

01;03
©1994 г.МОМЕНТНЫЙ МЕТОД ДЛЯ ИЗОТРОПНОГО
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 2 февраля 1994 г.)

Изотропное уравнение Больцмана с помощью разложения по полиномам Сонина сводится к нелинейной моментной системе уравнений. В отличие от [1], где сечение взаимодействия считается не зависящим от углов, матрица перехода строится аналитически практически для произвольных сечений. Проводится анализ точности вычисления матрицы. Показано, что при числе моментных уравнений $N = 30$ обеспечивается такая же точность, как и в [1] при $N = 13$. Приведены пробные расчеты релаксационных процессов, указывающие на влияние сечения взаимодействия на поведение "хвостов" функции распределения.

Введение

В [1] для решения изотропных по скоростям релаксационных задач при достаточно сильных отклонениях от равновесия успешно использовалась нелинейная система моментных уравнений. При этом делалось существенное предположение о независимости сечения от угла рассеяния.

Обычно используемые при решении неизотропного по скоростям уравнения Больцмана моментные методы Чепмена-Энскога и Греда применяются при малых отклонениях от равновесия. При этом уравнение Больцмана линеаризуется и при разложении функции распределения (ΦR) ограничиваются небольшим количеством моментов. В изотропном случае это соответствует двум-трем полиномам Сонина. В [1] учитывалось до 13 моментов.

Принципиальным ограничением моментных методов при разложении ΦR по полиномам Сонина является выполнение критерия Греда

$$\int_0^{\infty} f^2 \exp(mv^2/2kT_{eq}) d^3v < \infty. \quad (1)$$

Здесь m — масса частицы, k — постоянная Больцмана, а T_{eq} — равновесная температура газа. Напомним [2], что для температурной релаксации, когда ФР в начальный момент времени представлена в виде суммы двух максвеллианов с температурами T_1 и T_2 ($T_1 < T_2$), этот критерий не выполнен, если $T_2/T_{eq} > 2$.

Свободным от ограничений, связанных с критерием Греда, является α -метод [3], основанный на разложении изотропной по скоростям ФР по максвеллианам с произвольными температурами. Этот метод легко обобщается на неизотропный случай. Так, в [4] было предложено представлять ФР в виде ряда по сферическим гармоникам, а изотропные по скоростям коэффициенты этого разложения в свою очередь разлагать по максвелловским распределениям с различными температурами.

В данной работе разработанная при построении α -представления уравнения Больцмана техника используется для вычисления правой части нелинейных моментных уравнений. В [1] на ЭВМ решалась с помощью метода Рунге–Кутты следующая система моментных уравнений:

$$dC_r/dt = \sum_{r_1 r_2} K_{r_1 r_2}^r C_{r_1} C_{r_2}. \quad (2)$$

Аналитическому вычислению матрицы $K_{r_1 r_2}^r$ в предположении независимости сечения от угла рассеяния посвящена работа [5]. В случае степенной зависимости сечения от энергии матричные элементы из [5] представляют собой шесть вложенных сумм. В данной работе с использованием α -метода матрица $K_{r_1 r_2}^r$ построена не только для изотропных по углам сечений, кроме того, существенно расширен по сравнению с [1] диапазон зависимости сечения от энергии. В частности, удалось построить матрицу для модели кулоновского взаимодействия частиц. Существенной особенностью нового представления матрицы $K_{r_1 r_2}^r$ является также уменьшение количества суммирований: для случая, предложенного в [1], вместо шести получается только четыре вложенные суммы. Уменьшение числа суммирований влияет как на уменьшение времени, так и на увеличение точности счета. В работе проводится анализ точности вычисления матрицы и показано, что с гарантированной точностью можно считать до 25–30 моментных уравнений. Приведены примеры, показывающие, насколько по сравнению с [1] увеличивается точность расчета ФР.

Постановка задачи

Для потенциала взаимодействия со степенной зависимостью от расстояния $V \sim 1/r^*$ дифференциальное сечение рассеяния известно, и зависимости от угла и скорости разделяются

$$q\sigma(g, z) = B_\gamma g^\gamma \chi(z)/4\pi \quad (B_\gamma = \text{const}, z = \sin^2 \theta/2). \quad (3)$$

Здесь g — относительная скорость; θ — угол рассеяния; $\sigma(g, z)$ — дифференциальное сечение взаимодействия частиц; $\gamma = (\kappa - 4)/\kappa$; $\chi(z)$ — угловая часть сечения рассеяния, которая однозначно определяется

параметром κ . Значение $\gamma = 0$ соответствует максвелловским молекулам, а $\gamma = 1$ — твердым шарам. В [1] показатели степени γ выбирались из области

$$-0.5 \leq \gamma \leq 1, \quad (4)$$

сечение $\sigma(g, z)$ считалось не зависящим от углов ($\chi(z) = 1$).

В кинетической теории широко используется разложение ФР по ортогональным полиномам Сонина (Лагерра). Если выполнен критерий Греда, то изотропная ФР может быть представлена в виде

$$f(v, t) = M(v, T_{eq}) \sum_{r=0}^{\infty} C_r(t) S_{1/2}^r(mv^2/2kT_{eq}). \quad (5)$$

Здесь $M(v, T) = (m/(2kT\pi))^{3/2} \exp(-mv^2/2kT)$ — максвеллиан. Если подставить (5) в правую часть уравнения Больцмана, затем умножить обе части уравнения на $S_{1/2}^r(mv^2/2kT_{eq})$ и проинтегрировать по \mathbf{v} , то получим систему уравнений (2), где матрица $K_{r_1 r_2}^r$ определяется через интеграл столкновений $\hat{I}(f, f)$ следующим образом:

$$K_{r_1 r_2}^r = 4\pi \left(\int_0^{\infty} S_{1/2}^{r_1} \hat{I} \left(M S_{1/2}^{r_1}, M S_{1/2}^{r_2} \right) v^2 dv \right) / \nu_r, \quad (6)$$

$$\nu_r = (2r + 1)!! / (2r)!! \quad (7)$$

Здесь ν_r — квадрат нормы полинома Сонина. В [1,5] в качестве базисных функций рассматривались нормированные полиномы Сонина $\Phi_r(x) = S_{1/2}^r(x) / \nu_r^{1/2}$. Соответственно коэффициенты разложения C_r в (5) отличаются от используемых в [1] множителем $\nu_r^{1/2}$, а матричные элементы $K_{r_1 r_2}^r$ (6) — множителем $(\nu_r / (\nu_{r_1} \nu_{r_2}))^{1/2}$.

