

ИНТЕГРАЛЬНО-МОМЕНТНЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА

М. Н. Коган

(Москва)

Предлагается метод, позволяющий в принципе рассчитывать течения газа при произвольном числе Кнудсена; этот метод практически удобен для решения задач при не слишком малых числах Кнудсена ($\alpha < \bar{\alpha} < \infty$, где $0 < \alpha < 1$).

§ 1. Движение разреженного газа при произвольных числах Кнудсена описывается уравнением Больцмана, которое для одноатомного газа в отсутствие массовых сил имеет вид

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \xi_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = J(t, x_i, \xi_i) \quad (1.1)$$

Здесь $f(t, x_i, \xi_i)$ — функция распределения, нормированная таким образом, что интеграл

$$\int f d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \equiv \int f d\xi$$

равен числу молекул в единице объема, t — время, x_i — декартовы координаты, ξ_i — составляющие вектора скорости молекулы и

$$J(t, x_i, \xi_i) = \int [f(\xi') f(\eta') - f(\xi) f(\eta)] g b db d\theta d\eta \quad (1.2)$$

$(d\eta = d\eta_1 d\eta_2 d\eta_3, \quad g = |\eta - \xi|)$

интеграл столкновений. Здесь $\eta = \{\eta_1, \eta_2, \eta_3\}$ — вектор скорости молекул; b — прицельное расстояние молекул при столкновении; θ — угол, отсчитываемый от произвольного направления в плоскости, перпендикулярной вектору g ; ξ' и η' — векторы скоростей после столкновения молекул, имевших до столкновения соответственно скорости ξ и η .

Функция $f(\xi)$ не зависит от переменной интегрирования η , поэтому интеграл столкновений можно представить в виде

$$J(t, x_i, \xi_i) = L(t, x_i, \xi_i) - f(t, x_i, \xi_i) G(t, x_i, \xi_i) \quad (1.3)$$

Интегралы L и G конечны только для молекул с конечным радиусом взаимодействия.

Уравнение Больцмана часто записывают в интегральной форме. Очевидно, что любому дифференциальному уравнению можно сопоставить бесчисленное множество эквивалентных ему интегральных уравнений. Считая, например, J известным, уравнение Больцмана можно рассматривать как обыкновенное дифференциальное уравнение, общее решение которого имеет вид [1,2]

$$f(t, x_i, \xi_i) = f(t_0, x_i - \xi_i(t - t_0), \xi_i) + \int_{t_0}^t J(\tau, x_i - \xi_i(t - \tau), \xi_i) d\tau \quad (1.4)$$

Считая заданными L и G , получим другую интегральную форму уравнения (см., например, [2-4])

$$f(t, x_i, \xi_i) = f[t_0, x_i - \xi_i(t - t_0), \xi_i] \exp\left\{-\int_{t_0}^t G[\tau, x_i - \xi_i(t - \tau), \xi_i] d\tau\right\} + \\ + \int_{t_0}^t L[s, x_i - \xi_i(t - s), \xi_i] \exp\left\{-\int_s^t G[\tau, x_i - \xi_i(t - \tau), \xi_i] d\tau\right\} ds \quad (1.5)$$

Обычно при малых числах Кнудсена пользуются теми или иными разложениями функции распределения по длине пробега около максвелловского распределения [2].

При $K \gg 1$ функцию распределения разлагают по величине K^{-1} или пользуются эквивалентным этому разложению методом последовательных приближений. В работе [2] показано при определенных ограничениях, что этот процесс сходится для времен, меньших времени релаксации, или областей, меньших длины пробега, т. е. для чисел $K > 1$. Обычно (см., например, [2, 5-7]) за f_0 принимается решение для свободномолекулярного течения и интегрирование ведется от границ области.

§ 2. Стационарные и нестационарные задачи для уравнения Больцмана решаются совершенно одинаково. Поэтому можно рассматривать f_0 как некоторое начальное состояние и вместо последовательных приближений решать соответствующую нестационарную задачу:

$$f(t_n, x_i, \xi_i) = f(t_{n-1}, x_i - \xi_i \Delta t, \xi_i) + \int_{t_{n-1}}^{t_n} J_{n-1}[t_{n-1}, x_i - \xi_i(t_n - \tau), \xi_i] d\tau \quad (2.1)$$

где J_{n-1} вычисляется по значению функции f в момент времени t_{n-1} и $t_n = t_0 + n\Delta t$. Пусть T — полный интервал времени, в течение которого рассматривается процесс. Если выбрать интервалы времени Δt столь малыми, что за это время J изменяется лишь на величину порядка Δt , то после N шагов ($\Delta t = T/N$); полученное решение будет отличаться от точного на величину порядка Δt (так же, как при численном решении обыкновенного дифференциального уравнения). В равенстве (2.1) интегрирование ведется вдоль траектории молекулы; поэтому интегралы J изменяются за счет изменения f , по времени и по координатам.

