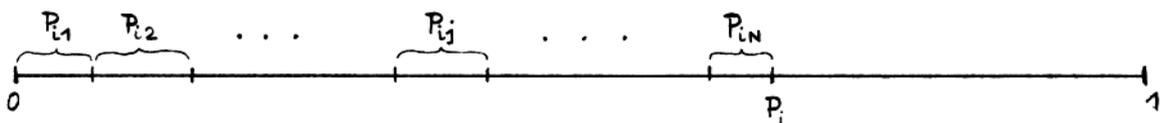
Die Interpretation des obigen Resultats führt wieder zum Nanbualgorithmus.

3.6 Der modifizierte Nanbualgorithmus

Wie bereits erwähnt, ist der Stoßalgorithmus nach Nanbu in der in 3.4 dargestellten Form von einem praktischen Gesichtspunkt aus nicht brauchbar. Wir ändern den Algorithmus in zwei Punkten, wobei der zweite die entscheidende Verbesserung bringt und die Idee dazu von H. Babovsky stammt.

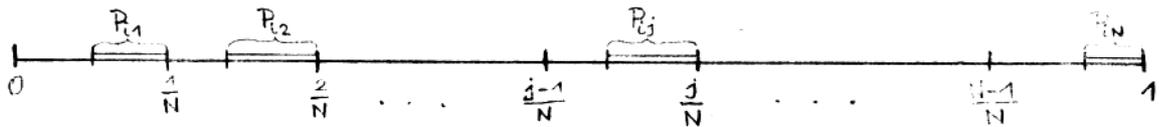
- A) Wie bei der Herleitung in 3.5 unterteilen wir den Entkopplungsschritt Δt in L Intervalle der Größe $\Delta\tau$ und führen den Stoßalgorithmus L mal durch, bevor wir zur stoßfreien Bewegung übergehen. (Daher gilt im folgenden auch $P_{ij} = \Delta\tau \frac{n}{N} \sigma_{\tau}(g_{ij}) g_{ij}$.) Dieses Vorgehen führt zu einer größeren Flexibilität in der Wahl von Δt und kann Ersparnis in der Rechenzeit bringen. Ein Teilchen kann dann während des Stoßprozesses - wie auch beim Birdschema - mehrmals stoßen.
- B) Äquivalent zum Nanbualgorithmus ist es, die dortigen Schritte (1) und (2) in einem Schritt zusammenzufassen: Man generiere eine auf $[0,1]$ gleichverteilte Zufallszahl R_f . Fällt sie in das Intervall $[P_i, 1]$, stößt das i -te Teilchen nicht.

Fig. 5



Fällt sie in das Intervall P_{ij} , stößt das i -te Teilchen, und der Stoßpartner ist das j -te Teilchen. Wenn wir nun das Intervall $[P_i, 1]$ (ΔW . das i -te Teilchen stößt nicht) gemäß folgender Skizze auf die Intervalle P_{ij} aufteilen, so daß N gleichgroße Intervalle entstehen, ändert sich an der Methode zur Bestimmung des Stoßpartners nichts.

Fig. 6



In diesem Fall aber können wir sofort entscheiden, in welches der N Intervalle unsere Zufallszahl fällt. Angenommen, es ist das Intervall $[\frac{j-1}{N}, \frac{j}{N}]$. Dann kommt als Stoßpartner nur das j -te Teilchen in Frage. Wir müssen also lediglich P_{ij} ausrechnen und können abfragen:

$$R_f \leq \left(\frac{j}{N} - P_{ij}\right) \mapsto \text{kein Stoß des } i\text{-ten Teilchens;}$$

$$R_f > \left(\frac{j}{N} - P_{ij}\right) \mapsto \text{das } i\text{-te Teilchen stößt und sein Stoßpartner ist das } j\text{-te Teilchen.}$$

Damit ist der Aufwand nur mehr linear in der Teilchenzahl N .

Einen Punkt müssen wir dabei noch beachten. Die obige Vorgangsweise ist dann bedenkenlos, wenn

$$P_{ij} = \Delta\tau \frac{n}{N} \sigma_\tau(g_{ij})g_{ij} \leq \frac{1}{N} \quad \text{bzw.} \quad \Delta\tau n \sigma_\tau(g_{ij})g_{ij} \leq 1 \quad \text{für } 1 \leq i < j \leq N$$

(13)

garantiert ist. Es gilt also diese Bedingung durch geeignete Wahl von $\Delta\tau$ (d.h. des Entkopplungsintervalls Δt und des Parameters L) zu erfüllen; natürlich ohne alle $\sigma_\tau(g_{ij})g_{ij}$ auszurechnen, sondern durch Abschätzungen von linearem Aufwand. So gilt im Fall eines einatomigen Gases für die in der Praxis verwendeten Molekülmodelle (vgl. [3])

$$\sigma_\tau(g_{ij})g_{ij} = c g_{ij}^\beta \quad \text{mit } 0 < \beta \leq 1 \quad \text{und } c \text{ einer Konstanten.}$$

Und wir können g_{ij}^β z.B. durch

$$g_{ij}^\beta = \|v_i - v_j\|^\beta = \|(v_i - m) - (v_j - m)\|^\beta \leq (\|v_i - m\| + \|v_j - m\|)^\beta \\ \leq (\|v_i - m\| + \max_{1 \leq j \leq N} \|v_j - m\|)^\beta \quad \text{mit} \quad m = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N v_j$$

abschätzen.

Da man dadurch eventuell ein unnötig kleines $\Delta\tau$ bekommt, erscheint uns für die Praxis folgende Alternative beachtenswert: Während einer Testphase bestimme man $\Delta\tau$ so, daß für alle tatsächlich berechneten P_{ij}

$$P_{ij} \leq k \frac{1}{N} \quad \text{mit} \quad k < 1 \quad \text{gewählt gilt.}$$

Eine Abschätzung des dabei möglichen Fehlers steht noch aus. Unserer Meinung nach ist aber diese Fehlerquelle besser in den Griff zu bekommen als die Auswirkungen der Näherungen, mit denen Bird seinen linearen Aufwand erkaufte.

Generell sollte ja

$$(14) \quad \Delta t < T_{\text{frei}} \quad (T_{\text{frei}} \dots \text{mittlere freie Stoßzeit eines Teilchens})$$

gewählt werden.

Mit $L \sim 10$ gilt dann

$$\Delta\tau \ll T_{\text{frei}} \quad \text{bzw.} \quad \text{nach (6)} \quad \Delta\tau n \overline{\sigma_\tau(g)} < 1$$

und unsere Bedingung (13) ist eine Spezifikation der allgemeinen Forderung (14).

Das durch die oben beschriebene Modifikation des Stoßprozesses erhaltene Verfahren werden wir im folgenden mit N^* bezeichnen.

4. Vergleich der Verfahren

Anhand von zwei Beispielen - einem Relaxationsproblem und einem Stoßwellenproblem - haben wir die beschriebenen Simulationsverfahren miteinander verglichen. Bereits bei der Konzipierung des Forschungsprojekts wurde berücksichtigt, daß die Rechenanlage in Kaiserslautern für kompliziertere Simulationsprobleme nicht geeignet ist. Es wurde beantragt, auf dem Vektorrechner CYBER 205 in Karlsruhe zu rechnen, und die Vektorisierung der Algorithmen wurde als zusätzlicher Forschungspunkt aufgenommen. Wir berichten darüber in 5.. Grundsätzlich gilt, daß der N*-Algorithmus wesentlich besser als der Birdalgorithmus vektorisierbar ist.

4.1 Ein Relaxationsproblem

Da sich die betrachteten Verfahren nur in der Realisierung des Stoßprozesses unterscheiden, haben wir als erstes Testbeispiel die Relaxation eines räumlich homogenen einatomigen Gases gerechnet. Hier spielt sich alles nur im Geschwindigkeitsraum ab. Wir können auf die stoßfreie Bewegung verzichten und brauchen keine Einteilung in Zellen. Wir sprechen von einem (räumlich) "0-dim. Problem".

Wir führen dimensionslose Variable ein, indem wir als Referenz auf Größen des Gases im Gleichgewicht zurückgreifen. D.h. Längen werden durch λ_∞ (Δ mittlere freie Weglänge eines Teilchens im Gleichgewichtszustand), Temperaturen durch T_∞ , Geschwindigkeiten durch $\sqrt{2RT_\infty}$ (Δ wahrscheinlichste Geschwindigkeit, $R = \text{Gaskonstante}$) dividiert. Für die Zeit ergibt sich als Referenzgröße $\frac{\lambda_\infty}{\sqrt{2RT_\infty}}$. (Dimensionslose Variable werden mit einem Δ gekennzeichnet).

