

О РЕШЕНИИ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

С.А.САВКОВ

Россия, 302030, Орел, Новосильский пер., д. 3, кв. 6,
Орловский государственный университет,
кафедра теоретической физики,
e-mail: tanja@gamma.orl.ru

Предлагается метод решения кинетического уравнения. Апробация проводится на примере задачи о вычислении потока тепла от сферической частицы. Приведены результаты численных расчетов для БГК модели интеграла столкновений при условии чисто диффузного отражения молекул газа от ее поверхности.

В настоящее время разработан целый ряд способов решения кинетического уравнения. Достаточно подробный обзор достоинств и недостатков приближенных методов проведен в [1]. Особый интерес представляет непосредственное численное решение этого уравнения [2–5]. Однако, такое решение требует существенных ресурсов вычислительной техники.

В данной статье предлагается подход, позволяющий получить желаемую точность при значительно меньших затратах машинного времени и, что не менее важно, допускающий очевидное обобщение на случай более сложных задач физической кинетики. Изложенный метод может найти приложение в других областях математической физики.

Рассмотрим задачу о вычислении потока тепла от равномерно нагретой до температуры T_ω сферической частицы радиуса R_ω , находящуюся

в атомарном газе, в котором поддерживается постоянная на бесконечности температура T_0 . Перепад температуры $\Delta T = T_\omega - T_0$ будем считать достаточно малым для того, чтобы линеаризовать задачу.

Введем сферическую систему координат с началом в центре частицы. Состояние окружающего ее газа описывается уравнением [6]

$$C_r \frac{\partial \varphi}{\partial r} + \frac{C^2 - C_r^2}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial C_r} = I\varphi. \quad (1)$$

Здесь: φ – поправка к равновесной функции распределения

$$f_0 = n_0 \left(\frac{m}{2\pi kT_0} \right)^{3/2} \exp(-C^2);$$

$C = \mathbf{V} \sqrt{m/2kT_0}$ – безразмерная собственная скорость молекул газа; I – интегральный оператор столкновений.

Представим оператор столкновений в виде

$$I\varphi = F - \nu\varphi, \quad (2)$$

что, как известно, возможно в случае потенциалов межмолекулярного взаимодействия с ограниченным радиусом действия, а также для модельных уравнений.

Переходя к новой переменной $\mu = \cos \theta$, получим:

$$\mu \frac{\partial \varphi}{\partial r} + \frac{1 - \mu^2}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial \mu} = \frac{F - \nu\varphi}{C}. \quad (3)$$

Для решения этого уравнения в [3–5] применяют итерационный метод, аналогичный описанному в монографии [2]. При этом в качестве функции распределения, входящей в интегральную часть оператора столкновений, используются значения, полученные на предыдущем шаге итерации. Другими словами, на каждом шаге функция F считается заданной и задача сводится к численному решению соответствующего дифференциального уравнения.

Очевидно, что при таком подходе уравнение (3) допускает аналитическое решение. Действительно, составим систему характеристических уравнений

$$\frac{dr}{\mu} = \frac{rd\mu}{1 - \mu^2} = \frac{Cd\varphi}{F - \nu\varphi}.$$

Первое равенство

$$\frac{dr}{\mu} = \frac{rd\mu}{1 - \mu^2}$$

решается тривиально и дает уравнение характеристики

$$K_1 = r\sqrt{1 - \mu^2}. \quad (4)$$

В качестве второго уравнения рассмотрим

$$\frac{dr}{\mu} = \frac{Cd\varphi}{F - \nu\varphi}.$$

Подставляя в это уравнение найденное из (4) значение $\mu = \pm\sqrt{1 - K_1^2/r^2}$, получим

$$C\text{sign}(\mu)\sqrt{1 - \frac{K_1^2}{r^2}}\frac{d\varphi}{dr} = F - \nu\varphi.$$

Отсюда находим

$$\begin{aligned} \varphi = & K_2 \exp\left(-\text{sign}(\mu)\frac{\nu}{C}\sqrt{r^2 - K_1^2}\right) + \\ & + \frac{\text{sign}(\mu)}{C} \int_{R_\omega}^r \exp\left(\text{sign}(\mu)\frac{\nu}{C}\left(\sqrt{r_1^2 - K_1^2} - \sqrt{r^2 - K_1^2}\right)\right) \times \\ & \times F\left(r_1, \text{sign}(\mu)\sqrt{1 - K_1^2/r_1^2}\right) \frac{r_1 dr_1}{\sqrt{r_1^2 - K_1^2}}. \end{aligned} \quad (5)$$

Аргументы функции F означают, что при ее вычислении в качестве r и μ необходимо брать r_1 и $\text{sign}(\mu)\sqrt{1 - K_1^2/r_1^2}$ соответственно.

