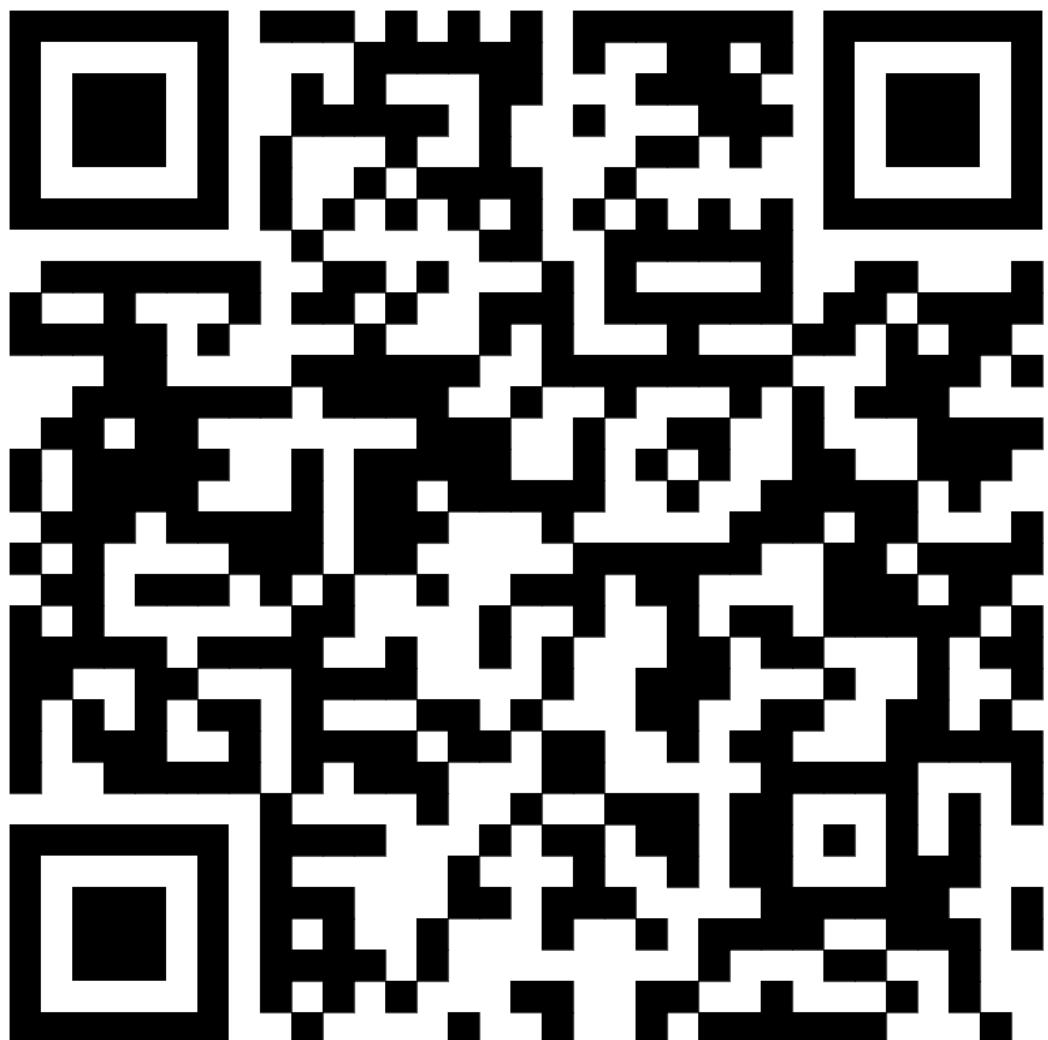


QR-код со ссылкой на диск с программой



# Диффузия и теплоперенос в области с градиентом температуры: от моделирования частиц к стохастическим уравнениям

Вероятность – это честное признание в том, что нам не хватает информации, но мы всё равно хотим что-то посчитать.