В реальных расчетах разложение (5) нужно обрезать и считать $C_r = 0$, если r больше некоторого N . В [1] утверждается, что для γ из области (4) матрица $K_{r_1 r_2}^r$ обладает такими свойствами, что ошибка, возникающая при обрезании моментов C_r , не превосходит 1 %, если $r \leq N - 4$. Следует отметить, что при $\gamma = 0$ можно доверять всем N моментам, так как для максвелловских молекул $K_{r_1 r_2}^r = 0$ вне области

$$r_1 = r_2 = r \quad (8)$$

и обрезанные моменты вообще не влияют на скорость релаксации первых N моментов. Кроме того, вопрос о том, скольким моментам можно доверять при решении системы (2), в большой степени зависит от вида ФР, и реально хорошие результаты можно получить только тогда, когда $C_r(t)$ достаточно быстро стремятся к нулю при $r \rightarrow \infty$. Таким образом, точность расчета моментов при обрезании больше зависит от начальных условий, чем от вида матрицы $K_{r_1 r_2}^r$.

Обрезание ряда (5) может сильно исказить хвосты ФР и, как эмпирически было показано в [3], область изменения скоростей, где представление (5) хорошо сходится, тем больше, чем больше N . В связи с

этим важно уметь вычислять матрицу $K_{r_1 r_2}^r$ при больших r, r_1, r_2 . Как отмечалось в [5], при расчете каждого матричного элемента приходилось проводить N^6 операций, поэтому из соображений затрат машинного времени автор ограничивался N , равным 20. Кроме того, при таком числе операций очень быстро нарастали погрешности и реально в [1] расчеты проводились до $N = 13$.

В связи с вышеизложенным актуальной представляется задача построения матрицы $K_{r_1 r_2}^r$ в более широком диапазоне N и с более высокой точностью, чем в [1], для чего целесообразно разработать новые алгоритмы вычисления матричных элементов.

Построение ядра столкновительного оператора для произвольных сечений взаимодействия

Как показано в [2], уравнение Больцмана в α -представлении ($\alpha = m/(2kT)$) имеет вид

$$n \frac{\partial \varphi}{\partial t} = n^2 \int_0^{\infty} A(T, T_1, T_2) \varphi(T_1, t) \varphi(T_2, t) dT_1 dT_2. \quad (9)$$

Здесь n — числовая плотность частиц, а Φ в v -пространстве связана с $\varphi(T, t)$ следующим образом:

$$f(v, t) = \int_0^{\infty} M(v, T) \varphi(T, t) dT. \quad (10)$$

Ядро $A(T, T_1, T_2)$ представляет собой отображение интеграла столкновений от двух максвеллианов $J^m(T_1, T_2, v)$ в α -пространство

$$J^m(T_1, T_2, v) = n^2 \int_0^{\infty} M(v, T) A(T, T_1, T_2) dT. \quad (11)$$

Ортогональной с максвелловским весом системе полиномов Сонина $S_{1/2}^r$ в v -пространстве соответствует биортогональная система функций s_L^r и s_R^r в α -пространстве [6]. Поскольку максвеллиан является производящей функцией для полиномов Сонина, то последние легко преобразуются в α -пространство — они представляют собой производные от δ -функций

$$S_{1/2}^r(mv^2/2kT_0) = \int_0^{\infty} M(v, T) s_R^r(T, T_0) dT, \quad (12)$$

$$s_R^r(T, T_0) = (T_0)^r \delta^{(r)}(T - T_0) / r!. \quad (13)$$

Функции $s_L^r(T, T_0)$ имеют вид

$$s_L^r = (1 - T/T_0)^r. \quad (14)$$

Ортогональность в v -пространстве заменяется в α -пространстве на следующее условие:

$$\int_0^\infty s_L^i s_R^j dT = \delta_{ij}. \quad (15)$$

В [6] показано, что интеграл столкновений от двух максвеллианов с температурами T_1 и T_2 в случае изотропной релаксации имеет вид

$$J^m(T_1, T_2, v) = \frac{16n^2 e^{-\frac{\lambda v^2}{T_1 T_2}}}{\pi(T_1 T_2)^{3/2}} \int_0^\infty dg \int_0^1 dz \tilde{P}(g, z) g \sigma(g, z), \quad (16)$$

$$P(g, z) = g \exp(- (g^2/T_2 + \Delta z g^2/(T_1 T_2))) \text{sh}(vgr)/r, \quad (17)$$

$$\tilde{P}(g, z) = P(g, z) - P(g, 0), \quad (18)$$

$$r = (2T_1^2 + z\lambda\Delta)^{1/2}/(T_1 T_2), \quad \lambda = T_1 + T_2, \quad \Delta = T_1 - T_2. \quad (19)$$

В (16)–(19) под T_1 и T_2 подразумеваются величины $2kT_1/m$ и $2kT_2/m$.

Чтобы построить ядро $A(T, T_1, T_2)$ для произвольных сечений, предлагается в (16) провести разложение вероятности перехода $g\sigma(g, z)$ по некоторым функциям, с помощью которых легко проводятся интегрирования по g и z . Будем представлять функцию $g\sigma(g, z)$ в виде интеграла Лапласа

$$g\sigma(g, z) = \int_0^\infty e^{-\beta g^2} S(\beta, z) d\beta. \quad (20)$$

По существу предлагается представлять интеграл столкновений с произвольным сечением в виде суперпозиции столкновительных интегралов с сечениями вида $e^{-\beta g^2} \chi(z)/g$. Возможность такого разложения обусловлена тем, что сечение рассеяния входит линейно в нелинейный интеграл столкновений.

