

**ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ СМОЛУХОВСКОГО
ДЛЯ БОЗЕ-ГАЗА¹**

Есенков А.С.* , Есенков В.С. , Михайлов И.Е.*****

*Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН, Россия, г. Москва

**Московский физико-технический институт (гос. университет), г. Долгопрудный

***Международный университет природы, общества и человека «Дубна», г.Дубна

Поступила в редакцию 30.04.2009.

Предлагается численное решение краевой задачи для интегро-дифференциального уравнения, описывающего поведение квантового бозе-газа в граничной обобщенной задаче Смолуховского о температурном скачке и слабом испарении газа с плоской поверхности на границе раздела газ — конденсированная фаза (твердое тело, жидкость). Такие скачки обусловлены наличием нормального к поверхности градиента температуры, и, как следствие, потока тепла к поверхности.

The numerical decision of boundary task is offered for integral-differential equation. This equation describes quantum boze-gases in the generalized boundary Smolukhovsky's problem about temperature and evaporation of gas from a flat surface on border gas – the condensed phase (a solid, a liquid). Such jumps are caused by presence of normal to the surface gradient of temperature, and, as a result, stream of heat to the surface.

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

Keywords: Smolukhovsky problem, Boze-gas, integral-differential equation, iterative methods.

Введение

Обобщенная задача Смолуховского о скачке температуры разреженного газа на границе раздела газ — конденсированная фаза (твердое тело, жидкость) и о слабом испарении газа с плоской поверхности относится к числу важнейших задач кинетической теории квантовых газов.

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

¹Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ №08-01-00826.

1. Постановка задачи

Пусть квантовый бозе-газ занимает полупространство $x > 0$ над плоской стенкой, лежащей в плоскости $x = 0$. Следуя [1], возьмем τ -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 Бозе,

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

k_B — постоянная Больцмана, m — масса бозе-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 бозеана

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

Введем безразмерную скорость $\mathbf{C} = \sqrt{\beta} \mathbf{v}$, $\beta = m/(2k_B T_s)$ (T_s — температура поверхности в начале координат), функцию $\alpha(x) = \mu_0(x)/(k_B T(x))$ и безразмерный параметр $\alpha_s = \mu_s/(k_B T_s)$. 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 бозеана: $f(x, v) = f_B^s(C) + g(C)h(x, C)$, где $g(C) = \exp(C^2 - \alpha_s)/(\exp(C^2 - \alpha_s) - 1)^2$, $h(x, \mathbf{C})$ — 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

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

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

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

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

Законы сохранения приводят к следующей алгебраической системе уравнений

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

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

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

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

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

Ядро уравнения (3) имеет следующий вид:

$$k(\mathbf{C}, \mathbf{C}', \alpha) = 1 + 2 \frac{g_0(\alpha)}{g_1(\alpha)} C_x C'_x + 4 \frac{g_0^2(\alpha)}{d_0(\alpha)} \left(C^2 - \frac{3g_1(\alpha)}{2l(\alpha)} \right) \left(C'^2 - \frac{3g_1(\alpha)}{2l(\alpha)} \right),$$

где

$$d_0(\alpha) = g_0(\alpha)g_3(\alpha) - g_1^2(\alpha), \quad d_1(\alpha) = g_2(\alpha)l(\alpha) - g_1(\alpha)g_0(\alpha),$$

$$l(\alpha) = -\ln(1 - e^\alpha), \quad g_0(\alpha) = -\frac{3}{2} \int_0^\infty \ln(1 - \exp(\alpha - C^2)) dC,$$

$$g_1(\alpha) = -4 \int_0^\infty C \ln(1 - \exp(\alpha - C^2)) dC,$$

$$g_2(\alpha) = -\frac{15}{2} \int_0^\infty C^2 \cdot \ln(1 - \exp(\alpha - C^2)) dC,$$

$$g_3(\alpha) = -12 \int_0^\infty C^3 \ln(1 - \exp(\alpha - C^2)) dC.$$

Уравнение (3) имеет следующие легко проверяемые частные решения:

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

2. Граничные условия

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

$$h(0, \mathbf{C}) = 0, \quad 0 < C_x < 1. \quad (4)$$

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

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

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

$$h_{as}(x, \mathbf{C}) = \varepsilon_1 + \varepsilon_T \left(C^2 - \frac{3 \cdot g_2(\alpha)}{5 \cdot g_0(\alpha)} \right) + g_T(x - C_x) \left(C^2 - \frac{g_2(\alpha)}{g_0(\alpha)} \right) + \left(U - g_T \frac{d_1(\alpha)}{g_0(\alpha)} \right). \quad (6)$$

В выражении (6): ε_1 — вспомогательная неизвестная величина, она связана линейным соотношением со скачком приведенного химического потенциала ε_α (α — безразмерная величина) и величиной скачка температуры ε_T :

$$\varepsilon_1(\alpha) = \varepsilon_\alpha - \left(\alpha - \frac{3 \cdot g_2(\alpha)}{5 \cdot g_0(\alpha)} \right) \cdot \varepsilon_T(\alpha), \quad (7)$$

относительный градиент логарифма температуры в газе g_T — величина, заданная вдали от поверхности, U — заданная скорость испарения бозе-частиц с плоской 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: $dC_y dC_z = \rho d\rho d\varphi$. Обозначим $C_x = \mu$, тогда $C^2 = \mu^2 + \rho^2$. Интегрирование по углу φ в правой части уравнения (3) дает 2π . В результате получаем уравнение:

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

с ядром

$$k(\omega, \rho, \omega', \rho', \alpha) = 1 + 3 \frac{l(\alpha)}{g_1(\alpha)} \omega \omega' + 4 \frac{l^2(\alpha)}{d_0(\alpha)} \left(C^2 - \frac{g_1(\alpha)}{l(\alpha)} \right) \left(C'^2 - \frac{g_1(\alpha)}{l(\alpha)} \right),$$

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

Граничные условия имеют вид:

$$h(0, \mu, \rho) = 0, \quad 0 < \mu < +1, \quad (9)$$

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

$$h_{as}(x, \mu, \rho) = \varepsilon_1 + \varepsilon_T \left(\mu^2 + \rho^2 - \frac{3 \cdot g_2(\alpha)}{5 \cdot g_0(\alpha)} \right) + g_T(x - \mu) \left(\mu^2 + \rho^2 - \frac{g_2(\alpha)}{g_0(\alpha)} \right) + \left(U - g_T \frac{d_1(\alpha)}{g_0^2(\alpha)} \right). \quad (11)$$

Требуется найти зависимость скачка температуры ε_T и величины ε_1 от величины химического потенциала α . Затем по найденным величинам нужно найти зависимость величины скачка химического потенциала ε_α от величины химического потенциала. При этом ожидаемое изменение химического потенциала α находится

в интервале $[-5; 0)$. Для этого необходимо найти такое решение задачи Смолуховского, которое удовлетворяло бы условию, следующему из закона сохранения импульса [1]:

$$2\pi \int_{-1}^{+1} \int_0^{+\infty} \mu h(x, \mu, \rho) g(\mu, \rho) d\mu d\rho = U, \quad \forall x > 0, \quad (12)$$

где

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

Обобщенная задача Смолуховского объединяет сразу две задачи — задачу о температурном скачке и задачу о слабом испарении. В этой работе рассмотрен случай классической задачи Смолуховского, когда $U = 0$.

