

6.1.1 – teoria kinetyczna
i statystyczna

Praca habilitacyjna

Kazimierz Pięchór
DYSKRETNE MODELE
RÓWNANIA BOLTZMANN:
STRUKTURA OPERATORA ZDERZENIOWEGO
PROPAGACJA DŹWIĘKU

2/1992



P.269

W A R S Z A W A 1 9 9 2

Praca wpłynęła do Redakcji dnia 20 stycznia 1992

Praca habilitacyjna

recenzent - Prof.dr Władysław Fiszdon
Prof.dr hab.Henryk Zorski
Doc.dr hab.Wojciech Zajączkowski



56754



Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN
Nakład 100 egz. Ark.wyd. 3,5 Ark.druk.4,25
Oddano do drukarni w styczniu 1992 r.

Wydawnictwo Spółdzielcze sp. z o.o.
Warszawa, ul.Jasna 1

Kazimierz Piechór

Zakład Mechaniki Cieczy i Gazów

Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN

DYSKRETNE MODELE RÓWNANIA BOLTZMANNA:
STRUKTURA OPERATORA ZDERZENIOWEGO. PROPAGACJA DŹWIĘKU.

Rozdział 1

Wstęp

Niniejsze opracowanie jest streszczeniem i podsumowaniem prac 1-5, stanowiących rozprawę habilitacyjną autora. Opracowanie składa się ze wstępu i dwóch części merytorycznych.

Z powodu istnienia szerokiej literatury dotyczącej dyskretnej teorii kinetycznej ([9], [14], [15], [16] , a także sprawozdanie z sympozjum cytowane w [6], [10] i innych miejscach spisu literatury), ograniczamy przegląd wyników uzyskanych przez innych autorów do minimum, zwracając w nim szczególną uwagę na relacje między wynikami uzyskanymi w dyskretnej teorii kinetycznej a odpowiednimi wynikami uzyskanymi w ramach tzw. prawdziwej teorii kinetycznej, tzn. opartej na pełnym równaniu Boltzmann.

W pierwszej części zajmujemy się dyskretnym operatorem zderzeniowym. Głównym wynikiem jest twierdzenie, mówiące że w klasie dwuliniowych operatorów odwzorowujących $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^D$ w \mathbb{R}^D jedynie operatory postaci (1.6), tzn. klasyczne dyskretne operatory zderzeniowe, charakteryzują się posiadaniem niezmienników zderzeń, znikają tylko dla maxwellianu i rozwiązania układu postaci (1.5) spełniają twierdzenie H. Podejście jest aksjomatyczne a dowód konstrukcyjny. Podana konstrukcja jest następnie użyta do zbudowania

wania dyskretnych modeli dla mieszanin gazów szlachetnych i gazów z binarnymi reakcjami chemicznymi. Jako szczególne przypadki uzyskujemy modele istniejące wcześniej. W przypadku gazów z reakcjami chemicznymi nie jest w zasadzie spełniona zasada bilansu szczegółowego, tzn. prawdopodobieństwa reakcji prostej i odwrotnej nie są na ogół jednakowe. Tylko w przypadku tzw. równowagi chemicznej można uważać, że ta zasada jest spełniona. Nasze modele wymagają spełnienia tej zasady, a to dlatego, że zakładamy klasyczną dla teorii dyskretnej postać maxwellianu. Zdaniem autora, dyskretne modele kinetyczne można rozszerzyć tak, by dopuścić wielocząstkowo reakcję z ilością cząstek po reakcji inną niż przed, ale usunięcie czy też nawet pewne osłabienie zasady bilansu szczegółowego wymaga innej niż klasyczna postać maxwellianu, a więc tym samym innej, nowej postaci operatorów zderzeniowych.

Prace nad nieklasycznymi operatorami zderzeń trwają, a pierwszym, niedoskonałym modelem jest prosty model zaproponowany przez autora w pracy [37].

W tej części niniejszego opracowania podajemy też wyniki konieczne i dostateczne na to, by dany model dyskretny był nietrywialny, tzn. by układ (1.5), (1.6) nie rozpadał się na kilka niezależnych podukładów.

Część druga dotyczy zagadnienia propagacji dźwięku. Problem ten rozważamy na przykładzie tzw. płaskich regularnych modeli o parzystej liczbie prędkości. Zwracamy szczególną uwagę na przejście graniczne z liczbą równań dążących do nieskończoności. Formalnie rzecz biorąc ciąg takich modeli jest zbieżny do tzw. modelu półdyskretnego. Okazuje się jednak, że w ogólności tak być nie musi, a odpowiedź zależy od postawionego zagadnienia. Dla fal swobodnych dowodzimy, że zbieżność ta ma miejsce a nawet

podajemy, jaka liczba równań dyskretnych gwarantuje to, że błąd między rozwiązaniem z dyskretnym rozkładem prędkości a odpowiednim rozwiązaniem z ciągłym rozkładem prędkości nie przekroczy z góry zadanej liczby. W przypadku fal swobodnych takiej zbieżności nie ma. Ponadto dyskutujemy zasadniczy problem dla relacji między rozwiązaniami z dyskretnymi prędkościami a odpowiednimi zagadnieniami z ciągłym rozkładem prędkości. Chodzi mianowicie o to, w jakim sensie ciąg rozwiązań zagadnień dyskretnych będący ciągiem wektorów, których wymiar dąży do nieskończoności, ma przybliżać funkcję od ciągłego argumentu.

Zajmujemy się też prędkością dźwięku i jego tłumieniem dla zagadnienia propagacji wymuszonych fal dźwiękowych. Okazuje się, że dla fal o dużej częstotliwości wyniki są nawet jakościowo niezgodne z wynikami eksperymentalnymi. Zdaniem autora jest tak dlatego, że modele o tym samym module prędkości nie dopuszczają dużych prędkości molekularnych, które powodują tłumienie fal dźwiękowych o dużej częstotliwości.

W klasycznej teorii kinetycznej [7], [3] gaz jest reprezentowany przez zbiór punktów materialnych zawartych w pewnym, ograniczonym lub nie, obszarze $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, poruszających się z losowymi prędkościami $\vec{v} \in \mathbb{R}^3$. Podstawowym pojęciem tej teorii jest funkcja rozkładu $f(t, \vec{x}, \vec{v})$, będąca gęstością prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w elemencie przestrzeni fazowej $d\vec{x} d\vec{v}$ wokół punktu (\vec{x}, \vec{v}) w chwili czasu t .

Funkcja f jest rozwiązaniem dobrze znanego równania Boltzmann'a (przy zaniedbaniu sił zewnętrznych)

$$(1.1) \quad \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} = \int (f'_* f''_* - f f_*) |\vec{v} - \vec{v}_*| \text{bdb } d\vec{c} d\vec{v}_*$$

gdzie \vec{v}, \vec{v}_* są prędkościami cząstek przed zderzeniem, \vec{v}', \vec{v}'_* są prędkościami tych cząstek po zderzeniu, $f_* = f(\vec{v}_*)$, $f'_* = f(\vec{v}'_*)$, $f' = f(\vec{v}')$ (położenie i czas są we wszystkich wyrażeniach występujących w równaniu Boltzmana takie same, więc dla uproszczenia zapisu nie podajemy ich jawnie). Wreszcie $\epsilon \in (0, \infty)$ jest tak zwanym parametrem zderzeń, a $0 \leq \epsilon \leq 2\pi$ jest kątem między płaszczyzną zderzenia a wybraną płaszczyzną odniesienia.

Równanie Boltzmana jest bardzo złożonym równaniem różniczkowo-całkowym dla jednej funkcji, zależnej od siedmiu zmiennych. W związku z tym pojawiły się liczne pomysły zastąpienia równania Boltzmana przez jakieś prostsze równania, tzw. równania modelowe. Jednym z takich pomysłów są tzw. modele z dyskretnymi prędkościami. Podstawowym założeniem jest to, że każda cząstka gazu może poruszać się tylko z pewną prędkością \vec{v}_i należącą do zbioru V składającego się z p ustalonych wektorów z \mathbb{R}^3 (lub ogólniej z \mathbb{R}^d)

$$(1.2) \quad V = (\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_p : \vec{v}_i \in \mathbb{R}^n, \quad i = 1, 2, \dots, p)$$

Zakłada się, że prędkości \vec{v}_i spełniają związki

$$(1.3) \quad \vec{v}_i + \vec{v}_j = \vec{v}_k + \vec{v}_l \quad (\text{zachowanie pędu})$$

$$(1.4) \quad \vec{v}_i^2 + \vec{v}_j^2 = \vec{v}_k^2 + \vec{v}_l^2 \quad (\text{zachowanie energii})$$

dla pewnej, nietrywialnej czwórki indeksów $1 \leq i, j, k, l \leq p$.

Zastępując całkę po prawej stronie równania Boltzmana (1.1) przez skończoną sumę i oznaczając

$$f(t, \vec{x}, \vec{v}_i) = N_i(t, \vec{x}), \quad i = 1, 2, \dots, p,$$

otrzymuje się następujący układ równań:

$$(1.5) \quad \frac{\partial N_i}{\partial t} + \vec{v}_i \frac{\partial N_i}{\partial \vec{x}} = \mathcal{F}_i(N, N), \quad i = 1, 2, \dots, p$$

gdzie \mathcal{F}_i jest i -tą współrzędną wektora \mathcal{F} odwzorowującego $\mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^p$ w \mathbb{R}^p danego przez

$$(1.6) \quad \mathcal{F}_i(U, V) = \sum_{j=1}^p \sum_{k=1}^p \sum_{l=1}^p A_{ij}^{kl} (U_k V_l + U_l V_k - U_l V_j - U_j V_l)$$

gdzie U_i, V_i ($i = 1, 2, \dots, p$) są współrzędnymi wektorów $U, V \in \mathbb{R}^p$. W (1.6) A_{ij}^{kl} nieujemnymi współczynnikami charakteryzującymi zderzenie opisane przez $\vec{u}_i, \vec{u}_j \rightarrow \vec{u}_k, \vec{u}_l$. Zwykle zakłada się, że

$$(1.7) \quad \left\{ \begin{array}{ll} A_{ij}^{kl} = A_{ij}^{lk} = A_{ji}^{kl}, & \\ A_{im}^{in} = 0, & \text{jeżeli } n \neq m \\ A_{kl}^{ii} = A_{ii}^{kl} = 0, & \text{jeżeli } k \neq i \text{ lub } l \neq i \\ A_{ij}^{kl} = 0 & \text{dla każdej czwórki indeksów, dla której nie} \\ & \text{zachodzą równości (1.3), (1.4).} \end{array} \right.$$

Analogicznie do teorii równania Boltzmann'a można teraz wprowadzić pojęcie tzw. momentów hydrodynamicznych, zwanych też wielkościami makroskopowymi. I tak definiujemy:

- gęstość liczbowa n

$$(1.8) \quad n = \sum_{i=1}^p N_i,$$

- prędkość średnią \vec{u}

$$(1.9) \quad \vec{u} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^p \vec{v}_i N_i$$

- tensor ciśnień P

$$(1.10) \quad p = \sum_{i=1}^p (\vec{v}_i - \vec{u}) \otimes (\vec{v}_i - \vec{u}) N_i$$

- ciśnienie hydrodynamiczne p

$$(1.11) \quad p = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^p (\vec{v}_i - \vec{u})^2 N_i$$

- temperaturę T

$$(1.12) \quad T = \frac{1}{3kn} \sum_{i=1}^p (\vec{v}_i - \vec{u})^2 N_i$$

gdzie k jest stałą Boltzmanna,

- strumień ciepła \vec{q}

$$(1.13) \quad \vec{q} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^p (\vec{v}_i - \vec{u})^2 (\vec{v}_i - \vec{u}) N_i.$$

Jak widać z powyższego, definicje wielkości hydrodynamicznych są w pełni analogiczne do definicji odpowiednich pojęć występujących w teorii pełnego równania Boltzmanna. Jedyną zmianą jest zastąpienie całek z teorii o ciągłym rozkładzie prędkości przez sumy skończone.

Z (1.11) i (1.12) wynika równanie gazu idealnego

$$(1.14) \quad p = knT$$

zupełnie tak samo jak w teorii Boltzmanna.

Analogicznie do zwykłej teorii kinetycznej wprowadza się pojęcie niezmienników zderzeniowych. Są to takie wektory \mathbb{R}^p , których współrzędne $(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_p)$ spełniają

$$(1.15) \quad \varphi_i + \varphi_j = \varphi_k + \varphi_l$$

dla każdej czwórki indeksów i, j, k, l , dla której zachodzą (1.3), (1.4).

Zbiór niezmienników zderzeń tworzy przestrzeń liniową $\mathbb{F} \subset \mathbb{R}$. Jednakże tu pojawia się istotna różnica między dyskretną a ciągłą teorią kinetyczną. Mianowicie niech $q = \dim \mathbb{F}$. W ciągłej teorii kinetycznej mamy pięć liniowo niezależnych niezmienników zderzeniowych, w teorii dyskretniej ilość liniowo niezależnych niezmienników zderzeniowych, czyli q , może być różna od pięciu.

Typowymi niezmiennikami zderzeniowymi są

- masa

$$\varphi_0 = (1, 1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^p,$$

- pęd

$$\varphi = (\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_p),$$

- a także energia

$$\varphi = \left(\frac{1}{2} v_1^2, \frac{1}{2} v_2^2, \dots, \frac{1}{2} v_p^2 \right) \in \mathbb{R}^p$$

Ponieważ, w ogólności $q \neq 5$, oznacza to, że mogą być niezmiennikami zderzeniowymi, w niektórych modelach, takie wektory, które nie mają bezpośredniego sensu fizycznego. I przeciwnie wektory, które mają sens fizyczny, mogą nie być niezmiennikami zderzeń. Dzieje się tak dla szczególnie prostych modeli o dwóch prędkościach, gdzie wektor pędu nie jest niezmiennikiem zderzeniowym. Jednakże zawsze niezmiennikiem zderzeniowym jest wektor masy.

Innym pojęciem z ciągłej teorii kinetycznej, które można przenieść na przypadek dyskretny, jest pojęcie funkcji H . Jest ona zdefiniowana następująco

$$H = \sum_{i=1}^p N_i \ln N_i.$$

Można też udowodnić dyskretny analog twierdzenia H Boltzmann'a, a przez to można zdefiniować pojęcie maxwellianu. Jest to taki wektor $N = (N_1, N_2, \dots, N_p)$, że $(\log N_1, \log N_2, \dots, \log N_p)$ jest niezmiennikiem zderzeń. Można udowodnić, że tak określony maxwellian ma wszystkie własności, które posiada maxwellian w teorii Boltzmann'a.

