В. А. Галкин, О решениях уравнений, связанных с физической кинетикой, *Докл. АН СССР*, 1988, том 298, номер 6, 1362–1367

УДК 517.968:533:551.510 МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

В.А. ГАЛКИН

О РЕШЕНИЯХ УРАВНЕНИЙ, СВЯЗАННЫХ С ФИЗИЧЕСКОЙ КИНЕТИКОЙ

(Представлено академиком А.А. Самарским 29 I 1987)

Рассмотрен класс операторных нелинейных уравнений типа Вольтерра, содержащий кинетическое уравнение Больцмана для псевдомаксвелловских молекул, записанное в интегральной форме. Установлены достаточные условия для однозначной разрешимости уравнения в целом в окрестности нуля. Для кинетического уравнения Смолуховского пространственно неоднородной коагуляции указаны условия, когда при сколь угодно гладкой по пространственным переменным начальной функции на решении возникает особенность типа "градиентная катастрофа" за счет взаимодействия свободного переноса частиц и столкновений.

К л а с с ы к о р р е к т н о с т и. Пусть Ω – локально-компактное метрическое пространство, $\Sigma_\sigma = \{t \in R_1 \colon 0 \leqslant t \leqslant \sigma\}$, $\Sigma_\infty \overset{\text{def}}{=} R_1^+$. Пространство $\Omega \times \Sigma_\sigma$, $0 \leqslant \sigma \leqslant \infty$, снабдим топологией произведения. Обозначим $C_{b,\sigma}$, $0 \leqslant \sigma \leqslant \infty$, пространство ограниченных, непрерывных на $\Omega \times \Sigma_\sigma$ вещественных функций с нормой $\|\cdot\|^\sigma = \sup\limits_{\Omega \times \Sigma_\sigma} |\cdot|$. Отношение частичного порядка "$\geqslant$" на $C_b \overset{\text{def}}{=} C_{b,0}$ определяется как неравенство, выполняющееся в каждой точке $\omega \in \Omega$. Совокупность неотрицательных функций из C_b образует конус C_b^+. Носитель функции $\varphi \in C_b$ обозначим $d(\varphi)$.

Пусть $\{T_t\}_{t \in R_1}$ – однопараметрическая группа линейных преобразований на C_b, которая оставляет инвариантным конус C_b^+ и для каждой $f \in \bigcup\limits_{\sigma \in R_1^+} C_{b,\sigma}$ суперпозиция $T_t(f_\tau(\cdot))(\omega)$ является непрерывной функцией по совокупности аргументов (ω, t, τ) в топологии произведения $\Omega \times R_1 \times R_1^+$. Множество указанных групп обозначим G^+. Полугруппы линейных преобразований $\{T_t\}_{t \in R_1^+}$, обладающих свойствами G^+ при $t \in R_1^+$, будем обозначать SG^+.

Пусть $\{T_t\}$ принадлежит G^+ или SG^+. С положительной полуорбитой $\{T_t\varphi\}_{t \in R_1^+}$ элемента $\varphi \in C_b^+$ свяжем банаховы пространства

$$\mathfrak{B}_\sigma(\varphi) = \{f \in C_{b,\sigma} \colon l_\sigma(f) = \sup_{t \in \Sigma_\sigma} \sup_{d(T_t\varphi)} |(T_t\varphi)^{-1} f| < \infty,\ |f| \leqslant l_\sigma(f) T_t\varphi\},$$

$$\|f\|_\varphi^\sigma \overset{\text{def}}{=} l_\sigma(f), \quad 0 \leqslant \sigma \leqslant \infty.$$

Положим $\mathfrak{B}(\varphi) \overset{\text{def}}{=} \mathfrak{B}_0(\varphi)$. Ограниченные шары в $\mathfrak{B}_\sigma(\varphi)$ обозначим $B_\sigma(\varphi, r) = \{f \colon \|f\|_\varphi^\sigma \leqslant r\}$.

