**УРАВНЕНИЕ ФОККЕРА — ПЛАНКА ДЛЯ ГАЗА ПРИ УМЕРЕННЫХ ЧИСЛАХ КНУДСЕНА.**

*С.В.Богомолов*

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

В явном виде получены приближенные коэффициенты в уравнении Фоккера — Планка в фазовом пространстве для моделирования газа из твердых сфер при переходных (от кинетического к макроскопическому описанию) числах Кнудсена.

**FOKKER — PLANK EQUATION FOR A GAS AT MODERATE KNUDSEN NUMBERS.**

*S.V. Bogomolov*

M.V. Lomonosov Moscow State University

Explicit approximate coefficients in the Fokker — Plank equation in the phase space for modeling a gas of rigid spheres at transient (from kinetic to macroscopic description) Knudsen numbers are obtained.

Газ можно рассматривать как сплошную среду или как совокупность огромного числа молекул, что влечет довольно разное математическое описание: систему уравнений Навье — Стокса или уравнение Больцмана.

Выбор правильной математической модели важен не только для физики, но и для вычислительной математики. Последняя сталкивается с трудностью описания негладких газодинамических течений (например,[18]). Для преодоления этой проблемы используется целый набор различных подходов. Многие считают, что достаточно научиться хорошо численно моделировать решение уравнений Навье — Стокса. Среди необозримого набора работ на эту тему выделим только те, которые используют регулязирующие добавки. Целое направление вычислительных методов носит название кинетически - согласованных разностных схем [1], идея получения которых основана на разностной дискретизации уравнения Больцмана и применении метода расщепления, являющегося основным источником эффекта сглаживания в итоговом вычислительном алгоритме. На получение абстрактных (непосредственно не связанных с кинетическим описанием газа) добавок в уравнения Навье — Стокса нацелена книга [2].

Имеется также набор задач (например, спуск летательного аппарата в высоких слоях атмосферы), в которых приходится одновременно в разных частях пространства решать и стыковывать уравнения Навье — Стокса и уравнение Больцмана. Это — методы декомпозиции области [3].

Многие авторы рассматривают вопрос о том, какие математические модели лежат на пути перехода от уравнения Больцмана к уравнениям газовой динамики. Здесь можно выделить два этапа: получение предельного по отношению к уравнению Больцмана, но по-прежнему, в фазовом пространстве $x - v$ переменных, уравнения Фоккера — Планка, а затем — еще один, диффузионный предел, то - есть переход в $x-$ пространство, в результате чего должна получится система макроскопических уравнений квази-газо(гидро)-динамики. На физическом уровне строгости эта проблема изучалась еще Ландау, а затем другими авторами [4-8,17]. Математически строгие результаты содержаться в [9,10].

Есть и подход, основанный на вычислительных упрощениях в численном решении уравнения Больцмана при умеренных числах Кнудсена [19].

В этой работе мы покажем (в продолжение работы [20]), как с помощью стохастических дифференциальных уравнений можно получить в явном виде приближенные коэффициенты в уравнении Фоккера — Планка .

Поведение молекул газа описывается системой детерминированных уравнений Ньютона или Гамильтона. Предельный переход (грэдовский предел) приводит [11] к уравнению Больцмана для одночастичной функции распределения. Метод частиц, дискретизирующий последнюю, дает систему стохастических дифференциальных уравнений по мере Пуассона [10]. Эту систему можно вывести непосредственно, сразу вводя случайную модель взаимодействия молекул [12]. Если снова устремить к бесконечности число частиц, то получим предельное уравнение движения одной частицы в самосогласованном поле:

$$
\begin{aligned}
dx_1(t) &= v_1(t)dt, \\
dv_1(t) &= \int\int\int f(\theta, x_1(t), v_1(t), x, v) p(d\theta \times dx \times dv \times dt), \\
\mathbf{E}p(d\theta \times dx \times dv \times dt) &= m(d\theta)\lambda_t(dx, dv)dt,
\end{aligned} \tag{1}
$$

Вводя центрированную меру

$$
q(d\theta \times dx \times dv \times dt) = p(d\theta \times dx \times dv \times dt) - m(d\theta)\lambda_t(dx, dv)dt,
$$

приходим к мартингальной постановке:

$$
\begin{aligned}
v_1(t) = v_1(0) &+ \int_0^t \int\int\int f(\theta, x_1(s), v_1(s), x, v) m(d\theta)\lambda_s(dx, dv)ds \\
&+ \int_0^t \int\int\int f(\theta, x_1(s), v_1(s), x, v) q(d\theta \times dx \times dv \times ds),
\end{aligned} \tag{2}
$$

