01;03

Обобщение теоремы Хеке для нелинейного больцмановского интеграла столкновений в осесимметричном случае

© А.Я. Эндер,[1] И.А. Эндер[2]

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

(Поступило в Редакцию 16 июля 2002 г.)

Исследуются свойства нелинейного интеграла столкновений уравнения Больцмана. Используются разложения по сферическим полиномам Эрмита. В работе [1] показано, что нелинейные матричные элементы столкновительного оператора связаны простыми соотношениями, причем эти связи справедливы для произвольных сечений взаимодействия частиц. В данной работе проводится изучение структуры столкновительного оператора и свойств матричных элементов, когда потенциал взаимодействия сферически симметричен. В этом случае линейный больцмановский оператор удовлетворяет теореме Хеке. С помощью выведенных рекуррентных соотношений доказывается обобщенная теорема Хеке, из которой следует обращение в нуль очень многих нелинейных матричных элементов. Показано, что обобщенная теорема Хеке является следствием обычной теоремы Хеке.

Введение

Работа посвящена исследованию структуры столкновительного оператора с использованием метода полиномиальных разложений. В этом методе интеграл столкновений переходит в некоторую матрицу взаимодействия. Как было показано в работах [1–3], между нелинейными матричными элементами (МЭ) такой матрицы существует множество соотношений, эти соотношения выполняются всегда независимо от потенциала взаимодействия частиц. Применение этих соотношений существенно упрощает вычисление МЭ при больших значениях индексов.

В качестве базисных функций, по которым проводится разложение функции распределения (ФР) в уравнении Больцмана, выбираются сферические полиномы Эрмита, представляющие собой произведение полиномов Сонина (Лагерра) и сферических гармоник. Уравнение Больцмана заменяется эквивалентной системой моментных уравнений для коэффициентов.

Основной сложностью, сдерживающей развитие такого нелинейного моментного метода, является расчет МЭ при больших значениях индексов. В работах [2,3], исходя из свойства инвариантности интеграла столкновений по отношению к выбору базисных функций, построены рекуррентные соотношения для МЭ в изотропном случае. Там показано, что с помощью таких соотношений можно построить ФР вплоть до 8–10 тепловых скоростей с „почти“ аналитической точностью. В работе [1] построены аналогичные реккурентные соотношения для МЭ, соответствующих осесимметричной по скоростям ФР. Эти связи позволяют выразить любой нелинейный МЭ с помощью небольшого числа математических операций через набор линейных МЭ как изотропных, так и неизотропных. Как уже отмечалось, полученные связи справедливы независимо от модели взаимодействия частиц, т.е. они выполняются и в том случае, когда в системе имеется выделенное направление, например, для частиц в очень сильном магнитном или электрическом поле. Такие частицы ориентируются вдоль поля и становятся несимметричными.

В настоящей работе проводится изучение структуры столкновительного оператора и свойств МЭ для неориентированных частиц, когда потенциал взаимодействия не произволен, а сферически симметричен. В этом случае сечение взаимодействия зависит только от модуля скорости и угла рассеяния. Именно такие потенциалы в основном рассматриваются в стандартной кинетической теории газов.

В разделе 1 описываются полиномиальные разложения ФР, приводится общий вид моментной системы в осесимметричном по скоростям случае и выведенные в [1] рекуррентные связи для МЭ. В этом же разделе анализируются результаты Хеке [4,5] для линейного больцмановского оператора.

В разделе 2 приведено простое доказательство обобщенной теоремы Хеке для нелинейного осесимметричного случая с использованием рекуррентных связей для МЭ, причем становится очевидным, что обобщенная теорема Хеке является следствием теоремы Хеке для линейных МЭ.

В разделе 3 рассматривается предложенное Кумаром [6] представление нелинейного интеграла столкновений, основанное на преобразованиях Талми. Показано, как, используя результаты Кумара, можно доказать обобщенную теорему Хеке.

1. Полиномиальное разложение для осесимметричного уравнения Больцмана и связи между матричными элементами интеграла столкновений

Полиномиальные разложения широко используются в кинетической теории газов. Для линеаризованного уравнения Больцмана такое разложение лежит в основе известного метода Чепмена–Энскога [7]. В нелинейном случае этот метод получил развитие в работах Барнетта [8,9] и Греда [10]. Как утверждается в [6], наиболее экономичным является предложенное Барнеттом разложение по функциям, которые можно называть сферическими полиномами Эрмита.

$$H_{r,l,m} = S^{(r)}_{l+1/2} c^l Y^i_{lm},$$

где $S^{(r)}_{l+1/2}$ — полиномы Сонина (Лагерра); $Y^i_{lm}(\theta, \varphi)$ $(i = 0, 1)$ — это ненормированные вещественные сферические гармоники.