*из неформальных заметок по статистической физике*

## 1 Постановка задачи и визуализация градиента температуры

Рассмотрим двумерную область, заполненную идеальным газом, с левой горячей и правой холодной стенкой. Температуры стенок фиксированы и равны  $T_\ell$  и  $T_r$ . В численной демонстрации это прямоугольный сосуд, внутри которого движутся точечные частицы массы  $m$ .

### 1.1 Визуальное представление температуры

Температурный градиент мы наблюдаем через движение частиц:

- частицы, недавно столкнувшиеся с горячей стенкой, имеют большую скорость; их удобно выделять “горячими” цветами;
- частицы из холодной области движутся медленнее и помечаются “холодными” цветами;

Для наглядности в центр области помещают примесные частицы другого цвета. Начальное компактное пятно примеси затем расплывается, и по его форме видно, как диффузия реагирует на неоднородность среды. В каждый момент времени строится гистограмма распределения примеси по координате  $x$ ; по ней легко отслеживать смещение центра масс облака и рост дисперсии.

## 2 Микроскопическая модель газа

### 2.1 Движение и столкновения частиц

Модель представляет собой двумерный газ из  $N$  точечных частиц массы  $m$ . Между столкновениями частицы движутся прямолинейно и равномерно. Столкновения частиц между собой и со стенками сосудов считаются упругими.

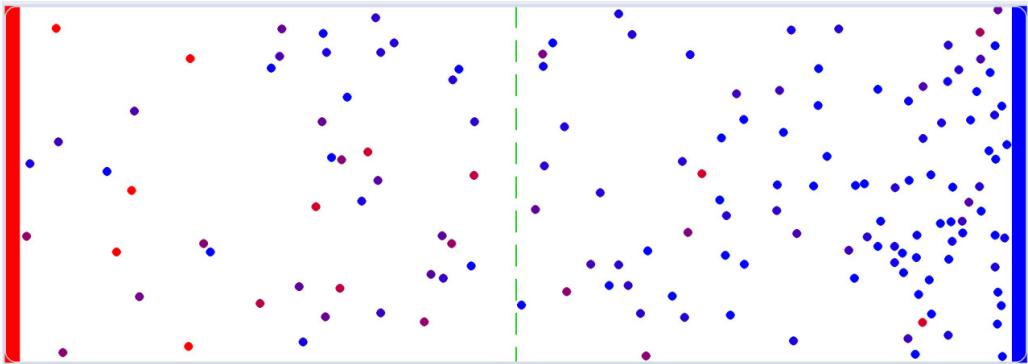


Рис. 1: Схема области и визуализация температурного градиента.

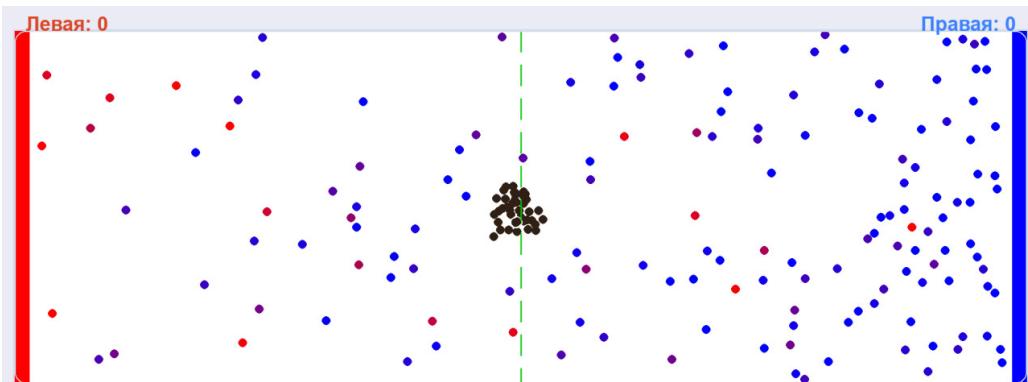


Рис. 2: Добавление частиц в центральную область.

