



Бобылев А.В., Карпов С.А.,
Потапенко И.Ф.

Методы типа Монте-Карло
для моделирования
кулоновских столкновений в
многокомпонентной плазме

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Бобылев А.В., Карпов С.А., Потапенко И.Ф. Методы типа Монте-Карло для моделирования кулоновских столкновений в многокомпонентной плазме // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2012. № 26. 32 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2012-26>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В. Келдыша
Российской Академии наук**

Бобылев А.В., Карпов С.А., Потапенко И.Ф.

**Методы типа Монте-Карло для моделирования
кулоновских столкновений в многокомпонентной
плазме**

Москва - 2012

Бобылев А.В., Карпов С.А., Потапенко И.Ф. Методы типа Монте-Карло для моделирования кулоновских столкновений в многокомпонентной плазме. Препринт Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, 2012, 32 страницы, 5 рисунков, библиография: 12 наименований.

Общий метод прямого моделирования типа Монте-Карло для решения уравнения Больцмана для далекодействующих потенциалов и уравнения Ландау-Фоккера-Планка был предложен Бобылевым и Нанбу в 2000 году. В этой работе мы даем совсем другой подход, который приводит к тому же общему методу, однако делает его суть абсолютно ясной и прозрачной. Метод объясняется для случая многокомпонентной плазмы. Даны строгие оценки точности метода.

Bobylev A.V., Karpov S.A., Potapenko I.F. Monte Carlo methods for simulation of Coulomb collisions in multi-component plasmas. Preprint, Inst. Appl. Mathem., Russian Academy of Sciences, 2012, 32 Pages, 5 Figures, 12 References.

The general DSMC method for solving Boltzmann equation for long-range potentials and Landau-Fokker-Planck equation was proposed by Bobylev and Nanbu in 2000. We present in this paper a completely different approach, which leads to basically the same general method, but makes its essence absolutely clear and transparent. The method is explained for the general case of multi-component plasma. Some rigorous estimates for accuracy of the method are presented.

Введение

Общий метод решения уравнения Больцмана для далекодействующих потенциалов и решения уравнения Ландау - Фоккера -Планка был предложен Бобылевым и Нанбу в 2000 [1]. В некоторой степени это было развитием более раннего подхода Нанбу к кулоновским столкновениям [2]. Методы, предложенные в [1, 2] позднее были приложены к различным моделям задач физики плазмы, исследованы детально и позднее развиты разными авторами (см., например, [3, 4] и ссылки в [4]). Тем не менее общий метод [1] не был ясно понят и поэтому многие авторы до сих пор используют более сложную первоначальную схему [2] со ссылками на работу [1] лишь как на формальное доказательство соответствия уравнению Ландау - Фоккера -Планка. Причина этого заключается в том, что первое представление метода было дано в [1] в слишком общем и формальном виде.

В данной работе мы даем совершенно другой подход, который приводит в своей основе к тому же общему методу, но проясняет абсолютно отчетливо и доходчиво его суть. Заметим, что первые численные результаты для некоторых типичных задач физики плазмы в случае двухкомпонентной системы, полученные на основе подобной схемы расчета, опубликованы в [5]. Здесь метод объясняется подробно для общего случая многокомпонентной плазмы. Аппроксимация интеграла столкновений Ландау интегралом Больцмана основана на работе [6]. Указано, что рассмотренная схема аппроксимации не единственная. Внимание уделено уравнению Ландау для классической плазмы из n сортов (см., например, [7]). Объясняется, как решать уравнение Больцмана методом Монте-Карло, идея которого была предложена в [8]. Для описания стохастической модели выбран подход [9]. Анализируются возможность выбора оптимальных шагов по времени и возможности ускорения счета. Также даны строгие оценки порядка аппроксимации интеграла столкновений Ландау интегралом Больцмана. Наконец, представлены иллюстративные расчеты, демонстрирующие ускорение счета для двухкомпонентной плазмы.

Аппроксимация уравнений Ландау уравнениями Больцмана

Пусть $\{f_i(\mathbf{v}, t), i = 1, \dots, n\}$ - зависящие от времени $t \geq 0$ функции распределения по скоростям $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^3$ частиц n сортов с массами $\{m_i, i = 1, \dots, n\}$ соответственно. Мы предполагаем, что плотности компонент смеси (в физическом пространстве) выражаются интегралами

$$\rho_i(t) = \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{v} f_i(\mathbf{v}, t), \quad i = 1, \dots, n. \quad (1)$$

Система кинетических уравнений Больцмана для $f_i(\mathbf{v}, t)$ имеет вид

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \sum_{j=1}^n Q_{ij}(f_i, f_j), \quad i, j = 1, \dots, n, \quad (2)$$

где

$$\begin{aligned}
Q_{ij}(f_i, f_j) &= \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{S}^2} d\mathbf{w} d\boldsymbol{\omega} g_{ij}\left(u, \frac{\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega}}{u}\right) [f_i(\mathbf{v}') f_j(\mathbf{w}') - f_i(\mathbf{v}) f_j(\mathbf{w})], \\
\mathbf{v}' &= \frac{1}{m_i + m_j} (m_i \mathbf{v} + m_j \mathbf{w} + m_j u \boldsymbol{\omega}), \\
\mathbf{w}' &= \frac{1}{m_i + m_j} (m_i \mathbf{v} + m_j \mathbf{w} - m_i u \boldsymbol{\omega}); \\
\mathbf{u} &= \mathbf{v} - \mathbf{w}, \quad u \equiv |\mathbf{u}|, \quad \boldsymbol{\omega} \in \mathbb{S}^2; \quad i, j = 1, \dots, n.
\end{aligned} \tag{3}$$

Функция $\sigma_{ij}(u, \mu)$ выражается формулой

$$g_{ij}(u, \mu) = g_{ji}(u, \mu) = u \cdot \sigma_{ij}(u, \mu), \tag{4}$$

где $\sigma_{ij}(u, \mu)$ - дифференциальное сечение рассеяния (в системе центра масс сталкивающихся частиц сортов i и j) на угол $\theta = \arccos(\mu)$, $|\mu| \leq 1$.

Система уравнений Больцмана (2) интересна для нас только как исходный пункт для перехода к уравнениям Ландау. Для такого перехода нужно выбрать специальный вид функций $g_{ij}(u, \mu)$. Этот выбор основан на следующем факте, доказанном много лет назад [6]. Предположим, что функции распределения бесконечно дифференцируемы и быстро убывают на бесконечности со всеми их производными. Следуя идее Ландау, проведем разложение в ряд Тейлора (по малым приращениям скоростей после столкновений) подынтегрального выражения в (3), получим формальный ряд

$$Q_{ij}(f_i, f_j) = \sum_{k=1}^{\infty} Q_{ij}^{(k)}(f_i, f_j), \tag{5}$$

который можно описать следующим образом.

Первый член ряда отвечает приближению Ландау:

$$Q_{ij}^{(1)}(f_i, f_j) = \frac{m_{ij}^2}{2m_i^2} \frac{\partial}{\partial v^\alpha} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} g_{ij}^{(1)}(u) T^{\alpha\beta}(\mathbf{u}) \left(\frac{\partial}{\partial v^\beta} - \frac{m_i}{m_j} \frac{\partial}{\partial w^\beta} \right) f_i(\mathbf{v}) f_j(\mathbf{w}), \tag{6}$$

где предполагается суммирование по повторяющимся индексам $\alpha, \beta = 1, 2, 3$,

$$\begin{aligned}
\mathbf{u} &= \mathbf{v} - \mathbf{w}, \quad m_{ij} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}, \quad T^{\alpha\beta}(\mathbf{u}) = |\mathbf{u}|^2 \delta^{\alpha\beta} - u^\alpha u^\beta, \\
g_{ij}^{(1)}(u) &= 2\pi \int_{-1}^1 d\mu g_{ij}(u, \mu) (1 - \mu).
\end{aligned} \tag{7}$$

Остальные члены ряда (5) можно символически представить в виде

$$Q_{ij}^{(k)}(f_i, f_j) = \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} g_{ij}^{(k)}(u) A_{ij}^{(k)}(\mathbf{v}, \mathbf{w}),$$

$k \geq 2$, где $A_{ij}^{(k)}(\mathbf{v}, \mathbf{w})$ является при любом $k \geq 2$ гладкой интегрируемой функцией, а

$$g_{ij}^{(k)}(u) = 2\pi \int_{-1}^1 d\mu g_{ij}(u, \mu)(1 - \mu)^k. \quad (8)$$

Отсюда становится понятным при каких условиях система уравнений Больцмана (2) "хорошо аппроксимирует" (на формальном уровне, конечно) соответствующую систему уравнений Ландау, т.е. систему

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \sum_{j=1}^n Q_{ij}^{(1)}(f_i, f_j), \quad i, j = 1, \dots, n, \quad (9)$$

в обозначениях (6), (7). Напомним, что нашей задачей является, грубо говоря, построить такое уравнение Больцмана (2), которое аппроксимирует заданные уравнения Ландау (9). Для такой аппроксимации достаточно выбрать функции g_{ij} в виде $g_{ij}(u, \mu; \varepsilon)$, где $\varepsilon > 0$ - малый параметр, и потребовать, чтобы

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} 2\pi \int_{-1}^1 d\mu g_{ij}(u, \mu; \varepsilon)(1 - \mu) &= g_{ij}^{(1)}(u), \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} 2\pi \int_{-1}^1 d\mu g_{ij}(u, \mu; \varepsilon)(1 - \mu)^k &= 0, \quad g_{ij}^{(k)}(u) \xrightarrow[k > 2]{} 0, \end{aligned} \quad (10)$$

где $g_{ij}^{(1)}(u)$ - заданные функции, а $\varepsilon > 0$ произвольно. В качестве простого примера такой аппроксимации можно рассмотреть функции

$$g_{ij}(u, \mu; \varepsilon) = \frac{1}{2\pi\varepsilon} \delta[1 - \mu - \varepsilon a_{ij}(u)], \quad (11)$$

где

$$a_{ij}(u) = \begin{cases} g_{ij}^{(1)}(u), & \text{при } \varepsilon g_{ij}^{(1)}(u) \leq 2, \\ 2\varepsilon^{-1}, & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (12)$$

Такая не физическая функция g_{ij} означает, что рассеяние всегда происходит на фиксированный угол $\theta_{ij} = \arccos[1 - \varepsilon a_{ij}(u)]$ (при столкновении частиц сорта i и j). Такой закон рассеяния очень удобен для метода Монте-Карло (см. ниже). Другое достоинство этой аппроксимации состоит в том, что полная частота столкновений постоянна, т.к.

$$g_{ij}^{tot}(u, \varepsilon) = 2\pi \int_{-1}^1 d\mu g_{ij}(u, \mu; \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} \quad (13)$$

Такую аппроксимацию можно назвать квазимаксвелловской, т.к. полная частота столкновений (для любой пары сортов i и j , включая случай $i = j$) не

зависит от скоростей. Это также дает известные преимущества при использовании методом Монте-Карло. Отметим, что ε имеет размерность $[t][l]^{-3}$, но пока мы игнорируем этот факт, считая ε просто малым положительным параметром.

Наконец, рассмотрим наиболее важный для нас случай уравнения Ландау для классической плазмы из n сортов заряженных частиц с зарядами $\{e_i, i = 1, \dots, n\}$. Считая кулоновский логарифм L постоянным для всех взаимодействий, получим (см., например, [7]) уравнения (6)-(9), где

$$g_{ij}^{(1)}(u) = 4\pi L \frac{e_i^2 e_j^2}{m_{ij}^2 u^3}; \quad i, j = 1, \dots, n. \quad (14)$$

Ясно, что уравнения (2), (3), где функция $g_{ij}(u, \mu; \varepsilon)$ вычисляются по формулам (11), (12), (14) аппроксимируют при $\varepsilon \rightarrow 0$ систему уравнений Ландау (9) для n -компонентной плазмы. Естественное обобщение такой аппроксимации можно получить, подставляя в (2) не функции $g_{ij}(u, \mu; \varepsilon)$ из (11), (12), а функции $g_{ij}\left(u, \mu; \frac{\varepsilon}{\lambda_{ij}}\right)$, где $\{\lambda_{ij} = \lambda_{ji}; i, j = 1, \dots, n\}$ - произвольные положительные числа. Тогда полные частоты столкновений (13)

$$g_{ij}^{tot}(u, \varepsilon) = 2\pi \int_{-1}^1 d\mu g_{ij}\left(u, \mu; \frac{\varepsilon}{\lambda_{ij}}\right) = \frac{\lambda_{ij}}{\varepsilon} \quad (15)$$

будут постоянными (не зависящими от скоростей), но различными для разных сортов сталкивающихся частиц. Такой прием можно использовать для ускорения счета. Заметим, что формальная ошибка описанной выше аппроксимации интеграла столкновений Ландау $Q^{(1)}(f_i, f_j)$ интегралом Больцмана $Q(f_i, f_j)$ имеет первый порядок $O(\varepsilon)$, как это следует из ряда (5), где $Q_{ij}^{(k)}(f_i, f_j) = O(\varepsilon^{k-1})$, $k \geq 2$, если используются формулы типа (11), (12).

