НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

На правах рукопису

КОБРИН Олександр Євгенійович

ДО ТЕОРІЇ КІНЕТИЧНИХ РІВНЯНЬ СИСТЕМ ВЗАЄМОДІЮЧИХ ЧАСТИНОК В МЕТОДІ НЕРІВНОВАЖНОГО СТАТИСТИЧНОГО ОПЕРАТОРА

01.04.02 — теоретична фізика

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

ЛЬВІВ — 1996

АВ 36.533

Дисертацією є рукопис

ЛННБ України ім.В.Стефаника
00760711 (М)

Робота виконана при Інституті фізики [illegible] ціональної академії наук України.

Науковий керівник — доктор фізико-математичних наук М.В.Токарчук

Офіційні опоненти — доктор фізико-математичних наук Р.Р.Левицький

— кандидат фізико-математичних наук В.М.Мальнєв

Провідна організація — Чернівецький державний університет ім. Ю.Федьковича

Захист відбудеться "12" лютого 1997 року о "15^{30}" годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 04.18.01 при Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України за адресою: 290011 м. Львів–11, вул. Свєнціцького, 1.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту фізики конденсованих систем НАН України за адресою: 290026 м. Львів–26, вул. Козельницька, 4.

Автореферат розіслано "3" січня 1997 року.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради,
кандидат фіз.-мат. наук — Т.Є.Крохмальський

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Важливість дослідження нерівноважних систем взаємодіючих частинок (таких як гази, рідини, плазма) методами кінетичних рівнянь обумовлена в першу чергу тим, що ці методи дозволяють в аналітичному вигляді отримувати залежності для коефіцієнтів переносу, здійснювати їх чисельний розрахунок для порівняння з експериментальними даними і на основі цих порівнянь застосовувати при дослідженні більш складних термодинамічних систем, чи у поєднанні з іншими теоріями і методами. Серед останніх можна було б назвати метод часових кореляційних функцій. З іншої сторони, існує також теоретичний інтерес у вивченні взаємовпливу кінетики та гідродинаміки помірно густих систем, де вони є тісно взаємопов'язані й повинні розглядатись одночасно. Якщо для розріджених систем (газів, плазми) кінетична теорія є добре розвиненою, то у випадку помірно густих та густих систем послідовної теорії все ще не існує. Труднощі при розгляді таких систем пов'язані у більшості випадків з неоднозначністю побудови інтегралів зіткнень, що безпосередньо залежать від врахування сильних взаємодій частинок на малих відстанях (у наближенні парних зіткнень) та колективних взаємодій частинок на великих відстанях (що відповідає поляризаційному і вищим наближенням). Серед інших труднощів теорії слід назвати відсутність параметрів, за якими можна проводити розклад для отримання кінетичного рівняння. Як правило, ці параметри характеризують роль взаємодії частинок в кінетичному рівнянні, від якої залежать як дисипативні, так і недисипативні процеси в системі. В помірно густих системах ця взаємодія може бути суттєвою.

Дана дисертаційна робота присвячена дослідженню модельних кінетичних рівнянь та їх розв'язків, що дозволяють описувати нерівноважні процеси в помірно густих та густих системах з явно виділеними близькосяжним та далекосяжним потенціалами міжчастинкової взаємодії. При цьому особлива увага приділяється послідовному способу отримання цих рівнянь з перших принципів нерівноважної статистичної термодинаміки методом нерівноважного статистичного оператора Д.М.Зубарєва.

Дисертаційна робота виконана в Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України згідно плану робіт по темі: шифр 1.4.8.10 №0194022991 "Розвиток і застосування статистичної теорії нерівноважних властивостей простих, полярних і магнітних рідин і плазми на основі узгодженого опису кінетики і гідродинаміки".

Мета роботи. Отримання і розв'язок кінетичних рівнянь для помірно густих та густих систем взаємодіючих частинок, в тому числі з врахуванням як повільних, так і швидких гідродинамічних процесів методом нерівноважного статистичного оператора Д.М.Зубарєва. Аналітичний і чисельний розрахунок коефіцієнтів переносу систем на основі отриманих розв'язків.

Наукова новизна:

– кінетичні рівняння для нерівноважної одночастинкової функції розподілу та функції розподілу гідродинамічних змінних, які вибрано в якості параметрів опису кінетичних та гідродинамічних флуктуацій в однокомпонентній класичній рідині;
– обчислення структурної функції гідродинамічних флуктуацій та потоків методом колективних змінних;
– отримання кінетичного рівняння Енскога-Ландау для багатосортної системи заряджених твердих сфер;
– нормальний розв'язок такого рівняння методом Чепмена-Енскога та методом граничних умов для однокомпонентної системи;
– використання при розв'язуванні локальних законів збереження в загальній формі й показ того, що трансформація рівняння збереження повної енергії у рівняння балансу для кінетичної енергії є достатньою для коректного розрахунку лише тензора в'язких напружень і при високих густинах може приводити до невідповідних значень вектора теплового потоку в системі;
– аналітичний і чисельний розрахунок коефіцієнтів переносу густих систем в залежності від температури при різних співвідношеннях густин компонент сумішей, парціальні кінетичні коефіцієнти;
– кінетичні рівняння для твердих сфер та густого електронного газу в узагальненому поляризаційному наближенні.

Практична і наукова цінність. Отримані в модифікованій кінетичній теорії з врахуванням повільних гідродинамічних процесів узгоджені рівняння кінетики та гідродинаміки можуть бути використані для обчислення низькочастотних аномалій в нейтральних класичних рідинах та деяких інших системах, скажімо в густій плазмі. Окрім цього дані рівняння також можна застосовувати для дослідження вкладу крупномасштабних флуктуацій в кінетичних процесах в околі точки фазового переходу. Також запропоновано і реалізовано спосіб обчислення структурної функції гідродинамічних флуктуацій та гідродинамічних швидкостей – потоків в просторі колективних змінних, оскільки при аналізі рівнянь переносу та ядер переносу це є першочерговою задачею.

