01

Асимптотика матричных элементов интеграла прямых столкновений уравнения Больцмана

© Э.А. Тропп, Е.Ю. Флегонтова

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: fl.xiees@mail.ioffe.ru

(Поступило в Редакцию 29 октября 2014 г.)

Исследована асимптотика при больших значениях индексов матричных элементов интеграла столкновений уравнения Больцмана, являющихся коэффициентами разложения интеграла столкновений по сферическим полиномам Эрмита, в изотропном случае для степенных потенциалов взаимодействия. Установлено, что главный член асимптотического разложения представляется в виде произведения степенной функции от одного из индексов на однородную функцию от отношений индексов со степенью однородности, определяющейся показателем степени в потенциале взаимодействия. Для матричных элементов интеграла прямых столкновений получен главный член асимптотического разложения, равномерного для всех отношений индексов матричного элемента.

Прямое численное решение интегродифференциального уравнения Больцмана даже при современном уровне развития вычислительной техники сопряжено со значительными трудностями. Один из принятых в кинетической теории газов подходов к его решению состоит в применении моментного метода. В этом методе функция распределения (ФР) разлагается по сферическим полиномам Эрмита, представляющим собой произведение полиномов Лагерра на сферические гармоники. Интеграл столкновений определяется при этом набором матричных элементов (МЭ), которые являются коэффициентами разложения интеграла столкновений по базисным функциям. Основную трудность в реализации моментного метода представляет расчет МЭ. В работе [1] были получены новые соотношения между МЭ и разработана рекуррентная процедура их расчета. Это позволило строить МЭ с большими значениями индексов и тем самым учитывать большое число членов в разложении ФР по базисным функциям. Однако получение простых асимптотических формул для МЭ при больших значениях индексов может существенно упростить расчет.

Во многих случаях интеграл столкновений можно представить в виде суммы интегралов обратных и прямых столкновений, описывающих соответственно приход частиц в элемент фазового объема за счет столкновений и уход из него. Матричные элементы интеграла прямых столкновений, которые имеют более простой вид, чем МЭ интеграла обратных столкновений, являются основным объектом рассмотрения в настоящей работе.

Представим функцию распределения в виде разложения по сферическим полиномам Эрмита

$$f(\mathbf{v},\mathbf{r},t)=\alpha^{3/2}n(\mathbf{r},t)M(c)\sum_j C_j(\mathbf{r},t)H_j(\mathbf{c}). \qquad (1)$$

Здесь $\mathbf{r}$ и $\mathbf{v}$ — координаты и скорости частиц, t — время, $n(\mathbf{r},t)$ — концентрация, $\mathbf{c}=\sqrt{\alpha}(\mathbf{v}-\mathbf{u})$ — безразмерная скорость, $\alpha=m/(2kT)$, m — масса частиц, $\mathbf{u}(\mathbf{r},t)$ и $T(\mathbf{r},t)$ — средняя скорость и температура газа, $M(c)=\pi^{-3/2}\exp(-c^2)$ — равновесное максвелловское распределение. Сферические полиномы Эрмита определяются выражением

$$H_j(\mathbf{c})=L_r^{l+1/2}(c^2)c^lY_{lm}^i(\theta,\varphi), \qquad (2)$$

$L_r^{l+1/2}(x)$ — полиномы Лагерра, $Y_{lm}^i(\theta,\varphi)$ — сферические гармоники, c,θ,φ — координаты скорости $\mathbf{c}$ в сферической системе координат, индекс i принимает значения 1, 2, индекс j включает в себя четыре индекса r,l,i,m.

