

01;03

Нелинейный моментный метод для изотропного уравнения Больцмана и инвариантность интеграла столкновений

© А.Я. Эндер¹, И.А. Эндер²¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия² Санкт-Петербургский государственный университет,
199034 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 20 февраля 1998 г.)

Предлагается новый подход к развитию нелинейного моментного метода решения уравнения Больцмана. Этот подход основан на принципе инвариантности интеграла столкновений по отношению к выбору базисных функций. В качестве последних для изотропного по скоростям уравнения Больцмана выбираются полиномы Сонина с максвелловской весовой функцией. Показано, что для произвольных сечений взаимодействия матричные элементы, соответствующие моментам от нелинейного интеграла столкновений, не независимы, а связаны простыми рекуррентными связями, с помощью которых все нелинейные матричные элементы выражаются через линейные. В результате построена высокоэффективная численная схема расчета нелинейных матричных элементов. Предлагаемый подход открывает перспективы как расчета релаксационных процессов в области больших скоростей, так и решения более сложных кинетических задач.

Введение

Основные математические результаты по решению уравнения Больцмана относятся к линеаризованному уравнению и к слабым отклонениям от равновесия [1–3]. Аналитические решения нелинейного уравнения Больцмана известны в очень ограниченном числе случаев [4]. Существующие численные методы решения (в основном различные модификации методов Монте-Карло) дают только грубое представление о поведении функции распределения (ФР) в области больших скоростей [5]. Вместе с тем поведение ФР в области больших энергий оказывается определяющим в целом ряде физико-химических процессов.

В 1982 г. появилась работа [6], где впервые с помощью нелинейного моментного метода были проведены систематические расчеты ФР в области больших скоростей для изотропного уравнения Больцмана. При этом ФР представлялась в виде отрезка ряда по полиномам Сонина и для описания хвостов ФР использовались высокие моменты. Основной трудностью в этом методе является расчет матрицы взаимодействия, соответствующей моментам от нелинейного интеграла столкновений. Даже в случае изотропного по скоростям уравнения Больцмана задача оказывается достаточно сложной. Так, в названной работе, где рассматриваются степенные потенциалы в предположении независимости сечения рассеяния от углов, полученные аналитические формулы для матричных элементов содержат 6 вложенных сумм. Вычислительные трудности при этом катастрофически нарастают с ростом количества учитываемых моментов, что не дает возможности продвинуться выше 13-го момента.

Ранее авторами работы был разработан метод интегрального преобразования нелинейного уравнения Больцмана, в котором ФР и интеграл столкновений

представляются в виде суперпозиции максвелловских распределений и для весовой функции строится уравнение (α -представление уравнения Больцмана), эквивалентное уравнению Больцмана в v -пространстве [7,8]. В работе [9] рассматривается такой же, как и в [6], моментный метод, но применение развитого при разработке α -представления математического аппарата позволило получить формулы для матричных элементов в случае произвольных степенных потенциалов, в том числе и для кулоновского взаимодействия частиц, причем формулы получаются значительно проще (4 вложенные суммы), что позволило при той же точности продвинуться до 30-го момента.

В [10] для анализа матричных элементов было предложено использовать инвариантность интеграла столкновений от максвелловской ФР по отношению к выбору базисных функций. В качестве последних рассматривались полиномы Сонина с различными температурами максвеллианов, характеризующих разложение. В результате были получены некоторые соотношения между матричными элементами, которые использовались как критерии правильности вычислений. Особо подчеркивалось, что при произвольных сечениях взаимодействия нелинейные матричные элементы не являются независимыми, а между ними существуют некоторые связи.

В данной работе идея инвариантности обобщается на интеграл столкновений от произвольной ФР. В результате получены самые детальные связи, позволившие выразить нелинейные матричные элементы через линейные. Эти соотношения позволяют проследить, как основные свойства линейных элементов отражаются на нелинейных. Кроме того, эти более детальные связи могут использоваться для проверки правильности вычислений. И наконец, на эти соотношения можно смотреть как на рекуррентные формулы для вычисления нелинейных матричных элементов через линейные.

Инвариантность описания релаксационных процессов

При применении моментного метода к изотропным задачам ФР раскладывают по полиномам Сонина с максвелловским весом

$$f(v, t) = n_0 M(v, T) \sum_{r=0}^{\infty} C_r(T) S_{1/2}^r(mv^2/2kT). \quad (1)$$

Здесь $M(v, T) = (m/2kT\pi)^{3/2} \exp(-mv^2/2kT)$ — максвеллиан; n_0 — числовая плотность частиц. Известно, что этот ряд сходится, если выполнен критерий Греда (более подробно об этом см. в [8]). Если подставить (1) в правую часть уравнения Больцмана, затем умножить обе части уравнения на $S_{1/2}^r(mv^2/2kT)$ и проинтегрировать по v , то получим систему уравнений

$$dC_r/dt' = \sum_{r_1, r_2} K_{r_1, r_2}^{r'}(T) C_{r_1} C_{r_2}, \quad t' = t/\tau. \quad (2)$$

Безразмерная матрица $K_{r_1, r_2}^{r'}$ определяется через интеграл столкновений $\hat{I}(f, f)$ следующим образом:

$$K_{r_1, r_2}^{r'}(T) = 4\pi n_0 \tau \left(\int_0^{\infty} S_{1/2}^r \hat{I} \left(MS_{1/2}^{r_1}, MS_{1/2}^{r_2} \right) v^2 dv \right) \nu_r, \quad \nu_r = (2r+1)!!/(2r)!! \quad (3)$$

где ν_r — квадрат нормы полинома Сонина; ниже штрихи будем опускать, и вопрос о выборе τ будет оговариваться особо.

