Краткие сообщения по физике № 11 1981

АСИМПТОТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ ДИСКРЕТНЫХ УРАВНЕНИЙ

С. А. Решетняк, С. М. Харчев, Л. А. Шелепин

УДК 537.75

Построены асимптотические по времени решения системы линейных кинетических уравнений баланса заселенностей. Полученные результаты позволяют существенно упростить анализ ряда релаксационных процессов.

Системы кинетических уравнений для заселенности термов атомов и молекул широко используются в физических приложениях /I/. Наибольший практический интерес вызывает асимптотическая стадия кинетических процессов для достаточно больших времен /2/. Цель настоящей работы заключается в построении асимптотических по времени решений систем уравнений баланса методами собственных функций (с.ф.) и собственных значений (с.з.) и методом квазистационарных функций распределения (КФР). Подобные подходы ранее использовались для решения уравнения Фоккера – Планка, описывающего сходные кинетические задачи для непрерывного спектра /3/.

Рассмотрим $(N + 1)$- уровневую систему уравнений баланса заселенностей, учитывающую только переходы между соседними уровнями:

$$dP_n/dt = W_{n+1,n}P_{n+1} - (W_{n,n+1} + W_{n,n-1})P_n + W_{n-1,n}P_{n-1},\quad (n = 0, 1, \dots, N), \tag{I}$$

где $W_{n+1,n}$ – вероятность перехода с уровня $(n + 1)$ на n единицу времени. Систему (I) будем решать с начальным условием вида $P_n\big|_{t=0} = f_n$ и законом сохранения

$$\sum_{n=0}^{N} P_n(t) = 1. \tag{2}$$

Стационарное решение ρ_n системы (I) удовлетворяет принципу детального равновесия

$$W_{n+1,n}\rho_{n+1} = W_{n.n+1}\rho_n \tag{3}$$

и имеет вид $\rho_n = C \prod_{k=1}^{n} W_{k-1,k}/W_{k,k-1}$, причем константа C определяется соотношением (2). Положим $P_n = \rho_n x_n$. Тогда из (I) и (3) приходим к системе

$$\rho_n dx_n/dt = W_{n+1,n}\rho_{n+1}(x_{n+1} - x_n) - W_{n-1,n}\rho_{n-1}(x_n - x_{n-1}). \tag{4}$$

Зависимость распределения от времени ищем в виде $x_n \backsim \exp(-\lambda t)$. При этом (4) переходит в задачу на с.ф. и с.з.

$$- \lambda\rho_n x_n = W_{n+1,n}\rho_{n+1}(x_{n+1} - x_n) - W_{n-1,n}\rho_{n-1}(x_n - x_{n-1}) \equiv$$
$$\equiv \sum_{m=0}^{N} \tilde{W}_{n,m}x_m. \tag{5}$$

Так как вещественная матрица $\tilde{W}_{n,m}$ симметрична, то система с.ф. $\{x_n^{(p)}\}$, соответствующая набору с.з. $\{\lambda_p\}$, ортогональна и полна с весом ρ_n:

$$\rho_n \sum_{p=0}^{N} x_n^{(p)}x_m^{(p)} = \delta_{n,m}, \tag{6а}$$

$$\sum_{n=0}^{N} \rho_n x_n^{(p)}x_n^{(q)} = \delta_{p,q}. \tag{6б}$$

Отметим, что в силу (2) наименьшему с.з. $\lambda_0 = 0$ соответствует с.ф. $x_n^{(0)} = 1$. Зная все с.ф. и с.з., решение системы (I) мож-

но представить в виде $P_n = \rho_n \sum\limits_{p=0}^{I} x_n^{(p)} C_p \exp(-\lambda_p t)$, где $C_p =$
$\cdot \sum\limits_{n=0}^{N} f_n x_n^{(p)}$.

