01

Аналитическое представление линейных ядер интеграла столкновений уравнения Больцмана для максвелловских молекул

© *А.Я. Эндер, И.А. Эндер*

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург
Санкт-Петербургский государственный университет
E-mail: andrei.ender@mail.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 12 октября 2010 г.

Предлагается представлять сложный пятикратный интеграл столкновений в уравнении Больцмана набором сравнительно простых интегральных операторов. Получить аналитическое выражение для ядер даже в линейной постановке оказывается возможным лишь в редких случаях. Один из таких случаев был рассмотрен в [1], другой — в данной работе.

В последние годы значительный импульс получил моментный метод решения уравнения Больцмана [2]. В этом методе функция распределения (ФР) представляется в виде разложения по базисным функциям — сферическим полиномам Эрмита (функциям Барнетта). Основной трудностью такого подхода является вычисление матричных элементов (МЭ) интеграла столкновений. В [3,4] были найдены новые соотношения между МЭ и разработаны рекуррентные процедуры их расчета, что позволило вычислять МЭ с большими значениями индексов и учитывать большое число членов в разложении ФР.

Другая трудность — это ограничения на сходимость разложения ФР по сферическим полиномам Эрмита [3,4]. Эти ограничения снимаются, если разлагать ФР по сферическим гармоникам, не проводя дальнейшего разложения коэффициентов по полиномам Сонина. При этом уравнение Больцмана переходит в систему интегродифференциальных уравнений для коэффициентов разложения, содержащих в интегральной части изотропные ядра. Переход к таким ядрам сильно упрощает задачу решения кинетического уравнения. Впервые ядра в случае линеаризованного уравнения Больцмана и модели твердых шаров рассматривались в [1]. С использованием таких ядер решена, например, задача о взаимодействии газа со стенкой [5]. Похожий подход для модели твердых шаров в случае смеси газов предложен в [6].

Как показано в [3], при изучении ядер, не ограничивая общности, можно перейти от сферических гармоник к полиномам Лежандра. Тогда уравнение Больцмана заменяется системой уравнений для f_l-коэффициентов разложения ФР по полиномам Лежандра

$$\frac{D(f_l(c))}{Dt} = \sum_{l_1,l_2} \int_0^\infty \int_0^\infty G^l_{l_1,l_2}(c, c_1, c_2) f_{l_1}(c_1) f_{l_2}(c_2) c_1^2 c_2^2 dc_1 dc_2, \tag{1}$$

где c — величина скорости частиц, рассчитанная в единицах тепловой скорости $v_T = \sqrt{2kT/m}$, $G^l_{l_1,l_2}(c, c_1, c_2)$ — нелинейные ядра, а суммирования проводятся по индексам, удовлетворяющим следующим условиям: $|l_1 - l_2| \leqslant l \leqslant l_1 + l_2$, $l + l_1 + l_2$ — четное число.

Если известны МЭ, то нелинейные ядра можно представить в виде [7,8]

$$G^l_{l_1,l_2} = M(c) \sum_{r,r_1,r_2} c^l S^r_{l+1/2}(c^2) K^{rl}_{r_1l_1,r_2l_2} \frac{c_1^{l_1} S^{r_1}_{l_1+1/2}(c_1^2)}{\sigma_{r_1l_1}} \frac{c_2^{l_2} S^{r_2}_{l_2+1/2}(c_2^2)}{\sigma_{r_2l_2}},$$

$$\sigma_{rl} = \frac{\Gamma(r + l + 3/2)}{2\pi^{3/2} r!}. \tag{2}$$

Здесь $M(c) = e^{-c^2}/\pi^{3/2}$ — максвеллиан, $S^r_\alpha(x)$, $(\alpha = l + 1/2)$ — полиномы Сонина (Лагерра), матричные элементы $K^{rl}_{r_1l_1,r_2l_2}$ — коэффициенты разложения интеграла столкновений по сферическим полиномам Эрмита.

Зная нелинейные ядра, можно определить линейные ядра первого и второго типов:

$$L_l^{(1)}(c, c_1) = \int_0^\infty G^l_{l,0}(c, c_1, c_2) M(c_2) c_2^2 dc_2,$$

$$L_l^{(2)}(c, c_2) = \int_0^\infty G^l_{0,l}(c, c_1, c_2) M(c_1) c_1^2 dc_1. \tag{3}$$

Первому типу соответствует релаксация на максвеллиане, а второму — релаксация максвеллиана на произвольной ФР.

Из (3) с использованием (2) получаем выражение линейных ядер через МЭ:

$$L_l^{(i)\pm}(c, c_i) = M(c) \sum_{r, r_i} c^l S_{l+1/2}^{r}(c^2) \Lambda_{r, r_i, l}^{(i)\pm} \frac{c_i^l S_{l+1/2}^{r_i}(c_i^2)}{\sigma_{r_i l}}, \quad i = 1, 2. \tag{4}$$

Здесь $\Lambda_{r, r_1, l}^{(1)\pm} = K_{r_1 l, 00}^{rl\pm}$, а $\Lambda_{r, r_2, l}^{(2)\pm} = K_{00, r_2 l}^{rl\pm}$.