В [10] была выведена формула, позволившая проверить правильность вычисления матричных элементов. Эта формула выводилась из условия инвариантности интеграла столкновений от максвелловской ФР относительно выбора базиса и представляла собой следующую связь между матричными элементами:

$$\sum_{r_1=0}^N K_{r_1, N-r_1}^r = 0, \quad r, N = 0, \dots, \infty. \quad (4)$$

Равенства (4) выполняются для произвольных сечений рассеяния. Очевидно, что свойствами инвариантности должен обладать не только интеграл столкновений от максвеллиана, но и интеграл столкновений от произвольной ФР.

При разложении по полиномам Сонина следует учитывать, что они ортогональны с максвелловским весом, характеризующимся некоторой температурой T . Переход к другой температуре соответствует новой единице измерения скорости. По существу это переход к новому базису. Обычно в кинетической теории газов температура T выбирается равной равновесной температуре газа.

При переходе от одного базиса к другому удобно использовать α -представление ($\alpha = m/(2kT)$) уравнения Больцмана [7, 8]:

$$n_0 \frac{\partial \varphi}{\partial t} = n_0^2 \int_0^{\infty} A(T, T_1, T_2) \varphi(T_1, t) \varphi(T_2, t) dT_1 dT_2, \quad (5)$$

ФР в v -пространстве связана с $\varphi(T, t)$ следующим образом:

$$f(v, t) = \int_0^{\infty} M(v, T) \varphi(T, t) dT. \quad (6)$$

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

$$J^M(T_1, T_2, v) = n_0^2 \int_0^{\infty} M(v, T) A(T, T_1, T_2) dT. \quad (7)$$

Ортогональной с максвелловским весом системе полиномов Сонина $S_{1/2}^r(mv^2/T_*)$ соответствует биортогональная система функций s_L^r и s_R^r в α -пространстве [8]

$$s_R^r(T, T_*) = (T_*)^r \delta^{(r)}(T - T_*)/r!, \quad (8)$$

$$s_L^r(T, T_*) = (1 - T/T_*)^r. \quad (9)$$

Здесь $\delta^{(r)}(T - T_*)$ — производная порядка r от δ -функции. Обозначим для краткости $M(v, T) S_{1/2}^r(mv^2/2kT) = S_r(v, T)$. Тогда имеем

$$S_r(v, T_*) = \int_0^{\infty} M(v, T) s_R^r(T, T_*) dT, \quad (10)$$

и из (8), (9) следует

$$\int_0^{\infty} s_L^i(T, T_*) s_R^j(T, T_*) dT = \delta_{ij}. \quad (11)$$

Представим ФР в v -пространстве в двух базисах с температурами T_0 и T_1

$$f(v, t) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k^0(t) S_k(v, T_0) = \sum_{r=0}^{\infty} C_r^1(t) S_r(v, T_1). \quad (12)$$

Очевидно, что векторы C^0 и C^1 не меняются при переходе от v - к α -пространству и равенства (12) в α -представлении имеют вид

$$\varphi(T, t) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k^0(t) s_R^k(T, T_0) = \sum_{r=0}^{\infty} C_r^1(t) s_R^r(T, T_1). \quad (13)$$

Чтобы найти связь между векторами C^0 и C^1 , скалярно умножим обе части равенства (13) на $s_L^r(T, T_1)$. Тогда, используя (8), (9) и (11), получаем

$$C_r^1 = \sum_{k=0}^{\infty} d_{r,k}(T_1, T_0) C_k^0, \quad (14)$$

где элементы матрицы перехода из одного в другой базис $D(T_1, T_0)$ выражаются через скалярное произведение

$$d_{r,k}(T_1, T_0) = \int_0^{\infty} s_L^r(T, T_1) s_R^k(T, T_0) dT = \left(s_L^r(T, T_1), s_R^k(T, T_0) \right). \quad (15)$$

При этом сами полиномы Сонина преобразуются следующим образом:

$$s_R^r(T, T_1) = \sum_{k=0}^{\infty} d_{k,r}(T_0, T_1) s_R^k(T, T_0). \quad (16)$$

Используя простые в α -представлении выражения для s_L^r и s_R^k (8) и (9), получаем

$$d_{r,k}(T_1, T_0) = \begin{cases} \binom{r}{k} (T_1 - T_0)^{r-k} T_0^k / T_1^r, & r \geq k, \\ 0, & r < k. \end{cases} \quad (17)$$

Матрица D оказалась треугольной. Отметим также, что она не унитарна. Для любого линейного преобразования имеем

$$d_{r,k}(T_1, T_0) = \sum_{p=0}^{\infty} d_{r,p}(T_1, T_*) d_{p,k}(T_*, T_0). \quad (18)$$

В нашем случае в силу треугольности матрицы суммирование ведется от r до k . Непосредственной подстановкой (17) в (18) можно убедиться, что этой свойство действительно имеет место. В операторном виде равенство (18) имеет вид

$$\hat{D}(T_1, T_0) = \hat{D}(T_1, T_*) \hat{D}(T_*, T_0). \quad (19)$$

Поскольку $\hat{D}(T_0, T_0)$ представляет собой единичный оператор \hat{E} , то, полагая $T_1 = T_0$, получаем

$$\hat{D}(T_*, T_0) = \hat{D}^{-1}(T_0, T_*). \quad (20)$$

Отметим, что в неизотропном случае разложение ФР ведется по полиномам Эрмита, где весовой максвеллиан характеризуется четырехвектором $W = (T, \mathbf{u})$. Здесь T и \mathbf{u} — температура и скорость, вокруг которых проводится разложение. В этом общем случае можно определить оператор перехода от одного базиса к другому — $\hat{D}(W_0, W_1)$, который также будет обладать свойствами, аналогичными (19), (20). Для построения этой общей матрицы целесообразно использовать представление полиномов Эрмита в α - u -пространстве [11, 12].