Dla dowolnych wektorów $U = (U_1, U_2, \dots, U_p) \in \mathbb{R}^p$ i $V = (V_1, V_2, \dots, V_p) \in \mathbb{R}^p$ oznaczamy symbolem (U, V) ich iloczyn skalarny

$$(U, V) = \sum_{i=1}^p U_i V_i.$$

Niech $\varphi^1, \varphi^2, \dots, \varphi^q$ będą liniowo niezależnymi niezmiennikami zderzeń. Określamy

$$\Phi^i = (\varphi^i, N), \quad i = 1, 2, \dots, q.$$

Z równań (1.5) wynikają równania transportu

$$\frac{\partial}{\partial t} \Phi^i + \frac{\partial}{\partial x} \left(\sum_{j=1}^p \vec{v}_j N_j \varphi_j^i \right) = 0, \quad i = 1, \dots, q.$$

Układ ten nie jest zamknięty, podobnie jak w pełnej teorii kinetycznej. W tej teorii układ równań transportu zamyka się stosując np. metodę Chapmana-Enskog'a. Wymagane są dwie rzeczy: wprowadzenie liczby Knudsen'a i wyrażenie maxwellianu przez wielkości hydrodynamiczne. Te dwa warunki można spełnić również w teorii kinetycznej, a więc można przenieść procedurę Chapmana-Enskog'a na przypadek dyskretny. W wyniku uzyskuje się, podobnie jak w praw-

dziwej teorii kinetycznej, zamknięty układ równań Eulera, Naviera-Stokesa, itd. Podobieństwo to jest tak głębokie, że w dyskretnej teorii kinetycznej współczynniki transportu w modelowych równaniach Naviera-Stokesa nie zależą od gęstości, jak to ma miejsce w prawdziwej teorii kinetycznej, a równanie zachowania masy jest w obu teoriach dokładnie takie samo. Tym razem jednak układ równań "hydrodynamiki" składa się z q równań, zamiast pięciu.

Szczegóły tej procedury, jak i dowody faktów tu wspomnianych można znaleźć w książce R. Gatignol [9]. W pracy [10] procedura Chapmana-Enskog została rozszerzona na dyskretne modele z wielocząstkowymi zderzeniami.

Historycznie jako pierwszy dyskretny model równania Boltzmana należy uznać model zaproponowany przez Carlemana [11], [12]

$$(1.16) \quad \begin{aligned} \frac{\partial N_1}{\partial t} + v \frac{\partial N_1}{\partial x} &= N_2^2 - N_1^2 \\ \frac{\partial N_2}{\partial t} - v \frac{\partial N_2}{\partial x} &= N_1^2 - N_2^2. \end{aligned}$$

Model ten jest zwykle interpretowany jako opisujący gaz, którego cząstki poruszają się po prostej z dwoma różnymi prędkościami, którymi wymieniają się podczas zderzenia.

Bardzo szybki rozwój teorii modeli dyskretnych nastąpił jednak w związku z pracą J.E. Broadwella, [13], który zaproponował i użył do wyznaczenia struktury fali uderzeniowej następujący model: cząstki gazu poruszają się wzdłuż trzech prostopadłych prostych stanowiących osie układu współrzędnych z tą samą szybkością v , a wyniki każdego nietrywialnego zderzenia mają to samo prawdopodobieństwo. Taki "gaz" jest opisany przez następujący układ równań

$$\begin{aligned}
 (1.17) \quad & \frac{\partial}{\partial t} N_1 + v \frac{\partial N_1}{\partial x} = \mathcal{G}(N_3 N_4 + N_5 N_6 - 2N_1 N_2), \\
 & \frac{\partial}{\partial t} N_2 - v \frac{\partial N_2}{\partial x} = \mathcal{G}(N_3 N_4 + N_5 N_6 - 2N_1 N_2), \\
 & \frac{\partial}{\partial t} N_3 + v \frac{\partial N_3}{\partial y} = \mathcal{G}(N_1 N_2 + N_5 N_6 - 2N_3 N_4), \\
 & \frac{\partial}{\partial t} N_4 - v \frac{\partial N_4}{\partial y} = \mathcal{G}(N_1 N_2 + N_5 N_6 - 2N_3 N_4), \\
 & \frac{\partial}{\partial t} N_5 + v \frac{\partial N_5}{\partial z} = \mathcal{G}(N_1 N_2 + N_3 N_4 - 2N_5 N_6), \\
 & \frac{\partial}{\partial t} N_6 - v \frac{\partial N_6}{\partial z} = \mathcal{G}(N_1 N_2 + N_3 N_4 - 2N_5 N_6).
 \end{aligned}$$

Od tego czasu opublikowano mnóstwo prac na temat modeli dyskretnych, pojawiły się też książki i prace przeglądowe (pozycje [10], [14], [15], [16] - to tylko niektóre z nich), w szczególności opracowano wiele nowych bardziej złożonych modeli niż cytowane tu modele Carlemana i Broadwella. Wobec tej ilości prac dokonamy poniżej jedynie przeglądu najważniejszych kierunków badań.

Istnienie i jednoznaczność rozwiązań zagadnienia

Cauchy'ego

Przez dość długi okres sądzono, że udowodnienie twierdzenia o globalnym istnieniu i jednoznaczności rozwiązań zagadnienia Cauchy'ego

$$(1.18) \quad N_i(0, \vec{x}) = N_{i0}(\vec{x}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}_+^1, \quad n \geq 1$$

dla układu (1.5) jest prostsze niż udowodnienie istnienia i jednoznaczności rozwiązań odpowiedniego zagadnienia dla pełnego

równania Boltzmanna. Jednakże prawda okazała się inna, a mianowicie di Perna i Lions [17] udowodnili istnienie (ale nie jednoznaczność) rozwiązań zagadnienia Cauchy'ego dla pełnego równania Boltzmanna. Jednakże metoda, jaką zastosowali, nie da się przenieść na przypadek dyskretny. Wobec tego modele dyskretne nie spełniły pokładanych w nich nadziei. Jednakże nie należy sądzić, że praca włożona przez wielu autorów (por. [14],[18]) była bezużyteczna. Po pierwsze, wyniki uzyskane dla modeli dyskretnych zawierają twierdzenie o jednoznaczności, po drugie, uzyskuje się wiele wyników dotyczących asymptotycznego zachowania się rozwiązań zagadnienia początkowego dla równań dyskretnych przy czasie dążącym do nieskończoności, po trzecie wreszcie, znaczenie niektórych metod zastosowanych w teorii dyskretnej wykracza poza nią i są one ciekawe z punktu widzenia ogólnej teorii równań różniczkowych.

Wreszcie dla modeli dyskretnych uzyskano wiele ciekawych wyników [18],[19],[32] w przypadku zagadnień brzegowych.

Rozwiązania dokładne

Dla najprostszych modeli dyskretnych takich jak modele dwuprędkościowe czy też dla modelu Broadwella znaleziono wiele nietrywialnych rozwiązań dokładnych (por. np. [20],[21]).

Cornille znalazł też rozwiązania dokładne dla modelu ze zderzeniami trój-cząstkowymi [22]. Interesujące jest, że dla modelu 14-prędkościowego znaleziono ostatnio dokładne rozwiązania przez zastosowanie tzw. programu MACSYMA i używając komputera [23].

Z powyższego wynika, że pod tym względem uproszczenie równania Boltzmanna wynikające z dyskretyzacji zbioru prędkości mole-

kularnych okazało się bardzo owocne.

Granica hydrodynamiczna

Jednym z głównych zadań teorii kinetycznej jest uzyskanie makroskopowego opisu gazu. Gatignol [10] pokazała, jak formalnie stosować procedury Hilberta i Chapmana-Enskoga znane z prawdziwej teorii kinetycznej. Podjęto intensywne wysiłki w celu udowodnienia matematycznej poprawności tych procedur. Dla najprostszych modeli skończyło się to powodzeniem, a przegląd metod i wyników dany jest w [14]. Tutaj zwrócimy uwagę na te prace, których autorzy doświadczenie zdobyte przy analizie modeli dyskretnych wykorzystali do analizy przypadku ciągłego. Ellis i Pinsky [24] badali asymptotykę przy liczbie Knudsena dążącej do zera dla ogólnych zlinearyzowanych modeli dyskretnych a następnie rozwijając metody wyznaczyli odpowiednią asymptotykę dla zlinearyzowanego równania Boltzmann [25], [26].

Również Caflish, który wraz z Papanicolaou [27] uzyskał ścisłe wyniki dotyczące granicy hydrodynamicznej dla modelu Broadwella, wykorzystał zdobyte doświadczenie i wiedzę do pokazania poprawności procedury Hilberta dla pełnego równania Boltzmann [28].

Struktura fali uderzeniowej i inne zastosowania

Dyskretne modele równania Boltzmann były wykorzystywane do badania konkretnych przepływów. Szczególnie intensywnie był badany problem fali uderzeniowej rozpoczęty jeszcze przez Broadwella [13]. Problemowi temu poświęcona jest znaczna część książki

Gatignol [9]. Uzyskała ona szereg wyników dotyczących fal uderzeniowych w modelowych równaniach Eulera. Badała też przypadki szczególne zarówno teoretycznie jak i numerycznie. Interesującym jest wynik numeryczny pokazujący, że grubość struktury fali uderzeniowej w przybliżeniu Naviera-Stokesa dla modeli dyskretnych jest mniejsza niż w opisie kinetycznym. Tę samą własność można zauważyć porównując struktury fal uderzeniowych uzyskanych z prawdziwych równań hydrodynamiki i równania Boltzmann [29].

Caflish [30] badał związek między strukturą fali uderzeniowej w modelu Broadwella i odpowiadających mu przybliżeniach typu Eulera i Naviera-Stokesa. Kawashima i Matsumura [31], badali stabilność struktury fali uderzeniowej w modelu Broadwella.

Struktura fali uderzeniowej w mieszaninie gazów Broadwella badana była w pracach [33], [34], [35], [36]. Ostatnio autor niniejszego opracowania [37] pokazał, że można stosować modele typu dyskretnych modeli równania Boltzmann do problemu struktury fali uderzeniowej w tzw. gazach wstecznych.

Z innych przepływów badane były przepływy typu Couette'a i Rayleigha (por. [9], [14], [38]).

Dyskretne modele równania Boltzmann dały też początek tzw. gazom sieciowym [39]. Obecnie ta teoria stanowi samodzielną i bardzo obszerną dziedzinę badań, uprawianą głównie w USA i Francji. (Wiele prac na ten temat można znaleźć w cytowanych sprawozdaniach przy pozycjach [6], [10], [18], [36]).

Część I

Rozdział 2

KONSTRUKCJA DYSKRETYCH MODELI RÓWNANIA BOLTZMANN

Motywacja. Klasyczna konstrukcja dyskretnych modeli równania polega na tym, że ustalamy najpierw liczbę prędkości p , a potem staramy się dobrać te prędkości tak, by dla jakichś nietrywialnych czwórek indeksów spełnione były równości (1.3) i (1.4). To zadanie jest jednak po pierwsze bardzo trudne, a po drugie, nawet po jego rozwiązaniu nie możemy być w pełni zadowoleni, gdyż liczba niezależnych niezmienników zderzeń tak uzyskanego modelu nie musi być taka, jaką chcielibyśmy mieć. Dalej w przypadku, gdy $|\vec{v}_i| = v$ ($i = 1, \dots, p$), to równość (1.4) jest konsekwencją zasady zachowania masy (lub odwrotnie). Zatem do skonstruowania, a tym samym i do zdefiniowania modelu używa się równości, które nie muszą być niezależne.

Stwierdzenie tego jest punktem wyjścia konstrukcji opisanej w pracy [1]. Mianowicie, proponuje się rozpocząć konstrukcję modelu dyskretnego od konstrukcji jego przestrzeni niezmienników zderzeń. Jest to więc idea odwrotna do tej, która była dotychczas stosowana. Wymaga to przede wszystkim udowodnienia, że przestrzeń niezmienników zderzeń całkowicie i jednoznacznie określa model dyskretny. Jest rzeczą istotną zauważyć, że żadne z równań kinetycznych o ciągłym rozkładzie prędkości nie posiada tej cechy.

Metody zastosowane w omawianej pracy pozwalają na opis jednoznaczności, jaka występuje przy konstruowaniu dyskretnych

modeli równania Boltzmanna. Pokazuje się też, że w zakresie dwu-
liniowych operatorów w przestrzeniach euklidesowych operator
zderzeniowy dany przez prawą stronę równań (1.5) jest jedynym,
który posiada te własności, których zwykle wymaga się od opera-
torów zderzeniowych.

W części trzeciej niniejszego przeglądu podajemy zastosowa-
nia zarówno pojęć, jakie wprowadzamy jak i podajemy konstrukcje
konkretnych modeli.

Podstawowe pojęcia

Niech $p \geq 2$ będzie dowolną, ale ustaloną liczbą naturalną.

Zbiór wszystkich par nieuporządkowanych (i, j) , takich że
 $1 \leq i, j \leq p$ oznaczamy przez \mathcal{P} .

Wprowadzamy następującą definicję

Definicja 2.1. Każdy element z iloczynu kartezjańskiego $\mathcal{P} \times \mathcal{P}$
nazywamy zderzeniem i oznaczamy $(i, j; k, l)$.

Definicja 2.2. Niech $(j, k; l, m) \in \mathcal{P}$. Wektor $\gamma \in \mathbb{R}^p$,
którego i -ta składowa γ_i dana jest wzorem

$$(2.1) \quad \gamma_i = \delta_{il} + \delta_{im} - \delta_{ij} - \delta_{ik},$$

gdzie δ_{ij} jest deltą Kroneckera, nazywamy symbolem zderzenia
i oznaczamy przez $\chi(j, k; l, m)$.

Zderzenie nazywamy trywialnym, jeżeli jego symbol jest zero-
wym wektorem z \mathbb{R}^p .

Definicja 2.3. Mówimy, że dwa (lub więcej) zderzenia są nie-
zależne, jeżeli ich symbole są liniowo niezależnymi wektorami z \mathbb{R}^p .

Podstawowym pojęciem, jakie wprowadzamy, jest tak zwany

zbiór zderzeń podstawowych, zdefiniowany jak następuje: zbiór zderzeń podstawowych Q składa się z dowolnie wybranych $r = p - q$ ($1 \leq p - q < p$) zderzeń niezależnych.

Zbiór ten nie jest, nawet dla danych p i q , wyznaczony jednoznacznie. W pracy [1] nie zajmujemy się jego konstrukcją, ale wprowadzamy

Założenie 2.1. Zbiór zderzeń podstawowych jest dany; jest on dowolny, ale ustalony.

Definicja 2.4. Zbiorem zderzeń dopuszczalnych nazywamy zbiór takich nietrywialnych zderzeń, których symbol można przedstawić jako kombinację liniową symboli zderzeń z Q . Zbiór zderzeń dopuszczalnych oznaczamy przez \bar{Q} .

Ponieważ symbole zderzeń tworzących Q są liniowo niezależne, to rozpinają one $(p - q)$ -wymiarową podprzestrzeń liniową $\mathbb{F}^+ \subset \mathbb{R}^p$.

