Національна академія наук України

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP–02–08U

О.Ф.Бацевич,* І.М.Мриглод, Ю.К.Рудавський,* М.В.Токарчук

ДИНАМІЧНА ПОВЕДІНКА БІНАРНОЇ СУМІШІ З НЕКОНСЕРВАТИВНИМИ ДИНАМІЧНИМИ ЗМІННИМИ

*Національний університет "Львівська політехніка", 79013, Львів, вул. С.Бандери 12

ЛЬВІВ

УДК: 548:537.611.44, 536.75
PACS: 75.50.M

Динамічна поведінка бінарної суміші з неконсервативними динамічними змінними

О.Ф.Бацевич, І.М.Мриглод, Ю.К.Рудавський, М.В.Токарчук

Анотація. Лінеаризовані рівняння гідродинаміки, як відомо, добре описують рідини та їх суміші в гідродинамічній області (малі k та ω). В даній роботі ставиться питання про поведінку двокомпонентної суміші рідин при виході з гідродинамічного режиму, коли до набору динамічних змінних включені неконсервативні параметри системи, тобто змінні, які не є густинами величин, що зберігаються. Зокрема, до базисного набору змінних включені парціальні густини енергій обох систем. Показано, що в даному випадку існує дві теплові моди, одна з яких гідродинамічна і відповідає за термодифузійні процеси в системі, а інша – кінетична і описує процеси вирівнювання температур обох підсистем. В гідродинамічній границі вклад другої з мод є незначним і тому ним можна знехтувати.

Dynamical behaviour of the binary mixture with non-conservative dynamical variables

O.F.Batsevych, I.M.Mryglod, Yu.K.Rudavskii, M.V.Tokarchuk

Abstract. It is well-known that in the hydrodynamic region (small k and ω) liquids and liquid mixtures are well described by the linearized hydrodynamic equations. This paper is aimed on the problem of behaviour of the binary liquid mixture which leaves hydrodynamic region, when non-conserved parameters, are included to the basic set of dynamic variables of the system. Namely, the basic set of variables which includes densities of partial energies of both subsystems is being investigated. It is shown that there exist two heat modes, one of which is hydrodynamic one and describes thermal diffusion in the system, and the second mode is kinetic one and describes the process of temperature equilibration between subsystems. In the hydrodynamic limit the contribution of the second mode is negligible.

Подається в Журнал фізичних досліджень
Submitted to Журнал фізичних досліджень

1. Вступ

Метод нерівноважного статистичного оператора Зубарєва [1,2] розглядається сьогодні як один із найбільш ефективних при теоретичному описі нерівноважних властивостей багаточастинкових систем. У попередніх наших роботах [3,4] метод нерівноважного статоператора був використаний для отримання рівнянь узагальненої гідродинаміки суміші магнітних та немагнітних частинок. Отримані у статті [3] узагальнені рівняння переносу можуть бути використані для опису як сильно- так і слабо-нерівноважних динамічних процесів. У роботі [4] дані рівняння, що є сильно нелінійними, були проаналізовані у випадку малих відхилень від рівноваги в границі великих просторових та часових масштабів (малі k та ω). Слід відмітити, що при отриманні рівнянь переносу для двокомпонентної суміші магнітних та немагнітних частинок, ми виходили із розгляду двох граничних умов, що відповідають різним фізичним уявленням про систему. У першому випадку вважалося, що визначальною є парціальна динаміка підсистеми. Така ситуація часто зустрічається, коли мова йде про опис підсистем, характерні часи яких сильно відрізняються. Зокрема, прикладом може служити суміш з великою різницею мас чи розмірів частинок різних сортів. У цьому випадку до набору динамічних змінних зручно включити парціальні густини імпульсу $\hat{\boldsymbol{p}}_1(k)$, $\hat{\boldsymbol{p}}_2(k)$ та енергії $\hat{\varepsilon}_1(k)$, $\hat{\varepsilon}_2(k)$ окремих підсистем. В іншому випадку, коли домінують колективні процеси і особливості парціальної динаміки нас не цікавлять, зручно виходити із густин повного імпульсу $\hat{\boldsymbol{p}}(k)$ та повної енергії $\hat{\varepsilon}(k)$ – величин, для яких виконуються локальні закони збереження. Тому цікавим і правомірним є питання про різницю між цими двома підходами до опису динаміки бінарної суміші, зокрема при виході з гідродинамічного режиму. Дослідженню саме цього питання присвячена дана стаття.