Описанная выше простая схема аппроксимации, основанная на равенствах (11), (12), далеко не единственна. Важно лишь удовлетворить условиям (10) и, желательно, условиям постоянства частоты столкновений типа (13) или (15). Мы будем рассматривать ниже только простейшую схему, не пытаюсь ее как-то оптимизировать.

Таким образом, рассматривая задачу приближенного (или численного) решения системы уравнений Ландау для n -компонентной плазмы

$$\frac{\partial f_i(\mathbf{v}, t)}{\partial t} = 2\pi L \sum_{j=1}^n \frac{e_i^2 e_j^2}{m_i^2} \frac{\partial}{\partial v^\alpha} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} R^{\alpha\beta}(\mathbf{u}) \left(\frac{\partial}{\partial v^\beta} - \frac{m_i}{m_j} \frac{\partial}{\partial w^\beta} \right) f_i(\mathbf{v}) f_j(\mathbf{w}), \quad (16)$$

где $R^{\alpha\beta}(\mathbf{u}) = (u^2 \delta^{\alpha\beta} - u^\alpha u^\beta) / u^3$, $\mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{w}$; $\alpha, \beta = 1, 2, 3$, $i, j = 1, \dots, n$, мы на первом этапе выбираем малый параметр $\varepsilon > 0$ и положительные числа $\{\lambda_{ij} = \lambda_{ji}; i, j = 1, \dots, n\}$, а затем приближенно заменяем уравнение Лан-

дау (16) уравнениями Больцмана (2), (3), где

$$g_{ij}(u, \mu) = \frac{\lambda_{ij}}{2\pi\varepsilon} \delta \left[1 - \mu - \text{Min} \left\{ 4\pi\varepsilon \frac{e_i^2 e_j^2 L}{\lambda_{ij} m_{ij}^2 u^3}, 2 \right\} \right]. \quad (17)$$

Стохастическая модель

Плотности компонент $\{\rho_i(t), i = 1, \dots, n\}$, определяемые интегралами (1), не зависят от времени в пространственно однородной задаче. Удобно выбрать в качестве единиц измерения полную плотность числа частиц системы ρ_0 , тогда $\rho_i = c_i \rho_0$, $1 \leq i \leq n$, где c_i - концентрации i -ого сорта частиц, $c_1 + \dots + c_n = 1$. Выберем также характерные единицы скорости v_0 и времени t_0 и положим

$$\tilde{t} = \frac{t}{t_0}, \quad \tilde{\mathbf{v}} = \frac{\mathbf{v}}{v_0}, \quad f_i(\mathbf{v}, t) = \frac{c_i \rho_0}{v_0^3} \tilde{f}_i(\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{t}), \quad 1 \leq i \leq n. \quad (18)$$

Единицу времени для уравнений Ландау удобно выбрать так, чтобы выполнялось равенство

$$\frac{2\pi L e^4}{m^2 v_0^3} \rho_0 t_0 = 1, \quad (19)$$

где L - кулоновский логарифм, а e и m - заряд и масса электрона. Легко проверить, что преобразованные уравнения (16) для функции $\tilde{f}_i(\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{t})$ имеют вид (тильды опущены)

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \sum_{j=1}^n \left(\frac{m}{m_i} \right)^2 Z_i^2 Z_j^2 c_j Q_{ij}^{(L)}(f_i, f_j), \quad i = 1, \dots, n, \quad (20)$$

где

$$Q_{ij}^{(L)}(f_i, f_j) = \frac{\partial}{\partial v^\alpha} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} R^{\alpha\beta}(\mathbf{v} - \mathbf{w}) \left(\frac{\partial}{\partial v^\beta} - \frac{m_i}{m_j} \frac{\partial}{\partial w^\beta} \right) f_i(\mathbf{v}) f_j(\mathbf{w}), \quad (21)$$

$Z_i = e_i/e$, тензор $R^{\alpha\beta}(\mathbf{u})$ определен в (16).

При аналогичном обезразмеривании уравнений Больцмана (2), (3), (17) нам нужно также выбрать единицу измерения размерного параметра ε . Удобно положить

$$\varepsilon = \frac{m^2 v_0^3}{2\pi L e^4} \tilde{\varepsilon} \quad (22)$$

где $\tilde{\varepsilon}$ - безразмерный параметр. Тогда, с учетом условия (19), уравнения Больцмана (2), (3), (17) преобразуются подстановкой (18), (22) к следующей форме (тильды опущены):

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \sum_{j=1}^n c_j Q_{ij}(f_i, f_j), \quad i = 1, \dots, n, \quad (23)$$

где $Q_{ij}(f_i, f_j)$ определены формулами (3), в которых

$$g_{ij}(u, \mu) = \frac{\lambda_{ij}}{2\pi\varepsilon} \delta \left[1 - \mu - 2 \operatorname{Min} \left\{ \frac{Z_i^2 Z_j^2}{\lambda_{ij}} \left(\frac{m}{m_{ij}} \right)^2 \frac{\varepsilon}{u^3}, 1 \right\}, i, j = 1, \dots, n. \quad (24)$$

В этих уравнениях величины $\{c_j, j = 1, \dots, n\}$ характеризуют концентрации компонент. Для конкретности можно считать, что плотность ρ_0 в формулах (18), (19) совпадает с полной плотностью числа частиц плазмы. При этом электроны имеют массу $m_1 = m$, заряд $Z_1 = -1$ и описываются в уравнениях (20) функцией распределения $f_1(\mathbf{v}, t)$. Тогда, очевидно,

$$c_1 + \dots + c_n = 1, \quad c_2 Z_2 + \dots + c_n Z_n = c_1$$

в случае электронейтральной плазмы.

Поясним здесь и в следующем параграфе как решать уравнение Больцмана (23) методом Монте-Карло. Идея метода принадлежит Г.Берду [8], который предложил его в 1960-х годах независимо от более ранних работ М.Каца [9] по вероятностному смыслу уравнения Больцмана. Мы примем здесь за основу подход Каца, т.к. он делает метод почти очевидным. Этот подход состоит в том, чтобы связать нелинейные уравнения (23) с некоторым линейным уравнением (Master equation), описывающим достаточно простой случайный процесс. Имеются в виду процессы следующего типа. Пусть $\mathbf{x}(t)$ - зависящий от времени $t \geq 0$ случайный вектор размерности $m \geq 1$. Временная эволюция этого вектора состоит в том, что он испытывает последовательные скачки и в результате каждого скачка меняет свое значение. Точнее говоря, на любом промежутке времени dt скачок из состояния \mathbf{x} (до скачка) в состояние \mathbf{y} (после скачка) происходит с "вероятностью" (в интуитивном смысле) $p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) d\mathbf{y} dt$. Для простоты будем считать, что $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ задана на всем пространстве $\mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m$. Такие процессы хорошо изучены [10]. Если $\varphi(\mathbf{x}, t)$ - соответствующая "функция распределения по \mathbf{x} т.е. плотность вероятности того, что случайная величина $\mathbf{x}(t)$ принимает значение $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$ в момент времени t , то уравнение эволюции $\varphi(\mathbf{x}, t)$ имеет вид

$$\frac{\partial \varphi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \int_{\mathbb{R}^m} d\mathbf{y} \varphi(\mathbf{y}, t) p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) - \varphi(\mathbf{x}, t) \int_{\mathbb{R}^m} d\mathbf{y} p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$$

Во многих важных для приложений процессах выполнено свойство $p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ ("микрообратимость"). Тогда это уравнение приобретает более привычный вид обычного линейного кинетического уравнения:

$$\frac{\partial \varphi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \int_{\mathbb{R}^m} d\mathbf{y} p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) [\varphi(\mathbf{y}, t) - \varphi(\mathbf{x}, t)]. \quad (25)$$

Идея Каца состоит в том, чтобы связать уравнение Больцмана со случайным процессом, описываемым уравнением типа (25). Обобщая эту идею

на случай системы уравнений Больцмана (23), введем n натуральных чисел $\{N_j, j = 1, \dots, n\}$, и обозначим

$$N = N_1 + \dots + N_n, \quad (26)$$

и рассмотрим вектор N скоростей

$$\mathbf{V}_N = \{\mathbf{v}_1^{(1)}, \dots, \mathbf{v}_{N_1}^{(1)}; \mathbf{v}_1^{(2)}, \dots, \mathbf{v}_{N_2}^{(2)}; \dots; \mathbf{v}_1^{(n)}, \dots, \mathbf{v}_{N_n}^{(n)}\} \in \mathbb{R}^{3N}. \quad (27)$$

Понятно, что компоненты $\{\mathbf{v}_r^{(i)}, r = 1, \dots, N_i\}$ этого вектора отвечают N_i скоростям частиц i -ого сорта в уравнениях (23). Подобно описанной выше модели, вектор $\mathbf{V}_N(t)$ испытывает случайные скачки, вызванные парными столкновениями частиц одного или различных сортов. С формальной точки зрения, парное столкновение двух частиц с массами m и M и скоростями (до столкновения) \mathbf{v} и \mathbf{w} соответственно описывается следующим образом. Это скачок $(\mathbf{v}, \mathbf{w}) \rightarrow (\mathbf{v}', \mathbf{w}')$, при котором скорость центра масс

$$\mathbf{U} = \frac{m\mathbf{v} + M\mathbf{w}}{m + M}$$

остаётся неизменной, а относительная скорость $\mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{w}$, не меняясь по абсолютной величине, приобретает новое направление $\boldsymbol{\omega} \in \mathbb{S}^2$, т.е. $\mathbf{u}' = \mathbf{v}' - \mathbf{w}' = |\mathbf{u}|\boldsymbol{\omega}$. Такой скачок происходит с вероятностью

$$\frac{1}{2} g\left(u, \frac{\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega}}{u}\right) d\boldsymbol{\omega} dt,$$

где $d\boldsymbol{\omega}$ - элемент площади поверхности единичной сферы. Легко видеть, что эта модель не зависит от того, какая из двух величин $\mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{w}$ или $\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{w} - \mathbf{v}$ выбрана в качестве относительной скорости. В простейшем случае $n = 2$, $N_1 = N_2 = 1$, уравнение (25) имеет вид $(\mathbf{v}_1^{(1)} = \mathbf{v}, \mathbf{v}_1^{(2)} = \mathbf{w}, m_1 = m, m_2 = M)$

$$\varphi_t(\mathbf{v}, \mathbf{w}) = \int_{\mathbb{S}^2} d\boldsymbol{\omega} g\left(u, \frac{\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega}}{u}\right) [\varphi(\mathbf{v}', \mathbf{w}') - \varphi(\mathbf{v}, \mathbf{w})],$$

где аргумент t для краткости опущен,

$$\mathbf{v}' = \frac{m\mathbf{v} + M\mathbf{w} + Mu\boldsymbol{\omega}}{m + M}, \quad \mathbf{w}' = \frac{m\mathbf{v} + M\mathbf{w} - mu\boldsymbol{\omega}}{m + M}.$$

Небольшое отличие от уравнения (25), состоящее в том, что интегрирование происходит не по "полному" пространству \mathbb{R}^6 , а по единичной сфере \mathbb{S}^2 , связано с законами сохранения энергии и импульса при столкновении. Вероятность $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ в (25) включает две δ -функции, отвечающие законам сохранения, и в результате правая часть уравнения (25) сводится к интегралу по пространству меньшей размерности.