Wir verwenden das Hartkugel-Modell. Dann ist $g \mapsto \sigma_\tau(g)$ konstant, $\sigma_\tau = \pi d^2$ und im Gleichgewicht gilt

$$\lambda_\infty = \frac{1}{\sqrt{2} n_\infty \pi d^2} \quad (\text{vgl. z.B. [2] p. 70}).$$

Damit ergibt sich z.B. für den beim Birdalgorithmus benötigten Zeitzuwachs τ_{ij} in dimensionsloser Form

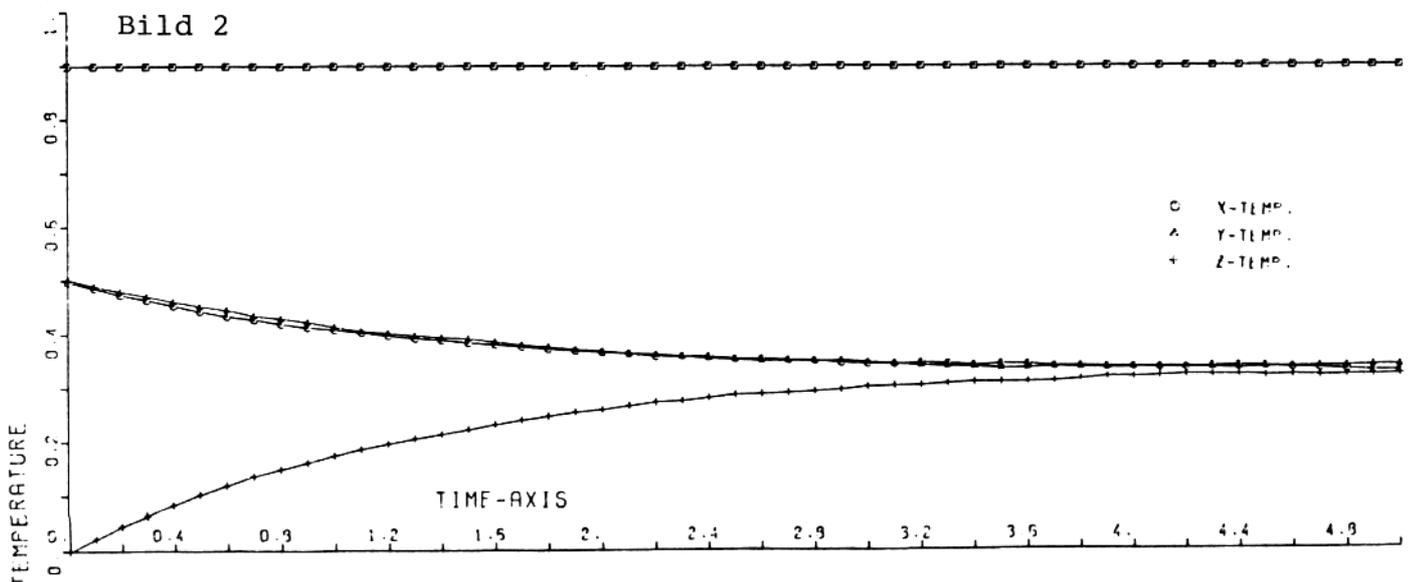
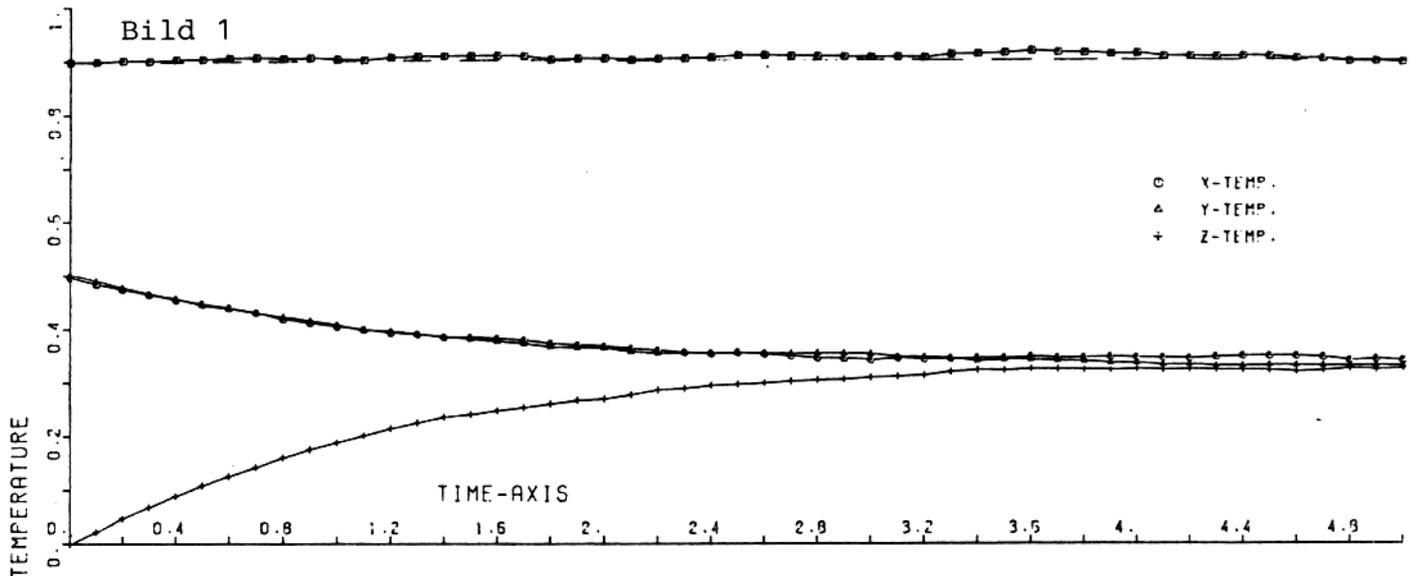
$$\hat{\tau}_{ij} := \hat{\tau}_{ij} : \frac{\lambda_{\infty}}{\sqrt{2RT_{\infty}}} = \frac{2}{Nn\pi d^2 g_{ij}} \cdot \frac{\sqrt{2RT_{\infty}}}{\lambda_{\infty}} = \frac{2\sqrt{2}}{Ng_{ij}}$$

Zur Zeit $\hat{t} = 0$ genügen die Geschwindigkeitskomponenten der N Teilchen folgender Anfangsbedingung:

$\hat{v}_z = 0$; die \hat{v}_x, \hat{v}_y -Koordinaten sind gleichmäßig auf der Kreislinie $\hat{v}_x^2 + \hat{v}_y^2 = \frac{3}{2}$ verteilt.

Dieses sehr einfache Beispiel stammt von D. Pullin, Imperial College London.

Es findet eine Relaxation statt, und die Ergebnisse (Bild 1: Nanbu; Bild 2: Bird) unterscheiden sich nur unwesentlich. Die oberste Kurve stellt die Gesamttemperatur $\hat{\Delta}$ Gesamtenergie dar, und man sieht, daß sie beim Nanbu-Verfahren nicht exakt erhalten bleibt.



Eine deutliche Sprache jedenfalls sprechen die Rechenzeiten:

Teilchenzahl	Nanbu	N*	Bird
100	56.7	3.1	2.3
1000	5422	17.5	8.9
10000	?	180	79

CPU-Sekunden auf der
Rechenanlage in
Kaiserslautern

Es mag sein, daß man die Rechenzeiten beim Nanbu-Verfahren durch geschicktes Programmieren noch drücken kann; die Größenordnung aber bleibt auf Grund des quadratischen Aufwands sicher erhalten.

Auf der CYBER 205 ergaben Testrechnungen folgendes Bild:

Teilchenzahl	N*	Bird
100	0.035	0.031
1000	0.145	0.120
2000	0.263	0.214

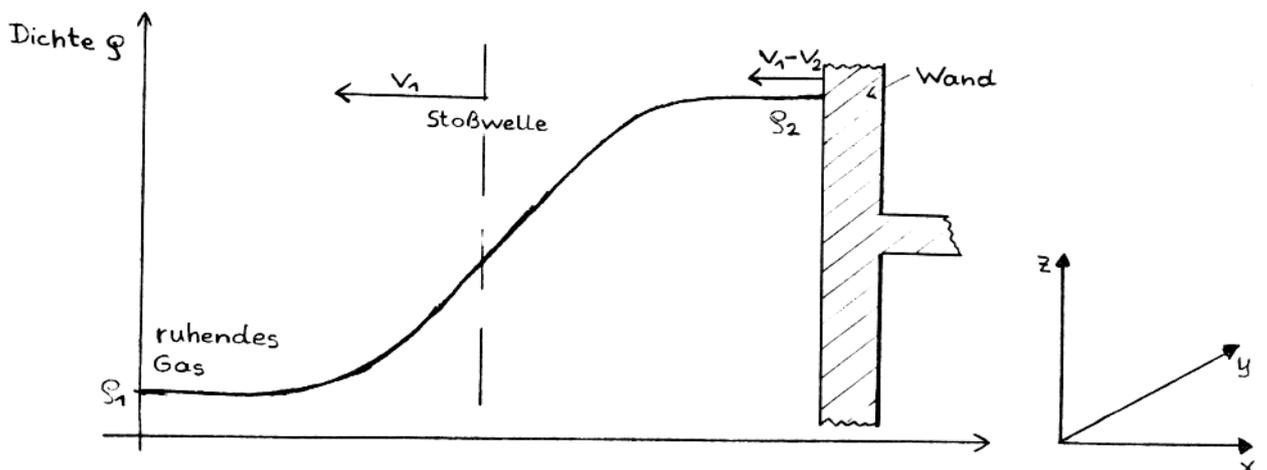
CPU-Sekunden

Bemerkung: Die Rechnungen wurden zu einem Zeitpunkt durchgeführt, als wir noch relativ wenig Erfahrung mit der CYBER 205 hatten. Bei besserer Ausnützung der CYBER 205 kann man die "N*-Zeiten" sicher noch verbessern.

