

МЕТОД КВАЗИЧАСТИЦ ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА

Предложен метод моделирования газа сталкивающихся молекул конечной системой квазичастиц с переменным весом, двигающихся по гладким траекториям.

Динамика газа в кинетическом режиме описывается уравнением Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{v}} \cdot f = I(f, f), \quad (1)$$

где $f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$ – функция распределения молекул; \mathbf{F} – внешняя сила; m – масса молекулы; $I(f, f)$ – интеграл столкновений Больцмана [1]. Недавно [2–4] было показано, что если параметризовать двухчастичное столкновение молекул матрицей \hat{R} , принадлежащей группе вращений O_3^+ , то интеграл столкновений естественным образом можно точно переписать в дивергентном виде:

$$I(f, y) = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{C}(f, y). \quad (2)$$

Представление интеграла столкновений в дивергентной форме, а также параметризация столкновений матрицами поворота открывают совершенно новые возможности для построения кинетических моделей с конечным числом степеней свободы на основе уравнения Больцмана. Основная трудность моделирования интеграла столкновений заключается в том, что конечные наборы скоростных пар $(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_k)$ в общем случае не инвариантны относительно преобразования, индуцированного столкновениями

$(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_k) \in (\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_k)$. В аккуратных численных методах [5, 6] специальное внимание уделяется обходу этой проблемы и обеспечению закона сохранения энергии при столкновении, при этом приходится прибегать к некоторым приемам "размазывания" частиц по ближайшим узлам.

Начнем описание предлагаемого метода с анализа пространственно однородного уравнения Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} = I(f, f). \quad (3)$$

Основной идеей нашего подхода является представление интеграла столкновений в комбинированной форме. Очевидно, что это можно сделать благодаря соотношению (2):

$$I_{comb}(f, f) = \mathbf{g}(f, f) - (1 - \mathbf{g}) \frac{\partial \Psi(f, f)}{\partial \mathbf{v}}, \quad (4)$$

где $\mathbf{g} = \mathbf{g}(\mathbf{v}, t)$ является произвольной функцией скорости и времени. Уравнение (3) в этом случае принимает вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} = I_{comb}(f, f). \quad (5)$$

Процесс дискретизации уравнения (5) начнем с разложения функции распределения по дельта-функциям

$$f(\mathbf{v}, t) = \sum_{i=1}^N n_i(t) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i(t)), \quad (6)$$

что соответствует замене огромного ($N_A : 10^{23}$) числа сталкивающихся реальных молекул конечной системой квазичастиц с переменным весом, двигающихся по плавным траекториям в фазовом пространстве. Матричные элементы оператора потока J имеют вид[2]:

$$\begin{aligned} J(n_i \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i), n_k \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_k)) &= \\ &= \frac{n_i n_k}{2} \int \frac{d\mathbf{f}}{p} d\mathbf{W}_n d\mathbf{a} (1 - \cos \mathbf{f}) f b(\mathbf{v}, \mathbf{m}) [n \mathbf{e} \cdot \mathbf{v}_i] \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) = \\ &= \int \frac{d\mathbf{f}}{p} d\mathbf{W}_n d\mathbf{a} \frac{n_i n_k (1 - \cos \mathbf{f})}{2} f b(\mathbf{v}, \mathbf{m}) [\cos \mathbf{a} \mathbf{f} + (\sin \mathbf{a} \mathbf{f}) \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}] \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i), \end{aligned} \quad (7)$$

где

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_i + \frac{\mathbf{f} (1 - \cos \mathbf{a} \mathbf{f}) \kappa^2 + (\sin \mathbf{a} \mathbf{f}) \kappa \frac{\mathbf{W}_i}{\mathbf{B}} \cdot \mathbf{v}_i}{2}, \quad (8)$$

$$\mathbf{u}_k = \mathbf{v}_k - \frac{\mathbf{f} (1 - \cos \mathbf{a} \mathbf{f}) \kappa^2 + (\sin \mathbf{a} \mathbf{f}) \kappa \frac{\mathbf{W}_i}{\mathbf{B}} \cdot \mathbf{v}_i}{2}. \quad (9)$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_i - \mathbf{u}_k, \quad \kappa \mathbf{v} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}, \quad \frac{df}{dv} \quad (10)$$

$$m_{\mathbf{v}} = \frac{v_{\mathbf{v}} \kappa v_{\mathbf{v}}}{v_{\mathbf{v}}^2} = m_a = \frac{v \kappa v}{v^2} =$$

$$= 1 - \frac{(1 - \cos \alpha f)[n \cdot v_{\alpha}]}{v_{\alpha}^2} = 1 - \frac{(1 - \cos \alpha f)[m \cdot v_{\alpha}]}{v^2}. \quad (11)$$