Они определяются следующим образом:

$$Y^0_{lm}(\theta, \varphi) = P^m_l(\cos\theta)\cos m\varphi \quad (m = 0, 1, \dots, l),$$

$$Y^{-1}_{lm}(\theta, \varphi) = P^m_l(\cos\theta)\sin m\varphi \quad (m = 0, 1, \dots, l).$$

Здесь $P^m_l(x)$ — это присоединенные полиномы Лежандра. В осесимметричном случае $(m = 0)$ сферические гармоники переходят в полиномы Лежандра P_l и разложение проводится по функциям $H_{r,l} = S^{(r)}_{l+1/2} c^l P_l$ с максвелловским весом

$$f(\mathbf{v}, x, t) = M(c) \sum C_{r,l}(x, t) H_{r,l}(\mathbf{c}),$$

$$M(c) = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-c^2}, \quad \mathbf{c} = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}}(\mathbf{v} - \mathbf{u}).$$

Нелинейное уравнение Больцмана при этом заменяется системой уравнений для коэффициентов разложения $C_{r,l}$

$$DC_{r,l}/Dt = \sum K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,l_2} C_{r_1,l_1} C_{r_2,l_2}. \tag{1}$$

Здесь D/Dt — дифференциальный оператор, представляющий собой левые части моментных уравнений, которые подробно рассмотрены, например, в [9,11].

Осесимметричный нелинейный МЭ имеет вид

$$K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,l_2} = \frac{1}{g_{r,l}} \int H_{r,l} \hat{I}(MH_{r_1,l_1}, MH_{r_2,l_2}) d^3v.$$

$$g_{r,l} = \frac{(2r + 2l + 1)!!}{(2r)!! 2^l (2l + 1)}.$$

В основе связей между МЭ лежит инвариантность интеграла столкновений по отношению к выбору базисных функций. Если в изотропном случае [2,3] используется инвариантность относительно температуры T весового максвеллиана, то в осесимметричном используется инвариантность как относительно T, так и относительно средней скорости u [1]. Матрица билинейного столкновительного оператора преобразуется по формуле

$$\hat{\hat{K}}' = \hat{D}\hat{\hat{K}}(\hat{D}^{-1}, \hat{D}^{-1}). \tag{2}$$

Матрицу перехода D от одного базиса к другому удается построить с использованием α–u-представления [12].

После дифференцирования (2) по T и u находятся два типа связей между МЭ

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

$$\begin{aligned}
T\frac{d}{dT} K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,l_2}(T) &= (R + L/2) K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,l_2}(T) \\
&+ rK^{r-1,l}_{r_1,l_1,r_2,l_2}(T) - (r_1+1) K^{r,l}_{r_1+1,l_1,r_2,l_2}(T) \\
&- (r_2+1) K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2+1,l_2}(T),
\end{aligned} \tag{4}$$

$R = r_1 + r_2 - r$, $L = l_1 + l_2 - l$, которые в случае степенных потенциалов представляют собой простые алгебраические соотношения. Их достаточно для того, чтобы с помощью рекуррентной процедуры построить все нелинейные МЭ по заданным линейным МЭ одного типа: или $K^{r,l}_{r_1,l,0,0}$, или $K^{r,l}_{0,0,r_1,l_1}$.

Если в системе имеет выделенное направление, например, при наличии сильного электрического или магнитного поля, то частицы ориентируются вдоль поля. Кинетическое уравнение для таких несимметричных частиц рассмотрено в [13]. Там же доказана H-теорема при наличии выделенного направления в пространстве. Такие задачи решаются значительно сложнее, чем те, которые рассматриваются в обычной кинетической теории, где нет выделенного направления и частицы считаются симметричными.

При наличии выделенного направления сечение рассеяния зависит от модуля относительной скорости g и углов $(\widehat{\mathbf{g}_1, \mathbf{z}})$ и $(\widehat{\mathbf{g}_2, \mathbf{z}})$, где $\mathbf{z}$ — вектор, направленный вдоль выделенного направления, $\mathbf{g}_1$ и $\mathbf{g}_2$ — векторы относительной скорости до и после столкновения. В стандратной кинетической теории сечение рассеяния σ зависит только от модуля относительной скорости и угла между векторами $\mathbf{g}_1$ и $\mathbf{g}_2$, т. е.

$$\sigma = \sigma(g, \Theta). \tag{5}$$

При развитии кинетической теории газов многие результаты были получены для линейного и линеаризованного интеграла столкновений. Еще Гильберт [14] предложил итерационную схему решения уравнения Больцмана. При этом ФР представлялась в виде

$$f(\mathbf{v},\mathbf{r},t) = M(c)\big(1+\varphi(\mathbf{c})\big)$$

и одно уравнение с нелинейным столкновительным оператором сводилось к системе линейных интегральных уравнений. На примере твердых шаров Гильберт показал, что все эти уравнения представляют собой линейные интегральные уравнения Фредгольма 2-го рода с симметричным и ортогонально-инвариантным ядром $K(\mathbf{c},\mathbf{c}_1)$. Ортогональная инвариантность определяется как инвариантность относительно поворота координатных осей, т.е. зависимость ядра только от c^2, c_1^2 и скалярного произведения $(\mathbf{c},\mathbf{c}_1)$.

После этого Хеке [4,5] рассмотрел линейное интегральное уравнение с ортогонально-инвариантным ядром и доказал, что такой оператор не выводит любую функцию вида $\psi(c)Y_{l,m}$ из подпространства, связанного с $Y_{l,m}$, т.е.

$$\hat{L}\big(\psi(c)Y_{l,m}\big) = Y_{l,m}\hat{L}^l\big[\psi(c)\big]. \qquad (6)$$

Оператор $\hat{L}^l$ не зависит от индекса m и функция $\hat{L}^l[\psi(c)]$ изотропна по скоростям.

