

Fokker-Planck 方程有限解析 / Monte Carlo 数值模拟方法¹⁾

徐江荣^{*,2)} 周俊虎[†] 张平^{*} 岑可法[†]

^{*}(杭州电子科技大学应用物理系, 杭州 310018)

[†](浙江大学热能工程研究所, 杭州 310027)

摘要 对白噪声驱动随机系统的 Fokker-Planck 方程进行约化, 求得约化方程的解析解, 使用局部解析解和 Monte Carlo 结合方法求解常系数 Fokker-Planck 方程, 并与常系数 Fokker-Planck 方程的精确解进行对比, 之后求解了变驱动力系统的行为. 数值模拟结果表明, 有限解析 / Monte Carlo 结合的方法, 能成功求解一维 Fokker-Planck 方程, 求解粒子数为 10^5 个, 能获得十分光滑的 PDF 分布曲线, 计算颗粒在 300 个时, 就能获得较好的均值. 其研究为两相湍流 PDF 模型新计算方法研究提供基础.

关键词 Fokker-Planck 方程, Monte Carlo 方法, 数值计算, 两相流动

中图分类号: TK121 文献标识码: A 文章编号: 0459-1879(2006)01-0073-06

引 言

基于概率密度函数 (PDF) 的单相湍流流动、湍流反应流动和湍流两相流动的模型和数值模拟研究在近 20 年中有了长足的发展, 一方面因为 PDF 方法来自于经典统计物理, 有很强的基础性和广泛的适应性, 因而 PDF 方法成为发展上述三类流动模型的有效方法, 使得 PDF 模型比雷诺平均两阶矩模型 (被称为“宏观层次”) 高一个层次, 被称为“中观层次”^[1]. 另一方面, 直接求解包含随机过程的 PDF 输运方程成为极具挑战性的研究课题^[1].

PDF 方程的求解, 在单相湍流流动和湍流反应流动两个领域同时开展. 单相湍流流动的有限体积 / 颗粒混合求解方法研究取得良好的结果, 并成功地对稳态、非稳态、可压缩、不可压缩流动问题进行了数值模拟^[2~4]. 更多的研究集中在湍流反应流动领域, 以 Pope 为主的研究组就有限体积 / 颗粒混合求解方法、位置 - 速度 - 标量 - 频率联合 PDF 求解、结构 / 非结构网格求解方法、随机微分方程格式精度等诸多方面展开研究^[5~9], 使有限体积 / 颗粒法混合求解方法成为了一种较成熟的计算方法.

本文的研究是 PDF 方程的一个新数值方法的

第 1 步. 新方法主要研究两相湍流流动, 暂且不考虑单相湍流的计算方法, 认为单相湍流可以用现有的模型获得流动速度、雷诺应力、压强、湍流耗散率等流场的平均信息, 将研究的重点放在颗粒 PDF 输运方程的求解上. 由于颗粒 PDF 输运方程在位置 - 速度高维相空间上, 常规的 Monte Carlo 方法需要较多的 CPU 时间. 考虑先获得局部 PDF 方程的解析阶, 再结合 Monte Carlo 方法进行联合求解, 因此称之为“有限解析 / Monte Carlo 方法”. 本文使用上述思路求解一个可获得准确解的 1-D 常系数 Fokker-Planck 方程, 以验证新方法的准确性, 再求解变系数 Fokker-Planck 方程, 并探讨有关算法的几个问题.

1 白噪声系统 Fokker-Planck 方程解析解

考虑白噪声驱动随机系统 Langevin 方程

$$\left. \begin{aligned} \dot{X} &= V(X, t) \\ \dot{V} &= -\beta[V(X, t) - F(X)] + \Gamma(t) \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

其中 β 为常数, $\Gamma(t)$ 为白噪声驱动力, 定义为

$$\langle \Gamma(t) \rangle = 0, \quad \langle \Gamma(t)\Gamma(t') \rangle = 2Q\delta(t-t')$$

2004-04-13 收到第 1 稿, 2005-11-30 收到修改稿.

1) 浙江省自然科学基金 (Y105028) 和教育部跨世纪优秀人才培养计划 (2002(48)) 资助项目.