Przyjmujemy kolejną definicję

Definicja 2.5. Ortogonalne (w sensie standardowego iloczynu skalarnego w \mathbb{R}^p) dopełnienie \mathbb{F} podprzestrzeni \mathbb{F}^+ do \mathbb{R}^p nazywamy przestrzenią niezmienników zderzeń, a każdy wektor ψ z \mathbb{F} nazywamy niezmiennikiem zderzeń. Oczywiście mamy

$$\begin{aligned} \dim \mathbb{F} &= q \\ \mathbb{F} \oplus \mathbb{F}^+ &= \mathbb{R}^p. \end{aligned}$$

Dowodzi się, że obowiązuje

Lemat 2.1. Niech $\psi = (\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_p)$ będzie wektorem z \mathbb{R}^p . Następujące własności są równoważne

- a) $\psi \in \mathbb{F}$
- b) $\psi_{i_\alpha} + \psi_{j_\alpha} = \psi_{k_\alpha} + \psi_{l_\alpha}$, ($\alpha = 1, 2, \dots, p - q$)
dla każdego zderzenia $(i_\alpha, j_\alpha; k_\alpha, l_\alpha) \in Q$

$$c) \quad \varphi_i + \varphi_j = \varphi_k + \varphi_l$$

dla każdego zderzenia $(i,j;k,l) \in \bar{Q}$.

W ten sposób mając dany zbiór zderzeń podstawowych Q możemy wyznaczyć zbiór wszystkich zderzeń nietrywialnych, a także skonstruować przestrzeń niezmienników zderzeń. Możliwe jest podejście odwrotne, o czym mówi

Lemat 2.2. Niech $i,j;k,l$ ($1 \leq i,j,k,l \leq p$) będą takimi liczbami naturalnymi, że dla każdego wektora

$$\varphi = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_p) \in \mathbb{F}$$

$$\varphi_i + \varphi_j = \varphi_k + \varphi_l$$

wtedy albo $(i,j;k,l)$ jest zderzeniem trywialnym, albo $(i,j;k,l) \in \bar{Q}$.

Tę możliwość konstrukcji dyskretnego modelu równania Boltzmana poprzez uprzednie zadanie jego przestrzeni niezmienników zderzeń wykorzystamy w następnym rozdziale do konstrukcji dyskretnych modeli dla mieszanin.

Mając skonstruowaną przestrzeń niezmienników zderzeń możemy skonstruować maxwellian. Czynimy to w sposób następujący.

Niech \mathbb{R}_+^p będzie podzbiorem tych wektorów z \mathbb{R}^p , których wszystkie składowe są dodatnie.

Dla wygody wprowadzamy oznaczenie następujące: niech

$N = (N_1, N_2, \dots, N_p) \in \mathbb{R}^p$. Symbolem $\ln N$ oznaczamy wektor dany przez

$$\ln N = (\ln N_1, \ln N_2, \dots, \ln N_p).$$

Teraz wprowadzamy definicję

Definicja 2.6. Każdy wektor $N \in \mathbb{R}_+^p$, taki że $\ln N \in \mathbb{F}$

nazywamy maxwellianem.

W ten sposób skonstruowaliśmy zderzenia, niezmienniki zderzeń i przestrzeń niezmienników zderzeń a także maxwellian bez znajomości operatora zderzeń. Teraz przystępujemy do jego konstrukcji.

Operator zderzeniowy

Niech \mathcal{F} będzie symetrycznym dwuliniowym operatorem

$$\mathcal{F}: \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^p \longrightarrow \mathbb{R}^p.$$

Jego i -ta składowa \mathcal{F}_i dana jest przez

$$\mathcal{F}_i(U, V) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^p \sum_{k=1}^p D_{ijk} (U_j V_k + U_k V_j),$$

gdzie U_i, V_j są składowymi wektorów $U, V \in \mathbb{R}^p$ a D_{ijk} są współczynnikami takimi, że

$$D_{ijk} = D_{ikj} \quad (i, j, k = 1, 2, \dots, p).$$

Przyjmujemy

Założenie 2.2. Zbiór wartości \mathcal{F} jest zawarty w \mathbb{F}^+ , tzn.

$$\mathcal{F}: \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^p \longrightarrow \mathbb{F}^+,$$

gdzie \mathbb{F}^+ jest podprzestrzenią \mathbb{R}^p rozpiętą na symbolach zderzeń z \mathbb{Q} .

Wtedy obowiązuje

Lemat 2.3. Operator \mathcal{F} spełnia założenie 2.2 wtedy i tylko wtedy, gdy ma postać

$$(2.2) \quad \mathcal{F}(U, V) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{p-q} \gamma_{\alpha} \sum_{j=1}^p \sum_{k=1}^p C_{\alpha jk} (U_j V_k + U_k V_j)$$

a współczynniki $C_{\alpha jk}$ spełniają warunki

$$C_{\alpha jk} = C_{k j \alpha} \quad \alpha = 1, 2, \dots, p-q \\ j, k = 1, 2, \dots, p,$$

zaś $\gamma^\alpha = \gamma(i_\alpha, j_\alpha; k_\alpha, l_\alpha)$ ($\alpha = 1, 2, \dots, p-q$) są symbolami zderzeń tworzących zbiór zderzeń podstawowych.

Teraz przyjmujemy następujące

Założenie 2.3. Dla dowolnego operatora $\mathcal{F} : \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^p \longrightarrow \mathbb{R}^p$ maxwellian jest rozwiązaniem równania

$$(2.3) \quad \mathcal{F}(N, N) = 0,$$

gdzie maxwellian jest określony w definicji 2.6.

Z definicji maxwellianu, z (2.2) i (2.3) wynika

Lemat 2.4. Operator \mathcal{F} spełnia założenia 2.2 i 2.3 wtedy i tylko wtedy, gdy można przedstawić go w postaci

$$(2.4) \quad \mathcal{F}(U, V) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{p-q} \gamma^\alpha \sum_{(i, j; k, l) \in \bar{Q}} B_\alpha(i, j; k, l) \cdot \\ \cdot (U_i V_j + U_j V_i - U_k V_l - U_l V_k),$$

gdzie $\gamma^1, \gamma^2, \dots, \gamma^{p-q}$ są symbolami zderzeń tworzących zbiór Q zderzeń podstawowych, a $B_\alpha(i, j; k, l)$ są pewnymi współczynnikami liczbowymi.

Przedstawienie operatora \mathcal{F} w postaci (2.4) nie jest jedyne, można znaleźć inne jego reprezentacje. Najogólniejsza reprezentacja \mathcal{F} jest otrzymana w dowodzie Lematu 2.4. Wybraliśmy tę reprezentację, gdyż ona najbardziej przypomina prawdziwe równanie Boltzmann'a.

Nieodwracalność

W teorii pełnego równania Boltzmann'a pokazuje się [7], [8],

że

$$(2.5) \quad \int J(f, f) \ln f \, d\zeta \leq 0$$

gdzie $J(f, f)$ jest operatorem stojącym po prawej stronie równania Boltzmanna (1.1).

Konsekwencją tej nierówności jest znane twierdzenie H Boltzmanna o nieodwracalności.

Ażeby pogłębić podobieństwo między prawdziwym równaniem Boltzmanna i jego dyskretnym analogonem potrzebujemy następującej nierówności

$$(2.6) \quad (\ln N, \mathcal{F}(N, N)) \leq 0$$

dla każdego $N \in \mathbb{R}_+^p$.

Niestety, używając tylko (2.6) nie potrafimy uzyskać żadnych dalszych ograniczeń na współczynniki w przedstawieniu (2.4) operatora \mathcal{F} (wyjątek stanowi szczególnie prosty przypadek $p = 2$, $q = 1$, por. [30]). Dlatego musimy przyjąć bardziej ograniczające założenie. Wstawiając (2.4) do lewej strony (2.6) otrzymujemy

$$(2.7) \quad (\ln N, \mathcal{F}(N, N)) = \\ = \sum_{(i, j; k, l) \in Q} N_i N_j \sum_{\alpha=1}^{p-q} B_\alpha(i, j; k, l) \left(1 - \frac{N_k N_l}{N_i N_j}\right) \ln \frac{N_k N_l}{N_i N_j}$$

Nierówność (2.6) będzie spełniona, gdy

$$(2.8) \quad \sum_{\alpha=1}^{p-q} B_\alpha(i, j; k, l) \left(1 - \frac{N_k N_l}{N_i N_j}\right) \ln \frac{N_k N_l}{N_i N_j} \leq 0$$

dla każdego zderzenia $(i, j; k, l) \in \bar{Q}$.

Przyjmujemy więc

Założenie 2.4. Operator \mathcal{F} dany przez (2.6) jest taki, że dla każdego zderzenia $(i, j; k, l) \in \bar{Q}$ i dla każdego wektora $N \in \mathbb{R}_+^p$ jest spełniona nierówność (2.8).

Założenie to różni się od poprzednich tym, że ma wyraźny

sens mikroskopowy (nierówność (2.3) zachodzi dla każdego zderzenia). Pod tym względem przypomina ono sytuację, która ma miejsce w prawdziwej teorii kinetycznej, gdzie nierówność (2.5) zachodzi dlatego, że funkcja podcałkowa jest nieujemna. To z kolei wynika z wprowadzonej w teorii kinetycznej "strzałki czasu": od niezależności cząstek przed zderzeniem do ich statystycznej zależności po zderzeniu.

Przez analogię można więc interpretować założenie 2.4 jako wprowadzenie "strzałki czasu" w teorii dyskretnych modeli równania Boltzmana.

Z założenia 2.4 a także z lematów 2.3 i 2.4 wynika

Twierdzenie 2.1. Operator dwuliniowy $\mathcal{F} : \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^p \longrightarrow \mathbb{R}^p$ spełnia założenia 2.2, 2.3 i 2.4 wtedy i tylko wtedy, gdy jest on postaci

$$(2.9) \quad \mathcal{F}(U, V) = \\ = \frac{1}{2} \sum_{(i, j; k, l) \in \bar{Q}} A(i, j; k, l) \gamma(i, j; k, l) (U_i V_j + U_j V_i - U_k V_l - U_l V_k),$$

gdzie współczynniki liczbowe $A(i, j; k, l)$ są takie, że dla każdego $(i, j; k, l) \in \bar{Q}$

$$A(i, j; k, l) \geq 0.$$

Korzystając z definicji (2.2) symbolu zderzenia $\gamma(i, j; k, l)$ łatwo przekonujemy się, że (2.9) może być zapisany również w klasycznej postaci danej przez prawą stronę równań (1.5).

Poprawność konstrukcji

Należy jeszcze zbadać, czy przeprowadzona konstrukcja daje istotnie operator o poszukiwanych własnościach. Ponieważ współczynniki A w (2.9) spełniają słabe nierówności,

to w szczególności wszystkie one mogą być równe zero. Wtedy jednak dla takiego, skrajnie zdegenerowanego przypadku, przestrzenią niezmienników zderzeń jest cała przestrzeń \mathbb{R}^p zamiast żądanej jej podprzestrzeni \mathbb{F} . Innym problemem jest wyznaczenie wszystkich rozwiązań równania

$$(2.10) \quad \mathcal{F}(N, N) = 0, \quad N \in \mathbb{R}_+^p.$$

Oczywiście każdy maxwellian spełnia równanie (2.10), ale odwrotne twierdzenie nie jest w ogólności prawdziwe. Jest tak w przypadku, gdy np. wszystkie współczynniki A w (2.9) są równe zero. Wtedy oczywiście, dowolny wektor N z \mathbb{R}_+^p spełnia równanie (2.10).

Te dwa przykłady wskazują, że potrzebne są pewne dodatkowe założenia, które nie wynikają z założeń już przyjętych. Wygodnie jest wprowadzić zbiór $\hat{Q} \subset \bar{Q}$ zderzeń odpowiadających dodatnim współczynnikom A ; definiujemy

$$\hat{Q} = \{(i, j; k, l) \in \bar{Q} : A(i, j; k, l) > 0\}.$$

Przyjmujemy następującą definicję:

Mówimy, że operator \mathcal{F} dany przez (2.9) ma własność zupełności, jeżeli zbiór zderzeń \hat{Q} zawiera $p-q$ zderzeń niezależnych.

Łatwo jest ustalić, czy operator \mathcal{F} ma czy też nie własność zupełności. W tym celu tworzymy macierz Γ , której wiersze (lub kolumny) są utworzone z symboli zderzeń z \hat{Q} . Operator \mathcal{F} ma własność zupełności wtedy i tylko wtedy, gdy rząd macierzy Γ jest równy $p-q$.

Używając pojęcia zupełności operatora \mathcal{F} możemy udowodnić

Twierdzenie 2.2. Każde rozwiązanie $N \in \mathbb{R}_+^p$ równania (2.9)

ma tę własność, że

$$\ln N \in \mathbb{F}$$

tzn. jest maxwellianem wtedy i tylko wtedy, gdy operator ma własność zupełności.

Twierdzenie 2.3. Operator \mathcal{F} dany przez (2.9) ma własność zupełności wtedy i tylko wtedy, gdy \mathcal{F} odwzorowuje $\mathbb{R}^D \times \mathbb{R}^D$ na \mathbb{F}^1 .

Z tych dwu twierdzeń wynika

Twierdzenie 2.4. Każde rozwiązanie $N \in \mathbb{R}_+^D$ równania (2.9) jest typu maxwell-owskiego wtedy i tylko wtedy, gdy operator \mathcal{F} dany przez (2.9) odwzorowuje $\mathbb{R}^D \times \mathbb{R}^D$ na \mathbb{F}^1 .

Zauważmy jednak, że własność zupełności operatora zderzeniowego nie jest konsekwencją przyjętych wcześniej założeń. Muszą więc one być wzmocnione tak, by uniknąć niepożądanych czy wręcz trywialnych sytuacji.

Twierdzenie 2.4 sugeruje wyraźnie jak to uczynić. Można zrobić na dwa równoważne sposoby.

I) Zamiast założenia 2.2 przyjmujemy

Założenie 2.2'. Niech zbiór Q zderzeń podstawowych będzie dany. Zbiorem wartości operatora dwuliniowego \mathcal{F} określonego na $\mathbb{R}^D \times \mathbb{R}^D$ jest \mathbb{F}^1 . Mamy:

Twierdzenie 2.5. Dwuliniowy symetryczny operator \mathcal{F} określony na $\mathbb{R}^D \times \mathbb{R}^D$ spełnia założenia 2.2', 2.3 i 2.4 wtedy i tylko wtedy, gdy ma postać (2.9) z nieujemnymi współczynnikami A oraz gdy ma własność zupełności.

Dodatkowo: każde rozwiązanie równania (2.9) N takie, że

$N \in \mathbb{R}_+^D$ jest typu maxwellowskiego.