Мы подробно разобрали простейший случай $n = 2$, поскольку общий случай эволюции вектора $\mathbf{V}_N(t)$ (27) сводится к последовательности парных столкновений типа

$$(\mathbf{v}_r^{(i)}, \mathbf{v}_s^{(j)}) \rightarrow (\mathbf{v}_r^{(i)'}, \mathbf{v}_s^{(j)'}), \quad (28)$$

которые происходят с вероятностями

$$\frac{1}{N} g_{ij} \left(u, \frac{\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega}}{u} \right) d\boldsymbol{\omega} dt, \quad (29)$$

где $\mathbf{u} = \mathbf{v}_r^{(i)} - \mathbf{v}_s^{(j)}$,

$$\mathbf{v}_r^{(i)'} = \frac{m_i \mathbf{v}_r^{(i)} + m_j \mathbf{v}_s^{(j)} + m_j u \boldsymbol{\omega}}{m_i + m_j}, \quad \mathbf{v}_s^{(j)'} = \frac{m_i \mathbf{v}_r^{(i)} + m_j \mathbf{v}_s^{(j)} - m_i u \boldsymbol{\omega}}{m_i + m_j}. \quad (30)$$

При этом достаточно рассматривать значения $1 \leq i \leq j \leq n$, т.к. $g_{ij}(u, \mu) = g_{ji}(u, \mu)$. Уравнение для функции распределения $\varphi(\mathbf{V}_N, t)$ имеет вид

$$\begin{aligned} \varphi_t(\mathbf{V}_N) = \frac{1}{N} \left\{ \sum_{i=1}^n \sum_{r=1}^{N_i-1} \sum_{s=r+1}^{N_i} \hat{L}(i, r|i, s) + \right. \\ \left. + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \sum_{r=1}^{N_i} \sum_{s=1}^{N_j} \hat{L}(i, r|j, s) \right\} \varphi(\mathbf{V}_N), \end{aligned} \quad (31)$$

где

$$\hat{L}(i, r|j, s) \varphi(\mathbf{V}_N) = \int_{\mathbb{S}^2} d\boldsymbol{\omega} g_{ij} \left(u, \frac{\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega}}{u} \right) \{ \varphi[\mathbf{V}'_N(i, r|j, s)] - \varphi(\mathbf{V}_N) \}, \quad (32)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{v}_r^{(i)} - \mathbf{v}_s^{(j)}, \quad \mathbf{V}'_N(i, r|j, s) = \{ \dots, \mathbf{v}_r^{(i)'}, \dots, \mathbf{v}_s^{(j)'}, \dots \}.$$

Здесь точки обозначают оставшиеся неизменными компоненты вектора \mathbf{V}_N (27), а изменившиеся компоненты $(\mathbf{v}_r^{(i)'}, \mathbf{v}_s^{(j)'})$ даются формулами (30). Заметим, что

$$\hat{L}(i, r|j, s) \varphi(\mathbf{V}_N) = \hat{L}(j, s|i, r) \varphi(\mathbf{V}_N) \quad (33)$$

Как связано уравнение для $\varphi(\mathbf{V}_N, t)$ с уравнением Больцмана (23)? Ответ на этот вопрос давно известен (по крайней мере, при $n = 1$) из работ М.Каца [9]. Для краткости мы будем игнорировать тот факт, что эволюция случайного вектора $\mathbf{V}_N(t)$ происходит не в полном пространстве \mathbb{R}^{3N} , а на многообразии (эллипсоиде) размерности $3N - 4$, определяемом законами сохранения импульса и энергии

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \sum_{i=1}^n m_i \sum_{r=1}^{N_i} \mathbf{v}_r^{(i)}(t) = const, \\ E &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n m_i \sum_{r=1}^{N_i} [\mathbf{v}_r^{(i)}(t)]^2 = const. \end{aligned}$$

Несмотря на это обстоятельство, можно считать формально, что $\varphi(\mathbf{V}_N, t)$ при любом $t > 0$ (ниже аргумент t опущен) задано в полном пространстве \mathbb{R}^{3N} и удовлетворяет нормировке

$$\int_{\mathbb{R}^{3N}} d\mathbf{V}_N \varphi(\mathbf{V}_N) = 1.$$

Кроме того, предполагается, что начальные условия заданы в факторизованном виде

$$\varphi|_{t=0} = \prod_{i=1}^n \left[\prod_{r=1}^{N_i} f_i^{(0)}(\mathbf{v}_r^{(i)}) \right], \quad (34)$$

с условиями нормировки

$$\int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{v} f_i^{(0)}(\mathbf{v}) = 1, \quad i = 1, \dots, n. \quad (35)$$

Нам понадобятся ниже одночастичные и двухчастичные функции распределения, определяемые соответственно равенствами

$$f_i(\mathbf{v}_r^{(i)}) = \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} d\Omega(i, r) \varphi(\mathbf{V}_N),$$

$$F_{ij}(\mathbf{v}_r^{(i)}, \mathbf{v}_s^{(j)}) = \int_{\mathbb{R}^{3(N-2)}} d\Omega(i, r|j, s) \varphi(\mathbf{V}_N),$$

где $i, j = 1, \dots, n$, $1 \leq r \leq N_i$, $1 \leq s \leq N_j$, и предполагается, что функция $\varphi(\mathbf{V}_N)$ симметрична по перестановкам скоростей $\mathbf{v}_{r1}^{(i)}$ и $\mathbf{v}_{r2}^{(i)}$ с фиксированным верхним индексом (т.е. все частицы одного сорта $1 \leq i \leq n$ эквивалентны). Дифференциалы $d\Omega(i, r)$ и $d\Omega(i, r|j, s)$ отличаются от $d\mathbf{V}_N$ тем, что в них отсутствуют $d\mathbf{v}_r^{(i)}$ и $d\mathbf{v}_r^{(i)} d\mathbf{v}_s^{(j)}$ соответственно.

Зафиксируем число $1 \leq k \leq n$ и попытаемся получить уравнение для $f_k(\mathbf{v})$ при $\mathbf{v} = \mathbf{v}_1^{(k)}$. Для этого достаточно проинтегрировать уравнение по $d\Omega(k, 1)$. Легко проверить, что

$$\int_{\mathbb{R}^6} d\mathbf{v}_r^{(i)} d\mathbf{v}_s^{(j)} \hat{L}(i, r|j, s) \varphi(\mathbf{V}_N) = 0$$

для всех значений пар индексов (i, r) и (j, s) , которые входят в уравнение (31). Поэтому большинство слагаемых в правой части (31) исчезают при интегрировании и мы получаем

$$\frac{\partial f_k(\mathbf{v}_1^{(k)})}{\partial t} = \frac{1}{N} \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} d\Omega(k, 1) \left\{ \sum_{s=2}^{N_k} \hat{L}(k, 1|k, s) + \sum_{j=k+1}^n \sum_{s=1}^{N_j} \hat{L}(k, 1|j, s) + \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \left. \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{r=1}^{N_i} \hat{L}(i, r|k, 1) \right\} \varphi(\mathbf{V}_N) = \\
& = \frac{1}{N} \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} d\Omega(k, 1) \left\{ (N_k - 1) \hat{L}(k, 1|k, 2) + \sum_{j=1}^n {}^{(j \neq k)} N_j \hat{L}(k, 1|j, 1) \right\} \varphi(\mathbf{V}_N),
\end{aligned}$$

где использованы свойства симметрии (33) оператора \hat{L} и функции $\varphi(\mathbf{V}_N)$. Правую часть этого уравнения можно выразить через двухчастичные функции распределения $F_{ij}(\mathbf{v}, \mathbf{w})$, тогда

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f_k(\mathbf{v}_1^{(k)})}{\partial t} &= \frac{N_k - 1}{N} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{v}_2^{(k)} \hat{L}(k, 1|k, 2) F_{kk}(\mathbf{v}_1^{(k)}, \mathbf{v}_2^{(k)}) + \\
& + \sum_{j=1}^n {}^{(j \neq k)} \frac{N_j}{N} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{v}_1^{(j)} \hat{L}(k, 1|j, 1) F_{kj}(\mathbf{v}_1^{(k)}, \mathbf{v}_1^{(j)}),
\end{aligned}$$

где $k = 1, \dots, n$. Упрощая здесь обозначения, окончательно получаем

$$\frac{\partial f_k(\mathbf{v})}{\partial t} = \sum_{j=1}^n \frac{N_k - \delta_{jk}}{N} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} \hat{L}_{kj} F_{kj}(\mathbf{v}, \mathbf{w}),$$

$$\hat{L}_{kj} F(\mathbf{v}, \mathbf{w}) = \int_{\mathbb{S}^2} d\boldsymbol{\omega} g_{kj} \left(u, \frac{\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega}}{u} \right) [F(\mathbf{v}', \mathbf{w}') - F(\mathbf{v}, \mathbf{w})], \quad k = 1, \dots, n,$$

где при фиксированных k и j

$$\mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{w}, \quad \mathbf{v}' = \frac{m_k \mathbf{v} + m_j \mathbf{w} + m_j u \boldsymbol{\omega}}{m_k + m_j}, \quad \mathbf{w}' = \frac{m_k \mathbf{v} + m_j \mathbf{w} - m_k u \boldsymbol{\omega}}{m_k + m_j}.$$

Если теперь формально перейти к пределу $N_k \rightarrow \infty$, $k = 1, \dots, n$, и потребовать, чтобы в этом пределе

$$\frac{N_k}{N} \rightarrow c_k, \quad F_{kj}(\mathbf{v}, \mathbf{w}) \rightarrow f_k(\mathbf{v}) f_j(\mathbf{w}), \quad (36)$$

то мы получим в точности систему уравнений Больцмана (23) (с произвольными функциями $g_{ij}(u, \mu)$), где $\{c_i, i = 1, \dots, n\}$ - это истинные концентрации компонент смеси газов, удовлетворяющие условию

$$c_1 + \dots + c_n = 1. \quad (37)$$

Факторизация функции $F_{kj}(\mathbf{v}, \mathbf{w}, t)$ при $t = 0$ следует из предположения (34). Это же свойство при $t > 0$ и $N \rightarrow \infty$ называется "распространением молекулярного хаоса" и требует доказательства. Этот вопрос хорошо изучен для простейшего случая $n = 1$ и здесь мы на нем не останавливаемся, просто постулируя факторизацию двухчастичной функции распределения. Остается построить и реализовать метод Монте-Карло решения уравнения (31). Для этого

достаточно более подробно описать эволюцию случайного вектора $\mathbf{V}_N(t)$ и промоделировать ее на компьютере. Соответствующие вопросы рассматриваются в следующих параграфах.

Вычислительный метод

Будем ниже рассматривать уравнение Больцмана (23) не только с δ -образными функциями $g_{ij}(u, \mu)$ (24), но с произвольными "квазимаксвелловскими" функциями, удовлетворяющими условиям

$$g_{ij}^{tot} = 2\pi \int_{-1}^1 d\mu g_{ij}(u, \mu) = \frac{\lambda_{ij}}{\varepsilon}, \quad i, j = 1, \dots, n, \quad (38)$$

где $\{\lambda_{ij} = \lambda_{ji}, i, j = 1, \dots, n\}$ и ε - заданные положительные числа. Важно, что частота столкновений g_{ij}^{tot} пары частиц любых сортов i и j не зависит от скоростей. Это существенно упрощает построение решений уравнения (31), как мы увидим ниже

Заметим, что уравнение (31) можно записать в виде

$$\varphi_t = \frac{1}{N} \hat{L}_N \varphi, \quad \hat{L}_N = \hat{L}_N^+ - \hat{L}_N^-, \quad (39)$$

где оператор \hat{L}_N определяется выражением в фигурных скобках в правой части (31), а его декомпозиция на положительную и отрицательную части \hat{L}_N^\pm определяется естественной декомпозицией операторов (32)

$$\hat{L}(i, r|j, s) = \hat{L}^+(i, r|j, s) - \hat{L}^-(i, r|j, s) \quad (40)$$

Тогда

$$\hat{L}^-(i, r|j, s) = \int_{\mathbb{S}^2} d\boldsymbol{\omega} g_{ij} \left(u, \frac{\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega}}{u} \right) = g_{ij}^{tot} = \frac{\lambda_{ij}}{\varepsilon},$$

т.е. операторы $\hat{L}^-(i, r|j, s)$ (включая случай $i = j$) не зависят от (r, s) и являются просто операторами умножения на числа. Таким же оказывается и оператор

$$\hat{L}_N^- = \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} N_i (N_i - 1) g_{ii}^{tot} + \sum_{1 \leq i < j \leq n} N_i N_j g_{ij}^{tot} = \nu_N. \quad (41)$$

Уравнение (39) имеет вид

$$\varphi_t = \frac{1}{N} \left(\hat{L}_N^+ \varphi - \nu_N \varphi \right),$$

где $\varphi = \varphi(\mathbf{V}_N, t)$, а начальное условие дается равенством (34). Упростим это уравнение, приближенно заменив производную по времени конечной разностью

$$\varphi_t \approx \frac{1}{\Delta t} [\varphi(t + \Delta t) - \varphi(t)].$$

Тогда

$$\varphi(t + \Delta t) = \frac{\Delta t}{N} \hat{L}_N^+ \varphi(t) + \left(1 - \frac{\nu_N \Delta t}{N}\right) \varphi(t). \quad (42)$$