В [5] Хеке применил свою теорему к линейному больцмановскому оператору для модели твердых шаров. Остановимся на этом подробнее. Хеке, следуя Гильберту, записал линейный интеграл столкновений в виде

$$L(\varphi) = k(c)\varphi - \int K_+(c, c_1\cos\Theta)\varphi(\mathbf{c}_1)d\mathbf{c}_1,$$

где

$$k(c) = 4\pi^2 e^{-c^2}\left(\frac{e^{-c^2}}{2} + \left(c+\frac{1}{2c}\right)\int\limits_0^c e^{-u^2}du\right).$$

Приведем построенные Хеке фурье-компоненты k_l^* ядра $K_+^* = K_+/\sqrt{k(c)k(c_1)}$, которые он определил следующим образом:

$$k_l^*(c,c_1) = \int\limits_{-1}^{1} K_+^*(c,c_1,\cos\Theta)P_l(\cos\Theta)d\cos\Theta.$$

Аналитические выражения для $k_l^*(c,c_1)$ имеют вид

$$k_l^*(c,c_1) = \frac{e^{-(c^2+c_1^2)}}{\sqrt{k(c)k(c_1)}}\Bigg[\frac{8\pi}{2l+1}\cdot\frac{M^{2l+1}}{(cc_1)^{l+1}}$$

$$+\frac{4\pi M^{2l-1}}{(2l+1)(2l-1)(cc_1)^{l-1}} - \frac{4\pi M^{2l+3}}{(2l+1)(2l+3)(cc_1)^{l+1}}$$

$$+\frac{8\pi}{cc_1}\int\limits_{|u|<M} ue^{u^2}E(u)P_l\Big(\frac{u}{c}\Big)P_l\Big(\frac{u}{c_1}\Big)du\Bigg]. \qquad (7)$$

Здесь

$$\left(M = \min(c,c_1);\quad E(u) = \int\limits_0^u \exp(-x^2)dx\right).$$

Таким образом, выполнение теоремы Хеке приводит к следующим результатами для линейного уравнения Больцмана: если функцию распределения $\varphi(c)$ разложить по полиномам Лежандра с коэффициентами разложения $\varphi_l(c)$, то применение больцмановского оператора в осесимметричном случае сводится к ряду сферически симметричных интегральных операторов

$$\hat{L}(\varphi) = \sum_l P_l(\cos\theta)\int K_l(c,c_1)\varphi_l(c_1)dc_1, \qquad (8)$$

где ядра $K_l(c,c_1)$ легко определяются через $k_l^*(c,c_1)$ (7). Здесь угол θ — это угол между вектором $\mathbf{c}$ и осью z. Подчеркнем, что поскольку изотропные операторы $\hat{L}^l$ в (6) не зависят от индекса m, то достаточно рассмотреть только осесимметричный случай. Обобщение на трехмерный случай проводится тривиально.

Линейный больцмановский оператор обладает свойством ортогональной инвариантности, если выполнено условие (5). Следовательно, теорема Хеке (6) выполнена всегда, если частицы неориентированы. При разложении по сферическим полиномам Эрмита теорема Хеке накладывает определенные ограничения на линейные МЭ. В осесимметричном случае из (6) следует

$$K^{r,l}_{r_1,l_1,0,0} = \Lambda^{(1)}_{r,r_1,l}\delta_{l_1,l}, \qquad (9)$$

$$K^{r,l}_{0,0,r_1,l_1} = \Lambda^{(2)}_{r,r_1,l}\delta_{l_1,l}, \qquad (10)$$

т.е. если $l \neq l_1$, то МЭ обращаются в нуль. Формулы (9) и (10) являются матричным выражением теоремы Хеке. Будем называть линейные элементы $K^{r,l}_{r_1,l_1,0,0}(\Lambda^{(1)}_{r,r_1,l})$ линейными элементами первого типа, а $K^{r,l}_{0,0,r_1,l_1}(\Lambda^{(2)}_{r,r_1,l})$ — линейными элементами второго типа.

2. Доказательство обобщенной теоремы Хеке исходя из рекуррентных соотношений

Покажем теперь, что с использованием выведенных нами рекуррентных соотношений (3) и (4) очень просто можно из теоремы Хеке для линейных элементов найти условия, при которых нелинейные МЭ обращаются в нуль. Проведем этот вывод в осесимметричном случае, опираясь для определенности на МЭ первого типа (9). Воспользуемся сначала соотношением (4), связывающим матричные элементы при различных значениях индексов r, r_1, r_2, но при фиксированных значениях l, l_1, l_2. Перепишем его в виде

$$(r_2+1)K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2+1,l_2}(T) = -(r_1+1)K^{r,l}_{r_1+1,l_1,r_2,l_2}(T)$$

$$-\left(R - T\frac{d}{dT}\right)K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,l_2}(T) - rK^{r-1,l}_{r_1,l_1,r_2,l_2}(T), \qquad (11)$$

перенося четвертый член влево. Подставляя в (11) $r_2 = l_2 = 0$, получаем по теореме Хеке, что

$$K^{r,l}_{r_1,l_1,1,0} = G_1(r,r_1,l)\delta_{l,l_1},$$

$$G_1(r, r_1, l) = -(r_1+1)\Lambda^1_{r,r_1+1,l} - \left(R - \tilde{T}\frac{d}{d\tilde{T}}\right)$$
$$\times \Lambda^{(1)}_{r,r_1,l} - r\Lambda^{(1)}_{r-1,r_1,l}.$$

Далее, подставляя в (11) $r_2 = 1$, $l_2 = 0$, получаем

$$K^{r,l}_{r_1,l_1,2,0} = G_2(r, r_1, l)\delta_{l,l_1},$$

где $G_2(r, r_1, l)$ выражается через линейную комбинацию функций G_1.