Пусть на множестве $D \subset C_b$ определено отображение $S \colon D \to C_b$, подчиненное требованиям

(S_1) $\exists \varphi \in C_b^+ \colon \bigcup\limits_{t \in R_1^+} \mathfrak{B}(T_t\varphi) \subset D$,

(S_2) $\forall t \geqslant 0$ отображение $S \colon \mathfrak{B}(T_t\varphi) \to \mathfrak{B}(T_t\varphi)$ является локально липшиц-непрерывным, т.е. $\sup\limits_{u, v \in B_0(T_t\varphi, r)} \|S(u) - S(v)\|_{T_t\varphi}^0 (\|u - v\|_{T_t\varphi}^0)^{-1} = L(r, t) < \infty$, $r \geqslant 0$, $t \geqslant 0$,

(S_3) $S(0) = 0$.

На фазовом пространстве C_b рассматривается операторное уравнение типа Вольтерра

$$(1)\qquad f_t = T_t f_0 + \int_0^t T_{t-\tau} \circ S(f_\tau) d\tau, \quad t \geqslant 0.$$

О п р е д е л е н и е. *Назовем решением уравнения* (1) *непрерывную при* $(\omega, t) \in \Omega \times R_1^+$ *функцию* $f_t(\omega)$, *обращающую* (1) *в тождество.*

В следующей теореме устанавливаются условия, обеспечивающие однозначную разрешимость уравнения (1) при всех $t \geqslant 0$.

Т е о р е м а 1. *Пусть однопараметрическая полугруппа* $\{T_t\}_{t \in R_1^+} \in SG^+$, *оператор* S *удовлетворяет требованиям* (S_1), (S_2), (S_3), *причем локальная постоянная Липшица в условии* (S_2) *мажорируется при* $r \geqslant 0$, $t \geqslant 0$ *функцией* $g(r, t)$, *суммируемой по* $t \in R_1^+$ *при каждом значении параметра* $r \geqslant 0$. *Если для любой* $f \in \mathfrak{B}_\sigma(\varphi)$ *суперпозиция* $S(f)$ *принадлежит* $\mathfrak{B}_\sigma(\varphi)$ *при произвольном* $\sigma \geqslant 0$, *то для каждого* $r \geqslant 0$ *можно указать неотрицательные числа* r_0, δ *такие, что в случае* $f_0 \in B_0(T_\delta \varphi, r_0)$ *уравнение* (1) *имеет единственное решение* $f \in B_\infty(T_\delta \varphi, r)$, *причем связь между* r, r_0, δ *может быть задана соотношениями*

$$(2)\qquad q = \int_\delta^{+\infty} g(r, \tau) d\tau < 1, \quad r_0 \leqslant r(1-q), \quad (r, r_0, \delta \in R_1^+).$$

Т е о р е м а 2. *Пусть в дополнение к условиям теоремы* 1 $\{T_t\}_{t \in R_1} \in G^+$, *а отображение* S *удовлетворяет также требованию*

$$(S_4)\quad \forall\, \sigma, r \in R_1^+ \quad \exists\, h(\sigma, r) \in R_1^+ : \ S(f) + fh \geqslant 0, \ f \in \bigcup_{t \in \Sigma_\sigma} B_0(T_t\varphi, r).$$

Тогда решение уравнения (1), *указанное в теореме* 1, *является неотрицательным при всех* $t \geqslant 0$, *если* $f_0 \geqslant 0$.

П р и м е р (кинетическое уравнение Больцмана для псевдомаксвелловских молекул в интегральной форме). Пространство аргументов $\Omega = \{p, x\} = R_3 \times R_3$. Однопараметрическая группа $\{T_t^a\}_{t \in R_1}$, $a \in R_3$, задана соотношением

$$T_t^a(f)(p, x) = f(p + at, x - pt - \tfrac{1}{2} a t^2), \quad a \in R_3, \quad f \in C_b.$$

