

ТУРБУЛЕНТНОСТЬ

КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ БОЛЬЦМАНА

ФГБОУ ВО "Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)" (МАИ):

Юрий Михайлович Кочетков, д.т.н., профессор

Николай Юрьевич Кочетков, к.т.н., старший преподаватель

Кинетическое уравнение Больцмана описывает статистическое распределение частиц в газе или жидкости. Является основным уравнением физической кинетики, которое описывает системы, далёкие от термодинамического равновесия. Уравнение Больцмана описывает эволюцию во времени плотности распределения. Записывается для фазового объекта в виде равенства субстанциональной производной функции распределения и интеграла столкновений. В результате исследований был проведен анализ уравнения Больцмана и возможных методов его решения. Установлено, что аналитическое решение сопряжено с огромными математическими трудностями и в настоящее время их нет. В релаксационном приближении к равновесию записан новый вариант уравнения Больцмана через энтропию. Получена аналитическая зависимость времени релаксации от энтропии.

The Boltzmann kinetic equation describes the statistical distribution of particles in a gas or liquid. It is the basic equation of physical kinetics that describes systems that are far from thermodynamic equilibrium. The Boltzmann equation describes the time evolution of the distribution density. It is written for a phase object in the form of equality of the substantial derivative of the distribution function and the collision integral. As a result of the research, an analysis of the Boltzmann equation and possible methods for its solution was carried out. It is established that the analytical solution is associated with huge mathematical difficulties and currently there are no such difficulties. In the relaxation approximation to equilibrium, a new version of the Boltzmann equation is written in terms of entropy. The analytical dependence of the relaxation time on the entropy is obtained.

Ключевые слова: турбулентность, релаксация, кинетика, уравнение Больцмана.

Keywords: turbulence, relaxation, kinetics, Boltzmann equation.

Уравнение Больцмана - универсальное уравнение статистической физики [1]. Оно является основой молекулярно-кинетической теории и снабжает механику сплошных сред необходимыми для практических расчетов переносными свойствами. Уравнение Больцмана представляет собой равенство полной производной плотности распределения молекул и многократного интеграла их столкновений. Интеграл столкновений часто называют правой частью уравнения Больцмана и если он равен нулю, то этот случай называют одночастичным уравнением Лиувилля.

Столкновение частиц приводит к изменению их скоростей. Если определена вероятность рассеяния частицы со скоростью v в состояние со скоростью v' , то интеграл столкновений можно конкретизировать.

Если бы столкновением молекул можно было бы пренебречь, то для функции распределения молекул была бы справедлива теорема Лиувилля, в силу которой правая часть становилась бы равной нулю, а уравнение $df/dt = 0$ описывало бы уравнение равновесия системы.

Другими словами, при величине интеграла столкновений равной нулю реализуется равновесное распределение частиц.

Наиболее известным распределением является распределение Максвелла по скоростям [2]:

$$f_0 = f_i = n_i \left(\frac{m_i}{2\pi kT} \right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{m_i v_i^2}{2kT}},$$

где $\bar{c}_i(x, y, z, t) = \bar{v}_i - \bar{v}_0(x, y, z, t)$.

Уравнения Больцмана и Боголюбова

Вывод общего вида кинетического уравнения Больцмана достаточно трудоемок, поэтому запишем его в окончательном виде [3]:

$$\frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial t} + \frac{\bar{p}_i}{m_i} \frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial \bar{r}} + \bar{x}_i \frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial \bar{p}_i} = \sum_{j=1}^g \iiint (f_i^{(1)'} \cdot f_j^{(1)'} - f_i^{(1)} \cdot f_j^{(1)}) \Omega_{ij} d\bar{b} d\bar{b}' d\varepsilon (d\bar{p}_j).$$

Обозначения в той же ссылке и для краткости не записываются.

В таком виде учитываются все индексы и интегрирование осуществляется для неоднородных газов.

В частном случае одноатомного газа, когда в математичес-

ких выражениях присутствует много симметрии, уравнение Больцмана сильно упрощается, а конкретизация переменных позволяет получить более простой вид интеграла соударений

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \iiint (f' \cdot f'_1 - f \cdot f_1) \sigma d\bar{v}_1.$$

При более строгом подходе для получения кинетического уравнения Больцмана исходят из уравнения Лиувилля для плотности распределения всех молекул газа в фазовом пространстве, из которого получают систему уравнений для функций распределения одной, двух и т.д. молекул. Эту цепочку уравнений решают с помощью разложения по степеням плотности частиц с использованием граничного условия ослабления корреляций, замещающего гипотезу молекулярного хаоса.