Ядра и МЭ со знаком плюс отвечают интегралу обратных столкновений (gain term), а ядра и МЭ со знаком минус — интегралу прямых столкновений (loss term) $(L_l^{(i)}(c, c_i) = L_l^{(i)+}(c, c_i) - L_l^{(i)-}(c, c_i))$.

По формулам (4) были численно построены ядра $L_0^+(c, c_i)$ для псевдомаксвелловских молекул [9] и модели твердых шаров [10]. При больших индексах в (4) использовалось асимптотическое поведение МЭ и полиномов Сонина. При этом ядра строились с хорошей точностью до 4–5 тепловых скоростей. При более высоких скоростях построить ядра таким способом не удается.

Дифференциальное сечение рассеяния в случае максвелловских молекул (потенциал взаимодействия $V \sim 1/r^4$) имеет вид [3]

$$\sigma(g, \theta) = F_0(z)/g, \qquad z = \sin^2(\theta/2), \tag{5}$$

где g — относительная скорость сталкивающихся частиц, а θ — угол рассеяния. Вид угловой части $F_0(z)$ можно найти в [11]. Эта формула очень громоздка. Если ее аппроксимировать методом наименьших квадратов, то получим с большой точностью следующее выражение:

$$F_0(z) = \frac{3\pi^{1/2}}{64\sqrt{2}} \frac{1.000050 + 0.927579\sqrt{z} + -0.216338z}{z^{5/4}}. \tag{6}$$

В литературе часто рассматривают псевдомаксвелловские молекулы, полагая $F_0(z)$ постоянной величиной. Если сечение имеет вид (5), то при произвольной $F_0(z)$ матрица $\Lambda_{r, r_1, l}^{i}$ становится диагональной и выражение для ядер (4) еще более упрощается:

$$L_l^{(i)}(c, c_i = M(c)(cc_i)^l \sum_r \frac{S_\alpha^r(c^2) S_\alpha^r(c_i^2)}{\sigma_{rl}} \Lambda_{r,l}^{(i)}, \quad i = 1, 2. \tag{7}$$

Здесь суммирование включает произведение двух полиномов Сонина с одинаковыми индексами и равными аргументами. Подобные суммы исследовались ранее. В [12] (формула 10.12.(20)) приведена формула Хилле–Харди для билинейной производящей функции для полиномов Лагерра. В наших обозначениях она имеет вид

$$\sum_{r-0}^{\infty} \frac{S_\alpha^r(x) S_\alpha^r(y) z^r}{\sigma_{rl}} = 2\pi^{3/2} \frac{(xyz)^{-\alpha/2}}{1-z}$$
$$\times \exp\left(-z\,\frac{x+y}{1-z}\right) I_\alpha\left(2\,\frac{\sqrt{xyz}}{1-z}\right), \quad |z| < 1. \tag{8}$$

Здесь $I_\alpha(x)$ — функция Бесселя. В левой части (8) при $z \to 1$, воспользовавшись условием полноты полиномов Сонина, получим

$$\lim_{z\to 1}\left(M(c) \sum_{r=0}^{\infty} \frac{S_\alpha^r(c^2) S_\alpha^r(c_1^2) z^r}{\sigma_{rl}}\right) = \frac{\delta(c-c_1)}{c^2}. \tag{9}$$

Для максвелловских молекул хорошо известна [3] формула для линейных МЭ

$$\Lambda_{r,l}^{(1)} = \int_0^1 F_0^i(1-z)\big(z^{l/2+r} P_l(\sqrt{z}) - 1\big) dz,$$

$$\Lambda_{r,l}^{(2)} = \int_0^1 F_0(z)\big(z^{l/2+r} P_l(\sqrt{z}) - \delta_{r0}\delta_{l0}\big) dz. \tag{10}$$

Здесь $F_0(z)$ — угловая часть сечения рассеяния, а $P_l(x)$ — полиномы Лежандра.

Подставим (10) в (7) и применим формулу Хилле–Харди (8). Меняя местами порядок суммирования и интегрирования и используя (9), получаем представление линейных ядер для максвелловских молекул в виде следующих квадратур:

$$L_l^{(1)}(c, c_1) = \int_0^1 F_0(1-z)\Bigg(2\pi^{3/2} \frac{M(c) P_l(\sqrt{z})}{\sqrt{cc_1}\, z^{1/4}(1-z)}$$
$$\times \exp\left(-z\,\frac{c^2+c_1^2}{1-z}\right) I_\alpha\left(2\frac{cc_1\sqrt{z}}{1-z}\right) - \frac{\delta(c-c_1)}{c^2}\Bigg) dz, \tag{11}$$

$$L_l^{(2)}(c, c_1) = 2\pi^{3/2} M(c) \int\limits_0^1 F_0(z) \left(\frac{P_l(\sqrt{z})}{\sqrt{cc_2}\, z^{1/4}(1-z)} \right.$$

$$\left. \times \exp\left(-z\, \frac{c^2 + c_2^2}{1-z}\right) I_\alpha \left(2\, \frac{cc_2\sqrt{z}}{1-z}\right) - \frac{2\delta_{l0}}{\sqrt{\pi}} \right) dz. \qquad (12)$$

Отметим, что ядра для модели твердых шаров в [1] также представлены в квадратурах.