Продолжим рассмотрение изотропного уравнения Больцмана. Очевидно, что переход к новому базису не должен влиять на результат, т.е. должны совпадать производные от функции распределения по времени в базисах T_1 и T_2 ,

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi(T, t)}{dt} &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{dC_k^0(t)}{dt} s_R^k(T, T_0) \\ &\times \sum_{r=0}^{\infty} \frac{dC_r^1(t)}{dt} s_R^r(T, T_1). \end{aligned} \quad (21)$$

Если обе части уравнения (21) умножить скалярно на $s_L^r(T, T_1)$, то, пользуясь условием ортогональности полиномов Сонина и (15), получим

$$\frac{dC_r^1(t)}{dt} = \sum_{k=0}^{\infty} d_{r,k}(T_1, T_0) \frac{dC_k^0(t)}{dt}. \quad (22)$$

Подставим в (22) уравнение (2) в исходном базисе T_0 и выразим, используя (14) и (20), вектор C^0 через C^1 : $C^0 = \hat{D}(T_0, T_1) C^1$. Тогда

$$\begin{aligned} \frac{dC_r^1}{dt} &= \sum_{k=0}^r d_{r,k}(T_1, T_0) \sum_{k_1, k_2=0}^{\infty} K_{k_1, k_2}^k(T_0) \\ &\times \sum_{r_1=0}^{k_1} d_{k_1, r_1}(T_0, T_1) C_{r_1}^1 \sum_{r_2=0}^{k_2} d_{k_2, r_2}(T_0, T_1) C_{r_2}^1. \end{aligned} \quad (23)$$

Если раскладывать ФР сразу по полиномам Сонина с температурой T_1 , то вместо выражения (23) систему моментных уравнений можно записать в виде

$$\frac{dC_r^1}{dt} = \sum_{r_1, r_2=0}^{\infty} K_{r_1, r_2}^r(T_1) C_{r_1}^1 C_{r_2}^1. \quad (24)$$

В силу произвольности коэффициентов разложения $C_{r_1}^1$ и $C_{r_2}^1$ из (23) и (24) получаем

$$\begin{aligned} K_{r_1, r_2}^r(T_1) &= \sum_{k=0}^r d_{r,k}(T_1, T_0) \\ &\times \sum_{k_1=r_1, k_2=r_2}^{\infty} K_{k_1, k_2}^k(T_0) d_{k_1, r_1}(T_0, T_1) d_{k_2, r_2}(T_0, T_1). \end{aligned} \quad (25)$$

Таким образом, из инвариантности описания релаксационного процесса относительно выбора базиса вытекает связь матричных элементов в базисах T_1 и T_0 . Отметим, что при фиксированном значении T_0 формула (25) справедлива при любых значениях T_1 . Вид зависимости $K_{r_1, r_2}^r(T_1)$ от температуры T_1 в левой части (25) определяется зависимостью сечения от энергии, а выражение справа зависит от T_1 только через одинаковые для всех сечений матричные элементы матрицы перехода D . После подстановки элементов матрицы D (17) и ряда несложных преобразований из (25) получаем

$$K_{r_1, r_2}^r(T_1) = (1-z)^R (-1)^{N+q} \sum_{q=0}^{\infty} z^q B_{r_1, r_2}^r(q, T_0), \quad (26)$$

$$\begin{aligned} B_{r_1, r_2}^r(q, T_0) &= \sum_{k=\max(q+R, N)}^{\infty} \binom{r}{k-q-R} (-1)^k \\ &\times \sum_{k_1=r_1}^{k-r_2} \binom{k}{r_1} \binom{k-k_1}{r_2} K_{k_1, k-k_1}^{k-q-R}(T_0). \end{aligned} \quad (27)$$

Здесь $z = 1 - T_1/T_0$, $R = N - r$, $N = r_1 + r_2$. Соотношения (25) или (26), (27) накладывают определенные связи на элементы матрицы K в исходной системе отсчета T_0 . Особенно ясно это в случае максвелловских молекул, для которых, как известно (см., например, [9]), элементы $K_{r_1, r_2}^r(T)$ не зависят от температуры. Для такой модели в (26) слева стоит константа, а справа — степенной ряд по z . Приравнявая нулю коэффициенты при всех положительных степенях z , получаем некоторые соотношения,

в которые входят разные $K_{r_1, r_2}^r(T_1)$ и коэффициенты, не зависящие от T . Например, приравнявая коэффициенты при первой степени z , можно получить

$$RK_{r_1, r_2}^r + \sum_{k=\max(1+R, N)}^{N+1} \binom{r}{k-R-1} (-1)^{N+k} \times \sum_{k_1=r_1}^{k-r_2} \binom{k_1}{r_1} \binom{k-k_1}{r_2} K_{k_1, k-k_1}^{k-R-1} = 0. \quad (28)$$