II) Zamiast założenia 2.3 przyjmujemy

Założenie 2.3' Każdy wektor $N \in \mathbb{R}_+^D$ spełniający (2.9) jest maxwellianem.

W tym przypadku mamy

Twierdzenie 2.6. Symetryczny dwuliniowy operator \mathcal{F} określony na $\mathbb{R}^D \times \mathbb{R}^D$ spełnia założenia 2.2, 2.3' i 2.4 wtedy i tylko wtedy, gdy jest postaci (2.9) z nieujemnymi współczynnikami A oraz posiada własność zupełności.

Zbiorem wartości \mathcal{F} jest \mathbb{F}^+ .

Fizyczne zasady zachowania

Chcemy podkreślić, że definiując zderzenia i odpowiadającą im przestrzeń niezmienników zderzeń nie używaliśmy w ogóle prędkości molekularnych. Jednak w wielu przypadkach może być rzeczą ważną, aby pęd i energia były zachowane. W tym celu muszą być spełnione (1.3), (1.4) dla każdej czwórki indeksów i, j, k, l takiej, że zderzenie $(i, j; k, l) \in \bar{Q}$. Z lematu 2.1 wynika, że wystarcza, by związki (1.3), (1.4) były spełnione dla każdego i, j, k, l takich, że $(i, j; k, l) \in Q$.

Związek (1.3) oznacza, że wektory

$$(2.11) \quad (v_1^i, v_2^i, \dots, v_p^i) \in \mathbb{F}, \quad i = 1, 2, \dots, d.$$

Niech $\Phi^\alpha = (\Phi_1^\alpha, \Phi_2^\alpha, \dots, \Phi_p^\alpha)$, ($\alpha = 1, 2, \dots, q$) będą wektorami bazowymi w \mathbb{F} . Relacja (2.11) zachodzą wtedy i tylko wtedy, gdy

$$(2.12) \quad \vec{v}_1^i = \sum_{\alpha=1}^q \tilde{c}_\alpha \Phi_i^\alpha, \quad i = 1, 2, \dots, p$$

gdzie $\vec{c}_\alpha \in \mathbb{R}^d$ są dowolnymi wektorami.

Wstawiając (2.12) do (1.4) otrzymamy $p-q$ kwadratowych równań algebraicznych dla qd niewiadomych współrzędnych wektorów $\vec{c}_1, \dots, \vec{c}_q$. Zatem na ogół liczba równań będzie większa niż liczba niewiadomych, a więc otrzymany układ będzie miał, i to niejednoznaczne, rozwiązania. Jeżeli jednak zdarzy się, że ten układ równań nie będzie miał rozwiązań, to będzie to oznaczało, że w danym modelu zasady zachowania pędu i energii nie mogą być jednocześnie spełnione. Jest tak np. gdy $p = 2$ i $q = 1$.

Rozdział 3

ZASTOSOWANIA TEORII

Przykłady

W pracy [2] zajmujemy się konstrukcją współczynników $A(i, j; k, l)$ występujących w operatorze zderzeniowym. Ponieważ jest to adaptacja idei wprowadzonych przez Gatignol [9], to pominiemy tutaj tę konstrukcję. Dokładniej nieco omówimy pewien przykład [2].

Bierzemy $p = 2r$, gdzie r jest pewną liczbą naturalną, taką że $r \geq 2$. Jako zbiór zderzeń podstawowych bierzemy

$$Q = \bigcup_{i=1}^{r-1} \{(i, i+r; i+1, i+r+1)\}.$$

Zbiór \bar{Q} zderzeń dopuszczalnych ma postać

$$\bar{Q} = \bigcup_{1 \leq i < j \leq r} \{(i, i+r; j, j+r)\}$$

Postępując według schematu opisanego w poprzedniej części i zakładając, że każde ze zderzeń z \bar{Q} jest jednakowo prawdopodobne uzyskujemy

$$(3.1) \quad \mathcal{F}_i(N, N) = \frac{2vS}{F} \sum_{j=1}^F (N_{i+j} N_{i+j+r}^{-N_i} N_{i+r}), \quad i=1, 2, \dots, 2r$$

gdzie c jest wielkością o wymiarze prędkości, a S można utożsamiać z przekrojem zderzeniowym, a w (3.1) przyjęliśmy umowę:

jeżeli $i > 2r$, to $i = j \pmod{2r}$, $(1 \leq j \leq 2r)$.

Zatem model jest następujący

$$(3.2) \quad \frac{\partial N_i}{\partial t} + \vec{c}_i \frac{\partial N_i}{\partial \vec{x}} = \overline{F}_i(N, N), \quad i = 1, 2, \dots, 2r$$

gdzie $\vec{c}_i \in \mathbb{R}^d$ ($i = 1, 2, \dots, 2r$), $\vec{x} \in \mathbb{R}^d$, a \overline{F}_i dane są przez (3.1).

Jeżeli zażądamy, by spełnione były zasady zachowania pędu i energii, to uzyskamy

$$(3.3) \quad \begin{aligned} \vec{c}_i &= \vec{v}_0 + \vec{v}_i \\ \vec{c}_{i+r} &= \vec{v}_0 - \vec{v}_i, \quad i = 1, 2, \dots, r \end{aligned}$$

gdzie $\vec{v}_0, \vec{v}_1, \dots, \vec{v}_r$ są dowolnymi wektorami z \mathbb{R}^d , takimi że

$$(3.4) \quad \vec{v}_1^2 = \vec{v}_2^2 = \dots = \vec{v}_r^2 = v$$

Interesujące są przypadki szczególne.

a) Kładąc $d = 2$, $\vec{v}_0 = 0$ oraz

$$(3.5) \quad \vec{v}_i = v \left(\cos \frac{(i-1)\pi}{r}, \sin \frac{(i-1)\pi}{r} \right), \quad i = 1, 2, \dots, r$$

uzyskamy tzw. model regularny o $2r$ prędkościach wprowadzony przez Gatignol [9].

b) Jeżeli przyjmiemy $d = 3$, $r = 3$ oraz $\vec{v}_0 = 0$,

$$(3.6) \quad \vec{v}_1 = v \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{v}_2 = v \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{v}_3 = v \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

to uzyskamy znany model Broadwella [13], (a także (1.17)).

c) Przyjmując $d = 3$, $r = 6$, $\vec{v}_0 = 0$ oraz

$$(3.7) \quad \begin{cases} \vec{v}_i = v(\cos\alpha, \sin\alpha \cos \frac{2i\pi}{3}, \sin\alpha \sin \frac{2i\pi}{3}), & i=1,2,3 \\ \vec{v}_i = v(\cos\beta, \sin\beta \cos \frac{(2i+1)\pi}{3}, \sin\beta \sin \frac{(2i+1)\pi}{3}), & i=4,5,6 \end{cases}$$

gdzie

$$\operatorname{tg} \alpha = 3 - \sqrt{5} \quad , \quad \operatorname{tg} \beta = 3 + \sqrt{6}$$

otrzymamy tzw. model 12-prędkościowy wprowadzony przez Cabannesa [40].

Stosując proponowaną procedurę pokazaliśmy, że te trzy modele są pewnymi szczególnymi przypadkami ogólniejszej klasy modeli. Uzyskaliśmy też pewne uogólnienie każdego z nich, jednakże to uogólnienie można uzyskać bez stosowania teorii naszkicowanej w części II. Istotne jest to, że zastosowanie tej teorii pozwala stwierdzić, że otrzymane uogólnienia są maksymalne w tym sensie, że nie zmieniają zbioru zderzeń charakteryzującego dany model.

Modele dyskretne mieszanin gazów szlachetnych

Założmy, że mamy danych ν dyskretnych modeli równania Boltzmanna, z których każdy składa się z p_1, p_2, \dots, p_ν równań i ma Q_1, Q_2, \dots, Q_ν jako zbiory zderzeń podstawowych. Zadanie polega na napisaniu takiego modelu o $p_1+p_2+\dots+p_\nu$ równaniach, w którym uwzględnione zostałyby nie tylko zderzenia między cząstkami typu (tzw. zderzenia własne), ale też między cząstkami różnych typów (tzw. zderzenia krzyżowe).

Jako pierwszy zadanie to w szczególnym przypadku rozwiązał Cabannes [41]. Zbudował on model o 14 prędkościach używając dwóch modeli Broadwella, a mianowicie wspomnianego już modelu o 6 pręd-

kościach i modelu o 8 prędkościach. Modelu Cabannesa nie można uznać jako modelu mieszaniny dwóch gazów, gdyż zakładał on, że masy obu gazów są jednakowe.

Pierwszy model mieszaniny gazów dopuszczający różne masy został napisany przez Bellomo i de Socio [42]. Swój model zbudowali oni dla mieszaniny dwóch 6-cio prędkościowych modeli Broadwella. Ten model został użyty do badania struktury fali uderzeniowej w binarnej mieszaninie gazów szlachetnych przez Monaco [33], [34] i Płatkowskiego [35]. Przegląd dalszych konstrukcji modeli dyskretnych dla mieszanin oraz próbę ujednoczenia ich i podanie ogólnego schematu podjęli Monaco i Płatkowski [38]. Jednakże podali oni tylko opis idei i pewne nowe modele, natomiast nie byli w stanie ująć tych idei w sposób ilościowy. Jest to związane z geometrycznym podejściem do tego zadania.

Konstrukcja, którą zastosowaliśmy w pracy [2] jest oparta na ideach pracy [1] przedstawionych w części II niniejszego opracowania.

Zakładamy, że każdy z modeli, którego używamy do utworzenia mieszaniny ma ten sam zbiór zderzeń podstawowych. Dokładniej, zakładamy, że

$$p_1 = p_2 = \dots = p_N = p$$

i

$$q_1 = q_2 = \dots = q_N = q.$$

Fizycznie to założenie można interpretować tak, że każdy gaz, traktowany z osobna, podlega dokładnie tym samym przemianom z tym, że potencjał oddziaływań (u nas współczynniki $A(i,j;k,l)$) jest na ogół różny.

Niech \mathbb{F} będzie wspólną dla każdego modelu przestrzenią

niezmienników zderzeń i niech $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_{q-1}$ będzie jej bazą. Przyjmujemy, że $\varphi_0 = (1, 1, \dots, 1)$. Jako przestrzeń niezmienników zderzeń dla mieszaniny przyjmujemy liniową $(q+\nu-1)$ -wymiarową podprzestrzeń \mathbb{F}_M przestrzeni $\mathbb{R}^{p\nu}$ rozpiętą przez $p\nu$ -wymiarowe wektory

$$\begin{aligned}
 \Phi_1 &= (\varphi_0, 0, \dots, 0) \\
 \Phi_2 &= (0, \varphi_0, \dots, 0) \\
 &\dots\dots\dots \\
 (3.8) \quad \Phi_\nu &= (0, 0, \dots, \varphi_0) \\
 \Phi_{\nu+1} &= (\varphi_1, \varphi_1, \dots, \varphi_1) \\
 &\dots\dots\dots \\
 \Phi_{q+\nu-1} &= (\varphi_{q-1}, \varphi_{q-1}, \dots, \varphi_{q-1})
 \end{aligned}$$

gdzie 0 oznacza p -wymiarowy wektor zerowy.

Pierwsze ν wektorów w (3.8) wyraża zachowanie masy każdego składnika podczas zderzenia.

Używając (3.8) jako bazy w \mathbb{F}_M możemy odtworzyć wszystkie typy zderzeń i wobec tego operator zderzeniowy dla mieszaniny. Model ma następującą postać

$$(3.9) \quad \left(I \frac{\partial}{\partial t} + \mathcal{U}^\alpha \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right) N^\alpha = \mathcal{F}^\alpha, \quad \alpha = 1, 2, \dots, \nu$$

gdzie I jest $p \times p$ macierzą jednostkową, $N^\alpha = (N_1^\alpha, \dots, N_p^\alpha)$,

\mathcal{U}^α jest macierzą postaci

$$(3.10) \quad \mathcal{U}^\alpha = \begin{pmatrix} \vec{c}_1^\alpha & 0 \\ 0 & \vec{c}_p^\alpha \end{pmatrix}$$

$\vec{c}_1^\alpha, \dots, \vec{c}_p^\alpha \in \mathbb{R}^d$, ($\alpha = 1, \dots, \nu$), $\vec{x} \in \mathbb{R}^d$, a \mathcal{F}^α ma postać

$$\begin{aligned}
(3.11) \quad \mathcal{F}^{\alpha} = & \sum_{(i,j;k,l) \in \bar{Q}} A_{\alpha\alpha}^{\alpha\alpha}(i,j;k,l) \gamma(i,j;k,l) (N_1^{\alpha} N_j^{\alpha} - N_k^{\alpha} N_l^{\alpha}) + \\
& + \sum_{\substack{\beta=1 \\ \beta \neq \alpha}}^{\alpha\beta} \sum_{(i,j;k,l) \in \bar{Q}} [A_{\alpha\beta}^{\alpha\beta}(i,j;k,l) \gamma(i,k) (N_1^{\alpha} N_j^{\beta} - N_k^{\alpha} N_l^{\beta}) + \\
& + A_{\alpha\alpha}^{\alpha\beta}(i,j;k,l) \gamma(i,l) (N_1^{\alpha} N_j^{\beta} - N_k^{\alpha} N_l^{\beta}) + \\
& + A_{\alpha\beta}^{\beta\alpha}(i,j;k,l) \gamma(j,k) (N_j^{\alpha} N_l^{\beta} - N_k^{\alpha} N_1^{\beta}) + \\
& + A_{\alpha\alpha}^{\beta\alpha}(i,j;k,l) \gamma(j,l) (N_j^{\alpha} N_l^{\beta} - N_k^{\alpha} N_1^{\beta}) + \\
& + \sum_{1 \leq i < j \leq p} A_{\alpha\beta}^{\alpha\beta}(i,j;j,i) \gamma(i,j) (N_1^{\alpha} N_j^{\beta} - N_j^{\alpha} N_1^{\beta})]
\end{aligned}$$

gdzie $\gamma(i,j;k,l) \in \mathbb{R}^p$ jest symbolem zderzenia $(i,j;k,l) \in \bar{Q}$ a $\gamma(i,j)$ jest p -wymiarowym wektorem, którego m -ta składowa jest dana wzorem

$$\gamma_n(i,j) = \sigma_{mj} - \sigma_{mi}, \quad m = 1, 2, \dots, p$$

W (3.11) pierwszy składnik reprezentuje zderzenia między cząstkami tego samego typu, i wobec tego współczynniki $A_{\alpha\alpha}^{\alpha\alpha}(i,j;k,l)$ są takie same jak odpowiednie (tzn. odpowiadające zderzeniu $(i,j;k,l)$) współczynniki w modelu typu α . Pozostałe wyrazy reprezentują zderzenia cząstek typu α z cząstkami typu β ($\beta \neq \alpha$), a zatem współczynniki A występujące w tej sumie charakteryzują zderzenia krzyżowe.