Мы установили, что формулы (11), (12) с успехом могут быть использованы для построения ядер при достаточно произвольной угловой зависимости $F_0(z)$, и не возникает никаких проблем при построении ядер с произвольными l в области больших скоростей.

Для псевдомаксвелловских молекул приходные ядра первого и второго типов равны, т. е. $L_l^{(1)+}(c, c_1) = L_l^{(2)+}(c, c_1) = L_l^{+}(c, c_1)$. Интегралы в формулах (11) и (12) в этом случае при $l = 0$ берутся до конца. Действительно, полагая $\alpha = 1/2$, учитывая, что $I_{1/2}(x) = \sqrt{2}\,\mathrm{sh}(x)/\sqrt{\pi x}$ и делая замену переменных $t = z/(1-z)$, найдем

$$L_0^+(c, c_1) = \frac{2\pi M(c)}{cc_1} \int\limits_0^\infty \frac{1}{\sqrt{t}(1+t)} \exp\big(-t(c^2 + c_1^2)\big)\,\mathrm{sh}\big(2cc_1\sqrt{t(1+t)}\big)\, dt. \qquad (13)$$

Интеграл такого вида приведен в [13]. Согласно формуле (2.4.19) из [13], имеем

$$L_0^+(c, c_1) = \frac{2\sqrt{\pi}}{cc_1} \exp(c_1^2)\,\mathrm{erfc}(z_+)\,\mathrm{erf}(z_-),$$

$$2(z_\pm)^2 = (c^2 + c_1^2) \pm \big|(c^2 - c_1^2)\big|.$$

Таким образом, для псевдомаксвелловских молекул приходное ядро $L_0^+(c, c_1)$ имеет вид

$$L_0^+(c, c_1) = M(c) \sum_r \frac{S_{1/2}^r(c^2) S_{1/2}^r(c_1^2)}{r+1} = \frac{2\sqrt{\pi}}{cc_1} \exp(c_1^2)$$

$$\times \begin{cases} \mathrm{erfc}(c)\,\mathrm{erf}(c_1) & c_1 < c \\ \mathrm{erfc}(c_1)\,\mathrm{erf}(c) & c_1 > c. \end{cases} \qquad (14)$$

При сравнении расчетов из [9] с (14) мы убедились в прекрасном совпадении результатов в области сходимости [9], т.е. при $\sqrt{c^2 + c_1^2} < 4$.

Работа поддержана ФЦП „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России“ (гос. контракт № 02.740.11.0201), а также грантом РФФИ № 09.08.01017.

Список литературы

[1] *Hecke E.* // Math. Zs. 1922. Bd. 12. S. 274–286.
[2] *Burnett D.* // Proc. London Math. Soc. 1935. V. 40. P. 382–435.
[3] *Эндер А.Я., Эндер И.А.* Интеграл столкновений уравнения Больцмана и моментный метод. СПб.: Изд-во СПбГУ, 2003. 224 с.
[4] *Ender A.Ya., Ender I.A.* // Phys. Fluids. 1999. V. 11. P. 2720–2730.
[5] *Loyalka S.K.* // Phys. Fluids. A. 1989. V. 1. P. 403–408.
[6] *Garsia M., Siewer C.E.* // Europ. J. Mech. B/F1. 2007. V. 206. P. 749–780.
[7] *Эндер А.Я., Эндер И.А.* // Сиб. журнал инд. мат. 2003. Т. 6. В. 2(14). С. 156–164.
[8] *Эндер А.Я., Эндер И.А., Бакалейников Л.А.* // ЖТФ. 2010. Т. 80. В. 10. С. 12–21.
[9] *Бакалейников Л.А., Эндер А.Я., Эндер И.А.* // ЖТФ. 2006. Т. 76. В. 9. С. 6–15.
[10] *Бакалейников Л.А., Флегонтова Е.Ю., Эндер А.Я., Эндер И.А.* // ЖТФ. 2009. Т. 79. В. 2. С. 24–62.
[11] *Уленбек Д., Форд Д.* Лекции по статистической механике. М.: Мир, 1965. 307 с.
[12] *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции. М.: Наука, 1966. 295 с.
[13] *Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И.* Интегралы и ряды. М.: ФМ, 1981. 798 с.