Группа $\{T_t^a\}$ соответствует движению частиц в R_3 под действием постоянной силы с потенциалом (a, x). Больцмановский оператор столкновений частиц [1] определяется формулами

$$S_B(f)(p, x) = \int_{R_3} \int_{S_2} W(p, p_1, \theta) [f(p', x) f(p_1', x) - f(p, x) f(p_1, x)] dp_1 d\theta,$$

$$p' = p - \theta(p - p_1, \theta), \quad p_1' = p_1 + \theta(p - p_1, \theta),$$

$$p, p_1 \in R_3, \quad \theta \in S_2 = \{\theta \in R_2 : (\theta, \theta) = 1)\}.$$

Для группы $\{T_t^a\}_{t \in R_1}$ и оператора S_B условия теоремы 1 выполняются, если принять требования:

1) функция W ограничена и непрерывна на $R_3 \times R_3 \times S_2$;

2) $\varphi(p, x) = \exp[-\alpha(x - p\beta - \tfrac{1}{2} a\beta^2)^2]$, где α, β – положительные числа.

В этом случае можно положить $g(r, t) = 32\pi^{5/2} M \alpha^{-3/2} r(t + \beta)^{-3}$, где $M = \sup |W|$. Таким образом, уравнение Больцмана в интегральной форме

$$f_t = T_t^a f_0 + \int_0^t T_{t-\tau}^a \circ S_B(f_\tau) d\tau$$

однозначно разрешимо в $\mathfrak{B}_\infty(\varphi)$, если выполнены условия 1), 2) и

$$|f_0(p,x)| \leqslant r_0 \exp\left[-\alpha(x - p\beta - \tfrac{1}{2}a\beta^2)^2\right],$$

где связь между постоянными определяется из соотношений (2)

$$q = 16\pi^{5/2}M\alpha^{-3/2}r\beta^{-2} < 1, \quad r_0 \leqslant r(1-q), \quad \forall r \geqslant 0.$$

При этом на решении выполняется оценка

$$|f_t(p,x)| \leqslant r\exp\left[-\alpha(x - p(t+\beta) - \tfrac{1}{2}a(t+\beta)^2)^2\right].$$

Если дополнительно предположить, что функция $W \geqslant 0$, то неотрицательной начальной функции f_0 соответствует неотрицательное решение для $t \geqslant 0$.

Нижеследующее доказательство теоремы 1 основано на рассмотрении отображения Ψ: $\mathfrak{B}_\sigma(\varphi) \to \mathfrak{B}_\sigma(\varphi)$, $\sigma \geqslant 0$, определенного формулой

$$\psi = \Psi(f): \ \psi_t = T_t f_0 + \int_0^t T_{t-\tau} \circ S(f_\tau)d\tau, \quad 0 \leqslant t \leqslant \sigma,$$

для которого справедливы следующие две леммы.

Лемма 1. *Если* $f_0 \in B_0(T_\delta\varphi, r_0)$, $f \in B_\sigma(T_\delta\varphi, r)$, $\delta \geqslant 0$, *то*

$$\|\psi\|^\sigma_{T_\delta\varphi} \leqslant r_0 + r\int_0^\sigma g(r, \tau+\delta)d\tau,$$

и, следовательно, при выполнении соотношений (2) *шар* $B_\infty(T_\delta\varphi, r)$ *инвариантен относительно отображения* Ψ *для* $f_0 \in B_0(T_\delta\varphi, r_0)$.

Лемма 2. *Пусть неотрицательные числа* r, r_0, δ *связаны соотношениями* (2), $r_0 < r$. *Тогда для* $f_0 \in B_0(T_\delta\varphi, r_0)$ *отображение* Ψ: $B_\sigma(T_\delta\varphi, r) \to B_\sigma(T_\delta\varphi, r)$ *является сжимающим при достаточно малом положительном* $\sigma(r, r_0)$.