Уравнение Больцмана при этом переходит в систему уравнений для коэффициентов разложения $C_j(\mathbf{r},t)$:

$$D^jC_j/Dt=\sum_0^\infty K_{j_1,j_2}^jC_{j_1}C_{j_2}, \qquad (3)$$

где D^j/Dt — дифференциальный оператор, представляющий левую часть моментных уравнений [2,3]. Его явный вид можно найти также в [4]. Матричные элементы интеграла столкновений $K_{j_1j_2}^j$ определяются выражением

$$K_{j_1,j_2}^j=\int H_j\hat{I}(MH_{j_1},MH_{j_2})d^3v/g_j. \qquad (4)$$

Здесь $\hat{I}(f,f)$ — интеграл столкновений, описывающий изменение частиц в элементарном фазовом объеме за счет рассеяния, g_j — квадрат нормы полинома Эрмита. Интегральный оператор $\hat{I}(f,f)$ имеет вид

$$\hat{I}(f,f)=\int\big(f(\mathbf{v}_1)f(\mathbf{v}_2)-f(\mathbf{v})f(\mathbf{v}')\big)g\sigma(g,\theta)d\mathbf{v}'d\mathbf{k}. \qquad (5)$$

Здесь первое слагаемое — приход в фазовый объем $d\mathbf{v}$ за счет столкновений частиц со скоростями $\mathbf{v}_1$ и $\mathbf{v}_2$, второе — уход из $d\mathbf{v}$ за счет столкновений с частицами со скоростью $\mathbf{v}'$, относительная скорость $\mathbf{g} = \mathbf{v} - \mathbf{v}'$, $\mathbf{k} = (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)/g$, θ — угол рассеяния, определяется соотношением $\cos\theta = \mathbf{kg}/g$, $\sigma(g, \theta)$ — дифференциальное сечение рассеяния.

Переходя в уравнении Больцмана к безразмерным переменным $\mathbf{c}$, $\tau = t\nu$, ν — средняя частота столкновений, можно по аналогии с (4) определить безразмерные матричные элементы

$$\tilde{K}^j_{j_1, j_2} = \int H_j \hat{I}(MH_{j_1}, MH_{j_2}) d^3c/g_j, \qquad (6)$$

связанные с матричными элементами (4) соотношением $\tilde{K}^j_{j_1, j_2} = K^j_{j_1, j_2}\nu/n_0$. Ниже будем рассматривать интеграл столкновений безразмерного уравнения Больцмана и безразмерные матричные элементы $\tilde{K}^j_{j_1, j_2}$, при этом знак „тильда“ в обозначении будем опускать.

В изотропном случае базисные функции — полиномы Лагерра $L^{1/2}_r(c^2)$, а матричный элемент $K^r_{r_1, r_2}$ определяется только тремя индексами. Исследуем асимптотическое поведение $K^r_{r_1, r_2}$ при больших значениях индексов. Будем рассматривать псевдостепенные потенциалы взаимодействия. В этом случае потенциал зависит от расстояния степенным образом ($V \sim 1/r^\kappa$) и, кроме того, дифференциальное сечение не зависит от угла рассеяния, а зависит (тоже степенным образом) только от модуля относительной скорости g:

$$\sigma(g, \theta) = A_\mu g^{2\mu - 1}\frac{1}{4\pi}, \quad \mu = (\kappa - 4)/2\kappa, \qquad (7)$$

где A_μ — константа. В этом случае матричные элементы связаны рекуррентными формулами А.Я. Эндера и И.А. Эндер [1]:

$$(\mu - r_1 - r_2 + r)K^r_{r_1, r_2} = rK^{r-1}_{r_1, r_2} - (r_1 + 1)K^r_{r_1+1, r_2} - (r_2 + 1)K_{r_1, r_2+1}. \qquad (8)$$

Представим матричный элемент $K^r_{r_1, r_2}$ как функцию $U(s, a, b)$ переменных $s = r/R$, $a = r_1/R$, $b = r_2/R$, где $R = \sqrt{r^2 + r_1^2 + r_2^2} \gg 1$. Тогда рекуррентное соотношение (8) принимает вид

$$(\mu/R - a - b + s)U(s, a, b) = sU(s - 1/R, a, b) - (a + 1/R)U(s, a + 1/R, b) - (b + 1/R)U(s, a, b + 1/R). \qquad (9)$$