Эта формула показывает, что некоторые линейные комбинации матричных элементов матрицы K обращаются в нуль. Для произвольных моделей взаимодействия более общие соотношения могут быть выведены, если обе части (25) последовательно дифференцировать по T_1 и затем положить $T_1 = T_0$. Формулу (25) запишем в операторном виде

$$\hat{K}(T_1) = \hat{D}(T_1, T_0) \hat{K}(T_0) (\hat{D}(T_0, T_1), \hat{D}(T_0, T_1)). \quad (29)$$

Правила действий билинейного оператора \hat{K} на вектор очевидны из (2), а правила действия при представлении оператора в новом базисе — из (25). В общем случае, когда в качестве базисных функций рассматриваются полиномы Эрмита, для оператора перехода $\hat{D}(W_0, W_1)$ выполняются соотношения, аналогичные (19) и (20), и вместо (29) должно быть выполнено равенство

$$\hat{K}(W_1) = \hat{D}(W_1, W_0) \hat{K}(W_0) (\hat{D}(W_0, W_1), \hat{D}(W_0, W_1)). \quad (30)$$

Связи между матричными элементами.

Рассмотрим произвольные сечения взаимодействия частиц. Продифференцируем (29) 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}

$$\left(\frac{d\hat{K}(T_1)}{dT_1} \right)_{T_1=T_0} = \left(\frac{d\hat{D}(T_1, T_0)}{dT_1} \right)_{T_1=T_0} \hat{K}(\hat{E}, \hat{E}) + \hat{E} \hat{K} \left(\left(\frac{d\hat{D}(T_0, T_1)}{dT_1} \right)_{T_1=T_0}, \hat{E} \right) + \hat{E} \hat{K} \left(\hat{E}, \left(\frac{d\hat{D}(T_0, T_1)}{dT_1} \right)_{T_1=T_0} \right). \quad (31)$$

При вычислении производной от матричных элементов матрицы D обратимся к явному виду $d_{r,k}(T_1, T_0)$ (17). Очевидно, что производная от этой функции при $T_1 = T_0$ отлична от нуля только, если $r = k + 1$ или $r = k$,

$$\frac{d}{dT_1} (d_{r,k}(T_1, T_0))_{T_1=T_0} = r(\delta_{r-1,k} - \delta_{r,k})/T_0. \quad (32)$$

Аналогично имеем

$$\frac{d}{dT_1} (d_{k_1, r_1}(T_0, T_1))_{T_1=T_0} = -(r_1 + 1)\delta_{r_1+1, k_1} + r_1\delta_{r_1, k_1}/T_0, \quad (33)$$

$$\frac{d}{dT_1} (d_{k_2, r_2}(T_0, T_1))_{T_1=T_0} = -(r_2 + 1)\delta_{r_2+1, k_2} + r_2\delta_{r_2, k_2}/T_0. \quad (34)$$

Переходя в (31) от операторного вида к матричному и подставляя туда (32)–(34), получаем основное соотношение, связывающее между собой матричные элементы K_{r_1, r_2}^r ,

$$T \frac{dK_{r_1, r_2}^r(T)}{dT} - RK_{r_1, r_2}^r(T) = rK_{r_1, r_2}^{r-1}(T) - (r_1 + 1)K_{r_1+1, r_2}^r(T) - (r_2 + 1)K_{r_1, r_2+1}^r(T), \quad (35)$$

$$(R = r_1 + r_2 - r).$$

Здесь проведена замена T_0 на T ; подчеркнем, что (35) должно быть выполнено при произвольном значении T . В частном случае максвелловских молекул формула (35) совпадает с (28).

Чтобы получить соотношения, возникающие при повторном дифференцировании, поделим обе части равенства (26) на $(1-z)^R$, продифференцируем дважды по T_1 , положим $T_1 = T_0$ ($z = 0$) и обозначим $T_0 = T$. В результате имеем

$$\left(T^2 \frac{d^2}{dT^2} - 2RT \frac{d}{dT} + R(R+1) \right) K_{r_1, r_2}^r(T) = B_{r_1, r_2}^r(2, T). \quad (36)$$

Покажем теперь, что соотношения (36) являются следствием соотношений (35) и не накладывают дополнительных связей на матричные элементы. Воспользовавшись тем, что тождество (35) справедливо при любой T , применим к нему оператор Td/dt . Если в правой части получившегося равенства, используя (35), выразить производные через сами матричные элементы и провести несложные преобразования, то получим

$$\left(T^2 \frac{d^2}{dT^2} - T(R-1) \frac{d}{dT} \right) K_{r_1, r_2}^r(T) - B_{r_1, r_2}^r(2, T) = (R+1)(rK_{r_1, r_2}^{r-1}(T) - (r_1 + 1)K_{r_1+1, r_2}^r(T) - (r_2 + 1)K_{r_1, r_2+1}^r(T)). \quad (37)$$

Теперь в правой части (37) снова воспользуемся равенством (35)

$$\left(T^2 \frac{d^2}{dT^2} - (R-1)T \frac{d}{dT} \right) K_{r_1, r_2}^r(T) = (R+1) \left(T \frac{d}{dT} - R \right) K_{r_1, r_2}^r(T) + B_{r_1, r_2}^r(2, T). \quad (38)$$

Сравнивая (36) и (38), замечаем, что эти равенства совпадают. Аналогично можно показать, что соотношения, возникающие при взятии более высоких производных от (25), также не накладывают дополнительных связей на матричные элементы по сравнению с (35). Таким образом, можно утверждать, что для выполнения (25) необходимо и достаточно, чтобы соотношение (35) было выполнено при любом значении T .