4.2 Das Problem der inneren Struktur einer Stoßwelle

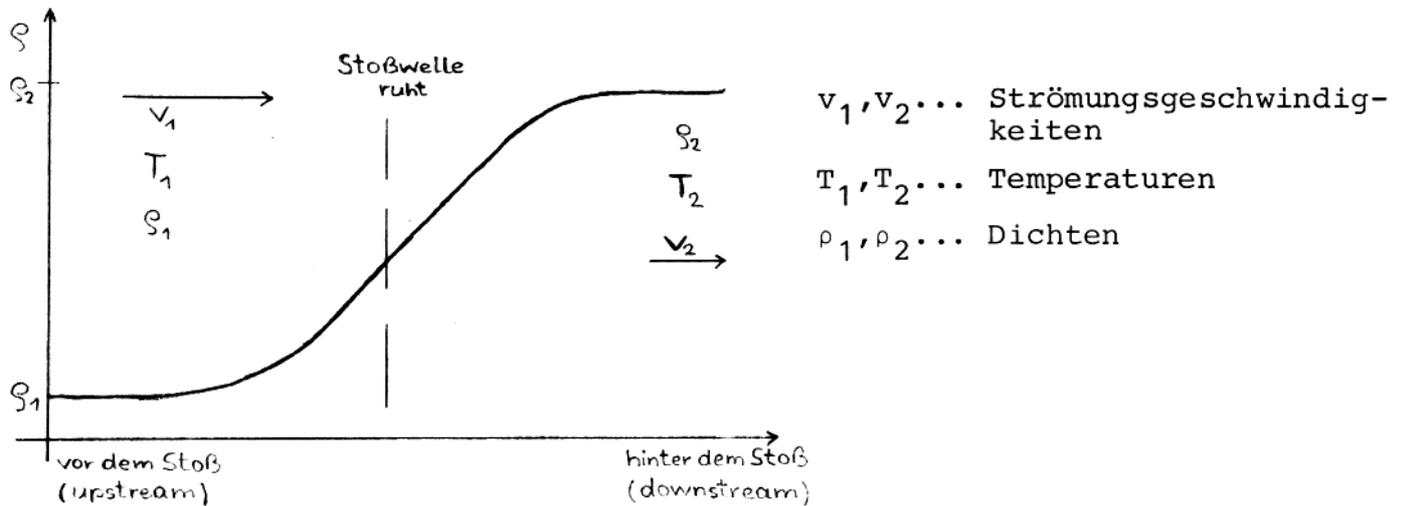
Fig. 7 illustriert, wie eine stationäre Stoßwelle von einer sich mit konstanter Geschwindigkeit bewegendem Wand erzeugt wird.

Fig. 7



Wenn wir uns die Wand in der y - z -Ebene uneingeschränkt ausgedehnt denken, haben wir keine Gradienten in der Richtung parallel zur Wand, und das Problem ist räumlich eindimensional. In einem Bezugssystem, in dem die Stoßwelle ruht, erhalten wir folgendes Bild:

Fig. 8



Die in Fig. 8 angegebenen Größen vor bzw. hinter der Stoßwelle sind bekanntlich über die Rankine-Hugoniot Beziehungen miteinander verknüpft.

Eine Stoß-Machzahl M_s wird durch

$$M_s := \frac{\text{Geschw. der Welle relativ zum Gas vor dem Stoß}}{\text{Schallgeschwindigkeit im Gas vor dem Stoß}} = \frac{v_1}{c_1}$$

definiert.

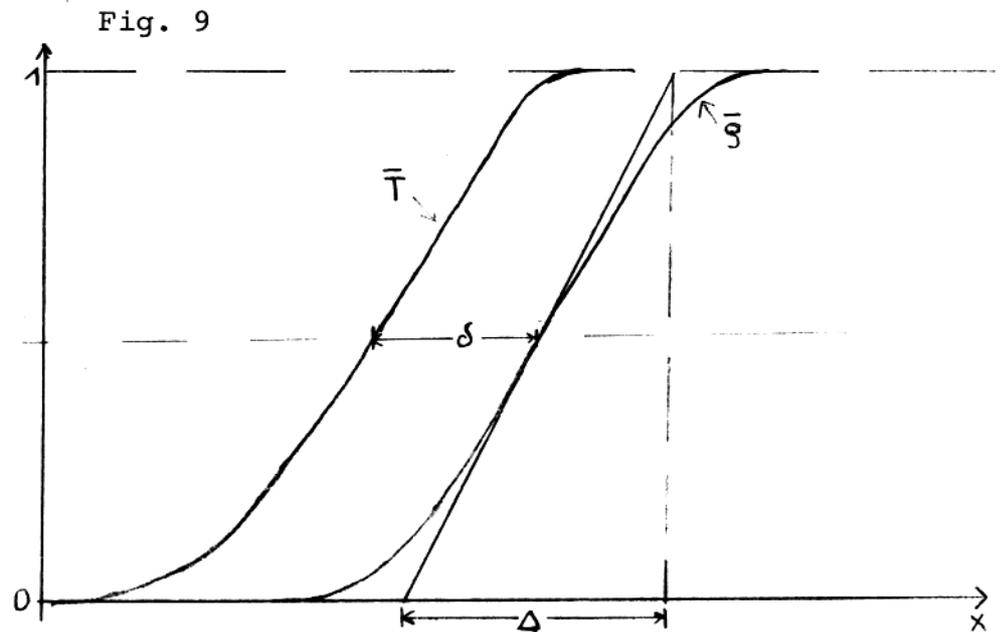
Das Studium der inneren Struktur von Stoßwellen gehört zu den klassischen Problemen der molekularen Gasdynamik. Bei Machzahlen ≥ 2 zeigt der Gasfluß deutliche Abweichungen vom thermischen Gleichgewicht. Die Ungewißheiten, die mit dem Auftreffen von Teilchen auf feste Körper verbunden sind, fallen weg. Zudem erweist sich das Problem genauen experimentellen Messungen gewisser makroskopischer Größen zugänglich.

Die charakteristische Länge beim Stoßwellenproblem ist die Dicke der Stoßwelle Δ :

$$\bar{\rho} := \frac{\rho_2 - \rho_1}{\rho_2 - \rho_1}$$

$$\bar{T} := \frac{T - T_1}{T_2 - T_1}$$

$$\Delta := \frac{\rho_2 - \rho_1}{\left(\frac{d\rho}{dx}\right)_{\max}}$$



(Die Temperatur läuft der Dichte voraus, und ein anderes mögliches Maß für die Dicke der Stoßwelle ist δ .)

Bird zitiert in ([2] p. 133), daß

$$\frac{\Delta}{\lambda} \quad (\lambda \dots \text{mittlere freie Weglänge eines Teilchens in der Stoßwelle})$$

typischerweise die Werte 10 bei $M_s = 1.25$; 5 bei $M_s = 1.5$; 3 bei $M_s = 2$ bis ungefähr 2 bei $M_s > 3$ annimmt. Entsprechend variiert die Knudsenzahl $K_n := \frac{\lambda}{\Delta}$ von $\frac{1}{10}$ bis $\frac{1}{2}$. Daher fällt das Problem insbesondere für Machzahlen ≥ 2 in den Übergangsbereich. Dies wird durch experimentelle Messungen bestätigt, die zeigen, daß für $M_s \geq 2$ die Kontinuumsbeschreibung (Navier-Stokes) ungeeignet ist [10].

Die Methode zur Erzeugung einer Stoßwelle in der Simulation übernahmen wir aus [3]. Zu Beginn wird die Stoßwelle, die im gewählten Bezugssystem ruht, durch eine scharfe Trennlinie repräsentiert. Die Anfangsbedingungen von der Trennlinie bis zum linken Rand (vor dem Stoß), bzw. von der Trennlinie bis zum rechten Rand des Rechengebiets (hinter dem Stoß), werden so gesetzt, daß die Rankine-Hugoniot Beziehungen erfüllt sind. Während der stoßfreien Bewegung der Teilchen über das Entkopplungsintervall Δt sind die

Randbedingungen durch spiegelreflektierende Wände gegeben. Die eine Wand bewegt sich vom linken Rand aus mit v_1 auf die Stoßwelle zu, die andere vom rechten Rand aus mit v_2 von der Stoßwelle weg; v_1 und v_2 sind die lokalen theoretischen Strömungsgeschwindigkeiten "weit weg" von der Stoßwelle [vgl. Fig. 8]. Danach wird links das "Volumen" $v_1 \cdot \Delta t$ mit neuen Teilchen angefüllt, während rechts die Teilchen außerhalb des Rechengebiets eliminiert werden. Nach einigen Entkopplungsschritten (Stoßprozeß-stoßfreie Bewegung) glättet sich die anfängliche Unstetigkeit in den Größen v, ρ und T , und es entstehen die Profile der Stoßwelle.

Wir betrachten den Fall eines einatomigen Gases.

M.N. Macrossan beschreibt in seiner Doktorarbeit [3] ausführlich die verschiedenen bei Simulationen verwendeten Stoßmodelle. Wir haben aus Einfachheitsgründen mit dem Hartkugelmodell und dem VHS-Modell (variable diameter hard sphere) gerechnet. Etwas lax ausgedrückt kann man sagen, daß bei letzterem die Funktion $g \mapsto \sigma_\tau(g)$ - und damit auch die Stoßwahrscheinlichkeiten - gemäß einem abgeschnittenen $r^{-\alpha}$ Potential, die Stöße selbst aber nach dem Hartkugelmodell berechnet werden. Für genauere Details und für eine Rechtfertigung dieser Vereinfachungen gegenüber einem gewöhnlichen $r^{-\alpha}$ Potential verweisen wir auf die oben zitierte Arbeit (p. 80-100).

Dimensionslose Variable werden durch Referenz auf das Gas im Gleichgewicht vor dem Stoß eingeführt.

$$\text{Temperatur } T; \hat{T} := \frac{T}{T_1}$$

$$\text{Geschwindigkeit } v; \hat{v} := \frac{v}{\sqrt{2RT_1}} \quad (\sqrt{2RT_1} \dots \text{wahrscheinlichste Geschw. eines Teilchens vor dem Stoß})$$

$$\text{Länge } x; \hat{x} := \frac{x}{\lambda_1} \quad (\lambda_1 \dots \text{mittlere freie Weglänge vor dem Stoß})$$

$$\text{Zeit } t; \hat{t} := \frac{t \cdot \sqrt{2RT_1}}{\lambda_1}$$

Alle Rechnungen für das Stoßwellenproblem wurden auf der CYBER 205 in Karlsruhe durchgeführt.

