



Б.48

50

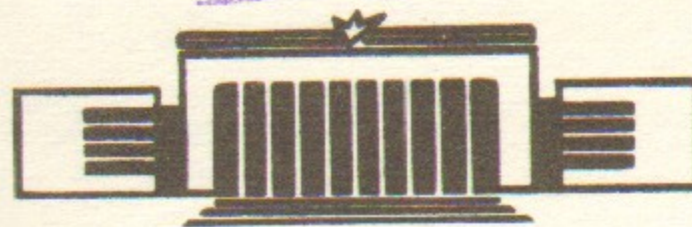
ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СО АН СССР

Ю.А.Березин, М.С.Пеккер, В.Н.Худик

**КОНСЕРВАТИВНЫЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ  
ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ФОККЕРА—ПЛАНКА,  
НЕ НАРУШАЮЩИЕ ЗАКОНА  
ВОЗРАСТАНИЯ ЭНТРОПИИ**

ПРЕПРИНТ 84-96

БИБЛИОТЕКА  
Института ядерной  
физики СО АН СССР  
ИНВ. № \_\_\_\_\_



НОВОСИБИРСК

КОНСЕРВАТИВНЫЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ  
ФОККЕРА-ПЛАНКА, НЕ НАРУШАЮЩИЕ ЗАКОНА ВОЗРАСТАНИЯ ЭНТРОПИИ

Ю.А.Березин, М.С.Пеккер, В.Н.Худик

А Н Н О Т А Ц И Я

В работе построены две полностью консервативные разностные схемы для одномерного уравнения Фоккера-Планка, не нарушающие закона возрастания энтропии. Показано, что одну из схем можно интерпретировать, как градиентный метод максимизации энтропии системы при постоянном числе частиц и энергии. Вблизи максвелловской функции распределения установлена взаимосвязь между устойчивостью предложенных схем и возрастанием энтропии. Проведены численные эксперименты, демонстрирующие эту взаимосвязь в общем случае.

1. Введение

Принцип полной консервативности разностных схем был выдвинут А.А.Самарским и Ю.П.Поповым [1]. Полностью консервативная разностная схема (ПКР-схема), аппроксимирующая уравнение Фоккера-Планка (УФП), была впервые построена в работе [2], для случая изотропной в пространстве скоростей функции распределения. В последующих работах [3,4,5] основные усилия были направлены на обобщение этой схемы на практически важный двумерный случай, когда функция распределения зависит от модуля скорости  $V$  и азимутального угла  $\theta$ . Построение ПКР-схем, сохраняющих кроме энергии и числа частиц также и импульс системы, было проведено в [6]. Там же предложена трехмерная ПКР-схема, не нарушающая закона возрастания энтропии замкнутой системы.

Разностные схемы, автоматически обладающие свойствами соответствующих дифференциальных уравнений, конечно, более адекватно позволяют описать физическую сторону изучаемых явлений [1,4].

В данной работе мы возвращаемся к одномерной задаче, считая, что функция распределения зависит только от модуля скорости  $V$ . В первой части проведено построение двух ПКР-схем, не нарушающих закона возрастания энтропии <sup>\*</sup> и имеющих точным стационарным решением максвелловскую функцию распределения. Во второй части начато исследование этих схем. Выявлено, что одна из построенных схем является разновидностью градиентного метода максимизации энтропии при условии постоянства числа частиц и энергии. Найдено в явном виде ограничение на шаг схемы по времени, гарантирующее рост энтропии. В третьей части нами проведено обсуждение численных экспериментов, устанавливающих взаимосвязь между устойчивостью схемы и законом возрастания энтропии (в случае, когда функция распределения близка к максвелловской, эта взаимосвязь установлена аналитически).

2. Построение ПКР-схем, не нарушающих закона  
возрастания энтропии

Трехмерное УФП для замкнутой системы заряженных частиц с интегралом столкновений в форме Ландау в декартовых координатах имеет вид [7]:

<sup>\*</sup> Очевидно, что разностная схема, не нарушающая закона возрастания энтропии для замкнутой системы, обязательно является ПКР-схемой.

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \sum_{\alpha, \beta} \frac{\partial}{\partial v_{\alpha}} \int (f' \frac{\partial f}{\partial v_{\beta}} - f \frac{\partial f'}{\partial v_{\beta}}) G_{\alpha\beta}(\vec{v}, \vec{v}') d\vec{v}'$$

где

$$G_{\alpha\beta}(\vec{v}, \vec{v}') = \frac{1}{|\vec{v} - \vec{v}'|} \left( \delta_{\alpha\beta} - \frac{(v_{\alpha} - v'_{\alpha})(v_{\beta} - v'_{\beta})}{|\vec{v} - \vec{v}'|^2} \right)$$

и для краткости под  $f$  понимается  $f(\vec{v}, t)$ , а под  $f'$  —  $f(\vec{v}', t)$ . Индексы  $\alpha, \beta$  пробегает значения  $x, y, z$ .

Для изотропной функции распределения УФП в сферической системе координат принимает вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left[ \int_0^{\infty} \left( f' v \frac{\partial f}{\partial v} - f v' \frac{\partial f'}{\partial v'} \right) G(v, v') v v'^2 dv' \right] \quad (1)$$

где

$$G(v, v') = \frac{4\pi}{3} \left( \frac{v^2}{v'} + \frac{v'^2}{v} - \left| \frac{v^2}{v'} - \frac{v'^2}{v} \right| \right)$$

а  $f \equiv f(v, t)$ ,  $f' \equiv f(v', t)$ .

В предыдущих работах [2-5] при построении разностных схем для одномерного УФП использовались переменные  $V, t$ . Как будет видно из дальнейшего, более удобно использовать вместо переменной  $V$  переменную  $\varepsilon = V^2$ . Опуская несущественный для нас численный множитель, перепишем уравнение (1) в переменных  $\varepsilon, t$ :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[ \int_0^{\infty} \left( f' \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} - f \frac{\partial f'}{\partial \varepsilon'} \right) g(\varepsilon, \varepsilon') d\varepsilon' \right], \quad (2)$$

где

$$g(\varepsilon, \varepsilon') = \frac{1}{2} \left[ \varepsilon^{3/2} + \varepsilon'^{3/2} - \left| \varepsilon^{3/2} - \varepsilon'^{3/2} \right| \right] = \begin{cases} \varepsilon^{3/2} & \text{при } \varepsilon \leq \varepsilon' \\ \varepsilon'^{3/2} & \text{при } \varepsilon > \varepsilon' \end{cases}$$

$$f \equiv f(\varepsilon, t), \quad f' \equiv f(\varepsilon', t).$$

Очевидно, что  $g(\varepsilon, \varepsilon') = g(\varepsilon', \varepsilon)$ ;  $g(\varepsilon, \varepsilon') \geq 0$ , причем равенство нулю возможно только, когда один из аргументов обращается в нуль.

Уравнение (2) имеет особенность в точке  $\varepsilon = 0$ , которая является устранимой особенностью. После проведения дифференцирова-

ния правой части (2), устремляя  $\varepsilon$  к нулю, получим, что

$$\frac{\partial f(0, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \left[ f^2(0, t) + \int_0^{\infty} f' d\varepsilon' \cdot \frac{\partial f(\varepsilon, t)}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon=0} \right]$$

Число частиц  $N$ , энергию  $E$  и энтропию системы  $S$  из соображений удобства определим по формулам:

$$N = \frac{1}{2\pi} \int f d\vec{v} = \int f \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon \quad (3)$$

$$E = \frac{1}{2\pi} \int f \vec{v}^2 d\vec{v} = \int f \varepsilon \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon$$

$$S = -\frac{1}{2\pi} \int f \ln f d\vec{v} = -\int f \ln f \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon$$

Величины  $N$  и  $E$  при эволюции системы остаются неизменными, а энтропия  $S$  может только возрасть (H-теорема Больцмана). Действительно

$$\frac{dN}{dt} = \int \frac{\partial f}{\partial t} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon = \int \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left( f' \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} - f \frac{\partial f'}{\partial \varepsilon'} \right) g(\varepsilon, \varepsilon') d\varepsilon' d\varepsilon = 0$$

$$\frac{dE}{dt} = \int \frac{\partial f}{\partial t} \varepsilon^{3/2} d\varepsilon = - \int \int \left( f' \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} - f \frac{\partial f'}{\partial \varepsilon'} \right) g(\varepsilon, \varepsilon') d\varepsilon d\varepsilon' = 0 \quad (4)$$

$$\frac{dS}{dt} = - \int \frac{\partial f}{\partial t} \ln f \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon = \frac{1}{2} \int \int \left( \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \ln f - \frac{\partial}{\partial \varepsilon'} \ln f' \right)^2 f f' g(\varepsilon, \varepsilon') d\varepsilon d\varepsilon'$$

При вычислении интегралов в (4) применялось интегрирование по частям и учитывалось равенство нулю функции распределения  $f$  при  $\varepsilon = \infty$ .

Максвелловская функция является точным стационарным решением уравнения (2) и при данных  $N$  и  $E$  максимизирует энтропию  $S$ .