Основные соотношения для различных законов взаимодействия частиц

В [9] для произвольных степенных потенциалов аналитически вычислены матричные элементы в виде четырех вложенных сумм. Они имеют вид

$$\begin{aligned}
 K_{r_1, r_2}^r &= n_0^2 \left(\frac{4kT_0}{m} \right)^\mu \frac{(-1)^{r+r_1} r! \Gamma(\mu + 5/2)}{2^{r_2}} \\
 &\times \sum_{q=1}^r \frac{(\mu + 5/2)_{q-1}}{q!} J_q \sum_{i=\max(0, q-r_1)}^{\min(r_2, q)} \binom{q}{i} \frac{2^i}{(r_2 - i)!} \\
 &\times \sum_{l=\max(q, r-r_1+q-i)}^r \frac{(2l - 2q - 1)! (-1)^l}{\Gamma(l + 3/2) (r - l)!} \\
 &\times \sum_{j=\max(0, m_2)}^{m_1} \frac{(-1)^j (-\mu)_{j+m_3}}{j! 2^j (m_1 - j)! (j - m_2)!}, \quad (39)
 \end{aligned}$$

где $\mu = \gamma/2$, $m_1 = r_1 - r + l - q + i$, $m_2 = r_1 - r - l + q + i$, $m_3 = l - q + r_2 - i$.

Здесь мы использовали следующие обозначения

$$a_k = a(a + 1) \dots (a + k - 1) = \Gamma(a + k) / \Gamma(a),$$

$$J_q = 4\pi \int_0^1 F(z) z^q dz. \quad (40)$$

В данном случае сечение рассеяния представляется в виде

$$g\sigma(g, z) = g^\gamma F(z). \quad (41)$$

Здесь $F(z)$ — угловая часть сечения, $z = \sin^2 \Theta/2$, Θ — угол рассеяния. Как видно из (39) и (40), в случае зависимости сечения рассеяния от угла и скорости в виде (41) матричные элементы K_{r_1, r_2}^r зависят от температуры базиса вполне определенным образом, а именно от температуры зависит общий коэффициент — частота столкновения $\tau(T) = bT^\mu$. Соотношение (35) теперь принимает вид

$$\begin{aligned}
 (\mu - R) K_{r_1, N-r_1}^r &= r K_{r_1, N-r_1}^{r-1} - (r_1 + 1) K_{r_1+1, N-r_1}^r \\
 &- (N + 1 - r_1) K_{r_1, N+1-r_1}^r. \quad (42)
 \end{aligned}$$

Интересно отметить, что соотношения между матричными элементами (42) не зависят от вида функции $F(z)$. Хорошо известно, что для псевдомаквелловских молекул ($\mu = 0$) имеется простая аналитическая формула, которая с точностью до нормировочной константы имеет вид

$$K_{r_1, r-r_1}^r = \frac{1}{r+1} - \delta_{r, r_1}. \quad (43)$$

Для ненулевых матричных элементов в случае максвелловских молекул из (42) имеем

$$\begin{aligned}
 (r + 1) K_{r_1, r-r_1}^r - (r_1 + 1) K_{r_1+1, r-r_1}^{r+1} \\
 - (r - r_1 + 1) K_{r_1, r-r_1+1}^{r+1} = 0. \quad (44)
 \end{aligned}$$

Легко проверить, что матричные элементы (43) удовлетворяют тождеству (44).

В [10] в качестве критерия правильности вычислений использовались соотношения (4), которые, как можно показать, являются следствием соотношений (35). Последние представляют собой более детальные критерии правильности вычислений. Если считать, что r_1 и r_2 меняются в области $0 \leq r_1 + r_2 \leq N_0$, а r в области $0 \leq r \leq N_0$, то общее число матричных элементов равно $(N_0 + 1)^2 (N_0 + 2) / 2$, общее число новых более детальных связей типа (35) или (42) равно $(N_0 + 1)^2 N_0 / 2$, в то время как общее число связей, возникающих из формулы (4), равно всего $(N_0 + 1)^2$. Таким образом, при больших N_0 число соотношений (42) намного превышает число связей (4).

Для других законов взаимодействия проверка соотношений (42) проводилась с вычислением матричных элементов по формулам (39)–(41) в диапазоне $r, N \leq 20$. Как показано в [9], в этом диапазоне заведомо малы численные погрешности. Проверка проводилась при различных значениях μ и было установлено, что все матричные элементы удовлетворяют равенствам (42).

В статье [13] приведены формулы для матричных элементов в случае модели твердых шаров ($\mu = 0.5$), причем для расчета линейных элементов приводятся отдельные формулы и последние после ряда упрощений совпадают с (39)–(41). Для нелинейных элементов приведены специальные формулы, не включающие матричные элементы, с одним из нижних индексов, равным 1. В связи с этим трудно проверить тождества (42), когда они связывают нелинейные и линейные элементы. Поэтому рассмотрим, например, тождество (42) при $N = 4$ и $r = r_1 = 2$

$$1.5K_{2,2}^2 - 3K_{3,2}^2 - 3K_{2,3}^2 = -2K_{2,2}^1. \quad (45)$$

Значения этих элементов, вычисленные по формулам (39) и по формулам из [13] в одинаковых единицах измерения, приведены в табл. 1. Несмотря на существенные различия соответствующих элементов, соотношения (45) удовлетворяются как в том, так и в другом случае. Более того, и другие наборы элементов из [13] с нижними индексами, не включающими 0 или 1, удовлетворяют соотношениям (42).