Для однозначного определения искомого решения необходимо задать граничные условия. Учитывая структуру (5) и разрывный характер функции распределения вдоль характеристики $r\sqrt{1 - \mu^2} = R_\omega$, разобьем область изменения переменных $r\mu$ (см. рис. 1) на три подобласти:

$$\text{I для } \mu \in [-1, 0], \text{ II - } \mu \in [0, \sqrt{1 - R_\omega^2/r^2}] \text{ и III - } \mu \in [\sqrt{1 - R_\omega^2/r^2}, 1].$$

Для того, чтобы различать функции распределения в перечисленных областях обозначим их соответствующими индексами.

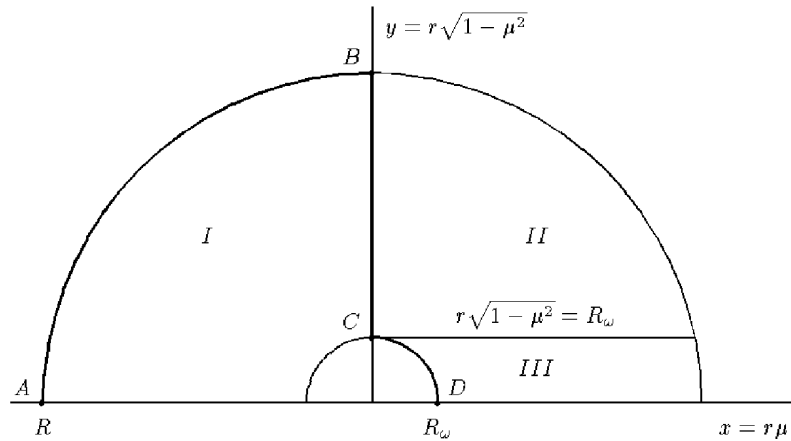


Рис. 1. Область интегрирования уравнения (3).

В качестве граничного условия в области I по аналогии с [2–5] можно задать значение функции φ_1 на некотором расстоянии $r = R$, т.е. на дуге AB :

$$\varphi_1(R, \mu) = \Phi_R(\mu) \quad \text{для} \quad -1 < \mu < 0. \quad (6)$$

Строго говоря, при конечном значении R , такой подход соответствует задаче о вычислении потока тепла между концентрическими сферами. При этом под R необходимо понимать радиус внешней сферы, а под Φ_R – функцию распределения отразившихся от ее поверхности молекул. Учитывая тот факт, что упомянутая проблема представляет самостоятельный интерес, оставим условие (6) без изменений с той лишь оговоркой, что в рассматриваемом случае R следует устремить к бесконечности, а в качестве Φ_R принять равновесную или Чепменовскую функцию распределения.

Значение функции распределения в области II определяется условием ее непрерывности на отрезке BC (границе областей I и II):

$$\varphi_2(r, 0) = \varphi_1(r, 0) \quad \text{для} \quad R_\omega < r \leq R. \quad (7)$$

Граничное условие в области III определяется законом отражения молекул газа от поверхности частицы и должно быть задано на дуге CD :

$$\varphi_3(R_\omega, \mu) = \Phi_\omega(\mu) \quad \text{для} \quad 0 < \mu < 1, \quad (8)$$

где Φ_ω – функция распределения молекул, отраженных от поверхности частицы.

Решение уравнения (3), удовлетворяющее условиям (6–8), описывается выражением

$$\varphi = \varphi_1 H_1 + \varphi_2 H_2 + \varphi_3 H_3, \quad (9)$$

где H_i – единичные функции, определяющие принадлежность φ к соответствующей области,

$$\begin{aligned} \varphi_1 = & \Phi_R \left(-\sqrt{1 - \frac{r^2}{R^2}(1 - \mu^2)} \right) \exp \left(-\frac{\nu}{C} \left(r\mu + \sqrt{R^2 - r^2(1 - \mu^2)} \right) \right) + \\ & + \frac{1}{C} \int_r^R \exp \left(-\frac{\nu}{C} \left(r\mu + \sqrt{r_1^2 - r^2(1 - \mu^2)} \right) \right) \times \end{aligned} \quad (10)$$