Левые и правые стенки играют роль термостатов. При ударе частицы о стенку модуль её скорости переопределяется в соответствии с температурой этой стенки:

$$\frac{1}{2}mv^2 = kT_{\text{стенки}}, \quad (1)$$

где  $k$  – постоянная Больцмана. Направление скорости выбирается случайно, а модуль подчиняется приведённому соотношению. Так реализуется тепловой контакт газа с границами.

### 3 Неоднородная диффузия и закон Фика

Если капнуть духами на границе тёплого и холодного воздуха, запах первым делом “голосует” за тёплую сторону.

*из книжки FPAllbook*

Рассмотрим примесные частицы (облако другого цвета), которые удобно описывать полем концентрации  $n(x, t)$ . При наличии градиента температуры коэффициент диффузии  $D$  зависит от координаты:  $D = D(x)$ . В одномерном приближении выполняется уравнение Фика

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D(x) \frac{\partial n}{\partial x} \right). \quad (2)$$

В кинетической теории диффузионный коэффициент связан с длиной свободного пробега  $\lambda$  и средней тепловой скоростью  $\bar{v}$ :

$$D \sim \lambda \bar{v}. \quad (3)$$

Для идеального газа  $\bar{v} \propto \sqrt{T}$ , так что в первом приближении

$$D(x) \propto T(x). \quad (4)$$

Отсюда следуют несколько важных эффектов.

- В горячей части области коэффициент диффузии больше, и облако примеси расплывается быстрее.
- На ранних временах распределение примеси оказывается слегка смещено в сторону большей диффузии: возникает дополнительный дрейф облака к более горячей части.
- Когда значительная часть примеси попадает в холодную область, там из-за меньшего  $D(x)$  частицы задерживаются дольше; в стационарном режиме профиль концентрации смещён в сторону холодной стенки.

Изменение формы облака удобно отслеживать по гистограмме распределения по координате  $x$ , вычисляя положение центра масс и дисперсию.

### Мини-комментарий: опыт с каплей духов

Представим мысленный эксперимент: капля духов находится на границе тёплого и холодного воздуха. Из-за того, что в тёплой области коэффициент диффузии больше, облако запаха сначала смещается в сторону тепла, и именно там наблюдатель почтует запах раньше.

Ровно тот же эффект можно увидеть в нашей демонстрации: облако примеси, посанженное в центре, сначала демонстрирует дрейф в сторону более горячей части области, ещё до того, как существенная часть частиц достигнет границ.

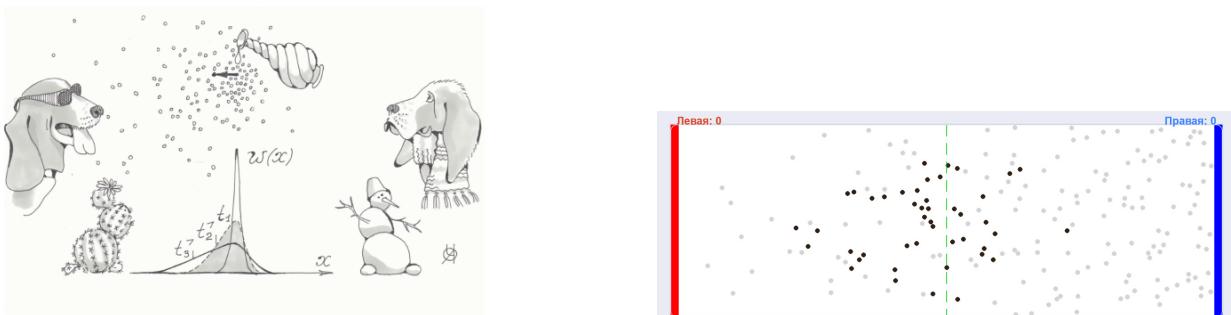


Рис. 3: Аналогия опыта с каплей духов и демонстрация дрейфа облака примеси на демонстрации.

## 4 Стохастические уравнения Ито и Стратоновича

Однаковая формула с разными точками над интегралом способна породить два разных мира. Физики называют их Ито и Стратонович.