Из закона сохранения энергии следует, что $K_{2,2}^1 = 0$. Основная ошибка работы [13] состоит в том, что из предложенных там формул вытекает, что $K_{2,2}^1 \neq 0$ и только при этом неверном значении $K_{2,2}^1$ выполняется тождество (45). Если же в (45) подставить нулевое значение элемента $K_{2,2}^1$, а все остальные элементы, входящие в (45), взять из [13], то критерий (42) нарушается. Это означает, что в определении остальных трех элементов, входящих в (45), имеется ошибка. Если эти неверные элементы изменить так, чтобы тождество (45) выполнялось, то нарушится критерий (42) при последующих значениях индексов, и т.д. В [10] проанализировано, к каким ошибочным результатам в ходе релаксационного

Таблица 1. Проверка соотношения (45)

	K_{22}^2	K_{32}^2	K_{23}^2	Правая часть (45)
По (39)	$-1.6667 \cdot 10^{-2}$	$3.9063 \cdot 10^{-4}$	$-8.7240 \cdot 10^{-3}$	0
Из [13]	$1.7578 \cdot 10^{-2}$	$-3.4180 \cdot 10^{-3}$	$-1.2533 \cdot 10^{-2}$	$7.4218 \cdot 10^{-2}$

процесса приводит такое неверное определение нелинейных матричных элементов.

Формулы (39)–(41) можно применять и для кулоновского взаимодействия частиц. В этом случае для устранения расходимости, как это обычно делается, можно использовать кулоновский потенциал с дебаевским радиусом обрезания λ_D [9]. Это соответствует тому, что при определении J_q в формуле (40) интегрирование по углам ведется не от нуля, а от некоторого малого угла θ_0 , который считается равным $2e^2/(\lambda_D mg^2)$. Можно показать, что первый член в суммировании по q в формуле (39) соответствует приближению Ландау [11]. Для полного уравнения Больцмана суммирование по q ведется до r и число поправочных членов с ростом r растет. В табл. 2 и 3 приведены безразмерные матричные элементы, вычисленные по формулам (40), (41) при $N = 4$ и 5. Здесь при вычислении матричных элементов в качестве единицы измерения времени в уравнении Больцмана выбрано $\tau = 16(kT_0/m)^{3/2}/(J_1 n_0)$. При этом

$$J_1 = 8\pi \ln \Lambda e^4/m^2.$$

Таблица 2. K_{r_1, r_2}^r при $r_1 + r_2 = 4$ для кулоновского взаимодействия частиц

r	$r_1 = 0$	1	2	3	4
	$r_2 = 4$	3	2	1	0
1	0.41139	0.82278	0.00000	-0.82278	-0.41139
2	0.74050	0.91681	0.56419	-0.91681	-1.30469
3	0.87273	0.89918	0.84628	-0.12543	-2.49276
4	0.84041	0.83453	0.84628	0.94222	-3.46344
5	0.71626	0.72728	0.70524	0.58184	-2.73061
6	0.56199	0.59504	0.52893	0.23912	-1.92508
7	0.41525	0.46024	0.37025	0.03995	-1.28568
8	0.29311	0.33940	0.24683	-0.04957	-0.82977
9	0.19959	0.24050	0.15868	-0.07628	-0.52248
10	0.13200	0.16483	0.09917	-0.07325	-0.32275

Кулоновский логарифм $\ln \Lambda$ в наших расчетах выбирался равным 5. Верхнее число в каждой строке таблицы соответствует $q = 1$ (приближение Ландау), нижнее — полной сумме по q (уравнение Больцмана для кулоновского взаимодействия частиц). Подстановка значений из этих таблиц в соотношение (42) показывает, что эти тождества удовлетворяются как для приближения Ландау, так и для полного уравнения Больцмана. Кроме того, если в (39) суммирование по q искусственно обрывать на $r = 2, 3, \dots$, то такие суммы также удовлетворяют соотношениям (42). Такая проверка проводилась до $N_0 = 20$.

Рекуррентные соотношения

Соотношения (42) можно использовать как рекуррентные для вычисления матричных элементов. Это особенно важно при больших значениях индексов. Покажем, что для определения нелинейных матричных элементов достаточно задания линейных элементов только одного из двух видов $K_{r_1, 0}^r$ или K_{0, r_1}^r . При этом одна половина

Таблица 3. K_{r_1, r_2}^r при $r_1 + r_2 = 5$ для кулоновского взаимодействия частиц

r	$r_1 = 0$	1	2	3	4	5
	$r_2 = 5$	4	3	2	1	0
1	.23141	.69422	.46281	-.46281	-.69422	-.23141
2	.50909	.86906	.68908	-.03085	-1.19817	-.83820
3	.70909	.85785	.78347	.48595	-1.00898	-1.82740
4	.78788	.81212	.80000	.75152	-.14786	-3.00367
5	.76102	.75505	.75804	.76998	.86552	-3.90961
6	.66736	.67975	.67356	.64876	.51849	-3.18792
7	.54501	.58599	.56550	.48354	.16171	-2.34175
8	.42135	.48242	.45188	.32975	-.05400	-1.63140
9	.31186	.38019	.34602	.20935	-.14947	-1.09795
10	.22275	.28810	.25542	.12474	-.17066	-.72036