$$\times F \left(r_1, -\sqrt{1 - \frac{r^2}{r_1^2}(1 - \mu^2)} \right) \frac{r_1 dr_1}{\sqrt{r_1^2 - r^2(1 - \mu^2)}},$$

$$\begin{aligned} \varphi_2 = & \Phi_R \left(-\sqrt{1 - \frac{r^2}{R^2}(1 - \mu^2)} \right) \exp \left(-\frac{\nu}{C} \left(r\mu + \sqrt{R^2 - r^2(1 - \mu^2)} \right) \right) + \\ & + \frac{1}{C} \int_{r\sqrt{1-\mu^2}}^R \exp \left(-\frac{\nu}{C} \left(r\mu + \sqrt{r_1^2 - r^2(1 - \mu^2)} \right) \right) \times \\ & \times F \left(r_1, -\sqrt{1 - \frac{r^2}{r_1^2}(1 - \mu^2)} \right) \frac{r_1 dr_1}{\sqrt{r_1^2 - r^2(1 - \mu^2)}} + \end{aligned} \quad (11)$$

$$+ \frac{1}{C} \int_{r\sqrt{1-\mu^2}}^r \exp \left(\frac{\nu}{C} \left(\sqrt{r_1^2 - r^2(1 - \mu^2)} - r\mu \right) \right) \times$$

$$\times F \left(r_1, \sqrt{1 - \frac{r^2}{r_1^2}(1 - \mu^2)} \right) \frac{r_1 dr_1}{\sqrt{r_1^2 - r^2(1 - \mu^2)}},$$

$$\varphi_3 = \Phi_\omega \left(\sqrt{1 - \frac{r^2}{R_\omega}(1 - \mu^2)} \right) \exp \left(\frac{\nu}{C} \left(\sqrt{R_\omega - r^2(1 - \mu^2)} - r\mu \right) \right) +$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{1}{C} \int_{R_\omega}^r \exp \left(\frac{\nu}{C} \left(\sqrt{r_1^2 - r^2(1 - \mu^2)} - r\mu \right) \right) \times \\
 & \times F \left(r_1, \sqrt{1 - \frac{r^2}{r_1^2}(1 - \mu^2)} \right) \frac{r_1 dr_1}{\sqrt{r_1^2 - r^2(1 - \mu^2)}}.
 \end{aligned} \tag{12}$$

Фактически, выражения (10–12) представляют собой аналитическую реализацию предложенного в [2–5] численного метода. Поэтому, для решения полученной системы интегральных уравнений может быть использован аналогичный подход.

Для дальнейшего анализа ограничимся БГК моделью интеграла столкновений [7], что соответствует

$$F = \nu \sum_{i=1}^3 P_i(C, \mu) M_i, \quad M_i = \pi^{-3/2} \int P_i \varphi \exp(-C^2) d\mathbf{C}.$$

$$P_1 = 1, \quad P_2 = \sqrt{\frac{2}{3}} \left(C^2 - \frac{3}{2} \right), \quad P_3 = \sqrt{2} C \mu, \quad \nu = \frac{5n_0}{\alpha} \sqrt{\frac{k^3 T_0}{8m}},$$

α – теплопроводность газа.

Выбор указанной модели представляет особый интерес, поскольку позволяет провести сравнение с полученными в предельных случаях аналитическими результатами, а также определить точность известных приближенных методов решения кинетического уравнения. Кроме того, эта форма интеграла столкновений используется для решения более сложных задач [3, 5].

В качестве граничных условий примем равенство нулю поправки к функции распределения на бесконечности и закон чисто диффузного отражения молекул газа от поверхности частицы:

$$\Phi_\infty = 0, \quad \Phi_\omega = \frac{\Delta N}{n_0} + \left(C^2 - \frac{3}{2} \right) \frac{\Delta T}{T_0}.$$

Перепад концентрации молекул газа ΔN должен быть определен из условия отсутствия потока массы

$$\int \mu C \varphi \exp(-C^2) d\mathbf{C} = 0. \tag{13}$$

Отсюда находим

$$\frac{\Delta N}{n_0} = -\frac{1}{2} \frac{\Delta T}{T_0} - 4 \int_0^\infty dC \int_{-1}^0 \varphi_1(R_\omega) \mu C^2 \exp(-C^2) d\mu.$$