Единичный вектор \mathbf{n} задает направление оси поворота; \mathbf{f} – угол поворота, который определяет матрица вращения \mathbf{R} ; \mathbf{a} – параметр ослабления столкновения. Остальные обозначения стандартные. Параметры столкновения меняются в следующих пределах:

$$n \in [n^2 = 1]; \quad 0 \leq \mathbf{f} \leq \pi; \quad 0 \leq \mathbf{a} \leq 1. \quad (12)$$

В аналогичных формулах [2] для интеграла столкновений Больцмана в стохастической форме $I(f, f)$ скорости после столкновения уже не зависят от параметра ослабления:

$$\begin{aligned} I(n_i \mathbf{d}v - v_i, n_k \mathbf{d}v - v_k) &= \\ &= n_i n_k \int \frac{d\mathbf{f}}{p} d\mathbf{W}_n (1 - \cos \mathbf{f}) b(v, m) [\mathbf{d}(v - v_{\alpha}) - \mathbf{d}(v - v_i)] = \\ &= n_i n_k \int \frac{d\mathbf{f}}{p} d\mathbf{W}_n (1 - \cos \mathbf{f}) b(v, m) [\mathbf{d}(v - v_{\alpha}) - \mathbf{d}(v - v_i)] \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$v_{\alpha} = v_i + \frac{\mathbf{n}(1 - \cos \mathbf{f})v^2 + (\sin \mathbf{f})\mathbf{n} \times (v_i - v_k)}{2}, \quad (14)$$

$$u_{\alpha} = v_k - \frac{\mathbf{n}(1 - \cos \mathbf{f})v^2 + (\sin \mathbf{f})\mathbf{n} \times (v_i - v_k)}{2}. \quad (15)$$

$$v_{\alpha} = v_{\beta} - u_{\beta}, \quad v = v_i - u_k, \quad \mathbf{n} \cdot v = n \cdot v; \quad (16)$$

$$\begin{aligned} m_{\alpha} &= \frac{v_{\alpha} \mathbf{e} \cdot v_{\alpha}}{v_{\alpha}^2} = m = \frac{v \mathbf{e} \cdot v}{v^2} = \\ &= 1 - \frac{(1 - \cos \mathbf{f})[n \cdot v_{\alpha}]}{v_{\alpha}^2} = 1 - \frac{(1 - \cos \mathbf{f})[n \cdot v]}{v^2}. \end{aligned} \quad (17)$$

Чтобы дискретизовать уравнение (5), заменим в (7) и (13) интегралы и суммы их монте-карловскими оценками по правилу

$$\mathbf{e}_{ik} \int da \frac{d\mathbf{f}}{p} d\mathbf{W}_n \{ \dots \} \approx \sum_{\mathbf{f}} \mathbf{e}_{ik} \int da \frac{d\mathbf{f}}{p} d\mathbf{W}_n \frac{1}{N_{coll}} \mathbf{e}_{coll} \{ \dots \} = \frac{4pN^2}{N_{coll}} \mathbf{e}_{coll} \{ \dots \}, \quad (18)$$

$$\mathbf{e}_{ik} \int \frac{d\mathbf{f}}{p} d\mathbf{W}_n \{ \dots \} \approx \sum_{\mathbf{f}} \mathbf{e}_{ik} \int \frac{d\mathbf{f}}{p} d\mathbf{W}_n \frac{1}{N_{coll}} \mathbf{e}_{coll} \{ \dots \} = \frac{4pN^2}{N_{coll}} \mathbf{e}_{coll} \{ \dots \}, \quad (19)$$

где $\mathbf{e}_{coll} \{ \dots \}$ – сумма по N_{coll} столкновениям (т.е. по наборам характеристик столкновения: $\{(i, k), 1 \leq i, k \leq N\}; n \in S_2; 0 \leq f \leq p, 0 \leq a \leq 1$).