2) E-mail: jrxu@hzjee.edu.cn

定义概率密度函数 $\rho = \rho(t; X, V)$, 对应的 Fokker-Planck 方程为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial X}(V\rho) + \frac{\partial}{\partial V}[-\beta(V - F)\rho] = Q \frac{\partial^2 \rho}{\partial V^2} \quad (2)$$

1.1 约化方程解析解

在 $X \sim X + dX$ 微分范围内, 定义速度空间 PDF $\varphi = \varphi(v, t)$ 满足的 Fokker-Planck 方程, 此时 F 看作常数

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial V}[-\beta(V - F)\varphi] = Q \frac{\partial^2 \varphi}{\partial V^2} \quad (3)$$

仿照文献 [10] 的方法, 方程 (3) 的解为 [10]

$$\varphi(t; V) = N(t) \exp \left[-\frac{1}{2\sigma(t)}(V - b(t))^2 \right] \quad (4)$$

其中

$$\left. \begin{aligned} N(t) &= [\pi\sigma(t)]^{1/2} \\ \sigma(t) &= (Q/\beta)[1 - \exp(-2\beta t)] \\ b(t) &= b_0 \exp(-\beta t) + F \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

不难求得速度的两阶矩

$$\langle V \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} V\varphi(t; V)dV / \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(t; V)dV = b(t) \quad (6)$$

$$\langle (V - \langle V \rangle)^2 \rangle = \left[\int_{-\infty}^{\infty} V^2\varphi(t; V)dV / \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(t; V)dV \right] - \langle V \rangle^2 = \sigma(t) \quad (7)$$

1.2 白噪声系统常系数 Fokker-Planck 方程解析解

将 F 可以看作常数, 方程 (2) 为 Ornstein-Uhlenbeck 过程, 其一般形式为 [10]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} (A_{ij}x_j\rho) = \sum_i \sum_j \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} [D_{ij}\rho]$$

将它进行 Fourier 变换, 可以转换到波数空间, 方程变为

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} = \sum_i \sum_j A_{ij}k_i \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial k_j} - \sum_i \sum_j D_{ij}k_i k_j \bar{\rho}$$

其中 $\bar{\rho}$ 为 ρ 的 Fourier 空间变换量, 通过求解和 Fourier 反变换, 求得其准确解 [10]

$$\rho(t; V) = N(t) \exp \left\{ -\frac{1}{2 \det[\sigma(t)]} [\sigma_{22}(X - M_1)^2 - 2\sigma_{12}(X - M_1)(V - M_2) + \sigma_{11}(V - M_2)^2] \right\} \quad (8)$$

其中 $\det[]$ 为矩阵行列式. 式中的平均量和方差可由以下方程组求得

$$\left. \begin{aligned} \dot{M}_1 &= M_2, & M_1(0) &= 0 \\ \dot{M}_2 &= -\beta M_2, & M_2(0) &= B(0) \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

$$\left. \begin{aligned} \dot{\sigma}_{11} &= 2\sigma_{12} \\ \dot{\sigma}_{12} &= -\beta\sigma_{12} + \sigma_{22}, & \sigma_{ij}(0) &= 0 \\ \dot{\sigma}_{22} &= -2\beta\sigma_{22} + 2Q \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

式 (10) 的初始条件由方程转换到波数空间时确定. 不难求得速度的两阶矩

$$\langle V \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} V\varphi(t; V)dV / \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(t; V)dV = M_2 + \frac{\sigma_{12}}{\sigma_{11}}(M_1 - X) \quad (11)$$

$$\langle (V - \langle V \rangle)^2 \rangle = \left[\int_{-\infty}^{\infty} V^2\varphi(t; V)dV / \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(t; V)dV \right] - \langle V \rangle^2 = \sigma_{22} - \frac{\sigma_{12}^2}{\sigma_{11}} \quad (12)$$

2 数值解方法

考虑随机微分方程

$$dX = D(X(t), t)dt + B(X(t), t)dw \quad (13)$$

其中 $D(X(t), t)$ 为漂移系数, $B(X(t), t)$ 为扩散系数, dw 为 Wiener 随机过程. 颗粒的局部平均特性已经由局部 Fokker-Planck 方程求得, 即式 (5)~(7), F 看作常数, 统一表达为

$$\Phi = \Phi(X(t), t) \quad (14)$$

在本文中 表示颗粒的平均速度, 速度均方值. 式 (13),(14) 的积分采用预报 - 校正数值格式, 其步骤如下:

(1) 在 $0.5\Delta t$ 时间内, 获得 $X^{1/2}$

$$X^{1/2} = X(t_0) + 0.5\Delta t D(X(t), t)$$

(2) 求得粒子路径上的除位置外其它量 (平均速度, 速度均方值)

$$\Phi(t_0 + 0.5\Delta t) = \Phi(X^{1/2}, t + 0.5\Delta t)$$

(3) 由下式

$$\begin{aligned}
X(t_0 + \Delta t) &\approx Y(t_0 + \Delta t) = \\
&X(t_0) + D(X^{1/2}, t_0 + 0.5\Delta t) \frac{1}{2} \Delta t + \\
&B(X^{1/2}, t_0 + 0.5\Delta t) \frac{1}{2} \Delta t \zeta \\
\Phi(t_0 + \Delta t) &= \Phi(Y, t + \Delta t)
\end{aligned}$$

求得 $X(t_0 + \Delta t)$ 的近似值 $Y(t_0 + \Delta t)$. 其中 ζ 是以第 (2) 步计算获得的平均值和方差决定的高斯分布随机数, 用以表示 Wiener 随机过程, 粒子从初始位置按初始随机条件释放.

上述方法称为预报 - 校正 Euler 积分方法 [8], 该方法有以下两个优点: 1) 每一步积分都是两阶精度, 因而整个格式为两阶精度格式. 2) 每一步所用到的方程的系数都是在同一个时间步内的当地信息.

考虑任意物理量 $g(X)$, 其统计平均为 $\langle g(X) \rangle$, 定义误差 ε , 上述格式满足 [8]

$$|g[X(t)] - \langle g[X(t)] \rangle| \leq C_g \Delta t^2$$

为弱收敛二阶精度格式.

3 数值模拟结果分析

数值模拟分为两个部分. 首先是利用局部 Fokker-Planck 方程解析解式 (5)~(7), 跟踪粒子运

动, 统计获得粒子的平均速度和方差, 并与常系数 Fokker-Planck 方程的准确解式 (9)~(12) 比较, 粒子数为 10^5 个获得的 PDF 曲线非常光滑, 均值在粒子数为 300 时已经接近精确值. 每个时间步的 CPU 时间约为 60s, 当时间步较大时, 为了保证收敛精度, 需要的 CPU 时间略长一些.

图 1 是 Fokker-Planck 方程扩散系数 Q 变化时, 系统在 $X = 2$ 处的模拟结果和准确解的比较, 计算时取 $F = 8, \beta = 5, B(0) = 0.2F$. 从计算结果可以看出, 随着 Q 的增大, 粒子系统的方差增大, 而平均速度减小, 结论是 Fokker-Planck 方程扩散系数 Q 使得随机粒子的平均速度降低. 其误差见表 1, 方差的误差要比均值的误差大得多. 图 2 是 Fokker-Planck 方程漂移系数 β 变化时, 系统在 $X = 2$ 处的模拟结果和准确解的比较, 计算时取 $F = 8, Q = 2, B(0) = 0.2F$. 从计算结果可以看出, 随着 β 的增大, 粒子系统的平均速度减小, 方差也在减小. 其误差见表 2, 随着 β 的增大, 均值的误差减小, 方差的误差增大. 图 3 是粒子的位置变化时, 系统的模拟结果和准确解的比较, 计算时取 $F = 8, Q = 2, \beta = 8, B(0) = 0.2F$. 从计算结果可以看出, 随着 X 的增大, 粒子系统的方差增大, 而平均速度减小, 当 $X = 5$ 时, 平均速度已接近 F 值. 方差接近其 Q/β 值, 这符合真实情况, 可以认为 $t \gg 1/\beta$. 误差见表 3. 随着 X 的增大, 误差增大.