Прежде, чем перейти к известным решениям уравнения Больцмана, приведем короткие описания двух практически важных следствий.

H-теорема Больцмана

H-теорема Больцмана доказывает закон возрастания энтропии для изолированной системы и была инициирована Людвигом Больцманом в целях доказательства необратимости процесса перехода системы из неравновесного состояния термодинамической системы в равновесное.

Больцман ввел в обиход понятие H-функции. С одной стороны, он ввел её как обратную по знаку энтропии $H = -S$. С другой как некоторую среднюю от логарифма плотности распределения f : $H(t) = \langle \ln f \rangle$:

$$H(t) = \int \ln f(t, v) \cdot f(t, v) dv,$$

где $f = f(t, v)$ - плотность распределения, зависящая от времени и фазового объёма. Энтропию Больцман характеризовал как: $S = -H = -\ln f$.

Доказательство H-теоремы основано на дифференцировании собственно уравнения Больцмана [4]. Тогда

$$\frac{dH}{dt} = \int (\tilde{f}' - f f') (1 + \ln f) \omega dv dv' \tilde{v}'.$$

Здесь v и v' - скорость частицы-снаряда до соударений и

после, \tilde{v} и \tilde{v}' - скорость частицы-мишени до и после соударений; f с метками - плотности распределения по скоростям молекул снаряда и мишени до и после соударений.

При дальнейших преобразованиях используется следующие гипотезы: первая - гипотеза детального равновесия. Считается что скорости набега и отскока соответствующих частиц равны и можно применять операцию симметризации. При этом можно заменить v на v' и осреднить, поскольку они одинаковы.

И еще. Поскольку мишени и налетающие частицы формируют свой спектр распределения, Больцман для этого разработал ещё одну гипотезу для того, чтобы их всех объединить. Это - **Stoßzahlansatz** - гипотеза числа столкновений. Он рассуждал так: если это вероятности, то они перемножаются; тогда появляются попарные произведения - это плотности распределений до и после столкновений. Значит, что результирующее распределение - есть их разность. Далее, анализируя подынтегральную функцию, Больцман доказывает свое основное утверждение, что $dH/dt < 0$. Из последнего неравенства делается вывод о постоянном возрастании энтропии, и тем самым доказывается второе Начало термодинамики.

Уравнение Чепмена-Энскога

Уравнение Чепмена-Энскога является следствием уравнения Больцмана. Оно также не отличается простотой и математическим изяществом, но оно важно для теоретических исследований.

Уравнение Чепмена-Энскога получается путем проведения нескольких математических операций над уравнением Больцмана.

1. Умножение левой и правой части уравнения на некоторую свободную функцию $\psi_i(c_{ix}, c_{iy}, c_{iz})$, где $\bar{c}_i = v_i - v_0(x, y, z, t)$.
2. Интегрирование левой и правой частей по $d\mathbf{v}$.
3. Интегрирование по частям с учетом быстрого, экспоненциального убывания (v) на хвостах.
4. В процессе преобразований используется свойство симметрии.

Делать вывод этого уравнения не целесообразно в силу названных ранее причин, а запишем его сразу в конечном виде [5]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{i=1}^g n_i \bar{\psi}_i + \frac{\partial}{\partial t} \sum_{i=1}^g n_i \bar{\psi}_i \bar{v}_i - \sum_{i=1}^g n_i \left[\left(\frac{\partial \bar{\psi}_i}{\partial t} + (\bar{v}_i \frac{\partial \bar{\psi}_i}{\partial \bar{r}}) + \left(\frac{\bar{x}_i}{m_i} \frac{\partial \bar{\psi}_i}{\partial \bar{v}} \right) \right) \right] = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^g \sum_{j=1}^g \iint (\psi_i + \psi_j - \psi_i' - \psi_j') (f_i' f_j' - f_i f_j) \Omega b d\mathbf{b} d\mathbf{v} (d\bar{v}_i)(d\bar{v}_j).$$