Это разностное уравнение, при достаточно малых Δt , сохраняет вполне ясный вероятностный смысл: за время Δt хотя бы одно столкновение происходит с вероятностью $\rho_N(\Delta t) = \frac{\nu_N}{N} \Delta t$ и ничего не происходит с вероятностью $1 - \rho_N(\Delta t)$. Такая интерпретация возможна при $\rho_N(\Delta t) \leq 1$, т.е. при

$$\Delta t \leq \Delta t_{max} = \frac{N}{\nu_N}. \quad (43)$$

Грубо говоря, ν_N пропорционально N^2 . Поэтому $\Delta t_{max} = O(N^{-1})$, т.е. при больших N интервал Δt_{max} остается много меньшим типичного времени релаксации $\Delta t_{rel} = O(1)$ уравнений Больцмана (23). Интуитивно понятно (хотя и требует доказательства), что выбор максимального шага по времени в уравнении (42) не приведет (при больших N) к большой погрешности в решении уравнений Больцмана (23). Выбрав $\Delta t = \Delta t_{max}$ в равенстве (42) получаем

$$\varphi(\mathbf{V}_N, t + \tau_N) = \frac{1}{\nu_N} \hat{L}_N^+ \varphi(\mathbf{V}_N, t), \quad \tau_N = \Delta t_{max} = \frac{N}{\nu_N}. \quad (44)$$

Это равенство можно переписать в простой символической форме

$$\varphi(\mathbf{V}_N, t + \tau_N) = \langle \varphi(\mathbf{V}'_N, t) \rangle, \quad (45)$$

где переход $\mathbf{V}_N \rightarrow \mathbf{V}'_N$ означает скачок в результате в точности одного парного столкновения, а угловые скобки $\langle \dots \rangle$ означают полное усреднение (a) по всем возможным столкновениям и (b) в каждом столкновении по всем возможным его исходам. Усреднение (b) - это просто интеграл вида

$$\frac{1}{g_{ij}^{tot}} \int_{\mathbb{S}^2} d\boldsymbol{\omega} g_{ij} \left(u, \frac{\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega}}{u} \right) \varphi(\dots, \mathbf{v}', \dots, \mathbf{w}', \dots), \quad (46)$$

где $\mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{w}$, а $(\mathbf{v}', \mathbf{w}')$ - скорости после столкновения. Усреднение (a) определяется вероятностями столкновений частиц различных сортов. Из равенств (41) для ν_N и правой части равенства (44), легко видеть, что в пределе (36) вероятности столкновений частиц сортов i и j имеют вид

$$p_{ij} = q \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{ij}\right) c_i c_j \lambda_{ij}, \quad \sum_{1 \leq i < j \leq n} p_{ij} = 1, \quad (47)$$

где постоянная q определяется из второго равенства (нормировки), а постоянные λ_{ij} определены в формулах (38). Напомним, что в приложениях к уравнениям Ландау (см. параграф 2) эти постоянные являются просто свободными параметрами, которые можно использовать для оптимизации вычислений.

Таким образом, мы получаем простой алгоритм моделирования равенства (44) методом Монте-Карло. Опишем его для больших значений $N_j \simeq c_j N$, $j = 1, \dots, n$. Сначала в счетчик времени добавляется величина

$$\tau_N = \frac{\varepsilon}{N} \left[\sum_{1 \leq i \leq j \leq n} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{ij}\right) c_i c_j \lambda_{ij} \right]^{-1}. \quad (48)$$

Считается, что за это время произошло одно столкновение. Какое? Этот вопрос решается в три этапа. На первом этапе выбирается пара чисел $1 \leq i \leq j \leq n$ с вероятностью p_{ij} (48), показывающая, что столкновение произошло между частицами сортов i и j . Затем случайно выбирается пара чисел ($1 \leq r \leq N_i$, $1 \leq s \leq N_j$) при $i \neq j$ или пара ($1 \leq r < s \leq n$) при $i = j$. Пара (r, s) показывает, что сталкивающиеся частицы сортов i и j имели перед столкновением скорости $\mathbf{v}_r^{(i)}$ и $\mathbf{v}_s^{(j)}$ соответственно. Третий этап состоит в реализации столкновения, т.е. преобразования (28), (30). При этом направление $\boldsymbol{\omega} \in \mathbb{S}^2$ относительной скорости после столкновения выбирается на единичной сфере \mathbb{S}^2 с плотностью вероятности $g_{ij}(u, \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega}/u) / g_{ij}^{tot}$ в соответствии с усреднением по формуле (47), где $\mathbf{u} = \mathbf{v}_r^{(i)} - \mathbf{v}_s^{(j)}$ (порядок несущественен). В результате мы получаем новое значение

$$\mathbf{V}_N(t + \tau_N) = \{\dots, \mathbf{v}_r^{(i)'}, \dots, \mathbf{v}_s^{(j)'}, \dots\} \quad (49)$$

случайного вектора $\mathbf{V}_N(t)$ и весь процесс повторяется снова. Для уравнений Больцмана (23) это (по крайней мере, для $n = 1$) эквивалентно первоначальной схеме Берда [8]. Для краткости мы не будем обсуждать математические работы по обоснованию этой схемы при $n = 1$ [11], [12], а ограничимся данным выше интуитивным выводом этого метода. Этот метод тривиально обобщается на случай произвольного шага по времени $\Delta t < \Delta t_{max}$ в равенстве (42). Достаточно добавить только один первоначальный этап вычислений. На этом этапе решается произошло ли вообще какое-то столкновение на интервале Δt , т.е. разыгрывается случайная величина, принимающая значение 1 с вероятностью $\theta = \nu_N \Delta t / N < 1$ и ноль с вероятностью $(1 - \theta)$. Если в результате получается ноль, то полагаем $\mathbf{V}_N(t + \Delta t) = \mathbf{V}_N(t)$. В противном случае $\mathbf{V}_N(t + \Delta t)$ вычисляется так же, как и $\mathbf{V}_N(t + \tau_N)$ в равенстве (49).

Реализация метода для двухкомпонентной плазмы

Рассмотрим теперь конкретный пример электронейтральной водородной плазмы. Уравнение Ландау имеют вид (16) с $n = 2$, $e_1^2 = e_2^2 = e^2$. Заменяем индексы 1 и 2 на индексы e (электроны) и i (ионы) соответственно и обозначим $m_e = m$, $m_i = M$. Проведем обезразмеривание по формулам (18), где ρ_0 - полная плотность числа частиц плазмы. Ясно, что $c_i = c_e = 1/2$ из-за электронейтральности. В качестве единицы измерения скорости v_0 выбирается какая-либо характерная скорость из начального условия (например, тепловая скорость электронов при равновесной температуре). После этого единица измерения времени t_0 выбирается из равенства (19). В результате получаем урав-

нение (20), (21), которые можно записать в виде

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_e}{\partial t} &= \frac{1}{2} \left[Q_1^{(L)}(f_e, f_e) + Q_\gamma^{(L)}(f_e, f_i) \right], \\ \frac{\partial f_i}{\partial t} &= \frac{\gamma^2}{2} \left[Q_1^{(L)}(f_i, f_i) + Q_{1/\gamma}^{(L)}(f_i, f_e) \right],\end{aligned}\tag{50}$$

где $\gamma = m/M$, и для любого $\theta > 0$

$$Q_\theta^{(L)}(f_1, f_2) = \frac{\partial}{\partial v^\alpha} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} R^{\alpha\beta}(\mathbf{v} - \mathbf{w}) \left(\frac{\partial}{\partial v^\beta} - \theta \frac{\partial}{\partial w^\beta} \right) f_1(\mathbf{v}) f_2(\mathbf{w}),$$

$$R^{\alpha\beta}(\mathbf{u}) = (u^2 \delta^{\alpha\beta} - u^\alpha u^\beta) / u^3, \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3.$$

Уравнение (50) будут решаться с начальными условиями

$$f_{e,i}|_{t=0} = f_{e,i}^{(0)}(\mathbf{v}), \quad \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{v} f_{e,i}^{(0)}(\mathbf{v}) = 1.\tag{51}$$

Для приближенного решения задачи (50), (51) выберем малое число $\varepsilon > 0$ и большое натуральное число N_1 . Мы будем моделировать решение этой задачи эволюцией случайного вектора

$$\mathbf{V}_N(t) = \{\mathbf{v}_1^{(e)}(t), \dots, \mathbf{v}_{N_1}^{(e)}(t); \mathbf{v}_1^{(i)}(t), \dots, \mathbf{v}_{N_1}^{(i)}(t)\} \in \mathbb{R}^{3N}, \quad N = 2N_1.\tag{52}$$

При $t = 0$ все скорости электронов $\mathbf{v}_k^{(e)}(0)$ распределяются в \mathbb{R}^3 независимо в соответствии с функцией распределения $f_e^{(0)}(\mathbf{v})$ и аналогично распределяются скорости ионов $\{\mathbf{v}_k^{(i)}(0), k = 1, \dots, N_1\}$.

Для описания временной эволюции вектора $\mathbf{V}_N(t)$ нам потребуется также три вспомогательных параметра λ_{ee} , λ_{ii} и λ_{ei} . Без ограничения общности один из этих параметров можно считать равным единице. Поэтому положим

$$\lambda_{ee} = 1, \quad \lambda_{ii} = \lambda, \quad \lambda_{ei} = \lambda_{ie} = \varkappa,\tag{53}$$

где положительные числа λ и \varkappa пока произвольны. Будем рассматривать схему с максимальным шагом по времени (49), поэтому

$$\tau_N = \frac{8\varepsilon}{N(1 + \lambda + 2\varkappa)}, \quad N = 2N_1.\tag{54}$$

Таким образом, время t принимает дискретные значения $t_k = k\tau_N$, $k = 0, 1, \dots$. На каждом интервале $[t_k, t_{k+1})$ происходит в точности одно столкновение. Вероятности столкновений трех возможных типов определяются равенствами (47), т.е.

$$p_{ee} = \frac{1}{1 + \lambda + 2\varkappa}, \quad p_{ii} = \frac{\lambda}{1 + \lambda + 2\varkappa}, \quad p_{ei} = \frac{2\varkappa}{1 + \lambda + 2\varkappa}.\tag{55}$$

В простейшем варианте можно выбрать $\lambda = \varkappa = 1$, тогда

$$\tau_N = 2\varepsilon/N, \quad p_{ee} = p_{ii} = 1/4, \quad p_{ei} = 1/2. \quad (56)$$

После того, как решено какое из трех событий, определяемых вероятностями (55), действительно произошло, выбирается случайная пара скоростей частиц соответствующих сортов и "производится столкновение". Мы кратко опишем как это делается в случае δ -образных функций $g_{kl}(u, \mu)$ (24) в соответствующих уравнениях Больцмана.