Найдем разложение (9) по степеням малого параметра $1/R$. Входящие в это уравнение функции можно представить в виде рядов Тейлора:

$$U(s - 1/R, a, b) = U(s, a, b) + \sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^k}{k!R^k}\frac{\partial^k U(s, a, b)}{\partial s^k}, \qquad (10)$$

$$U(s, a + 1/R, b) = U(s, a, b) + \sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k!R^k}\frac{\partial^k U(s, a, b)}{\partial a^k}, \qquad (11)$$

$$U(s, a, b + 1/R) = U(s, a, b) + \sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k!R^k}\frac{\partial^k U(s, a, b)}{\partial b^k}. \qquad (12)$$

Подставляя разложения (10)–(12) в (9) и оставляя только члены порядка R^0, R^{-1}, получим

$$(\mu + 2)U(s, a, b) + s\frac{\partial U(s, a, b)}{\partial s} + a\frac{\partial U(s, a, b)}{\partial a} + b\frac{\partial U(s, a, b)}{\partial b} = 0. \qquad (13)$$

Решением уравнения (13) является однородная функция степени $-\mu - 2$:

$$U(s, a, b) = s^{-\mu-2}V(a/s, b/s), \qquad (14)$$

где $V(x, y)$ — произвольная функция. Таким образом, главный член асимптотического разложения $K^r_{r_1, r_2}$ имеет вид

$$K^r_{ar, br} = r^{-\mu-2}\big(V(a, b) + O(R^{-1})\big). \qquad (15)$$

Чтобы искать $V(a, b)$, вернемся к определению матричного элемента (4), (6). Интегральный оператор в (6) может быть также представлен в форме [5,6]

$$\hat{I}(f, f) = \iint G(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) f(\mathbf{c}_1) f(\mathbf{c}_2) d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c}_2, \qquad (16)$$

где $G(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)$ — ядро интеграла столкновений, зависящее от векторных скоростей.

В изотропном случае функция распределения зависит лишь от модуля скорости, и интеграл столкновений может быть выражен через скалярное ядро, которое получается усреднением (1) по направлениям скорости $\mathbf{\Omega} = \mathbf{c}/c$, $\mathbf{\Omega}_1 = \mathbf{c}_1/c_1$, $\mathbf{\Omega}_2 = \mathbf{c}_2/c_2$:

$$G^0_{00}(c, c_1, c_2) = \frac{1}{4\pi}\iiint G(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) d\Omega d\Omega_1 d\Omega_2. \qquad (17)$$

В этом случае матричный элемент $K^r_{r_1, r_2}$ определяется выражением

$$K^r_{r_1, r_2} = \frac{1}{\sigma_r}\int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^\infty L^{1/2}_r(c^2)M(c_1)L^{1/2}_{r_1}(c_1^2)M(c_2)L^{1/2}_{r_2}(c_2^2) \times G^0_{0,0}(c, c_1, c_2)c^2c_1^2c_2^2 dc\, dc_1 dc_2, \qquad (18)$$

где

$$\sigma_r = \int_0^\infty M(c)\big(L^{1/2}_r(c^2)\big)^2 c^2 dc = \frac{\Gamma(r + 3/2)}{2\pi^{3/2} r!}.$$

Ядро $G(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)$ может быть представлено в виде разности ядер интегралов обратных $G^+(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)$ и прямых

$G^-(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)$ столкновений,

$$G(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) = G^+(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2) - G^-(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2). \quad (19)$$

В изотропном случае ядрам $G^+(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)$, $G^-(\mathbf{c}, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2)$ соответствуют скалярные ядра $G^+(c, c_1, c_2)$ и $G^-(c, c_1, c_2)$. Раскладывая эти ядра по полиномам Лагерра, можно построить матричные элементы $K^{(-)r}_{r_1,r_2}$ и $K^{(+)r}_{r_1,r_2}$.