В случае степенных потенциалов, когда сечение представляется в форме (3), его отображение $S(\beta, z)$ вычисляется аналитически

$$S(\beta, z) = B_\gamma \chi(z) / (4\pi \Gamma((2-\gamma)/2)) \frac{d}{d\beta} \left(\frac{\theta(\beta-0)}{\beta^{\gamma/2}} \right). \quad (21)$$

Здесь $\Gamma(x)$ — гамма-функция, а $\theta(x)$ — функция скачка Хэвисайда. Функция $\theta(\beta-0)$ представляет собой предел функции $\theta(\beta-\varepsilon)$ при $\varepsilon \rightarrow 0$ и равна нулю при $\beta = 0$. Формула (21) проверяется подстановкой в (20) и непосредственным интегрированием. В случае псевдомаквелловских молекул ($\gamma = 0$) функция $S(\beta, z)$ пропорциональна дельта-функции $\delta(\beta)$. Для кулоновского потенциала ($\gamma = -3$)

$$\sigma(g, \theta) = e^4 / (m^2 g^4 z^2) \quad (B_{-3} = 4\pi e^4 / m^2, \chi(z) = 1/z^2), \quad (22)$$

$$S(\beta, z) = \frac{3e^4 \sqrt{\beta}}{2m^2 z^2 \Gamma(5/2)}. \quad (23)$$

Здесь e — заряд электрона, а m — его масса. Возвращаясь к вычислению ядра, подставим (21) в (20), а затем (20) в (16) и проинтегрируем по g . При этом используем формулу

$$\int_0^{\infty} x e^{-\nu x^2} \operatorname{sh}(\kappa x) dx = \frac{\kappa \pi^{1/2}}{4\nu^{3/2}} \exp\left(\frac{\kappa^2}{4\nu}\right). \quad (24)$$

В результате (16) принимает вид

$$J^m(T_1, T_2, \nu) = \int_0^{\infty} d\beta \frac{4\pi n^2}{(1 + \lambda\beta)^{3/2}} \int_0^1 dz S(\beta, z) (M(\nu, P) - (M(\nu, P)|_{z=0})), \quad (25)$$

$$P = (1 + \lambda\beta)/(QT_1T_2), \quad Q = \Delta z/(T_1T_2) + 1/T_2 + \beta. \quad (26)$$

Поскольку при переходе в α -пространство максвеллиан отображается в δ -функцию, то из (25), (26) можно получить следующее выражение для ядра:

$$A(T, T_1, T_2) = \int_0^{\infty} \int_0^1 d\beta dz S(\beta, z) A_{\beta z}(T, T_1, T_2), \quad (27)$$

$$A_{\beta z}(T, T_1, T_2) = \frac{4\pi}{(1 + \lambda\beta)^{3/2}} (\delta(T - T_b z - T_a(1 - z)) - \delta(T - T_a)), \quad (28)$$

$$T_a = \frac{T_1(1 + \beta T_2)}{1 + \lambda\beta}, \quad T_b = \frac{T_2(1 + \beta T_1)}{1 + \lambda\beta}. \quad (29)$$

Если в формулах (27)–(29) положить $\beta = 0$, то получим ядро для модели максвелловских молекул. Следует отметить, что для произвольных сечений законы сохранения выполнены уже на уровне $\beta - z$ -ядер $A_{\beta z}$, т.е.

$$\int_0^{\infty} A_{\beta z} dT = 0, \quad \int_0^{\infty} T(A_{\beta z}(T, T_1, T_2) + A_{\beta z}(T, T_2, T_1)) dT = 0.$$

Для дальнейших расчетов разложим $A_{\beta z}$ (28) в ряд Тейлора по z

$$A_{\beta z} = \frac{4\pi}{(1 + \lambda\beta)^{3/2}} \sum_{q=1}^{\infty} \frac{\delta^{(q)}(T - T_a)(-\Delta z)^q}{q!(1 + \lambda\beta)^q}. \quad (30)$$

По существу формула (30) представляет собой разложение $\beta - z$ -ядра по отображениям полиномов Сонина $s_R^q(T, T_a)$ (13) в α -пространство около точки T_a . Переразложим (30) по тем же функциям s_R^q , но уже около точки T_1

$$A_{\beta z} = \frac{4\pi}{(1 + \lambda\beta)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} s_R^l(T, T_1) \Psi_l(T_1, T_2). \quad (31)$$

Для определения коэффициентов $\Psi_l(T_1, T_2)$ умножим обе части (31) на $s_L^r(T, T_1)$ (14), проинтегрируем по T и воспользуемся свойством (15)

$$\Psi_l(T_1, T_2) = \frac{(1 - \lambda\beta)^{3/2}}{4\pi} \int A_{\beta z} s_L^r(T, T_1) dT. \quad (32)$$

Подставляя (32) в (31) и проводя интегрирование по T , после ряда несложных выкладок получаем следующее выражение для $A_{\beta z}$:

$$A_{\beta z} = \frac{4\pi}{(1 + \lambda\beta)^{3/2}} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\delta^{(l)}(T - T_1)}{(1 + \lambda\beta)^l} \sum_{q=1}^l \frac{(-\Delta z)^q (\beta T_1)^{l-q}}{q!(l-q)!}. \quad (33)$$

Теперь для сечений типа (21) наиболее удобно, используя (33), провести в (27) интегрирование по β . Вся зависимость от β в (27) входит только через следующий интеграл:

$$I_{\beta} = \int_0^{\infty} d\beta \frac{\beta^{l-q}}{(1 + \lambda\beta)^{l+3/2}} \frac{d}{d\beta} \left(\frac{\theta(\beta - 0)}{\beta^{\mu}} \right) d\beta. \quad (34)$$