Omówimy teraz fizyczne zasady zachowania.

Niech

$$\psi_j = (\psi_{j1}, \psi_{j2}, \dots, \psi_{jp}), \quad i = 1, 2, \dots, q-1$$

oraz $\psi_0 = (1, \dots, 1)$ będzie bazą w \mathbb{R}^p . Wektor pędu mieszaniny

$$(3.12) \quad (m_1 \vec{c}_1^1, \dots, m_1 \vec{c}_p^1, m_2 \vec{c}_1^2, \dots, m_2 \vec{c}_p^2, \dots, m_\nu \vec{c}_1^\nu, \dots, m_\nu \vec{c}_p^\nu)$$

gdzie $m_\alpha > 0$ ($\alpha = 1, \dots, \nu$) można interpretować jako masę molekuł typu α , jest elementem \mathbb{R}_M^M wtedy i tylko wtedy, gdy

$$(3.13) \quad \vec{c}_i^\alpha = \vec{v}_0^\alpha + \mu_\alpha \sum_{j=1}^{q-1} \vec{v}_j \psi_{ji}, \quad i = 1, \dots, p, \quad \alpha = 1, \dots, \nu$$

gdzie \vec{v}_0^α i \vec{v}_j są dowolnymi wektorami z \mathbb{R}^d , a

$$\mu_\alpha = \frac{m_1}{m_\alpha}, \quad \alpha = 1, 2, \dots, \nu.$$

Wektor energii mieszaniny

$$(3.14) \quad (m_1 (\vec{c}_1^1)^2, \dots, m_1 (\vec{c}_p^1)^2, \dots, m_\nu (\vec{c}_1^\nu)^2, \dots, m_\nu (\vec{c}_p^\nu)^2)$$

jest niezmiennikiem zderzeniowym wtedy i tylko wtedy, gdy jest on ortogonalny do symbolu każdego zderzenia w mieszaninie. Prowadzi to do dość skomplikowanych równań algebraicznych, które wobec tego pominiemy. Bardziej szczegółowo omówimy tzw. modele regularne, w których

$$(3.15) \quad \left(\sum_{m=1}^{q-1} \vec{v}_m \psi_{mi} \right)^2 = v^2, \quad i = 1, 2, \dots, p$$

Energia mieszaniny jest niezmiennikiem wtedy i tylko wtedy, gdy

$$(3.16) \quad (\vec{v}_0^\alpha - \vec{v}_0^{\alpha+1}) \sum_{m=1}^{q-1} \vec{v}_m (\psi_{mi} - \psi_{m,i+1}) = 0$$

Zakładając, że $q > d$ i że wektory

$$\sum_{m=1}^{q-1} \vec{v}_m (\psi_{mi} - \psi_{m,i+1})$$

są liniowo niezależne, otrzymujemy z (3.16)

$$\vec{v}_0^\alpha = \vec{v}_0 \quad (\alpha = 1, 2, \dots, \nu).$$

Ze względu na transformację Galileusza możemy przyjąć bez straty ogólności, że $\vec{v}_0 = 0$. Wtedy wzory (3.13) dają

$$(3.17) \quad \vec{c}_i^\alpha = \mu_\alpha \sum_{m=1}^{q-1} \vec{v}_m \psi_{mi}, \quad i = 1, 2, \dots, p; \alpha = 1, \dots, \nu$$

W szczególnym przypadku (3.15), (3.16) zasady zachowania pędu i energii mieszanej są spełnione.

Rozważania tego punktu kończymy konstrukcją mieszaniny gazów, z których każdy jest modelem omówionym w punkcie poprzednim tej części. W tym modelu regularnym

$$\begin{aligned} \vec{c}_i^\alpha &= \mu_\alpha \vec{v}_i \\ \vec{c}_{i+r}^\alpha &= -\mu_\alpha \vec{v}_i, \end{aligned} \quad i = 1, 2, \dots, r$$

gdzie $\vec{v}_i \in \mathbb{R}^d$ i mają ten sam moduł.

Model jest następujący

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mu_\alpha \vec{u}_m \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right) N_m^\alpha = \\ &= \frac{v}{2r} \sum_{\beta=1}^{\nu} S_{\alpha\beta} (\mu_\alpha + \mu_\beta) \sum_{j=1}^{2r} (N_{m+j}^\alpha N_{m+j+r}^\beta - N_m^\alpha N_{m+r}^\beta) \\ &+ \frac{v}{2r} \sum_{\beta=1}^{\nu} S_{\alpha\beta} \sum_{j=1}^{2r} \sqrt{\mu_\alpha^2 + \mu_\beta^2 - 2\mu_\alpha \mu_\beta \cos \psi_{m,m+j}} (N_{m+j}^\alpha N_m^\beta - N_m^\alpha N_{m+j}^\beta), \end{aligned}$$

$m = 1, 2, \dots, r$

gdzie

$$\begin{aligned} \vec{u}_m &= \vec{v}_m \\ \vec{u}_{m+r} &= -\vec{v}_m, \end{aligned}$$

zaś Ψ_{ij} jest kątem między \vec{v}_i i \vec{v}_j .

Szczególnym przypadkiem dla $\nu = 2$, $r = 3$ i \vec{v}_i danym przez (3.6) jest model Bellomo-de Socio, a także, oczywiście przy innych ν i r , model mieszaniny skonstruowany w [38] przez Monaco i Płatkowskiego.

Konstrukcja modeli dyskretnych dla mieszanin gazów chemicznie czynnych

Podamy teraz konstrukcję takich modeli dyskretnych, które mogą być interpretowane jako modele dla mieszanin gazów z reakcjami chemicznymi. Modelowanie opieramy na teorii gazów rzeczywistych, podanej w pracach [43], [44].

Przyjmujemy dwa podstawowe założenia, które z punktu widzenia chemii są bardzo ograniczające. Są to:

a) uwzględniamy tylko binarne zderzenia, tzn. w wyniku zderzenia się (reakcji) dwóch cząstek pozostają zawsze tylko dwie cząstki, chociaż być może innego rodzaju,

b) zakładamy, że obowiązuje tzw. zasada bilansu szczegółowego. Mówiąc z grubsza, polega ona na tym, że reakcja prosta i odwrotna są symetryczne. Ta zasada jest w przybliżeniu spełniona tylko wtedy, gdy mieszanina znajduje się w pobliżu stanu równowagi chemicznej [43].

Mimo tego otrzymane równania są bardzo złożone. Należy też zaznaczyć, że zdaniem autora możliwe jest takie rozszerzenie konstrukcji podanej w rozdziale 2, by uwzględnić zderzenia wielocząstkowe. Prowadzi to jednak do olbrzymiej komplikacji i zaciera przejrzystość i czytelność modelu. Innymi słowy założenie a) ma techniczny charakter uproszczenia. Założenie b) jest o wiele bardziej istot-

ne, i nie jest jasne jak go osłabić. Jest ono powszechnie przyjmowane, w różnych formach, w teoriach kinetycznych opartych na ciągłym rozkładzie prędkości molekularnych, gdyż bez jakiejś formy założenia bilansu szczegółowego nie można osiągnąć praktycznie żadnych wyników.

Dalsze założenia, jakie przyjmujemy, dotyczą składu i struktury rozważanej mieszaniny.

Zakładamy, że znamy wszystkie rodzaje molekuł B_α ($\alpha = 1, 2, \dots, \nu$), które mogą wystąpić w mieszaninie. Dalej, niech molekula B_α składa się z atomów $A^{(\lambda)}$ ($\lambda = 1, 2, \dots, \mu$). Skład atomowy molekuly zapisujemy w postaci wzoru chemicznego

$$B_\alpha = A_{K_{1\alpha}}^{(1)} A_{K_{2\alpha}}^{(2)} \dots A_{K_{\mu\alpha}}^{(\mu)}$$

gdzie $K_{\beta\alpha}$ ($\beta = 1, 2, \dots, \mu$, $\alpha = 1, 2, \dots, \nu$) jest liczbą atomów typu β w molekule typu α . Zakładamy, że znamy z chemii te liczby.

Zakładamy też, że znamy, na podstawie rozważań chemicznych, wszystkie typy reakcji, jakie mogą wystąpić w rozważanej mieszaninie.

W tym punkcie postępujemy podobnie jak w punkcie poprzednim, tzn. rozważamy ν modeli, z których każdy ma tę samą ilość prędkości p i ten sam zbiór zderzeń podstawowych Q .

Rozpoczynamy od skonstruowania przestrzeni niezmienników zderzeń $\mathbb{F}_M \subset \mathbb{R}^{p\nu}$ dla mieszaniny. Po pierwsze, zachowuje się całkowita ilość cząstek, gdyż wynikiem zderzenia się dwóch cząstek są znowu dwie cząstki. Zatem wektor

$$(3.18) \quad \vec{\Phi}_0 = (\psi_0, \psi_0, \dots, \psi_0) \in \mathbb{R}^{p\nu},$$

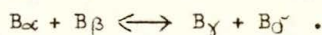
gdzie jak poprzednio $\psi_0 = (1, 1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^p$, jest niezmiennikiem zderzeniowym.

Następne prawo zachowania wyraża zachowanie liczby atomów w molekułach przed i po zderzeniu, czyli

$$K_{\lambda\alpha} + K_{\lambda\beta} = K_{\lambda\gamma} + K_{\lambda\sigma}$$

$$(\lambda = 1, 2, \dots, \kappa)$$

dla każdej reakcji typu



Zatem p_1 -wymiarowe wektory

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}_1 &= (K_{11}\psi_0, K_{12}\psi_0, \dots, K_{1\nu}\psi_0), \\ \bar{\Phi}_2 &= (K_{21}\psi_0, K_{22}\psi_0, \dots, K_{2\nu}\psi_0), \\ &\dots\dots\dots \\ \bar{\Phi}_\kappa &= (K_{\kappa 1}\psi_0, K_{\kappa 2}\psi_0, \dots, K_{\kappa\nu}\psi_0) \end{aligned} \quad (3.19)$$

powinny być zaliczone w skład niezmienników zderzeniowych.

Przy dodatkowym założeniu, wynikającym z rozważań fizyko-chemicznych, że składowe atomy $A^{(1)}, A^{(2)}, \dots, A^{(\kappa)}$ są zawarte w zestawie molekuł B_α , tzn. że istnieje chociaż jedna $(\kappa+1 \leq \beta \leq \nu)$, taka że

$$(3.20) \quad \sum_{\alpha=1}^{\kappa} K_{\alpha\beta} \neq 1$$

można dowieść, podobnie jak w [43], [44], że wektory $\bar{\Phi}_0, \bar{\Phi}_1, \dots, \bar{\Phi}_\kappa$ są liniowo niezależne w \mathbb{R}^{p_1} .

W końcu zakładamy, że inne wielkości reprezentowane przez

$\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{q-1}$ są zachowywane w czasie zderzenia.

Zatem wektory

$$\begin{aligned}
 \Phi_{\mathcal{N}+1} &= (\psi_1, \psi_1, \dots, \psi_1) \in \mathbb{R}^{p\mathcal{V}} \\
 \Phi_{\mathcal{N}+2} &= (\psi_2, \psi_2, \dots, \psi_2) \in \mathbb{R}^{p\mathcal{V}} \\
 &\dots\dots\dots \\
 \Phi_{q+\mathcal{N}-1} &= (\psi_{q-1}, \psi_{q-1}, \dots, \psi_{q-1}) \in \mathbb{R}^{p\mathcal{V}}
 \end{aligned}
 \tag{3.21}$$

są elementami \mathbb{F}_M .

Przy założeniu (3.20) wektory (3.18), (3.19), (3.21) są liniowo niezależne i bierzemy je jako bazę w \mathbb{F}_M .

Oczywiście

$$\dim \mathbb{F}_M = q + \mathcal{N} .$$

Znajomość bazy, a przez to i całej przestrzeni \mathbb{F}_M pozwala na wyznaczenie zbioru wszystkich reakcji w rozważanej mieszaninie. W wyniku zastosowania rozważań rozdziału 2 możemy skonstruować operator zderzeniowy.

Wygodniej jest podzielić zderzenia na dwa typy: zderzenia sprężyste i zderzenia niesprężyste. Zderzeniami sprężystymi nazywa się zderzenia, w wyniku których molekuly zachowują swoją tożsamość, a zderzeniami niesprężystymi nazywa się te, w wyniku których powstają dwie, zupełnie różne, ale będące w zestawie dopuszczalnych typów molekuly.

Zgodnie z tym, operator zderzeniowy dzieli się na dwie części: część odpowiadającą za zderzenia sprężyste, $\mathcal{F}_{e,\alpha}$, i część odpowiadającą za zderzenia niesprężyste, $\mathcal{F}_{in,\alpha}$.
Piszemy więc

$$\mathcal{F}_\alpha = \mathcal{F}_{e,\alpha} + \mathcal{F}_{in,\alpha} \quad , \quad \alpha = 1, 2, \dots, \mathcal{V} .$$

Część sprężysta $\mathcal{F}_{e,\alpha}$ jest taka sama jak w punkcie poprzednim i dana jest wzorem (3.11). Część niesprężysta $\mathcal{F}_{in,\alpha}$ jest o wiele bardziej skomplikowana ze względu na różnorodność zderzeń niesprężystych i dlatego ominiemy ją (jest ona dana wzorem (4.10) pracy [2]). Omówimy za to bardziej szczegółowo fizyczne zasady zachowania.

Po pierwsze, ponieważ pęd zachowuje się w każdym typie zderzenia, sprężystym i niesprężystym, to ν -wymiarowe wektory pędu mieszanki (3.12) muszą być elementami \mathbb{F}_M . Daje to

$$(3.22) \quad \vec{c}_i^\alpha = \mu_\alpha (\vec{A}^\alpha + \vec{B}_i)$$

gdzie

$$\vec{A}^\alpha = \sum_{j=1}^{\nu} K_{j\alpha} \vec{a}_j, \quad \alpha = 1, 2, \dots, \nu$$

$$\vec{B}_i = \sum_{j=1}^{q-1} \psi_{ji} \vec{b}_j, \quad i = 1, 2, \dots, p.$$

Tutaj $\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_\nu, \vec{b}_1, \dots, \vec{b}_{q-1}$ są dowolnymi wektorami z \mathbb{R}^d , $\mu_\alpha = m_1/m_\alpha$, a ψ_{ji} , ($i = 1, \dots, p$) są składowymi $\psi_j \in \mathbb{R}^p$ ($j = 1, 2, \dots, q-1$).