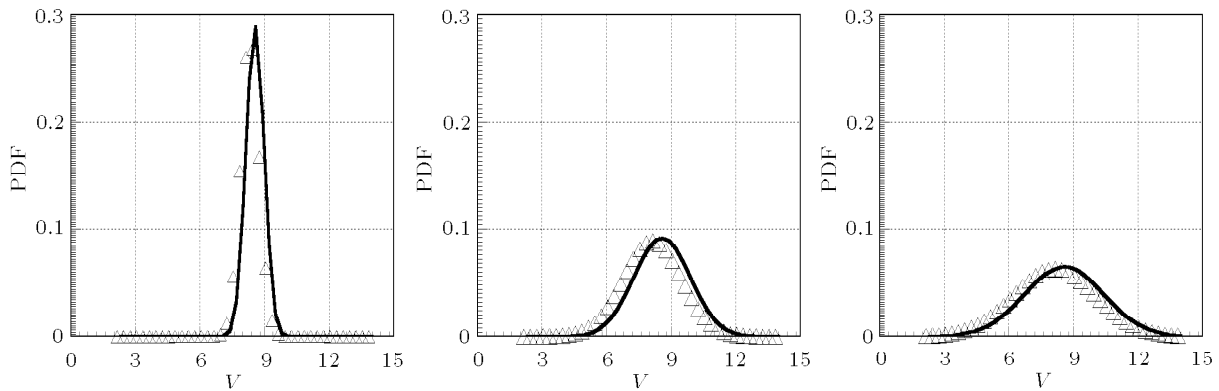


图 1 不同 Q 时 PDF 分布函数模拟值与准确值比较

Fig.1 PDF between calculated and analytic with different Q

表 1 不同 Q 时平均速度和方差比较

Table 1 First and second moments between calculated and analytic with different Q

Q	Calculated first moments	Analytic first moments	Error %	Calculated second moments	Analytic first moments	Error %
1	8.4665	8.5586	1.08	0.1815	0.1695	7.08
10	8.3745	8.3943	0.24	1.8217	1.7015	7.06
20	8.2894	8.3031	0.16	3.6416	3.4021	7.04

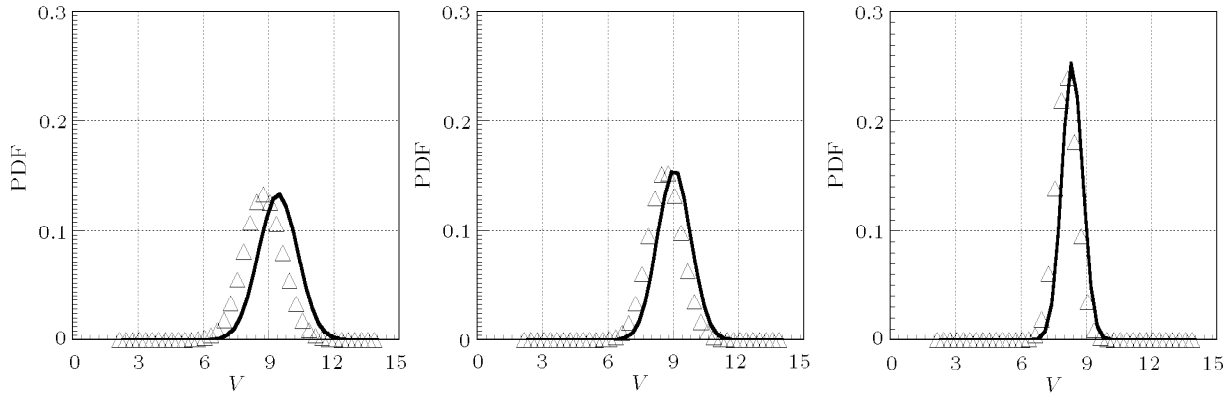


图 2 不同 β 时 PDF 分布函数模拟值与准确值比较

Fig.2 PDF between calculated and analytic with different β

表 2 不同 β 时平均速度和方差比较

Table 2 First and second moments between calculated and analytic with different β

β	Calculated first moments	Analytic first moments	Error %	Calculated second moments	Analytic first moments	Error %
0.5	8.894 0	9.431 3	5.70	0.806 8	0.804 6	0.27
2	8.761 5	9.030 6	3.98	0.599 7	0.589 1	1.80
8	8.222 7	8.348 9	1.51	0.245 1	0.221 3	10.75