*из лекции по стохастическому исчислению*

Движение отдельной примесной частицы вдоль оси  $x$  в неоднородной среде удобно описывать стохастическим дифференциальным уравнением (СДУ) с белым шумом:

$$dx_t = a(x_t) dt + b(x_t) \circ dW_t, \quad (5)$$

где  $a(x)$  – детерминированный дрейф,  $b(x)$  задаёт амплитуду флуктуаций, а  $dW_t$  – приращение винеровского процесса. Кружок в записи означает интерпретацию **Стратоновича**.

Плотность вероятности  $w(x, t)$  удовлетворяет уравнению Фоккера–Планка:

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(K_1(x)w) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(K_2(x)w). \quad (6)$$

Для приведённой формы СДУ при интерпретации Стратоновича кинетические коэффициенты имеют вид

$$K_2(x) = 2D b^2(x), \quad K_1(x) = -a(x) + D b(x) b'(x). \quad (7)$$

Дополнительный член  $D b(x) b'(x)$  в дрейфе описывает *дополнительный* перенос к области большей диффузии, возникающий из-за неоднородности шумового множителя.

Для интерпретации **Ито** то же СДУ записывают как

$$dx_t = a_{\text{Ито}}(x_t) dt + b(x_t) dW_t, \quad (8)$$

и выражения для коэффициентов меняются:

$$K_1^{\text{Ито}}(x) = -a_{\text{Ито}}(x), \quad K_2^{\text{Ито}}(x) = 2D b^2(x). \quad (9)$$

Здесь дополнительного дрейфа в явном виде нет; его нужно закладывать непосредственно в функцию  $a_{\text{Ито}}(x)$ .

В задачах статистической физики и неравновесных процессов удобнее интерпретация Стратоновича: она соответствует пределу быстро меняющихся, но всё же конечновременных флуктуаций и автоматически даёт корректный дополнительный дрейф.

В нашей демонстрации эффект виден на уровне “облака частиц”: модельная диффузия с  $D(x) \propto T(x)$  ведёт себя так, как прогнозирует анализ СДУ в форме Стратоновича.

## 5 Локальное уравнение состояния идеального газа

На макроскопическом уровне для идеального газа выполняется уравнение Менделеева–Клапейрона

$$pV = \nu RT. \quad (10)$$

Переходя к числу частиц  $N$  и концентрации  $n = N/V$ , получаем

$$p = nkT. \quad (11)$$

В демонстрации это уравнение можно проверить двум способами.

### 5.1 Глобальное равновесие

Если температуры стенок равны ( $T_\ell = T_r$ ), система после релаксации становится однородной:  $n_{\text{лев}} \approx n_{\text{прав}}$ , температура везде одинакова, и уравнение состояния выполняется для левой и правой половины сосуда с хорошей точностью.

## 5.2 Локальная форма закона

Рассмотрим тонкий слой шириной  $\Delta x$  в нашей области. Объём слоя равен

$$\Delta V = L_y \Delta x,$$

где  $L_y$  — высота области. Обозначим через  $N(x)$  число частиц, находящихся в этом слое, а через  $T(x)$  — локальную температуру, определяемую по средней кинетической энергии частиц:

$$\left\langle \frac{1}{2}mv^2 \right\rangle_x = kT(x). \quad (9)$$

Тогда локальная концентрация

$$n(x) = \frac{N(x)}{\Delta V},$$

и локальное уравнение Менделеева–Клапейрона принимает вид

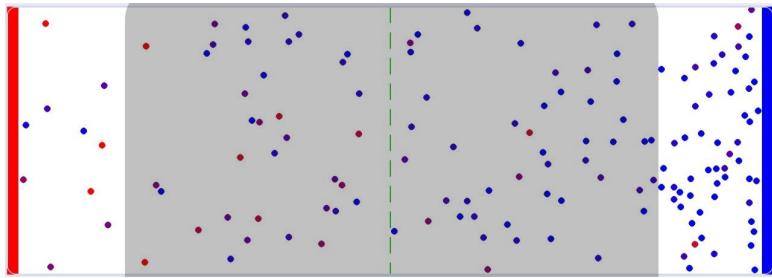


Рис. 4: Схематическое изображение областей, где выполняется локальное соотношение  $p(x) = n(x)kT(x)$ .