3. Численный метод решения

Граничная задача Смолуховского о скачке температуры и испарении газа с плоской поверхности на границе раздела газ — конденсированная фаза, сформулированная в (11–14), имеет сложные граничные условия, а коэффициенты g_i , d_i — являются интегралами в бесконечных пределах. Теоретически было показано, что для вычисления этих кинетических коэффициентов при фиксированном α с заданной точностью δ достаточно ограничить верхний предел интегрирования числом :

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

В рассматриваемом диапазоне значений $\alpha \in [-5; 0)$ значение $|M|$ не превосходило 10. Расчетная область бралась в виде $0 \leq x \leq M$, $-1 \leq \mu \leq 1$, $0 \leq \rho \leq M$. В этой области вводилась равномерная сетка с шагами dx , $d\mu$, $\delta\rho$.

Для решения интегро-дифференциальных уравнений (11) с граничными условиями (12–14) применялся численный итерационный метод [2].

На n -м слое по x уравнение (11) аппроксимировалось неявной конечно-разностной схемой, которую можно записать в виде системы уравнений, описывающей переход от $(j - 1)$ -й к j -й итерации:

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

Здесь j — номер итерации внутреннего итерационного процесса, применяемого для решения системы (16).

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 (16), который организуется следующим образом. Вычисляются промежуточные значения $\hat{h}_{n+1}^{(j)}(x, \mu, \rho)$ до тех пор, пока не выполняется условие:

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

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 (9–12) сходится к решению для любых значений параметров ε_1 и ε_T .

4. Результаты расчетов

Были проведены расчеты для следующих входных данных: $\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_T = 1$, $g_T = 1$, $\alpha = -5$, $U = 0$, $M = 10$, $X_{\max} = 10$, $R_{\max} = 10$ при соотношениях шагов $dx \times d\mu \times d\rho = 0.1 \times 0.1 \times 0.1$. Вид рассчитанной функции h с помощью неявного метода приведен на рис. 1. Во всех методах для достижения точности $\delta = 0.01$ при различных α требовалось не более 10–12 итераций по i .

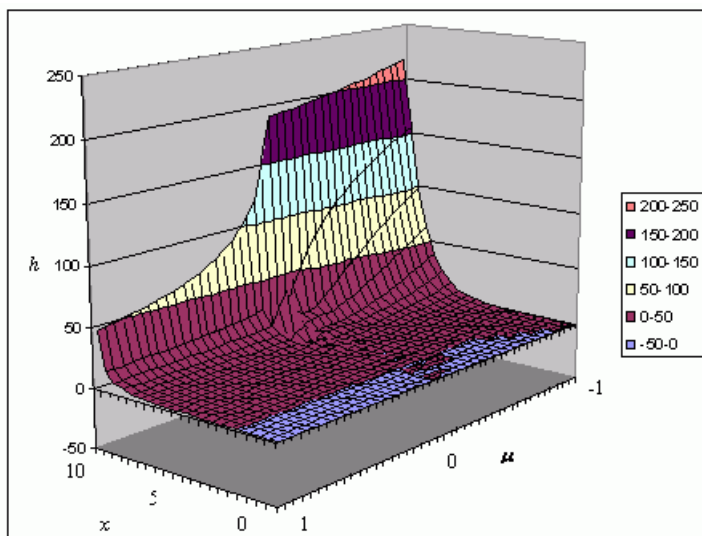


Рис. 1: Распределение функции h

Зависимости рассчитанных значений ε_T , ε_1 , ε_α от величины химического потенциала α приведены на рис. 2, 3, 4 для случаев $g_T = 1$; 0.5; -1 соответственно.