Наибольший интерес представляет асимптотическое решение, определяющееся первыми двумя минимальными с.з. λ_0 и λ_1. Для вычисления λ_1 и $x_n^{(1)}$ рассмотрим функцию Грина $G_{n,m}$, удовлетворяющую уравнению

$$W_{n+1,n}\rho_{n+1}(G_{n+1,m} - G_{n,m}) - W_{n-1,n}\rho_{n-1}(G_{n,m} - G_{n-1,m}) = = -\delta_{n,m} + \rho_n x_n^{(0)} x_m^{(0)} \equiv -\delta_{n,m} + \rho_n. \tag{7}$$

Из (7) видно, что $G_{n,m}$ определена с точностью до произвольного слагаемого φ_m, которое всегда можно выбрать так, чтобы выполнялось равенство

$$\sum_{n=0}^{N} \rho_n G_{n,m} = 0. \tag{8}$$

Тогда легко показать, что функция Грина симметрична и представима в виде

$$G_{n,m} = \sum_{p=1}^{N} x_n^{(p)} x_m^{(p)} / \lambda_p. \tag{9}$$

Решая (7) с учетом (8), получаем явное выражение для $G_{n,m}$:

$$G_{n,m} = \sum_{i=1}^{N} \rho_i \sum_{k=0}^{i-1} (W_{k,k+1}\rho_k)^{-1} \sum_{s=0}^{k} (\delta_{s,m} - \rho_s) - - \sum_{k=0}^{n-1} (W_{k,k+1}\rho_k)^{-1} \sum_{s=0}^{k} (\delta_{s,m} - \rho_s). \tag{10}$$

Для шпура функции $G_{n,m}$ с помощью (6б) и (9) можно показать справедливость следующей формулы:

$$\mathrm{Sp}\, G \equiv \sum_{n=0}^{N} \rho_n G_{n,n} = \sum_{p=1}^{N} \lambda_p^{-1}. \tag{II}$$

С другой стороны, подстановка (I0) в (II) дает:

$$\sum_{p=1}^{N} \lambda_p^{-1} = \sum_{n=1}^{N} \rho_n \sum_{k=0}^{n-1} (W_{k,k+1}\rho_k)^{-1} \sum_{s=0}^{k} \rho_s. \tag{I2}$$

Как правило, в физических приложениях λ_1 значительно меньше остальных с.з., поэтому в левой части (I2) основной вклад в сумму дает слагаемое с $p = 1$. Отсюда

$$\lambda_1^{-1} \approx \sum_{n=1}^{N} \rho_n \sum_{k=0}^{n-1} (W_{k,k+1}\rho_k)^{-1} \sum_{s=0}^{k} \rho_s. \tag{I3}$$

Более точный расчет λ_1 выполняется в терминах итерированных функций Грина, определенных рекуррентными соотношениями

$$G_{n,m}^{(s+1)} = \sum_{k=0}^{N} G_{n,k}^{(s)} \rho_k G_{k,m}, \quad s = 1, 2, \ldots \; (G_{n,k}^{(1)} \equiv G_{n,k}).$$

Для них справедлива формула $\mathrm{Sp}\, G^{(s)} = \sum_{p=1}^{N} 1/\lambda_p^{s}$, из которой следует $\lambda_1^{-1} \approx \left[\mathrm{Sp}\, G^{(s)}\right]^{1/s}$.

Точное выражение для λ_1 получается путем предельного перехода при $s \to \infty$. Значение итерированных функций Грина позволяет делать оценки и для следующего с.з. λ_2 даже в тех случаях, когда $\lambda_1 \sim \lambda_2$ /3/.

Обратимся теперь к расчету с.ф. $x_n^{(1)}$, соответствующей с.з. λ_1. Преобразуем систему (5) к виду

$$x_n = -\lambda \sum_{k=0}^{N} G_{n,k}\rho_k x_k. \qquad (14)$$

Подставляя (10) в (14), получаем

$$x_n = x_0 - \lambda \sum_{k=0}^{n-1} (W_{k,k+1}\rho_k)^{-1} \sum_{s=0}^{k} \rho_s x_s, \qquad (15)$$

где

$$x_0 = \lambda \sum_{n=1}^{N} \rho_n \sum_{k=0}^{n-1} (W_{k,k+1}\rho_k)^{-1} \sum_{s=0}^{k} \rho_s x_s. \qquad (16)$$