Zderzenia niesprężyste nie zachowują energii translacyjnej, ale zachowują sumę energii translacyjnej i wewnętrznej. Dlatego niezmiennikiem zderzeń powinien być wektor

$$(\frac{1}{2}m_1(\vec{c}_1^1)^2 + E_1, \dots, \frac{1}{2}m_1(\vec{c}_p^1)^2 + E_1, \dots, \frac{1}{2}m_\nu(\vec{c}_1^\nu)^2 + E_\nu, \dots, \frac{1}{2}m_\nu(\vec{c}_p^\nu)^2 + E_\nu),$$

gdzie E_α jest energią wewnętrzną molekuly B_α .

Prowadzi to do jeszcze bardziej skomplikowanych równań na składowe wektorów $\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_\nu, \vec{b}_1, \dots, \vec{b}_{q-1}$ niż w przypadku mieszanki gazów szlachetnych.

Wieloatomowe molekuly nie mogą być traktowane jako sferycznie symetryczne i dlatego mamy dodatkowy niezmiennik zderzeń, którym jest w istocie średni moment pędu \vec{I}_α (teraz zakładamy, że $d = 3$). Jest to spełnione, gdy

$$\vec{I}_\alpha = \sum_{\beta=1}^N K_{\beta\alpha} \vec{J}_\beta, \quad \alpha = 1, 2, \dots, N$$

gdzie $\vec{J}_\beta \in \mathbb{R}^3$ są dowolnymi wektorami.

W pracy [2] pokazujemy ponadto, że maxwellian w rozważanym przypadku dyskretnym przypomina bardzo maxwellian uzyskany w przypadku ciągłego rozkładu prędkości przy założeniu zasady bilansu szczegółowego (p. [43], [44]). W szczególności obie teorie dają tę samą postać potencjału chemicznego.

Modele nietrywialne [3]

Pojęcie wprowadzone w rozdziale 1 znajduje zastosowanie nie tylko do konstrukcji modeli o pewnych własnościach, ale też do rozważań teoretycznych. Niektóre z nich zostały podane już w rozdziale 1, teraz podamy dalsze. Chodzi tu o tzw. modele nietrywialne. Ogólna teoria rozdziału 1 nie wyklucza takich modeli, które rozpadają się na dwa lub więcej modeli niezależnych, ani też o takie modele, w których jakaś ze składowych wektora operatora zderzeniowego jest równa tożsamościowo zeru, bez względu na to, jakie jest N .

Problem ten został już podjęty przez Gatignol ([9], str. 21 i 22). Teraz, używając pojęcia zbioru zderzeń podstawowych udało się otrzymać dodatkowe zależności między liczbą równań p , wymiarem przestrzeni niezmienników zderzeń q i wymiarem r jej dopełnienia do \mathbb{R}^p . Chodzi oczywiście o dodatkowe zależności oprócz

tych oczywistych, że $1 \leq p < q$ i $q+r = p$.

Najpierw jednak zdefiniujemy precyzyjnie pojęcie modelu nietrywialnego.

Na zbiorze indeksów $\{1, 2, \dots, p\}$ wprowadzamy następującą relację (por. [9], str. 16).

Mówimy, że

$$i \sim j \quad \text{jeżeli 1) lub 2)}$$

- 1) indeksy i oraz j są równe
- 2) indeksy i oraz j są różne, ale istnieje skończony ciąg indeksów k_1, k_2, \dots, k_i , taki że następujące zderzenia

$$(i, k_1; k_2, k_3), (k_3, k_4; k_5, k_6), \dots, (k_{i-5}, k_{i-4}; k_{i-3}, k_{i-2}),$$

$$(k_{i-2}, k_{i-1}; k_i, j)$$

są nietrywialne i należą do \bar{Q} .

Powyższa relacja jest relacją równoważności [9]. Klasę abstrakcji, do której należy i , oznaczamy przez \bar{i} .

Dyskretny model równania Boltzmanna nazywamy nietrywialnym, jeżeli jego zbiór zderzeń podstawowych jest taki, że

$$\bar{1} = \{1, 2, \dots, p\};$$

w przeciwnym przypadku model nazywamy trywialnym.

Zachodzą następujące twierdzenia [3]

Twierdzenie 2.7. Niech różnica $p-q = r$ będzie zadana. Dyskretny model może być nietrywialny wtedy, gdy liczba jego równań p przyjmuje jedną z wartości

$$p = r+1, r+2, \dots, 3r+1.$$

Dla innych wartości p model jest zawsze trywialny.

Twierdzenie 2.8. Najmniejszy, tzn. składający się z najmniejszej liczby równań dyskretny model równania Boltzmanna, mający z góry zadany wymiar q swojej przestrzeni niezmienników zderzeń, składa się z

$$p_{\min} = q + \left[\frac{q}{2} \right], \quad q = 2, 3, \dots$$

i $p_{\min} = 2$, gdy $q = 1$, równań.

Tutaj, $[x]$ oznacza część całkowitą liczby rzeczywistej x .

Twierdzenie 2.9. Niech $p \geq 2$ będzie ustaloną z góry liczbą równań modelu dyskretnego. Dla każdego q naturalnego, takiego że

$$1 \leq q \leq p - \left[\frac{p+1}{3} \right]$$

można zbudować model nietrywialny taki, że q jest wymiarem jego przestrzeni niezmienników zderzeń. Jeżeli zaś

$$p - \left[\frac{p+1}{3} \right] < q < p$$

to model jest trywialny.

W szczególności z twierdzenia 2.7 wynika, że jedynie dla $p = 2, 3, 4$ mogą istnieć modele nietrywialne mające $p-1$ niezależnych niezmienników zderzeń.

Część II

Rozdział 4

PROPAGACJA FAL DŹWIĘKOWYCH

Wstęp

Jedną z przyczyn, dla których zajęto się tak intensywnie modelami równania Boltzmanna była nadzieja, że przy dostatecznie dużej ilości prędkości uwzględnionych w modelu można będzie uzyskać dostatecznie dokładne przybliżenie do rozwiązania odpowiedniego zagadnienia na gruncie pełnego równania Boltzmanna.

Problem ten nie został należycie wyjaśniony, chociażby z tej przyczyny, że nie jest wytypowany taki ciąg modeli dyskretnych, który możnaby traktować jako "zbieżny" do pełnego równania Boltzmanna. Słowo "zbieżny" ujęliśmy w cudzysłów, gdyż nie jest też jasne, w jakim sensie tę zbieżność rozumieć. W pracach [4] i [5] rozważaliśmy znacznie prostsze zagadnienie z uwzględnieniem przejścia granicznego z liczbą prędkości dążącą do nieskończoności. Badaliśmy propagację fal dźwiękowych w półdyskretnym modelu zaproponowanym przez Cabannesa [45] i w regularnym dyskretnym modelu o $2r$ prędkościach [9] interesując się zwłaszcza przejściem granicznym przy $r \rightarrow \infty$. Okazuje się, że dla zagadnienia propagacji fal swobodnych modele dyskretne przybliżają rozwiązanie uzyskane w granicznym modelu półdyskretnym, zaś dla zagadnienia fal wymuszonych tak w ogólności nie jest.

Związane jest to z charakterem widma operatora opisującego odpowiednie zagadnienie. W pierwszym problemie (fale swobodne) widmo to jest ograniczone i uzyskuje się zbieżność modelu dyskretnego do półdyskretnego; w drugim problemie (fale wymuszone) widmo jest nieograniczone i takiej zbieżności brak.

Ponieważ zagadnienie propagacji dźwięku na gruncie pełnego zlinearyzowanego operatora równania Boltzmann'a zawsze prowadzi do operatorów z nieograniczonym widmem, a modele dyskretnie ze względu na skończoną ilość prędkości prowadzą do operatorów o ograniczonym widmie, to wynika stąd wniosek, że w ogólności nie należy spodziewać się tego, że rozwiązanie każdego zagadnienia uzyskanego w ramach pełnej teorii kinetycznej da się przybliżyć przez jakiś uniwersalny ciąg modeli dyskretnych. Przeciwnie, należy się spodziewać tego, że dla każdego danego zagadnienia trzeba będzie dobierać odpowiedni model dyskretny.

Nie należy jednak sądzić, że modele dyskretnie są zupełnie nieprzydatne do uzyskiwania poprawnych wyników numerycznych. Przeczą takiemu stanowisku wyniki, które już uzyskano. Z powyższych spostrzeżeń wynika tylko tyle, że nie należy poszukiwać uniwersalnego schematu.

Model Cabannesa jako granica modeli regularnych

Półdyskretny model Cabannesa jest następującym równaniem różniczkowo-całkowym [45]

$$\begin{aligned}
 (4.1) \quad & \frac{\partial}{\partial t} N(t, \vec{x}, \theta) + \bar{c} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} N(t, \vec{x}, \theta) = \\
 & = \frac{cS}{\pi} \int_0^{2\pi} N(t, \vec{x}, \psi) N(t, \vec{x}, \psi + \pi) d\psi - 2cSN(t, \vec{x}, \theta) N(t, \vec{x}, \theta + \pi)
 \end{aligned}$$

gdzie $t \geq 0$, $\vec{x} = (x, y) \in \mathbb{R}^2$, $\theta \in \langle 0, 2\pi \rangle$, $N(t, \vec{x}, \theta)$ jest nieznaną funkcją rozkładu, okresową względem θ o okresie 2π

$$(4.2) \quad N(t, \vec{x}, \theta + 2\pi) = N(t, \vec{x}, \theta),$$

zaś prędkości molekularne \vec{c} są następujące

$$(4.3) \quad \vec{c} = c(\cos\theta, \sin\theta)$$

gdzie $c > 0$; w (4.1) S jest dodatnią stałą.

W pracy [45] H. Cabannes zaproponował swój model jako przypadek graniczny tzw. płaskich modeli regularnych

$$(4.4) \quad \begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} N_m(t, \vec{x}) + \vec{c}_m \frac{\partial}{\partial \vec{x}} N_m(t, \vec{x}) = \\ & = \frac{2cS}{r} \sum_{l=m+1}^{m+r-1} (N_l N_{l+r} - N_m N_{m+r})(t, \vec{x}) \end{aligned}$$

przy $r \rightarrow \infty$. Tutaj $N_m(t, \vec{x})$, ($m = 1, 2, \dots, 2r$) są niewiadomymi funkcjami, zaś

$$(4.5) \quad \vec{c}_m = c \left(\cos \frac{(m-1)\pi}{r}, \sin \frac{(m-1)\pi}{r} \right), \quad m = 1, 2, \dots, 2r.$$

Pisząc równanie (4.4) użyliśmy umowy

$$(4.6) \quad N_{m+2r} = N_m,$$

będącej odpowiednikiem (4.2).

Istniejące wyniki dotyczące modelu Cabannesa nie są zbyt liczne. Bellomo, Illner i Toscani [46] udowodnili globalne istnienie i jednoznaczność rozwiązań zagadnienia Cauchy'ego dla tego modelu przy założeniu, że dane początkowe są dostatecznie małe i dostatecznie szybko znikają, gdy $|\vec{x}| \rightarrow \infty$.

Niedawno Longo, Monaco i Płatkowski [47] badali własności termodynamiczne tego modelu i pewne jego zastosowania do klasycznych

zagadnień hydrodynamicznych.

Linearyzujemy formalnie równanie (4.1) wokół jednorodnego stanu równowagi N_0 kładąc

$$(4.7) \quad N(t, \vec{x}, \theta) = N_0 [1 + P(t, \vec{x}, \theta)] ,$$

gdzie P jest małym zaburzeniem. Z powyższego i z (4.2) wynika okresowość funkcji $P(t, \vec{x}, \theta)$ względem θ z tym samym okresem 2π . Wygodnie jest wprowadzić

$$(4.8) \quad \begin{aligned} A(t, \vec{x}, \theta) &= \frac{1}{2} [P(t, \vec{x}, \theta) + P(t, \vec{x}, \theta + \pi)] \\ B(t, \vec{x}, \theta) &= \frac{1}{2} [P(t, \vec{x}, \theta) - P(t, \vec{x}, \theta + \pi)] . \end{aligned}$$

Z tych definicji wynika, że

$$(4.9) \quad \begin{aligned} A(t, \vec{x}, \theta + \pi) &= A(t, \vec{x}, \theta) \\ B(t, \vec{x}, \theta + \pi) &= -B(t, \vec{x}, \theta) \end{aligned}$$

Teraz procedura jest standardowa. Wstawiamy (4.7) do równania (4.1) i zachowując tylko wyrazy zawierające \mathcal{P} w pierwszej potędze otrzymujemy zlinearyzowane równanie Cabannesa. Z tego równania i z okresowości $P(\theta)$ można uzyskać równanie tylko na $A(t, \vec{x}, \theta)$. Jest ono następujące

$$(4.10) \quad \frac{\partial^2}{\partial t^2} A - (\vec{c} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}})^2 A + 4cSN_0 \frac{\partial}{\partial t} A = \frac{4cSN_0}{91} \int_0^{2\pi} \frac{\partial}{\partial t} A \, d\varphi .$$

Ze względu na (4.9) można ograniczyć θ do przedziału $\langle 0, \pi \rangle$. Znając $A(\theta)$ możemy znaleźć $B(\theta)$, a zatem w myśl (4.8) możemy znaleźć $P(\theta)$ (p. [4]).

Odpowiednią procedurę powtarzamy dla modelu dyskretnego (4.4) kładąc

$$N_m(t, \vec{x}) = N_0 [1 + P_m(t, \vec{x})],$$

i jako dyskretny odpowiednik równania (4.10) znajdujemy

$$(4.11) \quad \frac{\partial^2}{\partial t^2} A_m - \left(\vec{c} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right)^2 A_m + 4cSN_0 \frac{\partial}{\partial t} A_m = \frac{4cSN_0}{r} \sum_{k=1}^r \frac{\partial}{\partial t} A_k,$$

$$m = 1, 2, \dots, r.$$

W dalszej części tego rozdziału będziemy interesowali się związkami między modelami (4.10) i (4.11).

Fale swobodne

Rozważamy jednowymiarowy przepływ w kierunku osi x -ów okresowy względem x . Przyjmujemy więc

$$(4.12) \quad A(t, \vec{x}, \theta) = a(\theta) \exp(ikx - \omega t)$$

w przypadku ciągłym oraz

$$(4.13) \quad A_m(t, \vec{x}) = a_m \exp(ikx - \omega t), \quad m = 1, 2, \dots, r$$

w przypadku dyskretnym. Tutaj liczba falowa k jest traktowana jako wielkość dana i dodatnia a częstość ω jest nieznaną funkcją zespoloną od k . Podstawiając (4.12), (4.13) odpowiednio do (4.10) i (4.11) otrzymujemy

$$(4.14) \quad (\lambda^2 - 2R\lambda + \cos^2\theta)a + \frac{2R\lambda}{\pi} \int_0^\pi a \, d\psi = 0$$

w przypadku ciągłym oraz

$$(4.15) \quad (\lambda^2 - 2R\lambda + \cos^2 \frac{(m-1)\pi}{r})a_m + \frac{2R\lambda}{r} \sum_{k=1}^r a_k = 0$$

$$m = 1, 2, \dots, r$$

w przypadku dyskretnym.