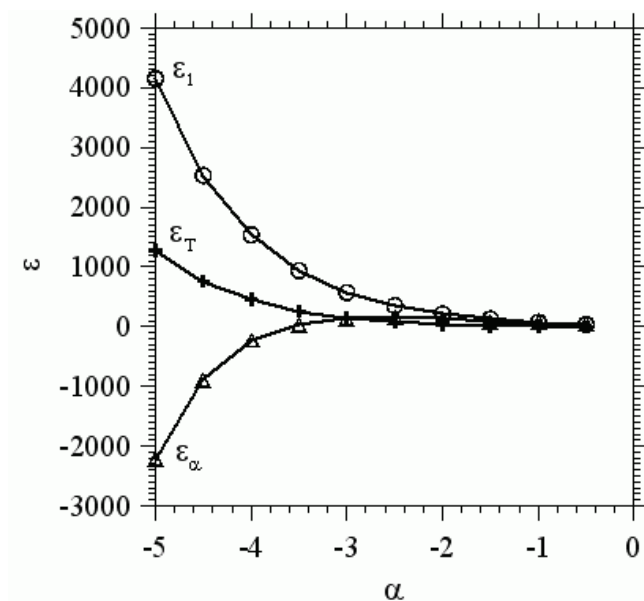


Рис. 2: Зависимости $\varepsilon(\alpha)$ при $g_T = 1$

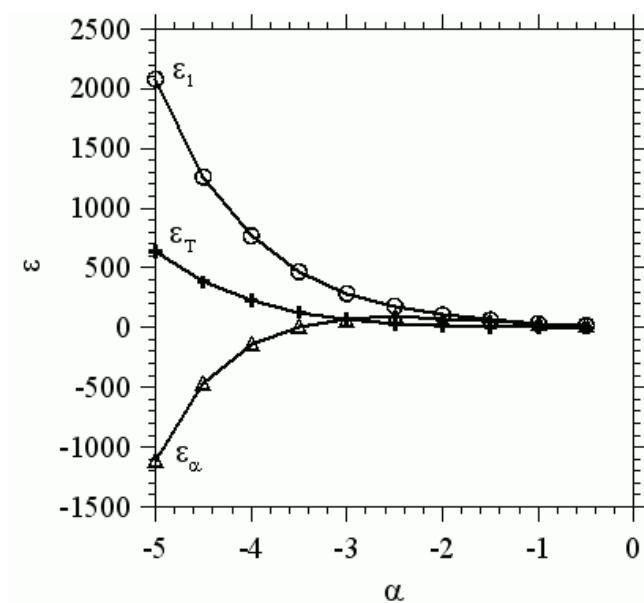


Рис. 3: Зависимости $\varepsilon(\alpha)$ при $g_T = 0.5$

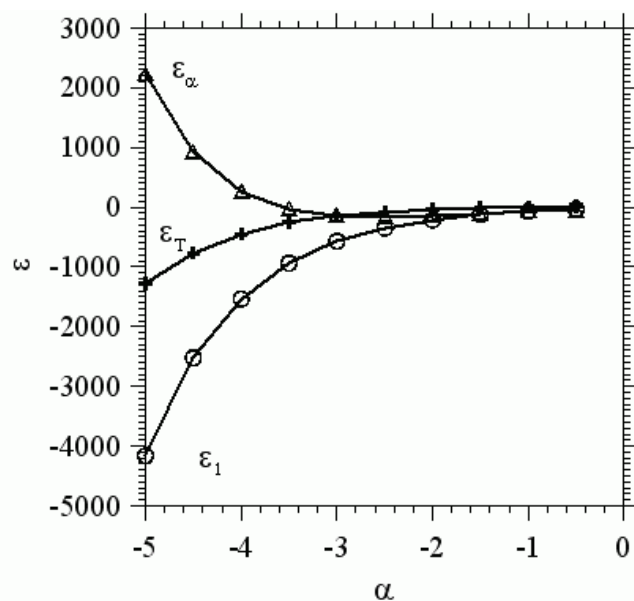


Рис. 4: Зависимости $\varepsilon(\alpha)$ при $g_T = -1$

Список литературы

- [1] Латышев А.В., Юшканов А.А. Моделирование кинетических процессов в квантовых бозе-газах и аналитическое решение граничных задач // Матем. моделирование. 2003. № 5. С. 80–94.
- [2] Есенков А.С., Есенков В.С., Михайлов И.Е. Методы решения интегро-дифференциального уравнения в задаче Смолуховского для ферми-газа. Вестник Тверского государственного университета. Серия: Прикладная математика. Тверь. Выпуск №1(12), 2009. С. 51–57.