Um die Wahl der Simulationsparameter über die generellen Forderungen

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Entkopplungszeitschritt } \Delta t \leq \text{mittlere freie Stoßzeit eines Teilchens} \\ \text{Zellgröße } \Delta x \leq \text{mittlere freie Weglänge eines Teilchens} \end{array} \right.$$

hinaus besser in den Griff zu bekommen, haben wir folgende Bedingung getestet:

$$\frac{1}{\Delta x} \cdot \Delta t \cdot v_{\max} \leq \text{const.} = 1 \quad \text{mit } v_{\max} \text{ als maximaler Strömungsgeschwindigkeit.}$$

Mit $\Delta \hat{x} = 0.2$ (d.h. $\Delta \hat{x} \approx \frac{1}{20}$ der Dicke der Stoßwelle) und $v_{\max} = v_1$ erhalten wir $\Delta \hat{t} \approx 0.13$ bei $M_s = 1.55$, $\Delta \hat{t} \approx 0.06$ bei $M_s = 3.8$ und $\Delta \hat{t} \approx 0.025$ bei $M_s = 9.0$. ($T_{\text{frei}} \approx 0.5$ vor dem Stoß und ≈ 0.18 hinter dem Stoß).

Für den Parameter L beim N*-Algorithmus haben wir die Forderung gestellt, daß unabhängig von der Machzahl ein gewisser Prozentsatz an Stößen nicht überschritten wird:

$$\frac{N n_{\sigma_T} (g) g \cdot \Delta \tau}{N} \leq \text{const.}$$

Im Hartkugelfall erhält man dafür [man benutze die Beziehungen in [2] p. (69)]

$$\frac{n_2}{n_1} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{\Delta \hat{x}}{2}} \cdot \Delta \hat{t} \cdot \frac{1}{L} \leq \text{const.} \quad (n_1, n_2 \dots \text{Anzahldichten vor bzw. hinter dem Stoß})$$

Für $M_s = 3.8$ haben wir $L = 6$ in einer Testphase gewonnen. Dann folgt $L = 4$ für $M_s = 1.55$ und $L = 7$ für $M_s = 9.0$.

Mit einer Teilchenzahl $NM = 54000$ (\pm max 10% während des Programmablaufs), einem Rechengebiet zwischen $\hat{x}_{\min} = -10$ und $\hat{x}_{\max} = +10$ und obigen Parametern haben wir im Hartkugelfall folgende Rechenzeiten erzielt. Die Verrechnungseinheit auf der CYBER 205 in Karlsruhe ist ein SBU (System Billing Unit).

$M_s = 1.55$	CPU sec	SBU
Bird	11200	45800
N*	9800	47500

$M_s = 3.8$	CPU sec	SBU
Bird	12700	52000
N*	10800	52000

$M_s = 9.0$	CPU sec	SBU
Bird	20400	83400
N*	17700	85500

(Man beachte die Ausführungen zur Vektorisierung in 5.)

Dabei wurde bis zu einer Zeit $\hat{t} = 65$ bei $M_s = 1.55$, $\hat{t} = 24$ bei $M_s = 3.8$ und $\hat{t} = 15$ bei $M_s = 9.0$ gerechnet und jeweils über 50 unabhängige Läufe gemittelt.

Einen Teil der Ergebnisse dazu zeigen wir in den Bildern (3) bis (5). Dabei fällt auf, daß insbesondere bei $M_s = 9.0$ doch deutliche Unterschiede in den Resultaten des Bird bzw. N*-Algorithmus zu sehen sind. Daß im Vergleich zu den von Alsmeyer 1974 [10] in Argon gemessenen Dichteprofilen die gerechneten Profile zu steil ausfallen, liegt am Hartkugelmodell und ist in Übereinstimmung mit früheren nach verschiedenen Methoden durchgeführten Hartkugelrechnungen [10].

Bild 3

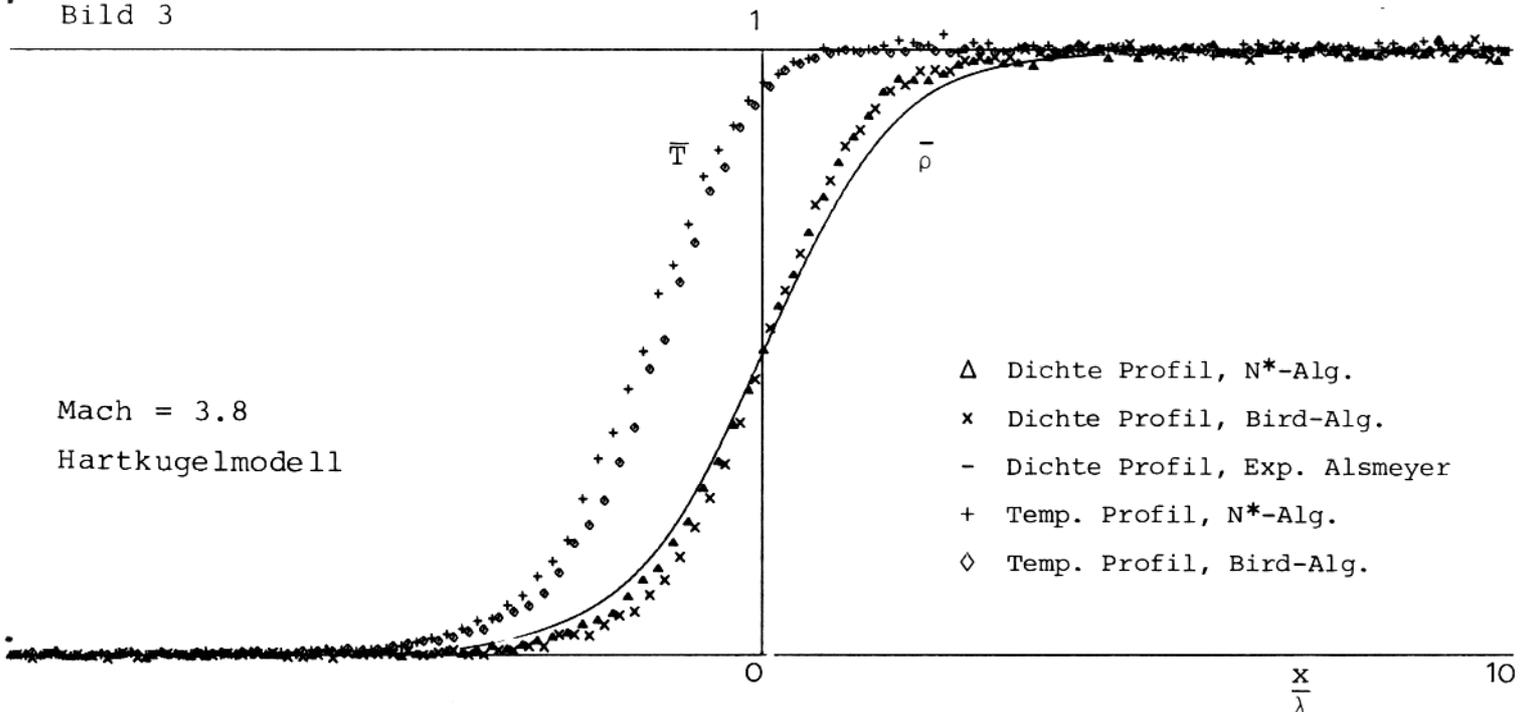


Bild 4

$$\bar{v} = \frac{v-v_2}{v_1-v_2}$$

Mach = 3.8

Hartkugelmodell

Δ Geschw. Profil, N*-Alg.

+ Geschw. Profil, Bird-Alg.