W (4.14), (4.15) użyliśmy następujących oznaczeń

$$\lambda = \frac{\omega}{ck}$$

oraz

$$R = \frac{2SN_0}{k} .$$

Parametr R można interpretować jako odwrotność liczby Knudsen'a i oczywiście będzie on odgrywał zasadniczą rolę.

Sybolem $T(\lambda)$ oznaczamy operator liniowy generowany przez lewą stronę równania (4.14). Jako jego dziedzinę bierzemy zbiór wszystkich funkcji ciągłych określonych na przedziale $\langle 0, \pi \rangle$. Ponieważ jest to zbiór gęsty (w odpowiedniej topologii) w wielu przestrzeniach funkcyjnych, to nasze wyniki można odpowiednio uogólnić. Nie przeprowadzamy tego, by zbytnio nie komplikować rozważań.

Widmo operatora $T(\lambda)$ nazywamy "uogólnionym", aby podkreślić to, że nie badamy osobliwości klasycznego operatora rezolwenty postaci

$$(\lambda I - A)^{-1}$$

gdzie A jest pewnym operatorem, a I jest tożsamością.

Analiza uogólnionego widma operatora $T(\lambda)$ jest dość prosta i szczegóły podane są w pracy [4].

Jego widmo składa się z części istotnej σ_e , gdzie

$$\sigma_e = \left\{ \lambda \in \mathbb{C} : -1 \operatorname{Re}(\lambda^2 - 2R\lambda) \leq 0, \operatorname{Im}(\lambda^2 - 2R\lambda) = 0 \right\},$$

gdzie \mathbb{C} jest płaszczyzną zespoloną, zaś Re oraz Im oznaczają odpowiednio część rzeczywistą i urojoną liczby zespolonej.

Uogólnione widmo dyskretne składa się z dwóch wartości własnych λ_+ i λ_- , które są sprzężone w sensie liczb zespolonych, i których część rzeczywista jest dodatnia dla $R > 0$. Można znaleźć na nie jawne wzory [4].

Uogólnione widmo operatora $T(\lambda)$ i jego zależność od R pokazane są na rys.1.

Rozważmy teraz przypadek dyskretny (4.15). Symbolem $T_r(\lambda)$ oznaczamy operator generowany przez lewą stronę (4.15). Odwzorowuje on r -wymiarową przestrzeń zespoloną \mathbb{C}^r w siebie. Jego widmo nazywamy uogólnionym, aby zaznaczyć, że (4.15) nie jest klasycznym zagadnieniem własnym typu

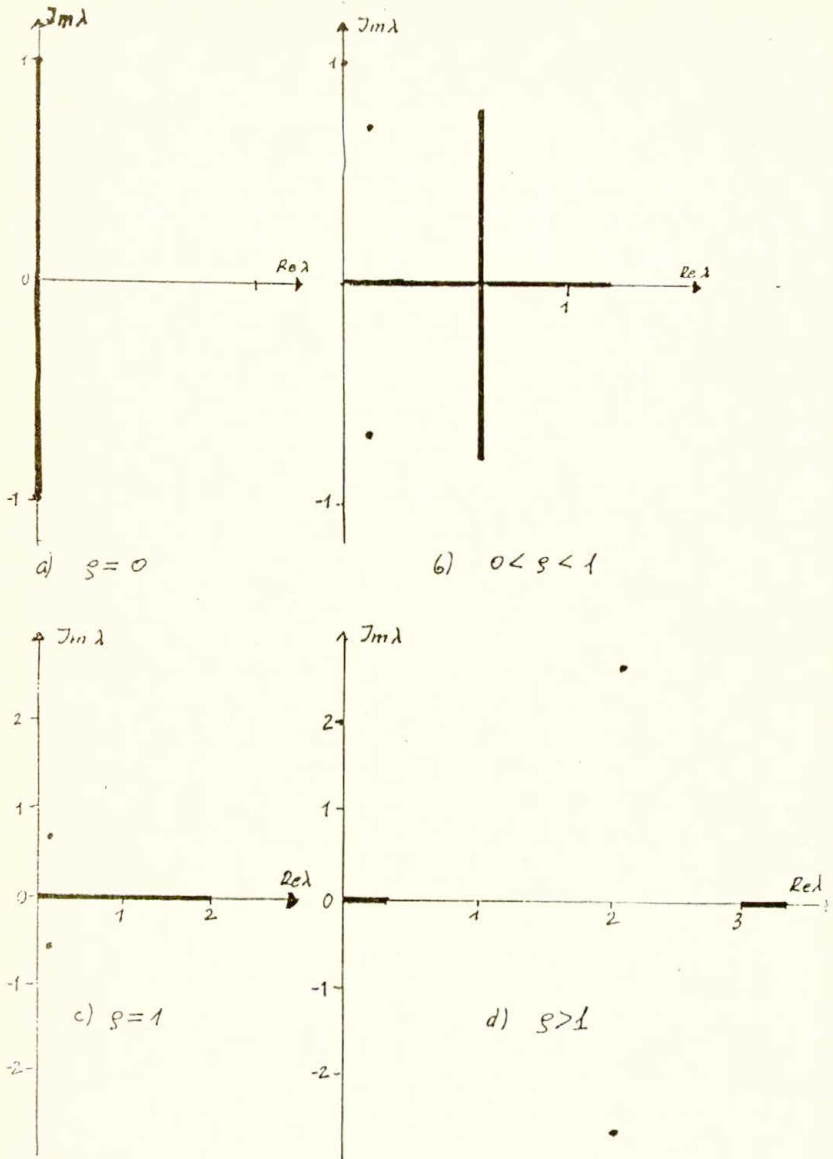
$$\det(\lambda I - A) = 0,$$

gdzie I jest macierzą jednostkową, a A jest jakąś daną macierzą kwadratową.

Wyznaczenie widma uogólnionego operatora $T_r(\lambda)$ jest bardziej złożone niż jego ciągłego odpowiednika $T(\lambda)$ i dlatego pominiemy tutaj ten problem i ograniczymy się do podania wyników istotnych dla wyjaśnienia przejścia granicznego z $r \rightarrow \infty$.

Mamy

Lemat 4.1. Jeżeli $R > 0$, to dla każdego rzeczywistego ε , takiego że $0 < \varepsilon < \operatorname{dist}(\lambda_{\pm}, \sigma_e)$, gdzie λ_{\pm} są uogólnionymi wartościami własnymi $T(\lambda)$, a $\operatorname{dist}(z, A)$ oznacza odległość punktu zespolonego z od zbioru $A \subset \mathbb{C}$, istnieje liczba naturalna r_{ε} , taka że dla każdego $r \geq r_{\varepsilon}$, operator $T_r(\lambda)$ ma



Rys.1. Uogólnione widmo operatora $\mathbf{T}(\lambda)$ danego przez (4.14).

dokładnie jedną wartość własną $\lambda_+^{(r)}$ i jedną wartość własną $\lambda_-^{(r)}$ należące do ε -wego otoczenia odpowiednio λ_+ lub λ_- .

Wprowadzamy oznaczenia: σ_r jest zbiorem uogólnionych wartości własnych operatora $T_r(\lambda)$, σ_∞ definiujemy wzorem

$$\sigma_\infty = \bigcup_{r=2}^{\infty} \sigma_r,$$

σ_∞^d jest pochodną zbioru σ_∞ , tzn. zbiorem jego punktów skupienia, wreszcie σ_T jest całkowitym uogólnionym widmem operatora $T(\lambda)$, tzn.

$$\sigma_T = \sigma_e \cup \{\lambda_+, \lambda_-\}$$

Mamy

Twierdzenie 4.1. Dla każdego $R \geq 0$,

$$\sigma_\infty^d \subset \sigma_T.$$

Innymi słowy każdy ciąg różnych elementów, z których każdy jest uogólnioną wartością własną jakiegoś operatora dyskretnego $T_r(\lambda)$ może być zbieżny tylko do punktu uogólnionego widma operatora $T(\lambda)$.

Zachodzi też odwrotne

Twierdzenie 4.2. Każdy punkt λ uogólnionego widma σ_T może być przybliżony przez ciąg $\{\lambda_n\} \subset \sigma_\infty$.

W szczególności z tego twierdzenia wynika, że

$$\sigma_e \subset \sigma_\infty^d.$$

W praktyce chcielibyśmy wyznaczyć uogólnione widmo dla jakiegoś jednego operatora $T_r(\lambda)$ z ustalonym, być może nawet

dużym wskaźnikiem r , i wiedzieć, że uogólnione wartości własne tego operatora przybliżają, ze z góry zadaną dokładnością, każdy punkt uogólnionego widma operatora $T(\lambda)$. Byłoby też rzeczą bardzo pożądaną, gdyby ten wskaźnik r można było dobrać niezależnie od R .

Jest to możliwe, jeżeli $R \geq 1$. Dokładniej mamy

Twierdzenie 4.3. Niech $R \geq 1$. Wtedy w każdym ε -wym otoczeniu punktu $\lambda \in \sigma_e$, istnieje co najmniej jeden element z $\sigma_r \cap \sigma_\varepsilon$ o ile

$$r \geq \pi \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon}\right)^2.$$

To oszacowanie nie zależy od R .

Ostatnim zagadnieniem, jakie tu poruszamy jest problem przybliżania funkcji własnych operatora $T(\lambda)$ mając do dyspozycji wektory własne operatorów $T_r(\lambda)$. To zagadnienie może mieć wiele różnych rozwiązań. Rozwiązanie, które wyoraliśmy, jest następujące.

Wprowadzamy funkcję

$$a(\lambda, \theta) = \frac{1}{\lambda^2 - 2R\lambda + \cos^2 \theta},$$

gdzie $0 \leq \theta < \pi$, $\lambda \in \mathbb{C} - \sigma_e$.

Jeżeli $\lambda = \lambda_+$ lub $\lambda = \lambda_-$, to $a(\lambda_{\pm}, \theta)$ są funkcjami własnymi operatora $T(\lambda)$. Jeżeli zaś $\lambda_{\pm}^{(r)}$ są tymi uogólnionymi wartościami własnymi operatora $T_r(\lambda)$, o których mówi się w lemacie 4.1, to wektor $(a_{\lambda_+}^{\pm}, \dots, a_{\lambda_-}^{\pm})$, którego m -ta składowa dana jest wzorem

$$a_m^\pm = a(\lambda_{\pm}^{(r)}, \frac{(m-1)\pi}{r})$$

jest wektorem własnym odpowiadającym $\lambda_{\pm}^{(r)}$. (Wektory własne odpowiadające pozostałym wartościom własnym operatora $T_r(\lambda)$ są podane w [4]).

Niech $\chi_m(\theta)$ będzie funkcją charakterystyczną przedziału $\langle \frac{(m-1)\pi}{r}, \frac{m\pi}{r} \rangle$ ($m = 1, 2, \dots, r$).

Używając składowych wektora własnego tworzymy funkcję schodkową

$$a_r^\pm(\theta) = \sum_{m=1}^r a(\lambda_{\pm}^{(r)}, \frac{(m-1)\pi}{r}) \chi_m(\theta)$$

Mamy następujące

Twierdzenie 4.4. Jeżeli $R > 0$, to jednostajnie względem $\theta \in \langle 0, \pi \rangle$ zachodzi równość

$$\lim_{r \rightarrow \infty} a_r^\pm(\theta) = a_{\pm}(\theta).$$

Z tego twierdzenia i z ograniczoneści przedziału $\langle 0, \pi \rangle$ wynika zbieżność ciągu funkcyjnego $\{a_r^\pm(\theta)\}$ do $a_{\pm}(\theta)$ w przestrzeniach $L_p(\langle 0, \pi \rangle)$ (p . [4]).

Wymuszone fale dźwiękowe

Poprzednio badaliśmy zależność częstości od długości fali. Jest to typowe podejście do zagadnienia tłumienia pewnego zaburzenia początkowego. Eksperymentalnie jednak częściej badane są fale wymuszone. W tym podejściu interesujemy się zależnością liczby falowej od częstości.

Teraz rozwiązań równania (4.10) poszukujemy w postaci

$$(4.16) \quad A(t, \vec{x}, \theta) = a(\theta) \exp[i(kx - \omega t)]$$

gdzie zespolona liczba falowa jest traktowana jako niewiadoma funkcja od dodatniej częstości ω .

Z (4.10) i (4.16) otrzymujemy następujące równanie dla amplitudy $a(\theta)$

$$(4.17) \quad (1 + iR - 2\lambda^2 \cos^2 \theta) a(\theta) - \frac{iR}{\pi} \int_0^\pi a(\psi) d\psi = 0$$

gdzie teraz

$$(4.18) \quad \lambda = \frac{kc}{\sqrt{2} \omega}$$

$$(4.19) \quad R = \frac{4cSN_0}{\omega}$$

W przypadku dyskretnym podstawiamy

$$A_m(t, \vec{x}) = a_m [i(kx - \omega t)] , \quad m = 1, 2, \dots, r$$

do równań (4.11) i dla współczynników a_m otrzymujemy następujące równanie algebraiczne

$$(4.20) \quad (1 + iR - 2\lambda^2 \cos^2 \frac{(m-1)\pi}{r}) a_m - \frac{iR}{r} \sum_{k=1}^r a_k = 0, \quad m=1, 2, \dots, r$$

gdzie λ i R są dane odpowiednio przez (4.18) i (4.19).

Używamy terminologii i oznaczeń podobnych jak w poprzednim punkcie. Operator generowany przez lewą stronę równania (4.17) oznaczamy $T(\lambda)$, zaś operator generowany przez lewą stronę oznaczamy przez $T_r(\lambda)$. Wyrażenie "widmo uogólnione" jest uży-

wane w sensie wyjaśnionym również w poprzednim paragrafie.