В [7,8] показано, что в изотропном случае для псевдостепенных потенциалов взаимодействия матричные элементы интеграла прямых столкновений определяются выражением

$$K^{(-)r}_{r_1,r_2} = 2\pi \times \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{L_r^{1/2}(c^2)}{\sigma_r} M(c) L_{r_1}^{1/2}(c^2) M(c_2) L_{r_2}^{1/2}(c_2^2) c^2 dc c_2^2 dc_2 \times \int_{-1}^{1} (c^2 + c_2^2 - 2cc_2 x)^\mu dx. \quad (20)$$

Рассмотрим матричный элемент (20) при больших значениях индексов r, r_1, r_2. Внутренний интеграл берется при любых значениях μ:

$$\int_{-1}^{1} (c^2 + c_2^2 - 2cc_2x)^\mu dx = \frac{(c^2 + c_2^2 + 2cc_2)^{\mu+1} - (c^2 + c_2^2 - 2cc_2)^{\mu+1}}{2(\mu+1)cc_2} = \frac{(c + c_2)^{2\mu+2} - |c - c_2|^{2\mu+2}}{2(\mu+1)cc_2}. \quad (21)$$

Подставляя этот интеграл в выражение для МЭ (20), получим

$$K^{(-)r}_{r_1,r_2} = \frac{\pi}{\sigma_r(\mu+1)} \times \int_0^\infty \int_0^\infty L_r^{1/2}(c^2) M(c) L_{r_1}^{1/2}(c^2) M(c_2) L_{r_2}^{1/2}(c_2^2) \times \left[(c + c_2)^{2\mu+2} - |c - c_2|^{2\mu+2}\right] c_2 c\, dc_2 dc. \quad (22)$$

При больших значениях индексов r, r_1, r_2 можно использовать асимптотику полиномов Лагерра [9]:

$$M(c_2) L_{r_2}^{1/2}(c_2^2) = \frac{\exp(-c_2^2/2)}{\pi^2 c_2} \sin\left(2\sqrt{r_2} c_2\right) + O\left((r_2 c_2^2)^{-1}\right). \quad (23)$$

Соответственно

$$M(c) L_r^{1/2}(c^2) L_{r_1}^{1/2}(c^2) = \frac{1}{\pi^{5/2} c^2} \sin\left(2\sqrt{r}c\right) \sin\left(2\sqrt{r_1}c\right) + O\left((rc^2)^{-1}\right) + O\left((r_1 c^2)^{-1}\right) = \frac{1}{2\pi^{5/2}c^2} \times \left[\cos\Big(2\big(\sqrt{r} - \sqrt{r_1}\big)c\Big) - \cos\Big(2\big(\sqrt{r} + \sqrt{r_1}\big)c\Big)\right] + O\left((r + r_1)^{-1} c^{-2}\right). \quad (24)$$

Подставив (23), (24) в (22), для главного члена получаем

$$K^{(-)r}_{r_1,r_2} \approx \frac{1}{(\mu+1)\sigma_r \pi^{7/2}} \int_0^\infty \int_0^\infty \exp\left(-\frac{c_2^2}{2}\right) \sin\left(2\sqrt{r_2}c_2\right) \times \left[\cos\Big(2\big(\sqrt{r} - \sqrt{r_1}\big)c\Big) - \cos\Big(2\big(\sqrt{r} + \sqrt{r_1}\big)c\Big)\right] \times \frac{\lfloor (c + c_2)^{2\mu+2} - |c - c_2|^{2\mu+2} \rfloor}{c} dc_2 dc. \quad (25)$$

Таким образом, отыскание асимптотики матричного элемента интеграла прямых столкновений сводится к построению асимптотического разложения интегралов вида

$$I = \int_0^\infty \int_0^\infty \exp\left(-\frac{c_2^2}{2}\right) \sin(ac_2) \times \cos(bc) \frac{\lfloor (c + c_2)^{2\mu+2} - |c - c_2|^{2\mu+2} \rfloor}{c} dc_2 dc, \quad (26)$$

где $a = 2\sqrt{r_2}$, $b = 2(\sqrt{r} - \sqrt{r_1})$ или $b = 2(\sqrt{r} + \sqrt{r_1})$ — большие параметры.