Именно эту зависимость можно проверять в численной модели:

- при равных температурах стенок  $T_\ell = T_r$  после релаксации средние значения  $n_{лев}$  и  $n_{прав}$  совпадают, а значит, давления в левой и правой половинах сосуда одинаковы, и уравнение Менделеева–Клапейрона выполняется для каждой половины;
- при наличии градиента температуры  $T(x)$  система остаётся в неравновесном стационарном состоянии, однако в малом объёме (тонком слое, где  $T(x)$  и  $n(x)$  мало меняются по координате) соотношение

$$p(x) \Delta V = N(x) kT(x)$$

остаётся справедливым по следующим соображениям: в холодной области больше число частиц, а горячей — температура, а их произведение остается постоянным.

А именно, в холодной области больше число частиц, а в горячей — температура, и их произведение остаётся практически постоянным.

Таким образом, модель позволяет наблюдать выполнение закона Менделеева–Клапейрона как в глобальном равновесном случае, так и в локальной форме для малых объёмов при наличии температурного градиента.

## 6 Длина свободного пробега и транспортные коэффициенты

Средняя длина свободного пробега в газе выражается как

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2} \pi d^2 n}, \quad (12)$$

где  $d$  – эффективный диаметр частицы,  $n$  – локальная концентрация.

Вблизи горячей стенки средняя скорость частиц выше, время между столкновениями больше, и фактические пробеги вдоль траекторий оказываются длиннее. В холодной части области ситуация обратная: траектории “измельчают”, пробеги короче.

Для диффузионного коэффициента в трёхмерном газе справедлива оценка

$$D = \frac{\lambda \bar{v}}{3}, \quad (13)$$

а в двумерной модели множитель  $1/3$  заменяется на  $1/2$ . Аналогичная по структуре формула существует для коэффициента теплопроводности:

$$\kappa = \frac{1}{3} \lambda c_V \rho \bar{v} \quad (14)$$

(в двумерном случае множитель также корректируется).

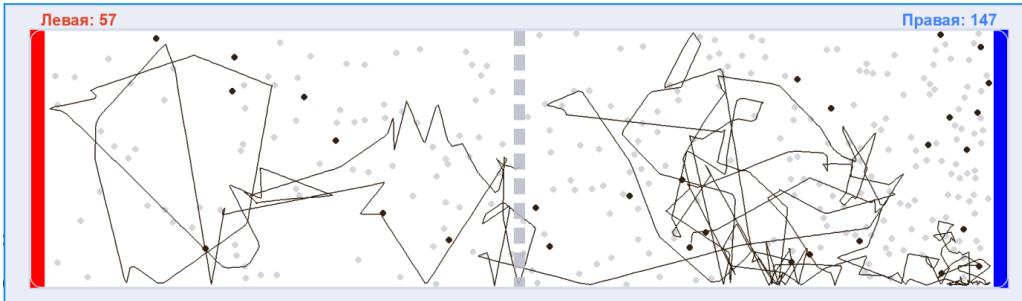


Рис. 5: Сравнение длины свободного пробега частиц в горячей и холодной областях.

## 7 Теплопоток и закон Фурье

Помимо диффузии примеси, в системе идёт перенос энергии от горячей стенки к холодной. Удобно фиксировать вертикальную границу и считать поток энергии через неё.

Если частица массы  $m$  пересекает границу со скоростью  $v_x$ , её энергия

$$E = \frac{1}{2} m v^2. \quad (15)$$

Вклад частицы в поток энергии:

$$\Delta Q = \begin{cases} +E, & v_x > 0 \quad (\text{частица идёт слева направо}), \\ -E, & v_x < 0 \quad (\text{частица идёт справа налево}). \end{cases} \quad (16)$$

В кинетической теории тепловой поток определяется как

$$j_Q = \frac{\Delta Q}{\Delta t \Delta S}, \quad (17)$$

где  $dQ$  — количество энергии, пересекающей площадку  $dS$  за время  $dt$ .