линейных элементов определяется через другую. Пусть заданы все линейные элементы вида $K_{q,0}^r(r, q \leq N_0)$. Формулу (42) можно представить так:

$$(q+1)K_{N-q,q+1}^r = (R-\mu)K_{N-q,q}^r + rK_{N-q,q}^{r-1} - (N-q+1)K_{N-q+1,q}^r. \quad (46)$$

Сначала рассмотрим эту формулу при $N=0$

$$K_{0,1}^r = (-\mu-r)K_{0,0}^r + rK_{0,0}^{r-1} - K_{1,0}^r. \quad (47)$$

Из (47) находим все $K_{0,1}^r$. Переходя в (46) к $N=1$, получаем два соотношения

$$K_{1,1}^r = (1-\mu-r)K_{1,0}^r + rK_{1,0}^{r-1} - 2K_{2,0}^r, \quad (48)$$

$$2K_{0,2}^r = (1-\mu-r)K_{0,1}^r + rK_{0,1}^{r-1} - K_{1,1}^r. \quad (49)$$

Из (48) при фиксированном r находим $K_{1,1}^r$, тогда из (49) определяются $K_{0,2}^r$ через только что определенные элементы $K_{1,1}^r$ и определенные ранее по (47) линейные элементы с нижними индексами 0, 1. Тем самым определены все элементы с $N=2$.

При $N=2$ из (46) имеем три соотношения, из которых последовательно определяются все элементы с $N=3$: $K_{2,1}^r$, $K_{1,2}^r$ и $K_{0,3}^r$ через элементы с $N=2$: $K_{2,0}^r$, $K_{1,1}^r$, $K_{0,2}^r$.

Пусть известны все матричные элементы с суммой нижних индексов равной N и выпишем соответствующие равенства (46) при фиксированном r и при $q=0, 1, \dots, N$

$$K_{N,1}^r = (N-r-\mu)K_{N,0}^r + rK_{N,0}^{r-1} - (N+1)K_{N+1,0}^r, \quad (50)$$

$$2K_{N-1,2}^r = (N-r-\mu)K_{N-1,1}^r + rK_{N-1,1}^{r-1} - NK_{N,1}^r, \quad (51)$$

$$3K_{N-2,3}^r = (N-r-\mu)K_{N-2,2}^r + rK_{N-2,2}^{r-1} - (N-1)K_{N-1,2}^r, \quad (52)$$

.....

$$(N+1)K_{0,N+1}^r = (N-r-\mu)K_{0,N}^r + rK_{0,N}^{r-1} - K_{1,N}^r. \quad (53)$$

Очевидно, что, двигаясь сверху вниз, из (50)–(53) последовательно можно определить все элементы с суммой нижних индексов, равной $N+1$, через уже известные элементы. Таким образом, по заданным $K_{q,0}^r$ определяются все нелинейные элементы. Кроме того, линейные элементы другого вида $K_{0,q}^r$ также определяются через них. Можно, наоборот, считать известными линейные элементы вида $K_{0,q}^r$ и, уменьшая q , определять все нелинейные элементы и линейные вида $K_{q,0}^r$.

В результате можно построить такую рекуррентную процедуру. Сначала увеличивается N , начиная с $N=0$, затем увеличивается r , тоже начиная с нуля. Затем при заданных r и N значения q меняются от 0 до N и из (46) определяются элементы $K_{N-q,q+1}^r$. Если считать известными линейные элемента вида $K_{0,q}^r$, то получим аналогичную рекуррентную процедуру, заменяя в (46) $N-q$ на q и определяя крайний правый элемент $K_{q+1,N-q}^r$.

Отметим, что при изучении газа одного сорта достаточно знания только симметризованных матричных элементов.

$$\tilde{K}_{r_1,r_2}^r = (K_{r_1,r_2}^r + K_{r_2,r_1}^r) / 2, \quad r_1 \geq r_2. \quad (54)$$

В этом случае вместо формул (50)–(53) имеем

$$(q+1)\tilde{K}_{N-q,q+1}^r = (N-r-\mu)\tilde{K}_{N-q,q}^r + r\tilde{K}_{N-q,q}^{r-1} - (N+1-q)\tilde{K}_{N+1-q,q}^r, \quad q=0, \dots, [(N-1)/2]. \quad (55)$$

Здесь квадратными скобками обозначена целая часть числа.

Понятно, что при применении рекуррентных формул (46) нужно иметь простые формулы для расчета линейных элементов. Перейдем к линейному случаю в формуле (39). Пусть $r_1=0$, тогда $i=q$, $m_1=l-r \geq 0$, откуда следует, что $r=l$, тогда $m_1=0$ и $j=0$. В результате

$$K_{0,r_2}^r = \left(\frac{4kT_0}{m}\right)^\mu \frac{r!n_0^2}{\Gamma(r+3/2)2^{r+r_2}} \times \sum_{q=1}^{\min(r_2,r)} 2^{2q} W_{r,q}^{r_2} J_q \Gamma(q+\mu+3/2)/q!, \quad (56)$$

где

$$W_{r,q}^{r_2} = \frac{-\mu(-\mu+1)\dots(-\mu+r_2+r-2q-1)}{(r_2-q)!(r-q)!} = \frac{\Gamma(-\mu+r_2+r-2q)}{\Gamma(-\mu)(r_2-q)!(r-q)!}. \quad (57)$$

Аналогичная формула для $K_{r_1,0}^r$ имеет вид

$$K_{r_1,0}^r = \left(\frac{4kT_0}{m}\right)^\mu \frac{r!n_0^2}{\Gamma(r+3/2)2^{r+r_1}} \times \sum_{q=1}^{\min(r_1,r)} 2^{2q} W_{r,q}^{r_1} \tilde{J}_q \Gamma(q+\mu+3/2)/q!. \quad (58)$$