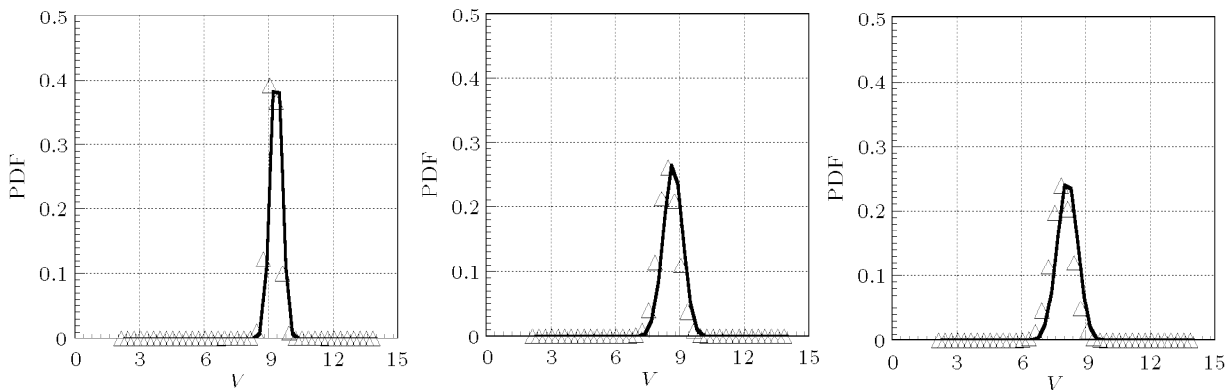


图 3 不同 X 时 PDF 分布函数模拟值与准确值比较

Fig.3 PDF between calculated and analytic with different X

表 3 不同 X 时平均速度和方差比较

Table 3 First and second moments between calculated and analytic with different X

X	Calculated first moments	Analytic first moments	Error %	Calculated second moments	Analytic first moments	Error %
0.2	9.333 7	9.348 7	0.16	0.073 1	0.072 7	0.05
1	8.592 7	8.676 9	0.97	0.211 7	0.201 0	5.82
5	8.010 8	8.137 2	1.55	0.249 9	0.229 7	8.79

数值模拟的第 2 部分是变系数 $F = F(X)$ 时的分网格数值模拟，即在每个网格中，按照上述方法进行计算，下一个网格计算的初始条件由上一个网

格给出，每个网格的计算颗粒数为 1000 个。

图 4 的计算条件为

$$F(x) = 2x + 2, \quad 0 < x \leq 2$$

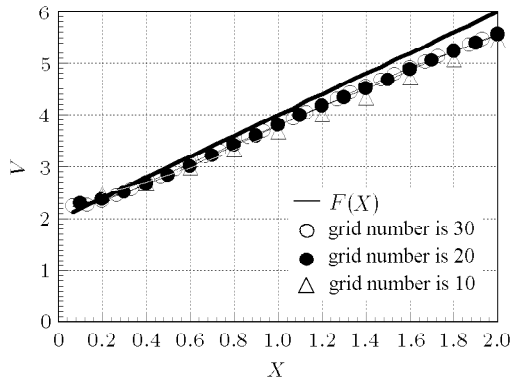


图 4 粒子平均速度与系统线性驱动速度比较
Fig.4 Calculated average velocity and $F(X)$ in linear system

$\beta = 3, Q = 6$, 第 1 网格的 $B(0) = 0.1F(0)$ 采用不同的网格数, 其计算结果略有不同, 但非常接近.

图 5 的计算条件为

$$F(x) = x^2 - 2x + 2, \quad 0 < x \leq 2$$

$\beta = 3, Q = 6$, 第 1 网格的 $B(0) = 0.1F(0)$, 同样采用不同的网格数, 其计算结果略有不同, 但非常接近. 可以看出, 随机粒子的漂移可以大于 F , 也可以小于 F , 主要取决于初始时刻的漂移量的正负.

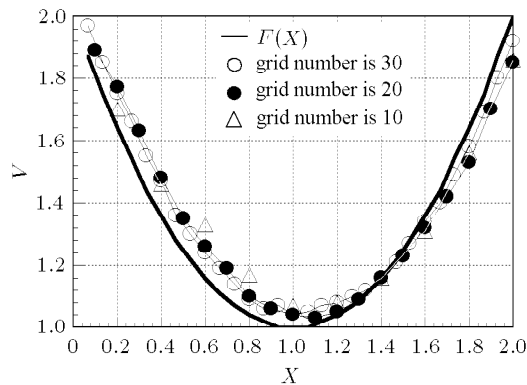


图 5 粒子平均速度与系统非线性驱动速度比较
Fig.5 Calculated average velocity and $F(X)$ in nonlinear system

4 小 结

本文通过对白噪声驱动随机系统 Fokker-Planck 方程进行约化, 求得方程的解析解, 使用局部解析解和 Monte Carlo 方法结合求解常系数 Fokker-Planck 方程, 并与常系数 Fokker-Planck 方程的精确解进行对比. 之后求解了变驱动力系统的行为, 可总结如下:

(1) 有限解析 / Monte Carlo 方法结合, 能成功求解一维 Fokker-Planck 方程, 该方法的多维 Fokker-Planck 方程求解有待进一步研究;

(2) 如果求解粒子数足够多, 如本文中的 10^5 个, 能获得光滑的 PDF 分布曲线, 计算颗粒在 300 个时, 就能获得较好的均值;

(3) 该方法的 CPU 时间消耗少, 能求解粒子的复杂经历问题;

(4) 误差的变化有一定的规律, 在下一步的研究中可以考虑改进积分方法和统计方法以改善求解精度和进行误差分析.

本文的目的是发展 PDF 两相湍流模型的新计算方法, 以解决高维相空间 PDF 方程求解的经济性和稳定性问题, 本文仅是新方法研究的初步阶段.

参 考 文 献

- 1 Minier JP, Perirano E. The PDF approach to turbulent poly-dispersed two-phase flows. *Physics Report*, 2001, 352: 1~214
- 2 Delarue BJ, Pope SB. Application of PDF methods to compressible turbulent flows. *Phys Fluids*, 1997, 9(9): 2704~2715
- 3 Welton W, Pope SB. PDF model calculations of compressible turbulent flows using smoothed particles hydrodynamics. *J Comput Phys*, 1997, 134: 150~168
- 4 Jenny P, Muradoglu M, Liu K, et al. PDF simulations of a bluff-body stabilized flow. *J Comput Phys*, 2001, 169: 1~23
- 5 Xu J, Pope SB. Numerical studies of PDF/Monte Carlo methods for turbulent reactive flows. *J Comput Phys*, 1999, 155: 192~230
- 6 Muradolu M, Pope SB, Caughey DA. The hybrid method for the PDF equations of turbulent reactive flows: consistency conditions and correction algorithms. *J Comput Phys*, 2001, 172: 841~878
- 7 Li G, Modest MF. An effective particle tracing scheme on structured/unstructured grid in hybrid finite volume/PDF Monte Carlo methods. *J Comput Phys*, 2001, 173: 187~207
- 8 Cao RF, Pope SB. Numerical integration of stochastic differential equation: weak second-order mid-point scheme for application in composition PDF method. *J Comput Phys*, 2003, 185: 194~212
- 9 Zhang YZ, Haworth DC. A general mass consistency algorithm for hybrid particles/finite volume/PDF methods. *J Comput Phys*, 2004, 194: 156~193
- 10 胡岗. 随机力与非线性系统. 上海: 上海科技教育出版社, 1994. 65~68 (Hu Gang. Stochastic Forces and Nonlinear Systems. Shanghai: Shanghai Science and Technological Education Press, 1994. 65~68(in Chinese))

A PARTICLE TRACING SCHEME FOR FOKKER-PLANCK EQUATION IN FINITE ANALYTIC/MONTE CARLO METHODS ¹⁾

Xu Jiangrong^{*,2)} Zhou Junhu[†] Zhang Ping^{*} Cen Kefa[†]

^{*}(Department of Applied Physics, Hangzhou Dianzi University, Hangzhou 310018, China)

[†](Institute for Thermal Power Eng., Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

Abstract Fokker-Planck equation for Stochastic system with white noise is reduced to velocity state vector, and the analytic solution of the reduced Fokker-Planck equation is obtained. The hybrid scheme in Finite Analytic/Monte Carlo methods is developed to simulate constant parameters complete Fokker-Planck equation and complete Fokker-Planck equation with variable $F(X)$. It is shown that the results obtained from the numerical algorithm are in good agreement with the analytic solutions, and that the simulating PDF is smoothed when calculated particles number is 10^5 , and the simulating average moments are about to analytic solutions when calculated particles number is 300. This work described here is first part of a long-term study in pursuit of a new simulating scheme for two-phase flows.

Key words Fokker-Planck equation, Monte Carlo method, numerical simulating, two-phase flows

Received 13 April 2004, revised 30 November 2005.

1) The project supported by the Natural Science Foundation of Zhejiang Province (Y105028) and the Program of Ministry of Education of China for Across Century Excellent Talents(2002(48)).

2) E-mail: jrxu@hzjee.edu.cn