Следствие. *При любом* $f_0 \in \mathfrak{B}(T_\tau\varphi)$, $\tau \geqslant 0$, *уравнение* (1) *имеет единственное решение* $f \in \mathfrak{B}_\sigma(T_\tau\varphi)$, *где* σ – *достаточно малое положительное число.*

Доказательство теоремы 1. В силу леммы 1 при выполнении соотношений (2) для начальной функции $f_0 \in B_0(T_\delta\varphi, r_0)$ решение уравнения (1) на интервале его существования подчиняется условию $f_t \in B_0(T_{t+\delta}\varphi, r)$, что позволяет на основании следствия к лемме 2 продолжить локальное решение на все $t \in R_1^+$. Теорема доказана.

Доказательство теоремы 2. Достаточно установить локальное во времени t сохранение свойства неотрицательности решения при положительном времени. Рассмотрим оператор $\tilde{S}$: $B_0(T_t\varphi, r) \to \mathfrak{B}(T_t\varphi)$, $0 \leqslant t \leqslant \sigma$, определенный формулой $\tilde{S}(f) = S(|f|) + |f|h - fh$, где постоянная h выбрана для семейства шаров $\bigcup_{t \in \Sigma_\sigma} B_0(T_t\varphi, r)$ в соответствии с условием (S_4). В силу условий теоремы 2 уравнение

$$f_t = T_t f_0 + \int_0^t T_{t-\tau} \circ \tilde{S}(f_\tau)d\tau$$

однозначно разрешимо в $B_\sigma(\varphi, r)$ при достаточно малом положительном σ, $\|f_0\|^0_\varphi < r$. Таким образом, справедливо тождество

$$T_{-t}f_t + h\int_0^t T_{-\tau}f_\tau = f_0 + \int_0^t T_{-\tau}[S(|f_\tau|) + |f_\tau|h]d\tau.$$

Подынтегральное выражение справа неотрицательное. Следовательно, $T_{-t}f_t \geqslant$ $\geqslant f_0\exp(-ht)$ и, значит, $f_t \geqslant \exp(-ht)T_tf_0$. Правая часть последнего неравенства неотрицательная, если $f_0 \geqslant 0$. Итак, на построенном решении f_t выполняется тождество $\widetilde{S}(f_t) = S(f_t)$, т.е. функция f_t является неотрицательным решением уравнения (1). Теорема доказана.

Особенности решения кинетического уравнения Смолуховского (коагуляции).

Рассмотрим уравнение (1), в котором $\Omega = \{i, x\} = N \times R_1$, однопараметрическая группа $\{T_t^v\}_{t \in R_1}$ на C_b определена соотношением

$$T_t^v(f)(i, x) = f(i, x - v_i t), \quad i \in N, \quad x \in R_1,$$

где v_i – постоянная скорость движения частицы массы $i\mu_1 > 0$, $i \in N$, вдоль пространственной оси $Ox = \{x \in R_1\}$. Оператор столкновений Смолуховского [2] определим формулой

$$S_C(f)(i, x) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \Phi_{i-j, j} f(i-j, x) f(j, x) - f(i, x) \sum_{j=1}^{\infty} \Phi_{i, j} f(j, x),$$

$$(i, x) \in \Omega,$$

в которой первое слагаемое при $i = 1$ по определению считаем равным нулю. Заданная функция $\Phi_{i,j}$ – симметричная, неотрицательная, описывает интенсивность слияний частиц массы $i\mu_1$ и $j\mu_1$, концентрации которых равны соответственно $f(i, x)$ и $f(j, x)$. Для описания эволюции пространственно неоднородных коагулирующих систем частиц используется кинетическое уравнение Смолуховского

$$(3) \qquad \frac{\partial}{\partial t} f_t(i, x) + v_i \frac{\partial}{\partial x} f_t(i, x) = S_C(f_t(\cdot, x)), \quad t > 0.$$

Таким образом, в рассматриваемом случае группы $\{T_t^v\}$ и оператора S_C уравнение (1) является интегральной формой уравнения (3), а решения уравнения (1) – обобщенные решения задачи Коши для уравнения Смолуховского.