При проведении выкладок в (4) можно заметить, что законы сохранения и принцип возрастания энтропии не связаны жестко с конкретным видом функции  $g(\varepsilon, \varepsilon')$ : для справедливости законов сохранения требуется лишь симметричная зависимость функции  $g(\varepsilon, \varepsilon')$  от аргументов  $\varepsilon, \varepsilon'$  и обращение ее в ноль при  $\varepsilon = 0$ , а для возрастания энтропии еще и неотрицательность этой функции:  $g(\varepsilon, \varepsilon') \geq 0$ .

Область определения функции  $f(\varepsilon, t)$  по переменной  $\varepsilon$  является полупрямая  $[0, \infty)$ . Это представляет некоторое неудобство

при теоретическом рассмотрении разностных схем. В частности, нам приходится оговаривать, что при реальном вычислительном процессе (когда полупрямая с необходимостью заменяется на конечный отрезок) законы сохранения справедливы лишь в пренебрежении экспоненциально малыми потоками частиц и энергии через границу области. Чтобы восстановить замкнутость системы на конечном отрезке  $[0, \epsilon_0]$ , будем рассматривать уравнение (3) с функцией  $g(\epsilon, \epsilon')$ , определенной следующим образом

$$g(\epsilon, \epsilon') = \frac{1}{2} [\epsilon^{3/2} + \epsilon'^{3/2} - |\epsilon^{3/2} - \epsilon'^{3/2}|] \varphi(\epsilon) \varphi(\epsilon').$$

Здесь образующая функция  $\varphi(\epsilon)$  есть некоторая функция, равная единице на отрезке  $[0, \epsilon_0 - \delta]$  и монотонно изменяющаяся от единицы до нуля на отрезке  $[\epsilon_0 - \delta, \epsilon_0]$  ( $\delta \ll \epsilon_0$ ). Можно, например, использовать такую функцию  $\varphi(\epsilon)$ :  $\varphi(\epsilon) = 1$  при  $0 \leq \epsilon \leq \epsilon_0 - \delta$ ,  $\varphi(\epsilon) = (1 - (\epsilon_0 - \delta - \epsilon)^2 / \delta^2)$  при  $\epsilon_0 - \delta \leq \epsilon \leq \epsilon_0$ ,  $\varphi(\epsilon) = 0$  при  $\epsilon > \epsilon_0$ .

При таком переопределении функции  $g(\epsilon, \epsilon')$  законы сохранения и закон возрастания энтропии очевидно не нарушаются, а функция распределения  $f(\epsilon, t)$  всегда будет равна нулю за пределами отрезка  $[0, \epsilon_0]$ , если в начальный момент времени она была отлична от нуля только на этом отрезке.

Выбирая в качестве  $\varphi(\epsilon)$  ступенчатую функцию  $\varphi(\epsilon) = 1 - \eta(\epsilon - \epsilon_0)$ , где  $\eta(x) = 0$  при  $x \leq 0$  и  $\eta(x) = 1$  при  $x > 0$ , будем иметь вместо уравнения (2) аналогичное уравнение на конечном отрезке  $[0, \epsilon_0]$ :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left[ \int_0^{\epsilon_0} (f' \frac{\partial f}{\partial \epsilon} - f \frac{\partial f'}{\partial \epsilon'}) g(\epsilon, \epsilon') d\epsilon' \right] \quad (5)$$

с граничным условием в точке  $\epsilon = \epsilon_0$

$$\int_0^{\epsilon_0} (f' \frac{\partial f}{\partial \epsilon} - f \frac{\partial f'}{\partial \epsilon'}) g(\epsilon, \epsilon') d\epsilon' \Big|_{\epsilon = \epsilon_0} = 0 \quad (6)$$

В точке  $\epsilon = 0$  уравнение (5) можно записать в виде:

$$\frac{\partial f(0, t)}{\partial t} = \frac{3}{2} \left[ f^2(0, t) - f(0, t) f(\epsilon_0, t) + \int_0^{\epsilon_0} f' d\epsilon' \cdot \frac{\partial f(0, t)}{\partial \epsilon} \Big|_{\epsilon=0} \right] \quad (7)$$

При построении разностной схемы будем исходить из интегродифференциального уравнения (5). Введем равномерную разностную сетку по переменным  $\epsilon$  и  $t$   $\{\epsilon_{i-1/2} = (i-1/2)h, i = 1, 2, 3, \dots, I, Ih = \epsilon_0; t^n = n\tau, n = 0, 1, 2, \dots\}$ . Определим на этой сетке сеточную функцию  $f_{i-1/2}^n$  как значения функции  $f(\epsilon, t)$  в узлах сетки  $(\epsilon_{i-1/2}, t^n)$  и введем вспомогательные функции  $f_i^n, g_{i,i'}$ , равные

$$f_i^n = \frac{1}{2} (f_{i-1/2}^n + f_{i+1/2}^n), \quad i = 1, 2, \dots, I-1 \quad (8)$$

$$g_{i,i'} = \frac{1}{2} h^{3/2} (i^{3/2} + i'^{3/2} - |i^{3/2} - i'^{3/2}|) (1 - \delta_{i,I})(1 - \delta_{i',I})$$

$$i, i' = 0, 1, \dots, I.$$

Отметим, что  $g_{i,i'}$  равна нулю, если хотя бы один из индексов равен нулю или  $I$ .

Разностная схема, аппроксимирующая уравнение (5) имеет вид

$$\frac{f_{i-1/2}^{n+1} - f_{i-1/2}^n}{\tau} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{i-1/2}}} \cdot \frac{P_i^n - P_{i-1}^n}{h}$$

$$P_i^n = \sum_{i'=1}^{I-1} (f_{i'}^n \frac{f_{i+1/2}^n - f_{i-1/2}^n}{h} - f_{i'}^n \frac{f_{i+1/2}^n - f_{i-1/2}^n}{h}) g_{i,i'} h =$$

$$= \sum_{i'=1}^{I-1} (f_{i'-1/2}^n f_{i+1/2}^n - f_{i+1/2}^n f_{i-1/2}^n) g_{i,i'}$$

Здесь  $\sqrt{\epsilon_{i-1/2}} \equiv \frac{1}{h} \int_{\epsilon_{i-1/2}}^{\epsilon_i} \sqrt{\epsilon} d\epsilon = \frac{2}{3} (\epsilon_i^{3/2} - \epsilon_{i-1/2}^{3/2}) / h$ ; вспомогательная функция  $P_i^n$ , с точностью до знака, совпадающая с потоком частиц, тождественна равна нулю при  $i$ , равном нулю или  $I$  \*).

Аппроксимация функции  $1/\sqrt{\epsilon}$  сеточной функцией  $1/\sqrt{\epsilon_{i-1/2}}$  сделана нами исходя из того, что разностное уравнение (9) при фиксированном  $i$  и  $h \rightarrow 0$  (что означает, что  $\epsilon_{i-1/2} \rightarrow 0$ ) должно переходить в уравнение (7).

Разностная схема (9) аппроксимирует уравнение (5) с первым порядком по времени  $t$  и со вторым по переменной  $\epsilon$  (за исключением окрестности точки  $\epsilon = 0$ ; вблизи этой точки аппроксимация по  $\epsilon$  имеет первый порядок).

Уравнение (2) может быть преобразовано также к следующему виду:

\* Тожественное равенство  $P_I^n \equiv 0$  соответствует граничному условию (6).

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left[ \int_0^{\infty} \left( \frac{\partial}{\partial \epsilon} \ln f - \frac{\partial}{\partial \epsilon} \ln f' \right) f f' g(\epsilon, \epsilon') d\epsilon' \right]$$

Проведя процедуру обрезания для такой формы записи УФП, получим разностную схему с другим определением потока частиц

$$\frac{f_{i-1/2}^{n+1} - f_{i-1/2}^n}{\tau} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{i-1/2}}} \cdot \frac{P_i^n - P_{i-1}^n}{h} \quad (10)$$

$$P_i^n = \sum_{i'=1}^{I-1} \left( \frac{\ln f_{i'+1/2}^n - \ln f_{i-1/2}^n}{h} - \frac{\ln f_{i'+1/2}^n - \ln f_{i+1/2}^n}{h} \right) f_i^n f_{i'}^n g_{i i'} h$$

Как и в схеме (9)  $P_0^n \equiv 0$ ,  $P_I^n \equiv 0$ .

Эта схема имеет тот же порядок аппроксимации, что и схема (9). Сеточная функция  $f_{i-1/2}^n$  в схеме (10) должна быть строго больше нуля во всех точках сетки. Точнее, нами предполагается, что относительное изменение функций распределения при переходе от точки к точке мало:

$$\alpha^n \equiv \left| \frac{f_{i+1/2}^n - f_{i-1/2}^n}{f_i^n} \right| \ll 1 \quad (11)$$

Условие (11) необходимо для того, чтобы разностная производная  $(\ln f_{i+1/2}^n - \ln f_{i-1/2}^n)/h$  во всех точках была близка к соответствующей дифференциальной  $-\frac{\partial \ln f}{\partial \epsilon}$ . Как показывают численные эксперименты при устойчивом счете выполнение неравенства (11) в начальный момент времени  $t^0$  обеспечивает его выполнение и во все последующие моменты времени  $t^n$ .