Здесь и ниже вместо γ будем использовать показатель μ , равный $\gamma/2$. Интеграл (34) для $\mu \neq 0$ после интегрирования по частям и использования свойств Γ -функций приводится к виду

$$I_{\beta} = - \frac{\Gamma(l - q - \mu) \Gamma(q + 3/2 + \mu)}{\lambda^{l-q-\mu} \Gamma(l + 5/2)} (l + 3/2) \mu. \quad (35)$$

Если $\mu = 0$, то $I_{\beta} = \delta_{lq}$. Таким образом, для любых сечений типа (3) ядро $A(T, T_1, T_2)$ имеет вид

$$A = \frac{4\pi\mu}{\Gamma(1 - \mu)} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\delta^{(l)}(T - T_1)}{\Gamma(l + 3/2)} \sum_{q=1}^l \frac{(-\Delta)^q T_1^{2(l-q)} \Gamma(l - q - \mu) \Gamma(q + 3/2 + \mu)}{q!(l-q)! \lambda^{l-q-\mu}} J_q. \quad (36)$$

Вся зависимость от угла рассеяния входит в (36) через функцию J_q

$$J_q = B_{\gamma} / 4\pi \int_0^1 \chi(z) z^q dz. \quad (37)$$

Для изотропных сечений $\chi(z) = 1$ и $J_q = B_\gamma/(q+1)/4\pi$. В случае обрезанного кулоновского потенциала нижний предел в J_q не нуль, а некоторое z_0 , соответствующее минимальному углу рассеяния θ_0 (более подробно о выборе минимального угла рассеяния см. в [6]). Сопоставляя с (22), для J_q в случае кулоновского потенциала получаем

$$J_q = \frac{\epsilon^4}{m^2} \int_{z_0}^1 z^{q-2} dz = \frac{\epsilon^4}{m^2} \times \begin{cases} 2 \ln \left(\frac{1}{\sin \theta_0/2} \right), & q = 1, \\ 1/(q-1), & q > 1. \end{cases} \quad (37a)$$

В случае классической теории рассеяния минимальный угол θ_0 связан с дебаевским радиусом λ_D по формуле $\sin \theta_0/2 = e^2/\lambda_D m g^2$, где $\lambda_D = (kT_e/4\pi n e^2)^{1/2}$, T_e — средняя температура электронного газа. Логарифмический множитель в (37a), появление которого характерно для кулоновского взаимодействия, называется кулоновским логарифмом. Оценивая под знаком логарифма $\sin(\theta_0/2) \simeq \theta_0/2$, $m g^2 \simeq 3T_e$, можно получить кулоновский логарифм в виде $\ln \Lambda = \ln(12\pi n \lambda_D^3)$.

С целью проверки правильности формулы (36) рассмотрим рассеяние максвеллиана с температурой T_1^* на максвелловском фоновом газе с температурой T_2^* и построим функцию, соответствующую производству энергии dE/dt . Для этого в правой части уравнения (9) заменим произведение функций $\varphi(T_1)\varphi(T_2)$ на произведение двух δ -функций $\delta(T_1 - T_1^*)\delta(T_2 - T_2^*)$, умножим обе части уравнения на $3T/4m$ и проинтегрируем по T . В результате (вспоминая, что под T подразумевалось $2kT/m$) получаем

$$\frac{dE}{dt} = \frac{4\pi n^2(3/2kT_2^* - 3/2kT_1^*)\Gamma(\mu + 5/2)J_1}{(2k/mT_2^* + 2k/mT_1^*)^{-\mu}\Gamma(5/2)}. \quad (38)$$

В случае максвелловских молекул ($\mu = 0$), $J_1 = 0.422(B_{12}/M_{12})/4$, где M_{12} — приведенная масса, B_{12} — коэффициент пропорциональности в силовом законе взаимодействия частиц [7], и (38) принимает вид

$$\frac{dE}{dt} = \pi n^2 0.422(B_{12}/M_{12})(3/2kT_2^* - 3/2kT_1^*). \quad (39)$$

Для модели твердых шаров ($\mu = 0.5$, $B_1 = 4\pi r^2$, где r — радиус частицы) $J_1 = r^2/2$ и (38) переходит в

$$\frac{dE}{dt} = \frac{16n^2\sqrt{\pi}r^2}{3}(2k/m(T_2^* + T_1^*))^{1/2}(3/2kT_2^* - 3/2kT_1^*). \quad (40)$$

В случае кулоновского взаимодействия ($\mu = -1.5$), $J_1 = 2e^4 \ln \Lambda/m^2$ и

$$\frac{dE}{dt} = \frac{32n^2\sqrt{\pi}e^4(3/2kT_2^* - 3/2kT_1^*)}{3m^2(2k/mT_2^* + 2k/mT_1^*)^{3/2}}. \quad (41)$$

Изучению релаксации импульса и энергии в газовых смесях посвящена работа [8], где, в частности, для описанных выше трех сечений выводятся выражения для производства энергии в случае взаимодействия двух максвеллианов с разными массами и различными температурами. Если в этих выражениях положить $m_1 = m_2 = m$, $n_1 = n_2 = n$ и $\Delta U = 0$, то получим выражения (39)–(41).

Построение матрицы $K_{r_1 r_2}^r$

Систему моментных уравнений (2) можно построить исходя из α -представления уравнения Больцмана (9). С этой целью используем описанную выше биортогональную систему функций s_L^r и s_R^r (13), (14). Представим в правой части (9) функции $\varphi(T)$ в виде ряда

$$\varphi(T, t) = \sum_0^{\infty} C_r(t) s_R^r(T, T_{eq}), \quad (42)$$

где

$$C_r(t) = \int_0^{\infty} \varphi(T, t) s_L^r(T, T_{eq}) dT. \quad (43)$$

Чтобы получить (2), умножим обе части (9) на $s_L^r(T, T_{eq})$ и проинтегрируем по T . При этом для матрицы $K_{r_1 r_2}^r$ получаем

$$K_{r_1 r_2}^r = n^2 T_{eq}^{r_1 + r_2} (-1)^{r_1 + r_2} \times \\ \times \frac{d^{r_1 + r_2}}{dT_1^{r_1} dT_2^{r_2}} \left(\int_0^{\infty} dT \left(1 - \frac{T}{T_{eq}} \right)^r A(T, T_1, T_2) \frac{T_1^{r_1} T_2^{r_2}}{r_1! r_2!} \right)_{\substack{T_1 = T_{eq} \\ T_2 = T_{eq}}} \quad (44)$$