где мартингалом является последний член, а его характеристика равна (стр. 513 в [13]):

$$
< IP(f) >_t = \int_0^t \int\int\int f^2(\theta, x_1(s), v_1(s), x, v) m(d\theta)\lambda_s(dx, dv)ds. \tag{3}
$$

С возрастанием плотности газа растет интенсивность пуассоновской меры, а траектории движения частиц приближаются к траекториям винеровского процесса:

$$v_1(t) = v_1(0) + \int_0^t \int\int\int f(\theta, x_1(s), v_1(s), x, v) m(d\theta) \lambda_s(dx, dv) ds \\ + \int_0^t \sigma(x_1(s), v_1(s), s) dw(s), \qquad (4)$$

где последний член — также мартингал с характеристикой:

$$< IW(\sigma) >_t = \int_0^t \sigma^2(x_1(s), v_1(s), s) ds. \qquad (5)$$

Приравнивая характеристики мартингалов, получаем выражение для $\sigma$:

$$\sigma(x_1(t), v_1(t), t) = [\int\int\int f^2(\theta, x_1(t), v_1(t), x, v) m(d\theta) \lambda_t(dx, dv)]^{1/2}. \qquad (6)$$

Введем также обозначение для вектора сноса:

$$a(x_1(t), v_1(t), t) = \int\int\int f(\theta, x_1(t), v_1(t), x, v) m(d\theta) \lambda_t(dx, dv). \qquad (7)$$

Для простоты мы выписали эти формулы в обозначениях [13]; подчеркнем, что в случае многих измерений $x, v, w, a$ являются векторами, а $\sigma$ — матрицей.

В безразмерном виде полученная модель будет выглядеть следующим образом:

$$dx_1(t) = v_1(t) dt,$$
$$dv_1(t) = \frac{1}{Kn} a(x_1(t), v_1(t), t) dt + \frac{1}{\sqrt{Kn}} \sigma(x_1(t), v_1(t), t) dw(t), \qquad (8)$$

где $Kn$ — число Кнудсена.

Такое представление справедливо для достаточно малых $Kn$, вероятно, меньших 0.1 [14], но больших 0.01 . При меньших $Kn$ следует переходить к другим моделям — диффузионному пределу [12], а затем — к уравнениям Навье - Стокса, работающих уже не в фазовом $(x, v)$ - пространстве, а только в $x$-пространстве.

С вычислительной точки зрения модель (8) довольно сложна. Ее можно значительно упростить для конкретного примера газа из твердых сфер, сделав при этом еще существенное предположение, что коэффициенты $a$ и $\sigma$ можно вычислять, беря в качестве $\lambda_t(dx, dv)$ локальный максвеллиан. Для газа из твердых сфер следует взять [15], [16]: $\theta = \xi \times \eta$, $\xi \in \Xi$, $\Xi$

— единичная сфера, $\eta \in [0,1)$, $f(\cdot) = \chi\{\eta < \frac{h(\xi,v_1,v)}{Hb(\xi)}\}\psi(\xi,v_1,v)\delta(x-x_1)$, $m(d\theta) = Hb(\xi)\omega(d\xi)d\eta$, $\chi$ — индикатор борелевского множества,$\delta$ — функция Дирака, $h(\cdot) = b(\xi)min\{\mid v_1 - v \mid, H\}$, $H = const$, $b(\xi) = d^2 \mid \cos\alpha \mid$, $\xi = \{\cos\epsilon \cdot \sin\alpha, \sin\epsilon \cdot \sin\alpha, \cos\alpha\}$, $0 < \alpha < \pi/2$, $0 < \epsilon < 2\pi$, d — диаметр молекулы (при обезразмеривании эта величина пропадет), $\omega(d\xi) = \sin\alpha d\alpha d\epsilon$ — равномерное распределение на единичной сфере, $\psi(\cdot) = \xi(v - v_1, \xi)$, $(\cdot,\cdot)$ — скалярное произведение.

Займемся сначала вектором сноса $a(\cdot)$.