Ясно, что, последовательно наращивая таким образом r_2, можно методом индукции получить следующие соотношения:

$$K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,0} = G_{r_2}(r, r_1, l)\delta_{l,l_1}, \qquad (12)$$

т. е. независимо от значений r_2 при $l_2 = 0$ любой нелинейный МЭ обращается в нуль, если $l \neq l_1$. Таким образом, показано, что не только на максвелловском фоне, но и на произвольном сферически симметричном фоне столкновительный оператор сохраняет подпространство, связанное с определенным полиномом Лежандра P_l.

Воспользуемся теперь равенством (3), вытекающим из инвариантности интеграла столкновений относительно сдвига по скорости u и связывающим матричные элементы с различными значениями l, l_1 и l_2. Перенесем в нем пятый член влево, т. е. будем определять МЭ $K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,l_2+1} = K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,l'_2}$ и ограничимся значениями индексов $l_1 \geq l'_2$. Полагая сначала $l'_2 = 1$ ($l_2 = 0$), имеем

$$-K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,1} = \beta(l-1)K^{r,l-1}_{r_1,l_1,r_2,0} + \gamma(r-1, l+1)K^{r-1,l+1}_{r_1,l_1,r_2,0}$$
$$-\beta(l_1)K^{r,l}_{r_1,l_1+1,r_2,0} - \gamma(r_1, l_1)K^{r,l}_{r_1+1,l_1-1,r_2,0}. \quad (13)$$

Если подставить в (13) $l = l_1 - 1$, то в соответствии с первым обобщением теоремы Хеке (12) первый и третий члены справа обращаются в нуль, а отличными от нуля могут быть только второй и четвертый члены. При $l = l_1 + 1$ отличными от нуля могут быть только первый и третий члены справа. При всех других значениях l все члены справа в соответствии с (12) равны нулю. Таким образом, МЭ $K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,1}$ может быть отличным от нуля только в двух случаях

$$l = l_1 - 1, \quad l = l_1 + 1. \qquad (14)$$

Теперь положим в (3) $l'_2 = 2$. Тогда справа встретятся следующие МЭ: $K^{r,l-1}_{r_1,l_1,r_2,1}$, $K^{r-1,l+1}_{r_1,l_1,r_2,1}$, $K^{r,l}_{r_1,l_1+1,r_2,1}$, $K^{r,l}_{r_1+1,l_1-1,r_2,1}$, $K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2+1,0}$. Применяя к первым четырем из этих МЭ неравенство (14), получаем, что первый и третий МЭ могут отличаться от нуля, только если $l = l_1$ и $l = l_1 + 2$, а второй и четвертый — только при $l = l_1 - 2$ и $l = l_1$. Пятый МЭ в соответствии с (12) может отличаться от нуля только при $l = l_1$. Объединяя эти условия, получаем, что МЭ $K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,2}$ может быть отличным от нуля, только если

$$l_1 - 2 \leq l \leq l_1 + 2, \quad (-1)^l = (-1)^{l_1+2}. \qquad (15)$$

Второе из условий (15) означает, что четность l совпадает с четностью $l_1 + 2$. При $l'_2 = 3$ условия на l находятся исходя из (14) и (15). Продолжая далее увеличивать l_2, мы можем легко доказать по индукции, что по теореме Хеке для линейных элементов первого типа (9) матричные элементы $K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,l_2}$ при $l_1 \geq l_2$ могут быть отличными от нуля, только если

$$l_1 - l_2 \leq l \leq l_1 + l_2, \quad (-1)^l = (-1)^{l_1+l_2}. \qquad (16)$$

Обобщение теоремы Хеке для линейных элементов второго типа (10) проводится аналогично предыдущему. Прежде всего, выбирая в качестве искомого в (4) четвертый член, можно получить соотношение

$$K^{r,l}_{r_1,0,r_2,l_2} = F(r, r_1, r_2, l)\delta_{l,l_2}.$$

Далее можно повторить все рассуждения относительно нулей МЭ, если в соотношении (3) определять не пятый, а третий элемент. Тогда легко показать, что матричные элементы $K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,l_2}$ при $l_1 \leq l_2$ могут быть отличными от нуля, только если

$$l_2 - l_1 \leq l \leq l_1 + l_2, \quad (-1)^l = (-1)^{l_1+l_2}. \qquad (17)$$

Объединяя (16) и (17), имеем

$$|l_2 - l_1| \leq l \leq l_1 + l_2, \quad (-1)^l = (-1)^{l_1+l_2}. \qquad (18)$$

Свойства матричных элементов (18) и являются обобщенной теоремой Хеке (ОТХ) для нелинейных МЭ.