Подставим выражение для ядра, соответствующее степенным потенциалам, (36) в (44). Поскольку в (36) зависимость от T входит только через функции $\delta^{(l)}(T - T_1)$, то интегрирование в (44) выполняется аналитически и после дифференцирования по T_1 и T_2 получаем следующее выражение для матричных элементов:

$$K_{r_1 r_2}^r = \frac{4\pi (-1)^{r+r_1} r! n^2 \Gamma(\mu + 5/2)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{4kT_{eq}}{m} \right)^\mu \times \\ \times \sum_{q=1}^r \frac{\{(\mu + 5/2) \dots (\mu + 5/2 + q - 2)\}}{q!} J_q \sum_{i=\max(0, q-r_1)}^{\min(r_2 q)} \binom{q}{i} \frac{2^i}{(r_2 - i)!} \times \\ \times \sum_{l=\max(q, r-r_1+q-i)}^r \frac{(2l - 2q - 1)!! (-1)^l 2^{l+1}}{(2l + 1)!! (r - l)!} \times \\ \times \sum_{j=\max(0, m_1 - m_2)}^{m_1} \frac{(-1)^j \{(-\mu) \dots (-\mu + j + m_3 - 1)\}}{j! 2^j (m_1 - j)! (j - m_1 + m_2)!}. \quad (45)$$

Здесь $m_1 = r_1 - r + l - q + i$, $m_2 = 2(l - q)$, $m_3 = l - q + r_2 - i$. Выражения в фигурных скобках представляют собой произведения $(a)_k = a(a + 1) \dots (a + k - 1)$ (символы Похгаммера), $(a)_0 = 1$.

Таблица 1. $D_{r_{10}}^r/D_{20}^2$ Твердые сферы, $2 \leq r, r_1 \leq 8$

1.0000	-.2315	-.0273	-.0065	-.0020	-.0007	-.0002
-.2315	1.6607	-.4230	-.0557	-.0147	-.0049	-.0018
-.0273	-.4230	2.1793	-.5851	-.0824	-.0233	-.0082
-.0065	-.0557	-.5851	2.6160	-.7266	-.1072	-.0319
-.0020	-.0147	-.0824	-.7266	2.9984	-.8529	-.1303
-.0007	-.0049	-.0233	-.1072	-.8529	3.3419	-.9678
-.0002	-.0018	-.0082	-.0319	-.1303	-.9678	3.6558

Таблица 2. $\tilde{D}_{r_{10}}^r/\tilde{D}_{20}^2$ Кулоновское взаимодействие, $2 \leq r, r_1 \leq 8$

1.0000	.6944	.4092	.2276	.1230	.0653	.0343
.6944	1.6607	1.2690	.8352	.5155	.3066	.1779
.4092	1.2690	2.1793	1.7553	1.2363	.8172	.5193
.2276	.8352	1.7553	2.6160	2.1797	1.6083	1.1165
.1230	.5155	1.2363	2.1797	2.9984	2.5588	1.9538
.0653	.3066	.8172	1.6083	2.5588	3.3419	2.9034
.0343	.1779	.5193	1.1165	1.9538	2.9034	3.6558

Если в случае кулоновского взаимодействия ($\mu = -1.5$) в сумме (45) сохранить только первый член при суммировании по q , то можно показать, что моментные уравнения с такой матрицей соответствуют приближению Ландау, т.е. учету рассеяния только на малые углы. Назовем такую матрицу $\tilde{K}_{r_1 r_2}^r$. Поправка

$$\Delta K_{r_1 r_2}^r = K_{r_1 r_2}^r - \tilde{K}_{r_1 r_2}^r \quad (46)$$

не дает вклада в законы сохранения, но может оказаться существенной в старших моментах. В данной работе для модели обрезанного кулоновского потенциала будем рассматривать только матрицу $\tilde{K}_{r_1 r_2}^r$.

Для произвольных сечений обозначим через $D_{r_1 r_2}^r(\mu)$ величину $(K_{r_1 r_2}^r + K_{r_2 r_1}^r)(\nu_r/(\nu_{r_1} \nu_{r_2}))^{1/2}$, где ν_r определяется формулой (7). Кроме того, будем обозначать через $\tilde{D}_{r_1 r_2}^r(\mu)$ соответствующую величину при $q = 1$. В качестве единицы измерения времени обычно используется время релаксации $\tau_{1\mu} = 1/(nB_V(kT_{eq}/m)^\mu)$. Однако для сравнения процессов при различных сечениях, следуя [1], мы часто будем использовать время $\tau_{2\mu} = D_{20}^2(\mu)\tau_{1\mu}/D_{20}^2(0)$. В этих единицах младший ненулевой диагональный элемент D_{20}^2 равен $-1/3$, т.е. совпадает с соответствующим собственным значением для псевдомаксвелловских молекул. Были рассчитаны значения матричных элементов $-D_{r_1 0}^r \tau_{1\mu}$ и $-D_{r_0}^r \tau_{1\mu}$ для изотропного сечения взаимодействия при $\mu = 0.25$ и $r_1, r \leq 8$. Эти значения полностью совпали с соответствующими значениями из таблицы, приведенной в [1]. В табл. 1 и 2 приведены такие же значения матричных элементов для твердых шаров и обрезанного кулоновского потенциала, но отнесенные к $-D_{20}^2 \tau_{1\mu}$ при $\mu = 0.5$ в первом случае и к $-\tilde{D}_{02}^2 \tau_{1\mu}$ при $\mu = -1.5$ во втором.