В нашей задаче же нет как таковой площади, через которую перелатают частички, у нас суммарный поток за время  $\Delta t$  равен

$$J_Q = \frac{1}{\Delta t} \sum_{i \in \Delta t} \Delta Q_i. \quad (18)$$

Численный эксперимент показывает:

- при  $T_\ell = T_r$  средний поток  $J_E \approx 0$ , что соответствует равновесию;
- при  $T_\ell \neq T_r$  устанавливается стационарный ненулевой поток с постоянным средним значением.

Это реализует закон Фурье:

$$j_Q = -\kappa \frac{dT}{dx}, \quad (19)$$

где  $j_Q$  — плотность теплового потока,  $\kappa$  — коэффициент теплопроводности. По структуре этот закон полностью аналогичен уравнению Фика для диффузии: градиент температуры играет роль “движущей силы” переноса энергии.

## 8 Энтропия и неравновесное стационарное состояние

Опять же вспомним, что мы изучаем ситуацию, в которой добавляем примесь молекул в центр области и рассматриваем эффекты, которые при этом возникают. Для нормированной плотности примеси  $p(x, t)$  энтропия определяется как

$$S(t) = - \int p(x, t) \ln p(x, t) dx. \quad (20)$$

- При равных температурах стенок система замкнута и со временем приходит к равномерному распределению и максимальной энтропии.
- При  $T_\ell \neq T_r$  система открыта: горячая стенка подаёт энергию, холодная её отводит. В итоге устанавливается неравновесное стационарное состояние с постоянным потоком энергии и устойчивым температурным профилем.

Энтропия облака примеси растёт по мере его расплывания, но глобальный максимум недостижим, так как внешние источники постоянно поддерживают температурный градиент.

## Вопрос для самостоятельного исследования

**Сценарий перестановки температур.** Предположим, что система уже вышла на стационарный режим при фиксированных температурах  $T_\ell$  и  $T_r$ . В некоторый момент времени температуры стенок *мгновенно меняют местами*: левая становится холодной, правая — горячей.

Предлагается:

1. Качественно описать эволюцию:

- как будет перестраиваться температурный профиль;

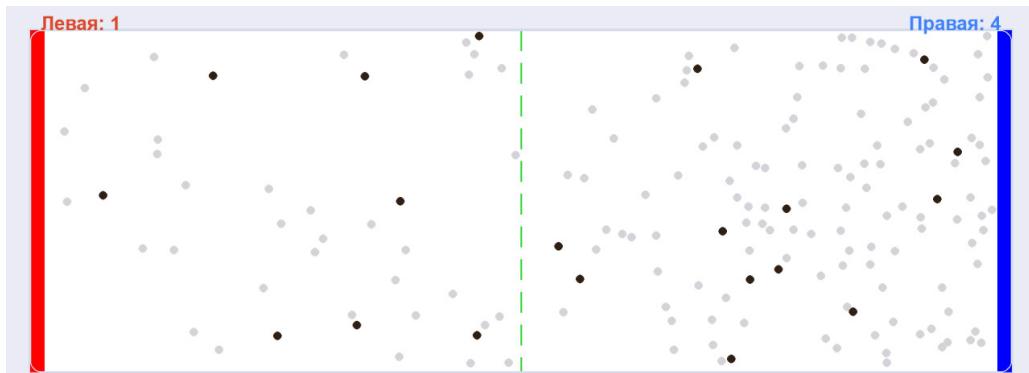


Рис. 6: Рост энтропии примеси и выход на стационарный режим.

- как изменится форма и положение облака примеси;
  - как будет вести себя дополнительный дрейф, связанный с неоднородностью коэффициента диффузии.
2. Нарисовать ожидаемую эволюцию энтропии примеси  $S(t)$  и обсудить, будет ли она постоянной или буде.
  3. Сравнить результаты рассуждений с численной демонстрацией: запустить модель, поменять температуры стенок местами и проанализировать получившиеся графики.