Укажем условия, при которых на решении уравнения (3) возникают негладкие особенности при сколь угодно гладкой по x начальной функции f_0. Обозначим $\bar{f}_t = T_t^v f_0$ свободный перенос частиц, f_t – решение задачи Коши для уравнения Смолуховского, положим

$$\bar{I}_t(i, x) = \sum_{j=1}^{\infty} \Phi_{i,j} \bar{f}_t(j, x), \qquad I_t(i, x) = \sum_{j=1}^{\infty} \Phi_{i,j} f_t(j, x).$$

Теорема 3. *Пусть в операторе столкновений Смолуховского интенсивность слияний частиц подчиняется соотношению*

$$\Phi_{i,j} = \sigma_{i,j} |v_i - v_j|, \quad i, j \in N,$$

где сечение взаимодействия частиц $\sigma_{i,j}$, $i, j \in N$, симметричная, неотрицательная функция, $0 < \inf_{i,j} \sigma_{i,j} \leqslant \sup_{i,j} \sigma_{i,j} < \infty$, скорость свободного переноса частиц v_i, $i \in N$, – строго монотонная функция. Предположим, что начальные концентрации $f_0(i, x)$, гладкие по x, – положительные величины, имеющие конечные интегралы

$$\int_{R_1} \sum_{j=1}^{\infty} (1 + \Phi_{i,j}) j f_0(j, x) dx < \infty, \quad i \in N,$$

$f_0(i, x) \to 0$ при $|x| \to \infty$. Пусть в каждой точке $x \in R_1$ выполнено соотношение

$$(4) \qquad \sum_{i=1}^{\infty} i S_C(f_0)(i, x) = 0,$$

определяющее локальный закон сохранения массы. Если существуют точки, в которых $\overline{I}_t = +\infty$, тогда независимо от класса гладкости начальной функции f_0 неотрицательное решение уравнения Смолуховского (3) *не может быть гладким по t, x при всех $t \geqslant 0$, $x \in R_1$.*

Замечание. *В точках, где $\overline{I}_t = +\infty$, решение уравнения Смолуховского имеет особенность типа "градиентная катастрофа", т.е. его производные обращаются в бесконечность. В указанных точках оператор столкновений $S_C(f_t) = -\infty$ и, следовательно, соотношение* (4) *локального закона сохранения переходит в закон диссипации $\sum_{i=1}^{\infty} iS_C(f_t) < 0$, что для пространственно однородных задач установлено в* [3, 4].

Доказательство. Равномерное стремление к нулю функций $f_t(i, x)$ при $|x| \to \infty$ на каждом конечном промежутке изменения времени устанавливается методом математической индукции по номеру $i \in N$. Для доказательства предположим противное утверждению теоремы, т.е. существование гладкого неотрицательного решения уравнения (3) при всех $t \geqslant 0$, $x \in R_1$, считая выполненными условия теоремы. Отбрасывая в правой части тождества (3) неотрицательное слагаемое, имеем оценку

$$(5) \qquad f_t(i,x) \geqslant \overline{f_t}(i,x) \exp\left[-\int_0^t I_\tau(i, x - v_i(t-\tau))d\tau\right], \quad i \in N, \quad t \geqslant 0.$$

Из соотношения (3) интегрированием по t, x получаем неравенства

$$(6) \qquad \int_{R_1} \sum_{i=1}^{\infty} f_t(i,x)dx \leqslant \int_{R_1} \sum_{i=1}^{\infty} f_0(i,x)dx, \quad t \geqslant 0,$$

$$(7) \qquad \int_0^t \sum_{j=1}^{\infty} |a - v_j| f_\tau(j, x + a\tau)d\tau \leqslant 2N_0, \quad \forall a \in R_1, \quad t \geqslant 0.$$