Благодаря разделению переменных в функции $h(\cdot)$, имеем:

$$\int_0^1 d\eta \int_{\mathbf{R^3}} \chi\{\eta < \frac{min\{\mid v_1 - v \mid, H\}}{H}\}(\cdots)dv =$$
$$= \int_0^1 d\eta \int_{\eta H < |v - v_1| < +\infty} (\cdots)dv =$$
$$= \int_{0<|v-v_1|<H} dv \int_0^{\frac{|v_1-v|}{H}} (\cdots)d\eta + \int_{H<|v-v_1|<+\infty} dv \int_0^1 (\cdots)d\eta =$$
$$= \int_{0<|v-v_1|<H} dv \frac{\mid v_1 - v \mid}{H}(\cdots) + \int_{H<|v-v_1|<+\infty} dv,$$

где через $(\cdots)$ мы обозначили выражение:

$$(\cdots) = \int \psi(\xi, v_1, v)\delta(x - x_1)Hb(\xi)\omega(d\xi)\lambda_t(dx, dv).$$

Подставив вместо функции скачка $\psi(\cdot)$ ее конкретное выражение для твердых сфер, получим вектора сноса в виде:

$$a(\cdot) = \int d\xi \int_{0<|v-v_1|<H} dv \mid v_1 - v \mid (\cdots) + H \int d\xi \int_{H<|v-v_1|<+\infty} dv(\cdots). \tag{9}$$

Постоянная $H$ в описании модели газа из твердых сфер была введена для того, чтобы избежать бесконечности в сечении рассеяния. Стандартная модель ([17], глава II) получится, если устремить $H$ к бесконечности. Тогда в последнем равенстве второе слагаемое устремится к нулю в силу быстрого (наверное, всегда экспоненциального) убывания функции распределения при увеличении значения скорости, а первое будет таким же, как в [17] с той лишь разницей, что интеграл по углам у нас берется по всей области их изменения, а не только по параметрам, описывающим скользящие столкновения.

Итак, для газа из твердых сфер вектор сноса $a$ можно приблизить выражением:

$$a(x_1(t), v_1(t), t) =$$

$$= -\int_{\mathbf{R}^3}\int_0^{\pi/2}\int_0^{2\pi} \xi(v_1 - v, \xi) \mid v_1 - v \mid b(\xi)\delta(x - x_1)\lambda_t(dx, dv)\sin\alpha d\alpha d\epsilon,$$

причем в системе отсчета с осью $z$, направленной вдоль $v_1 - v$, имеем (формула (9.27) главы II в [17]):

$$\xi(v_1 - v, \xi) =\mid v_1 - v \mid (\sin\alpha\cos\alpha\cos\epsilon, \sin\alpha\cos\alpha\sin\epsilon, \cos^2\epsilon).$$

После интегрирования по углу $\epsilon$ получим (как и в (9.30) из [17]):

$$a(x_1(t), v_1(t), t) = -\int_{\mathbf{R}^3}(v_1 - v)F(\mid v_1 - v \mid)\delta(x - x_1)\lambda_t(dx, dv), \qquad (10)$$

где через $F(\mid v_1 - v \mid)$ мы обозначили так же, как и в [17] (формула (9.29)), выражение:

$$F(\mid v_1 - v \mid) = 2\pi\int_0^{\pi/2}\cos^2\alpha \mid v_1 - v \mid d^2\cos\alpha\sin\alpha d\alpha.$$

Здесь стоит множитель $2\pi$, который был потерян в (9.29) при интегрировании по $\epsilon$. Диаметр молекул $d$ мы выписали в этой формуле для удобства сравнения с [17], хотя его не должно здесь быть, так как для появления числа Кнудсена в явном виде мы перешли к безразмерным переменным в (8).

Таким образом, для газа с умеренными числами Кнудсена мы получили уравнение Фоккера — Планка, аналогичное классическому, но и отличающееся от него как по способу вывода, так и по параметрам интегрирования, что приводит к дальнейшему упрощению:

$$F(\mid v_1 - v \mid) = \frac{\pi}{2}d^2 \mid v_1 - v \mid .$$

Теперь введем еще одно приближение в векторе сноса $a$ — заменим точное решение уравнения Фоккера — Планка $\lambda_t(dx, dv)$ локальным максвеллианом, тогда (опять в "размерном"виде для наглядности):

$$a(x_1(t), v_1(t), t) = -\pi/2\frac{n_1}{(2\pi RT_1)^{3/2}}d^2\int_{\mathbf{R}^3}(v_1 - v) \mid v_1 - v \mid e^{-\frac{(v-V_1)^2}{2RT_1}}dv. \qquad (11)$$

Проведем обезразмеривание:

$$t = t_*t', x = x_*x', v = v_*v', a = a_*a', n = n_*n',$$

выбрав

$$v_*^2 = 2RT, t_* = x_*/v_*, a_* = d^2n_*v_*^2;$$

тогда уравнение движения частицы примет вид (8), где

$$Kn = 1/d^2 n_* x_*,$$

что совпадает с обычным определением числа Кнудсена как отношения длины свободного пробега (в качестве которой можно взять $1/d^2 n_*$) к характерному размеру задачи $x_*$. В дальнейшем штрихи у безразмерных переменных опустим.

