

## МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ИНТЕГРО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ В ЗАДАЧЕ СМОЛУХОВСКОГО ДЛЯ ФЕРМИ-ГАЗА

Есенков А.С.<sup>1</sup>, Есенков В.С.<sup>1</sup>, Михайлов И.Е.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт, Долгопрудный, МО

<sup>2</sup> Международный университет природы, общества и человека «Дубна»,  
Дубна, МО

---

*Поступила в редакцию 15.01.2009.*

---

Предлагается численный метод решения краевой задачи для интегро-дифференциального уравнения, описывающего поведение квантовых газов в классической граничной задаче Смолуховского о температурном скачке и скачке химического потенциала в металле. Такие скачки обусловлены наличием нормального к поверхности градиента температуры, и, как следствие, потока тепла к поверхности.

The numerical method of decision of boundary task is offered for integro-differential equation. This equation describes quantum gases in the classical boundary Smolukhovsky's problem about temperature and chemical potential jumps in a metal. Such jumps are conditioned the presence of normal to the surface gradient of temperature, and, as a result, stream of heat to the surface.

**Ключевые слова:** задача Смолуховского, интегро-дифференциальное уравнение, итерационные методы.

**Keywords:** Smolukhovsky's problem, integro-differential equation, iteration methods.

### Введение

Задача Смолуховского для квантовых Ферми-газов — это задача о нахождении скачка температуры и скачка химического потенциала в газе над плоской поверхностью, вдали от которой задан постоянный градиент температуры.

Задача сводится к решению интегро-дифференциального уравнения, которое удовлетворяет двум граничным условиям. Одно граничное условие задано на стенке — это условие диффузного отражения фермионов от стенки, а второе условие состоит в требовании, чтобы функция распределения вдали от стенки переходила в известное распределение Чепмена–Энскога.

### 1. Постановка задачи

Пусть квантовый Ферми-газ занимает полупространство  $x > 0$  над плоской стенкой, лежащей в плоскости  $x = 0$ . Следуя [1], возьмем  $\tau$ -модельное стационарное кинетическое уравнение

$$v_x \frac{\partial f}{\partial x} + \nu (f_{eq} - f) = 0, \quad (1)$$

где  $\nu = 1/\tau$  — частота столкновений,  $f_{eq}$  — локально равновесная функция распределения Ферми,

$$f_{eq}(x, v) = \left[ 1 + \exp \left( \frac{m}{2k_B T(x)} \left[ (v_x - u(x))^2 + v_y^2 + v_z^2 \right] - \frac{\mu(x)}{2k_B T(x)} \right) \right]^{-1},$$

$k_B$  — постоянная Больцмана,  $m$  — масса Ферми-частицы,  $u(x)$  — величина массовой скорости газа, направленная вдоль оси  $x$ ,  $\mu_0(x)$  — его химический потенциал,  $T(x)$  — температура газа.

Линеаризацию уравнения (1) проведем относительно абсолютного фермиана

$$f_F^s(v) = \left[ 1 + \exp \left( \frac{mv^2}{2k_B T_s} + \frac{\mu_s}{2k_B T_s} \right) \right]^{-1}.$$

Введем безразмерную скорость  $\mathbf{C} = \sqrt{\beta} \mathbf{v}$ ,  $\beta = m/(2k_B T_s)$  ( $T_s$  — температура поверхности в начале координат), функцию  $\alpha(x) = \mu_0(x)/(2k_B T(x))$  и безразмерный параметр  $\alpha_s = \mu_s/(2k_B T_s)$ . Линеаризуя  $T(x)$  и  $\alpha(x)$ , полагаем  $T(x) = T_s + \delta T(x)$ ,  $\alpha(x) = \alpha_s + \delta \alpha(x)$ . Функцию распределения линеаризуем относительно абсолютного фермиана:

$$f(x, \mathbf{v}) = f_F^s(C) + g(C)h(x, \mathbf{C}),$$

где  $g(C) = \exp(C^2 - \alpha_s)/(1 + \exp(C^2 - \alpha_s))^2$ ,  $h(x, \mathbf{C})$  — новая неизвестная функция.