В заключение этого раздела отметим следующее свойство матрицы, справедливое для любых сечений взаимодействия при всех r_1 и r_2 и $r < 4$:

$$D_{r_1 r_2}^r / \tilde{D}_{r_1 r_2}^r = D_{02}^2 / \tilde{D}_{02}^2, \quad (47)$$

т. е. усечение матрицы при суммировании по q для первых матричных элементов эквивалентно умножению их на одно и то же число. Это же свойство в силу свойства симметрии $D_{0r_2}^r = D_{0r}^{r_2}$ справедливо для всех линеаризованных элементов матрицы $D_{0r_2}^r$, если $r_2 < 4$.

Исследование точности расчета матрицы $K_{r_1 r_2}^r$

В [1] расчеты проводились на ЭВМ CDC с двойной точностью и точность проверялась по псевдомаксвелловским молекулам, для которых помимо общего выражения (45) при $\mu = 0$ есть известная простая формула [3]

$$K_{r_1 r_2}^r = n^2 \left(\frac{\delta_{r, r_1 + r_2}}{r + 1} - \delta_{r_2, 0} \delta_{r, r_1} \right). \quad (48)$$

Был отмечен линейный характер роста зависимости порядка погрешности от номера r . Гарантировалась точность 10^{-5} при $r_1, r_2, r \leq 15$. Неявно предполагалось, что аналогичные оценки справедливы для всех сечений из области

$$-0.5 < \mu < 0.5. \quad (49)$$

Наши расчеты по формуле (45) проводились на ПЭВМ типа РС/АТ. Главную трудность при организации программы составил расчет факториальных сумм при больших значениях аргумента. Эту трудность удалось преодолеть за счет перехода от факториалов к рекуррентным соотношениям. Продемонстрируем это на примере самой внутренней суммы. Представим ее в виде

$$S = \sum_{j=\max(0, m_1 - m_2)}^{m_1} C(j), \quad (50)$$

$$C(j) = \frac{(-1)^j \{(-\mu) \dots (-\mu + j + m_3 - 1)\}}{j! 2^j (m_1 - j)! (j - m_1 + m_2)!}. \quad (51)$$

Для выражения (51) справедливо следующее рекуррентное соотношение:

$$C(j) = -C(j-1)/j \cdot (m_1 - j + 1)/(j - m_1 + m_2) \cdot (-\mu + m_3 + j - 1)/2. \quad (52)$$

Кроме того, первый член суммы выносился за знак суммирования, т. е. первый член в (50) полагался равным единице. Аналогичные преобразования выполнялись и во всех последующих суммах. Рекуррентные соотношения использовались и при изменении внешнего параметра r_1 . При каждом фиксированном r расчет начинался с диагонального элемента $r_1 = r$ при $r_2 = 0$ сначала в сторону убывания r_1 , а затем в сторону возрастания. Затем проводился перебор всех значений r_2 .

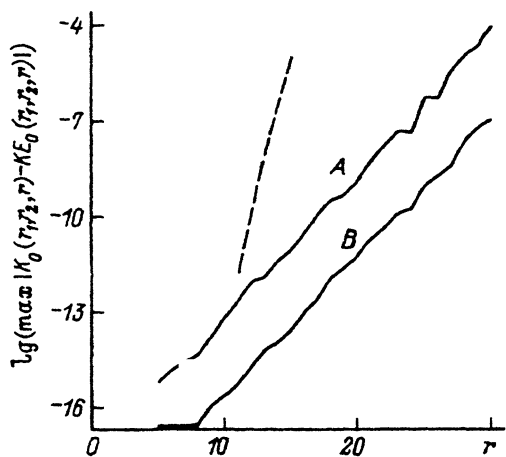


Рис. 1. Зависимости максимальных погрешностей при расчетах *A* и *B* от r для псевдомаксвелловских молекул.

Штриховая кривая — аналогичная зависимость из работы [1].

В результате в программе нет обращения к факториалам и появилась возможность увеличить точность расчетов с одновременным увеличением числа N .

В случае больших значений r , r_1 , r_2 необходимо было оценить точность вычисления матрицы (45) при разных сечениях рассеяния. Для этого в программе расчета матричных элементов использовалась различная точность вычисления — расчет *A* (8 байт) и расчет *B* (10 байт). Обозначим через $KA_\mu(r_1, r_2, r)$ и $KB_\mu(r_1, r_2, r)$ значения элементов матрицы, полученные в расчетах *A* и *B* соответственно, и покажем, как, сопоставляя эти расчеты, можно оценить погрешность вычислений по формуле (45).

В случае максвелловских молекул ($\mu = 0$) обозначим через $KE_0(r_1, r_2, r)$ расчет по формуле (48) и на каждом слое (8) при $r = \text{const}$ вычислим максимальные погрешности

$$DA = KA_0(r_1, r_2, r) - KE_0(r_1, r_2, r), \quad (53)$$

$$DB = KB_0(r_1, r_2, r) - KE_0(r_1, r_2, r). \quad (54)$$

На рис. 1 в логарифмическом масштабе построены зависимости максимальных погрешностей $|DA|$ и $|DB|$ от r . Нижняя сплошная кривая соответствует расчету *B*, а верхняя — *A*. Штриховая кривая соответствует результатам работы [1]. Можно утверждать, что в случае $\mu = 0$ максимальная ошибка вычислений по формулам из [1] при $N = 13$ совпадает с аналогичной ошибкой в расчетах по формулам (45) при $N = 30$ и не превосходит 10^{-7} . Таким образом, уменьшение числа суммирований при вычислении матричных элементов позволяет существенно увеличить число членов разложения ФР при сохранении высокой точности вычисления. Из расчетов и рис. 1 следует также, что для максвелловских молекул погрешности между расчетами *A* и *B* различаются на три порядка. Поскольку $|DB| \ll |DA|$, то погрешность *DA* можно оценить по формуле