Эти уравнения будем решать итерациями. На нулевом шаге в (16) положим $x_n^{(1)} = C = \mathrm{const}$. Тогда сразу приходим к значению λ_1, совпадающему с (13). С.ф. $x_n^{(1)}$ на первом шаге итераций получается подстановкой в правую часть (15) уже найденного на нулевом шаге значения λ_1 и $x_n^{(1)} = C$:

$$x_n^{(1)} \simeq C\left(1 - \lambda_1 \sum_{k=0}^{n-1} (W_{k,k+1}\rho_k)^{-1} \sum_{s=0}^{k} \rho_s\right). \qquad (17)$$

Постоянная C находится затем из условия нормировки (6б). Значение λ_1 в следующем приближении вычисляется подстановкой (17) в (16) и т.д. Таким образом, асимптотическое решение системы (1) имеет вид

$$P_n(t)_{t\to\infty} = \rho_n + \rho_n x_n^{(1)} \sum_{k=0}^{N} f_k x_k^{(1)} \exp(-\lambda_1 t), \qquad (18)$$

где λ_1 и $x_n^{(1)}$ в первом приближении определены формулами (13) и (17).

Построим теперь асимптотическое решение системы (1) методом КФР /4/. Для этого преобразуем (4) к виду

$$x_n = x_0 + \sum_{k=0}^{n-1} (W_{k,k+1}\rho_k)^{-1} \sum_{s=0}^{k} \rho_s dx_s/dt \equiv x_0 + \hat{E}x_n. \quad (19)$$

В отличие от предыдущего построения, где x_0 определялось однозначно функцией Грина, здесь x_0 считается некоторым неизвестным параметром, зависящим от времени. Уравнение (19) также решается итерациями, приводящими к представлению решения x_n в виде ряда по временным производным параметра x_0, или ряда по степеням оператора $\hat{E}$:

$$x_n = x_0 + \hat{E}x_0 + \hat{E}^2 x_0 + \ldots . \quad (20)$$

Асимптотические решения получаются в результате учета лишь нескольких членов ряда (20). Параметр x_0 находится затем путем решения дифференциального уравнения, возникающего из закона сохранения (2). Рассмотрим решение (20) в приближении первого порядка по степеням оператора $\hat{E}$. Подставляя (20) в (2), приходим к уравнению для x_0:

$$\tau dx_0/dt + x_0 = 1, \quad (21)$$

где

$$\tau = \sum_{n=1}^{N} \rho_n \sum_{k=0}^{n-1} (W_{k,k+1}\rho_k)^{-1} \sum_{s=0}^{k} \rho_s .$$

Решая (21), получаем: $x_0 = 1 + \mu \exp(-t/\tau)$, $\mu = x_0|_{t=0} - 1$. Отсюда

$$P_n(t) = \rho_n + \rho_n \mu \left(1 - \tau^{-1} \sum_{k=0}^{n-1} (W_{k,k+1}\rho_k)^{-1} \sum_{s=0}^{k} \rho_s \right) \exp(-t/\tau). \quad (22)$$

Из сопоставления формул (22) и (18) видно, что асимптотические решения имеют одинаковую зависимость от n и совпадающие минимальные с.з. λ_1. Отметим однако, что решение (18) справедливо при достаточно больших временах, необходимых для выполнения условия $P_n > 0$, в то время как (22) дает положительные P_n даже при $t = 0$. Действительно, для задач типа "рекомбинации" $dx_0/dt > 0$ и все P_n положительны. Для задач типа "диссоциации", являющихся обратными рекомбинационным, все приведенные формулы остаются в силе, если перенумеровать уровни в обратном порядке ($n \to N - n$).

Поступила в редакцию
I5 июня I98I г.

Л и т е р а т у р а

I. Б. Ф. Гордиец, А. И. Осипов, Л. А. Шелепин, Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры, "Наука", М., I980 г.
2. А. И. Ахиезер, С. В. Пелетминский, Методы статистической физики, "Наука", М., I977 г.
3. С. А. Решетняк, С. М. Харчев, Л. А. Шелепин, Краткие сообщения по физике ФИАН № 8, 20 (I980).
4. С. А. Решетняк, Л. А. Шелепин, Труды ФИАН, <u>I06</u>, 90 (I979).