Преобразование уравнения Чепмена-Энскога приводят его к универсальному уравнению статистической физики, которое связывает в каноническом виде функцию распределения и параметры фазового пространства. Введенные вновь "свободные" функции, в дальнейшем позволили преобразовать статистические уравнения в феноменологические уравнения сохранения в газовой динамике. Соответствующие подстановки позволяют получить всю систему в традиционном виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \rho \bar{v}_0 = 0 - \text{уравнение неразрывности};$$

$$\rho \left[\frac{\partial \bar{v}_0}{\partial t} + (\bar{v}_0 \frac{\partial}{\partial \bar{r}}) \bar{v}_0 \right] = \frac{\partial P}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial r} \tau + \sum_{i=1}^g n_i \bar{x}_i - \text{уравнение импульса};$$

$$\rho \left[\frac{\partial V}{\partial t} + (\bar{v}_0 \frac{\partial}{\partial \bar{r}}) V \right] = - \frac{\partial}{\partial r} \bar{q} - \rho \text{div} \bar{v}_0 + \tau \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \bar{v}_0 + \sum_{i=1}^g n_i (\bar{x}_i \bar{v}_i) - \text{уравнение энергии};$$

$$\frac{p}{\rho} = RT \left(\frac{C_1}{M_1} + \frac{C_2}{M_2} + \dots + \frac{C_V}{M_V} \right) - \text{уравнение состояния}.$$

Теория Чепмена-Энскога представляет собой важный шаг в переходе от микроскопического описания, основанного на движении дискретных частиц, к гидродинамическому континууму.

Учитывая точные операции в процессе преобразований (кроме отмеченной асимптотики) можно считать, что переход от

уравнения Больцмана к уравнению Чепмена-Энскога осуществлен без упрощений.

Таким образом уравнение Чепмена-Энскога не позволяет найти решение уравнения Больцмана - плотность распределения, но позволяет преобразовать уравнение Больцмана в феноменологические уравнения сохранения.

Попытки аналитического решения уравнения Больцмана

Существует приближенное решение кинетического уравнения Больцмана с помощью полиномов Сонина [6]. Как было установлено, что ввиду сложности закона взаимодействия молекул, определяющего функции в интеграле столкновений, уравнение Больцмана, по существу, не может даже быть записано для конкретных газов в точном виде.

В связи с этим в кинетической теории газов приобретают особое значение достаточно эффективные методы приближенного решения уравнения Больцмана. Один из примеров такого решения используется в применении его к одноатомному газу. Рассматривается задача о теплопроводности. Не вникая глубоко в подробности, отметим, что вначале записывается линеаризованное уравнение. Затем вводится линейный оператор и выстраивается интеграл столкновений:

$$f_0(v) = \frac{N\beta^{3/2}}{m^2 \pi^{3/2}} e^{-\beta v^2}.$$

Эффективный метод приближенного решения основан на разложении искомых функций по полной системе взаимно-ортогональных функций, в качестве которых особым удобством обладают полиномы Сонина.

Эти функции определяются формулой:

$$S_r^m(x) = \frac{1}{m!} e^{x^2} \frac{d^m}{dx^m} e^{-x^2} x^{r+m}.$$

Эти функции обладают свойством ортогональности, что является удобным при преобразованиях самого уравнения Больцмана.

Хотя линеаризация сильно упрощает интегро-дифференциальное уравнение Больцмана, тем не менее, сами выкладки достаточно трудоемки и сложны.

Решения даже линейных интегральных уравнений в настоящее время еще не могут быть получены в виде конечных соотношений, либо квадратур.

Они практически всегда могут быть получены, как было уже отмечено лишь в виде бесконечных рядов, например, с помощью полиномов Сонина.

Такая конструкция имеет следующее представление

$$S_n^m(w_i^2) = \sum_{k=0}^m \frac{(-1)^k (m+n)_{m-k}}{(m-k)! k!} (w_i^k)^k.$$

В силу сложности самих полиномов на практике всё равно ищут приближенные функции.

Для нахождения достаточно точных приближенных решений часто используют вариационные методы, то есть сводят приближенное решение каждого интегрального уравнения к нахождению минимума.

Пример с применением полиномов Сонина является чисто иллюстративным. Как видно, такое упрощение решения задачи тоже весьма непривлекательно. Оно лишь демонстрирует возможности использования различных свойств функций и полиномов.

Уравнение равновесия

Уравнения Больцмана справедливы для случая, когда газ находится в каждой точке объема в состоянии локального равновесия. При полном термодинамическом равновесии уравнение Больцмана имеет вид, когда правая его часть равна нулю (многократный интеграл равен нулю). В этом случае справедливо соотношение:

$$f_{0i}^{(1)'} f_{0i}^{(1)''} - f_{0i}^{(1)} f_{0i}^{(1)'} = 0.$$

Сложность уравнения Больцмана еще не дает оснований для пессимизма. Оно является мощнейшим инструментом для анализа процессов, связанных с переносными свойствами, такими как диффузия, вязкость и теплопроводность. Для плазмы еще и электропроводность.