Таким образом, из теоремы Хеке для линейных элементов с помощью соотношений (3) и (4) доказывается ОТХ для нелинейных матричных элементов. Следует отметить, что обращение в нуль МЭ, не удовлетворяющих условиям ОТХ в случае $l_1 > l_2$, является следствием теоремы Хеке для линейных элементов первого типа; при $l_1 < l_2$ обращение в нуль аналогичных МЭ является следствием теоремы Хеке для линейных элементов второго типа; при $l_1 = l_2$ соответствующие нули доказываются независимо, исходя как из линейных МЭ первого, так и второго типа.

В заключение этого раздела обобщим результаты Хеке по разложению ядра линейного больцмановского оператора (8) на нелинейный случай. Это становится возможным, поскольку рекуррентные соотношения (3) и (4) позволяют вычислять нелинейные МЭ $K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,l_2}$ при больших значениях индексов. Действительно, в силу полноты системы сферических полиномов Эрмита в рассматриваемом случае можно написать ядро билинейного оператора в виде

$$K(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) = M(c)\sum_{l_1,l_2}\sum_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2}\sum_{r,r_1,r_2}\frac{1}{g_{r_1,l_1}g_{r_2,l_2}}$$
$$\times c^l S^r_{l+1/2}(c)P_l(x)K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,l_2}c_1^{l_1}S^{r_1}_{l_1+1/2}(c_1)$$
$$\times P_{l_1}(x_1)c_2^{l_2}S^{r_2}_{l_2+1/2}(c_2)P_{l_2}(x_2). \qquad (19)$$

Здесь $x = \cos\theta$, $x_1 = \cos\theta_1$ и $x_2 = \cos\theta_2$. Углы θ, θ_1 и θ_2 — это углы между векторами скоростей $\mathbf{c}, \mathbf{c}_1$ и $\mathbf{c}_2$ и осью z. Пределы суммирования по l в (19) определяются в соответствии с ОТХ.

Если разложить ФР по полиномам Лежандра с коэффициентами разложения $f_l(c)$, то в качестве обобщения (8) будем иметь

$$\hat{I}(f,f)=\sum_{l_1,l_2}\sum_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2}P_l(x)\int_0^\infty\!\!\int_0^\infty K^l_{l_1,l_2},\, f_{l_1}(c_1)f_{l_2}(c_2)dc_1dc_2.$$

Здесь $\hat{I}(f,f)$ — нелинейный больцмановский интеграл столкновений. Ядра $K^l_{l_1,l_2}$ в данном случае имеют вид

$$K^l_{l_1,l_2}=M(c)c^l\sum_{r,r_1,r_2}\frac{1}{\sigma_{r_1,l_1}\sigma_{r_2,l_2}}S^r_{l+1/2}(c)K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,l_2}c_1^{l_1}$$
$$\times S^{r_1}_{l_1+1/2}(c_1)c_2^{l_2}S^{r_2}_{l_2+1/2}(c_2),$$

где σ_{r_1,l_1} и σ_{r_2,l_2} — нормировочные коэффициенты соответствующих полиномов Сонина.

3. Вывод формул для МЭ и доказательство ОТХ, опираясь на результаты работы Кумара

В [6] Кумар рассматривал моментное представление интеграла столкновений при разложении ФР по комплексным сферическим полиномам Эрмита.

$$\phi^{[n,l]}_m(\mathbf{c})=\sqrt{\sigma_{n,l}}c^lS^{(n)}_{l+1/2}(c^2)\mathfrak{Y}^{[l]}_m(\theta,\varphi),$$

где

$$\mathfrak{Y}^{[l]}_m(\theta,\varphi)=i^l(-1)^{(m+|m|)}\left[\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}\right]^{1/2}$$
$$\times P^{|m|}_l(\cos\theta)e^{im\varphi},$$

$$P^{|m|}_l(\cos\theta)=\frac{(-1)^l}{2^ll!}(\sin\theta)^{|m|}\frac{d^{l+|m|}}{(d\cos\theta)^{l+|m|}}(1-\cos^2\theta)^l.$$

Кумар отметил, что эти полиномы являются собственными функциями квантового гармонического осциллятора, и показал, что при вычислении нелинейных МЭ удобно воспользоваться некоторыми преобразованиями, которые впервые обсуждались Талми [15] в связи с оболочечной моделью в физике ядра.

Следуя Кумару и сохраняя в основном его обозначения, запишем разложение интеграла столкновений в следующем виде:

$$I(\mathbf{c}_1)=w(\beta_1,c_1)\sum_{n_3,l_3,m_3}I^{(n_3,l_3)}_{m_3}(\beta_1)\phi^{[n_3,l_3]}_{m_3}(\beta_1\mathbf{c}_1),$$

где

$$I^{(n_3,l_3)}_{m_3}(\beta_1)=\int I(\mathbf{c}_1)\phi^{(n_3,l_3)}_{m_3}(\beta_1\mathbf{c}_1)d\mathbf{c}_1$$
$$=\iint(f_1'f_2'-f_1f_2)\phi^{(n_3l_3)}_{m_3}(\beta_1\mathbf{c}_1)g\sigma(g,\Theta)d\hat{\mathbf{g}}'d\mathbf{c}_1d\mathbf{c}_2;$$

$$w(\beta,c)=\left(\frac{\beta^2}{2\pi}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{\beta^2c^2}{2}\right);\quad\int w(\beta,c)d\mathbf{c}=1.$$