Нам остается взять следующий интеграл:

$$\int_{\mathbf{R}^3} (v_1 - v) \mid v_1 - v \mid e^{-(v-V_1)^2} dv. \tag{12}$$

Сделаем замену переменных $w \equiv v - V_1$ и выберем оси координат $w$ таким образом, чтобы ось $w_z$ совпала с направлением вектора тепловой скорости

$$c \equiv v_1 - V_1.$$

Тогда $w_x$ - и $w_y$ - составляющие нашего интеграла будут равны нулю как интегралы от нечетных функций в симметричных пределах. Компоненту $w_z$ (то - есть, вектор, направленный вдоль, а точнее — против из-за знака "минус"перед интегралом в (11), вектора тепловой скорости $c$, что соответствует физическому смыслу задачи) преобразуем введением цилиндрических координат $w_x = \rho \sin\varphi, w_y = \rho\cos\varphi, w_z = z$. После интегрирования по углу $\varphi$ получим значение компоненты $w_z$:

$$\frac{c}{\mid c \mid} 2\pi \int\int (\mid c \mid - z)\sqrt{\rho^2 + (\mid c \mid - z)^2} e^{-z^2} e^{-\rho^2} \rho d\rho dz,$$

или после замены $\rho^2$ на $r$:

$$\frac{c}{\mid c \mid} \pi \int\int (\mid c \mid - z)\sqrt{r + (\mid c \mid - z)^2} e^{-z^2} e^{-r} dr dz.$$

Внутренний интеграл имеет вид:

$$\int_0^\infty \sqrt{r+\alpha} e^{-r} dr,$$

где $\alpha \equiv (\mid c \mid - z)^2$, и берется с помощью замены $\sqrt{r+\alpha} \equiv y$ и интегрирования по частям:

$$= e^{\alpha}[\sqrt{\alpha} e^{-\alpha} + \int_{\sqrt{\alpha}}^\infty e^{-y^2} dy].$$

Последний интеграл выражается через функцию ошибок

$$\Phi(\beta) = 2/\sqrt{\pi} \int_0^\beta e^{-\gamma^2} d\gamma,$$

и мы получаем:

$$= \sqrt{\alpha} + \sqrt{\pi}/2e^{\alpha}(1 - \Phi(\sqrt{\alpha})).$$

В результате, интеграл (12) станет таким:

$$\frac{c}{\mid c \mid}\pi \int_{-\infty}^{\infty} (\mid c \mid - z)[\mid (\mid c \mid - z) \mid + \sqrt{\pi}/2e^{(\mid c \mid - z)^2}(1 - \Phi(\mid (\mid c \mid - z) \mid)]e^{-z^2}dz.$$

Он берется путем раскрытия знака модуля, интегрирования по частям и изменения порядка интегрирования:

$$= \frac{c}{\mid c \mid}\pi[\sqrt{\pi}/2\Phi(\mid c \mid)(2c^2 + 1/2c^2) + e^{-c^2}(\mid c \mid - 1/2 \mid c \mid)].$$

Итак, вместо (11) получаем следующее выражение для безразмерного коэффициента сноса $a$:

$$a(x_1(t), v_1(t), t) = -\frac{c}{\mid c \mid}\frac{\pi}{2}n_1[\frac{1}{2}\Phi(\mid c \mid)(2c^2 + \frac{1}{2c^2}) + \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-c^2}(\mid c \mid - \frac{1}{2 \mid c \mid})]. \quad (13)$$

Отметим, что при малых $c$ модуль этого вектора мал (слабое торможение), а при больших $c$ ведет себя, как $c^2$.

Мы не будем непосредственно вычислять тензор диффузии $\sigma^2$ в соответствии с (6), а воспользовавшись соображениями [5,8,17] и вводя обозначение (см. (9.18) - (9.20), (9.26) из [17])

$$a(\cdot) \equiv -A(\cdot)c,$$

сразу запишем :

$$\sigma^2(x_1(t), v_1(t), t) = 2RT_1A\mathbf{I}$$

или (учитывая обезразмеривание)

$$\sigma^2(x_1(t), v_1(t), t) = A(x_1(t), v_1(t), t)\mathbf{I}, \quad (14)$$

где $\mathbf{I}$ - фундаментальный тензор (единичная матрица).