Структура роботи є наступною. У другому розділі приведені лінійні рівняння гідродинаміки, на основі яких буде проводитись подальший розгляд. У третьому розділі сформульовано основні ідеї дослідження та записано вихідні вирази для спрощеної задачі динаміки, в якій приймаються до розгляду лише флюктуації температури. У четвертому та п'ятому розділах знайдено розв'язки відповідних рівнянь переносу та проаналізовано отримані результати.

2. Рівняння узагальненої гідродинаміки

Розглянемо двокомпонентну рідку суміш, мікроскопічна динаміка якої описується оператором Ліувілля

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hat{L}_H = {} & \sum_{i}^{N_1} \frac{\mathbf{p}_i^{(1)}}{m_1}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} - \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N_1,N_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} V^{(11)}(r_{ij}) \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i^{(1)}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j^{(1)}}\right) \\ & + \sum_{i}^{N_2} \frac{\mathbf{p}_i^{(2)}}{m_2}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} - \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N_2,N_2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} V^{(22)}(r_{ij}) \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i^{(2)}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j^{(2)}}\right) \\ & - \sum_{i,j}^{N_1,N_2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} V^{(12)}(r_{ij}) \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i^{(1)}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j^{(2)}}\right), \end{aligned} \tag{2.1}$$

де N_1, N_2 – число частинок першого та другого сортів, $V^{(\alpha\beta)}(r_{ij})$ – потенціал взаємодії i-ї частинки сорту α та j-ї частинки сорту β, де $\alpha,\beta = \{1,2\}$.

Гідродинамічний підхід передбачає вибір в якості параметрів скороченого опису набору густин динамічних змінних, що зберігаються. Для даної системи такими змінними є Фур'є компоненти парціальних густин числа частинок (сортів 1 та 2), повного імпульсу та повної енергії, що залежать від хвильового вектора $\mathbf{k}$:

$$\hat{Y}(\mathbf{k}) = \{\hat{n}_1(\mathbf{k}), \hat{n}_2(\mathbf{k}), \hat{\boldsymbol{p}}(\mathbf{k}), \hat{\varepsilon}(\mathbf{k})\}, \tag{2.2}$$

відповідно. Локальні закони збереження для цих змінних у k-просторі мають наступний вигляд:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{Y}_i(\mathbf{k}) \equiv \mathrm{i}\hat{L}\cdot\hat{Y}(\mathbf{k}) = \mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{J}_i(\mathbf{k}), \tag{2.3}$$

де $\boldsymbol{J}_i$ – мікроскопічні потоки відповідних величин. Зокрема, для густини енергії маємо, що

$$\dot{\hat{\varepsilon}}(\mathbf{k}) = \mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}_\varepsilon(\mathbf{k}). \tag{2.4}$$

Можна показати, що для малих відхилень системи від рівноваги, лінійні рівняння узагальненої гідродинаміки для випадку поздовжніх флюктуацій матимуть вигляд [3,4]:

$$\left\{\mathrm{i}\omega\cdot\tilde{\mathrm{I}} - \mathrm{i}\tilde{\Omega}(k) + \tilde{\phi}(k,\omega)\right\}\langle\Delta\hat{Y}_i(k)\rangle^\omega = 0. \tag{2.5}$$

де $\langle\Delta\hat{Y}_i(k)\rangle^\omega$ – Фур'є-компоненти залежних від часу усередненихвідхилень динамічних змінних від рівноважних значень, а k – модуль хвильового вектора $\mathbf{k}$.

Ввівши означення кореляційної функції

$$(\hat{A},\hat{B}) = \int_0^1 \langle \hat{A}\rho_0^{\tau}\hat{B}\rho_0^{-\tau}\rangle\, d\tau, \qquad (2.6)$$

де $\langle\ldots\rangle$ позначає усереднення за рівноважним розподілом Ґібса, вирази для частотної матриці $\mathrm{i}\tilde{\Omega}(k)$ та матриці функцій пам'яті $\tilde{\phi}(k,z)$ у рівнянні (2.5) можна записати наступним чином [3,4]:

$$\mathrm{i}\tilde{\Omega}(k) = (\mathrm{i}\hat{L}\cdot\hat{Y}(k),\hat{Y}(-k))\ \left(\hat{Y}(k),\hat{Y}(-k)\right)^{-1}, \qquad (2.7)$$

$$\tilde{\phi}(k,\omega) = \left((1-\mathcal{P})\,\mathrm{i}\hat{L}\cdot\hat{Y}, \frac{1}{\mathrm{i}\omega + (1-\mathcal{P})\,\mathrm{i}\hat{L}}\,(1-\mathcal{P})\,\mathrm{i}\hat{L}\cdot\hat{Y}^{+}\right) \times \left(\hat{Y}(k),\hat{Y}(-k)\right)^{-1}, \qquad (2.8)$$

де $\left(\hat{Y}(k),\hat{Y}^{+}(-k)\right)$ – матриця статичних кореляційних функцій, β – обернена температура, V – об'єм системи, а $\mathcal{P}$ – проекційний оператор Морі [1,2].