Два процесса ведут к изменению функции распределения. С одной стороны, в данную точку пространства приходят молекулы из других областей течения. Если L — характерный размер течения, а ξ — характерная скорость молекул, то характерным временем этого процесса будет $T_1 = L/\xi$. С другой стороны, функция распределения меняется вследствие столкновения молекул. Характерным временем этого процесса является время релаксации или время между столкновениями молекул $T_2 = \lambda/\xi$, где λ — характерная длина пробега¹.

Для течений с числами Кнудсена порядка единицы оба характерных времени имеют одинаковый порядок $T_1 \sim T_2 \sim T$, так что, выбрав достаточно большое N , можем переписать (2.1) в разностной форме

$$f(t_n, x_i, \xi_i) = f(t_{n-1}, x_i - \xi_i \Delta t, \xi_i) + J_{n-1}(t_{n-1}, x_i, \xi_i) \Delta t \quad (\Delta t = T/N) \quad (2.2)$$

При малых числах Кнудсена $T_2 \ll T_1$. В этом случае, если принять $\Delta t \ll T_2$, необходимо очень много шагов. Поэтому здесь целесообразно

¹ Вообще говоря, течение может обладать несколькими характерными длинами пробега и несколькими характерными скоростями молекул (см., например, [8]).

считать, что в каждой точке за время порядка T_2 устанавливается равновесное распределение или близкое к нему, что и делается в применяемых методах для малых чисел Кнудсена.

При больших числах Кнудсена, наоборот, быстрее идет процесс переноса молекул из одних областей течения в другие, чем изменение функции распределения за счет столкновений. Здесь Δt должно быть меньше T_1 .

Если известно состояние, близкое к искомому, то число шагов естественно сокращается. Так, если исследуется стационарное течение, близкое к свободномолекулярному, и за начальное состояние принимается решение для свободномолекулярного течения, то процедура (2.1) практически совпадает с последовательными приближениями (1.4) или (1.5).

В этом случае можно брать большие отрезки времени $\Delta t \sim L/\xi = T_1$, так как функция распределения в какой-либо точке может измениться самое большее на величину порядка $f_0 K^{-1}$, а интеграл $J \sim f_0/T_2$. Следовательно, ошибка при $\Delta t \sim T_1$ будет порядка $f_0 K^{-2}$.

Практически при отыскании первой поправки к свободномолекулярному течению интегрирование ведется между границами области и поправка к свободномолекулярной функции распределения находится лишь на границах области (например, на поверхности тела [5-7]).

Для расчета следующего приближения необходимо найти и запомнить функцию распределения первого приближения во внутренних точках течения, что делает задачу слишком сложной для современных вычислительных машин.

Поэтому течение, требующее расчета второго и следующих приближений, целесообразно рассчитывать предлагаемым ниже интегрально-моментным методом.

§ 3. При реализации численного процесса (2.2) возникают две трудности. Во-первых, интегралы J_n обладают сложной структурой, требующей проведения не только квадратур, но и вычисления скоростей молекул после столкновения, т. е. попутного многократного решения задачи о столкновении. Во-вторых, на каждом шагу требуется запоминать слишком много значений (в каждой точке пространства в данный момент времени функция распределения зависит от трех компонент скорости). Поэтому оперативной памяти современных вычислительных машин с трудом может хватить для решения простейших вырожденных (одномерных) задач. Эти трудности следующим образом преодолеваются при помощи введения моментов от функции распределения. Как известно, моментами от функции распределения называют выражения вида

$$\begin{aligned} n(t, x_i) &= \int f(t, x_i, \xi_i) d\xi, & u_i(t, x_i) &= \frac{1}{n} \int \xi_i f(t, x_i, \xi_i) d\xi \\ P_{ij}(t, x_i) &= \int c_i c_j f(t, x_i, \xi_i) d\xi, & q_i(t, x_i) &= \frac{m}{2} \int c_i^2 f(t, x_i, \xi_i) d\xi \\ M_{ijk} &= \int c_i c_j c_k f d\xi & \text{и т. д.} & \quad (c_i = \xi_i - u_i) \end{aligned} \quad (3.1)$$

Здесь u_i — компоненты вектора макроскопической скорости, P_{ij} — компоненты тензора напряжений, q_i — составляющие вектора потока энергии и т. д.