Uogólnione widmo ciągłe σ_e operatora $T(\lambda)$ ma teraz postać

$$\sigma_e = \left\{ \lambda \in \mathbb{C} : 0 \leq \operatorname{Re} \frac{2(1+iR)}{\lambda^2} \leq 1, \operatorname{Im} \frac{2(1+iR)}{\lambda^2} = 0 \right\}.$$

Uogólnione widmo dyskretne składa się z dwóch wartości własnych, które są dane przez równanie

$$(4.21) \quad \lambda^2 = \frac{1+2iR}{2(1+iR)}$$

Pełne widmo σ_T operatora $T(\lambda)$ przedstawione jest na rys.2 dla kilku wartości R , dokładniej dla $R = 0$ do 3 ze skokiem 0.5. Dla każdej ustalonej wartości R , uogólnione istotne widmo operatora $T(\lambda)$ składa się z dwóch promieni leżących na tej samej prostej. Liniją przerywaną oznaczyliśmy brzeg obszaru

$$\bigcup_{R \geq 0} \sigma_e(R).$$

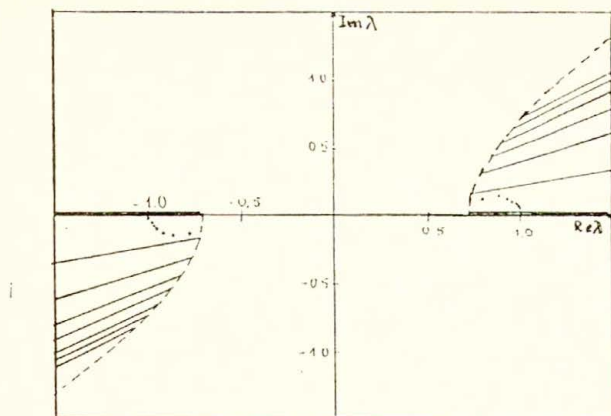
Jest on hiperbolą o równaniu

$$2(x^2 - y^2) = 1.$$

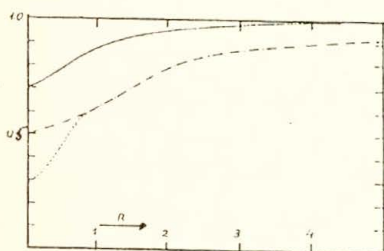
Punkty na rys.2 reprezentują widmo dyskretne dla $R = 0$ do 3 z krokiem 0.5.

Wartości własne operatora $T(\lambda)$ mają bezpośredni sens fizyczny. Mianowicie, część rzeczywista λ jest dyspersją dźwięku, tzn. odwrotnością bezwymiarowej prędkości dźwięku, a część zespolona λ jest współczynnikiem pochłaniania dźwięku. Są one podane na rysunkach 3 i 4 w funkcji odwrotności parametru rozrzedzenia (liczby Knudsen) R .

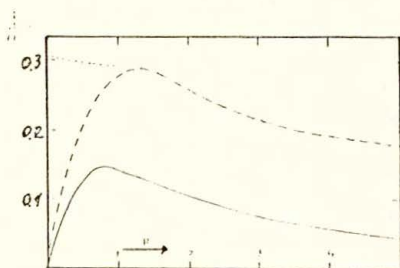
Obecne wyniki wykazują pewne jakościowe podobieństwo do wyników



Rys.2. Uogólnione widmo operatora $I(\lambda)$ danego przez (4.17).



Rys.3. Dyspersja dźwięku.



Rys.4. Współczynnik przenikania.

Na rysunkach 3 i 4 linia ----- oznacza wyniki Pekerisa et al. [40], linia oznacza wyniki Sirovicha i Ithurbera [50], a linia ciągła oznacza wyniki obecnej teorii.

uzyskanych przez Pekerisa, Altermana, Filkensteina i Frankowskiego [48] dla pełnego linearyzowanego równania Boltzmanna. W szczególności widzimy z rysunku 4, że współczynnik pochłaniania znika, gdy częstość ω rośnie do nieskończoności. Jest to jednak wynik nierealistyczny, gdyż zarówno eksperymenty [49], jak i teoria Sirovicha i Thurbera [50] przewidują skończone dodatnie pochłaniania przy dużych wartościach ω . Aby wyjaśnić zgodność między obecnymi wynikami a wynikami pracy [48] musimy przypomnieć pokrótce metodę zastosowaną w [48].

Pekeris, Alterman, Finkelstein i Frankowski poszukiwali rozwiązań linearyzowanego równania Boltzmanna w postaci szeregu wielomianów Sonina, a następnie obcinali ten szereg na pewnej (dużej, oo wynoszącej prawie 500) liczbie wyrazów. Ponieważ takie obcięcie daje rozwinięcie asymptotyczne, które nie jest jednostajne, gdy prędkość molekularna dąży do nieskończoności, to oni w istocie zaniedbali duże prędkości. Podobnie w modelu Cabannesa duże prędkości molekularne są zaniedbywane, bo one wszystkie mają ten sam moduł. Zatem w obu podejściach nie uwzględnia się dużych prędkości molekularnych i to naszym zdaniem czyni te wyniki podobnymi i jednocześnie nierealistycznymi w zakresie dużych częstości.

Przechodzimy obecnie do omówienia dyskretnego operatora $T_r(\lambda)$ danego przez lewą stronę równania (4.20). Analiza tego zagadnienia jest dość podobna do analizy problemu dyskretnego dyskutowanego w poprzednim paragrafie, jest też równie żmudna.

Można dowieść (p.[5]), że obecnie zachodzą lemat 4.1 oraz twierdzenia 4.1, 4.2, ale nie zachodzi twierdzenie 4.3. Oznacza to niemożność przybliżania uogólnionego widma istotnego operatora $T(\lambda)$ przez uogólnione widmo operatora $T_r(\lambda)$ dla jakiegoś ustalonego, chociażby i dużego r . Jest tak dlatego, że dla

każdego ustalonego r (oraz R) widmo operatora $T_r(\lambda)$ zawiera się w jakimś ograniczonym podzbiornie płaszczyzny zespolonej \mathbb{C} , zaś uogólnione istotne widmo operatora $T(\lambda)$ jest nieograniczone. Wobec tego, pod tym względem półdyskretny model Cabanessa nie może być traktowany jako granica regularnego modelu o $2r$ prędkościach.

Podobnie jak poprzednio można przybliżyć funkcje własne operatora $T(\lambda)$ przez funkcje schodkowe zbudowane z wektorów własnych odpowiadających tym uogólnionym wartościom własnym operatorów $T_r(\lambda)$, o których mowa w lemacie 4.1.

Literatura

Prace stanowiące rozprawę habilitacyjną

1. K.Piechór, A rational construction of discrete velocity models of the Boltzmann equation. Archives of Mechanics, 40, 4, 315-335 (1988)
2. K.Piechór, Discrete velocity models for mixtures of noble and chemically active gases, Archives of Mechanics, 41, 1, 95-113 (1989)
3. K.Piechór, Existence of nontrivial discrete velocity models of the Boltzmann equation, Biuletyn PAN, Seria Techn. 37, 10-12 (1989)
4. K.Piechór, Spectral problems for semidiscrete and discrete models of the Boltzmann equation, Part I. Praca przyjęta do druku w Archives of Mechanics.
5. K.Piechór, Spectral problems for semidiscrete and discrete models of Boltzmann equation.
Praca przyjęta do druku w Archives of Mechanics.
Część wyników prac [4],[5] została opublikowana w pracy [6].
6. K.Piechór, Dispersion relations for semidiscrete and discrete models of the Boltzmann equation. 238-247, Proceedings of the Workshop on Discrete Kinetic Theory, Lattice Gas Dynamics and Foundations of Hydrodynamics, Torino, Italy, 1988, wydawca R.Monaco, World Scientific, Singapore (1989)

Inne cytowane publikacje

7. S.Chapman, T.G.Cowling, The mathematical theory of nonuniform gases, Cambridge University Press, Cambridge (1952)
8. M.N.Kogan, Dinamika razreżennogo gaza, Nauka, Moskwa (1967)
9. R.Gatignol, Théorie Cinétique des Gaz a Répartition Discrète de Vitesses, Lecture Notes in Physics 36, Springer Verlag, Berlin (1975)
10. R.Gatignol, F.Coulouvrat, Constitutive laws for discrete velocity models of gas. 121-145, Proceedings of the Workshop on Discrete Kinetic Theory, Lattice Gas Dynamics and Foundations of Hydrodynamics, Torino, Italy, 1988. Wydawca R. Monaco, World Scientific, Singapore (1989)
11. T.Carleman, Problèmes.Mathématiques dans la Théorie Cinétique des Gaz. Public. Scient. de l'Inst. Mittag-Leffler Uppsala, 104-106 (1957)
12. T.Carleman, Sur la théorie de l'équation integro-differentielle de Boltzmann. Acta Math. 60, 91-140 (1933)
13. I.E.Broadwell, Shock structure in a simple discrete velocity gas, The Physics of Fluids, 7, 8, 1243-1247 (1964)
14. T.Płatkowski, R.Illner, Discrete velocity models of the Boltzmann equation: A survey on the mathematical aspects of the theory, SIAM Review, 213-255 (1988)
15. U.M.Sultangazin, Metody sfericzeskich garmonik i diskretnych ordinat w zadaczach kineticzeskoj teorii perenosa, Nauka, Alma-Ata (1979)
16. U.M.Sultangazin, Diskretnyje nieliniejnyje modeli urawnienija Bolcmana, Nauka, Alma-Ata (1985)

17. R. di Perna, P.L.Lions, On the Cauchy problem for Boltzmann equations: global existence and weak stability. *Ann. Math.* (1988)
18. C.Cercignani, Discrete models in kinetic theory, 62-73, *Proceedings of the Workshop on Discrete Kinetic Theory, Lattice Gas Dynamics and Foundations of Hydrodynamics, Torino, Italy. World Scientific, Singapore* (1989)
19. T.Łatkowski, Nonuniqueness of the boundary value problems for two-velocity models of the Boltzmann equation, preprint (1989)
20. H.Cornille, Exact solutions to the Broadwell model in 1+1 diemsnions, *J. Phys. A: Math. Gen.* 20, 1973-1988 (1987)
21. H.Cornille, Positive (2+1)-dimensional exact shock waves solutions to the Broadwell model, *J. Math. Phys.* 30, (4), 789-797 (1988)
22. H.Cornille, Exact solutions for discrete kinetic models with ternary solutions, *J.Math. Phys.* 29 (7), 1667-1667 (1988)
23. J.-P.Duruissseau-Aloyd, H.Cabannes, Construction, using Macsyma, of exact solutions for some discrete models of the Boltzmann equation, praca przyjeta do druku w *Archives of Mechanics*
24. R.Ellis, M.A.Pinsky, Limit theorems for model Boltzmann equations with several conserved quantities. *Indiana University Mathematical Journal*, 23, 4, 287-307 (1973)
25. R.Ellis, M.A.Pinsky, The first and second fluid approximations to the linearized Boltzmann equation. *J. Math. pures at appl.*

54, 125-156 (1975)

26. M.A.Pinsky, On the Navier-Stokes approximation to the linearized Boltzmann equation, *J. Math. pures et appl.* 55, 217-231 (1976)
27. R.E.Caflish, G.C.Papanicolaou, The fluid dynamical limit of the nonlinear model Boltzmann equation. *Comm. Pure Appl. Math.* 32, 589-616 (1979)
28. R.E.Caflish, The fluid dynamics limit of the nonlinear Boltzmann equation. *Comm. Pure Appl. Math.* 33, 651-666 (1980)
29. W.Fiszdon, R.Herczyński, Z.Walenta, The structure of a plane shock wave of a monatomic gas: Theory and experiment. *Ninth Intern. Symp. Rarefied Gas Dynamics*, 1-57, Appendix B, (1974)
30. R.E.Caflish, Navier-Stokes and Boltzmann shock profiles for a model of gas dynamics, *Comm. Pure Appl. Math.* 32, 589-616 (1979)
31. S.Kawashima, A.Matsumura, Asymptotic stability of traveling wave solutions of systems for one-dimensional gas motion. *Comm. Math. Phys.* 101, 97-127 (1985)
32. C.Cercignani, R.Illner, M.Shinbrot, A boundary value problem for discrete velocity models. *Duke Math. Journal* 55, 889-900 (1987)
33. R.Monaco, Shock-wave propagation in gas mixtures by means of a discrete velocity model of the Boltzmann equation. *Acta Mechanica*, 55, 239-251 (1985)
34. R.Monaco, On the shock wave structure in a binary mixture

- represented by a discrete velocity model. Proceedings of the 15-th RGD Symposium, V.Boffi, C.Cercignani eds., Teubner Verlag, Stuttgart (1986)
35. T.Łatkowski, Shock wave structure in a binary mixture of Broadwell discrete velocity gases. Mech. Res. Comm. 14, (5/6), 347-354 (1987)
36. T.Łatkowski, Shock wave profiles for discrete velocity models of mixtures, 248-257, Proceedings of the Workshop on Discrete Kinetic Theory, Lattice Gas Dynamics and Foundations of Hydrodynamics, wyd. R.Monaco; World Scientific, Singapore (1989)
37. K.Piechór, A discrete kinetic model admitting compression and expansion shock waves, będzie opublikowana w Archives of Mechanics
38. R.Monaco, T.Łatkowski, The discrete Boltzmann equation for gas mixtures: modelling and some analytical results. Politecnico di Torino, Rapporto interno, 19 (1987)
39. J.Hardy, Y.Pomeau, G.de Pazzis, Time evolution from a two dimensional model systems, I. Invariant states. J. Math. Physics, 14, 1746-1759 (1973)
40. H.Cabannes, Solution globale de l'équation de Boltzmann discrete pour les modeles spatiaux reguliers a 12 ou a 20 vitesses. Mech. Res. Comm. 10, 317-322 (1983)
41. H.Cabannes, Étude de la propagation des ondes dans un gaz à 14 vitesses. Journal de Mecanique, 14, 4, 705-744 (1975)
42. N.Bellomo, L.M. De Socio, The discrete Boltzmann equation for gas mixtures. A regular space model and shock wave problem.

Mec. Res. Comm. 4, 233-238 (1983)

43. S.W.Wallander, I.A.Jegorowa, M.A.Rydalewskaja, Statistical Boltzmann distribution as a solution of kinetic equations for gas mixtures, Westnik Leningradskogo Uniwersiteta, 2, 57-70, (1964)
44. S.W.Wallander, I.A.Jegorowa, M.A.Rydalewskaja, Extension of the Chapman-Enskog method to mixtures of gases with internal degrees of freedom and chemical reactions. Aerodinamika Razreżennych Gazow, wyd. S.W.Wallander, II, 122-162, Leningrad (1965)
45. H.Cabannes, Global solution of the discrete Boltzmann equation, w: Mathematical Problems in the Kinetic Theory of Gases, wyd. D.Pack, H.Neunzert, Verlag D. Lang, Frankfurt (1980)
46. N.Bellomo, R.Illner, G.Toscani, Sur le problème de Cauchy pour l'équation de Boltzmann semi-discrète. C.R.Acad.Sci. Paris, Série I, No 6 (1984)
47. E.Longo, R.Monaco, T.Płatkowski, Sound and shock wave propagations by the semidiscrete Boltzmann equation. J. Mec.Theor. Appl. 2, 3, 233-243 (1988)
48. C.L.Pekeris, Z.Alterman, L.Finkelstein, K.Frankowski, Propagation of sound in a gas of rigid spheres, Phys. Fluids, 5, 12, 1608-1616 (1962)
49. M.Greenspan, Propagation of sound in five monatomic gases, J.Acoust.Soc.Am. 28, 4, 644-648 (1956)
50. L.Sirovich, J.K.Thurber, On the propagation of forced sound waves in rarefied gas dynamics, J.Acoust.Soc.Am. 37, 2, 329-339 (1965)