В результате линеаризации получаем следующее уравнение

$$C_x \frac{\partial h}{\partial x} + h(x, \mathbf{C}) = \delta \alpha(x) + 2C_x W(x) + (C^2 - \alpha_s) \frac{\delta T(x)}{T_s}, \quad (2)$$

где  $W(x) = \beta u(x)$  — безразмерная массовая скорость газа.

Функции  $\delta \alpha(x)$ ,  $W(x)$ ,  $\delta T(x)$  находятся из законов сохранения числа частиц, импульса и энергии

$$\int (f - f_{eq}) d\Omega_F = 0, \quad \int (f - f_{eq}) m v_x d\Omega_F = 0,$$

$$\int (f - f_{eq}) \frac{m}{2} \left[ (v_x - u(x))^2 + v_y^2 + v_z^2 \right] d\Omega_F = 0, \quad d\Omega_F = \frac{(2s+1)m^3}{(2\pi\hbar)^3} d^3 v.$$

Здесь  $f_{eq}(x, \mathbf{C})$  — линеаризованная форма локально равновесной фермиевской функции распределения,

$$f_{eq}(x, \mathbf{C}) = f_F^s(C) + g(C) \left[ \delta \alpha(x) + 2C_x W(x) + (C^2 - \alpha_s) \frac{\delta T(x)}{T_s} \right].$$

Законы сохранения приводят к следующей алгебраической системе уравнений

$$\left( \delta \alpha - \alpha_s \frac{\delta T}{T_s} \right) \int g(C) d^3 C + \frac{\delta T}{T_s} \int C^2 g(C) d^3 C = \int h(x, \mathbf{C}) g(C) d^3 C,$$

$$2 \int (W C_x) \mathbf{C} g(C) d^3 C = \int \mathbf{C} h(x, \mathbf{C}) g(C) d^3 C,$$

$$\left(\delta\alpha - \alpha_s \frac{\delta T}{T_s}\right) \int C^2 g(C) d^3 C + \frac{\delta T}{T_s} \int C^4 g(C) d^3 C = \int h(x, \mathbf{C}) C^2 g(C) d^3 C.$$

Находя из этой системы  $\delta\alpha(x)$ ,  $W(x)$ ,  $\delta T(x)$  и подставляя в (2), приходим к уравнению

$$C_x \frac{\partial h}{\partial x} + h(x, \mathbf{C}) = \frac{1}{2\pi g_0} \int k(\mathbf{C}, \mathbf{C}') h(x, \mathbf{C}') g(C') d^3 C'. \quad (3)$$

Ядро уравнения (3) имеет следующий вид

$$k(\mathbf{C}, \mathbf{C}', \alpha) = 1 + 2 \frac{g_0(\alpha)}{g_2(\alpha)} C_x C'_x + 4 \frac{g_0^2(\alpha)}{d_0(\alpha)} \left( C^2 - \frac{3g_2(\alpha)}{2g_0(\alpha)} \right) \left( C'^2 - \frac{3g_2(\alpha)}{2g_0(\alpha)} \right),$$

где

$$d_0(\alpha) = 30 \cdot g_0(\alpha) g_4(\alpha) - 9 \cdot g_2^2(\alpha), \quad g_0(\alpha) = \int_0^\infty \frac{\exp(\alpha - C^2)}{1 + \exp(\alpha - C^2)} dC,$$

$$g_1(\alpha) = \ln(1 + e^\alpha), \quad g_n(\alpha) = \int_0^\infty C^{n-2} \cdot \ln(1 + \exp(\alpha - C^2)) dC, \quad n = 2, 3, \dots$$

Уравнение (3) имеет следующие легко проверяемые частные решения:

$$h_1 = 1, \quad h_2 = C_x, \quad h_3 = C^2 - \frac{3g_2(\alpha)}{2g_0(\alpha)}, \quad h_4 = (x - C_x) \left( C^2 - \frac{5g_2(\alpha)}{2g_0(\alpha)} \right).$$

## 2. Граничные условия

Граничные условия на стенке, выражающие факт диффузного отражения электронов от стенки, имеют вид:

$$h(0, \mathbf{C}) = 0, \quad 0 < C_x < +\infty. \quad (4)$$

Вдали от стенки функция распределения электронов должна переходить в функцию Чепмена-Энскога:

$$h(x, \mathbf{C}) = h_{as}(x, \mathbf{C}) + o(1), \quad x \rightarrow +\infty, \quad -\infty < C_x < 0. \quad (5)$$