Вибір міжчастинкового потенціалу взаємодії у адитивній формі як суми деякої короткосяжної частини (тверді сфери) та далекосяжної (кулонівська взаємодія) дозволив уникнути розбіжності в інтегралі зіткнень кінетичного рівняння Енскога-Ландау на близьких відстанях. Також це дало можливість відслідкувати в явній формі вклад далекосяжної взаємодії в структуру нормального розв'язку й апроксимувати температурну залежність коефіцієнтів переносу із зростанням густини системи. Отримані результати можуть бути використані для інтерпретації та пояснення ефектів впливу далекосяжної (кулонівської) взаємодії в помірно густих повністю іонізованих газах, плазмі, що дозволить розширити розуміння та можливість прогнозування властивостей таких систем.

Модифіковані групові розклади дозволили вийти за рамки наближення "парних" зіткнень й врахувати також колективну взаємодію частинок на далеких відстанях, що може розглядатись як аналог поляризаційного наближення. Отримані результати можуть бути застосовані до опису сильно густих газів, що описуються моделлю твердих сфер, або густого електронного газу в просторово однорідному випадку. Поєднання обох підходів є основою для отримання кінетичного рівняння для сильно густої системи заряджених неточкових частинок.

<u>На захист виносяться такі положення:</u>

1. Вивід кінетичного рівняння для нерівноважної одночастинкової функції розподілу та взаємопов'язаного з ним рівняння типу Фоккера-Планка для нерівноважної функції розподілу гідродинамічних змінних: густини маси, імпульсу, енергії.
2. Отримання нестаціонарного нормального розв'язку та узагальнених коефіцієнтів переносу кінетичного рівняння Енскога-Ландау для однокомпонентної системи заряджених твердих сфер методом граничних умов.
3. Знаходження нормального розв'язку кінетичного рівняння Енскога-Ландау для двокомпонентної системи заряджених твердих сфер методом Чепмена-Енскога.

4. Аналітичний і чисельний розрахунок коефіцієнтів переносу нейтрального та однократно іонізованого Ar та сумішей Ar-Kr, Ar-Xe, Kr-Xe.
5. Вивід узагальнених кінетичних рівнянь в поляризаційному наближенні для системи твердих сфер та для густої однокомпонентної плазми на основі модифікованих групових розкладів для ланцюжка рівнянь ББГКІ.

Апробація роботи. Основні результати дисертації доповідались і обговорювались на таких симпозіумах та конференціях:

- Українсько-французький симпозіум "Конденсована речовина: наука та індустрія" (Львів, 1993р.);
- Міжнародна конференція "Фізика в Україні" (Київ, 1994р.);
- Міжнародна конференція, присвячена 150-річчю від дня народження І.Пулюя (Львів, 1995р.);
- Міжнародна робоча нарада "Статистична фізика та теорія конденсованого стану" (Львів, 1995р.);
- 23 конференція європейського фізичного товариства з керованого термоядерного синтезу та фізики плазми (Київ, 1996р.);

а також на семінарах Інституту фізики конденсованих систем Національної академії наук України та на семінарах відділу теорії нерівноважних процесів цього інституту.

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 15 робіт, що перераховані в кінці автореферату. У спільних публікаціях авторові належить отримання і розв'язок кінетичних рівнянь, перехід одного типу розв'язку в інший у граничних випадках стаціонарного процесу та малих густин, рівно ж як і для кінетичних коефіцієнтів; чисельний розрахунок коефіцієнтів переносу за отриманими аналітичними формулами для різних систем, аналіз застосовності використаних наближень у залежності від густини та компонент сумішей.

Структура та об'єм дисертації. Дисертаційна робота складається з вступу, трьох розділів, висновків, списку цитованої літератури та шести додатків. Робота викладена на 121 сторінці (разом з літературою та додатками – 182), включає бібліографічний список, що містить 179 найменувань у вітчизняних та зарубіжних виданнях.

ЗМІСТ РОБОТИ

Вступ. Подано огляд робіт, в яких розвивалась кінетична теорія помірно густих та густих нерівноважних систем взаємодіючих частинок та досліджувались спрощені моделі. Наголошено на досягненнях кількох останніх років. Розглянуто основні принципи, на яких базується побудова кінетичної теорії з врахуванням гідродинамічних ефектів та опис еволюції систем в часі. Висвітлено актуальність теми дисертаційної роботи, дано її загальну характеристику, викладено короткий зміст кожного розділу, сформульовано основні положення, що виносяться на захист.

Перший розділ називається "Рівняння Ліувіля та ланцюжок рівнянь ББГКІ з модифікованими граничними умовами, що враховують локальні закони збереження". У цьому розділі методом нерівноважного статистичного оператора Д.М.Зубарєва з допомогою модифікованої граничної умови до рівняння Ліувіля, що враховує як нерівноважність одночастинкової функції розподілу, так і локальні закони збереження, знайдено його загальний розв'язок. При цьому саме рівняння отримує у своїй правій частині безмежно мале джерело

$$\left[\frac{\partial}{\partial t}+\mathrm{i}L_N\right]\varrho\left(x^N;t\right)=-\varepsilon\Big(\varrho\left(x^N;t\right)-\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right)\Big),$$

яке порушує симетрію відносно інверсії часу й відбирає загайні розв'язки, що відповідає скороченому опису нерівноважного стану. Допоміжна функція $\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right)$ є квазірівноважною функцією розподілу, що визначається з умови максимуму інформаційної ентропії системи при збереженні умови нормування та додаткових умовах, що середні значення змінних скороченого опису є фіксованими. Вибір функції $\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right)$ у значний мірі залежить від розглядуваного нерівноважного стану системи. Оскільки при узгодженому описі кінетики та гідродинаміки параметрами скороченого опису є нерівноважна одночастинкова функція розподілу та середнє значення потенціальної енергії взаємодії, то квазірівноважна функція розподілу $\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right)$ має вид:

$$\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right)=\exp\left\{-U_N(\boldsymbol{r}^N;t)\right\}\prod_{l=1}^{N}\frac{f_1(x_l;t)}{u(\boldsymbol{r}_l;t)},$$