Сделаем одно важное пояснение. В стандартном построении интеграла столкновений при учете столкновения двух частиц отслеживается изменение скорости только "налетающей" частицы. При этом каждая молекула один раз учитывается как "налетающая", а второй раз – как частица-"мишень". Поэтому столкновение в (18), (19) характеризуется упорядоченной парой индексов (i, k) , где на первом месте стоит номер "налетающей" частицы, а на втором – номер частицы-"мишени". На основе изложенного, если быть точным, N_{coll} – это число упорядоченных столкновений, которое равно удвоенному количеству актов физического столкновения.

Разделим мысленно все пространство скоростей на ячейки Зайделя $\mathbf{D}(\mathbf{v}_j), 1 \leq j \leq N$. Ячейка Зайделя $\mathbf{D}(\mathbf{v}_j)$ включает в себя все те скорости пространства скоростей, для которых узловая скорость \mathbf{v}_j является ближайшей из всех узловых скоростей $\mathbf{v}_i, 1 \leq i \leq N$. В "приходном" члене стохастического интеграла столкновений (20) в сумме по всем столкновениям группируем столкновения, приводящие к попаданию скоростей \mathbf{v}_j в ячейку $\mathbf{D}(\mathbf{v}_j)$, т.е. представляем сумму в виде

$\mathbf{e}_{coll} = \mathbf{e}_j \mathbf{e}_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)}$. Таким образом, сумма $\mathbf{e}_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)}$ включает в себя те столкновения, при которых скорость "налетающей" частицы после столкновения попадает в ячейку $\mathbf{D}(\mathbf{v}_j)$. В "расходном"

же члене разделяем все столкновения на группы $\mathbf{e}_{coll} = \mathbf{e}_j \mathbf{e}_{coll(\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_j)}$, в которых "налетающая"

частица имеет скорость, равную \mathbf{v}_j . Поэтому сумма $\mathbf{e}_{coll(\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_j)}$ включает в себя только те стол-

кновения, при которых налетающая частица имеет выбранную скорость, равную \mathbf{v}_j . В результате этой процедуры приходим к выражению

$$\begin{aligned}
 I(f, f) &= \mathbf{e}_{ik} I(n_i d\mathbf{v} - \mathbf{v}_i, n_k d\mathbf{v} - \mathbf{v}_k) = \\
 &= \mathbf{e}_{coll} [m_i d\mathbf{v} - \mathbf{v}_j - m_i d\mathbf{v} - \mathbf{v}_i] = \\
 &= - \mathbf{e}_j \mathbf{e}_{coll(\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_j)} m_i n_i d\mathbf{v} - \mathbf{v}_i + \mathbf{e}_j \mathbf{e}_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)} m_i d\mathbf{v} - \mathbf{v}_j = \\
 &= - \mathbf{e}_j \bar{n}_j n_j d\mathbf{v} - \mathbf{v}_j + \mathbf{e}_j \mathbf{e}_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)} m_i d\mathbf{v} - \mathbf{v}_j, \quad (20)
 \end{aligned}$$

где \bar{n}_j – полная частота столкновений частицы (j) с остальными частицами:

$$\bar{n}_j = \mathbf{e}_{coll(\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_j)} \mathbf{n} \quad (21)$$

$$\mathbf{n} = \mathbf{m} = \frac{4pV^2 n_k}{N_{coll}} (1 - \cos \mathbf{f}) b(\mathbf{v}, \mathbf{m}) = \frac{4pV^2 n_k}{N_{coll}} (1 - \cos \mathbf{f}) b(\mathbf{v}, \mathbf{m}). \quad (22)$$

Аналогичным образом строим выражение для потока в пространстве скоростей:

$$\begin{aligned} J(f, f) &= \mathbf{e}_{ik} J(n_i d\mathbf{v} - v_i, n_k d\mathbf{v} - v_k) = \mathbf{e}_{coll} \alpha \mathbf{v}_i d\mathbf{v} - v \mathbf{v} = \\ &= \mathbf{e}_j \mathbf{e}_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)} \alpha \mathbf{v}_i d\mathbf{v} - v \mathbf{v}, \end{aligned} \quad (23)$$

где

$$\begin{aligned} \alpha \mathbf{v} &= \frac{4pV^2 n_k}{N_{coll}} \frac{(1 - \cos \mathbf{f})}{2} \mathbf{f} b(\mathbf{v}, \mathbf{m}) [\mathbf{n} \mathbf{e} \mathbf{v}] = \mathcal{K}_a \alpha = \\ &= \frac{4pV^2 n_k}{N_{coll}} \frac{(1 - \cos \mathbf{f})}{2} \mathbf{f} b(\mathbf{v}, \mathbf{m}) [\cos \mathbf{a} \mathbf{f} + (\sin \mathbf{a} \mathbf{f}) \mathbf{n} \mathbf{e} \mathbf{h} \mathbf{e} \mathbf{v}]. \end{aligned} \quad (24)$$