Начнем с вычисления асимптотики внутреннего интеграла в (26):

$$I_2 = \int_0^\infty \exp\left(-\frac{c_2^2}{2}\right) \sin(ac_2)\left[(c + c_2)^{2\mu+2} - |c - c_2|^{2\mu+2}\right] dc_2 = \int_0^\infty \exp\left(-\frac{c_2^2}{2}\right) \sin(ac_2)(c + c_2)^{2\mu+2} dc_2 - \int_0^c \exp\left(-\frac{c_2^2}{2}\right) \sin(ac_2)(c - c_2)^{2\mu+2} dc_2 - \int_c^\infty \exp\left(-\frac{c_2^2}{2}\right) \sin(ac_2)(c_2 - c)^{2\mu+2} dc_2. \quad (27)$$

В соответствии с принципом локализации [10] каждый из интегралов в правой части (27) равен сумме вкладов от критических точек. В первом из них одна критическая точка $c_2 = 0$, во втором $c_2 = 0$ и $c_2 = c$, в третьем

$c_2 = c$. Вклад от точки $c_2 = 0$ можно оценить, применив интегрирование по частям. Он оказывается равным нулю.

Вклад в (27) от точки $c_2 = c$ можно оценить, воспользовавшись леммой Эрдейи [9]. Это дает

$$I_2 = -\exp\left(-\frac{c^2}{2}\right)\frac{\Gamma(2\mu+3)}{(2\sqrt{r_2})^{2\mu+3}}2\sin(2\sqrt{r_2}c)\sin(\mu\pi) + O(r_2^{-\mu-2}) + O\big(1/(4r_2)\big). \quad (28)$$

Подставив (28) во внешний интеграл в (26), получим

$$I \approx C_\mu \int\limits_0^\infty \exp\left(-\frac{c^2}{2}\right)\frac{2\sin(2\sqrt{r_2}c)}{c} \times \Big[\cos\Big(2(\sqrt{r}-\sqrt{r_1})c\Big) - \cos\Big(2(\sqrt{r}+\sqrt{r_1})c\Big)\Big]dc$$

$$= C_\mu\left(\int\limits_0^\infty \exp\left(-\frac{c^2}{2}\right)\frac{\sin\big(2(\sqrt{r_2}+\sqrt{r}-\sqrt{r_1})c\big)}{c}\,dc + \int\limits_0^\infty \exp\left(-\frac{c^2}{2}\right)\frac{\sin\big(2(\sqrt{r_2}-\sqrt{r}+\sqrt{r_1})c\big)}{c}\,dc - \int\limits_0^\infty \exp\left(-\frac{c^2}{2}\right)\frac{\sin\big(2(\sqrt{r_2}+\sqrt{r}+\sqrt{r_1})c\big)}{c}\,dc - \int\limits_0^\infty \exp\left(-\frac{c^2}{2}\right)\frac{\sin\big(2(\sqrt{r_2}-\sqrt{r}-\sqrt{r_1})c\big)}{c}\,dc\right), \quad (29)$$

где

$$C_\mu = -\frac{\Gamma(2\mu+3)}{(2\sqrt{r_2})^{2\mu+3}}\sin(\mu\pi).$$

Интегралы вида

$$I_1 = \int\limits_0^\infty \exp\left(-\frac{c^2}{2}\right)\frac{\sin bc}{c}\,dc \quad (30)$$

можно найти, применяя дифференцирование по параметру b. Это дает

$$I_1(b) = \sqrt{\frac{\pi}{2}}\int\limits_0^b \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right)du = \frac{\pi}{2}\operatorname{erf}\left(\frac{b}{\sqrt{2}}\right). \quad (31)$$

Таким образом, асимптотическое разложение интеграла (26) имеет вид

$$I \approx \frac{\Gamma(2\mu+3)}{(2\sqrt{r_2})^{2\mu+3}}\sin(\mu\pi)\frac{\pi}{2} \times \Big(\operatorname{erf}\big(\sqrt{2}(\sqrt{r_2}+\sqrt{r}+\sqrt{r_1})\big) + \operatorname{erf}\big(\sqrt{2}(\sqrt{r_2}-\sqrt{r}-\sqrt{r_1})\big) - \operatorname{erf}\big(\sqrt{2}(\sqrt{r_2}-\sqrt{r}+\sqrt{r_1})\big) - \operatorname{erf}\big(\sqrt{2}(\sqrt{r_2}+\sqrt{r}-\sqrt{r_1})\big)\Big). \quad (32)$$