Ниже схему (9) будем называть квадратичной, а схему (10) логарифмической.

Число частиц, энергию и энтропию системы для наших схем определим по формулам:

$$N = \sum_{i=1}^I f_{i-1/2}^n \sqrt{\epsilon_{i-1/2}} h, \quad E = \sum_{i=1}^I f_{i-1/2}^n \epsilon_{i-1/2} \sqrt{\epsilon_{i-1/2}} h \quad (12)$$

$$S^n = - \sum_{i=1}^I f_{i-1/2}^n \ln f_{i-1/2}^n \sqrt{\epsilon_{i-1/2}} h \quad (13)$$

Нетрудно убедиться, что эти суммы аппроксимируют соответствующие интегралы в (3) со вторым порядком.

Законы сохранения для обеих построенных схем выполняются точно, т.е. и квадратичная и логарифмическая схемы являются полностью консервативными разностными схемами:

$$\frac{\Delta N}{\tau} = \sum_{i=1}^I P_i^n - P_{i-1}^n = 0 \quad (14)$$

$$\frac{\Delta E}{\tau} = \sum_{i=1}^I (P_i^n - P_{i-1}^n) \epsilon_{i-1/2} = - \sum_{i=1}^{I-1} P_i^n h = 0$$

Последнее равенство в (14) легко получается при подстановке  $P_i^n$  как из (9), так и из (10).

Максвелловская функция  $f_{i-1/2}^n = a e^{-b \epsilon_{i-1/2}}$  ( $a, b$  — константы,  $\epsilon = v^2$ !) является точным стационарным решением как квадратичной, так и логарифмической разностных схем. Покажем это для квадратичной схемы. Подставляя в выражение для  $P_i^n$  из (9)  $f = f^M$  имеем

$$P_i^n = \sum_{i'=1}^{I-1} (f_{i-1/2}^n f_{i'+1/2}^n - f_{i'+1/2}^n f_{i-1/2}^n) g_{i i'} = \sum_{i'=1}^{I-1} (e^{\pm b h} e^{-\pm b h} - e^{-\pm b h} e^{\pm b h}) e^{-b h(i+i')} g_{i i'} \equiv 0$$

Заметим, что именно использование переменной  $\epsilon = v^2$  позволило построить квадратичную схему, для которой максвелловская функция обращает тождественно в ноль все величины  $P_i$ . Константы  $a$  и  $b$  для обеих схем определяются числом частиц  $N$  и энергией  $E$ :

$$N = a \sum_{i=1}^I e^{-b \epsilon_{i-1/2}} \sqrt{\epsilon_{i-1/2}} h, \quad E = a \sum_{i=1}^I e^{-b \epsilon_{i-1/2}} \epsilon_{i-1/2} \sqrt{\epsilon_{i-1/2}} h \quad (15)$$

Из физических соображений понятно, что граница обрезания  $\epsilon_0$  и шаг схемы  $h$  должны выбираться такими, чтобы выполнялись не-

равенства\*)

$$Nh \ll E \ll N\epsilon_0$$

В этом случае величины  $a$  и  $b$  приближенно равны

$$a = \frac{2}{\sqrt{h}} \left( \frac{3 \cdot N}{2E} \right)^{3/2} N, \quad b = \frac{3}{2} \frac{N}{E}$$

## 2. Геометрическая интерпретация логарифмической разностной схемы. Возрастание энтропии

Логарифмическая схема (10) на первый взгляд может показаться несколько искусственной. Однако, она интересна уже тем, что позволяет интерпретировать алгоритм решения разностного уравнения Фоккера-Планка как градиентный метод максимизации энтропии  $S$  при постоянном числе частиц  $N$  и энергии  $E$ .

В пространстве сеточных функций  $R^I$  определим вектор-столбец состояния системы  $\vec{F}^n$  равенствами:  $F_i^n = f_{i-1/2}^n, i=1, 2, \dots, I$ . Компоненты градиента энтропии в момент времени  $t^n$  находятся дифференцированием соотношения (13) по  $f_{i-1/2}^n$ :  $(\text{grad } S^n)_i = -(\ln f_{i-1/2}^n + 1) \sqrt{\epsilon_{i-1/2}} h$ . Отсюда следует, что

$$\frac{\ln f_{i+1/2}^n - \ln f_{i-1/2}^n}{h} = -\frac{1}{h^2} \left[ \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{i+1/2}}} (\text{grad } S^n)_{i+1} - \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{i-1/2}}} (\text{grad } S^n)_i \right]$$

После подстановки этих соотношений в (10) логарифмическую схему в векторных обозначениях можно записать в виде:

$$\vec{F}^{n+1} = \vec{F}^n + \tau L^n \text{grad } S^n \quad (16)$$

Элементы квадратной матрицы  $L^n$  определяются равенствами:

$$L_{i,i'}^n = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{i-1/2}} \sqrt{\epsilon_{i'+1/2}}} \frac{1}{h} \left( \frac{Q_{i,i'}^n - Q_{i+1,i'}^n}{h} - \frac{Q_{i,i'+1}^n - Q_{i-1,i'+1}^n}{h} \right), \quad i, i' = 1, 2, \dots, I$$

$$Q_{i,i'}^n = \frac{1}{h} \delta_{i,i'} \sum_{k=1}^{I-1} f_i^n f_k^n g_{ik} h - f_i^n f_{i'}^n g_{i,i'}, \quad i, i' = 0, 1, \dots, I \quad (17)$$

\*) Необходимость второго неравенства вытекает уже из того, что при  $E > N \left( \sum_{i=1}^I \epsilon_{i-1/2} \sqrt{\epsilon_{i-1/2}} h \right) / \left( \sum_{i=1}^I \sqrt{\epsilon_{i-1/2}} h \right) = \frac{3}{2} N \epsilon_0$ , определяемая из (15) величина  $b$ , обратно пропорциональная температуре системы, становится отрицательной и стационарная функция распределения растет с увеличением  $E$ .

Очевидно, что  $Q_{i,i'}^n$  равно нулю, если хотя бы один из индексов равен нулю или  $I$ .

Перечислим основные свойства матрицы  $L^n$ :

а) Матрица  $L^n$  симметрическая. Это непосредственно видно из ее определения (17).

б) Матрица  $L^n$  неотрицательна.

Действительно, для любого вектора  $\vec{z} \in R^I$

$$(\vec{z}, L^n \vec{z}) = \sum_{i,i'=1}^I L_{i,i'}^n z_i z_{i'} = \sum_{i,i'=1}^I \frac{1}{h} \left( \frac{Q_{i,i'}^n - Q_{i+1,i'}^n}{h} - \frac{Q_{i,i'+1}^n - Q_{i-1,i'+1}^n}{h} \right) \frac{z_i}{\sqrt{\epsilon_{i-1/2}}} \frac{z_{i'}}{\sqrt{\epsilon_{i'-1/2}}} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i,i'=1}^{I-1} \left[ \frac{1}{h} \left( \frac{z_{i+1}}{\sqrt{\epsilon_{i+1/2}}} - \frac{z_i}{\sqrt{\epsilon_{i-1/2}}} \right) - \frac{1}{h} \left( \frac{z_{i'+1}}{\sqrt{\epsilon_{i'+1/2}}} - \frac{z_{i'}}{\sqrt{\epsilon_{i'-1/2}}} \right) \right]^2 f_i^n f_{i'}^n g_{i,i'} > 0 \quad (18)$$

в) Множество векторов обращающих в нуль квадратичную форму, порожденную матрицей  $L^n$  является двумерным линейным подпространством. Вектора  $\vec{e}_1, \vec{e}_2$ , на которые натянуто это подпространство, по компонентно определяются равенствами  $e_{1i} = h \sqrt{\epsilon_{i-1/2}}, e_{2i} = h \epsilon_{i-1/2} \sqrt{\epsilon_{i-1/2}}$  и, таким образом, не зависят от момента времени  $t^n$ .

Из (18) следует, что  $(\vec{z}, L^n \vec{z}) = 0$  только в том случае, если компоненты вектора  $\vec{z}$  удовлетворяют системе линейных уравнений

$$\left( \frac{z_{i+1}}{\sqrt{\epsilon_{i+1/2}}} - \frac{z_i}{\sqrt{\epsilon_{i-1/2}}} \right) - \left( \frac{z_{i'+1}}{\sqrt{\epsilon_{i'+1/2}}} - \frac{z_{i'}}{\sqrt{\epsilon_{i'-1/2}}} \right) = 0, \quad i, i' = 1, 2, \dots, I$$

Эту систему можно решить следующим образом. Положим  $i' = I$ . Затем последовательно полагая  $i = 2, 3, \dots, I-1$ , определяем компоненты  $z_3, z_4, \dots, z_I$  как линейные функции первых двух компонент  $z_1, z_2$ . В результате получим

$$\frac{z_k}{\sqrt{\epsilon_{k-1/2}}} = \frac{z_2}{\sqrt{\epsilon_{I/2}}} + \left( \frac{z_2}{\sqrt{\epsilon_{3/2}}} - \frac{z_1}{\sqrt{\epsilon_{I/2}}} \right) (k-1),$$

что можно записать и в такой форме

$$\vec{z} = A \vec{e}_1 + B \vec{e}_2$$

где  $A = \frac{1}{h} \left[ \frac{z_1}{\sqrt{\epsilon_{I/2}}} - \frac{1}{2} \left( \frac{z_2}{\sqrt{\epsilon_{3/2}}} - \frac{z_1}{\sqrt{\epsilon_{I/2}}} \right) \right], B = \frac{1}{h^2} \left( \frac{z_2}{\sqrt{\epsilon_{3/2}}} - \frac{z_1}{\sqrt{\epsilon_{I/2}}} \right)$ .