Произведение двух сферических полиномов Эрмита от скоростей частиц до (или после) столкновений выражается через сумму произведений сферических полиномов Эрмита от скорости центра масс и относительной скорости сталкивающихся (разлетающихся) частиц. Коэффициентами в этом разложении являются коэффициенты Талми

$$\phi^{[n_1,l_1]}_{m_1}(\beta_1\mathbf{c}_1)\phi^{[n_2,l_2]}_{m_2}(\beta_2\mathbf{c}_2)$$
$$=\sum_{\substack{N,L,M\\n,l,m}}\left(\begin{array}{c|c}NLM&(\beta_1)n_1l_1m_1\\nlm&(\beta_2)n_2l_2m_2\end{array}\right)\phi^{[N,L]}_M(\Gamma\mathbf{G})\phi^{[n,l]}_m(\gamma\mathbf{g}).$$

Здесь

$$\beta_1^2=\frac{m_a}{kT},\quad\beta_2^2=\frac{m_b}{kT},$$
$$\Gamma^2=\frac{m_a+m_b}{kT},\quad\gamma^2=\frac{m_am_b}{(m_a+m_b)kT},$$

$\mathbf{G}$ — скорость центра масс, $\mathbf{g}$ — относительная скорость, m_a и m_b — массы частиц. После этого произвольный коэффициент разложения интеграла столкновений $I^{(n_3,l_3)}_{m_3}$ представляется в виде суммы произведений интегралов отдельно по скорости центра масс и по относительным скоростям, причем коэффициенты Талми входят только в интегралы по скорости центра масс. Интегралы по относительным скоростям имеют вид

$$R^{n,l,m}_{n',l',m'}=\int w(\gamma,g)\left[\phi^{[n,l]}_m(\gamma\mathbf{g}')-\phi^{[n,l]}_m(\gamma\mathbf{g})\right]$$
$$\times\phi^{(n',l')}_{m'}(\gamma\mathbf{g})g\sigma(g,\Theta)d\hat{\mathbf{g}}'d\mathbf{g}.\tag{20}$$

Далее Кумар показал, что в случае неориентированных частиц (только этот случай им и рассматривается) в (20) три из пяти интегрирований выполняются и

$$R^{n,l,m}_{n',l',m'}=V^l_{n,n'}\delta_{l,l'}\delta_{m,m'},\tag{21}$$

где

$$V^l_{n,n'}=\int_0^\infty w(\gamma,g)R_{n,l}(\gamma g)R_{n',l}(\gamma g)(\sigma_l-\sigma_0)g^3dg,$$

$$\sigma_l(g)=\frac{(2l+1)^2}{8\pi}\int\sigma(g,\Theta)P_l(\cos\Theta)d(\cos\Theta),$$

а $R_{n,l}(\gamma g)$ — радиальная функция, представляющая собой нормированные полиномы Лагерра (Сонина).

Именно вследствие сферической симметрии потенциала взаимодействия в (21) появились символы Кронекера $\delta_{l,l'}\delta_{m,m'}$. В результате выражение для $I^{(n_3,l_3)}_{m_3}(\beta_1)$ существенно упрощается: в нем на два суммирования становится меньше.

Из построенного Кумаром выражения для $I^{(n_3,l_3)}_{m_3}(\beta_1)$ легко понять, как выглядят МЭ при разложении по нормированным комплексным сферическим полиномам Эрмита, а именно

$$\bar{E}^{n_3,l_3,m_3}_{n_1,l_1,m_1,n_2,l_2,m_2} = \sum_{\substack{N,L,M\\ n,n',l,m}} \left(\begin{array}{c|c} NLM & (\beta_1)n_3l_3m_3 \\ n'lm & (\beta_2)0\,0\,0 \end{array} \right)^* \times \left(\begin{array}{c|c} NLM & (\beta_1)n_1l_1m_1 \\ nlm & (\beta_2)n_2l_2m_2 \end{array} \right) V^l_{n,n'}. \quad (22)$$

Здесь вместо K для МЭ использован символ E, чтобы отличить МЭ при разложении по комплексным сферическим гармоникам от МЭ при разложении по вещественным сферическим гармоникам.

Коэффициенты Талми отличны от нуля только при определенных соотношениях между индексами. В частности, должен быть выполнен закон сохранения четности, т.е. коэффициент Талми

$$\left(\begin{array}{c|c} NLM & (\beta_1)n_1l_1m_1 \\ nlm & (\beta_2)n_2l_2m_2 \end{array} \right)$$