Здесь

$$\tilde{J}_q = 4\pi \int_0^1 F(z)((1-z)^q - 1)dz. \quad (59)$$

На практике для представления ФР приходится использовать не ряд (1), а аппроксимацию в виде конечной суммы до некоторого N_0 . Основные ошибки при применении моментного метода связаны с таким обрезанием. Для расчета ФР в области больших скоростей нужно стремиться к увеличению N_0 . Но, с другой стороны, при расчете по формулам с многократным суммированием с ростом N_0 начинают катастрофически увеличиваться как погрешности, так и время счета. Это понятно, так как при расчете N_0^3 элементов по шести суммам, как в [6], приходится проводить пропорциональное N_0^9 количество

суммирований. Соответственно для четырех сумм, как в [9], это количество суммирований пропорционально N_0^7 . В этом смысле расчет по рекуррентным формулам выгодно отличается, так как число суммирований при вычислении любого элемента равно трем и время счета растет пропорционально лишь N_0^3 .

Расчеты проводились на ПЭВМ типа РС/АТ486 с частотой 66 МГц. Расчет по формуле (39) с учетом всех упрощений, рассмотренных в [9], при $N_0 = 30$ занял 3.5 h, в то время как расчет всех нелинейных элементов с двойной точностью по рекуррентной формуле (46) при $N_0 = 30$ потребовал только 0.23 s. Понятно, что при числе суммирований N_0^9 время 3.5 h потребуется для $N_0 = 14$, и если по формулам из [6] с шестикратным суммированием удалось бы без существенных погрешностей провести вычисления до $N_0 = 30$, то потребовалось бы 9 месяцев.

Заключение

В работе показано, что условия инвариантности описания релаксационного процесса относительно выбора базиса накладывают определенные связи на матричные элементы, являющиеся отображением интеграла столкновений в моментном методе решения уравнения Больцмана. Эти связи существуют для произвольных законов взаимодействия частиц. Использование этих связей в качестве рекуррентных соотношений позволяет на много порядков сократить время, необходимое для расчета нелинейных матричных элементов.

Это открывает возможность расчета матричных элементов для больших значений индексов. В результате появляется возможность "почти аналитически" вычислять ФР для больших скоростей.

Принцип инвариантности интеграла столкновений относительно выбора базисных функций может оказаться весьма эффективным при расчете матричных элементов в случае неизотропной релаксации. Соответственно разложение ФР здесь уже нужно проводить по полиномам Эрмита $H_{r,l,m}$, представляющим собой произведение сферических гармоник и полиномов Сонина с весовым максвеллианом, зависящим от температуры и средней скорости. Связи между матричными элементами в этом случае будут находиться при переходе к базису с максвелловским распределением не только с другой температурой, но и другой сдвиговой скоростью.

До сих пор моментный метод в неизотропном случае развивался слабо из-за больших сложностей, возникающих как при выводе формул, так и при вычислении нелинейных матричных элементов. Известные из теории переноса формулы [1,14] получены только для линейных элементов и для значения $l \leq 2$. Однако и в неизотропных задачах аппарат α - u -преобразований, развитый в работах [11,12], дает возможность получить простые соотношения между матричными элементами, аналогичные полученным в данной работе. В результате и в

неизотропных задачах при построении ФР можно будет существенно продвинуться в область больших скоростей. Это особенно важно для задач физико-химической кинетики и описания процессов переноса при сильных отклонениях от равновесия. Особо следует отметить необходимость привлечения высоких моментов и матричных элементов переноса электронов в термоядерной плазме.

Работа выполнена частично при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 97-02-18080) и частично при поддержке Федеральной целевой программы "Государственная поддержка интеграции высшего образования и фундаментальной науки" (контракт № 326.53).

Список литературы

- [1] Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. М.: ИЛ, 1960.
- [2] Burnett D. // Proc. London Math. Soc. 1933. N 2. P. 39.
- [3] Grad H. // Commun. Pure and Appl. Math. 1940. P. 331.
- [4] Ernst M.H. // Phys. Rep. 1981. Vol. 78. P. 1–21.
- [5] Бепф Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981.
- [6] Turchetti G., Paolilli M. // Phys. Lett. 1982. Vol. 90 A. N 3. P. 123–126.
- [7] Эндер И.А., Эндер А.Я. // ДАН СССР. 1970. Т. 193. № 1. С. 61–64.
- [8] Кольшикин И.Н., Эндер А.Я., Эндер И.А. // ЖВМиМФ. 1988. Т. 28. № 6. С. 901–916.
- [9] Эндер А.Я., Эндер И.А. // ЖТФ. 1994. Т. 64. Вып. 10. С. 38–53.
- [10] Эндер А.Я., Эндер И.А. // ЖТФ. 1998. Т. 68. Вып. 5. С. 18–26.
- [11] Эндер А.Я., Эндер И.А. Интегральное преобразование уравнения Больцмана для различных законов взаимодействия частиц. Препринт ФТИ АН СССР. Л., 1979. № 605.
- [12] Кольшикин И.Н., Эндер А.Я., Эндер И.А. // Моделирование в механике. Новосибирск, 1990. С. 54–64.
- [13] Schürer F., Kuqerl G. // Phys. Fluids. 1990. Vol. A2. P. 609–621.
- [14] Ферцигер Дж., Канер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Мир, 1976.