Здесь  $h_{as}(x, \mathbf{C})$  — функция распределения Чепмена-Энскога:

$$h_{as}(x, \mathbf{C}) = \varepsilon_1 + \varepsilon_T \left( C^2 - \frac{3 \cdot g_2(\alpha)}{2 \cdot g_0(\alpha)} \right) + g_T(x - C_x) \left( C^2 - \frac{5 \cdot g_2(\alpha)}{2 \cdot g_0(\alpha)} \right). \quad (6)$$

В выражении (6):  $\varepsilon_1$  — вспомогательная неизвестная величина, она связана линейным соотношением со скачком приведенного химического потенциала  $\varepsilon_\alpha$  ( $\alpha$  — безразмерная величина) и величиной скачка температуры  $\varepsilon_T$ :

$$\varepsilon_1(\alpha) = \varepsilon_\alpha - \left( \alpha - \frac{3 \cdot g_2(\alpha)}{2 \cdot g_0(\alpha)} \right) \cdot \varepsilon_T(\alpha), \quad (7)$$

$g_T$  — относительный градиент логарифма температуры в газе — величина, заданная вдали от поверхности.

Сделаем небольшое упрощение уравнения (3). В уравнении (3)  $d^3C = dC_x dC_y dC_z$ . В плоскости  $C_y, C_z$  перейдем к полярным координатам:  $dC_y dC_z = \rho d\rho d\varphi$ . Тогда  $C^2 = C_x^2 + \rho^2$ , далее обозначим  $C_x = \mu$ . Интегрирование по углу  $\varphi$  в правой части уравнения (3) дает  $2\pi$ . Поэтому получаем уравнение:

$$\mu \frac{\partial h}{\partial x} + h(x, \mu, \rho) = \frac{1}{g_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} k(\mu, \rho, \mu', \rho') h(x, \mu', \rho') g(\mu', \rho', \alpha) \rho d\mu' d\rho', \quad (8)$$

с ядром

$$k(\omega, \rho, \omega', \rho', \alpha) = 1 + 2 \frac{g_0(\alpha)}{g_2(\alpha)} \omega \omega' + 4 \frac{g_0^2(\alpha)}{d_0(\alpha)} \left( \omega^2 + \rho^2 - \frac{3g_2(\alpha)}{2g_0(\alpha)} \right) \left( \omega'^2 + \rho'^2 - \frac{3g_2(\alpha)}{2g_0(\alpha)} \right),$$

$$g(\mu, \rho, \alpha) = \frac{\exp(\mu^2 + \rho^2 - \alpha)}{[1 + \exp(\mu^2 + \rho^2 - \alpha)]^2}.$$

Граничные условия имеют вид:

$$h(0, \mu, \rho) = 0, \quad 0 < \mu < +\infty \quad (9)$$

$$h(x, \mu, \rho) = h_{as}(x, \mu, \rho) + o(1), \quad x \rightarrow +\infty, \quad -\infty < \mu < 0 \quad (10)$$

$$h_{as}(x, \mu, \rho) = \varepsilon_1 + \varepsilon_T \left( \mu^2 + \rho^2 - \frac{3 \cdot g_2(\alpha)}{2 \cdot g_0(\alpha)} \right) + g_T(x - \mu) \left( \mu^2 + \rho^2 - \frac{5 \cdot g_2(\alpha)}{2 \cdot g_0(\alpha)} \right) \quad (11)$$

Граничная задача сформулирована окончательно и описывается уравнениями (8)–(11).

### 3. Численные методы решения

Граничная задача Смолуховского о скачке температуры в металле, сформулированная в (8)–(11), имеет сложные граничные условия, а коэффициенты  $g_0, g_2, g_4$  — являются интегралами в бесконечных пределах. Теоретически было показано, что для вычисления этих кинетических коэффициентов при фиксированном  $\alpha$  с заданной точностью  $\delta$  достаточно ограничить верхний предел интегрирования числом :

$$|M| \leq \sqrt{\ln(1/\delta) + |\alpha|}.$$

В рассматриваемом диапазоне значений  $\alpha \in [-5; 15]$  значение  $|M|$  не превосходило 10. Расчетная область бралась в виде  $0 \leq x \leq M, -M \leq \mu \leq M, 0 \leq \rho \leq M$ . В этой области вводилась равномерная сетка с шагами  $dx, d\mu, \delta\rho$ .

