01

Симметрия нелинейной матрицы столкновительного оператора и новые перспективы в моментном методе решения уравнения Больцмана

© А.Я. Эндер, И.А. Эндер

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия
Санкт-Петербургский государственный университет,
199034 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 14 января 1999 г.)

Традиционно в кинетической теории моментный метод используется для расчета транспортных коэффициентов. Его применение к решению более сложных задач наталкивается на огромные трудности, связанные с вычислением матричных элементов от столкновительного оператора. Соответствующих формул при больших значениях индексов или нет, или они очень громоздки. Из самых общих принципов получены соотношения между матричными элементами, которые могут быть использованы как простые рекуррентные соотношения для вычисления всех нелинейных и линейных неизотропных матричных элементов по заданным линейным изотропным. Разработаны эффективные программы, реализующие этот алгоритм. Продемонстрирована возможность расчета функции распределения до 8–10 тепловых скоростей. Полученные результаты открывают перспективы решения многих актуальных задач кинетической теории.

1. В ранних классических работах метод разложения функции распределения (ФР) по ортогональным полиномам применялся для расчета первых нескольких линейных моментов, необходимых для задач теории переноса [1]. Барнетт [2] и Гред [3] сформировали основные принципы нелинейного моментного метода. Однако далеко продвинуться в этом направлении не удалось из-за большой сложности в вычислении матричных элементов (МЭ) от интеграла столкновений.

В моментном методе решения уравнения Больцмана ФР разлагается в ряд по полиномам Эрмита

$$f(\mathbf{v},\mathbf{r},t)=M(\mathbf{v})\sum_{i=0}^{\infty}C_i(\mathbf{r},t)H_i(\mathbf{v}),$$

$$H_{r,l,m}(\mathbf{v})=S^r_{l+1/2}(v^2/\tilde{T}_0)Y_{l,m}(\theta,\varphi). \tag{1}$$

Здесь $M(\mathbf{v})$ — максвеллиан, $S^r_{l+1/2}(v^2/\tilde{T}_0)$ — полиномы Сонина (Лагерра), $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ — сферические гармоники. Система моментных уравнений имеет вид

$$DC_p/Dt=\sum_{i,j=0}^{\infty}K^p_{i,j}C_iC_j. \tag{2}$$

Оператор D/Dt соответствует субстанциональной производной в левой части уравнения Больцмана и хорошо известен. В изотропном по скоростям случае разложение ФР (1) ведется только по полиномам Сонина. При этом матричный элемент $K^n_{k,m}$ представляет собой проекцию на полином Сонина с номером n интеграла столкновений от полиномов Сонина k и m.

При вычислении на ЭВМ ряд (1) всегда приходится обрезать до некоторого конечного N. Достижением авторов [4] является то, что они впервые в изотропном случае для "псевдостепенных потенциалов" сумели просчитать все матричные элементы (МЭ) вплоть до $N=13$. Формула для МЭ в [4] содержит шесть вложенных сумм, что ограничивает возможность дальнейшего увеличения N. В нашей работе [5] с использованием α-представления [6,7] получены формулы для расчета МЭ, справедливые для любых степенных потенциалов, и число суммирований уменьшилось до четырех. Показано, что с гарантированной точностью можно считать до $N=25$–30.

Переход к α-представлению соответствует разложению ФР по максвелловским распределениям с разными температурами $(\alpha=1/\tilde{T})$

$$f(v,t)=\int_0^{\infty}M(v,\tilde{T})\varphi(\tilde{T},t)d\tilde{T}. \tag{3}$$

Здесь $\varphi(\tilde{T},t)$ — ФР в α-пространстве. Ранее нами была получена замкнутая форма уравнения Больцмана в α- и $\alpha-u$-представлениях. В $\alpha-u$-пространстве разложение ведется по максвеллианам с разными температурами и с разными сдвиговыми скоростями. Существенным для дальнейшего оказалось очень простое представление в α- и $\alpha-u$-пространствах полиномов Сонина и полиномов Эрмита соответственно. Ортогональной с максвелловским весом системе полиномов Сонина $S^r_{1/2}$ соответствует биортогональная система функций s_R и s_L в α-пространстве

$$s^r_R(\tilde{T},\tilde{T}_*)=(\tilde{T}_*)^r\delta^{(r)}(\tilde{T}-\tilde{T}_*)/r!$$

$$s^r_L=(1-\tilde{T}/\tilde{T}_*)^r. \tag{4}$$

Представлению (1) в изотропном случае соответствует ФР $\varphi(\tilde{T})$ в виде

$$\varphi(\tilde{T}, t) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n(t) s_R^n(\tilde{T}, \tilde{T}_0),$$

$$C_n(t) = \int_0^{\infty} \varphi(\tilde{T}, t) s_L^n(\tilde{T}, t) d\tilde{T}. \qquad (5)$$