Уравнение Больцмана является сложным интегро-дифференциальным уравнением в частных производных. Кроме того, интеграл столкновений зависит от конкретной системы, от типа взаимодействия между частицами и от других факторов.

Нахождение общих характеристик неравновесных процессов (кинетических процессов) весьма непростое дело. Однако известно (как мы и показали), что в состоянии термодинамического равновесия интеграл столкновений равен нулю.

Действительно, в состоянии равновесия в однородной системе при отсутствии внешних полей (сил) все производные в левой части уравнения Больцмана равны нулю, поэтому интеграл столкновений тоже должен равняться нулю. Основным приложением равновесного уравнения Больцмана является равновесное распределение Максвелла по скоростям $f_0(\vec{v})$. Вторым важным приложением является распределение Больцмана по энергиям.

Уравнение Бхатнагара-Гросса-Крука (BGK-model)

Одним из признанных решений уравнения Больцмана является решение вблизи точки равновесия функции распределения [6]. Другими словами, ищется решение вблизи распределения Максвелла. При этом используется метод малых отклонений, а сама функция представляется в виде суммы равновесной функции и функции её приращения:

$$f = f_0(\vec{v}) + f_1,$$

где $f_0(\vec{v})$ - равновесная функция распределения, которая зависит только от скорости частиц. Эта функция известна из термодинамики, а f_1 - заведомо имеющая небольшое отклонение от равновесного значения.

Кинетическое уравнение Больцмана является интегро-дифференциальным уравнением первого порядка по времени и описывает необратимый переход системы из некоторого начального неравновесного состояния с функцией распределения в конечное равновесное состояние с наиболее вероятной функцией распределения.

В этом случае можно разложить интеграл столкновений в ряд Тейлора относительно функции f_1 и записать его в виде:

$$\frac{f_1}{\tau_{\text{рел}}} = - \frac{f - f_0}{\tau_{\text{рел}}},$$

где $\tau_{\text{рел}}$ - время релаксации.

Такое приближение было названо приближением времени релаксации или моделью интеграла столкновений Бхатнагара-Гросса-Крука (BGK-model).

Время релаксации, входящее в уравнение Больцмана, зависит от скорости частиц, а следовательно, и энергии. Время релаксации можно рассчитать для конкретной системы с конкретными процессами рассеяния частиц.

Уравнение Больцмана в приближении времени релаксации можно записать:

$$\frac{df}{dt} = - \frac{f - f_0}{\tau_{\text{рел}}}.$$

Или в развернутом виде:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + V \text{grad} f + \frac{F}{m} \text{grad} f = - \frac{f - f_0}{\tau_{\text{рел}}}.$$

Новые преобразования и решения

В работах [7, 8, 9] было показано, что любой процесс насыщения можно представить через универсальную функцию. Вид этой функции для разных процессов в безразмерном виде остается одним и тем же, он - универсален.

Функция изображена на рис. 1. и отображает следующие об-

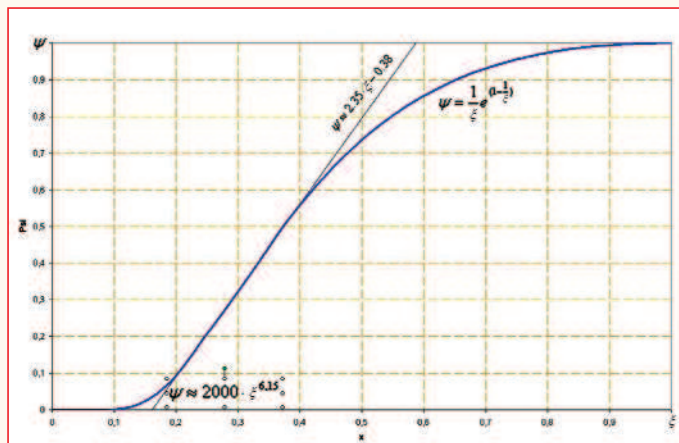


Рис. 1 Нормальная функция насыщения

ласти: область индукции, когда процесс только подготавливается, но еще не идет (интервал [0; 0,1]). Область быстрого нарастания процесса насыщения, когда условия подготовлены и процесс начался [0,1; 0,2]. Интервал [0,2; 0,4] - стабилизация процесса (линейный участок) и интервал [0,4; 1] - завершение процесса насыщения. Интервал [0; 1] является периодом релаксации. За это время процесс достигает состояния равновесия.