отличен от нуля только тогда, когда четность $L+l$ совпадает с четностью l_1+l_2. Из формулы (22) с использованием этого свойства следует, что МЭ $\bar{E}^{n_3,l_3,m_3}_{n_1,l_1,m_1,n_2,l_2,m_2}$ может быть отличным от нуля, только если четность l_1+l_2 совпадает с четностью l_3

$$(-1)^{l_1+l_2} = (-1)^{l^3}. \quad (23)$$

Дальнейшие преобразования проведем, используя результаты работы Смирнова [16], в которой получена следующая формула, выражающая коэффициенты Талми через известные коэффициенты Клебша–Гордана $C^{c\gamma}_{a\alpha b\beta}$:

$$\left(\begin{array}{c|c} NLM & (\beta_1)n_1l_1m_1 \\ nlm & (\beta_2)n_2l_2m_2 \end{array} \right) = \sum_\lambda B_\lambda C^{\lambda M_0}_{l_1m_1l_2m_2} C^{\lambda M_0}_{LMlm}. \quad (24)$$

Здесь существенно то, что коэффициенты B_λ не зависят от проекций момента m_1, m_2, M, m. Свойства коэффициентов Клебша–Гордана можно найти, например, в [17]. Одно из этих свойств, соответствующее закону сохранения проекции момента количества движения, приводит к тому, что коэффициенты Талми могут быть отличными от нуля, только если

$$M_0 = m_1 + m_2 = M + m.$$

Для преобразования первого из коэффициентов Талми в формуле (22) воспользуемся следующими свойствами коэффициентов Клебша–Гордана

$$C^{\lambda M_0}_{l_3m_300} = \delta_{\lambda,l_3}\delta_{M_0,m_3}, \quad (25)$$

$$\sum_{M,n} C^{\lambda M_0}_{LMlm} C^{l_3m_3}_{LMlm} = \delta_{\lambda,l_3}\delta_{M_0,m_3}. \quad (26)$$

Из (24) следует

$$\left(\begin{array}{c|c} NLM & (\beta_1)n_3l_3m_3 \\ n'lm & (\beta_2)0\,0\,0 \end{array} \right)^* = \sum_\lambda B^*_\lambda C^{\lambda M_0}_{l_3m_300} C^{\lambda M_0}_{LMlm} = B^*_{l_3}(N, n', n_3, 0, L, l, l_3, 0) C^{l_3m_3}_{LMlm}.$$

Здесь мы использовали формулу (25) и подставили явно аргументы функции $B^*_{l_3}$. Из (22) и (24) получаем

$$\bar{E}^{n_3,l_3,m_3}_{n_1,l_1,m_1,n_2,l_2,m_2} = \sum V^l_{n,n'} B^*_{l_3}(N, n', n_3, 0, L, l, l_3, 0) \times \sum_\lambda B_\lambda(N, n, n_1, n_2, L, l, l_1, l_2) C^{\lambda M_0}_{l_1m_1l_2m_2} \sum_{M,m} C^{\lambda M_0}_{LMlm} C^{l_3m_3}_{LMlm}. \quad (27)$$

Используя свойство (26) для последней суммы, выражение (27) можно упростить

$$\bar{E}^{n_3,l_3,m_3}_{n_1,l_1,m_1,n_2,l_2,m_2} = C^{l_3m_3}_{l_1m_1l_2m_2} \sum V^l_{n,n'} B^*_{l_3}(N, n', n_3, 0, L, l, l_3, 0) \times B_{l_3}(N, n, n_1, n_2, L, l, l_1, l_2). \quad (28)$$

Таким образом, нелинейный матричный элемент оказался пропорциональным коэффициенту Клебша–Гордана с теми же индексами. Отметим здесь, что выражение под знаком суммы не зависит от индексов m_1, m_2 и m_3.

Формула (28) является еще одним вариантом прямых формул для вычисления МЭ. Как и все другие прямые формулы, она содержит много суммирований и оказывается чрезвычайно громоздкой и непригодной для вычисления МЭ при больших значениях индексов.

Напомним, что первоначально коэффициенты Талми были предложены для квантово-механических расчетов, в частности для расчета МЭ в оболочечной модели ядра. Если в этой теории понадобится проводить расчеты с большими значениями индексов, то аналог рекуррентной процедуры, разрабатываемой в этой и предыдущих работах для кинетической теории, может быть рекомендован для квантовой теории. Следует отметить, что с использованием инвариантности билинейного больцмановского оператора относительно группы вращений $SO\,(3)$ (что справедливо только для центрально-симметричных потенциалов) пропорциональность нелинейных МЭ коэффициентам Клебша–Гордана была доказана в [17].

Вернемся к формуле (28). В силу того что стоящее там под знаком суммы выражение не зависит от индексов m, m_1 и m_2, можно выразить любой трехмерный МЭ через осесимметричный

$$\bar{E}^{n_3,l_3,m_3}_{n_1,l_1,m_1,n_2,l_2,m_2} = \frac{C^{l_3m_3}_{l_1m_1l_2m_2}}{C^{l_30}_{l_30l_20}} \bar{E}^{n_3,l_3,0}_{n_1,l_1,0,n_2,l_2,0}.$$

Понятно, что в осесимметричном случае все индексы m обращаются в нуль, комплексные и вещественные гармоники совпадают и сферические гармоники переходят в полиномы Лежандра. При этом E с нулевыми значениями m, m_1 и m_2 с точностью до коэффициента нормировки совпадает с $K^{n_3,l_3}_{n_1,l_1,n_2,l_2}$.