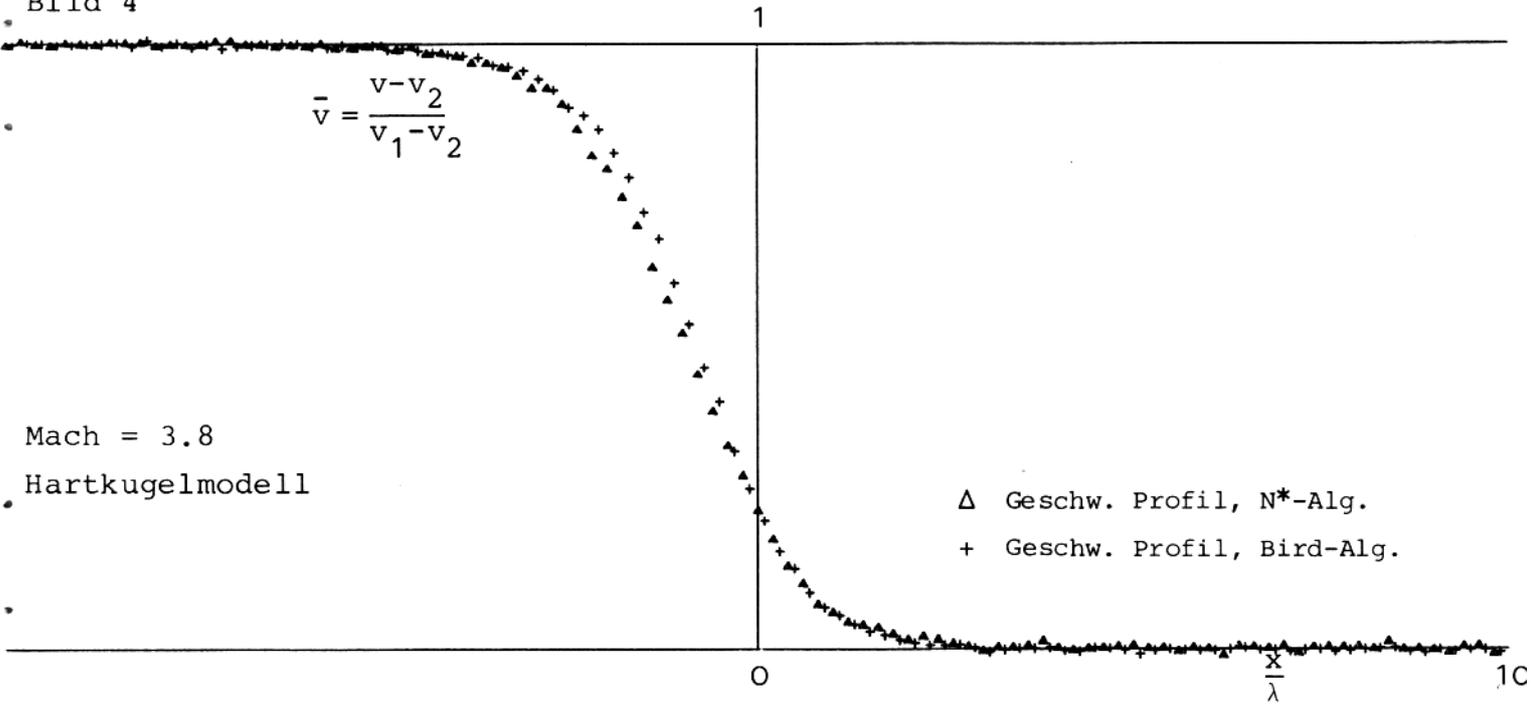


Bild 5

Mach = 9.0

Hartkugelmodell

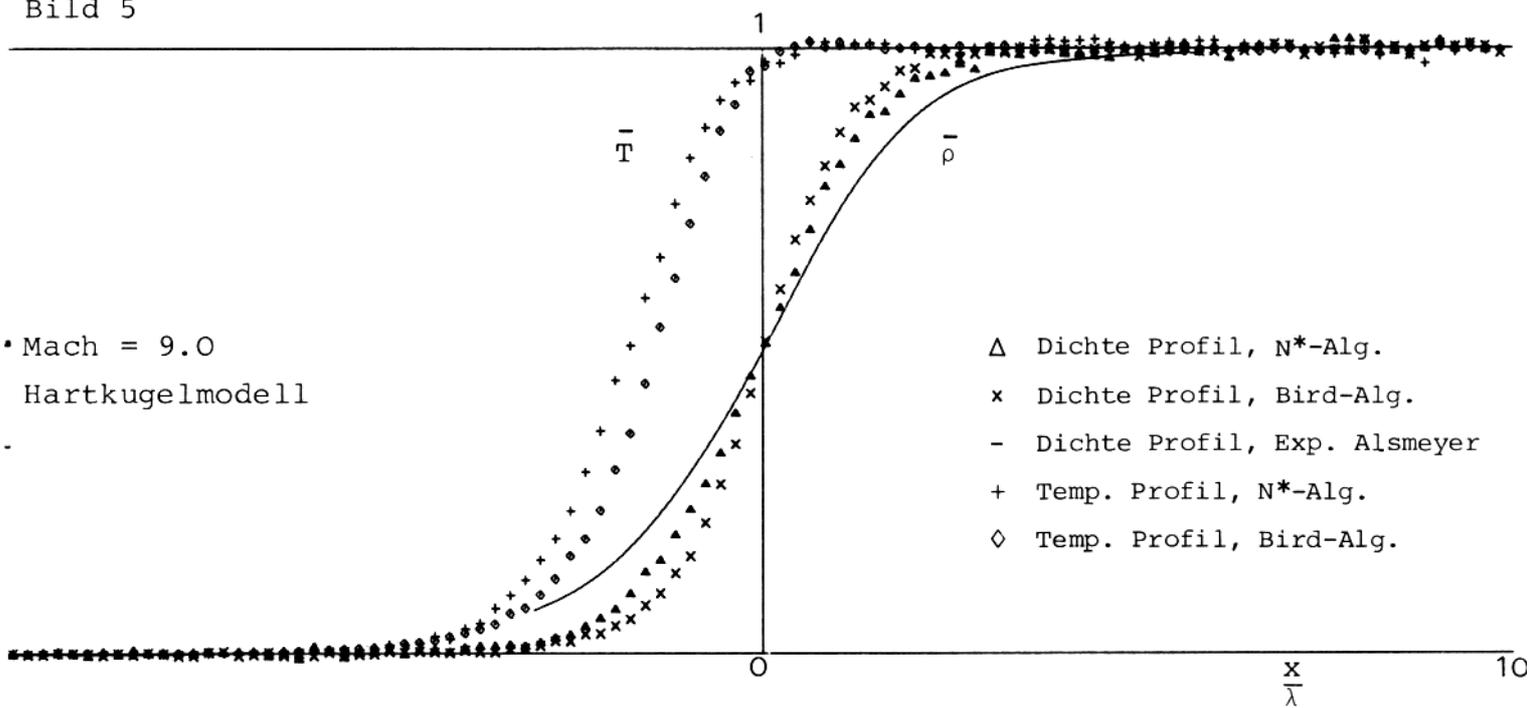
Δ Dichte Profil, N*-Alg.

x Dichte Profil, Bird-Alg.

- Dichte Profil, Exp. Alsmeyer

+ Temp. Profil, N*-Alg.

◇ Temp. Profil, Bird-Alg.



Gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Rechnung erhielten wir mit dem VHS-Modell und $\alpha = 12$ für den N*-Algorithmus, bzw. $\alpha = 11$ für den Bird-Algorithmus [Bilder (6) bis (8)]. (Durch geeignete Variation von α kann man wahrscheinlich sogar genaue Übereinstimmung erzielen.)