Здесь \mathcal{K}_a – матрица поворота на уменьшенный угол $\mathbf{a} \mathbf{f}$. Произвольную функцию $\mathbf{g}(\mathbf{v}, t)$ выбираем такой, чтобы она зависела только от времени:

$$\mathbf{g} = \mathbf{g}(t). \quad (25)$$

Объединив выражения (20) и (23), получим оценку для комбинированного интеграла столкновений:

$$\begin{aligned} \mathbf{g}(f, \mathbf{y}) \cdot (1 - \mathbf{g}) \frac{\mathbb{1}}{\mathbb{1} \mathbf{v}} \Psi(f, \mathbf{y}) = \\ = \mathbf{e} \sum_j \mathbf{g} \bar{n}_j d\mathbf{v} - v_j + \mathbf{g} \mathbf{e}_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)} \bar{n}_i d\mathbf{v} - v \mathbf{v} - \\ - (1 - \mathbf{g}) \mathbf{e}_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)} \frac{\mathbb{1}}{\mathbb{1} \mathbf{v}} \Psi \mathbf{v}_i d\mathbf{v} - v \mathbf{v} \end{aligned} \quad (26)$$

Заменяем суммы дельта-функций, сосредоточенных в ячейке $\mathbf{D}(\mathbf{v}_j)$, одной дельта-функцией, сосредоточенной в ее центре \mathbf{v}_j , введя неопределенные коэффициенты \mathbf{n} и \mathbf{a}_j :

$$\begin{aligned} & - \mathbf{g} \bar{n}_j d\mathbf{v} - v_j + \mathbf{g} \mathbf{e}_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)} \bar{n}_i d\mathbf{v} - v \mathbf{v} - \\ & - (1 - \mathbf{g}) \mathbf{e}_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)} \frac{\mathbb{1}}{\mathbb{1} \mathbf{v}} \Psi \mathbf{v}_i d\mathbf{v} - v \mathbf{v} \gg \\ & \gg \mathbf{n}_j d\mathbf{v} - v_j - \frac{\mathbb{1}}{\mathbb{1} \mathbf{v}} \Psi \mathbf{a}_j n_j d\mathbf{v} - v_j. \end{aligned} \quad (27)$$

Замену (27) делаем таким образом, чтобы сохранялись число частиц, импульс в ячейке $\mathbf{D}(\mathbf{v}_j)$ и энергия во всем пространстве скоростей. Для этого умножим обе части выражения (27) на 1 и на \mathbf{v} , а (26) на \mathbf{v}^2 и проинтегрируем по $d\mathbf{v}$. В результате этого получим три уравнения для трех искомых величин \bar{n}_j, α_j, g :

$$g \sum_j \frac{N_j}{N} n_j \bar{n}_j + \sum_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)} \mathbf{e} n_i m_i \mathbf{v}_i = n_j \bar{n}_j, \quad (28)$$

$$g \sum_j \frac{N_j}{N} n_j \bar{n}_j \mathbf{v}_j + \sum_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)} \mathbf{e} n_i m_i \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i + (1-g) \sum_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)} \mathbf{e} n_i \alpha_i \mathbf{v}_i = n_j \bar{n}_j \mathbf{v}_j + n_j \alpha_j, \quad (29)$$

$$g \sum_j \frac{N_j}{N} n_j \bar{n}_j \mathbf{v}_j^2 + \sum_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)} \mathbf{e} n_i m_i \mathbf{v}_i^2 + 2(1-g) \sum_j \sum_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)} \mathbf{e} n_i \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i \alpha_i = \\ = \sum_j \mathbf{e} (n_j \bar{n}_j \mathbf{v}_j^2 + 2n_j \mathbf{v}_j \alpha_j) \quad (30)$$