В соответствии с указанными условиями, система интегральных уравнений для моментов функции распределения примет вид:

$$\begin{aligned} M_i(r) = & \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \left(\int_{-1}^0 P_i(C, \mu) \varphi_1 d\mu + \int_0^{\sqrt{1-R_\omega^2/r^2}} P_i(C, \mu) \varphi_2 d\mu + \right. \\ & \left. + \int_{\sqrt{1-R_\omega^2/r^2}}^1 P_i(C, \mu) \varphi_3 K_i(C, \mu) d\mu \right) C^2 \exp(-C^2) dC, \\ \varphi_1 = & \frac{\nu}{C} \int_r^\infty \exp\left(-\frac{\nu}{C} \left(r\mu + \sqrt{r_1^2 - r^2(1-\mu^2)}\right)\right) \times \\ & \times \sum_j P_j\left(C, -\sqrt{1 - \frac{r^2}{r_1^2}(1-\mu^2)}\right) M_j(r_1) \frac{r_1 dr_1}{\sqrt{r_1^2 - r^2(1-\mu^2)}}, \\ \varphi_2 = & \frac{\nu}{C} \int_{r\sqrt{1-\mu^2}}^\infty \exp\left(-\frac{\nu}{C} \left(r\mu + \sqrt{r_1^2 - r^2(1-\mu^2)}\right)\right) \times \\ & \times \sum_j P_j\left(C, -\sqrt{1 - \frac{r^2}{r_1^2}(1-\mu^2)}\right) M_j(r_1) \frac{r_1 dr_1}{\sqrt{r_1^2 - r^2(1-\mu^2)}} + \\ & + \frac{\nu}{C} \int_{r\sqrt{1-\mu^2}}^r \exp\left(\frac{\nu}{C} \left(\sqrt{r_1^2 - r^2(1-\mu^2)} - r\mu\right)\right) \times \\ & \times \sum_j P_j\left(C, \sqrt{1 - \frac{r^2}{r_1^2}(1-\mu^2)}\right) M_j(r_1) \frac{r_1 dr_1}{\sqrt{r_1^2 - r^2(1-\mu^2)}}, \\ \varphi_3 = & \exp\left(\frac{\nu}{C} \left(\sqrt{R_\omega - r^2(1-\mu^2)} - r\mu\right)\right) \left((C^2 - 2) \frac{\Delta T}{T_0} - \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{4\nu}{C} \int_0^\infty C^2 dC \int_{-1}^0 \mu d\mu \int_{R_\omega}^\infty \exp\left(-\frac{\nu}{C} \left(R_\omega \mu + \sqrt{r_1^2 - R_\omega^2(1 - \mu^2)}\right) - C^2\right) \times \\
 & \times \sum_j P_j \left(C, -\sqrt{1 - \frac{R_\omega^2}{r_1^2}(1 - \mu^2)} \right) M_j(r_1) \frac{r_1 dr_1}{\sqrt{r_1^2 - R_\omega^2(1 - \mu^2)}} + \\
 & + \frac{\nu}{C} \int_{R_\omega}^r \exp\left(\frac{\nu}{C} \left(\sqrt{r_1^2 - r^2(1 - \mu^2)} - r\mu\right)\right) \times \\
 & \times \sum_j P_j \left(C, \sqrt{1 - \frac{r^2}{r_1^2}(1 - \mu^2)} \right) M_j(r_1) \frac{r_1 dr_1}{\sqrt{r_1^2 - r^2(1 - \mu^2)}}.
 \end{aligned}$$

Причем, в силу (13), $M_3 = 0$. Поэтому, реально необходимо решить систему двух уравнений, а третье может быть использовано для контроля точности полученных результатов.

Искомый поток тепла определяется выражением

$$q = \int \frac{mV_r V^2}{2} f_0 \varphi d\mathbf{V} = n_0 \sqrt{\frac{2k^3 T_0^3}{m}} \frac{R_\omega^2}{r^2} Q,$$

где

$$Q = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty C^5 \exp(-C^2) \left(\int_{-1}^0 \mu \varphi_1(R_\omega) d\mu + \int_0^1 \mu \Phi_\omega d\mu \right) dC, \quad (14)$$