Bild 6

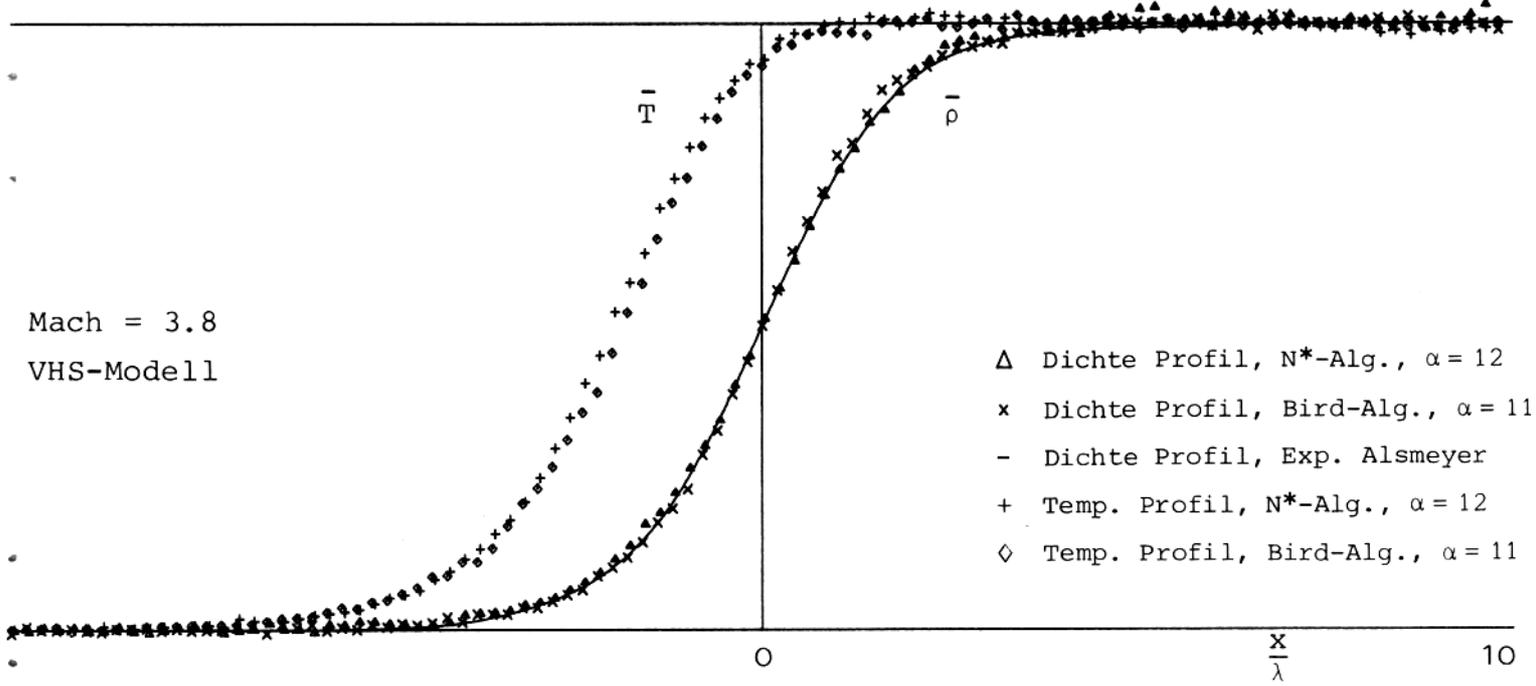


Bild 7

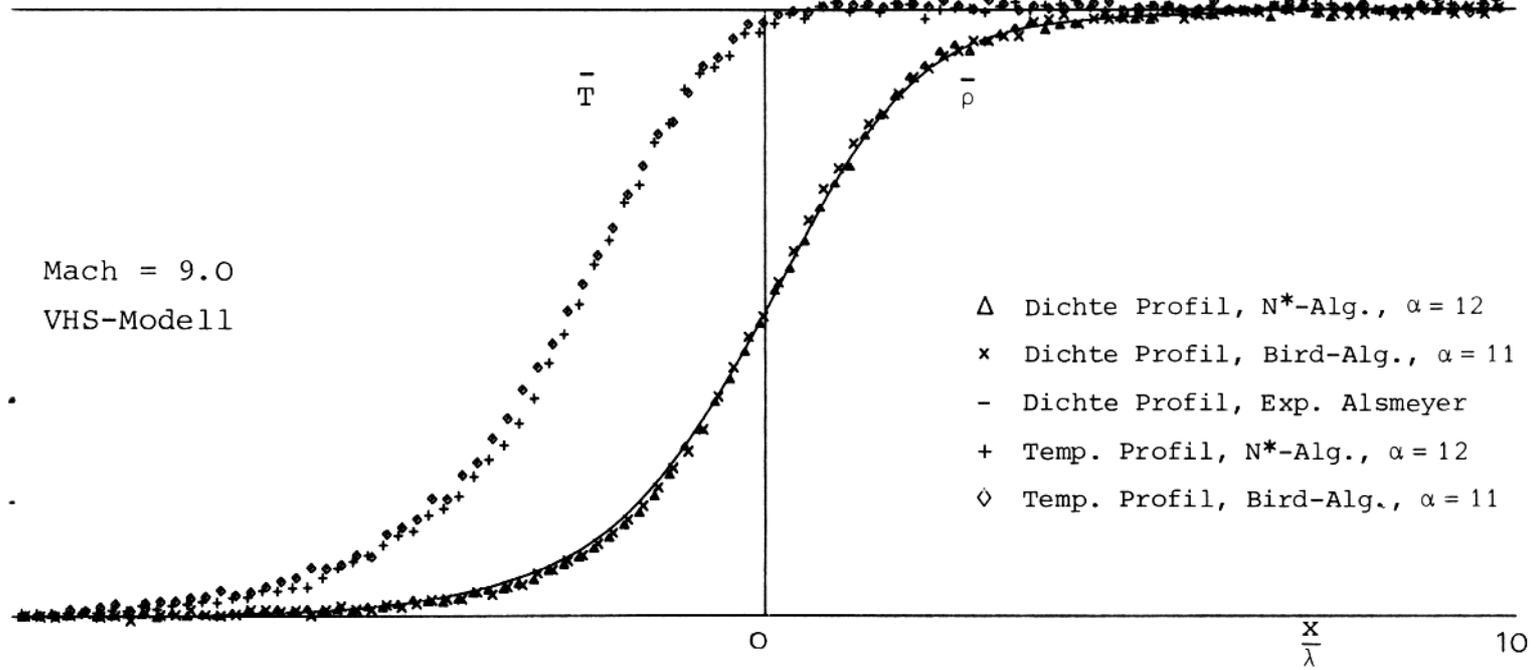
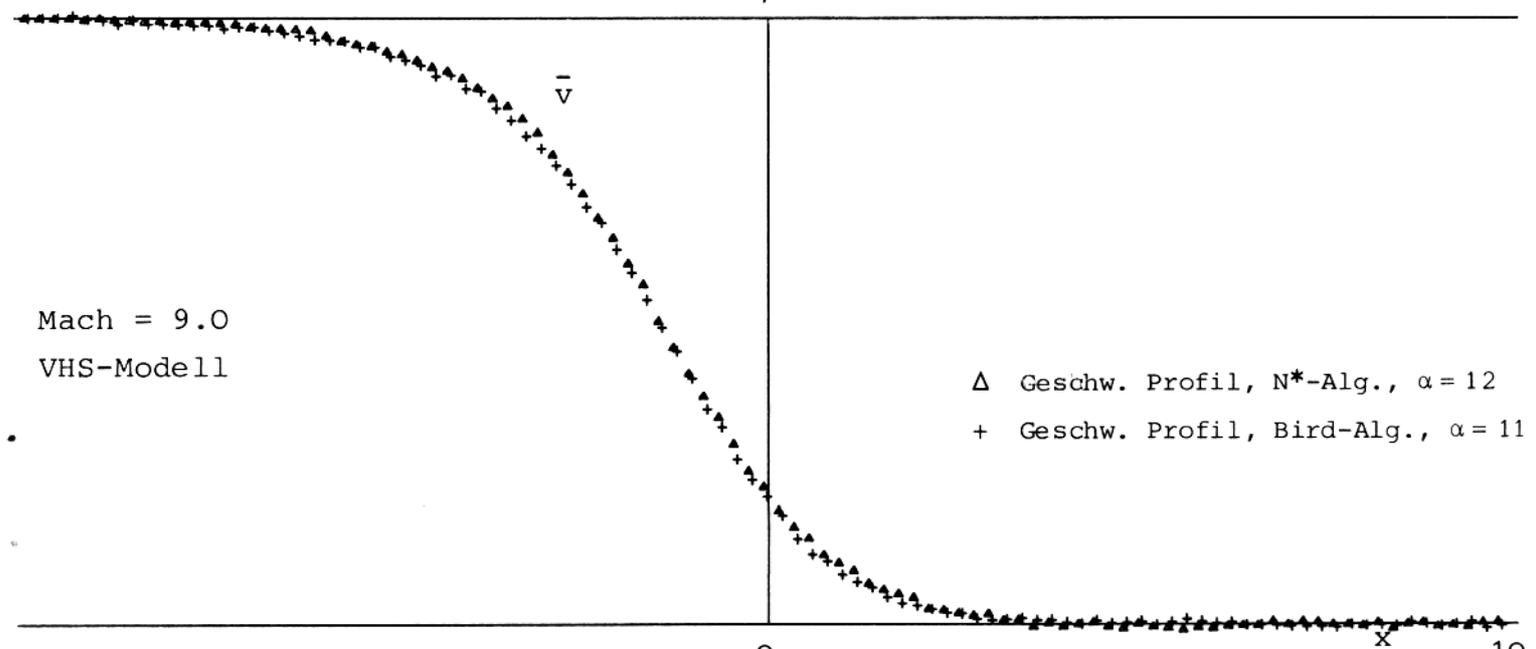


Bild 8



Bei gleichem Stoßmodell ergibt der Bird-Algorithmus etwas steilere Dichteprofile als der N*-Algorithmus. Die Unterschiede werden kleiner je "weicher" das Stoßmodell ist (Bei Maxwellmolekülen erhielt Nanbu Übereinstimmung seiner Ergebnisse mit denen des Bird-Algorithmus [13]), und deutlicher bei höheren Machzahlen. Die Erfahrung, daß im unteren und mittleren Machzahlenbereich hingegen das Stoßmodell eine kleinere Rolle spielt, findet man auch bei Alsmeyer [10].

Für $M_s = 1.55$ und $M_s = 3.8$ erzielten wir bei gleichem Stoßmodell [VHS, $\alpha = 11$] gute Übereinstimmung der Ergebnisse [Bilder (9) bis (11)].