При столкновении двух электронов выбирается пара скоростей

$$\mathbf{v}_r^{(e)} = \mathbf{v}, \quad \mathbf{v}_s^{(e)} = \mathbf{w}, \quad 1 \leq r < s \leq N_1.$$

Скорости после столкновения имеют вид

$$\mathbf{v}_r^{(e)'} = \frac{1}{2}(\mathbf{v} + \mathbf{w} + |\mathbf{v} - \mathbf{w}|\boldsymbol{\omega}), \quad \mathbf{v}_s^{(e)'} = \frac{1}{2}(\mathbf{v} + \mathbf{w} - |\mathbf{v} - \mathbf{w}|\boldsymbol{\omega}), \quad \boldsymbol{\omega} \in \mathbb{S}^2,$$

где единичный вектор $\boldsymbol{\omega}$ определяется в декартовых координатах с осью Oz вдоль вектора $\mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{w}$ следующим образом:

$$\boldsymbol{\omega} = \left\{ \sqrt{1 - \mu^2} \cos \varphi, \sqrt{1 - \mu^2} \sin \varphi, \mu \right\}, \quad (57)$$

где φ - это случайный угол, равномерно распределенный на интервале $[0, 2\pi)$,

$$\mu = \mu_{ee} = 1 - 2 \operatorname{Min} \left\{ \frac{4\varepsilon}{u^3}, 1 \right\}, \quad \mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{w}. \quad (58)$$

Столкновение двух ионов описывается совершенно аналогично. Единственная разница состоит в том, что в формуле (57) μ определяется следующим образом:

$$\mu = \mu_{ii} = 1 - 2 \operatorname{Min} \left\{ \frac{4\varepsilon\gamma^2}{\lambda u^3}, 1 \right\}, \quad \mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{w}, \quad \gamma = m/M. \quad (59)$$

Наконец, для столкновения электрона с ионом мы выбираем скорости

$$\mathbf{v}_r^{(e)} = \mathbf{v}, \quad \mathbf{v}_s^{(i)} = \mathbf{w}, \quad 1 \leq r, s \leq N_1,$$

и преобразуем их по формулам

$$\mathbf{v}_r^{(e)'} = \frac{m\mathbf{v} + M\mathbf{w} + M|\mathbf{u}|\boldsymbol{\omega}}{m + M}, \quad \mathbf{v}_s^{(i)'} = \frac{m\mathbf{v} + M\mathbf{w} - m|\mathbf{u}|\boldsymbol{\omega}}{m + M}, \quad \mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{w},$$

где в системе координат с осью Oz вдоль вектора \mathbf{u} справедлива та же формула (57), в которой

$$\mu = \mu_{ei} = 1 - 2 \operatorname{Min} \left\{ \frac{\varepsilon(1 + \gamma)^2}{\varkappa u^3}, 1 \right\}, \quad \mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{w}, \quad \gamma = m/M. \quad (60)$$

Преобразование этих формул к произвольной системе координат достаточно очевидно и для краткости опущено.

Таким образом, отправляясь от начального вектора $\mathbf{V}_N(0)$, мы получаем новый вектор $\mathbf{V}_N(\tau_N)$ после первого столкновения. Далее весь процесс вычислений повторяется без изменений и счетчик времени увеличивается при каждом столкновении на величину τ_N (54).

Как выбрать оптимальные значения параметров λ и \varkappa ? Ясно, что мы заинтересованы в увеличении шага по времени τ_N , хотя из (54) следует, что

$$\tau_N \leq \frac{8\varepsilon}{N}, \quad N = 2N_1, \quad (61)$$

причем равенство достигается при $\lambda = \varkappa = 0$. С другой стороны, нельзя неограниченно уменьшать λ и \varkappa поскольку для аппроксимации уравнений Ландау необходимо условие малости угла рассеяния при "большинстве" столкновений. Иначе говоря, в формулах(58)-(60) для косинуса угла рассеяния μ должны выполняться условия

$$\frac{4\varepsilon}{|\mathbf{u}_{ee}|^3} \ll 1, \quad \frac{4\varepsilon\gamma^2}{\lambda |\mathbf{u}_{ii}|^3} \ll 1, \quad \frac{\varepsilon(1+\gamma)^2}{\varkappa |\mathbf{u}_{ei}|^3} \ll 1, \quad (62)$$

где $\gamma = m/M$, а $|\mathbf{u}_{kl}|$ означает типичную абсолютную величину относительной скорости сталкивающихся частиц. В случае теплового равновесия с (безразмерной) температурой T_0 получим для порядков средних величин $|\mathbf{v}_e| \sim \gamma^{-1/2} |\mathbf{v}_i| \sim \sqrt{T_0}$.

Считая, что всегда $\gamma \ll 1$ (в реальной плазме $\gamma < 10^{-3}$), мы получим для равновесной системы порядки типичных относительных скоростей в виде

$$|\mathbf{u}_{ee}| \sim |\mathbf{u}_{ei}| \sim \frac{1}{\sqrt{\gamma}} |\mathbf{u}_{ii}| \sim \sqrt{T_0}$$

Поэтому, считая условие

$$\frac{4\varepsilon}{T_0^{3/2}} \ll 1 \quad (63)$$

выполненным, можно выбрать

$$\lambda = \gamma^{1/2}, \quad \varkappa = \frac{1}{4}, \quad (64)$$

тогда все неравенства (62) выполняются с одинаковой степенью точности. Значение (64) будем называть стандартными. Такой выбор параметров гарантирует условия (62) не только в равновесии, но и во всех случаях, когда

$$|\mathbf{v}_i| \geq \sqrt{\gamma} |\mathbf{v}_e|. \quad (65)$$

Т.е. нарушение этого условия происходит на такой стадии эволюции плазмы, когда типичная кинетическая энергия (температура) ионов T_i гораздо меньше температуры T_e электронов. В этом случае стандартное значение $\lambda = \gamma^{1/2}$

должно быть увеличено. Наконец, параметры λ и \varkappa можно выбирать зависящими от времени, тогда значения (64) выбираются, если плазма уже близка к равновесию. Вопрос об улучшении стандартных значений не очень важен, т.к. шаг по времени τ_N (54) мало меняется при малых значениях λ и \varkappa . Отметим, наконец, что стандартные значения (64) соответствуют обычным представлениям о частоте столкновений частиц разных сортов: столкновения электронов между собой происходят примерно в $\gamma^{-1/2}$ раз чаще, чем ион-ионные столкновения. При таких значениях шаг по времени (54) равен

$$\tau_N = \frac{16\varepsilon}{N(3 + 2\sqrt{\gamma})} \xrightarrow{\gamma \rightarrow 0} \frac{16\varepsilon}{3N}, \quad N = 2N_1. \quad (66)$$

Выбор параметров (64) позволяет ускорить вычисления почти в 3 раза по сравнению с простейшим выбором $\lambda = \varkappa = 1$, при котором $\tau_N = 2\varepsilon/N$ (56). Напомним, что ускорение в 4 раза уже невозможно из-за неравенства (61), так что результат недалек от оптимального.

Порядок аппроксимации интеграла столкновений Ландау интегралом Больцмана

Для краткости рассмотрим здесь случай одного уравнения Ландау в безразмерной форме

$$\frac{\partial f(\mathbf{v}, t)}{\partial t} = Q^L(f, f) = \frac{\partial}{\partial v_i} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} \frac{P_{ij}(\mathbf{u})}{|\mathbf{u}|^3} \left(\frac{\partial}{\partial v_j} - \frac{\partial}{\partial w_j} \right) f(\mathbf{v}) f(\mathbf{w}), \quad (67)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{w}, \quad P_{ij}(u) = |\mathbf{u}|^2 \delta_{ij} - u_i u_j; \quad i, j = 1, 2, 3.$$

Случай системы уравнений Ландау для многокомпонентной плазмы рассматривается совершенно аналогично и приводит к тому же результату.

Сопоставим уравнению (67) уравнение Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} = Q_\varepsilon(f, f) = \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{S}^2} d\mathbf{w} d\boldsymbol{\omega} g_\varepsilon \left(u, \frac{\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega}}{u} \right) [f_i(\mathbf{v}') f_j(\mathbf{w}') - f_i(\mathbf{v}) f_j(\mathbf{w})], \quad (68)$$

где

$$\mathbf{u} = \mathbf{v} - \mathbf{w}, \quad \boldsymbol{\omega} \in \mathbb{S}^2, \quad \mathbf{v}' = \frac{1}{2} (\mathbf{v} + \mathbf{w} + u \boldsymbol{\omega}), \quad \mathbf{w}' = \frac{1}{2} (\mathbf{v} + \mathbf{w} - u \boldsymbol{\omega}),$$

и попытаемся выбрать неотрицательную функцию $g_\varepsilon(|\mathbf{u}|, \mu)$, $\mu \in [-1, 1]$, $\varepsilon > 0$, так, чтобы

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} Q_\varepsilon(f, f) = Q^L(f, f) \quad (69)$$

для любой "хорошей" функции $f(\mathbf{v})$. Мы покажем ниже, что все доказательства можно сделать строгими в классе функций $f(\mathbf{v})$, для которых

$$|f^{(s)}(\mathbf{v})| \leq A e^{-\beta|\mathbf{v}|^2}; \quad s = 0, 1, 2, 3; \quad \mathbf{v} \in \mathbb{R}^3, \quad (70)$$

где $f^{(s)}(\mathbf{v})$ обозначает все частные производные порядка s по \mathbf{v} функции $f(\mathbf{v}) \equiv f^{(0)}(\mathbf{v})$, а A и β - некоторые положительные постоянные.

Рассмотрим интеграл в уравнении (68) и преобразуем его к виду

$$Q_\varepsilon(f, f) = \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} d\mathbf{w} d\mathbf{k} \frac{\delta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u} + |\mathbf{k}|^2/2)}{|\mathbf{u}|} g_\varepsilon\left(|\mathbf{u}|, 1 - \frac{|\mathbf{k}|^2}{2|\mathbf{u}|^2}\right) [F(\mathbf{u} + \mathbf{k}, \mathbf{U}) - F(\mathbf{u}, \mathbf{U})], \quad (71)$$

где

$$F(\mathbf{u}, \mathbf{U}) = f(\mathbf{v})f(\mathbf{w}) = f\left(\mathbf{U} + \frac{\mathbf{u}}{2}\right) f\left(\mathbf{U} - \frac{\mathbf{u}}{2}\right), \quad (72)$$

т.е. $\mathbf{U} = (\mathbf{v} + \mathbf{w})/2$ есть скорость центра масс, не меняющаяся при столкновении. Такое преобразование очень удобно для сравнения интегралов Больцмана и Ландау [6]. Оно основано на тождестве

$$\int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{k} \delta\left(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u} + \frac{|\mathbf{k}|^2}{2}\right) \psi(\mathbf{k}) = |\mathbf{u}| \int_{\mathbb{S}^2} d\omega \psi(|\mathbf{u}|\omega - \mathbf{u}),$$

где $\psi(\mathbf{k})$ - произвольная непрерывная функция.

Рассмотрим разность $[F(\mathbf{u} + \mathbf{k}) - F(\mathbf{u})]$ в интеграле (71), опуская несущественный аргумент \mathbf{U} . Легко проверить интегрированием по частям, что

$$\begin{aligned} F(\mathbf{u} + \mathbf{k}) - F(\mathbf{u}) &= \left[\left(\mathbf{k} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \right) + \frac{1}{2} \left(\mathbf{k} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \right)^2 \right] F(\mathbf{u}) + R(\mathbf{u}), \\ R(\mathbf{u}) &= \frac{1}{2} \int_0^1 d\theta (1 - \theta)^2 \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \right)^3 F(\mathbf{u} + \mathbf{k}\theta) = \\ &= \frac{1}{2} \int_0^1 d\theta (1 - \theta)^2 \left(\mathbf{k} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \right)^3 F(\mathbf{u} + \mathbf{k}\theta). \end{aligned} \quad (73)$$

Подставляя эту формулу в (71), получим

$$\begin{aligned} Q_\varepsilon(f, f) &= \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} d\mathbf{w} d\mathbf{k} \delta\left(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u} + \frac{|\mathbf{k}|^2}{2}\right) h_\varepsilon(|\mathbf{u}|, |\mathbf{k}|) \times \\ &\quad \times \left[\left(k_i \frac{\partial}{\partial u_i} + \frac{1}{2} k_i k_j \frac{\partial^2}{\partial u_i \partial u_j} \right) F(\mathbf{u}, \mathbf{U}) + R(\mathbf{u}, \mathbf{U}) \right], \quad (74) \\ h_\varepsilon(|\mathbf{u}|, |\mathbf{k}|) &= \frac{1}{|\mathbf{u}|} g_\varepsilon\left(|\mathbf{u}|, 1 - \frac{|\mathbf{k}|^2}{2|\mathbf{u}|^2}\right), \end{aligned}$$

где теперь указана явно зависимость от \mathbf{U} . Теперь можно вычислить два интеграла по k ($i, j = 1, 2, 3$)

$$I_i(\mathbf{u}) = \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{k} \delta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u} + |\mathbf{k}|^2/2) h_\varepsilon(|\mathbf{u}|, |\mathbf{k}|) k_i$$

$$I_{ij}(\mathbf{u}) = \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{k} \delta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u} + |\mathbf{k}|^2/2) h_\varepsilon(|\mathbf{u}|, |\mathbf{k}|) k_i k_j.$$

Пользуясь стандартными методами, получаем

$$I_i(\mathbf{u}) = -g_1(|\mathbf{u}|; \varepsilon) u_i,$$

$$I_{ij}(\mathbf{u}) = -g_1(|\mathbf{u}|; \varepsilon)(|\mathbf{u}|^2 \delta_{ij} - u_i u_j) + \frac{1}{2} g_2(|\mathbf{u}|; \varepsilon)(3u_i u_j - |\mathbf{u}|^2 \delta_{ij});$$

$$g_k(|\mathbf{u}|; \varepsilon) = 2\pi \int_{-1}^1 d\mu g_\varepsilon(|\mathbf{u}|; \mu) (1 - \mu)^k, \quad k \geq 1. \quad (75)$$