Решив систему (28)–(30), получим выражения для искомых коэффициентов:

$$g = \frac{2 \sum_j \sum_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)} \mathbf{e} n_i (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_j) \alpha_i \mathbf{v}_i}{2 \sum_j \sum_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)} \mathbf{e} n_i (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_j) \alpha_i \mathbf{v}_i + \sum_j \sum_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)} \mathbf{e} n_i m_i (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_j)^2}, \quad (31)$$

$$\bar{n}_j = g \sum_j \frac{N_j}{N} \bar{n}_j + \sum_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)} \mathbf{e} \frac{n_i}{N_j} m_i \mathbf{v}_i, \quad (32)$$

$$\alpha_j = g \sum_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)} \mathbf{e} \frac{n_i}{N_j} m_i \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_j + (1-g) \sum_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)} \mathbf{e} \frac{n_i}{N_j} \alpha_i. \quad (33)$$

Для удобства повторим основные обозначения для входящих в (31) – (33) величин:

$$m_i = n = \frac{4pN^2 n_k}{N_{coll}} (1 - \cos \mathbf{f}) b(\mathbf{v}, \mathbf{m}), \quad (34)$$

$$\bar{n}_j = \sum_{coll(\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_j)} \mathbf{e} n, \quad (35)$$

$$\alpha_i = \hat{K}_a \alpha = \frac{4pN^2 n_k}{N_{coll}} \frac{(1 - \cos \mathbf{f})}{2} \mathbf{f} b(\mathbf{v}, \mathbf{m}) [\cos \mathbf{a} \mathbf{f} + (\sin \mathbf{a} \mathbf{f}) \mathbf{n} \circ \mathbf{h} \circ \mathbf{v}], \quad (36)$$

$$\mathbf{m} = m_i = 1 - \frac{(1 - \cos \mathbf{f}) [\mathbf{n} \circ \mathbf{v}]}{\sqrt{2}}, \quad (37)$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_i - \mathbf{u}_k, \quad v = v_i = |\mathbf{v}_i - \mathbf{u}_k|. \quad (38)$$

Сумма $\sum_{\mathbf{v} \in \mathbf{D}(\mathbf{v}_j)} \mathbf{e}$ включает в себя все те столкновения, при которых скорость налетающей частицы после столкновения попадает в ячейку $\mathbf{D}(\mathbf{v}_j)$. Сумма $\sum_{coll(\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_j)} \mathbf{e}$ включает в себя только те столкновения, при которых налетающая частица имеет скорость, равную \mathbf{v}_j .

Таким образом, с учетом (31)–(38) имеем окончательное дискретизированное выражение для интеграла столкновений в комбинированной форме:

$$\begin{aligned}
 I_{comb} &= \mathbf{g}(f, f) - (1 - \mathbf{g}) \int_{\mathbf{v}} \Psi(f, f) = \\
 &= \sum_j \mathbf{e} \int_{\mathbf{v}} \mathbf{g} n_j d\mathbf{v} - \mathbf{v}_j - \int_{\mathbf{v}} \Psi \mathbf{a}_j n_j d\mathbf{v} - \mathbf{v}_j \int_{\mathbf{v}} \Psi
 \end{aligned} \tag{39}$$

Производная по времени от функции распределения (6) имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \sum_j \mathbf{e} \int_{\mathbf{v}} \mathbf{g} \dot{n}_j(t) d\mathbf{v} - \mathbf{v}_j(t) - \mathbf{g}(t) \int_{\mathbf{v}} \Psi \dot{n}_j(t) d\mathbf{v} - \mathbf{v}_j(t) \int_{\mathbf{v}} \Psi \tag{40}$$

Сравнивая (39) и (40), получаем искомые эволюционные уравнения для весов и узлов функции распределения (6):

$$\frac{\dot{n}_j}{n_j} = \int_{\mathbf{v}} \mathbf{g} \ln n_j = \mathbf{n}_j, \quad \int_{\mathbf{v}} \mathbf{g} \mathbf{v}_j = \mathbf{a}_j, \tag{41}$$

где выражения для \mathbf{n}_j и \mathbf{a}_j даются формулами (31)–(33). Из (41) получаем формулы пересчета весов и скоростей на временном шаге:

$$\ln n_j(t + \mathbf{D}t) = \ln n_j(t) + \mathbf{n}_j \mathbf{D}t, \quad \mathbf{v}_j(t + \mathbf{D}t) = \mathbf{v}_j(t) + \mathbf{a}_j \mathbf{D}t. \tag{42}$$

Эти формулы гарантируют сохранение положительности весов $n_j(t)$.