Bild 9

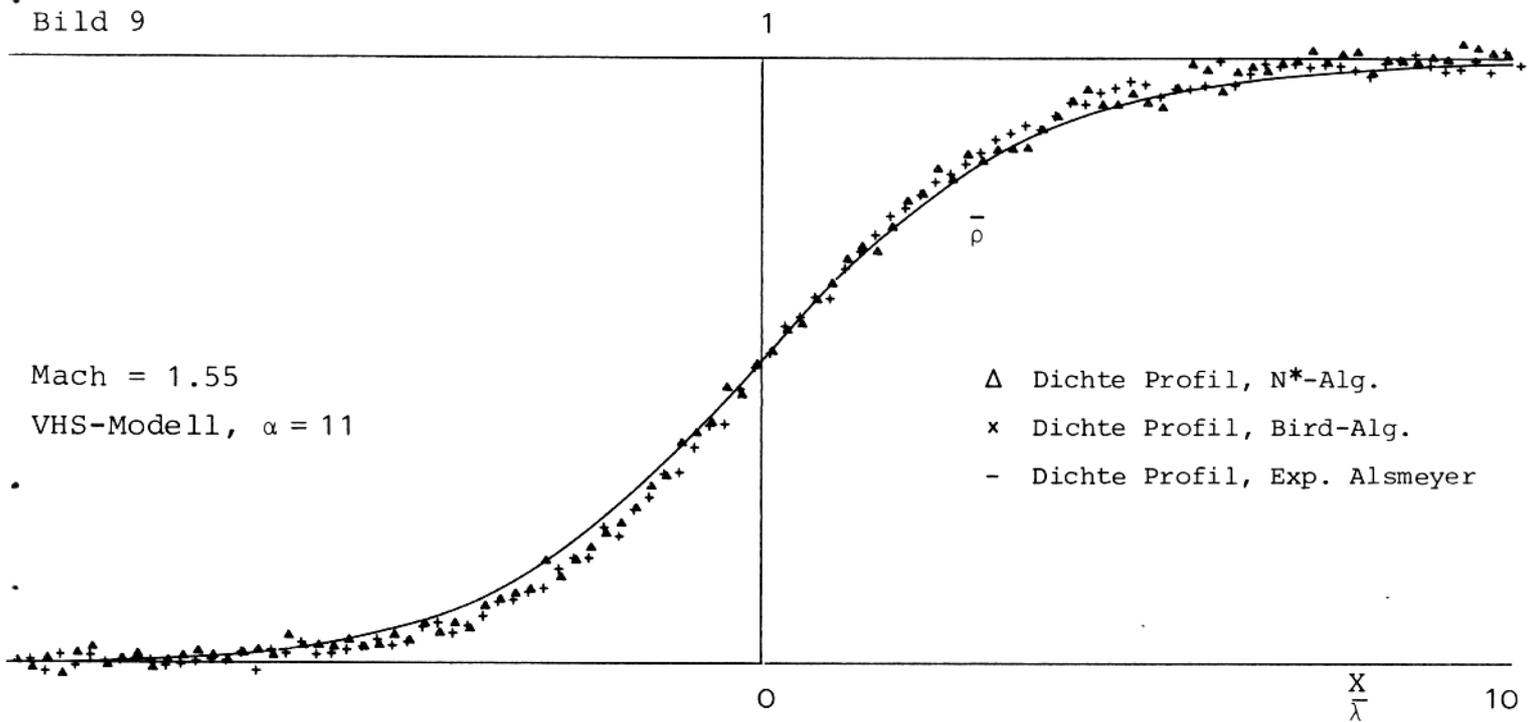


Bild 10

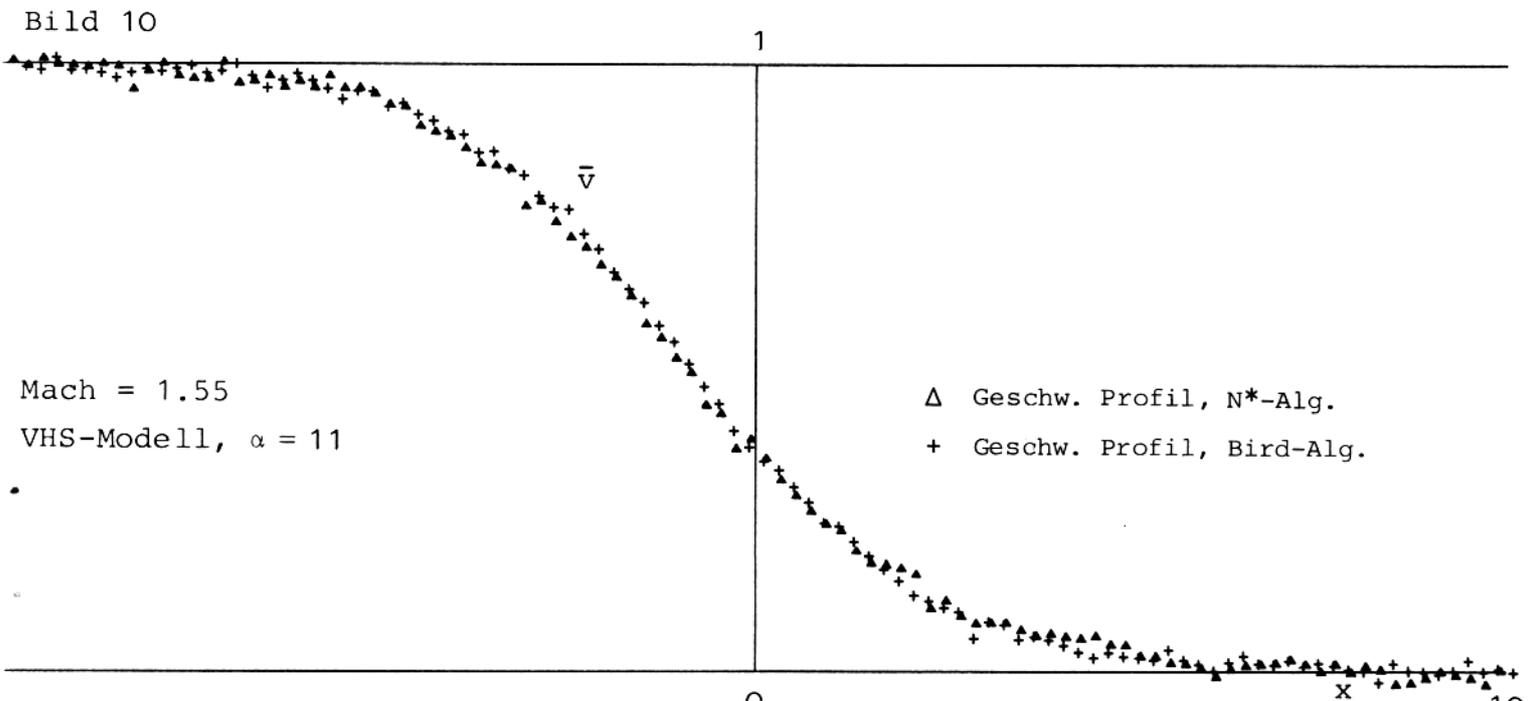
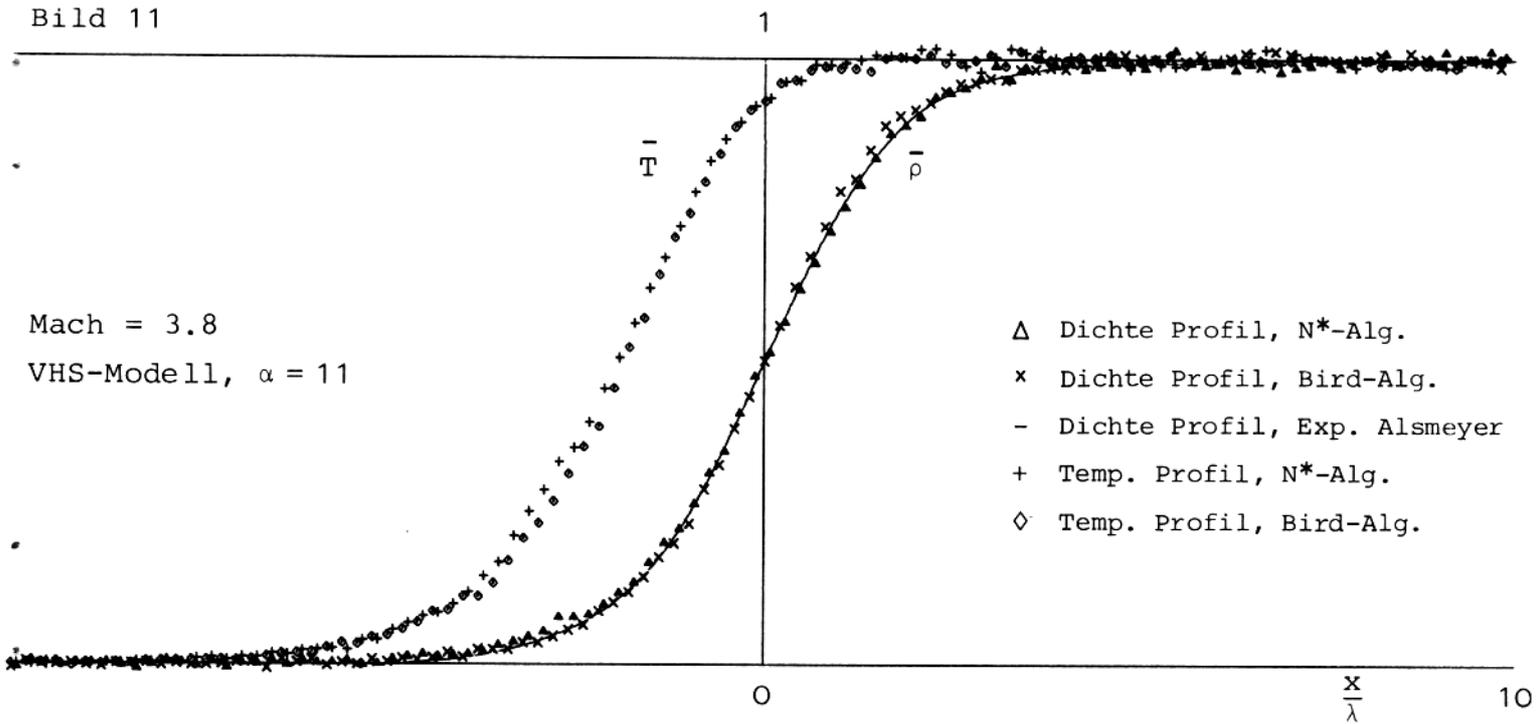


Bild 11



Die Abweichungen bei $M_s = 1.55$ vom gemessenen Profil wurden auch bei früheren Rechnungen mit dem Bird-Algorithmus gefunden und durch das Fehlen anziehender Kräfte beim verwendeten Stoßmodell zu erklären versucht [10]. Die zuletzt angeführten Rechnungen wurden mit etwas anderen Simulationsparametern erzielt: $\Delta \hat{x} = 0.2$, $\Delta \hat{t} = 0.1$, $NM = 40000$, $\hat{t} = 24$, $L = 10$ und Mittelung über 60 Läufe. Für $M_s = 3.8$ bringen wir hierzu noch einen Vergleich der Rechenzeiten:

$M_s = 3.8$	CPU sec	SBU
Bird	12900	50000
N*	11700	54000

Beide Verfahren zeigen bei gleichem Aufwand sehr ähnliche Ergebnisse. Zu einer Entscheidung, welches der Verfahren die besseren Resultate brachte, konnten wir nicht gelangen.

Wir haben den Vergleich des N*- mit dem Birdalgorithmus bei der gleichen Teilchenzahl NM durchgeführt. Eine möglichst große Teilchenzahl ist natürlich für beide Verfahren günstig. Man muß allerdings sagen, daß der Bird-Algorithmus weniger empfindlich auf eine Reduktion der Teilchenzahl als der N*-Algorithmus reagiert. Der Grund dafür dürfte darin zu suchen sein, daß beim Nanbu-Verfahren Energie und Impuls nur im Mittel erhalten bleiben. Auch bezüglich der Parameter Δx und Δt ist der N*-Algorithmus (wir haben hier noch zusätzlich L geeignet zu wählen) sensibler.

Das muß kein Nachteil des Verfahrens sein; nur ist in diesem wichtigen Punkt der richtigen Wahl der Simulationsparameter noch Arbeit zu leisten. Überhaupt geben wir zu bedenken, daß wir einen in praktischer Hinsicht schon ausgereiften Algorithmus mit einem sehr jungen noch entwicklungsfähigen Algorithmus verglichen haben. Bei unserer oben beschriebenen Simulationsmethode haben wir die Erfahrung gemacht, daß die Stoßwelle um eine Mittelpunktslage oszilliert und deshalb zur aufwendigen Mittelung über 50 bis 60 Läufe zu einer festen Zeit t gegriffen. Auch Nanbu war bei seinen Stoßwellenrechnungen (mit etwas anderen Randbedingungen) mit diesem Problem konfrontiert und hat eine weniger aufwendige Strategie gewählt [13]. Eine interessante Anregung, wie man allgemein bei Simulationsproblemen den Aufwand reduzieren könnte, stammt von Mitgliedern der Arbeitsgruppe Technomathematik: Man mittle nur über einige unabhängige Läufe und eliminiere die statistischen Schwankungen mit Hilfe eines "problemgerechten Filters".