Следовательно, мы получили, что если вектор  $\vec{f}$  обращает в ноль квадратичную форму  $(\vec{f}, L^n \vec{f})$ , то  $\vec{f}$  есть линейная комбинация векторов  $\vec{e}_1, \vec{e}_2$ . Очевидно и обратное утверждение: произвольная линейная комбинация векторов  $\vec{e}_1, \vec{e}_2$  обращает в ноль квадратичную форму, порожденную матрицей  $L^n$ .

Т.к. для неотрицательной матрицы уравнение  $(\vec{f}, L^n \vec{f}) = 0$  эквивалентно уравнению  $L^n \vec{f} = 0$ , то свойство в) можно сформулировать и по другому:

в) Множество собственных векторов матрицы  $L^n$ , принадлежащих собственному значению  $\lambda = 0$ , образует в  $R^2$  двумерное линейное подпространство натянутое на вектора  $\vec{e}_1, \vec{e}_2$ .

Следует отметить, что возможность приведения разностной схемы (10) к форме (16) связана с тем, что само интегродифференциальное уравнение (2) может быть преобразовано к "градиентному" виду:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \int_0^\infty d\varepsilon' \frac{\delta S}{\delta f'} L(\varepsilon, f; \varepsilon', f')$$

Здесь  $\frac{\delta S}{\delta f'}$  есть вариационная производная энтропии  $\frac{\delta S}{\delta f'} = -(\ln f' + 1) \sqrt{\varepsilon'}$ ,

$$L(\varepsilon, f; \varepsilon', f') = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon \varepsilon'}} \frac{\partial^2}{\partial \varepsilon \partial \varepsilon'} \left[ \int_0^\infty f f'' g(\varepsilon, \varepsilon'') d\varepsilon'' - f f' g(\varepsilon, \varepsilon') \right]$$

Можно показать, что ядро  $L(\varepsilon, f; \varepsilon', f')$  обладает свойствами, аналогичными свойствам а) - в) матрицы  $L^n$ .

Проекция вектора состояния  $\vec{F}^n$  на вектор  $\vec{e}_1$ , определяет число частиц системы  $N = (\vec{F}^n, \vec{e}_1) = \sum_{i=1}^{\infty} f^{i-1/2} \sqrt{\varepsilon_{i-1/2}} h$ , а на вектор  $\vec{e}_2$  - энергию системы  $E = (\vec{F}^n, \vec{e}_2) = \sum_{i=1}^{\infty} f^{i-1/2} \varepsilon_{i-1/2} \sqrt{\varepsilon_{i-1/2}} h$ . Сохранение этих величин непосредственно связано с тем, что  $L^n \vec{e}_i = 0$ .

$L^n \vec{e}_2 = 0$ . Действительно, используя (16), имеем, например, для числа частиц:  $(\vec{F}^{n+1}, \vec{e}_1) = (\vec{F}^n, \vec{e}_1) + \tau (L^n \text{grad } S^n, \vec{e}_1) = (\vec{F}^n, \vec{e}_1) + \tau (\text{grad } S^n, L^n \vec{e}_1) = (\vec{F}^n, \vec{e}_1)$ . Аналогично  $(\vec{F}^{n+1}, \vec{e}_2) = (\vec{F}^n, \vec{e}_2)$ . Поскольку множество векторов  $\vec{f}$ , для которых  $L^n \vec{f} = 0$ , исчерпывается линейными комбинациями векторов  $\vec{e}_1, \vec{e}_2$  (см. свойство в') матрицы  $L^n$ , то мы заключаем, что у

логарифмической схемы нет больше каких-либо других законов сохранения \*) - число законов сохранения для нее в точности равно кратности вырождения матрицы  $L^n$  (и равно 2). Подобным же образом делается вывод о том, что у схемы (10) нет каких-либо других стационарных решений отличных от максвелловской функции, т.к. из  $L^n \text{grad } S^n = 0$  с необходимостью следует, что  $\text{grad } S^n = \alpha \vec{e}_1 + \beta \vec{e}_2$  ( $\alpha, \beta$  - числовые константы) из чего, в свою очередь, вытекает, что  $f^{i-1/2} = a e^{-\beta \varepsilon_{i-1/2}}$ .

Нетрудно показать, что изменение энтропии системы при достаточно малом шаге по времени неотрицательно:  $S^{n+1} - S^n \geq 0$ . Для этого разложим  $S^{n+1} \equiv S(\vec{F}^{n+1}) = S(\vec{F}^n + \tau L^n \text{grad } S^n)$  по степеням  $\tau$  (предполагая, что  $\tau$  настолько мало, что  $|F_i^{n+1} - F_i^n| = \tau |(L^n \text{grad } S^n)_i| < F_i^n$  при всех  $i$ ):

$$S^{n+1} = S^n + \tau (\text{grad } S^n, L^n \text{grad } S^n) + \dots \quad (19)$$

Здесь нами опущены пропорциональные степеням  $\tau$  выше первой; сумма этих членов есть величина порядка  $O(\tau^2)$ . Коэффициент при первой степени  $\tau$  в этом разложении для не максвелловской функции распределения строго больше нуля (на основании свойств б), в) матрицы  $L^n$ ). Ясно поэтому, что уменьшая  $\tau$ , всегда можно сделать линейный по  $\tau$  член больше суммы всех остальных членов, опущенных в разложении (19). Следовательно, при достаточно малом шаге по времени всегда  $S^{n+1} - S^n \geq 0$ .

Алгоритм (16) (а вместе с ним и схема (10)) является по существу градиентным методом максимизации энтропии при постоянном числе частиц и энергии. В принципе он может быть использован для нахождения условного максимума произвольной скалярной функции  $\phi(\vec{F})$  при постоянном значении  $N$  и  $E$ , для чего в (16) нужно вместо  $\text{grad } S^n$  подставить  $\text{grad } \phi(\vec{F}^n)$ . Правда, если в этом случае компоненты вектора  $\vec{F}^n$  в процессе итерирования принимают отрицательные значения, то в определении величин  $Q_{ii}^n$ , через которые выражаются элементы матрицы  $L^n$ , нужно заменить также  $f_i^n$  на  $|f_i^n|$ .

\*) Уточним, что здесь имеются в виду законы сохранения линейно зависящие от вектора состояния.

При выполнении неравенство (II) ограничение на шаг по времени  $\tau$ , обеспечивающее рост энтропии для схемы (IO), находится в явном виде (см. приложение):

$$\tau < \frac{1}{2} \delta^n h^2 / \max_i \left( \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{i-1/2}}} \sum_{i'=1}^I \frac{1}{2} (g_{ii'} + g_{i'i}) f_{i'} h \right) \quad (20)$$

Здесь множитель  $\delta^n$  близок к единице при малых  $x^n$ . Численные эксперименты показывают, что это же ограничение на шаг по времени необходимо для устойчивости счета. Так как значение правой части (20) независимо от вида сеточной функции  $f_i^n$  больше, равно  $\frac{1}{2} \frac{h^2}{\sqrt{NE}}$  (см. приложение), то при

$$\tau < \frac{1}{2} \frac{h^2}{\sqrt{NE}} \quad (21)$$

приращение энтропии на каждом шаге по времени будет неотрицательным. Обратим внимание, что ограничение (21) на шаг  $\tau$  зависит только от числа частиц и энергии системы (и величины шага  $h$ ). Оно является вполне удовлетворительным, так как определяемая из него величина шага по времени оказывается лишь в полтора раза меньше максимально допустимого шага  $\tau$  для случая, когда функция распределения близка к максвелловской (сравни формулы (21), (24)).