В случае пространственно неоднородного уравнения Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{\mathbf{F}}{m} f = I_{comb}(f, f) \tag{43}$$

функцию распределения представляем в виде

$$f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) = \sum_j \mathbf{e} n_j(\mathbf{r}, t) d\mathbf{v} - \mathbf{v}_j(\mathbf{r}, t) \tag{44}$$

Принимая во внимание, что

$$\begin{aligned}
 &\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \int_{\mathbf{v}} n_j(\mathbf{r}, t) d\mathbf{v} - \mathbf{v}_j(\mathbf{r}, t) = \\
 &= \left(\mathbf{v}_j \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \int_{\mathbf{v}} n_j \right) d\mathbf{v} - \mathbf{v}_j \cdot \\
 &= n_j \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \left(\int_{\mathbf{v}} \mathbf{v}_j \right) \int_{\mathbf{v}} d\mathbf{v} - \mathbf{v}_j =
 \end{aligned}$$

$$= \left\{ \mathbf{v}_j \cdot \mathbf{C}_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}} n_j \right\} + n_j \left(\frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{C}_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}} \right) \frac{\mathbf{v}}{\mathbf{v}} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_j) - \\ - n_j \mathbf{v}_j \cdot \mathbf{C}_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}} \left(\frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{C}_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}} \right) \frac{\mathbf{v}}{\mathbf{v}} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_j) \quad (45)$$

и привлекая (40), получаем разложение для левой части уравнения (43):

$$\frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}} \frac{f}{t} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{C}_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}} f + \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{C}_{\mathbf{v}}^{\mathbf{v}} \frac{F}{m} f = \\ = \mathbf{e} \left\{ \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{C}_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}} + \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{C}_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}} \mathbf{v}_j \cdot \frac{\mathbf{v}}{\mathbf{v}} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_j) - \right. \\ \left. - n_j \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{C}_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}} (\mathbf{v}_j) + \mathbf{v}_j \cdot \mathbf{C}_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}} \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{C}_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}} \mathbf{v}_j - \right. \\ \left. - \frac{F}{m} \frac{\mathbf{v}}{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{C}_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}} \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{C}_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}} \mathbf{v}_j \right\}. \quad (46)$$

Сравнивая (39) и (46), получаем искомые уравнения "газовой динамики" квазичастиц:

$$\frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}} n_j + \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{C}_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}} \mathbf{v}_j = \mathbf{r} n_j, \\ \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}} \mathbf{v}_j + \mathbf{v}_j \cdot \mathbf{C}_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}} \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r}} \mathbf{v}_j = \mathbf{a}_j + \frac{F}{m}. \quad (47)$$

Работа выполнена в рамках проекта 221 (контракт № 8 от 2 марта 2006 г.) по программе фундаментальных исследований (шифр Ф.0351) по Государственному заказу.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ferziger J.H., Kaper H.G., Mathematical Theory of Transport Processes in Gases. North-Holland, Amsterdam, 1972.
2. Saveliev V.L., Nanbu K. Collision group and renormalization of the Boltzmann collision integral // Phys. Rev. 2002. E 65. 051205. P.1-9.
3. Saveliev V.L. A Parameterization of Collisions in the Boltzmann Equation by a Rotation Matrix and Boltzmann Collision Integral in Discrete Models of Gas Mixtures // Rarefied Gas Dynamics: 22nd Int. Symp./ Ed. by T. J. Bartel and M. A. Gallis. AIP Conf. Proc.. AIP, Melville, NY, 2001. V. 585. P.101.
4. Saveliev V.L., Nanbu K. Exact Forms of Representation of Boltzmann Collision Integral as a Divergence of the Flow in Velocity Space // Rarefied Gas Dynamics: 24rd International Symposium, Bari, Italy, 10-16 July 2004/ AIP Conference Proceedings. 2005. V. 762. P. 114-119.
5. Tcheremissine F.G. Conservative evaluation of Boltzmann collision integral in discrete ordinates approximation // Comput. Math. Appl. 1998. V. 35. P. 215-221.
6. Raines A. Study of a shock wave structure in gas mixtures on the basis of the Boltzmann equation // European Journal of Mechanics B/Fluids. 2002. V. 21. P. 599-610.

Резюме

Тегіс траекториялармен қозғалатын, айнымалы салмақты квазибөлшектердің ақырғы жүйесімен соқтығысатын молекулалар газын модельдеу әдісі ұсынылған.

Summary

The method for gas of colliding molecules modeling by finite system of quasi-particles with variable weight moving along smooth trajectories is proposed.

Институт ионосферы МОН РК,
г. Алматы
Жетысуский государственный университет,
г. Талдықорган