5. Zur Vektorisierung der Algorithmen

Unter Vektorisierung kann man hier die Adaption von Computerprogrammen an die spezielle Architektur des Rechners verstehen. Der Vektorrechner CYBER 205 ist nach dem Pipeline-Prinzip gebaut. Bei diesem Konzept wird eine hohe Leistung erzielt, wenn die Algorithmen in dem Sinn parallel sind, daß viele gleiche Operationen mit unabhängigen in Folge gespeicherten Daten (CYBER-Vektoren) durchzuführen sind.

Ein Blick auf das schematische Flußdiagramm Fig. 1 Seite 3 zeigt, daß auch für die Laufzeit des Programms die sich fortlaufend wiederholenden Schritte Stoßprozeß und stoßfreie Bewegung die entscheidenden Teile sind. Die stoßfreie Bewegung wird bei beiden Verfahren gleich durchgeführt. Die Vorschrift, daß jedes Teilchen gemäß seiner Geschwindigkeit um $v \cdot \Delta t$ verschoben wird

$$(*) \quad \vec{x}^{(i)} \mapsto \vec{x}^{(i)} + \Delta t \vec{v}^{(i)} \quad (i=1, \dots, NM),$$

läßt sich unmittelbar vektorisieren. Inwieweit dann Randbedingungen (feste Körper im Rechengebiet, Bedingungen an den Rändern) durch parallele Algorithmen erfaßt werden können, hängt vom Problem ab.

Das in 4.2 behandelte Stoßwellenproblem ist räumlich eindimensional. Daher interessiert uns von (*) nur die x-Komponente, und die entsprechende Anweisung in CYBER-FORTRAN lautet:

$$PX(1;NM) = PX(1;NM) + DTM * VX(1;NM)$$

Im Feld PX werden die Positionen und im Feld VX die x-Geschwindigkeiten der Teilchen gespeichert. Dann fragen wir vektoriell ab, welche Teilchen das Rechengebiet verlassen haben. Diese werden dann "skalar weiterbehandelt". (Reflexion an der rechten bzw. linken Wand und eventuell Elimination.) Als Vorbereitung für den nachfolgenden Stoßprozeß wird nun für jedes Teilchen die zugehörige Zelle und die Anzahl der Teilchen in jeder Zelle ermittelt. Zusätzlich wird eine Liste angelegt, in der die Teilchen nach aufsteigenden Zellennummern geordnet sind. Dies geschieht größtenteils skalar.

Der zeitaufwendigste Teil bei den Simulationsverfahren ist der Stoßprozeß. Und hier ist der Birdalgorithmus in dem Sinn rekursiv, daß nach einem Stoß die alten Geschwindigkeiten sofort durch die neuen ersetzt werden und damit weitergerechnet wird. Eine vernünftige Vektorisierung auf der CYBER 205 war hier nicht zu sehen.

Bemerkung: In [15] wird von einer Vektorisierung des Birdalgorithmus auf der CRAY-1S mit nur sehr bescheidenem Gewinn berichtet. Zudem sind die Bedingungen (z.B. günstige Vektorlänge), die eine erfolgreiche Vektorisierung erwarten lassen, auf der CYBER 205 recht verschieden von denen auf der CRAY-1S.

Im Gegensatz zum Stoßalgorithmus bei Bird ist der N*-Algorithmus von seiner Struktur her parallel. Es wird von der Menge der Geschwindigkeiten zur Zeit $t=0$ auf die Geschwindigkeiten zur Zeit $t = \Delta\tau$ geschlossen:

$$\{v_1, \dots, v_N\}_{t=0} \longrightarrow \{v_1, \dots, v_N\}_{t=\Delta\tau}$$

Wir haben dann auch für diesen rechenintensivsten Teil des Programms einen sehr hohen Vektorisierungsgrad erreicht. Unter Ausnutzung von auf der CYBER eingebauten Vektorfunktionen konnten wir für alle im Rechengebiet befindlichen Teilchen "simultan" die Stoßwahrscheinlichkeiten und die eventuellen Stoßpartner berechnen.

Das gesamte Simulationsverfahren für das Stoßwellenproblem mit dem N*-Algorithmus für den Stoßprozeß wird durch die Vektorisierung um einen Faktor 7 schneller als eine skalare Version des Verfahrens auf der CYBER 205.

Bei den in 4.2 angeführten Rechenzeiten fällt auf, daß das Verhältnis von CPUsec zu SBU beim überwiegend skalar gerechneten Birdverfahren günstiger als beim weitgehend vektorisierten N*-Verfahren ist. Ein hoher Vektorisierungsgrad hat oft einen größeren Aufwand an Speicherplatz zur Folge, und auch dafür ist "ein Preis zu bezahlen".

6. Zusammenfassung

Bisher scheiterte ein Vergleich der verschiedenen in 1. angeführten Varianten zur Simulation der Boltzmann-Gleichung in den meisten Fällen am Rechenaufwand, und der Birdalgorithmus war konkurrenzlos in Bezug auf Anwendungen. Macrossan schreibt in [3], daß es sehr nützlich wäre, zu Vergleichszwecken ein weiteres selbständiges Verfahren zu besitzen. Wir glauben gezeigt zu haben, daß der N*-Algorithmus gute Chancen besitzt, diese Lücke zu füllen. Auf einige Punkte, bei denen noch Verbesserungen zu erzielen sind, haben wir im Bericht hingewiesen.

Was den theoretischen Aspekt betrifft, so sind die Aussichten vielversprechend, das Nanbu-Verfahren auf eine feste Grundlage zu stellen. Erste Schritte dazu hat Hans Babovsky bereits getan, und er ist zuversichtlich, auf Grund seiner Herleitung, die Konvergenz des Verfahrens zu einer Lösung der Boltzmann-Gleichung zeigen zu können. Das wäre ein äußerst interessantes Ergebnis, und vielleicht fallen auch dabei für die Praxis wertvolle Resultate (Wahl der Parameter) ab. In der Bemerkung auf Seite 13 haben wir einen Hinweis gegeben, wie man versuchen könnte, das Birdverfahren theoretisch zu untermauern. Hier müßte noch die ganze Arbeit geleistet werden, und die Erfolgsaussichten erscheinen uns vager.

Ich möchte hier die Gelegenheit benützen und mich für die gute Zusammenarbeit in der Gruppe Neunzert bedanken. Hans Babovsky wurde im Bericht mehrfach erwähnt. Mein besonderer Dank gilt auch Herrn Thomas Mietzner, der mich während des ganzen Projekts in freundschaftlicher Weise unterstützte.

Literaturverzeichnis

- [1] Bird, G.A.: "Direct Simulation Monte Carlo Method", Rarefied Gas Dynamics, 6th. Symposium, part I, p. 85, Academic Press (1969)
- [2] Bird, G.A.: "Molecular Gas Dynamics", Oxford, Clarendon Press (1976)
- [3] Macrossan, M.N.: "Diatomic Collision Models Used in the Monte Carlo Direct Simulation Method Applied to Rarefied Hypersonic Flows", PH.D.-Thesis, University of London (1983)
- [4] Koura, K.: Phys. Fluids 13, p. 1457 (1970)
- [5] Belotserkovskiy, O.M. and Yanitskiy, V.Y.: "Statistical Modelling of Flows of Ideal Monoatomic Gases", Fluid Mech. Soviet Res., 7, p. 42 (1978)
- [6] Deshpande, S.M.: "An Unbiased and Consistent Monte Carlo Game Simulating the Boltzmann Equation", Indian Institute of Science, Report 78 FM 4 (1978)
- [7] Nanbu, K.: "Direct Simulation Scheme Derived from the Boltzmann Equation", J. Phys. Japan, 49, p. 2042 (1980a)
- [8] Nanbu, K.: "Analysis of Cylindrical Couette Flows by Use of the Direct Simulation Method", Phys. Fluids 27, p. 2632 (1984)
- [9] Illner, R. and Neunzert, H.: "On Simulation Methods for the Boltzmann Equation", Proceedings of 2nd MAFPD, Paris (1985), to appear
- [10] Alsmeyer, H.: "Density Profiles in Argon and Nitrogen Shock Waves Measured by the Absorption of an Electron Beam", J. Fluid Mech. 74, p. 497 (1976)
- [11] Nanbu, K.: "Interrelations Between Various Direct Simulation Methods for Solving the Boltzmann Equation", J. Phys. Soc. Japan, 52, p. 3382 (1983)

- [12] Sznitman, A.: "Équations de type de Boltzmann, spatialement homogènes", Zeitschrift für Wahrscheinlichkeitstheorie und verwandte Gebiete, 66, 559-592 (1984)
- [13] Nanbu, K. and Watanabe, Y.: "Analysis of the Internal Structure of Shock Waves by Means of the Exact Direct-Simulation Method", Rep. Inst. High Mech., Tōhoku Univ. Vol. 48 (1984)
- [14] Babovsky, H.: "On a Simulation Scheme for the Boltzmann Equation", Math. Meth. Appl. Sci., 9 (1986), to appear
- [15] Gentsch, W.: "Vectorization of Computer Programs with Applications to Computational Fluid Dynamics", Braunschweig; Wiesbaden, Vieweg (1984)