Анализ логарифмической схемы значительно упрощается, когда система приближается к стационарному состоянию. В этом случае вектор состояния  $\vec{F}^n$  можно представить в виде суммы  $\vec{F}^n = \vec{F}^n + \delta \vec{F}^n$ , где  $F_i^n \equiv f_{i-1/2}^n$ ,  $\delta F_i^n = f_{i-1/2}^n - f_{i-1/2}^n$  (для всех  $i$   $|\delta F_{i-1/2}^n| \ll F_i^n$ ) и провести разложение (I6) по  $\vec{F}^n$ , ограничиваясь линейными членами. В этом приближении адиянт энтропии равен  $\text{grad } S^n = \text{grad } S^n + \text{grad } \delta S^n$ ;  $\text{grad } \delta S^n = -C^2 \delta \vec{F}^n$ , где  $C$  - диагональная матрица с элементами на главной диагонали  $c_{ii} = (h \sqrt{\epsilon_{i-1/2}} / f_{i-1/2}^n)^{1/2}$ . С учетом того, что  $L^n \text{grad } S^n = 0$  алгоритм (I6) в линейном приближении записывается в виде:

$$\delta \vec{F}^{n+1} = \delta \vec{F}^n - \tau L^n C^2 \delta \vec{F}^n \quad (22)$$

Здесь  $L^n$  есть матрица  $L^n$ , при вычислении которой по фор-

муле (I7) положено  $\vec{F}^n = \vec{F}^n$ . После умножения (22) на матрицу  $C$  получим соотношение  $C \delta \vec{F}^{n+1} = C \delta \vec{F}^n - \tau (C L^n C) (C \delta \vec{F}^n)$ . Откуда легко находится отклонение системы от равновесного состояния в момент времени  $t^n$  при начальном отклонении  $\delta \vec{F}^0$ :

$$\delta \vec{F}^n = C^{-1} (E - \tau C L^n C)^n C \delta \vec{F}^0$$

Здесь  $E$  - единичная матрица. Так как матрица  $C L^n C$  также как и матрица  $L^n$ , неотрицательна, то для стремления  $\delta \vec{F}^n$  к нулю при  $n \rightarrow \infty$  необходимо, чтобы  $\tau$  удовлетворяло ограничению  $\tau < 2/\lambda_{\max}$ , где  $\lambda_{\max}$  - максимальное собственное значение матрицы  $C L^n C$ . Это ограничение на шаг по времени является условием устойчивости явной логарифмической схемы в случае, когда функция распределения близка к максвелловской.

Заметим, что проекции вектора  $C \delta \vec{F}^0$  на собственные вектора  $C^{-1} \vec{e}_1, C^{-1} \vec{e}_2$  матрицы  $C L^n C$  принадлежащим собственному значению  $\lambda = 0$ , в процессе итерирования остаются неизменными:  $(C \delta \vec{F}^n, C^{-1} \vec{e}_1) = (C \delta \vec{F}^0, C^{-1} \vec{e}_1)$ ,  $(C \delta \vec{F}^n, C^{-1} \vec{e}_2) = (C \delta \vec{F}^0, C^{-1} \vec{e}_2)$ , что казалось бы противоречит тому, что  $\delta \vec{F}^n \rightarrow 0$  при  $n \rightarrow \infty$ . Противоречия, однако, не возникает, поскольку  $(C \delta \vec{F}^0, C^{-1} \vec{e}_1) = (\delta \vec{F}^0, \vec{e}_1) = -(\vec{F}^0, \vec{e}_1) - (F^n, \vec{e}_1) = 0$  и, аналогично,  $(C \delta \vec{F}^0, C^{-1} \vec{e}_2) = 0$ .

Отличие энтропии в момент времени  $t^n$  от равновесного значения в принятом приближении является величиной второго порядка по  $\delta \vec{F}^n$ :

$$\delta S^n = -\frac{1}{2} h \sum_{i=1}^I \sqrt{\epsilon_{i-1/2}} (\delta f_{i-1/2}^n)^2 / f_{i-1/2}^n = -\frac{1}{2} (C \delta \vec{F}^n, C \delta \vec{F}^n)$$

Пользуясь этой формулой, а также выражением для  $\delta \vec{F}^{n+1}$  из (22), вычислим изменение энтропии:

$$\begin{aligned} \delta S^{n+1} - \delta S^n &= -\frac{1}{2} [(C \delta \vec{F}^{n+1}, C \delta \vec{F}^{n+1}) - (C \delta \vec{F}^n, C \delta \vec{F}^n)] = \\ &= \tau [(C \delta \vec{F}^n, C L^n C^2 \delta \vec{F}^n) - \frac{1}{2} \tau (C L^n C^2 \delta \vec{F}^n, C L^n C^2 \delta \vec{F}^n)] \geq \\ &\geq \tau (C \delta \vec{F}^n, C L^n C^2 \delta \vec{F}^n) \cdot (1 - \frac{1}{2} \tau \lambda_{\max}) \end{aligned}$$

Здесь при переходе к неравенству мы воспользовались тем, что  $(C L^n C^2 \delta \vec{F}^n, C L^n C^2 \delta \vec{F}^n) \leq \lambda_{\max} (C \delta \vec{F}^n, C L^n C^2 \delta \vec{F}^n)$ . Очевидно, что при  $\delta \vec{F}^n \neq 0$  возрастание энтропии  $\delta S^{n+1} - \delta S^n \geq 0$  будет происходить в общем случае при  $\tau \leq 2/\lambda_{\max}$ . Таким образом, нами показано, что необходимое условие устойчивости схе-



мы (10) в случае, когда система близка к равновесному состоянию является одновременно условием возрастания энтропии системы.

Приведем качественные соображения, позволяющие найти величину  $2/\lambda_{\max}$ , определяющую максимально допустимый шаг по времени  $\tau$ , когда функция распределения близка к максвелловской (подробное вычисление  $\lambda_{\max}$  дано в приложении, пункт 4). Ясно, что собственным вектором  $\delta \vec{F}$ , принадлежащим  $\lambda_{\max}$ , задается на разностной сетке быстро осциллирующая функция

$\delta f_{i-1/2}$ . Поэтому в уравнении (22) главную роль играет член содержащий вторую разностную производную функцию  $\delta f_{i-1/2}$  по  $\epsilon$ . Из этого следует, что в первом приближении искомое ограничение на шаг  $\tau$  то же самое, что и соответствующее ограничение для явной схемы, аппроксимирующей следующее уравнение второго порядка:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D(\epsilon) \frac{\partial^2 T}{\partial \epsilon^2}, \quad D(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon} \int_0^{\epsilon_0} f^n(\epsilon') g(\epsilon, \epsilon') d\epsilon' \quad (23)$$

Как хорошо известно, явная схема для уравнения (23) устойчива, если  $\tau < h^2 / (2 \max_{\epsilon} D(\epsilon))$ . При небольшом превышении этого значения развивается локальная (вблизи точки максимума функции  $D(\epsilon)$ ) неустойчивость, описываемая формулой:

$$\delta T(\epsilon_i, t^n) \sim \left(1 - 2 \frac{\tau}{\tau_{\max}}\right)^n (-1)^i e^{-\frac{(\epsilon_i - \epsilon^*)^2}{\ell^2}} \quad (24)$$

Здесь  $\epsilon^*$  точка, в которой функция  $D(\epsilon)$  принимает свое максимальное значение,  $\ell = (2D(\epsilon^*)/|D''(\epsilon^*)|)^{1/2} \sqrt{h}$  - характерный размер области неустойчивости,  $\tau_{\max} \equiv h^2 / (2 \max_{\epsilon} D(\epsilon))$ . Пользуясь тем, что  $f^n(\epsilon) = a e^{-\beta \epsilon}$ , после необходимых вычислений получим для логарифмической схемы ограничение на шаг по времени, когда система близка к состоянию равновесия:

$$\tau < 0,77 h^2 / \sqrt{NE} \quad (25)$$

и выражение описывающее схемную неустойчивость

$$\delta f_{i-1/2}^n \sim \left(1 - 2 \frac{\tau}{\tau_{\max}}\right)^n (-1)^i e^{-\frac{(\epsilon_{i-1/2} - \epsilon^*)^2}{\ell^2}} \quad (26)$$

Здесь  $\epsilon^* = 2,26 / \beta$ ,  $\ell = 1,1 \sqrt{h/\beta}$ ,  $\tau_{\max} = 0,77 h^2 / \sqrt{NE}$ . Формулы (25), (26) находятся в хорошем согласии с численным экспериментом.

В заключение этой части кратко поясним, как полученные выше результаты переносятся на квадратичную схему. Эта схема уже не может быть интерпретирована, как градиентный метод максимизации энтропии, но тем не менее возможна ее запись в виде аналогичном выражению (16) для логарифмической схемы:

$$\vec{F}^{n+1} = \vec{F}^n + \tau L^n U^n \quad (27)$$

где компоненты вектора  $U^n$  определяются равенствами:

$$U_1^n = -\gamma \sqrt{\epsilon_{1/2}} h,$$

$$U_i^n = -\left(\gamma + \sum_{j=2}^{i-1} (f_{i+j/2}^n - f_{i-j/2}^n) / f_i^n\right) \sqrt{\epsilon_{i-1/2}} h \quad \text{при } i=2, \dots, I$$

$\gamma$  - произвольная числовая константа.

Вектор состояния  $\vec{F}^n$  является стационарным решением (27) только тогда, когда  $\vec{U}^n = \alpha \vec{e}_1 + \beta \vec{e}_2$ . Откуда прямым вычислением показывается, что стационарное состояние должно описываться максвелловской функцией распределения, т.е. в этом случае  $\vec{F}^n = \vec{F}^*$ . Если  $\vec{F}^n \neq \vec{F}^*$ , то  $(\vec{U}^n, L^n \vec{U}^n) > 0$ .