Для решения интегро-дифференциальных уравнений (8) с граничными условиями (9)–(11) применяются и сравниваются явный [2] и неявные численные итерационные методы.

### 3.1 Явный конечно-разностный метод

На  $n$ -м слое по  $x$  уравнение (8) аппроксимируется явной конечно-разностной схемой:

$$\mu \frac{h_{n+1} - h_n}{x_{n+1} - x_n} + h_n(x_n, \mu, \rho) = \frac{1}{g_0(\alpha)} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} k(\mu, \rho, \mu', \rho', \alpha) \times \\ \times h_n(x_n, \mu', \rho') \cdot g(\mu', \rho', \alpha) \cdot \rho' \cdot d\mu' d\rho', \quad (12)$$

Для решения уравнения (8) с граничными условиями (9)–(11) организуется следующий итерационный процесс (итерации в нем мы будем обозначать индексом  $i$ ). На нулевой итерации во всей рассматриваемой области значение функции  $h^{(0)}(x, \mu, \rho)$  задается на фиксированной сетке произвольно с учетом граничных условий (9)–(11). Переход от  $i$ -й к  $(i+1)$ -й итерации осуществляется следующим образом. На первом этапе с использованием формулы (9) рассчитываются значения функции  $h_{n+1}^{(0)}(x, \mu, \rho)$  от  $x = M$  до  $x = 0$  только для отрицательных значений параметра  $\mu$ . На втором этапе по формуле (9) вычисляются значения функции распределения  $h_{n+1}^{(0)}(x, \mu, \rho)$  только для положительных значений  $\mu$ , но интегралы в правой части (12) находятся с использованием вычисленных на первом этапе  $h_n^{(0)}$  при  $\mu < 0$ . Итерации заканчиваются, когда выполняется условие

$$\max_{x, \mu, \rho} \left| h^{(i+1)}(x, \mu, \rho) - h^{(i)}(x, \mu, \rho) \right| < \delta.$$

Вычислительный эксперимент показал, что такой метод численного расчета системы уравнений (9)–(12) сходится к решению для любых значений параметров  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_T$ .

### 3.2 Неявный конечно-разностный метод

На  $n$ -м слое по  $x$  уравнение (8) аппроксимируется неявной конечно-разностной схемой, которую можно записать в виде системы уравнений, описывающей переход от  $(j-1)$ -й к  $j$ -й итерации:

$$\mu \frac{\hat{h}_{n+1}^{(0)} - h_n}{x_{n+1} - x_n} + h_n(x_n, \mu, \rho) = \\ = \frac{1}{g_0(\alpha)} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} k(\mu, \rho, \mu', \rho', \alpha) \cdot h_n(x_n, \mu', \rho') \cdot g(\mu', \rho', \alpha) \cdot \rho' \cdot d\mu' d\rho', \\ \mu \frac{\hat{h}_{n+1}^{(j)} - h_n}{x_{n+1} - x_n} + h_n(x_n, \mu, \rho) = \frac{1}{g_0(\alpha)} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} k(\mu, \rho, \mu', \rho', \alpha) \times \\ \times 0.5 * \left( h_n(x_n, \mu', \rho') + \hat{h}_{n+1}^{(j-1)}(x_n, \mu', \rho') \right) \cdot g(\mu', \rho', \alpha) \cdot \rho' \cdot d\mu' d\rho'. \quad (13)$$

Здесь  $j$  — номер итерации внутреннего итерационного процесса, применяемого для решения системы (13).

При решении исходной задачи алгоритм перехода от  $i$ -й к  $(i + 1)$ -й итерации осуществляется так же, как и в методе с явной конечно-разностной схемой.