Эти неравенства имеют простой физический смысл. Оценка (6) означает, что в коагулирующей системе число частиц с ростом времени уменьшается, а оценка (7) показывает, что через сечение потока коагулирующих частиц, движущееся со скоростью a вдоль оси x, при монотонной скорости свободного переноса v_i за время t может пройти не более $2N_0$ частиц, поскольку каждая частица проходит через это сечение не более двух раз. Сочетая (5), (6), (7), с учетом требований на $\Phi_{i,j}$ имеем

$$(8) \qquad f_t(i,x) \geqslant c_1 \overline{f}_t(i,x),$$

где постоянная $c_1 > 0$. Таким образом, на решении f_t уравнения (3) справедливо неравенство

$$(9) \qquad I_t(i,x) \geqslant c_1 \overline{I}_t(i,x).$$

Учитывая неравенства (8), (9) в тождестве (3), в точках, где $\overline{I} = +\infty$, имеем $S_C(f_t) = -\infty$ и, значит,

$$\frac{\partial}{\partial t} f_t(i,x) + v_i \frac{\partial}{\partial x} f_t(i,x) = -\infty.$$

Следовательно, в указанных точках функция f_t обладает особенностью типа "градиентная катастрофа". Теорема доказана.

Отметим, что аналогичное утверждение о возникновении особенностей решения справедливо для уравнения Смолуховского с непрерывно изменяющимися массами частиц, корректность которого в интегральной форме установлена в [5].

В заключение хочу выразить глубокую признательность за обсуждение результатов А.В. Бобылеву, В.А. Тупчиеву, Б.Л. Рождественскому, С.Н. Кружкову.

Обнинский институт атомной энергетики

Поступило
11 II 1987

ЛИТЕРАТУРА

1. *Карлеман Т.* Математические задачи кинетической теории газов. М.: ИЛ, 1960. 120 с. 2. *Волощук В.М., Седунов Ю.С.* Процессы коагуляции в дисперсных системах. Л.: Гидрометеоиздат, 1975. 320 с. 3. *Галкин В.А.* – Метеорол. и гидрол., 1983, № 12, с. 11–19. 4. *Галкин В.А.* – Там же, 1984, № 5, с. 33–39. 5. *Галкин В.А.* – ДАН, 1985, т. 285, № 5, с. 1087–1091.

УДК 519.6:621.3

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

В.А. НИКОЛАЕВА, В.И. РЫЖИЙ, Б.Н. ЧЕТВЕРУШКИН

МЕТОД РАСЧЕТА ДВУМЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУР В КВАЗИГИДРОДИНАМИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

(Представлено академиком А.А. Самарским 9 XII 1986)

В последнее время для математического моделирования плотной электронно-дырочной (электронной) плазмы в полупроводниковых структурах наряду с традиционной дрейфово-диффузионной моделью (ДДМ) [1–3] достаточно плодотворно стал использоваться квазигидродинамический подход [4–9]. Привлечение квазигидродинамической модели (КГМ) вместо более простого дрейфово-диффузионного описания связано с необходимостью моделирования процессов в элементах субмикронных размеров, в особенности элементов интегральных схем на основе материалов A_3B_5. В таких субмикронных элементах электронно-дырочная плазма существенно неравновесна, а ее параметры (концентрация, средняя направленная скорость и средняя энергия) связаны с напряженностью электрического поля нелокальным образом, т.е. ДДМ становится некорректной [10].

В настоящей работе описан метод численного решения пространственно двумерной системы уравнений КГМ с учетом самосогласованного поля в достаточно общей математической постановке для моделирования нестационарных электронных процессов в полупроводниковых структурах. Математическое моделирование на основе КГМ сопряжено с серьезными вычислительными трудностями, решение которых связано с ключевыми проблемами прикладной математики [11]. В работе предлагается полунеявная разностная схема совместного решения уравнения Пуассона для потенциала электрического поля с уравнениями непрерывности и изменения энергии. Предложенный алгоритм расчета может быть успешно использован для преодоления подобной вычислительной проблемы при решении ДДМ, в рамках которой опыт математического моделирования имеет почти 20-летнюю историю (см. библиографию в [1–3]).

1. Для описания электронной плазмы (ЭП) используется система, состоящая из уравнения непрерывности для концентрации электронов n, уравнения для плот-