Взамен (19) получаем теперь такое разложение энтропии в момент времени  $t^{n+1} = t^n + \tau$  по степеням  $\tau$ :

$$S^{n+1} = S^n + \tau (\text{grad } S^n, L^n \vec{U}^n) + \dots$$

Поскольку всегда  $(\text{grad } S^n, L^n \vec{U}^n) \geq (\vec{U}^n, L^n \vec{U}^n)$ , то также как и раньше при достаточно малом шаге по времени  $S^{n+1} - S^n \geq 0$ . При выполнении условия (II) допустимая величина шага, как и для логарифмической схемы, определяется формулами (20), (21).

Анализ квадратичной схемы вблизи стационарного состояния совпадает с приведенным выше анализом логарифмической схемы, т.к. в линейном приближении  $L^n \vec{U}^n = -\frac{1}{ch^2(\beta h/2)} L^n C^2 \delta \vec{F}^n$  и разложение (27) по  $\delta \vec{F}^n$  аналогично разложению (22). Квадратичная схема по сравнению с логарифмической обладает одним важным преимуществом: на ее основе легко строится удобная для практических расчетов неявная разностная схема.

### 3. Численный эксперимент

Целью настоящего численного эксперимента является установление взаимосвязи закона возрастания энтропии и устойчивости предложенных схем. Качественные соображения, касающиеся возникновения схемной неустойчивости вблизи максвелловской функции распределения, применимы и при рассмотрении неустойчивости на фоне любой гладкой функции распределения. Описываемая формулой (24) схемная неустойчивость развивается вблизи точки максимума коэффициента диффузии:

$$D(\varepsilon, t) = \frac{1}{\varepsilon} \int_0^{\varepsilon_0} f(\varepsilon', t) g(\varepsilon, \varepsilon') d\varepsilon'$$

значительно быстрее характерного времени изменения этого коэффициента. Применяя метод замороженных коэффициентов [8], находим ограничение на шаг по времени

$$\tau < \tau_{cr} = \frac{h^2}{2 \max D(\varepsilon, t)}, \quad (28)$$

при нарушении которого возникает схемная неустойчивость. Ограничение (28), по существу, совпадает с ограничением (20) на шаг по времени  $\tau$ , гарантирующим рост энтропии.

Расчеты проводились по логарифмической схеме на отрезке  $[0, \varepsilon_0]$  с  $\varepsilon_0 = 5$ . Пространственный шаг был выбран  $h = 0,025$ , а шаг времени  $\tau$  варьировался от  $0,7 h^2/\sqrt{NE}$  до  $0,8 h^2/\sqrt{NE}$ . В качестве начальной функции распределения была взята функция  $f_0(\varepsilon) = 0,716 (1 + \varepsilon)/(1 + \varepsilon^2)$ . Число частиц системы при этом равно  $N = 1,00$ , а энергия  $E = 0,96$ .

В начальный момент времени максимум  $D(\varepsilon, 0)$  достигается в точке  $\varepsilon^* = 1,21$ :  $\max D(\varepsilon, 0) = D(\varepsilon^*, 0) = 0,71 \sqrt{NE}$ , так, что величина критического шага по времени в (28) равна  $\tau_{cr} = 0,70 h^2/\sqrt{NE}$ . Счет проводился с шагом  $\tau = 0,75 h^2/\sqrt{NE}$ , что на 7% превышало значение  $\tau_{cr}$ . Следует сказать, что описанное развитие схемной неустойчивости имеет место при  $h \rightarrow 0$ . При выбранном же значении пространственного шага  $h$  картина носит более сложный характер. К моменту появления ряби на участ-

ке монотонного убывания функции распределения значение  $\tau_{cr}$  увеличивалось от  $0,7 h^2/\sqrt{NE}$  до  $0,72 h^2/\sqrt{NE}$ , а точка максимума коэффициента диффузии смещалась с  $\varepsilon^* = 1,21$  до  $\varepsilon^* = 1,36$ . Размер области локализации отличался от теоретического  $\mathcal{L} = [-2 D(\varepsilon^*, 0)/D'(\varepsilon^*)]^{1/2} = 0,21$  на величину, не превышающую шага сетки  $h = 0,025$ . Уменьшение энтропии началось с 288 итерации. Размах ряби на этой итерации составлял одну треть от величины фоновой функции распределения. На 315-ой итерации появились отрицательные значения функции распределения.

При шаге  $\tau = 0,7 h^2/\sqrt{NE}$  счет всегда был устойчив, а энтропия монотонно росла. За время  $t \sim 2 + 3$  функция распределения уже мало отличалась от максвелловской. В разные моменты времени ( $t = 0,6, 1$ ) мы прерывали этот устойчивый счет и, увеличивая шаг по времени, наблюдали возникновение схемной неустойчивости. Результаты были аналогичны результатам для начального момента времени.

При устойчивом счете величина относительного изменения функции распределения  $\mathcal{X}''$  была максимальна в начальный момент времени и равна  $\mathcal{X}'' = 0,065$  (в процессе счета величина  $\mathcal{X}''$ , уменьшаясь, стабилизировалась на значении 0,039, соответствующем максвелловской функции распределения).

Вычисление функции распределения по квадратичной схеме отличались от соответствующих вычислений по логарифмической схеме на величину  $10^{-4}$ .

ПРИЛОЖЕНИЕ

Докажем, что при шаге по времени

$$\tau < \tau_{\max} \equiv \frac{1}{2} \delta^n h^2 / \max_k \left( \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{k-1/2}}} \sum_{i=1}^{I-1} \frac{1}{2} (g_{ki} + g_{k-1,i}) f_i^n h \right)$$

энтропия системы при счете по логарифмической схеме возрастает:  $S^{n+1} \geq S^n$  (знак равенства возможен только, если  $f \equiv f^n$ ). Численный коэффициент  $\delta^n = (1 - \frac{1}{2} \chi^n) / (1 + 4 \chi^n)$  при  $\chi^n \leq 1$  \*).

Доказательство этого утверждения по сути довольно просто и связано с установлением нескольких неравенств.

1. При шаге по времени  $\tau < \tau_{\max}$  для величины максимального относительного изменения функции распределения во времени  $\delta^n = \max_k (|f_{k-1/2}^{n+1} - f_{k-1/2}^n| / f_{k-1/2}^n)$  справедлива оценка:  $\delta^n \leq 2 \chi^n / (1 + 2 \chi^n)$ , что означает, в частности, что  $\delta^n < 1$ .

Используя (13), получаем

$$\begin{aligned} |f_{i-1/2}^{n+1} - f_{i-1/2}^n| / f_{i-1/2}^n &= (\tau / \sqrt{\epsilon_{i-1/2}} f_{i-1/2}^n) \cdot |p_i^n - p_{i-1}^n| / h \leq \\ &\leq 2 \frac{\tau}{h^2} \max_k \left| \ln \frac{f_{k+1/2}^n}{f_{k-1/2}^n} \right| * \max_k \left[ \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{k-1/2}} f_{k-1/2}^n} \sum_{i=1}^{I-1} (f_k^n g_{ki} + f_{k-1}^n g_{k-1,i}) f_i^n h \right] \end{aligned}$$

Отсюда учитывая, что  $f_k^n \leq f_{k-1/2}^n / (1 - \frac{1}{2} \chi^n)$ ,  $f_{k-1}^n \leq f_{k-1/2}^n (1 - \frac{1}{2} \chi^n)$  и  $\max_k \left| \ln \frac{f_{k+1/2}^n}{f_{k-1/2}^n} \right| \leq \ln \frac{1 + \frac{1}{2} \chi^n}{1 - \frac{1}{2} \chi^n} < \chi^n (1 + \frac{1}{2} (\chi^n)^2)$  при  $\chi^n \leq 1$ , имеем

$$\begin{aligned} \delta^n &< 4 \frac{\tau}{h^2} \frac{\chi^n (1 + \frac{1}{2} (\chi^n)^2)}{1 - \frac{1}{2} \chi^n} \max_k \left( \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{k-1/2}}} \sum_{i=1}^{I-1} \frac{1}{2} (g_{ki} + g_{k-1,i}) f_i^n h \right) < \\ &< \frac{2 \chi^n (1 + \frac{1}{2} (\chi^n)^2)}{1 + 4 \chi^n} < \frac{2 \chi^n}{1 + 2 \chi^n}. \end{aligned}$$

2. При  $\delta^n < 1$  для изменения энтропии справедлива оценка  $S^{n+1} - S^n \geq \tau (\text{grad } S^n, L^n \text{grad } S^n) (1 - \frac{1+\delta^n}{2} \tau \lambda_{\max})$ .

\* Допустимые значения  $\chi^n$  лежат в интервале (0, 2), и лишь для упрощения формул мы считаем, что  $\chi^n \leq 1$ . При этом из определения  $\chi^n$  следует, что  $\frac{1}{2} \leq (f_{i+1/2}^n / f_{i-1/2}^n) \leq 3$ .