де функції $u(\boldsymbol{r}_l;t)$ задовільняють рівняння

$$u(\boldsymbol{r}_l;t) = \int \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}^{N-1}}{(N-1)!} \exp\left\{-U_N(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}^{N-1};t)\right\} \prod_{l=2}^{N} \frac{n(\boldsymbol{r}_l;t)}{u(\boldsymbol{r}_l;t)},$$

$$U_N(\boldsymbol{r}^N;t) = U_N(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N;t) = \frac{1}{2}\sum_{l\neq j=1}^{N} \varPhi(|\boldsymbol{r}_l-\boldsymbol{r}_j|)\beta(\boldsymbol{r}_j;t).$$

Шляхом інтегрування отриманого рівняння Ліувіля з джерелом записано ланцюжок рівнянь ББГКІ з модифікованими граничними умовами. Для s-частинкової функції розподілу ($s=1,2,\ldots,N$) рівняння має вид:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}L_s\right] f_s(x^s;t) + \int \mathrm{d}x_{s+1} \sum_{j=1}^{s} \mathrm{i}L(j,s+1) f_{s+1}(x^{s+1;t}) =$$

$$-\varepsilon\left[f_s(x^s;t) - g_s(\boldsymbol{r}^s;t)\prod_{j=1}^{s} f_1(x_j;t)\right].$$

Оскільки в це рівняння входять функції $g_s(\boldsymbol{r}^s;t)$, то його слід доповнити рівнянням для координатних квазірівноважних функцій розподілу. Зокрема, у випадку $s=2$ таким рівнянням є рівняння Орнштейна-Церніке, оскільки парна квазірівноважна кореляційна функція розподілу $h_2(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;t)$ пов'язана з $g_2(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;t)$ співвідношенням $h_2(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;t) = g_2(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;t) - 1$.

В наближенні "парних" зіткнень модифікований ланцюжок рівнянь ББГКІ вдається замкнути й отримати рівняння для нерівноважної одночастинкової функції розподілу у виді

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}L(1)\right] f_1(x_1;t) =$$

$$\int \mathrm{d}x_2\, \mathrm{i}L(1,2) \lim_{\tau\to-\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}L_2\tau} g_2(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;t+\tau) f_1(x_1;t+\tau) f_1(x_2;t+\tau).$$

У випадку потенціалу міжчастинкової взаємодії у вигляді твердих сфер це рівняння приводить до рівняння ревізованої теорії Енскога RET, без будь-яких феноменологічних припущень:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}L(1)\right] f_1(x_1;t) = \int \mathrm{d}x_2\, \hat{T}(1,2) g_2(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;t) f_1(x_1;t) f_1(x_2;t),$$

де $\hat{T}(1,2)$ – оператор зіткнень Енскога. Для цього рівняння П.Резибуа довів H-теорему.

Для послідовного опису кінетичних та гідродинамічних флуктуацій в однокомпонентній класичній рідині слід вибрати парамерти скороченого опису для одночастинкових та колективних процесів. З цією метою далі переформульовано теорію підходу об'єднаного опису кінетики та гідродинаміки на основі методу нерівноважного статистичного оператора. В ролі цих параметрів вибрано нерівноважну одночастинкову функцію розподілу $f_1(x;t) = \langle\hat{n}(x)\rangle^t$ та функцію розподілу гідродинамічних змінних $f(a;t) = \langle\delta(\hat{a}-a)\rangle^t$, де $\hat{a} = \hat{a}_{\boldsymbol{k}} = \{\hat{n}_{\boldsymbol{k}}, \hat{\boldsymbol{J}}_{\boldsymbol{k}}, \hat{\mathcal{E}}_{\boldsymbol{k}}\}$ – фазові функції, що є Фур'є-образами густини числа частинок, імпульсу, енергії. Тоді у відповідності до ідеї скороченого опису нерівноважного стану величина $\varrho\left(x^N;t\right)$ стає функціоналом від обох параметрів:

$$\varrho\left(x^N;t\right) = \varrho(\ldots, f_1(x;t), f(a;t), \ldots).$$

У цьому випадку квазірівноважну функцію $\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right)$, що входить у рівняння Ліувіля з джерелом, можна представити як добуток

$$\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right) = \varrho_{\mathrm{q}}^{\mathrm{kin}}\left(x^N;t\right) f(a;t) \Big/ W(a;t)\Big|_{a=\hat{a}},$$

де $\varrho_{\mathrm{q}}^{\mathrm{kin}}\left(x^N;t\right)$ – "кінетична" частина розподілу, $W(a;t)$ – структурна функція гідродинамічних флуктуацій. Цей результат застосовується для отримання узгоджених рівнянь для $f_1(x;t)$ та $f(a;t)$, у які входять ядра переносу $\phi_{\alpha\beta}$ $(\alpha,\beta = \{n, \boldsymbol{J}, \mathcal{E}\})$, що виражаються через кореляційні функції узагальнених потоків I_α, I_β, та потоки в просторі колективних змінних v_α. При цьому засереднення здійснюється з новою квазірівноважною функцією розподілу на відміну від $\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right)$ з мікроскопічним розподілом крупномасштабних колективних змінних:

$$\varrho_{\mathrm{L}}\left(x^N;t\right) = \varrho_{\mathrm{q}}^{\mathrm{kin}}\left(x^N;t\right) \hat{f}(a) \Big/ W(a;t),$$