3. Формулювання спрощеної задачі

Аналіз гідродинамічної поведінки систем із консервативними динамічними змінними на основі рівнянь (2.5) дає добре відомі результати [5]. Зокрема, для бінарної суміші з набором змінних (2.2) для спектру колективних збуджень отримаємо наступні розв'язки: дві комплексно-спряжені звукові моди, а також два збудження релаксаційного типу – дифузійна та термодифузійна (теплова) гідродинамічні моди.

Проте цікавим залишається питання про більш детальний опис системи на базисі змінних, що містять парціальні характеристики. Для прикладу в роботах [3,4] в якості таких змінних вибирався набір

$$\{\hat{n}_1(k),\hat{n}_2(k),\hat{\boldsymbol{p}}_1(k),\hat{\boldsymbol{p}}_2(k),\hat{\varepsilon}_1(k),\hat{\varepsilon}_2(k)\}$$

де $\hat{\boldsymbol{p}}_1(k)$, $\hat{\boldsymbol{p}}_2(k)$, $\hat{\varepsilon}_1(k)$, $\hat{\varepsilon}_2(k)$ – парціальні імпульси та енергії кожної з підсистем. Розширені набори змінних дають змогу враховувати більш тонкі процеси кінетичної природи, що стають важливими при виході з гідродинамічного режиму. Зокрема, розглядаючи базис

$$\{\hat{n}_1(k),\hat{n}_2(k),\hat{\boldsymbol{p}}(k),\hat{\varepsilon}_1(k),\hat{\varepsilon}_2(k)\}, \qquad (3.1)$$

де парціальні енергії для системи, що вивчається, мають вигляд

$$\hat{\varepsilon}_1(k) = \sum_i^{N_1} e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{r}_i}\left\{\frac{{\boldsymbol{p}_i^{(1)}}^2}{2m_1} + \frac{1}{2}\sum_{j(\neq i)}^{N_1} V^{(11)}(\mathbf{r}_{ij}) + \frac{1}{2}\sum_j^{N_2} V^{(12)}(\mathbf{r}_{ij})\right\}, \qquad (3.2)$$

$$\hat{\varepsilon}_2(k) = \sum_i^{N_2} e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{r}_i}\left\{\frac{{\boldsymbol{p}_i^{(2)}}^2}{2m_1} + \frac{1}{2}\sum_{j(\neq i)}^{N_2} V^{(22)}(\mathbf{r}_{ij}) + \frac{1}{2}\sum_j^{N_1} V^{(12)}(\mathbf{r}_{ij})\right\}, \qquad (3.3)$$

маємо можливість вивчати особливості процесів релаксації, що обумовлені різницею парціальних температур у підсистемах. Такі деталі неможливо досліджувати при використанні однієї динамічної змінної

$$\hat{\varepsilon}(k) = \hat{\varepsilon}_1(k) + \hat{\varepsilon}_2(k). \qquad (3.4)$$

З іншого боку, змінні (3.2), (3.3) не є консервативними, тобто для них закони збереження типу (2.3), (2.4) не виконуються, і маємо

$$\begin{aligned}\dot{\hat{\varepsilon}}_1(k) &= \hat{J}_0 + \mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}_{\varepsilon_1}(k),\\ \dot{\hat{\varepsilon}}_2(k) &= -\hat{J}_0 + \mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}_{\varepsilon_2}(k),\end{aligned} \qquad (3.5)$$

де $\hat{J}_0$ – деякий мікроскопічний потік, що описує процес вирівнювання температур і є відмінним від нуля в гідродинамічній границі:

$$\hat{J}_0 = -\frac{1}{2}\sum_{i,j}^{N_1,N_2}\frac{\partial V^{(1,2)}(r_{ij})}{\partial \mathbf{r}_i}\left(\frac{\mathbf{p}_i^{(1)}}{m_1} + \frac{\mathbf{p}_j^{(2)}}{m_2}\right). \qquad (3.6)$$

Мікроскопічні вирази для потоків $\hat{\boldsymbol{J}}_{\varepsilon_1}(k)$ та $\hat{\boldsymbol{J}}_{\varepsilon_2}(k)$ легко отримати, проте для подальшого розгляду їх структура не є суттєвою. Зауважимо лише, що для потоку повної енергії, очевидно, виконується рівність:

$$\hat{\boldsymbol{J}}_{\varepsilon}(k) = \hat{\boldsymbol{J}}_{\varepsilon_1}(k) + \hat{\boldsymbol{J}}_{\varepsilon_2}(k), \qquad (3.7)$$