Здесь  $\lambda_{\max}^n$  - максимальное собственное значение матрицы  $C^n L^n C^n$ ;  $C^n$  - диагональная матрица, элементы на главной диагонали которой равны:  $C_{ii}^n = (\sqrt{\epsilon_{i-1/2}} h / f_{i-1/2}^n)^{1/2}$ .

Прежде всего заметим, что для функции  $\varphi(x) = \frac{(1+x) \ln(1+x) - x}{x^2}$  при  $x \in [-\delta, +\infty)$ , здесь  $\delta < 1$ , справедливо неравенство:  $0 \leq \varphi(x) \leq \frac{1}{2}(1+\delta)$ . Действительно,  $\varphi(x)$  является монотонно убывающей функцией на полупрямой  $[-1, +\infty)$ , принимающей значения от 1 в т.  $x = -1$  до 0 ( $\varphi(x) \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow +\infty$ ), и кроме того  $\varphi(-\delta) \leq \frac{1}{2}(1+\delta)$ . Обозначив за  $\chi_{i-1/2}^n = (f_{i-1/2}^{n+1} - f_{i-1/2}^n) / f_{i-1/2}^n$ , получим

$$\begin{aligned} S^{n+1} - S^n &= - \sum_{i=1}^I (f_{i-1/2}^{n+1} \ln f_{i-1/2}^{n+1} - f_{i-1/2}^n \ln f_{i-1/2}^n) \sqrt{\epsilon_{i-1/2}} h = \\ &= - \sum_{i=1}^I (f_{i-1/2}^{n+1} - f_{i-1/2}^n) (\ln f_{i-1/2}^n + 1) \sqrt{\epsilon_{i-1/2}} h - \sum_{i=1}^I f_{i-1/2}^n \varphi(\chi_{i-1/2}^n) * \\ &\quad * (\chi_{i-1/2}^n)^2 \sqrt{\epsilon_{i-1/2}} h \geq - \sum_{i=1}^I (f_{i-1/2}^{n+1} - f_{i-1/2}^n) (\ln f_{i-1/2}^n + 1) \sqrt{\epsilon_{i-1/2}} h - \\ &\quad - \frac{1}{2} (1+\delta) \sum_{i=1}^I (f_{i-1/2}^{n+1} - f_{i-1/2}^n)^2 \sqrt{\epsilon_{i-1/2}} h / f_{i-1/2}^n \end{aligned}$$

С использованием формулы (16) и обозначений для  $\text{grad } S^n$  и  $C^n$  эта оценка запишется в виде:

$$S^{n+1} - S^n \geq \tau (\text{grad } S^n, L^n \text{grad } S^n) - \frac{\tau^2}{2} (1+\delta)^2 (C^n L^n \text{grad } S^n, C^n L^n \text{grad } S^n)$$

Обозначая за  $\vec{\gamma} = (C^n)^{-1} \text{grad } S^n$ , имеем, что

$$\begin{aligned} (C^n L^n \text{grad } S^n, C^n L^n \text{grad } S^n) &= (C^n L^n C^n \vec{\gamma}, C^n L^n C^n \vec{\gamma}) \leq \\ &\leq \lambda_{\max}^n (\vec{\gamma}, C^n L^n C^n \vec{\gamma}) = \lambda_{\max}^n (\text{grad } S^n, L^n \text{grad } S^n). \end{aligned}$$

И, следовательно,

$$S^{n+1} - S^n \geq \tau (\text{grad } S^n, L^n \text{grad } S^n) (1 - \frac{1+\delta}{2} \tau \lambda_{\max}^n)$$

3. При шаге по времени  $\tau < \min(\tau_{max}, \frac{2}{(1+\delta^n)\lambda_{max}^n})$  энтропия системы не убывает:  $S^{n+1} \geq S^n$ .

При таком выборе  $\tau$  величина  $\delta^n < 1$  (см. пункт 1) и т.о. наше утверждение является следствием пункта 2.

4. Для максимального собственного значения матрицы  $C^n L^n C^n$  имеет место оценка

$$\lambda_{max}^n \leq \frac{4}{h^2} \max_i \left( \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{i-1/2}}} \sum_{i'=1}^I \frac{1}{2} (g_{i',i} + g_{i,i'}) f_{i'}^n h \right) \frac{1+2x^n}{1-\frac{1}{2}x^n}$$

Нетрудно видеть, что максимальное собственное значение  $\lambda_{max}^n$  матрицы  $C^n L^n C^n$  равно максимальному собственному значению матрицы  $(C^n)^2 L^n$ . Пусть  $\bar{x}$  собственный вектор матрицы  $(C^n)^2 L^n$  соответствующий собственному значению  $\lambda_{max}^n$ . Тогда  $\lambda_{max}^n \bar{x} = (C^n)^2 L^n \bar{x}$  или по координатам

$$\lambda_{max}^n x_i = (C_{ii}^n)^2 \sum_{i'=1}^I L_{ii'}^n x_{i'} = \frac{\sqrt{\epsilon_{i-1/2}} h}{f_{i-1/2}^n} \sum_{i'=1}^I L_{ii'}^n x_{i'}$$

Определяя вектор  $\bar{y}$  равенствами  $y_i = x_i / \sqrt{\epsilon_{i-1/2}}$  и пользуясь определением матричных элементов  $L_{ii'}^n$ , этим соотношениям можно придать следующую форму:

$$\lambda_{max}^n y_i = - \frac{1}{f_{i-1/2}^n \sqrt{\epsilon_{i-1/2}}} \frac{P_i(\bar{y}) - P_{i-1}(\bar{y})}{h}$$

где

$$P_i(\bar{y}) = \sum_{i'=1}^{I-1} \frac{y_{i+1} - y_i}{h} f_i^n f_{i'}^n g_{i,i'} h - \sum_{i'=1}^{I-1} \frac{y_{i+1} - y_i}{h} f_i^n f_{i'}^n g_{i,i'} h$$

Первую сумму в определении  $P_i(\bar{y})$  обозначим за  $P_{2i}(\bar{y})$ , а вторую - за  $P_{1i}(\bar{y})$ . Так как  $f_i^n / f_{i-1/2}^n \leq 1 / (1 - \frac{1}{2}x^n)$ ,

$$f_{i-1}^n / f_{i-1/2}^n \leq 1 / (1 - \frac{1}{2}x^n), \text{ то}$$

$$|P_{2i} - P_{2i-1}| \leq \frac{4}{h} \max_k |y_k| \left[ \sum_{i'=1}^{I-1} \frac{1}{2} (g_{i',i} + g_{i,i'}) f_{i'}^n h \right] \cdot \frac{f_{i-1/2}^n}{1 - \frac{1}{2}x^n}$$

Разность же  $|P_{2i} - P_{2i-1}|$  можно оценить следующим образом:

$$\begin{aligned} |P_{2i} - P_{2i-1}| &= | -(\epsilon_i^{1/2} - \epsilon_{i-1}^{1/2}) f_i^n \sum_{i'=1}^{I-1} (y_{i'+1} - y_{i'}) f_{i'}^n - (f_i^n - f_{i-1}^n) \sum_{i'=1}^{I-1} (y_{i'+1} - y_{i'}) f_{i'}^n g_{i,i'} | = \\ &= |(\epsilon_i^{1/2} - \epsilon_{i-1}^{1/2}) f_i^n (f_i^n y_i - f_{i-1}^n y_i) + (\epsilon_i^{1/2} - \epsilon_{i-1}^{1/2}) f_i^n \sum_{i'=i+1}^{I-1} y_{i'} (f_{i'} - f_{i-1}) - \\ &- (f_i^n - f_{i-1}^n) \sum_{i'=1}^{I-1} (y_{i'+1} - y_{i'}) f_{i'}^n g_{i,i'} | \leq \max_k |y_k| [(\epsilon_i^{1/2} - \epsilon_{i-1}^{1/2}) f_i^n \cdot \\ &\cdot (f_i^n + f_{i-1}^n) + (\epsilon_i^{1/2} - \epsilon_{i-1}^{1/2}) f_i^n \sum_{i'=i+1}^{I-1} |f_{i'}^n - f_{i-1}^n| + \\ &+ 2 |f_i^n - f_{i-1}^n| \sum_{i'=1}^{I-1} f_{i'}^n g_{i,i'} ] \end{aligned}$$

При  $I > \frac{2}{x^n}$  (в действительности число точек сетки  $I \gg \frac{2}{x^n}$ ) можно показать, что имеет неравенство  $f_i^n + f_{i-1}^n < 3x^n \sum_{i'=1}^{I-1} f_{i'}^n$ . Учитывая также, что

$$|f_i^n - f_{i-1}^n| \leq \frac{1}{2} x^n (f_i^n + f_{i-1}^n),$$

получим в итоге оценку для  $|P_{2i} - P_{2i-1}|$ :

$$\begin{aligned} |P_{2i} - P_{2i-1}| &\leq \max_k |y_k| \cdot (1 - \frac{1}{2}x^n)^{-2} f_{i-1/2}^n \cdot [(\epsilon_i^{1/2} - \epsilon_{i-1}^{1/2}) \cdot 3x^n \sum_{i'=1}^{I-1} f_{i'}^n + \\ &+ (\epsilon_i^{1/2} - \epsilon_{i-1}^{1/2}) x^n \sum_{i'=1}^{I-1} f_{i'}^n + 2x^n \cdot \sum_{i'=1}^{I-1} f_{i'}^n g_{i,i'}] \leq \\ &\leq \frac{8x^n f_{i-1/2}^n}{h(1 - \frac{1}{2}x^n)} \cdot \max_k |y_k| \cdot \sum_{i'=1}^{I-1} \frac{1}{2} (g_{i',i} + g_{i,i'}) f_{i'}^n h \end{aligned}$$