Аппроксимируем функцию распределения некоторой аналитической зависимостью

$$f(t, x_i, \xi_i) = F(\xi_i, A_1, \dots, A_\nu) \quad (3.2)$$

где A_α ($\alpha = 1, \dots, \nu$) — некоторые функции от t и x_i . Вид функции F и число параметров A_α определяются характером конкретной задачи и необходимой точностью аппроксимации, которая должна соответствовать

точности всего расчета (т. е. точности исходных данных и граничных условий, выбранному шагу и т. д.). Функция F может быть выбрана различной в различных частях течения и должна учитывать разрывной по ξ характер поведения функции распределения у границ.

Подставляя (3.2) в (3.1), можно выразить ν моментов через ν коэффициентов A_α и наоборот.

Считая, что молекул со скоростями ξ , большими некоторого $\xi_{\max}$, очень мало и ими можно пренебречь, выберем Δt таким, чтобы интеграл J мало изменялся за время Δt и на расстоянии $\xi_{\max} \Delta t$. В уравнение Больцмана скорость ξ входит как параметр. Если зафиксировать некоторое число значений ξ_γ ($\gamma = 1, \dots, m$) и для каждого ξ_γ записать уравнение Больцмана, то получим систему из m совместных обыкновенных дифференциальных уравнений для m функций $f(t, x_i, \xi_\gamma)$. Левые части этих уравнений содержат лишь производные по направлению ξ_γ от функций $f(t, x_i, \xi_\gamma)$, а правые части зависят от всех m функций.

Выбранные m направлений можно рассматривать как характеристики и вести решение подобно тому, как это делается для гиперболических дифференциальных уравнений. При решении гиперболических уравнений характеристические направления определяются исходными уравнениями. В рассматриваемом случае выбор ξ_γ , а следовательно, и характеристических направлений, находится в нашем распоряжении. Поэтому их всегда можно выбрать, например, так, чтобы при вычислении моментов в некотором узле сетки x_i все m точек $x_i - \xi_{\gamma i} \Delta t$ также были бы узлами сетки¹. При таком выборе ξ_γ не требуется интерполяции полученных на $(n-1)$ -м шаге данных.

Пусть на $(n-1)$ -м шаге в каждом из узлов сетки известны все ν моментов от функции f_{n-1} . Умножая (2.2) соответственно на $1, \xi, \dots$ и т. д., получим ν моментов от f_n в точке x_i в момент времени t_n .

Для вычисления интеграла от функции $f(t_{n-1}, x_i - \xi_i \Delta t, \xi_i)$ соответствующие значения этой функции вычисляются по (3.2) при помощи известных в узлах моментов. Интегралы

$$\int J_{n-1} d\xi \equiv \int \xi_i J_{n-1} d\xi = (c_1^2 + c_2^2 + c_3^2) J_{n-1} d\xi \equiv 0 \quad (d\xi = d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3)$$

так как выражают собой, соответственно, законы сохранения массы, импульса и энергии при столкновении молекул. Нет необходимости также вычислять в каждой точке более высокие моменты от J_{n-1} . При заданных аппроксимации (3.2) и законе взаимодействия молекул квадратуры по ξ и η могут быть выполнены один раз, так что эти интегралы будут известными функциями от моментов. Поэтому вычисление интегралов

$$\int c_i c_j J_{n-1} d\xi \quad \text{или} \quad \int c_i c_j c_k J_{n-1} d\xi$$

в каждой точке сводится к некоторому количеству алгебраических операций. Вообще говоря, вычисление моментов от интеграла столкновений проще вычисления самого интеграла, так как при интегрировании по ξ интеграл становится симметричным относительно скоростей η и ξ .

В работе [9] показано, например, что для максвелловских молекул при произвольной функции распределения, представимой бесконечным рядом по полиномам Эрмита, моменты от J имеют особенно простую форму

$$\int c_i c_j J d\xi = A_1 p_{ij} \rho, \quad \int c_i c^2 J d\xi = A_2 q_i \rho \quad (p_{ij} = P_{ij} - \delta_{ij} p)$$

где A_1 и A_2 — величины, зависящие от рода молекул. В этой же работе

¹ Выбор Δt зависит от числа выбранных уравнений m .