2. Рассмотрим простой пример. Выберем в качестве начальной ФР максвелловское распределение с температурой T_0. Очевидно, что независимо от выбора базисных функций интеграл столкновений от такой ФР равен нулю. Если, как обычно, разложить эту функцию по полиномам Сонина около той же температуры T_0, то из равенства нулю интеграла столкновений вытекает единственное условие: $K^0_{0,0} = 0$. Очевидно, что переход к другому базису, т.е. переразложение этой же ФР по полиномам Сонина около другой температуры, не может привести к отличию интеграла столкновений от нуля. В работе [7] показано, что такое переразложение приводит к следующим связям между матричными элементами:

$$\sum_{k=0}^{m} K^n_{k,m-k} = 0, \quad n, m = 0, \dots, \infty. \qquad (6)$$

Развивая эту идею, можно утверждать, что не только для максвелловской, но и для произвольной ФР интеграл столкновений не зависит от выбора температуры весового максвеллиана. Посмотрим, что из этого следует для изотропного уравнения Больцмана. Разложим ФР в двух базисах с температурами T_0 и T_1

$$\varphi(T, t) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k^0(t) s_R^k(T, T_0) = \sum_{r=0}^{\infty} C_r^1(t) s_R^r(T, T_1). \qquad (7)$$

Бесконечномерные векторы $\mathbf{C}^0$ и $\mathbf{C}^1$ связаны простым соотношением

$$C_r^1 = \sum_{k=0}^{\infty} d_{r,k}(T_1, T_0) C_k^0, \qquad (8)$$

где элементы матрицы перехода из одного в другой базис $D(T_1, T_0)$ легко определяются с использованием (4), (5) и имеют очень простой вид

$$d_{r,k}(T_1, T_0) = \begin{cases} \binom{r}{k} (T_1 - T_0)^{r-k} T_0^k / T_1^r, & r \geq k, \\ 0, & r < k. \end{cases} \qquad (9)$$

Сравнивая вид интеграла столкновений в двух базисах, из условия инвариантности интеграла столкновений относительно выбора базиса можно получить связь МЭ в базисах T_1 и T_0

$$K^r_{r_1,r_2}(T_1) = \sum_{k=0}^{r} d_{r,k}(T_1, T_0)$$

$$\times \sum_{k_1=r_1, k_2=r_2}^{\infty} K^k_{k_1,k_2}(T_0) d_{k_1,r_1}(T_0, T_1) d_{k_2,r_2}(T_0, T_1). \qquad (10)$$

Продифференцируем (10) по T_1 и положим $T_1 = T_0$. Учтем при этом, что при $T_1 = T_0$ оператор $\hat{D}$ переходит в единичный оператор $\hat{E}$, т.к. $d_{r,k}(T_0, T_0) = \delta_{r,k}$. При дифференцировании по T_1 в парвой части (10) необходимо вычислить производные только от оператора $\hat{D}$. Из (9) очевидно, что производная от $d_{r,k}(T_1, T_0)$ при $T_1 = T_0$ отлична от нуля только, если $r = k + 1$ или $r = k$. В результате после ряда преобразований получаем основное соотношение, связывающее между собой МЭ,

$$\left(T \frac{d}{dT} - R\right) K^r_{r_1,r_2}(T) = r K^{r-1}_{r_1,r_2}(T)$$

$$- (r_1 + 1) K^r_{r_1+1,r_2}(T) - (r_2 + 1) K^r_{r_1,r_2+1}(T), \qquad (11)$$

$$(R = r_1 + r_2 - r). \qquad (12)$$

Для степенных потенциалов ($V \sim 1/r^\kappa$) МЭ $K^r_{r_1,r_2}$ зависят от температуры базиса вполне определенным образом, а именно $K^r_{r_1,r_2}(T) \sim T^\mu$, где $\mu = (\kappa - 4)/(2\kappa)$ [5]. Соотношение (11) теперь принимает вид