что эквивалентно

$$\begin{aligned}
 Q &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\Delta T}{T_0} + \frac{2\nu}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dC \int_{-1}^0 d\mu \int_{R_\omega}^\infty \mu C^2 (C^2 - 2) \times \\
 & \times \exp\left(-\frac{\nu}{C} \left(R_\omega \mu + \sqrt{r_1^2 - R_\omega^2(1 - \mu^2)}\right) - C^2\right) \times \\
 & \times \sum_j P_j \left(C, -\sqrt{1 - \frac{R_\omega^2}{r_1^2}(1 - \mu^2)} \right) M_j(r_1) \frac{r_1 dr_1}{\sqrt{r_1^2 - R_\omega^2(1 - \mu^2)}}.
 \end{aligned} \quad (15)$$

В случае $R_\omega \nu \ll 1$ второе слагаемое в (15) ничтожно мало и

$$Q = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\Delta T}{T_0}.$$

Причем, этот результат не зависит ни от способа решения, ни от формы интеграла столкновений, а определяется исключительно законами сохранения.

В газодинамическом пределе значение потока тепла определяется условием перехода функции распределения в распределению Чепмена-Энскога, что дает

$$Q = \frac{5 \Delta T}{4 T_0} \frac{1}{R_\omega \nu}.$$

Указанные обстоятельства позволяют понять, почему даже грубые методы в приложении к рассматриваемому классу задач дают правдоподобные результаты.

Следует отметить, что идея преобразования уравнения Больцмана в систему интегральных уравнений относительно моментов функции распределения использовалась при рассмотрении подобных задач в [8–10]. Для решения составленной системы авторы [8–9] применяли вариационный метод. При этом поток тепла задавался соотношением $q = C_1/r^2$, что действительно выполняется в силу закона сохранения энергии. Тогда как поле температуры и концентрации определялись в виде $T = C_2/r$ и $n = C_3/r$, справедливым лишь на достаточно большом удалении от частицы. Постоянные C_i — вычислялись из условия минимальности соответствующего функционала.

В [10] использовался метод Галеркина. Однако, пробная функция выбиралась из аналогичных соображений.

Для описания реального характера зависимости $M_i(r)$, представим их в виде ряда по полиномам Чебышева

$$M_i(r) = \sum_{j=0}^K A_j^i T_j(\xi(r)). \quad (16)$$

Под $\xi(r)$ понимается монотонная функция, область значений которой лежит в интервале от -1 до 1. Коэффициенты разложения определяются условием

$$\sum_{k=0}^K \sum_{l=0}^K T_j(\xi_l) T_k(\xi_l) = \frac{K+1}{2} (\delta_{0j} + 1) \delta_{jk}, \quad \xi_l = \cos \frac{(2l+1)\pi}{2K+2}.$$

Такой подход позволяет обойтись без дополнительного интегрирования, необходимого в методе Галеркина, что существенно уменьшает время расчетов и за счет этого позволяет увеличить число удерживаемых в разло-

жении полиномов, но требует более тщательного подбора параметра разложения.

В частности, при использовании разложения по степеням $1/r$, большинство узлов интерполяции в случае мелкой частицы будет лежать очень близко, что не позволит описать поведение функции распределения в газодинамической области. А для $R_\omega \nu \gg 1$ – слишком далеко от нее,

Как показывает численный анализ, наиболее оптимальным с точки зрения сходимости является

$$\xi = 1 - 2 \exp(-\beta \sqrt{r^2 - R_\omega^2}).$$

Величина β подбиралась из требования, чтобы большинство узлов интерполяции лежали в области основного изменения функции распределения.

Результаты изложенного метода представлены на рис. 2 сплошной линией. Точками отмечены результаты [4]: \circ – для рассматриваемой модели интеграла столкновений и \bullet – для молекул – твердых сфер. Для сравнения приведены значения полученные в [11] моментным методом (пунктирная кривая). Максимальная погрешность, обусловленная использованием модельного интеграла столкновений наблюдается при $R_\omega \nu \sim 1$ и не превышает нескольких процентов, т.е. лежит в пределах погрешности известных методов. Тогда как в газодинамическом и свободномолекулярном режимах различие исчезает вообще. Данное обстоятельство оправдывает использование модельных уравнений при решении подобных задач.

Существенным преимуществом предложенного метода является также возможность определения распределения макроскопических параметров газа. На Рис. 3 и 4 представлены значения относительных перепадов температуры и концентрации молекул газа

$$\frac{\delta n}{n_0} = M_1(r) \quad \text{и} \quad \frac{\delta T}{T_0} = \sqrt{\frac{2}{3}} M_2(r)$$

при $\Delta T = T_0$.