$$DA \cong DAB = KA_0(r_1, r_2, r) - KB_0(r_1, r_2, r). \quad (55)$$

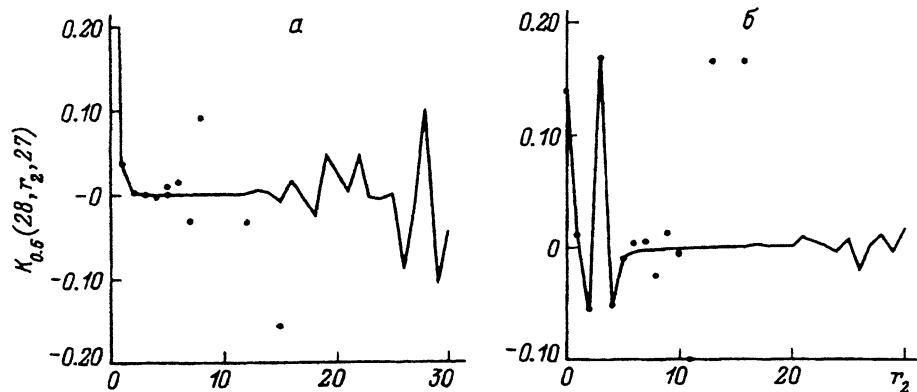


Рис. 2. Зависимости $K_{0.5}(r_1, r_2, r)$ от r_2 для модели твердых шаров.

Поэтому DA можно определять по (55), не обращаясь к $KE_0(r_1, r_2, r)$, а погрешность расчета B считать равной $10^{-3}|DA|$. Такой метод оценки погрешности может быть использован и для других сечений.

В работе [1] утверждается, что для всех μ , удовлетворяющих неравенству (49), можно пользоваться той же оценкой погрешности, что и для максвелловских молекул. Однако наши расчеты показали, что даже в области (8), т.е. там, где существуют ненулевые матричные элементы для максвелловских молекул, при условии $r, r_1, r_2 \leq 30$ максимальная относительная погрешность расчета A для модели твердых шаров приблизительно равна 0.05 и не совпадает с максимальной относительной погрешностью для псевдомакселловских молекул (≈ 0.005).

Теперь рассмотрим поведение матрицы для твердых шаров ($\mu = 0.5$) вне области (8). При больших значениях индексов r и r_1 матричные элементы как функции от r_2 имеют острый максимум либо при $r_2 = 0$ (если $r \leq r_1$), либо в точке $r_1 + r_2 = r$. В остальных точках они с ростом r_2 монотонно стремятся к нулю. На рис. 2, а отдельными точками представлена зависимость $KA_{0.5}(28, r_2, 27)$ от r_2 (начиная с $r_2 = 12$ точки расчета A выходят за границы рисунка), а сплошной линией — зависимость $KB_{0.5}(28, r_2, 27)$ от r_2 . На рис. 2, б приведены соответствующие кривые при $r_1 = 25, r = 28$. Можно отметить, что при больших значениях суммы $r + r_1 + r_2 = R$, близких к предельному значению 90, погрешности даже по расчету B становятся заметными. На каждом из рисунков отчетливо видно, что “шум” расчета B возникает там, где сами значения матричных элементов близки к нулю по сравнению с максимальным значением. Был проведен анализ кривых в области, где “шум” существенно превышает значения матричных элементов и фактически равен погрешности. Усреднение в одной и той же области расчетов A и B позволило вычислить отношение погрешностей этих расчетов при больших значениях R . Такой анализ показал, что это отношение близко к 1000, т.е. совпадает с оценкой для псевдомакселловских молекул. Это является дополнительным обоснованием предлагаемого метода оценки погрешности.

Вне области (8) значения матричных элементов достаточно резко стремятся к нулю с ростом r, r_1 и r_2 . Это позволяет при расчете релаксационных процессов исключить из рассмотрения матричные эле-

менты при больших значениях R , т.е. те, погрешность при расчете которых велика, но сохранить при этом 30 членов в разложении ФР (т.е. считать $N = 30$). Для этого ограничимся областью S , когда сумма $R \leq 2N$. Вне этой области матричные элементы считались равными нулю. Дополнительным обоснованием для такого обрезания является тот факт, что матричные элементы в моментных уравнениях входят в комбинации $K_{r_1 r_2}^r C_{r_1} C_{r_2}$. Как уже отмечалось, пользоваться моментным методом можно только в том случае, если C_r убывают с ростом r достаточно быстро. Если $R > 2N$, то $r_1 + r_2 > N$ и произведение $C_{r_1} C_{r_2}$ будет очень малой величиной. Поэтому соответствующий член будет давать малый вклад в производную dC_r/dt . Тщательный анализ показал, что наибольшая погрешность $|DB|$ достигается в основном на границе области S и при $N = 25$ не превосходит 10^{-8} , а при $N = 30$ — 10^{-5} .

В случае обрезанного кулоновского потенциала для матрицы $\tilde{K}_{r_1 r_2}^r$ были проведены исследования точности по той же схеме, как и для твердых шаров. Здесь уже при $r > 25$ максимальные погрешности расчета B становились заметными. Поэтому мы ограничились областью $r, r_1, r_2 \leq 25$. В данном случае $N = 25$ и область S уменьшается до $R = r + r_1 + r_2 \leq 50$. Максимальная относительная погрешность расчета B равна 0.03%. Здесь, как и в случае твердых шаров, всюду внутри области S будем использовать расчет B , а вне S положим матричные элементы равными нулю.

Примеры расчета релаксационных процессов

В случае изотропных сечений в [1] решается система (2) для начальных условий вида

$$C_n(0) = 2^{-n} \left(1 - n + \left(\frac{2}{5} + \frac{21}{4} \lambda \right) \binom{n}{2} - \frac{9}{2} \lambda \binom{n}{3} + \lambda \binom{n}{4} \right). \quad (56)$$

При таких начальных условиях для четырех значений $\gamma(-0.5, 0.5, 0, 1)$ при $\lambda = 0.3$ приводятся кривые $\Phi(x, t) = f(v, t)/f(v, \infty)$ (здесь $x = mv^2/2kT_{eq}$) при различных значениях t . Расчеты с приемлемой точностью проводятся только при $N = 13$.