а узагальнені потоки I_α, I_β визначаються через проекційний оператор Морі $\mathscr{P}(t)$. Отриманий набір рівнянь дає узгоджений опис кінетичних та гідродинамічних прцесів класичних рідин при наявності довгохвильових (гідродинамічних) флуктуацій. Ядра переносу ϕ_{nn} описують дисипацію кінетичних флуктуацій, тоді як ядра $\phi_{n\boldsymbol{J}}$, $\phi_{\boldsymbol{J}n}$, $\phi_{n\mathcal{E}}$ та $\phi_{\mathcal{E}n}$ описують дисипацію кореляцій між кінетичною та гідродинамічною степенями вільності. І, накінець, ядра переносу ϕ_{JJ}, $\phi_{J\mathcal{E}}$, $\phi_{\mathcal{E}J}$, та $\phi_{\mathcal{E}\mathcal{E}}$ відповідають дисипативним процесам, пов'язаним з кореляціями між в'язкими та тепловими гідродинамічними модами. На закінчення розділу проведено обчислення структурної функції $W(a;t)$ та гідродинамічних швидкостей $v_\alpha(a;t)$ методом колективних змінних.

Другий розділ названо "Кінетичне рівняння Енскога-Ландау для систем заряджених твердих сфер". Він присвячений розв'язуванню кінетичного рівняння Енскога-Ландау для однокомпонентної та двокомпонентної систем. Важливою властивістю цього рівняння є те, що його інтеграл зіткнень не володіє розбіжністю на малих відстанях. Рівняння має вид

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}L(1)\right] f_1(x_1;t) = I_{\mathrm{E}}(x_1;t) + I_{\mathrm{MF}}(x_1;t) + I_{\mathrm{L}}(x_1;t),$$

де I_{E}, I_{MF} – відомі вже інтеграли зіткнень ревізованої теорії Енскога RET та кінетичної теорії середнього поля KMFT. Новий доданок I_{L} є інтегралом зіткнень типу Ландау:

$$I_{\mathrm{L}}(x_1;t) = \frac{1}{m^2}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{v}_1}\int \mathrm{d}x_2\; g_2(\boldsymbol{r}^2;t)\left[\frac{\partial \Phi^{\mathrm{l}}(|\boldsymbol{r}_{12}|)}{\partial \boldsymbol{r}_{12}}\right] \times$$

$$\left[\int\limits_{-\infty}^{0} \mathrm{d}t'\; \frac{\partial \Phi^{\mathrm{l}}(|\boldsymbol{r}_{12}+\boldsymbol{g}t'|)}{\partial \boldsymbol{r}_{12}}\right]\left\{\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{v}_1} - \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{v}_2}\right\} f_1(x_1;t) f_1(x_2;t)$$

і як це видно – другого порядку за взаємодією. Для однокомпонентої системи це рівняння розв'язувалось методом граничних умов. За цим методом у праву частину кінетичного рівняння вводиться малий доданок $-\varepsilon\Big(f_1(x_1;t) - f_1^{(0)}(x_1;t)\Big)$, де $\varepsilon \to 0$ після термодинамічної границі, а $f_1^{(0)}(x_1;t)$ – відома одночастинкова функція розподілу, що задовільняє рівняння для параметрів скороченого опису. Тоді якщо шукати розв'язок у вигляді $f_1(x_1;t) = f_1^{(0)}(x_1;t) + \delta f(x_1;t)$, то для поправки у першому наближенні отримується розв'язок

$$\delta f^{(1)}(x_1;t) = -\int\limits_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t'\; \mathrm{e}^{-\varepsilon(t-t')} S(t,t')\left[f_1^{(0)}(x_1;t) \times \right.$$

$$\left\{\left(1 + \frac{2}{5}\pi n \sigma^3 g_2(\sigma|n,\beta)\right)\left[\frac{mc_1^2}{2kT} - \frac{5}{2}\right] \boldsymbol{c}_1 \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_1} \ln T(\boldsymbol{r}_1;t) + \right.$$

$$\left(1+\frac{4}{15}\pi n\sigma^3 g_2\left(\sigma|n,\beta\right)\right)\frac{m}{kT}\left[\boldsymbol{c}_1\boldsymbol{c}_1-\frac{1}{3}c_1^2\overleftrightarrow{I}\right]:\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}_1}\boldsymbol{V}\left(\boldsymbol{r}_1;t\right)\Bigg\}\Bigg]_{t'}.$$

Вклад від близькосяжної взаємодії спостерігається явно, тоді як від далекосяжної він є неявним через оператор $S(t,t')$, що частково може розглядатись як оператор еволюції. Підстановка знайденої нерівноважної функції розподілу в закони збереження для параметрів скороченого опису дозволила записати вирази для тензора в'язких напружень $\overleftrightarrow{P}(\boldsymbol{r}_1;t)$ та вектора теплового потоку $\boldsymbol{q}(\boldsymbol{r}_1;t)$. Вони виражаються, зокрема, через кінетичні ядра законів переносу $M^{\mathrm{k}}(t,t')$ та $L^{\mathrm{k}}(t,t')$, що пов'язані з в'язкими та тепловими дисипативними процесами в системі відповідно. У граничному випадку стаціонарного процесу зі структури $\overleftrightarrow{P}(\boldsymbol{r}_1;t)$ та $\boldsymbol{q}(\boldsymbol{r}_1;t)$ можна було виділити кінетичні коефіцієнти (в'язкість, теплопровідність). Порівняння з результатами попередніх підходів показало, що отримані вирази відрізняються більш повним і послідовним врахуванням далекосяжної взаємодії, однак в рамках використаного наближення записати для них аналітичний вираз не вдалося. На цьому етапі обчислень вже необхідною є конкретизація також і для бінарної квазірівноважної кореляційної функції g_2 в $\boldsymbol{r}$-просторі. Отриманий нормальний розв'язок для розглядуваного рівняння придатний для гідродинамічного опису швидких процесів з врахуванням запізнення в часі.