приведены выражения, дающие хорошую аппроксимацию и при других законах взаимодействия молекул. Во всяком случае, для каждого закона взаимодействия и выбранной аппроксимации (3.2) необходимо лишь один раз выполнить соответствующие квадратуры, так что при расчете течения моменты от интеграла столкновений входят как алгебраические функции моментов от функции распределения, а не сама функция.

§ 4. Описанный выше нестационарный подход обладает тем преимуществом, что позволяет вести счет прямым методом, т. е. непосредственно вычислять значения искомых функций на n -м шаге по значениям этих функций на $(n-1)$ -м шаге. Но этот подход обладает тем недостатком, что шаг Δt должен быть меньше обоих характерных времен T_1 и T_2 . Поэтому при уменьшении времени релаксации необходимо все большее число шагов. В ряде случаев может оказаться целесообразным несколько изменить процедуру, перейдя к решению стационарной задачи.

Заменим (2.2) уравнением

$$f(x_i, \xi_i) = f(x_i - \xi_i \Delta t, \xi_i) + J(x_i, \xi_i) \Delta t \quad (4.1)$$

где Δt выбирается таким образом, чтобы интеграл J мало изменялся на расстоянии $\xi_{\max} \Delta t$. Выбирая, как и выше, m значений ξ_i , так чтобы при вычислении f в узле сетки x_i все m точек $x_i - \xi_{i\gamma} \Delta t$ также являлись узлами сетки, умножая (4.1) на соответствующие комбинации скоростей и интегрируя по ξ , получим систему $N_1 v$ совместных алгебраических уравнений для определения v моментов в каждом из N_1 узлов сетки. Задача сводится к решению системы нелинейных уравнений для макроскопических величин. Задача усложняется при $T_2 \rightarrow 0$, так как интеграл J имеет особенность при $T_2 = 0$.

В обычном методе моментов функция распределения также заменяется некоторой аппроксимирующей функцией, зависящей от какого-либо числа моментов. Умножением уравнения Больцмана на соответствующие комбинации скоростей получают необходимое количество дифференциальных уравнений для моментов.

При этом тип и число уравнений зависят от выбранных аппроксимаций и моментов. Поэтому для каждого конкретного случая необходимо разрабатывать свои методы решения получающихся сложных систем дифференциальных уравнений. Здесь так же, как и выше, возможен стационарный и нестационарный подходы к решению задач. Однако число характеристик, а следовательно, и характер граничных задач для этой системы, определяется выбором аппроксимации. Из-за сложности уравнений трудно следить за физикой явлений.

При интегрально-моментном подходе метод решения любых задач идентичен. На каждом шаге расчета интегрально-моментным методом прослеживается физическая картина явления.

Автор благодарен А. А. Дородницину и Л. И. Седову за полезную дискуссию.

Поступила 20 XII 1963

ЛИТЕРАТУРА

1. Jaffe G., Zur Methodik der kinetischen Gastheorie, Ann. Phys., 1930, 6, 195.
2. Grad H., Principles of the kinetic theory of gases. Handbuch Phys., 1958, vol. XII.
3. Enskog D. Über die Grundgleichungen in der kinetischen Theorie der Flüssigkeiten und der Gase. Ark. mat. Astron. Phys. A, 1928, ser. 21, No. 1.
4. Коган М. Н. Об уравнениях движения разреженного газа. ПММ, 1958, т. 22, вып. 4.
5. Heinemann M. Theory of drag in highly rarefied gases. Comm. Appl. Math., 1948, vol. 1, No. 3. (Русск. пер.: Гейнеман М. К теории лобового сопротивления в сильно разреженных газах. Сб. пер. «Механика», ИЛ, 1951, вып. 2).
6. Willis D. K., Theoretical solutions to some nearly free molecular problems. Rarefied Gas dynamics. Proc. of the First International Symposium, 1958.
7. Перепухов В. А. О сопротивлении плоской пластинки в потоке сильно разреженного газа. Ж. вычислит. матем. и матем. физ., 1961, т. 1, № 4.
8. Коган М. Н. О гиперзвуковых течениях разреженного газа. ПММ, 1962, т. XXVI, вып. 3.
9. Grad H. On the kinetic theory of rarefied gases. Commun Pure and Appl. Math., 1949, vol. 2, No. 4.