Процесс насыщения, по существу, является процессом перехода от одного равновесного состояния в другое, наиболее вероятное. Причем начальное равновесие может быть нарушено путем внешних воздействий на систему. Система может быть выведена из положения равновесия тремя способами. Для плазмы - их четыре. За вывод системы из равновесия отвечают коэффициенты переноса. Если в систему, уравновешенную по определяющим параметрам, сделать дополнительный вброс молекул, то есть в том же объеме увеличить их общее количество, тем более со своими локальными скоростями, то равновесие нарушится. Пойдет процесс внутренних течений (токов), который по прошествии процесса релаксации вновь приобретет равновесное состояние. Важным параметром будет коэффициент диффузии. Если в систему добавить дополнительной энергии, например, подогреть газ или его охладить, то равновесный процесс так же нарушится. Появятся токи - внутримолекулярное движение. Новое равновесное состояние состоится после прохождения тепловой релаксации. Коэффициент теплопроводности будет здесь играть определяющую роль. Третьим фактором будет импульс (вязкость). Если частицы как-то разогнать или затормозить, также начнутся внутренние токи в системе. Такой же процесс, при лидирующем параметре электропроводность, может начаться в плазме.

Эти внутренние токи называются энтропийными [10], и они определяют все переносные свойства системы: диффузию, вязкость, теплопроводность и электропроводность в случае плазмы.

Закон $\psi(\xi)$ математическим образом представляется в следующем виде:

$$\psi(\xi) = \frac{1}{\xi} e^{-\frac{1}{\xi}};$$

Здесь и функция, и аргумент являются безразмерными параметрами. Причем для каждого процесса они будут свои. Если применить этот закон к случаю релаксации в молекулярной кинетике, то есть для решения уравнения Больцмана, то величину ξ можно представить как отношение времени процесса ко времени релаксации $\tau_{\text{рел}}$.

Общий процесс релаксации может быть записан с учетом равновесной функции распределения Максвелла f_0 :

$$f = f_0 \cdot \psi(\xi).$$

Равновесие после его нарушения по той или иной причине наступит при $\psi(\xi) = 1$.

Тогда, по аналогии с приближением времени релаксации, уравнение Больцмана можно записать в следующем виде:

$$\frac{df}{dt} = -\frac{f-f_0}{\tau_{\text{рел}}}$$

Поделив левую и правую части уравнения на плотность распределения, получим:

$$\frac{df}{fdt} = -\frac{1 - \frac{f_0}{f}}{\tau_{\text{рел}}}$$

Вводя безразмерное время $\xi = t/\tau_{\text{рел}}$, уравнение преобразуем к виду:

$$\frac{d \ln f}{d\xi} = \frac{1}{\psi(\xi)} - 1$$

Умножая левую и правую части уравнения на константу Больцмана со знаком минус, получаем:

$$\frac{d(-K_B \ln f)}{d\xi} = -K_B \left(\frac{1}{\psi(\xi)} - 1 \right)$$

В скобках слева замечаем статистическую энтропию s:

$$\frac{ds}{d\xi} = -K_B \left(\frac{1}{\psi(\xi)} - 1 \right)$$

С учетом числа Авогадро и молекулярной массы, переписываем уравнение для термодинамической энтропии Клаузиуса относительно газовой постоянной $S/R\mu$:

$$\frac{d(S/R\mu)}{d\xi} = - \left(\frac{1}{\psi(\xi)} - 1 \right)$$

Далее раскрываем содержание функции ψ и записываем очевидное равенство:

$$\frac{d(-ST/R\mu T)}{d\xi} = (\xi e^{\xi^{-1}} - 1) \text{ и } d(-ST/R\mu T) = (\xi e^{\xi^{-1}} - 1) d\xi,$$

где ST - связанная энергия, а $R\mu T$ - большой потенциал.

Интегрирование по безразмерному времени дает зависимость по безразмерной энтропии в виде:

$$-\frac{ST}{R\mu T} = -\xi + \text{const.}$$

Значение константы интегрирования с приближением к состоянию равновесия быстро стремится к нулю. На графиках (рис. 2, 3, 4) видно, что если это условие выполняется в интервале размером 0,01 от положения равновесия, то при дальнейшем приближении к точке равновесия (0,001), постоянная интегрирования практически исчезает. В этом случае решение стремится к равновесному, а энтропия к газовой постоянной. И тогда справедлива связь времени релаксации с энтропией:

$$\frac{ST}{R\mu T} = \xi.$$

Таким образом, в результате исследований было достигнуто следующее.