Значения функции  $h$  на  $(n + 1)$ -м слое по  $x$  находятся из внутреннего итерационного процесса решения уравнения (13), который организуется следующим образом. Вычисляются промежуточные значения  $\hat{h}_{n+1}^{(j)}(x, \mu, \rho)$  до тех пор, пока не выполняется условие:

$$\max_{\mu, \rho} \left| \hat{h}_{n+1}^{(j)}(x_{n+1}, \mu, \rho) - \hat{h}_{n+1}^{(j-1)}(x_{n+1}, \mu, \rho) \right| < \delta, \quad (14)$$

при этом в качестве значений функции  $h$  на  $(n + 1)$ -м слое по  $x$  принимается значение  $h_{n+1}(x_{n+1}, \mu, \rho) = \hat{h}_{n+1}^{(j)}(x_{n+1}, \mu, \rho)$ .

Вычислительный эксперимент показал, для выполнения условия (14) достаточно двух-трех итераций по  $j$ , и неявный метод численного расчета системы уравнений (9)–(11) сходится к решению для любых значений параметров  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_T$ .

#### 4. Сравнение результатов расчетов

Для сравнения результатов численных методов решения рассматриваемой задачи были проведены расчеты по двум вышеописанным методам для следующих входных данных:  $\varepsilon_1 = 1$ ,  $\varepsilon_T = 1$ ,  $g_T = 1$ ,  $\alpha = 1$ ,  $M = 10$ ,  $X_{\max} = 10$ ,  $R_{\max} = 10$  при различных соотношениях шагов  $dx \times d\mu \times d\rho$ . Результаты этих расчетов функции  $h$  в точке  $x = 5$ ,  $\mu = -5$ ,  $\rho = 5$  с помощью различных методов приведены в таблице.

$dx \times d\mu \times d\rho$	$1 \times 1 \times 1$	$0.5 \times 0.5 \times 0.5$	$0.25 \times 0.25 \times 0.25$
Явная схема ( $j = 0$ )	557.567	482.739	509.831
Неявная схема ( $j = 1$ )	552.187	443.604	427.223
Неявная схема ( $j = 2$ )	551.195	440.072	420.358

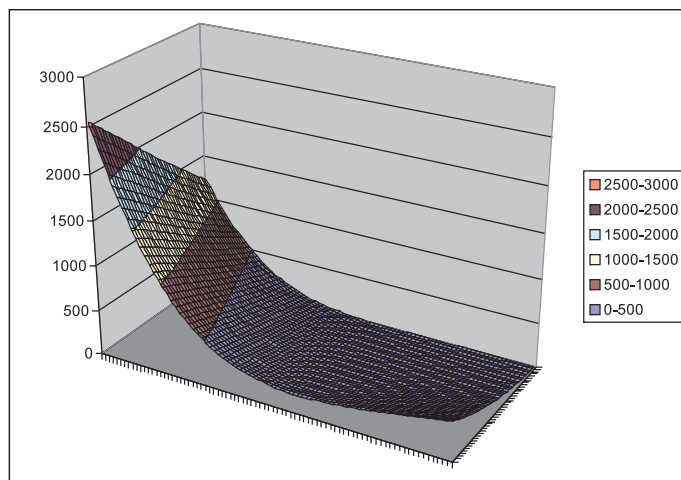


Рис. 1. Распределение функции  $h$ , вычисленное с помощью неявного метода ( $j = 2$ ).

Видно прекрасное выполнение правила Рунге как для явной схемы расчета, так и для неявных схем.

Вид рассчитанной функции  $h$  с помощью неявного метода ( $j = 2$ ) приведен на рисунке. Во всех методах для достижения точности  $\delta = 0.01$  при различных  $\alpha$  требовалось не более 10–12 итераций по  $i$ .

#### Список литературы

- [1] Латышев А.В., Юшканов А.А. Кинетическое уравнение для квантовых Ферми-газов и аналитическое решение граничных задач ТМФ. 2003. Т. 134. С. 310–324.
- [2] Есенков В.С., Латышев А.В., Михайлов И.Е., Юшканов А.А. Численное решение задачи Смолуховского для Ферми-газа Труды ИСА РАН. Динамика неоднородных систем. Т. 31(1). М.: Издательство ЛКИ, 2007. С. 168–173.