Хорошо известно из свойств коэффициентов Клебша–Гордана [18], что в соответствии с правилами векторного сложения они могут быть отличными от нуля, только если выполнено „условие треугольника“.

$$|l_1 - l_2| \leq l_3 \leq l_1 + l_2. \qquad (29)$$

Следовательно, в трехмерном случае МЭ могут отличаться от нуля, только если „условия треугольника“ выполнены. В интересующем нас осесимметричном случае свойство (29) совместно с условием сохранения четности (23) и представляет собой ОТХ (18).

В частном случае максвелловских молекул МЭ рассматривались в работах [19–21]. В первых двух работах, основанных на Фурье-преобразовании уравнения Больцмана, были построены прямые формулы для нелинейных МЭ. В [21] с использованием $\alpha - u$-представления выведены формулы для расчета осесимметричных нелинейных матричных элементов, проведены расчеты для не очень больших значений индексов и приведены таблицы значений этих элементов.

Интересно отметить [22], что в случае максвелловских молекул помимо нулей МЭ, обусловленных ОТХ, в нуль обращаются все МЭ, для индексов которых выполнены условия

$$l = 0, \quad l_1 = l_2 = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Заключение

Важной особенностью вывода ОТХ в разделе 2 является то, что группа вращения и ортогональная инвариантность ядра используются только при выводе теоремы Хеке для линейных МЭ. При доказательстве ОТХ для нелинейных МЭ используются соотношения (3) и (4), которые являются универсальными и следуют из инвариантности интеграла столкновений относительно выбора базиса. При этом изменению базиса соответствует только изменение температуры и величины скорости (сдвиг) весового максвеллиана.

Помимо того что ОТХ ограничивает область задания ненулевых МЭ, она позволяет установить дополнительные связи между МЭ. Как показано в [22], из ОТХ и построенных нами универсальных рекуррентных соотношений следует, что любой линейный осесимметричный МЭ $K^{r,l}_{r_1,l_1,r_2,l_2}$ однозначано определяется по заданным изотропным линейным МЭ $K^{r,0}_{r_1,0,0,0}$ или $K^{r,0}_{0,0,r_2,0}$. Для последних в [2] получены простые аналитические формулы. В [22] разработан алгоритм, с помощью которого очень просто можно вычислить любой линейный осесимметричный МЭ. Эти матричные элементы пропорциональны интегральным скобкам [23], с помощью которых вычисляются коэффициенты переноса в стандартной кинетической теории газов. Таким образом, ОТХ позволяет существенно продвинуться в теории переноса.

Работа поддержана грантами РФФИ (№ 00-02-16882, 01-02-17903) и ФЦП „Интеграция“ (№ АО143).

Список литературы

[1] *Эндер А.Я., Эндер И.А.* // ЖТФ. 2001. Т. 72. Вып. 5. С. 1–9.
[2] *Эндер А.Я., Эндер И.А.* // ЖТФ. 1999. Т. 69. Вып. 6. С. 22–29.
[3] *Ender A.Yu., Ender I.A.* // Phys. Fluids. 1999. Vol. 9. P. 2720–2730.
[4] *Hecke E.* // Math. Ann. 1917. Vol. 78. P. 398–404.
[5] *Hecke E.* // Math. Zs. 1922. Vol. 12. P. 274–286.
[6] *Kumar K.* // Ann. Phys. 1966. Vol. 37. P. 113–141.
[7] *Чепмен С., Каулинг Т.* Математическая теория неоднородных газов. М.: ИЛ, 1960. 510 с.
[8] *Burnett D.* // Proc. London Math. Soc. 1935. Vol. 39. P. 385–430.
[9] *Burnett D.* // Proc. London Math. Soc. 1935. Vol. 40.
[10] *Grad H.* // Comm. Pure Appl. Math. 1949. Vol. 2. P. 311.
[11] *Sirovich L.* // Phys. Fluids. 1963. Vol. 6. N 1. P. 10–20.
[12] *Эндер И.А., Эндер А.Я.* // ДАН СССР. 1970. Т. 193. № 1. С. 61–64. Phys. Fluids. 1963. Vol. 6. N 1. P. 10–20.
[13] *Эндер А.Я.* // ЖТФ. 1992. Т. 62. Вып. 1. С. 20–29.
[14] *Hilbert D.* // Math. Ann. 1912. Vol. 72. P. 562–577.
[15] *Talmi I.* // Helv. Phys. Acta. 1952. Vol. 25. P. 185–234.
[16] *Smirnov Yu.F.* // Nucl. Phys. 1961. Vol. 27. P. 177–187.
[17] *Веденяпин В.В.* Препринт ИПМ РАН. М., 1981. № 38. 27 с.
[18] *Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К.* Квантовая теория углового момента. Л., 1975. 436 с.
[19] *Hendrics E.M., Nieuwenhuizen T.M.* // Stat. Phys. 1982. Vol. 29. N 3. P. 591–615.
[20] *Веденяпин В.В.* // ДАН СССР. 1981. Т. 256. № 2. С. 338–342.
[21] *Эндер А.Я., Эндер И.А.* // Аэродинамика разреженных газов. Л., 1983. С. 197–215.
[22] *Эндер А.Я., Эндер И.А., Лютенко М.Б.* // Препринт ФТИ РАН. СПб., 2000. № 1748. 71 с.
[23] *Ферцигер Дж., Капер Г.* Математическая теория процессов переноса в газах. М., 1976. 554 с.