Далі розглянуто випадок двокомпонентної системи (хоча теорія застосовна і для довільної кількості компонент). Функції розподілу залежатимуть від сортів і кінетичне рівняння відрізнятиметься від записаного вище наявністю сумування по компонентах в інтегралах зіткнень справа. Таке рівняння розв'язувалось методом Чепмена-Енскога, для чого інтеграл зіткнень типу Ландау був перетворений до больцманівськоподібного. Це перетворення полягає у тому, що покладається $g_2(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;t)\to 1$, однак достатньо добре, щоб знайти нормальний розв'язок та коефіцієнти переносу в аналітичному вигляді. Подібно до попереднього пункту, розв'язок рівняння шукався у виді $f_1(x_1^\alpha;t)=f_1^{(0)}(x_1^\alpha;t)\left[1+\varphi(x_1^\alpha;t)\right]$, де $f_1^{(0)}(x_1^\alpha;t)$ – деяка відома функція, що задовільняє локальні закони збереження для гідродинамічних параметрів скороченого опису. Величина $\varphi(x_1^\alpha;t)$ була знайдена як функція поліномів Соніна-Лагера від парціальних мас, густин, локальної температури, а також теплових швидкостей компонент суміші та дифузійних термодинамічних сил (в однокомпонентному випадку такі сили відсутні). І це дозволило отримати аналітичні вирази для всіх кінетичних коефіцієнтів системи. Наприклад, вирази для коефіцієнтів взаємної дифузії $D^{\alpha\beta}$ та об'ємної в'язкості κ мають вигляд:

$$D^{\alpha\beta} = \frac{3\pi}{8n}\sqrt{\frac{\pi kT}{2m^*}}\left(g_2^{\alpha\beta}(\sigma_{\alpha\beta}|n,\beta)^{\alpha\beta}\Omega_{\text{hs}}^{(1,1)} + {}^{\alpha\beta}\Omega_{1}^{(1,1)}\right)^{-1},$$

$$\kappa = \frac{8}{9}\sum_{\alpha,\beta=1}^{M=2}\sigma_{\alpha\beta}^4 g_2^{\alpha\beta}(\sigma_{\alpha\beta}|n,\beta)n_\alpha n_\beta \frac{m^*}{m_\beta}\sqrt{2\pi m^* kT}.$$

Вирази для коефіцієнта термодифузії D_{T}^{α}, зсувної в'язкості η, теплопровідності λ складні, однак для всіх кінетичних коефіцієн-

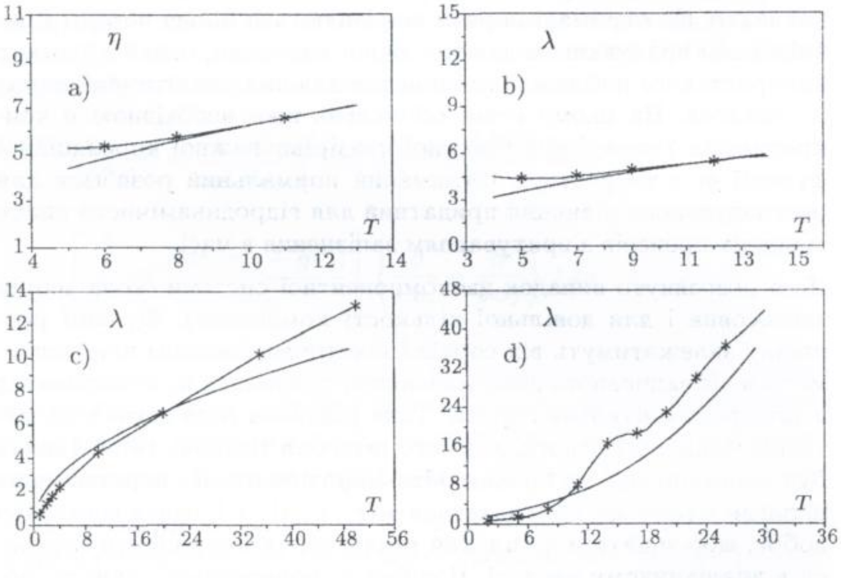

Рисунок 1. Температурні залежності коефіцієнтів переносу однокомпонентної системи: — теоретичні розрахунки, -*- експериментальні дані. a) об'ємна в'язкість нейтрального Ar при $\Delta = 0.1$, η: 10^{-5} [Па·с], T: 10^2 [K]; b) теплопровідність нейтрального Ar при $\Delta = 0.075$, λ: 10^{-2} [Вт/м·K], T: 10^2 [K]; c) теплопровідність нейтрального Ar при $\Delta = 0.0125$, λ: 10^{-2} [Вт/м·K], T: 10^2 [K]; d) теплопровідність однократно іонізованого Ar при $\Delta = 0.0126$, λ: 10^{-1} [Вт/м·K], T: 10^3 [K].