Автор выражает искреннюю признательность Юшканову А.А. за сотрудничество, определившее разработку предложенного метода. А также благодарит Савкову О.В., обратившую внимание на возможность представления решения уравнения (3) в виде (5).

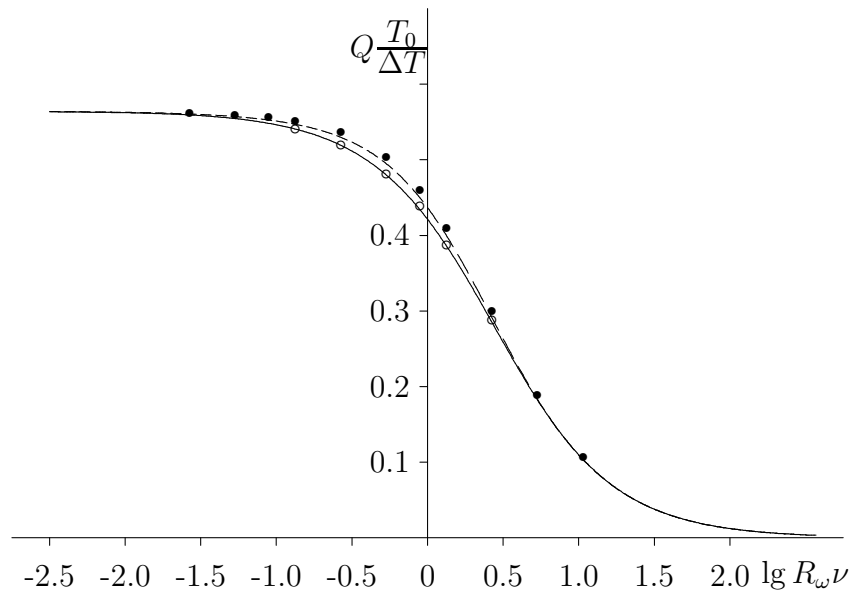


Рис. 2. График зависимости потока тепла от радиуса частицы: сплошная линия – результаты предложенного, пунктирная – моментного метода [11]. Точками отмечены приведенные в [4] значения: ○ – для рассматриваемой модели интеграла столкновений и ● – для молекул – твердых сфер.

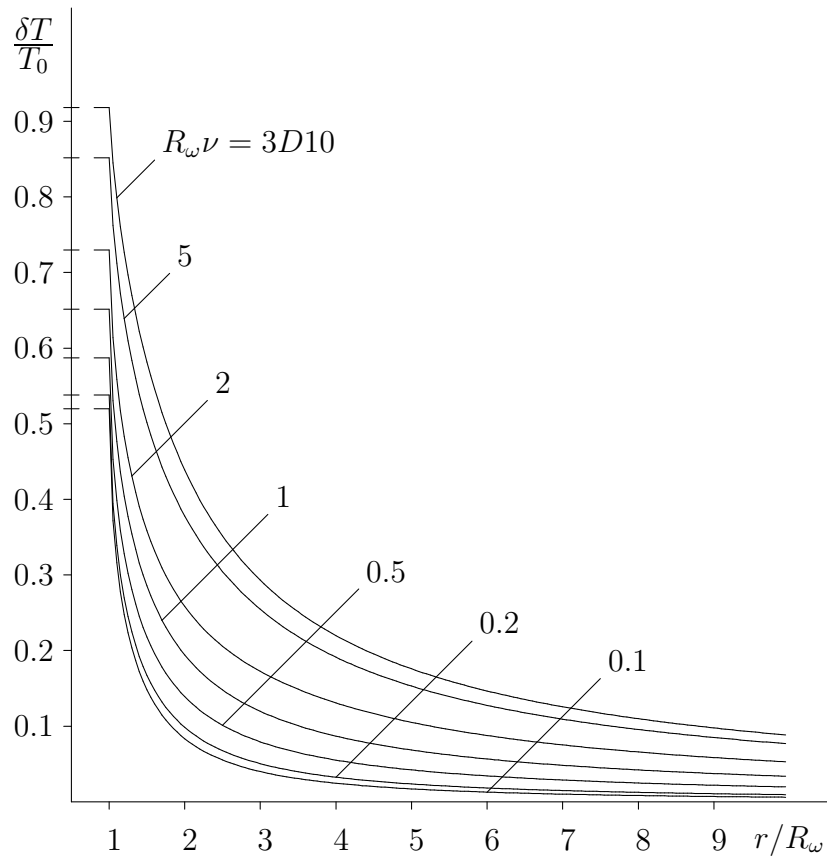


Рис. 3. Распределение относительного перепада температуры при $\Delta T = T_0$. Пунктиром вынесены значения в непосредственной близости от поверхности частицы.