Заметим, что в [6] получена общая формула для таких интегралов:

$$I_{i_1 \dots i_n}(\mathbf{u}) = \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{k} \delta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u} + |\mathbf{k}|^2/2) h_\varepsilon(|\mathbf{u}|, |\mathbf{k}|) k_{i_1} \dots k_{i_n} =$$

$$= \sum_{l=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{2^l |\mathbf{u}|^{2n-2l+1}}{(2l)!(n-2l)!} g_{n-l}(|\mathbf{u}|; \varepsilon) \frac{\partial^n |\mathbf{u}|^{2l-1}}{\partial u_{i_1} \dots \partial u_{i_n}}; \quad n = 1, 2, \dots$$

Теперь равенство (74) можно переписать в виде

$$Q_\varepsilon(f, f) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} g_1(|\mathbf{u}|; \varepsilon) \left[-2u_i \frac{\partial F(\mathbf{u}, \mathbf{U})}{\partial u_i} + \right. \\ \left. + (|\mathbf{u}|^2 \delta_{ij} - u_i u_j) \frac{\partial^2 F(\mathbf{u}, \mathbf{U})}{\partial u_i \partial u_j} \right] + \Delta_1(\mathbf{v}; \varepsilon) + \Delta_2(\mathbf{v}; \varepsilon), \quad (76)$$

где

$$\Delta_1(\mathbf{v}; \varepsilon) = \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} g_2(|\mathbf{u}|; \varepsilon) (3u_i u_j - |\mathbf{u}|^2 \delta_{ij}) \frac{\partial^2 F(\mathbf{u}, \mathbf{U})}{\partial u_i \partial u_j},$$

$$\Delta_2(\mathbf{v}; \varepsilon) = \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} d\mathbf{k} \delta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u} + |\mathbf{k}|^2/2) h_\varepsilon(|\mathbf{u}|, |\mathbf{k}|) R(\mathbf{u}, \mathbf{U}) \quad (77)$$

в обозначениях формулы (73). Здесь производные по \mathbf{u} под знаком интеграла вычисляются при постоянном \mathbf{U} , поэтому

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} \right). \quad (78)$$

Для сравнения первого члена в правой части (76) с интегралом Ландау (67) последний удобно переписать в виде

$$Q^L(f, f) = 4 \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} |\mathbf{u}|^{-3} \frac{\partial}{\partial u_i} P_{ij}(\mathbf{u}) \frac{\partial}{\partial u_j} F(\mathbf{u}, \mathbf{U}),$$

где используются обозначения (67), (72). Тогда разность интегралов (67) и (68) имеет вид

$$\Delta_\varepsilon(\mathbf{v}) = Q_\varepsilon(f, f) - Q^L(f, f) = \Delta_0(\mathbf{v}; \varepsilon) + \Delta_1(\mathbf{v}; \varepsilon) + \Delta_2(\mathbf{v}; \varepsilon), \quad (79)$$

где

$$\Delta_0(\mathbf{v}; \varepsilon) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} \left[g_1(|\mathbf{u}|; \varepsilon) - \frac{8}{|\mathbf{u}|^3} \right] \frac{\partial}{\partial u_i} P_{ij}(\mathbf{u}) \frac{\partial}{\partial u_j} F(\mathbf{u}, \mathbf{U}), \quad (80)$$

а $\Delta_{1,2}(\mathbf{v}; \varepsilon)$ определены в (77). Нам нужно выбрать $g_\varepsilon(|\mathbf{u}|, \mu)$ в (68) так, чтобы

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \Delta_i(\mathbf{v}; \varepsilon) = 0, \quad \mathbf{v} \in \mathbb{R}^3, \quad i = 0, 1, 2, \quad (81)$$

в предположении, что $f(\mathbf{v})$ удовлетворяет условиям (70). Легко проверить, что в этих предположениях мы получаем

$$\left| F^{(s)}(\mathbf{u}, \mathbf{U}) \right| \leq C e^{-\beta(|\mathbf{v}|^2 + |\mathbf{w}|^2)}; \quad s = 1, 2, 3, \quad (82)$$

где $F^{(s)}(\mathbf{u}, \mathbf{U})$ обозначает все частные производные по \mathbf{u} порядка s от $F(\mathbf{u}, \mathbf{U})$. Поэтому

$$|\Delta_1(\mathbf{v}; \varepsilon)| \leq C_1 \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} g_2(|\mathbf{u}|; \varepsilon) |\mathbf{u}|^2 e^{-\beta(|\mathbf{v}|^2 + |\mathbf{w}|^2)}. \quad (83)$$

Для того, чтобы оценить Δ_2 , заметим, что

$$|R(\mathbf{u}, \mathbf{U})| \leq \frac{1}{2} C |\mathbf{k}|^3 \int_0^1 d\theta \exp \left\{ -\beta \left[\left(\mathbf{v} + \frac{\mathbf{k}\theta}{2} \right)^2 + \left(\mathbf{v} - \frac{\mathbf{k}\theta}{2} \right)^2 \right] \right\},$$

согласно (73), (82). Поэтому из (77) получаем

$$|\Delta_2(\mathbf{v}; \varepsilon)| \leq \frac{C}{2} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} e^{-\beta(|\mathbf{v}|^2 + |\mathbf{w}|^2)} J_\varepsilon(|\mathbf{u}|),$$

где

$$\begin{aligned} J_\varepsilon(|\mathbf{u}|) &= \int_0^1 d\theta \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{k} \delta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u} + |\mathbf{k}|^2/2) h_\varepsilon(|\mathbf{u}|, |\mathbf{k}|) |\mathbf{k}|^3 \exp[-\beta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u} + |\mathbf{k}|^2\theta^2/2)] = \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{k} \delta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u} + |\mathbf{k}|^2/2) h_\varepsilon(|\mathbf{u}|, |\mathbf{k}|) |\mathbf{k}|^3 \int_0^1 d\theta \exp[\beta/2 |\mathbf{k}|^2\theta(1 - \theta)] \leq \end{aligned}$$

$$\leq \frac{2\pi}{|\mathbf{u}|} \int_0^{2|\mathbf{u}|} dr h_\varepsilon(|\mathbf{u}|, r) r^4 \exp(\beta r^2/8).$$

Подставляя $h_\varepsilon(|\mathbf{u}|, r)$ из (73), приведем это неравенство к виду

$$J_\varepsilon(|\mathbf{u}|) \leq 2^{5/2} \pi \int_{-1}^1 d\mu g_\varepsilon(|\mathbf{u}|, \mu) |\mathbf{u}|^3 e^{\beta|\mathbf{u}|^2(1-\mu)/4} (1-\mu)^{3/2}.$$

Поэтому получим

$$|\Delta_2(\mathbf{v}, \varepsilon)| \leq C_2 \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} \int_{-1}^1 d\mu g_\varepsilon(|\mathbf{u}|, \mu) |\mathbf{u}|^3 (1-\mu)^{3/2} \exp \left[-\beta(|\mathbf{v}|^2 + |\mathbf{w}|^2) + \beta \frac{|\mathbf{u}|^2}{4} (1-\mu) \right].$$

Теперь можно рассмотреть условия, при которых $\Delta_{1,2}(\mathbf{v}, \varepsilon) \rightarrow 0$ при $\varepsilon \rightarrow 0$. Пусть функция $g_\varepsilon(|\mathbf{u}|, \mu)$ такова, что

$$g_\varepsilon(|\mathbf{u}|, \mu) = 0 \quad \text{при} \quad \mu \geq 1 - \varepsilon a_\varepsilon(|\mathbf{u}|), \quad (84)$$

с некоторой функцией $a_\varepsilon(|\mathbf{u}|) > 0$. Пусть эта функция удовлетворяет условию (при достаточно малых $\varepsilon > 0$)

$$\varepsilon |\mathbf{u}|^2 a_\varepsilon(|\mathbf{u}|) \leq \gamma, \quad (85)$$

где γ не зависит от ε . Тогда

$$|\Delta_2(\mathbf{v}, \varepsilon)| \leq C_2 \exp \frac{\beta\gamma}{4} - \beta|\mathbf{v}|^2 \sqrt{\varepsilon} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} e^{-\beta|\mathbf{w}|^2} g_1(|\mathbf{u}|, \mu) |\mathbf{u}|^3 \sqrt{a_\varepsilon(|\mathbf{u}|)}. \quad (86)$$

Здесь использована очевидная оценка

$$2\pi \int_{-1}^1 d\mu g_\varepsilon(|\mathbf{u}|, \mu) (1-\mu)^{1+r} \leq [\varepsilon a_\varepsilon(|\mathbf{u}|)]^r g_1(|\mathbf{u}|, \mu),$$

где $g_1(|\mathbf{u}|, \mu)$ определено в (75). Применяя эту же оценку к (83), получаем

$$|\Delta_1(\mathbf{v}, \varepsilon)| \leq C_1 e^{-\beta|\mathbf{v}|^2} \varepsilon \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} e^{-\beta|\mathbf{w}|^2} g_1(|\mathbf{u}|, \mu) |\mathbf{u}|^2 a_\varepsilon(|\mathbf{u}|). \quad (87)$$

Если интегралы в неравенствах (86), (87) равномерно по ε ограничены, то получаем оценки вида

$$|\Delta_1(\mathbf{v}, \varepsilon)| \leq \Phi_1(|\mathbf{v}|) e^{-\beta|\mathbf{v}|^2} \varepsilon, \quad |\Delta_2(\mathbf{v}, \varepsilon)| \leq \Phi_2(|\mathbf{v}|) e^{-\beta|\mathbf{v}|^2} \sqrt{\varepsilon}, \quad (88)$$

где $\Phi_{1,2}(|\mathbf{v}|)$ не зависят от ε и легко оцениваются из интегралов в (86), (87) после того, как выбор аппроксимирующей функции $g_\varepsilon(|\mathbf{u}|, \mu)$ из (68), (84) произведен.

Остается рассмотреть выражение (80) для $\Delta_0(\mathbf{v}, \varepsilon)$ и потребовать, чтобы $\Delta_0(\mathbf{v}, \varepsilon) \rightarrow 0$ при $\varepsilon \rightarrow 0$. Из неравенства (83) следует, что естественным является требование

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} g_1(|\mathbf{u}|, \varepsilon) = \frac{8}{|\mathbf{v}|^3}, \quad \mathbf{u} \in \mathbb{R}^3. \quad (89)$$

С другой стороны, любая функция, удовлетворяющая условию (84) может быть представлена в виде

$$g_\varepsilon(|\mathbf{u}|, \mu) = \frac{1}{\varepsilon^2} \Psi_\varepsilon \left(|\mathbf{u}|, \frac{1 - \mu}{\varepsilon a_\varepsilon(|\mathbf{u}|)} \right), \quad (90)$$

где $\Psi_\varepsilon(|\mathbf{u}|, x) = 0$ при $x > 1$. Можно также считать без ограничения общности, что

$$\varepsilon a_\varepsilon(|\mathbf{u}|) \leq 2, \quad (91)$$

т.к. в противном случае неравенство в (84) становится тривиальным. Считая условие (91) выполненным, получаем

$$g_1(|\mathbf{u}|, \varepsilon) = 2\pi a_\varepsilon^2(|\mathbf{u}|) \int_0^1 dx x \Psi_\varepsilon(|\mathbf{u}|, x). \quad (92)$$

Для наших целей достаточно рассмотреть функции $\Psi_\varepsilon(|\mathbf{u}|, x)$ вида

$$\Psi_\varepsilon(|\mathbf{u}|, x) = b_\varepsilon(|\mathbf{u}|) \varphi(x), \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (93)$$

где $\varphi(x)$ не зависит от ε и удовлетворяет условию нормировки

$$2\pi \int_0^1 dx x \varphi(x) = 8. \quad (94)$$

Считая $a_\varepsilon(|\mathbf{u}|)$ и $b_\varepsilon(|\mathbf{u}|)$ непрерывными функциями от $\varepsilon \geq 0$, получим условие (89) в виде

$$a_0^2(|\mathbf{u}|) b_0(|\mathbf{u}|) = |\mathbf{u}|^{-3}. \quad (95)$$

Понятно, что существует очень много функций $a_\varepsilon(|\mathbf{u}|)$, $b_\varepsilon(|\mathbf{u}|)$ и $\varphi(x)$, которые удовлетворяют всем указанным выше условиям и обеспечивают равенства (81). С практической точки зрения, наиболее удобно выбирать *простейшие* для приближенного решения варианты Больцмана. Таковыми, в частности, являются модели с постоянной (не зависящей от скорости) полной частотой столкновений g_{tot} . В обозначениях (90), (92) получаем

$$g_{tot}(|\mathbf{u}|) = \frac{2\pi}{\varepsilon} a_\varepsilon(|\mathbf{u}|) b_\varepsilon(|\mathbf{u}|) \int_0^1 dx \varphi(x). \quad (96)$$