1. Проведен анализ уравнения Больцмана и возможных методов его решения. Установлено, что аналитическое решение сопряжено с огромными математическими трудностями.

2. В релаксационном приближении к равновесию записан новый вариант уравнения Больцмана через энтропию.

3. Получена аналитическая зависимость времени релаксации от энтропии.

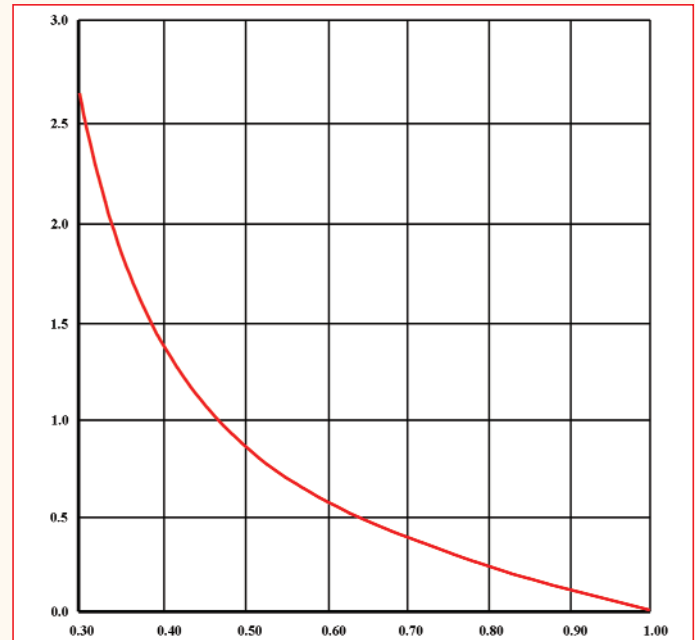


Рис. 2

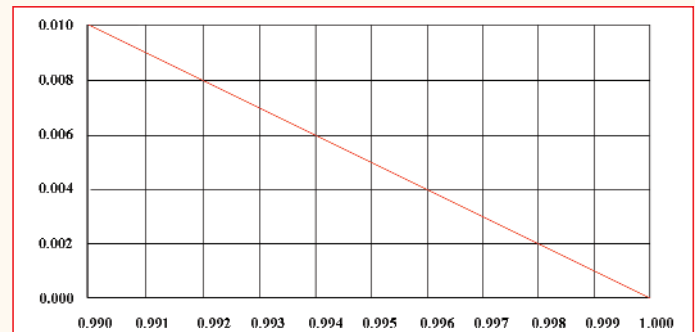


Рис. 3

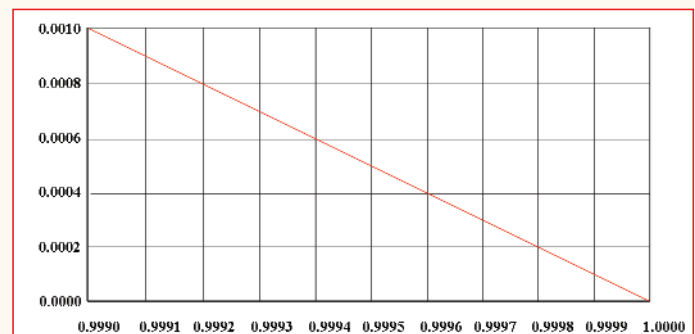


Рис. 4

Литература

1. Л. Больцман. Лекции по теории газов // М. Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1956 г.
2. А.К. Кикоин, И.К. Кикоин. Молекулярная физика // М. Наука, 1976 г.
3. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Гидродинамика // М. Наука, 1986 г.
4. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей // М. ИЛ, 1961 г.
5. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика // М. Наука, 1976 г.
6. Э.Е. Сон. Лекции по физической механике // М. Физматлит, 2010 г.
7. Н.Ю. Кочетков. Разработка и верификация метода и программы расчета внутриваллистических характеристик двигателей твердого топлива с двухсоставными зарядами для перспективных летательных аппаратов // Космонавтика и ракетостроение № 1, 2010 г.
8. Ю.М. Кочетков. Турбулентность. Закон пси от кси // Двигатель № 2, 2017 г.
9. Ю.М. Кочетков, Н.Ю. Кочетков. Турбулентность. Математический анализ релаксационных процессов // Двигатель № 3, 2020 г.
10. Ю.М. Кочетков. Турбулентность. Энтропийные потоки и коэффициенты переноса // Двигатель № 4, 2017 г.