$$(\mu - R) K^r_{r_1,r_2} = r K^{r-1}_{r_1,r_2} - (r_1 + 1) K^r_{r_1+1,r_2}$$

$$- (r_2 + 1) K^r_{r_1,r_2+1}. \qquad (13)$$

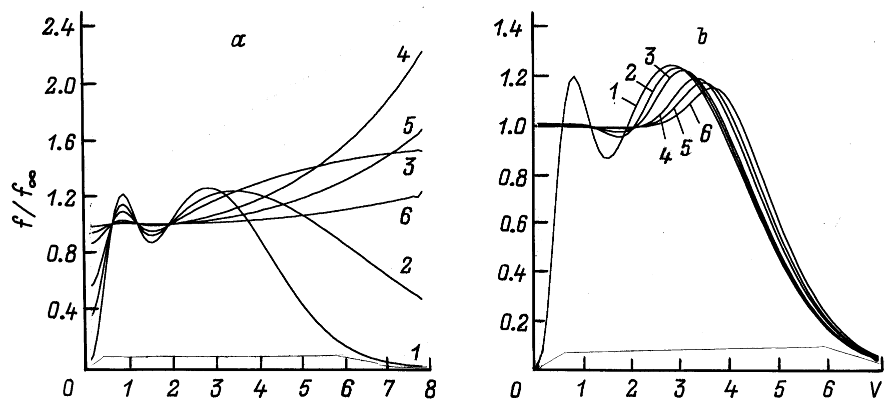
Равенства (13) можно использовать как рекуррентные для вычисления МЭ. Можно показать, что для определения нелинейных МЭ достаточно задания линейных элементов только одного из двух видов $K^r_{r_1,0}$ или K^r_{0,r_2}. При этом одна половина линейных элементов определяется через другую. Для замыкания рекуррентной процедуры были получены также простые формулы для вычисления линейных МЭ.

Использование рекуррентной процедуры позволило провести расчеты всех нелинейных МЭ до $N = 128$ примерно за полчаса на PC-486. Аналогичные расчеты по шестисуммной [4] и четырехсуммной [5] формулам потребовали бы $9 \cdot 10^4$ лет и 10 лет соответственно.

Результаты расчетов ФР по моментной системе (2) с использованием рекуррентных формул (13) сравнивались с точным BKW-решением уравнения Больцмана для максвелловских молекул. При $N = 128$ прекрасное совпадение наблюдалось вплоть до 12 тепловых скоростей. Для других случаев при $N = 128$ максимальная скорость, до которой отрезок ряда (1) хорошо описывает ФР, достигала 8–10 тепловых скоростей. Всегда с ростом числа моментов удавалось выявить поведение хвостов ФР, продвигаясь при этом с ростом N все дальше в область больших скоростей. На рисунке представлена для модели твердых шаров (a) и кулоновского взаимодействия частиц (b) относительная ФР f/f_∞ (f_∞ — равновесный максвеллиан) с начальной суммой двух *BKW*-мод

$$f(v, 0) = a_1 M(T_1, v)\big(1 + d_1 S^1_{1/2}(mv^2/2kT_1)\big)$$

$$+ a_2 M(T_2, v)\big(1 + d_2 S^1_{1/2}(mv^2/2kT_2)\big),$$



Решение нелинейного уравнения Больцмана с начальной суммой двух BKW-мод: *a* — для модели твердых шаров, *b* — для модели кулоновского взаимодействия; *1–6* — моменты времени $t/\tau^* = 0, 1, 2, 5, 7$ и 10 (τ^* — характерное время релаксации).

при этом полагалось $a_1 = a_2 = 0.5$, $T_1 = 1/3$, $T_2 = 8/9$ и $d_1 = 1/9$, $d_2 = 5/18$.

3. В отличие от изотропного уравнения Больцмана в неизотропном случае общих формул для вычисления нелинейных МЭ не существует (за исключением максвелловских молекул). В осесимметричном случае разложение ФР проводится по полиномам Эрмита $H_{r,l}$, где

$$H_{r,l} = c^l P_l(\cos\theta) S^r_{l+1/2}(c^2), \tag{14}$$

$$c^2 = \frac{m}{2kT_0}\left(v_x^2 + v_y^2 + (v_z - u_0)^2\right), \tag{15}$$

которые ортогональны с максвелловским весом $M(c, T_0) = \left(m/(2kT_0\pi)\right)^{3/2}\exp(-c^2)\big)$.

Связи между МЭ $K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,l_2}$ находятся из инвариантности интеграла столкновений при изменении скорости u_0 и температуры T_0 базисных функций

$$\frac{l}{2l-1}K^{r,l-1}_{r_1,l_1,r_2,l_2} - \frac{(l+1)r}{2l+3}K^{r-1,l+1}_{r_1,l_1,r_2,l_2} - \frac{(l_1+1)}{2l_1+1}K^{r,l}_{r_1,l_1+1,r_2,l_2}$$
$$+ \frac{l_1(r_1+1)}{2l_1+1}K^{r,l}_{r_1+1,l_1-1,r_2,l_2} - \frac{(l_2+1)}{2l_2+1}K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,l_2+1}$$
$$+ \frac{l_2(r_2+1)}{2l_2+1}K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2+1,l_2-1} = 0, \tag{16}$$

$$T\frac{d}{dT}K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,l_2}(T) = (R + L/2)K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,l_2}(T)$$
$$+ rK^{r-1,l}_{r_1,l_1,r_2,l_2}(T) - (r_1+1)K^{r,l}_{r_1+1,l_1,r_2,l_2}(T)$$
$$- (r_2+1)K^{r,l}_{r_2+1,l_2,r_1,l_1}(T). \tag{17}$$

$$R = r_1 + r_2 - r, \quad L = l_1 + l_2 - l. \tag{18}$$

При выводе этих соотношений были использованы результаты работы [8]. Полученные соотношения справедливы и в том случае, когда в системе имеется выделенное направление. Это могут быть, например, частицы, находящиеся в исключительно сильном магнитном поле (порядка 10^5 T), при этом частицы становятся несимметричными и ориентированными вдоль магнитного поля.