Нами были проведены аналогичные расчеты при различных значениях N вплоть до $N = 30$. Расчеты моментной системы проводились методом Рунге–Кутты с шагом по времени, равным 0.05. Время отнесено ко времени релаксации $\tau_{2\mu}$. На рис. 3, а для модели твердых шаров ($\mu = 0.5$) представлено поведение ФР $\Phi(x, t)$, соответствующей начальным условиям (56) при $N = 13$, а на рис. 3, б — та же функция при $N = 30$. Заметно большое расхождение в области хвостов ФР. Вместе с тем ФР, построенная в [1], достаточно хорошо ведет себя в области больших скоростей и приближается к построенной нами при $N = 30$. Это связано с тем, что авторы [1] для повышения точности использовали специальный метод [9], основанный на применении паде-аппроксимации. Наши исследования показали, что этот метод иногда удивительно точно приближает ФР, но в некоторых случаях теряет устойчивость, т.е. незначительные возмущения используемых в аппроксимации параметров приводят к большим изменениям в ФР.

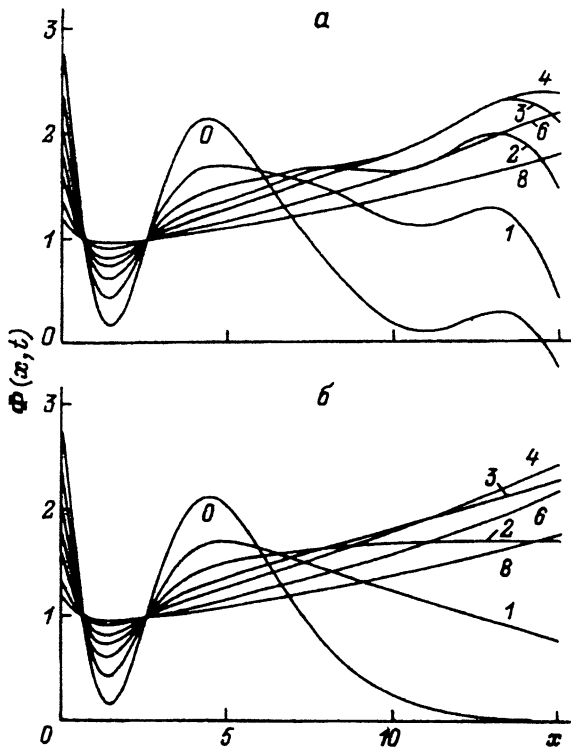


Рис. 3. Релаксация относительной функции распределения $\Phi(x, t)$ с начальными сонинскими моментами (56) для модели твердых шаров в моменты времени $t' = t/\tau_{2\mu} = 0, 1, 2, 3, 4, 6, 8$; а — $N = 13$, б — 30.

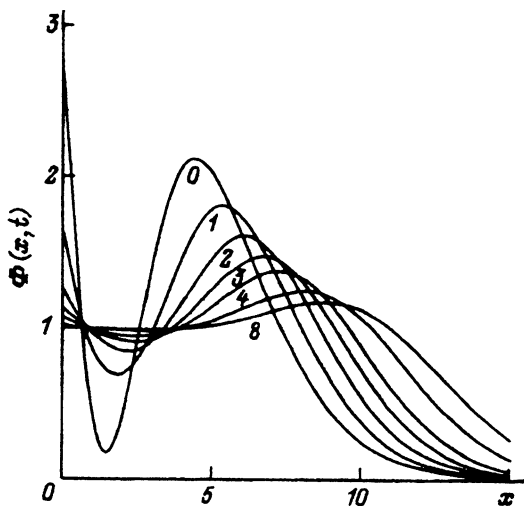


Рис. 4. То же, что и на рис. 3, при $\mu = -1.5$ и $N = 25$.

На рис. 4 представлена релаксация той же начальной ФР, но уже для модели обрезанного кулоновского взаимодействия. Можно отметить совершенно иное поведение хвостов. Если для модели твердых шаров хвосты релаксируют немонотонно сверху, то в случае кулоновского потенциала релаксация идет монотонно снизу. Таким образом, характер релаксационного процесса явно зависит от сечения взаимодействия. В [1] утверждается, что основные особенности ФР, такие как немонотонное приближение к равновесию, перезаселенность и недозаселенность хвостов ФР, связаны в основном с начальными условиями, а не с видом сечения взаимодействия. Этот вывод основан на изученных там нескольких начальных условиях при изотропных сечениях из достаточно узкой области изменения γ (4). Поэтому вопрос о зависимости релаксационного процесса от сечения взаимодействия требует дальнейшего исследования.

Список литературы

- [1] *Turchetti G., Paolilli M.* // Phys. Lett. 1982. Vol. 90. A. N 3. P. 123-126.
 - [2] *Эндер А.Я., Эндер И.А.* // ЖТФ. 1984. Т. 54. Вып. 9. С. 1671-1680.
 - [3] *Кольшкн И.Н., Эндер А.Я., Эндер И.А.* // Журн. вычисл. мат. и мат. физ. 1988. Т. 28. № 6. С. 901-916.
 - [4] *Кольшкн И.Н., Эндер А.Я., Эндер И.А.* // Моделирование в механике. Новосибирск, 1990. С. 54-64.
 - [5] *Barnsley M. and Turchetti G.* // Lett. Nuovo Cimento. 1982. Vol. 33. N 11. P. 347-351.
 - [6] *Эндер А.Я., Эндер И.А.* // Препринт ФТИ АН СССР. № 605. Л., 1979. 53 с.
 - [7] *Вальдман Л.* Термодинамика газов. М.: Машиностроение, 1970. 565 с.
 - [8] *Morse T.F.* // J. Phys. Fluids. 1963. Vol. 6, N 10. P. 1420-1427.
 - [9] *Barnsley M. and Turchetti G.* // Lett. Nuovo Cimento. 1979. Vol. 26. N 6. P. 188-192.
-