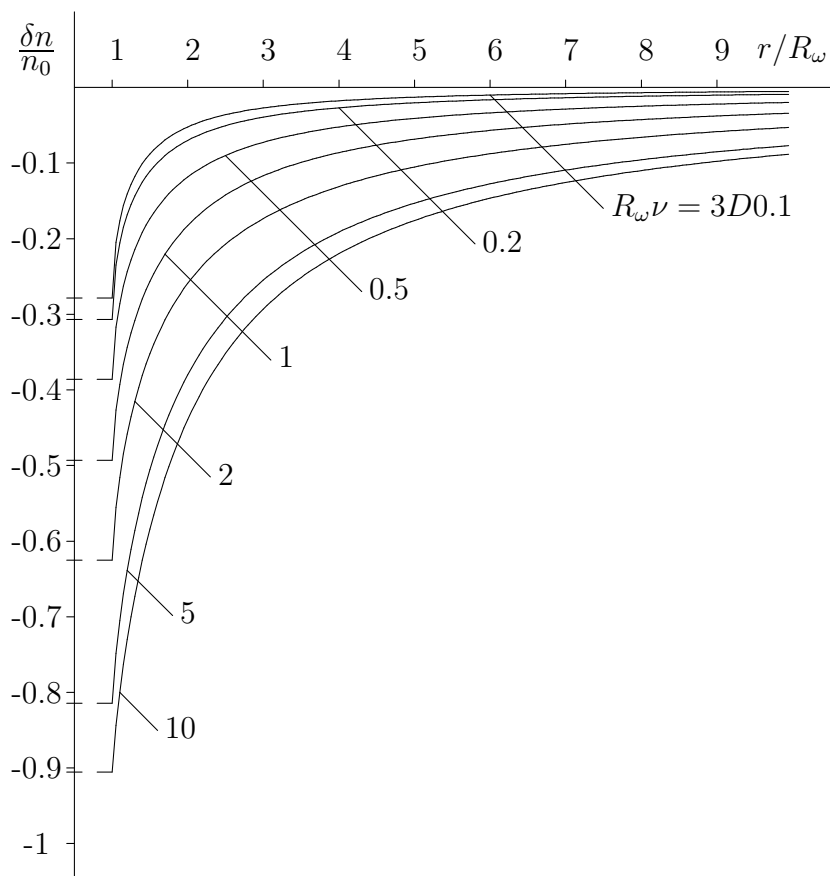


Рис. 4. Распределение концентрации молекул газа.

Список литературы

- [1] Черчиньяни К. Теория и приложения уравнения Больцмана. - М.: Мир, 1978, 295 с.
- [2] Шахов Е.М. Метод исследования движений разреженного газа. - М.: Наука, 1974, 208 с.
- [3] Sone Y., Sugimoto H. // *Phys. fluids. A* 5. No 6. 1993. P. 1491–1511.
- [4] Takata S., Sone Y., Lhuillier D., Wakabayshi M. // *Computers Math. Applic.* 1998. Vol. 35, No 1/2. P. 193–214.
- [5] Шахов Е.М. // *ЖВМ и МФ*. 1998. Т. 38. №5. С. 1040–1053.
- [6] Коган М.Н. Динамика разреженного газа. - М.: Наука, 1967.
- [7] Bhathagar P.L., Gross E.P., Krook M.A. // *Phys. Rev.* 1954. V.94. No 3. P. 511 – 525.
- [8] Cercignani C., Pagani C.D. // *Rarefied Gas Dynamics*. 1967. V. 2. P. 555–573.
- [9] Маргилевский А.Е., Черняк П.Е., Суетин П.Е. // *ИФЖ*. 1980. Т. 39. № 3. С. 428-434.
- [10] Chernyak V.G., Margilevskiy A.Ye. // *J. Heat Mass Transfer*. 1986. V. 32. No 11. P. 2127–2134.
- [11] Савков С.А., Юшканов А.А., Яламов Ю.И. // *ТВТ*. 2000. Т. 38. №1. С. 96–100.