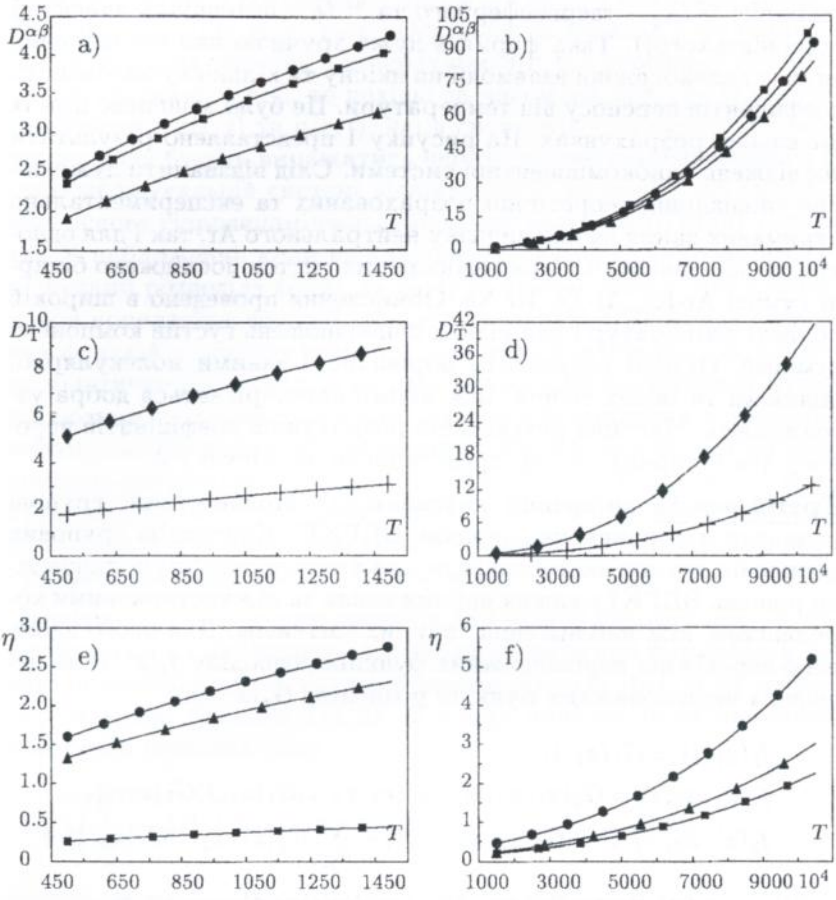

Рисунок 2. Температурні залежності коефіцієнтів переносу бінарних сумішей: a), c), e) – нейтральні системи при $\Delta = 0.1$; b), d), f) – однократно іонізовані гази при $\Delta = 0.0125$, скрізь T: [K]. a), b) – коефіцієнти взаємної дифузії сумішей Ar-Kr (•), Ar-Xe (▪), Kr-Xe (▴), $D^{\alpha\beta}$ a): 10^{-7}, b): 10^{-9} [$\text{м}^2/\text{с}$]. c), d) – коефіцієнти термодифузії суміші Ar-Kr: аргонової Ar (+) та криптонової Kr (♦) компонент, D_{T} c): 10^{-5}, d): 10^{-8} [кг/м·с]. e), f) – коефіцієнти зсувної в'язкості суміші Ar-Kr (•), аргонової Ar (▪) та криптонової Kr (▴) компонент, η e): 10^{-4}, f): 10^{-6} [Па·с].

тів можна виділити явний вклад від близькосяжної та далекосяжної взаємодій (що, фактично, зводиться до двох типів Ω-інтегралів: ${}^{\alpha\beta}\Omega_{\rm hs}$ – твердосферного та ${}^{\alpha\beta}\Omega_{\rm l}$ – потенціалу далекодії (кулонівського)). Така форма є дуже зручною для дослідження впливу далекосяжної взаємодії на якісну та кількісну залежність коефіцієнтів переносу від температури. Це було здійснено при їх чисельних розрахунках. На рисунку 1 представлено результати досліджень однокомпонентної системи. Слід відзначити дуже добре співпадіння теоретично розрахованих та експериментально отриманих даних як для випадку нейтрального Ar, так і для однократно іонізованого. Серед двосортних систем досліджено бінарні суміші Ar-Kr, Ar-Xe, Kr-Xe. Обчислення проведено в широкій області температур і для різних співвідношень густин компонент сумішей. Окремі результати порівняно з даними молекулярної динаміки та інших теорій, між якими спостерігається добра узгодженість. Частина результатів розрахунків коефіцієнтів переносу для бінарних систем представлена на рисунку 2.

Третій розділ дисертації називається "Модифіковані групові розклади для ланцюжка рівнянь ББГКІ". Концепцію групових розкладів зручно застосовувати для аналізу розв'язків ланцюжка рівнянь ББГКІ у вищих наближеннях за міжчастинковими кореляціями, ніж наближення "парних" зіткнень. Для цього здійснено перехід від нерівноважних функцій розподілу $f_s(x^s;t)$ до незвідних нерівноважних функцій розподілу $G_s(x^s;t)$:

$$\begin{aligned}
&f_1(x_1;t) = G_1(x_1;t),\\
&f_2(x_1,x_2;t) = G_2(x_1,x_2;t) + g_2(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;t)G_1(x_1;t)G_1(x_2;t),\\
&f_3(x_1,x_2,x_3;t) = G_3(x_1,x_2,x_3;t) + \sum_P G_2(x_1,x_2;t)G_1(x_3;t) +\\
&\qquad g_3(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3;t)G_1(x_1;t)G_1(x_2;t)G_1(x_3;t), \qquad \text{і т. д.}
\end{aligned}$$

Модифікація запропонованих групових розкладів полягає в тому, що значну частину просторових кореляцій в часі враховують квазірівноважні кореляційні функції $g_s(\boldsymbol{r}^s;t)$. При $g_s(\boldsymbol{r}^s;t) = 1$ для $s = 2,3,\ldots$ ці розрахунки співпадають з запропонованими раніше в роботах Д.М.Зубарєва та М.Ю.Новікова. Оскільки кожна стрічка рівностей вводить рівно одну нову функцію $G_s(x^s;t)$ $s = 1,2,3,\ldots$, то ці рівняння можна розв'язати відносно незвідних функцій розподілу (виразити всі$G_s(x^s;t)$ через $f_s(x^s;t)$). А відтак можна записати ланцюжок рівнянь ББГКІ для незвідних функцій розподілу $G_s(x^s;t)$. Рівняння для $G_1(x_1;t)$ співпадатиме з класично відомим. Характерною особливістю другого рівняння є доданок з похідною за часом від парної квазірівноважної функції розподілу $g_2(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2; t)$. Оскільки ця функція є функціоналом локальних значень температури $\beta(\boldsymbol{r}; t)$ і середньої густини числа частинок $n(\boldsymbol{r}; t)$, то похідні за часом від $g_2(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2; t)$ будуть стосуватись $\beta(\boldsymbol{r}; t)$ та $n(\boldsymbol{r}; t)$, які в свою чергу за умовами самоузгодження будуть виражатись через середнє значення енергії в супроводжувальній системі відліку $\langle \hat{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r}) \rangle^t$ та $\langle \hat{n}(\boldsymbol{r}) \rangle^t$, що складають основу гідродинамічного опису нерівноважного стану системи. У наближенні, коли не враховуються тричастинкові незвідні функції розподілу $G_3(x_1, x_2, x_3; t)$ та тричастинкові квазірівноважні кореляційні функції, ланцюжок рівнянь ББГКІ для незвідних функцій розподілу вдається замкнути й отримати узагальнене кінетичне рівняння для нерівноважної одночастинкової функції розподілу з немарківським інтегралом зіткнення в узагальненому поляризаційному наближенні. Наявність в його інтегралі зіткнень оператора зіткнень Власова $\mathscr{L}(x_1, x_2; t)$ вказує на врахування у ньому колективних ефектів. Для отриманого рівняння було розглянуто конкретні випадки: модель твердих сфер та просторово однорідну кулонівську плазму.