Отсюда ясно, что для постоянной частоты столкновений достаточно положить $b_\varepsilon(|\mathbf{u}|) = a_\varepsilon^{-1}(|\mathbf{u}|)$, тогда получаем

$$g_\varepsilon(|\mathbf{u}|, \mu) = \frac{1}{\varepsilon^2 a_\varepsilon(|\mathbf{u}|)} \varphi \left[\frac{1 - \mu}{\varepsilon a_\varepsilon(\mu)} \right], \quad a_0(|\mathbf{u}|) = |\mathbf{u}|^{-3}, \quad \varphi(x) = 0 \text{ при } x > 1, \quad (97)$$

$$\pi \int_0^1 dx \varphi(x) x = 4.$$

Кроме того, $a_\varepsilon(|\mathbf{u}|)$ должна удовлетворять условиям (85), (91)

$$\varepsilon a_\varepsilon(|\mathbf{u}|) \leq \text{Min} \left(2, \frac{\gamma}{|\mathbf{u}|^2} \right) \quad (98)$$

с некоторой постоянной γ . Заметим, что

$$g_{tot} = \frac{2\pi}{\varepsilon} \int_0^1 dx \varphi(x)$$

не зависит от $a_\varepsilon(|\mathbf{u}|)$. Простейшие примеры функций $a_\varepsilon(|\mathbf{u}|)$, удовлетворяющих всем этим условиям, имеют вид

$$a_\varepsilon(|\mathbf{u}|) = \text{Min} \left(\frac{2}{\varepsilon}, |\mathbf{u}|^{-3} \right) \quad \text{или} \quad a_\varepsilon(|\mathbf{u}|) = \frac{1}{|\mathbf{u}|^3 + \varepsilon/2}.$$

При этом единственным ограничением на неотрицательную функцию $\varphi(x)$, $x \in [0, 1]$ является нормировка (94). Интеграл (80) при квазимаксвелловском (т.е. в предположениях (97)) выборе $g_\varepsilon(|\mathbf{u}|, \mu)$ имеет вид

$$\Delta_0(\mathbf{v}, \varepsilon) = 4 \int_{|\mathbf{u}|^3 < \varepsilon/2} d\mathbf{w} (|\mathbf{u}|^{-3} - 2/\varepsilon) \left[2u_i \frac{\partial F(\mathbf{u}, \mathbf{U})}{\partial u_i} + \Gamma(\mathbf{u}, \mathbf{U}) \right],$$

$$\Gamma(\mathbf{u}, \mathbf{U}) = (|\mathbf{u}|^2 \delta_{ij} - u_i u_j) \frac{\partial^2 F(\mathbf{u}, \mathbf{U})}{\partial u_i \partial u_j}.$$

Ясно, что в предположениях (70) получим оценку

$$|\Gamma(\mathbf{u}, \mathbf{U})| \leq C |\mathbf{u}|^2 e^{-\beta(|\mathbf{v}|^2 + |\mathbf{w}|^2)}.$$

С другой стороны

$$2 \frac{\partial F(\mathbf{u}, \mathbf{U})}{\partial u_i} = \frac{\partial f(\mathbf{v})}{\partial v_i} f(\mathbf{w}) - \frac{\partial f(\mathbf{w})}{\partial w_i} f(\mathbf{v}) =$$

$$= u_j \int_0^1 d\theta \left[f(\mathbf{v}) \frac{\partial^2 f(\mathbf{v} - \mathbf{u}\theta)}{\partial v_i \partial v_j} - \frac{\partial f(\mathbf{v})}{\partial v_i} \frac{\partial f(\mathbf{v} - \mathbf{u}\theta)}{\partial v_j} \right],$$

поскольку $\partial_t + \mathbf{u} \cdot \partial_{\mathbf{v}} f(\mathbf{v} - \mathbf{u}t) = 0$. Поэтому в предположениях (70) получим

$$\left| u_i \frac{\partial F(\mathbf{u}, \mathbf{U})}{\partial u_i} \right| \leq C |\mathbf{u}|^2 e^{-\beta|\mathbf{v}|^2}.$$

В результате получаем

$$\Delta_0(\mathbf{v}; \varepsilon) \leq C e^{-\beta|\mathbf{v}|^2} \int_{|\mathbf{u}|^3 < \varepsilon/2} d\mathbf{u} (|\mathbf{u}|^{-3} - 2/\varepsilon) |\mathbf{u}|^2 = \tilde{C} \varepsilon^{2/3} e^{-\beta|\mathbf{v}|^2}.$$

Остается провести оценку интегралов в (86) и (87) для $\Delta_{1,2}(\mathbf{v}; \varepsilon)$. В рассматриваемом случае

$$g_1(|\mathbf{u}|; \varepsilon) = 8a_\varepsilon(|\mathbf{u}|), \quad a_\varepsilon(|\mathbf{u}|) = \text{Min}(|\mathbf{u}|^{-3}, 2/\varepsilon).$$

Поэтому интеграл в (86) оценивается как

$$8 \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} e^{-\beta|\mathbf{w}|^2} |\mathbf{u}|^{-3/2} \leq 8 \left[\int_{|\mathbf{u}| \leq 1} d\mathbf{u} |\mathbf{u}|^{-3/2} + \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} e^{-\beta|\mathbf{w}|^2} \right] = \text{const.}$$

Отсюда следует, что

$$|\Delta_2(\mathbf{v}; \varepsilon)| \leq \tilde{C}_2 \sqrt{\varepsilon} e^{-\beta|\mathbf{v}|^2}.$$

Интеграл в (87) оцениваются следующим образом:

$$8 \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} \frac{e^{-\beta|\mathbf{w}|^2} |\mathbf{u}|^2}{[\text{Max}(|\mathbf{u}|^3, \varepsilon/2)]^2} \leq 8 \left[\int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{w} e^{-\beta|\mathbf{w}|^2} + \int_{|\mathbf{u}| \leq 1} d\mathbf{u} \frac{|\mathbf{u}|^2}{[\text{Max}(|\mathbf{u}|^3, \varepsilon/2)]^2} \right].$$

Второй интеграл равен

$$4\pi \int_0^1 dr \frac{r^4}{[\text{Max}(r^3, \varepsilon/2)]^2} = 4\pi \left(\frac{2}{\varepsilon} \right)^{1/3} \int_0^{(2/\varepsilon)^{1/3}} dx \frac{x^4}{[\text{Max}(x^3, 1)]^2}.$$

Поэтому оценка (87) приводит к неравенству

$$|\Delta_1(\mathbf{v}; \varepsilon)| \leq \tilde{C}_1 \varepsilon^{2/3} e^{-\beta|\mathbf{v}|^2}.$$

Окончательный результат следует из (79):

$$|Q_\varepsilon(f, f) - Q^L(f, f)| \leq C \sqrt{\varepsilon} e^{-\beta|\mathbf{v}|^2}, \quad \mathbf{v} \in \mathbb{R}^3, \quad (99)$$

где интеграл Больцмана (68) рассматривался с модельной функцией

$$g_\varepsilon(|\mathbf{u}|, \mu) = \frac{1}{\varepsilon} a_\varepsilon^{-1}(|\mathbf{u}|) \varphi \left(\frac{1 - \mu}{\varepsilon a_\varepsilon(|\mathbf{u}|)} \right), \quad (100)$$

где $a_\varepsilon(|\mathbf{u}|) = \text{Min}(|\mathbf{u}|^{-3}, 2/\varepsilon)$, а $\varphi(x)$ - произвольная неотрицательная функция, равная нулю при $x > 1$ и удовлетворяющая условиям

$$\int_0^1 dx \varphi(x) < \infty, \quad \int_0^1 dx \varphi(x)x = 4/\pi.$$

Постоянная C в неравенстве (99) зависит только от параметров A и β из условий (70), причем зависимость от A тривиальна: $C = C_0(\beta) A^2$. Таким образом, выше доказано следующее общее утверждение.

Предложение.

Интеграл столкновений Ландау (67) можно бесконечным числом способов аппроксимировать "квазимаксвелловским" интегралом столкновений Больцмана (68), где функция $g_\varepsilon(|\mathbf{u}|, \mu)$ удовлетворяет условиям (97). В классе гладких функций распределения $f(\mathbf{v})$, удовлетворяющих условиям (70), аппроксимация (понимаемая в смысле неравенства (99)) имеет порядок не ниже, чем $O(\sqrt{\varepsilon})$, где ε - это параметр, фигурирующий в условиях (97).

Аналогичное утверждение точно так же доказывается для интеграла Ландау, соответствующему столкновениям частиц разных сортов. Оценку $O(\sqrt{\varepsilon})$ можно, по-видимому, несколько усилить, но это требует удлинения доказательств. Если множитель $|\mathbf{u}|^{-3}$ в интеграле Ландау (67) заменить ограниченной функцией, то получим стандартную оценку $O(\varepsilon)$, т.к. малые значения $|\mathbf{u}|$ уже не будут играть существенной роли.

Результаты численных расчетов

В этом параграфе представлены результаты двух иллюстративных расчетов релаксации двухкомпонентной плазмы к равновесию с целью сравнения скорости и точности счета для значений параметров $\lambda = \varkappa = 1$ и стандартных значений (64) $\lambda = \sqrt{\gamma}$, $\varkappa = 1/4$, где $\gamma = m/M$. Согласно (54), шаг по времени τ_N зависит от параметров λ и \varkappa , следовательно и продолжительность времени, необходимого для проведения одного расчета, также зависит от выбора параметров λ и \varkappa . Начальные распределения электронов и ионов изотропны $f_\alpha = \delta(v_\alpha - 1)$, $\alpha = e, i$, а начальные данные таковы, что $T_i^{(0)}/T_e^{(0)} = 1/\gamma$ и условие (65) выполняется на всех стадиях релаксации, поэтому выбор стандартных параметров (64) вполне обоснован. Подробное описание алгоритма метода Монте-Карло для двухкомпонентной плазмы и результатов численных расчетов релаксации приведено в [5], здесь мы лишь коротко напомним основные параметры расчета: N - число модельных частиц каждого сорта, K - количество расчетов, по которым проводится усреднение и ε - параметр характеризующий малость угла рассеяния.

На рис. 1, 2 представлено сравнение зависимости моментов ионной и электронной функций распределения от времени для выбранных значений параметров λ и \varkappa с результатами полученными с помощью полностью консервативных

разностных схем (см. список литературы в [5]) при отношении масс $\gamma = 1/64$. Моменты функции распределения определяются выражениями

$$M_\alpha^{2n}(t) = \frac{1}{N_\alpha} \sum_{j=1}^{N_\alpha} |\mathbf{v}_j|^{2n} \propto m_\alpha^{2n}(t) = \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{v} |\mathbf{v}|^{2n} f_\alpha(\mathbf{v}, t), \quad \alpha = e, i.$$

Из рисунков видно, что кривые соответствующие различным значениям λ и \varkappa с одинаковой точностью совпадают с результатами полученными с использованием полностью консервативных разностных схем, т.е. выбор значений (64) не приводит к ухудшению качества описания процесса релаксации плазмы. С другой стороны, продолжительность времени счета для параметров (64) оказывается в 2.4 раза меньше, чем в случае $\lambda = \varkappa = 1$, что соответствует увеличению шага по времени с $\tau_N = 2\varepsilon/N$ до значения определенного в (66) при $\gamma = 1/64$. На рис. 3, 4 представлены те же зависимости, но уже для отношения масс $\gamma = 1/1800$. Как и в предыдущем случае, полученные кривые практически совпадают, однако для параметров (64) продолжительность времени счета оказывается в 2.7 раза меньше, чем в случае $\lambda = \varkappa = 1$.

Таким образом, существенных различий в результатах численных расчетов релаксации двухкомпонентной плазмы при изменении параметров λ и \varkappa не выявлено, но время счета для стандартных значений (64) оказывается заметно меньше, что позволяет ускорить вычисления в 2.5-3.0 раза.