Следовательно, при всех  $i$

$$\lambda_{\max}^n |y_i| \leq \frac{1}{f_{i-\frac{1}{2}}^n \sqrt{\bar{\epsilon}_{i-\frac{1}{2}}}} (|P_{2i} - P_{2i-1}| + |P_{2i} - P_{2i-1}|) \leq$$

$$\leq \frac{4}{h^2} \max_k |y_k| \cdot \left[ \frac{1}{\sqrt{\bar{\epsilon}_{i-\frac{1}{2}}}} \sum_{i''=1}^{I-1} \frac{1}{2} (g_{i''} + g_{i-1, i''}) f_{i''}^n h \right] \cdot \frac{(1+2\chi^n)}{(1-\frac{1}{2}\chi^n)}$$

откуда и вытекает искомая оценка для  $\lambda_{\max}^n$ .

Подставляя полученную оценку для  $\lambda_{\max}^n$  в выражение  $2 \cdot (1+\delta^n)^{-1} (\lambda_{\max}^n)^{-1}$  и имея в виду, что  $\delta^n \leq 2\chi^n / (1+2\chi^n)$ , получаем

$$\frac{2}{(1+\delta^n) \lambda_{\max}^n} \geq \frac{2}{1+2\chi^n / (1+2\chi^n)} \cdot \frac{h^2}{4} \cdot \frac{1-\frac{1}{2}\chi^n}{1+2\chi^n} \times$$

$$\times \left[ \max_i \left( \frac{1}{\sqrt{\bar{\epsilon}_{i-\frac{1}{2}}}} \sum_{i''=1}^{I-1} \frac{1}{2} (g_{i''} + g_{i-1, i''}) f_{i''}^n h \right) \right] = \tau_{\max}^n$$

Теперь на основании утверждения пункта 3 легко сделать вывод, что при  $\tau < \tau_{\max}^n$  энтропия системы не убывает. Доказательство сформулированного вначале утверждения завершено.

В заключение приведем доказательство того, что

$$\frac{h^2}{2} / \max_i \left( \frac{1}{\sqrt{\bar{\epsilon}_{i-\frac{1}{2}}}} \sum_{i''=1}^{I-1} \frac{1}{2} (g_{i''} + g_{i-1, i''}) f_{i''}^n h \right) \geq \frac{h^2}{2\sqrt{NE}}$$

Для этого достаточно убедиться, что при всех  $i$

$$D_i = \frac{1}{\sqrt{\bar{\epsilon}_{i-\frac{1}{2}}}} \sum_{i''=1}^{I-1} \frac{1}{2} (g_{i''} + g_{i-1, i''}) f_{i''}^n h \leq \sqrt{NE}$$

для любой функции распределения  $f_i^n$  с данным числом час-

тиц  $N$  и энергией  $E$ . Переходя от сеточной функции  $f_i^n$  к функции  $f_{i-\frac{1}{2}}^n$ , после перегруппировки получаем

$$D_i = \frac{1}{\sqrt{\bar{\epsilon}_{i-\frac{1}{2}}}} \left[ \sum_{i''=1}^{i-1} \frac{1}{2} (\epsilon_{i''}^{3/2} + \epsilon_{i''}^{3/2}) f_{i''-\frac{1}{2}}^n h + \left( \frac{3}{4} \epsilon_{i-1}^{3/2} + \frac{1}{4} \epsilon_i^{3/2} \right) f_{i-\frac{1}{2}}^n h + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2} (\epsilon_{i-1}^{3/2} + \epsilon_i^{3/2}) \sum_{i''=i+1}^{I-1} f_{i''-\frac{1}{2}}^n h + \frac{1}{4} (\epsilon_{i-1}^{3/2} + \epsilon_i^{3/2}) f_{I-\frac{1}{2}}^n h \right]$$

Справедливы следующие алгебраические неравенства (приводим их без доказательств):

$$\frac{1}{2} (\epsilon_{i''-1}^{3/2} + \epsilon_{i''}^{3/2}) / \sqrt{\bar{\epsilon}_{i-\frac{1}{2}}} \leq \sqrt{\epsilon_{i''-\frac{1}{2}}} \sqrt{\bar{\epsilon}_{i''-\frac{1}{2}}}, \quad i'' \leq i-1, i''=2, 3, \dots$$

$$\frac{3}{4} (\epsilon_{i-1}^{3/2} + \frac{1}{4} \epsilon_i^{3/2}) / \sqrt{\bar{\epsilon}_{i-\frac{1}{2}}} \leq \sqrt{\epsilon_{i-\frac{1}{2}}} \sqrt{\bar{\epsilon}_{i-\frac{1}{2}}}, \quad i=1, 2, \dots$$

$$\frac{1}{2} (\epsilon_{i-1}^{3/2} + \epsilon_i^{3/2}) / \sqrt{\bar{\epsilon}_{i-\frac{1}{2}}} \leq \sqrt{\epsilon_{i+\frac{1}{2}}} \sqrt{\bar{\epsilon}_{i+\frac{1}{2}}}, \quad i=1, 2, \dots$$

Учитывая эти неравенства и пользуясь неравенством Коши-Буняковского получаем искомую оценку для  $D_i$ :

$$D_i \leq \sum_{i''=1}^{i-1} \sqrt{\epsilon_{i''-\frac{1}{2}}} \sqrt{\bar{\epsilon}_{i''-\frac{1}{2}}} f_{i''-\frac{1}{2}}^n h + \sqrt{\bar{\epsilon}_{i-\frac{1}{2}}} \sqrt{\epsilon_{i-\frac{1}{2}}} f_{i-\frac{1}{2}}^n h +$$

$$+ \sum_{i''=i+1}^I \sqrt{\epsilon_{i''-\frac{1}{2}}} \sqrt{\bar{\epsilon}_{i''-\frac{1}{2}}} f_{i''-\frac{1}{2}}^n h = \sum_{i''=1}^I f_{i''-\frac{1}{2}}^n \sqrt{\epsilon_{i''-\frac{1}{2}}} \sqrt{\bar{\epsilon}_{i''-\frac{1}{2}}} h \leq$$

$$\leq \left( \sum_{i''=1}^I f_{i''-\frac{1}{2}}^n \epsilon_{i''-\frac{1}{2}} \bar{\epsilon}_{i''-\frac{1}{2}} h \right)^{1/2} \left( \sum_{i''=1}^I f_{i''-\frac{1}{2}}^n \bar{\epsilon}_{i''-\frac{1}{2}} h \right)^{1/2} = \sqrt{NE}.$$

## Л и т е р а т у р а

1. Самарский А.А., Попов Ю.П. Разностные схемы газовой динамики, М. Наука, 1975.
2. Бобылев А.В., Чуянов В.А. О численном решении кинетического уравнения Ландау. - Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1976, т.16, с.407.
3. Потапенко И.Ф., Чуянов В.А. Полностью консервативная разностная схема для двумерного уравнения Ландау. - Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1980, т.20, с.513.
4. *Volosov V.I., Pekker M.S. Longitudinal confinement in a centrifugal trap. - Nucl. Fus., 1981, v. 21, N 10, p. 1275.*
5. Бобылев А.В., Потапенко И.Ф., Чуянов В.А. Законы сохранения и полностью консервативные разностные схемы для кинетического уравнения Ландау (Фоккера-Планка), - ДАН, 1980, т.255 с.1348.
6. Пеккер М.С., Худик В.Н. Консервативные разностные схемы для уравнения Фоккера-Планка. Новосибирск, 1982, с.18. (Препринт ИЯФ 82-109).
7. Ландау Л.Д. Кинетическое уравнение в случае кулоновского столкновения. В кн.: Л.Д.Ландау. Собрания трудов, М., Наука, 1969, с.199.
8. Годунов С.К., Рябенский В.С. Разностные схемы. М., Наука, 1973, стр.240.

Ю.А.Березин, М.С.Пеккер, В.Н.Худик

КОНСЕРВАТИВНЫЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ  
ФОККЕРА-ПЛАНКА, НЕ НАРУШАЮЩИЕ ЗАКОНА ВОЗРАСТАНИЯ ЭНТРОПИИ

Препринт  
№ 84-96

Работа поступила - 19 июня 1984 г.

---

Ответственный за выпуск - С.Г.Попов  
Подписано к печати 5.07-1984 г. МН 04422  
Формат бумаги 60x90 1/16 Усл.1,8 печ.л., 1,5 учетно-изд.л.  
Тираж 290 экз. Бесплатно. Заказ № 96.

---

Ротапринт ИЯФ СО АН СССР, г.Новосибирск, 90