Дослідження кінетичних процесів для моделі твердих сфер в поляризаційному наближенні зручно проводити при формальній заміні потенціальної частини оператора Ліувіля $\mathrm{i}L(1,2)$ на оператор зіткнень Енскога $\hat{T}(1,2)$. В цьому випадку було отримано кінетичне рівняння типу

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}L(1)\right] f_1(x_1; t) = I_{\mathrm{E}}(x_1; t) + I_{R_0}(x_1; t) + I_{R_1}(x_1; t),$$

де $I_{\mathrm{E}}(x_1; t)$ – інтеграл зіткнень ревізованої теорії Енскога RET, $I_{R_0}(x_1; t)$ – інтеграл зіткнень кінетичної теорії середнього поля KMFT (для твердих сфер), $I_{R_1}(x_1; t)$ – узагальнений кільцевий оператор. Отримане рівняння є узагальненням кінетичного рівняння М.М.Боголюбова для системи твердих сфер і співпадає з ним, коли формально квазірівноважну кореляційну функцію $g_2(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2; t)$ твердих сфер покласти рівною одиниці. На основі отриманого рівняння важливо провести дослідження гідродинамічних колективних мод та часових кореляційних функцій. Очевидно, що такі результати можуть виявитися добрими для дуже густих газів, що описуються моделлю твердих сфер.

При дослідженні просторово однорідної кулонівської плазми було отримано узагальнене кінетичне рівняння Боголюбова-Ленарда-Балеску для електронного газу в компенсуючому полі з тензором другого рангу $Q(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2; t)$, який співпадає з отриманим Ленардом при $\Im m\, g_2(\boldsymbol{k}; t) = 1$. У цьому випадку кінетичне рівняння переходить у звичайне рівняння Ленарда-Балеску. Очевидно, нове рівняння претендує на опис густого електронного газу, оскільки як і в узагальненому середньому полі, так і в узагальненому інтегралі зіткнень Боголюбова-Ленарда-Балеску багаточастинкові кореляції враховуються уявною частиною $g_2(\boldsymbol{k}; t)$. Однак проблема розбіжності в інтегралі зіткнень на малих відстанях ($k \to \infty$) залишається нерозв'язаною. Її можна розв'язати в рамках моделі заряджених твердих сфер, об'єднавши результати двох останніх розглянутих випадків.

Основні результати та висновки

1. Отримано ланцюжок рівнянь ББГКІ з модифікованою граничною умовою, що враховує локальні закони збереження гідродинамічних параметрів.

2. Записано кінетичне рівняння ревізованої теорії Енскога RET, що отримується з модифікованого ланцюжка рівнянь ББГКІ у наближенні парних зіткнень без будь-яких феноменологічних припущень.

3. Вперше методом нерівноважного статистичного оператора Д.М.Зубарєва отримано зв'язану систему: кінетичне рівняння для нерівноважної одночастинкової функції розподілу та рівняння типу Фоккера-Планка для нерівноважної функції розподілу гідродинамічних змінних для послідовного опису кінетичних та гідродинамічних флуктуацій в однокомпонентній класичній рідині.

4. Методом граничних умов знайдено нестаціонарний розв'язок та узагальнені коефіцієнти переносу кінетичного рівняння Енскога-Ландау для однокомпонентної системи заряджених твердих сфер. Показано, що у випадку розгляду стаціонарного процесу отримані результати переходять у такі, що розраховуються методом Чепмена-Енскога.

5. Записано кінетичне рівняння Енскога-Ландау для багатокомпонентної системи твердих сфер. Знайдено його нормальний розв'язок методом Чепмена-Енскога для бінарної суміші та отримано аналітичні вирази для всіх коефіцієнтів переносу. Проведено числові розрахунки для Ar та Ar^+ і показано дуже добре співпа-

діння отриманих результатів з експериментальними даними. Серед бінарних сумішей досліджено вплив далекосяжної взаємодії на температурну залежність коефіцієнтів переносу для Ar-Kr, Ar-Xe, Kr-Xe.

6. Запропоновані модифіковані групові розклади для нерівноважних функцій розподілу ланцюжка рівнянь ББГКІ. В узагальненому поляризаційному наближенні отримано кінетичне рівняння для моделі твердих сфер (наближення кільцевого оператора). У цьому ж наближенні виведено узагальнене кінетичне рівняння Боголюбова-Ленарда-Балеску для густого електронного газу. У ньому багаточастинкові кореляції враховуються уявною частиною Фур'є-образу парної квазірівноважної функції розподілу.

Результати дисертації опубліковані в таких роботах:

[1] Morozov V.G., Kobryn A.E., Tokarchuk M.V. Modified kinetic theory with consideration for slow hydrodynamical processes. // Cond. Matt. Phys., 1994, No 4, p. 117-127.

[2] Kobryn A.E., Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. Nonstationary solution to the Enskog-Landau kinetic equation using boundary conditions method. // Cond. Matt. Phys., 1996, No 8, p. 75-98.