Наконец, подставляя (32) в (25) и учитывая, что при больших значениях индекса

$$\sigma_r = \frac{\Gamma(r+3/2)}{2\pi^{3/2}r!} = \frac{\sqrt{r}}{2\pi^{3/2}} + o(\sqrt{r}),$$

получаем выражение для главного члена асимптотического разложения МЭ интеграла прямых столкновений при больших значениях всех индексов:

$$K^{(-)r}_{r_1,r_2} \approx \frac{\Gamma(2\mu+3)}{(\mu+1)\pi}\frac{\sin(\mu\pi)}{2^{2\mu+3}r_2^{\mu+2}} \times \Big(\operatorname{erf}\big(\sqrt{2}(\sqrt{r_2}+\sqrt{r}+\sqrt{r_1})\big) + \operatorname{erf}\big(\sqrt{2}(\sqrt{r_2}-\sqrt{r}-\sqrt{r_1})\big) - \operatorname{erf}\big(\sqrt{2}(\sqrt{r_2}-\sqrt{r}+\sqrt{r_1})\big) - \operatorname{erf}\big(\sqrt{2}(\sqrt{r_2}+\sqrt{r}-\sqrt{r_1})\big)\Big). \quad (33)$$

В зависимости от знаков комбинаций $\sqrt{r_2}-\sqrt{r}+\sqrt{r_1}$, $\sqrt{r_2}+\sqrt{r}-\sqrt{r_1}$, $\sqrt{r_2}-\sqrt{r}-\sqrt{r_1}$ выражение в скобках в (33) либо близко к 2 (при $|\sqrt{r}-\sqrt{r_1}| < \sqrt{r_2} < \sqrt{r}+\sqrt{r_1}$), либо экспоненциально мало (при $\sqrt{r_2} < |\sqrt{r}-\sqrt{r_1}|$ или $\sqrt{r}+\sqrt{r_1} < \sqrt{r_2}$). Равномерность асимптотики (33) относительно линейных комбинаций корней из индексов достигнута с помощью точного вычисления интеграла (30) по формуле (31).

Таким образом, исследовано асимптотическое поведение матричных элементов интеграла столкновений при больших значениях индексов в изотропном случае для псевдостепенных потенциалов. Показано, что асимптотика матричных элементов имеет вид (14). Для МЭ интеграла прямых столкновений получен в явном виде главный член асимптотического разложения.

Список литературы

[1] *Эндер А.Я., Эндер И.А.* Интеграл столкновений уравнения Больцмана и моментный метод. СПб.: СПбГУ, 2003. 224 с.
[2] *Burnett D.* // Proc. London Math. Soc. 1935. Vol. 40. P. 382–435.
[3] *Sirovich L.* // Phys. Fluids. 1963. Vol. 6. N 1. P. 10–20.
[4] *Эндер А.Я., Эндер И.А.* Аэродинамика / Под ред. Р.Н. Мирошина. СПб.: НИИХ. СПбГУ, 2003. С. 179–203.
[5] *Kugerl G., Schurrer F.* // Phys. Rev. A. 1989. Vol. 39. P. 1429.
[6] *Эндер А.Я., Эндер И.А.* // Сиб. журн. инд. мат. 2003. Т. 6. Вып. 2. С. 156.
[7] *Эндер А.Я., Эндер И.А., Бакалейников Л.А., Флегонтова Е.Ю.* // ЖТФ. 2011. Т. 81. Вып. 4. С. 24–34.
[8] *Эндер А.Я., Эндер И.А., Бакалейников Л.А.* // ЖТФ. 2010. Т. 80. Вып. 10. С. 12–21.
[9] *Лебедев Н.Н.* Специальные функции и их приложения. Л.: Гос. изд-во физ.-мат. лит., 1963. 358 с.
[10] *Федорюк М.В.* Метод перевала. М.: Наука, 1977. 368 с.