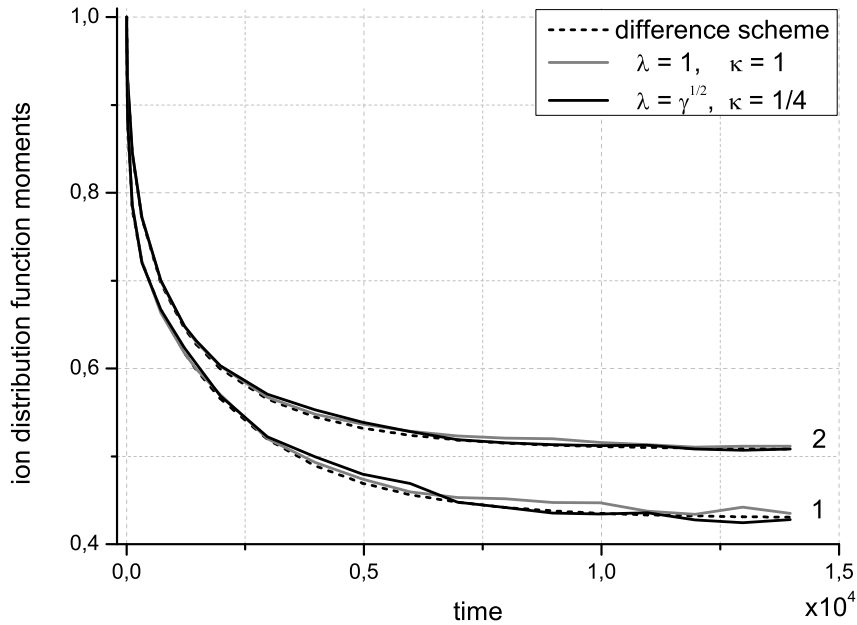


Рис. 1. Сравнение зависимостей моментов ионной функции распределения от времени, полученных методом Монте-Карло для параметров $\lambda = 1$, $\varkappa = 1$ и $\lambda = \gamma^{1/2}$, $\varkappa = 1/4$ при $\gamma = 1/64$, $N = 500$, $K = 20$, $\varepsilon = 0.05$; 1 - 2-ой момент, 2 - 4-ый момент.

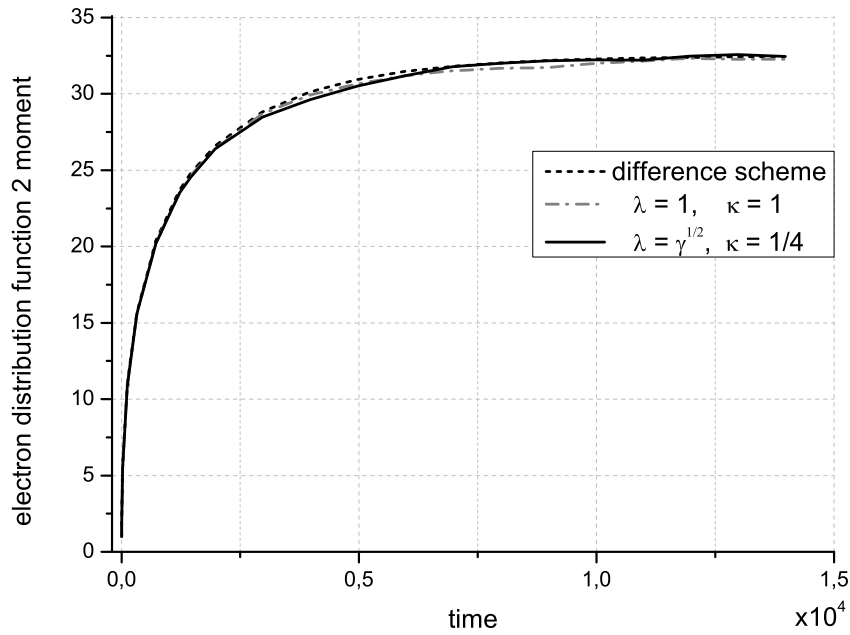


Рис. 2. Сравнение зависимости 2 момента электронной функции распределения от времени, полученной методом Монте-Карло для параметров $\lambda = 1, \kappa = 1$ и $\lambda = \gamma^{1/2}, \kappa = 1/4$ при $\gamma = 1/64, N = 500, K = 20, \varepsilon = 0.05$.

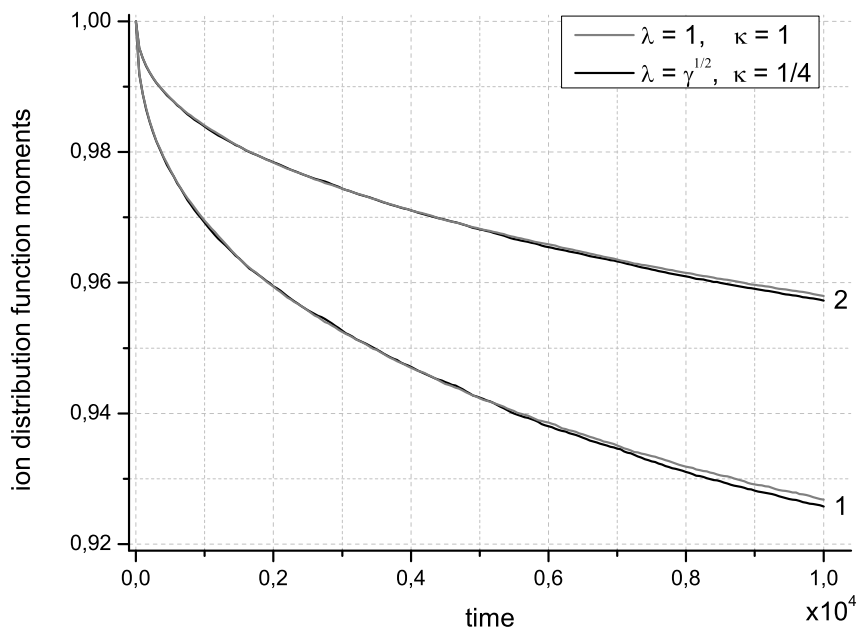


Рис. 3. Сравнение зависимостей моментов ионной функции распределения от времени, полученных методом Монте-Карло для параметров $\lambda = 1, \kappa = 1$ и $\lambda = \gamma^{1/2}, \kappa = 1/4$ при $\gamma = 1/1800, N = 1000, K = 10, \varepsilon = 0.05$; 1 - 2-ой момент, 2 - 4-ый момент.

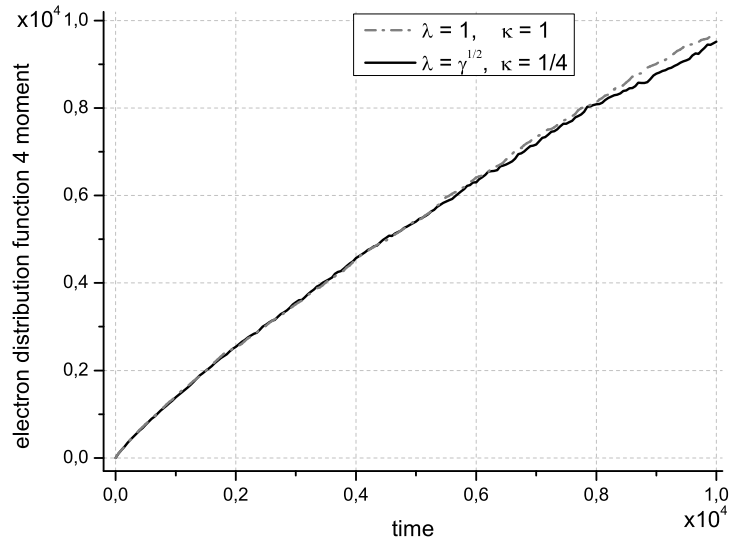


Рис. 4. Сравнение зависимости 4 момента электронной функции распределения от времени, полученной методом Монте-Карло для параметров $\lambda = 1$, $\kappa = 1$ и $\lambda = \gamma^{1/2}$, $\kappa = 1/4$ при $\gamma = 1/1800$, $N = 1000$, $K = 10$, $\varepsilon = 0.05$.

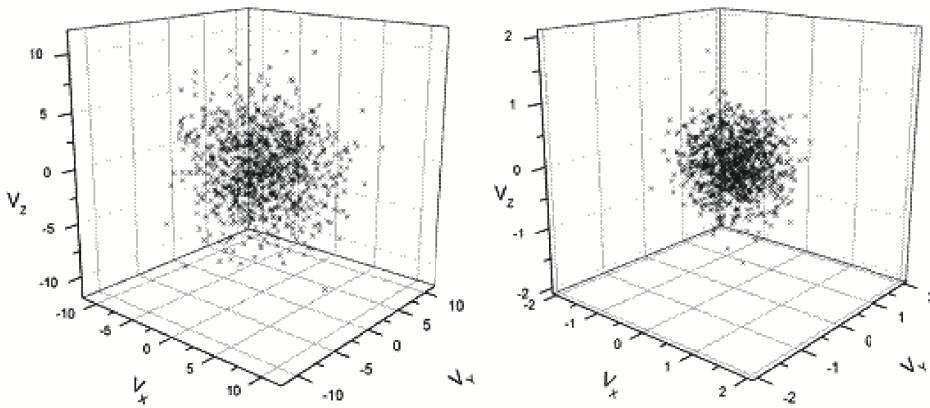


Рис. 5. Электронная и ионная функции распределения в декартовых координатах в конце процесса релаксации при $\gamma = 1/64$, $N = 1000$.

Для наглядности на рис. 5 представлены функции распределения (набор скоростей) электронов и ионов в декартовой системе координат. Видно, что частицы сосредоточены, главным образом, в соответствующих тепловых областях v_{th} : $0 \leq v \lesssim v_e$ слева и $0 \leq v \lesssim v_i$ справа. При этом в хвосты распределения попадает малое количество частиц.

Список литературы

- [1] *Bobylev A.V., Nanbu K.* Theory of collision algorithms for gases and plasmas based on the Boltzmann equation and the Landau-Fokker-Planck equation, *Phys.Rev.E* 61, 4576-4586 (2000).
- [2] *Nanbu K.* Theory of cumulative small-angle collisions in plasmas, *Phys.Rev. E* 55, 4642-4652 (1997).
- [3] *Bobylev A.V., Mossberg E., Potapenko I.F.* A DSMC method for the Landau-Fokker-Planck equation. Proceedings of XXV International symposium on RGD, 2006, 479-483, Eds. M.S.Ivanov, A.K.Rebrov, Novosibirsk, Publ. of the Seberian Branch of RAS;
- [4] *Dimarko G., Caflish R., Pareschi L.* Direct Simulation Monte Carlo schemes for Coulomb interactions in plasmas, *Commun. Appl. Indust. Math.* 1, 72-91 (2010).
- [5] *Бобылев А.В., Карпов С.А., Потапенко И.Ф.* Метод Монте-Карло для двухкомпонентной плазмы. Препринт N 21, М.: ИПМ им.М.В.Келдыша РАН, 2012, с.25; *Potapenko I.F., Bobylev A.V., Mossberg E.* Deterministic and stochastic methods for nonlinear Landau-Fokker-Planck kinetic equations with applications to plasma physics // *Transp. Theory Stat. Phys.*, 2008, v.37, p.113-170.
- [6] *Бобылев А.В.* О разложении интеграла столкновений Больцмана в ряд Ландау. *ДАН, СССР*, 225,(3), стр.535-538, 1975; *Бобылев А.В.* Приближение Ландау в кинетической теории газов и плазмы. - Москва: ИПМ им. М.В.Келдыша, АН СССР, 1974, препринт N 76, 49 с.
- [7] *Силлин В.П.* Введение в кинетическую теорию газов. -М.: Наука, 1971, 332с.
- [8] *Bird G.A.* Molecular gas dynamics and direct simulation of gas flows (Clarendon Press, Oxford) 1994, 458p.
- [9] *Кас М.* Probability and related topics in physical sciences. Interscience Publishers, Ltd., London, Inc., New York, 1957, 266p.
- [10] *Feller W.* An introduction to probability theory and its applications, New York, 1950, 12+419p.
- [11] *Arseniev A. A.* On the Relation between Boltzmann-Equation and Landau-Fokker-Planck Equations. *Doklady Akademii Nauk USSR* (1989) V.305, n. 2, 322-324.
- [12] *Eibeck A., Wagner W.* Stochastic interacting particle systems and nonlinear kinetic equations. *The Annals of Applied Probability* (2003) V.13, n.3, JSTOR, 845-889.