В стандартной кинетической теории (при отсутствии выделенного направления) пространство изотропно, и для линейных МЭ справедлива теорема Хека (см., например, [9]), состоящая в том, что МЭ $K^{r_1,l}_{r_1,l_1,0,0}$ могут быть отличными от нуля только, если $l_1 = l$. Используя рекуррентные соотношения (16)–(18), можно показать, что для нелинейных МЭ справедлива обобщенная теорема Хека: матричные элементы $K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,l_2}$ могут отличаться от нуля только, если

$$|l_1 - l_2| \le l \le l_1 + l_2 \tag{19}$$

и четность l совпадает с четностью $l_1 + l_2$. Ранее в работе [10] эта теорема была доказана другим способом без применения рекуррентных соотношений.

Следующим важным новым фактом в случае неориентированных частиц, вытекающим из (16)–(18), является связь между линейными неизотропными и линейными изотропными МЭ. Было показано, что если известны линейные изотропные МЭ, то все остальные МЭ однозначно определяются через них. В тех немногих частных случаях, когда существовали явные формулы [8,11], результаты наших расчетов совпали с известными.

В общем трехмерном случае в полиномы Эрмита входят сферические гармоники $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$. В данном случае появляется возможность дополнительных изменений базиса — это поворот системы отсчета вокруг оси z, т. е. переход $\varphi \to \varphi + \omega$, и отклонение оси z от первоначального направления, т. е. $\theta \to \theta + \psi$. Были выведены соотношения, которые получаются из инвариантности интеграла столкновений относительно таких изменений базиса. При отсутствии выделенного направления в пространстве таким рекуррентным соотношениям удовлетворяют известные коэффициенты Клебша–Гордона. Отсюда следует, что МЭ с индексами $m \ne 0$ связаны с осесимметричными МЭ через эти коэффициенты. Этот факт был известен ранее (см., например, [10]). Отметим, что приниципиально новые результаты получаются для несимметричных ориентированных частиц.

Таким образом, показано, что из единых принципов в стандартной кинетической теории можно построить иерархию простых рекуррентных соотношений и найти все МЭ, если известны линейные изотропные МЭ одного типа. Созданы программы, реализующие эти алгоритмы. Полученные результаты открывают возможности для решения ряда нерешенных задач кинетической теории газов и для уточнения уже имеющихся решений. К таким задачам относятся, например, 1) описание процессов переноса при $Kn \sim 1$ как в газах, так и в сильно ионизованной плазме, создание теории переноса для несимметричных ориентированных частиц в сильном магнитном поле; 2) кинетическое описание структуры слабых ударных волн и нестационарных процессов их взаимодействия; 3) исследование функции распределения в области больших скоростей для описания физико-химических процессов.

Работа выполнена частично при поддержке РФФИ (проект № 97-02-18080) и частично при поддержке Федеральной целевой программы "Интеграция" (программа № 326.53).

Список литературы

[1] *Чепмен С., Каулинг Т.* Математическая теория неоднородных газов. М.: ИЛ, 1960.
[2] *Burnett D.* // Proc. London Math. Soc. 1935. Vol. 40. P. 389.
[3] *Grad H.* // Communs. Pure and Appl. Math. 1940. P. 331.
[4] *Turchetti G, Paolilli M.* // Phys. Lett. 1982. Vol. 90 A. N 3. P. 123–126.
[5] *Эндер А.Я., Эндер И.А.* // ЖТФ. 1994. Т. 64. Вып. 10. С. 38–53.
[6] *Эндер И.А., Эндер А.Я.* // ДАН СССР. 1970. Т. 193. № 1. С. 61–64.
[7] *Колышкин И.Н., Эндер А.Я., Эндер И.А.* // ЖВМиМФ. 1988. Т. 28. № 6. С. 901–916.
[8] *Эндер И.А., Эндер А.Я.* // Физическая кинетика. Из-во СПбГУ, 1983. С. 197–215.
[9] *Вальдман Л.* Термодинамика газов. М., 1970. С. 169–414.
[10] *Веденяпин В.В.* Препринт ИПМ АН СССР. М., 1981. № 59. 15 с.
[11] *Ферцигер Дж., Капер Г.* Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Мир, 1976.