Непосредственное применение модели (8) к численному исследованию переходных режимов, по-видимому, неэкономично в силу того, что придется численно решать стохастические дифференциальные уравнения по винеровской мере в пространстве относительно невысокой размерности — три. Более эффективным представляется численное решение соответствующего уравнения Фоккера - Планка для плотности распределения $F(x, v, t)$ случайного процесса $(x_1(t), v_1(t))$:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + v\frac{\partial F}{\partial x} + \frac{1}{Kn}\frac{\partial(a(F)F)}{\partial v} = \frac{1}{\sqrt{Kn}}\frac{1}{2}\frac{\partial^2(\sigma^2(F)F)}{\partial v^2}. \quad (15)$$

Это — нелинейное уравнение переноса в фазовом $(x, v)$ - пространстве с диффузией по скоростной переменной $v$. Альтернативой его численного решения по отношению к стохастическому методу частиц является детерминированный метод частиц в сочетании с методом суммарной аппроксимации (или расщепления). Точнее, метод частиц решает не дифференциальное уравнение Фоккера - Планка для плотнотсти меры, а соответствующее обобщенное уравнение для меры, снимая тем самым жесткие ограничения на гладкость функции $F(x, v, t)$. Приведенный выше дифференциальный вид уравнения Фоккера - Планка служит для наглядности изложения.

Далее, на пути к уравнениям Навье - Стокса, есть еще один этап, который можно называть квазигидродинамикой, а именно, переход из фазового $(x, v)$ - пространства в $x$-пространство с сохранением флуктуационных членов [12].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Б.Н. Четверушкин.* Кинетически — согласованные схемы в газовой динамике. - М.: Изд - во Мос. ун - та, 1999.

2. *N.B. Maslova.* Nonlinear Evolution Equations. Kinetic Approach. - World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 1993.

3. *A. Lukschin, H. Neunzert, J. Struckmeier.* Coupling of Navier - Stokes and Boltzmann Regions. // HERMES Aerodynamics R/Q Program meeting, VKI, 1992.

4. *Л.Д. Ландау.* // ЖЭТФ, 1937, т.7, с. 203.

5. *J.G. Kirkwood.* // J. Chem. Phys., 1946, vol. 180, p. 14.

6. *S. Chandrasekhar.* // Rev. Modern. Phys., 1943, vol. 1, p. 15.

7. *С.Г. Раутиан.* Диффузионное приближение в задаче о миграции частиц в газе. // Успехи физических наук, 1991, т.161, No.11, с. 151.

8. *Ю.Л. Климонтович.* О необходимости и возможности единого описания кинетических и гидродинамических процессов. // Теор. и матем. физика, 1992, т.92, No.2, с. 312.

9. *А.А. Арсеньев, О.Е. Буряк.* О связи между решением уравнения Больцмана и решением уравнения Ландау — Фоккера — Планка // Математический сборник, 1990, т. 181, No.4, с. 435.

10. *А.А. Арсеньев.* Лекции о кинетических уравнениях. - М.: Наука, 1992.

11. *О. Э. Ланфорд III.* О выводе уравнения Больцмана. В кн.: Неравновесные явления: уравнение Больцмана, под ред. Дж. Л. Либовица и Е.У. Монтролла. - М.: Мир, 1986.

12. *А.В. Скороход.* Стохастические уравнения для сложных систем. - М.: Наука, 1983.

13.*В.С. Королюк, Н.И. Портенко, А.В. Скороход, А.Ф. Турбин.* Справочник по теории вероятностей и математической статистике. - М.: Наука, 1985.

14. *Г. Берд.* Молекулярная газовая динамика. - М.: Мир, 1981. 15. *А.В. Лукшин, С.Н. Смирнов.* Об одном эффективном стохастическом алгоритме решения уравнения Больцмана. // Журнал вычисл. матем. и матем. физики, 1989, т.29, No.1, с.118.

16. *H. Babovsky.* On a Simulation Scheme for the Boltzmann Equation. // Math. Meth. in the Appl. Sci., 1986, vol. 8, p. 223.

17. *К. Черчиньяни.* Теория и приложения уравнения Больцмана. - М.: Мир, 1978.

18. European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, Barcelona, 11 - 14 September 2000. Book of Abstracts.

19. *И.Н. Ларина, В.А. Рыков.* Численный метод второго порядка точности для решения уравнения Больцмана при малых числах Кнудсена. // Журнал вычисл. матем. и матем. физики, 2002, (в печати).

20. *С.В. Богомолов.* Стохастическая модель гидродинамики. // Математическое моделирование, 1990, т.2, No.11, с.85.