[3] Kobryn A.E., Morozov V.G., Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. Enskog-Landau kinetic equation. Calculation of the transport coefficients for charged hard spheres. // Physica A, 1996, vol. 230, No 1&2, p. 189-201.

[4] Kobryn A.E., Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. Normal solution to the Enskog-Landau kinetic equation using boundary conditions method. // Phys. Lett. A, 1996, vol. 223, No 1&2, p. 37-44.

[5] Токарчук М.В., Омелян І.П., Кобрин О.Є. Кінетичне рівняння Енскога-Ландау. Обчислення коефіцієнтів переносу для моделі заряджених твердих сфер. / Препринт АН України, ІФКС-92-22У, 36 с.

[6] Кобрин О.Є., Омелян І.П., Токарчук М.В. Кінетичне рівняння Енскога-Ландау для двокомпонентної густої плазми. Розв'язок, коефіцієнти переносу. / Препринт АН України, ІФКС-94-19У, 40 с.

[7] Кобрин О.Є., Токарчук М.В. Нормальний розв'язок кінетичного рівняння Енскога-Ландау методом граничних умов. / Препринт НАН України, ICMP-96-01U, 31 с.

[8] Морозов В.Г., Токарчук М.В., Ідзик І.М., Кобрин О.Є. Модифікована кінетична теорія з врахуванням повільних гідродинамічних процесів. / Препринт НАН України, ICMP-96-15U, 20 с.

[9] Кобрин О.Є., Омелян І.П., Токарчук М.В. Нормальний розв'язок кінетичного рівняння Енскога-Ландау для двосортної системи заряджених твердих сфер методом Чепмена-Енскога. Чисельний розрахунок коефіцієнтів переносу для сумішей Ar-Kr, Ar-Xe, Kr-Xe. / Препринт НАН України, ICMP-96-21U, 53 с.

[10] Токарчук М.В., Омелян І.П., Кобрин О.Є. До теорії кінетичних рівнянь систем взаємодіючих частинок в методі нерівноважного статистичного оператора Д.М.Зубарєва. / Препринт НАН України, ICMP-96-23U, 45 с.

[11] Tokarchuk M.V., Omelyan I.P., Kobryn A.E. Enskog-Landau kinetic equation. Calculation of the transpoprt coefficients for charged hard spheres. In: Abstracts and contributed papers of International Conference "Condensed Matter: Science & Industry", Lviv, 1993, p. 250.

[12] Kobryn A.E., Omelyan I.P. Enskog-Landau kinetic equation for two-component dense plasma. The solution, transport coefficients. In: Abstracts and contributed papers of International Conference "Physics in Ukraine", Kiev, 1994, p. 135-138.

[13] Kobryn A.E., Tokarchuk M.V. The normal solution and transport laws for Enskog-Landau kinetic equation using boundary conditions method. In: Proceedings and contributed papers of International Conference devoted to 150 anniversary of I.Puluj, Lviv, 1995, p. 77-78.

[14] Kobryn A.E., Tokarchuk M.V. The solution to Enskog-Landau kinetic equation using boundary conditions method. In: Abstracts of Invited and Contributed Papers of 23-rd EPS Conference on CFPP, Kiev, June 24-28. Kiev, 1996, p. 403.

[15] Kobryn A.E., Tokarchuk M.V. The solution to Enskog-Landau kinetic equation using boundary conditions method. In: Contributed Papers of 23-rd EPS Conference on CFPP, part III. Kiev, June 24-28. Europhysics Conference Abstracts, vol. 20C, part III. 1996, p. 1281-1284.

Kobryn A.E. On the theory of kinetic equations for systems of interacting particles by means of nonequilibrium statistical operator method

Thesis on search of the scientific degree of candidate of physical and mathematical sciences, speciality 01.04.02 – theoretical physics. Institute for Condensed Matter Physics of the Ukrainian National Academy of Sciences, Lviv, 1996.

The 15 scientific papers, which present the results of theoretical study of nonequilibrium processes in moderately dense systems (such as gases, liquids, plasmas), are being defended. Kinetic equations with consistent description of kinetics and hydrodynamics have been suggested in dependency on considering systems. Namely, with allowance for nonlinear hydrodynamic fluctuations in simple liquids, for systems of charged hard shperes with allowance for hydrodynamic description of fast processes, in polarization approximation for hard core gas and dense electron gas. Normal stationary and nonstationary solutions, transport coefficients have been calculated for systems of charged hard spheres. The influence of long-range interaction on temperature dependency of transport behaviours of such systems has been investigated for various temperatures at different densities.

Кобрин А.Е. К теории кинетических уравнений систем взаимодействующих частиц в методе неравновесного статистического оператора

Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика. Институт физики конденсированных систем Национальной академии наук Украины, Львов, 1996.

Защищается 15 научных работ, которые содержат результаты теоретического исследования неравновесных свойств в умеренно плотных системах (таких как газы, жидкости, плазма). В зависимости от рассматриваемых систем предложены кинетические уравнения, которые описывают кинетические и гидродинамические процессы согласованно. Вчастности, с учётом нелинейных гидродинамических флуктуаций, для систем заряженых твердых шаров при гидродинамическом описании быстрых процессов, в поляризационном приближении для газа из твердых шаров и плотного электронного газа. Для систем заряженых твёрдых шаров найдены нормальное стационарное и нестационарное решения, коэффициенты переноса. Для них изучено влияние потенциала дальнодействия на температурную зависимость транспортных свойств в обширной области температур для различных плотностей.

__Ключові слова:__ *кінетичні рівняння, функції розподілу, закони збереження, ядра переносу, коефіцієнти переносу.*

43936

Ав 36.535

Підписано до друку 25.12.96., Формат 60х84/16.
Друк офсетний Ум. друк. арк. 1,0. Тираж 100. Зам. 5032.
Друк ПТУ №58. 290008, Львів, вул. Ів. Федорова, 9.