Надалі, нехтуючи для простоти усіма іншими змінними, окрім ε_1 та $\hat{\varepsilon}_2$, розглянемо спрощену задачу про динаміку середніх значень лише парціальних енергій, яка, однак, дозволить з'ясувати особливості прояву кінетичних процесів при виході із області гідродинамічного режиму. В такому випадку система (2.5) редукується до двох рівнянь:

$$\mathrm{i}\omega\langle\Delta\varepsilon_i(k)\rangle^{\omega} = \{\mathrm{i}\Omega_{ij}(k) - \phi_{ij}(k,\omega)\}\,\langle\Delta\varepsilon_i(k)\rangle^{\omega}, \qquad (3.8)$$

які описують флюктуації середніх значень локальних парціальних енергій і дозволяють проаналізувати отримані результати в порівнянні із випадком динаміки для змінної $\hat{\varepsilon}(k) = \hat{\varepsilon}_1(k) + \hat{\varepsilon}_2(k)$.

4. Розв'язок рівнянь переносу

Коли використати марківське наближення для функцій пам'яті, рівняння (3.8) в часовому представленні матиме вигляд:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Delta\varepsilon_i(k)\rangle^t = \{\mathrm{i}\Omega_{ij}(k) - \phi_{ij}(k)\}\,\langle\Delta\varepsilon_i(k)\rangle^t, \tag{4.1}$$

де $\mathrm{i}\Omega_{ij} = (\dot{\varepsilon}_i(k),\varepsilon_l(-k))\cdot(\hat{\varepsilon}(k),\hat{\varepsilon}(-k))^{-1}_{lj}$, а $\phi_{ij}(k) = \phi_{ij}(k,0)$. Легко переконатись, що $\left(\dot{\hat{\varepsilon}}_i(k),\hat{\varepsilon}_j(k)\right) = 0$, і тому отримуємо $\mathrm{i}\Omega(k)\equiv 0$.

Для елементів матриці функцій пам'яті $\phi_{ij}(k)$ маємо

$$\tilde{\phi}(k,\omega=0) = \tilde{L}(k)\cdot(\hat{\varepsilon}(k),\hat{\varepsilon}(-k))^{-1}, \tag{4.2}$$

де функції $L_{ij}(k)$ задаються виразами типу Кубо

$$L_{ij}(k) = \int\limits_0^\infty \mathrm{d}t\left(\mathrm{i}\hat{L}\,\hat{\varepsilon}_i(k)\,,\ e^{-\mathrm{i}\hat{L}t}\,\mathrm{i}\hat{L}\,\hat{\varepsilon}_j(-k)\right), \tag{4.3}$$

і описують відповідні процеси переносу. У виразі (4.3) враховано, що $(1-\mathcal{P})\dot{\hat{\varepsilon}}_i(k) = \dot{\hat{\varepsilon}}_i(k) - \mathrm{i}\Omega_{ij}\hat{\varepsilon}_j(k) = \dot{\hat{\varepsilon}}_i(k)$.

Враховуючи, що потоки (3.5) можна записати у вигляді

$$\dot{\hat{\varepsilon}}_i(k) = (-1)^{i+1}\hat{J}_0 + \mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}_i(k),$$

і використовуючи загальні властивості кореляційних функцій, після певних спрощень отримуємо:

$$\begin{aligned}L_{ij}(k) = (-1)^{i+j}\bar{L}_0 + \mathrm{i}k\left[(-1)^{i+1}\bar{L}_{0j} + (-1)^{j+1}\bar{L}_{0i}\right]\\ + +k^2\bar{L}_{ij}, \qquad i,j=\{1,2\},\end{aligned} \tag{4.4}$$

де

$$\bar{L}_0 = \int\limits_0^\infty \mathrm{d}t\,(J_0(t),J_0(0))\,, \quad \bar{L}_{0i} = \int\limits_0^\infty \mathrm{d}t\,(J_0(t),J_i(0))\,,$$

$$\bar{L}_{ij} = \int\limits_0^\infty \mathrm{d}t\,(J_i(t),J_j(0))\,,$$

Матриця кінетичних коефіцієнтів $\tilde{L} = ||L_{ij}(k)||$ є ермітовою і має дійсні власні значення, тобто, для неї має виконуватись рівність

$L_{ij} = L^*_{ji}$. Ця умова вимагає антисиметричності другого доданка в правій частині формули (4.4). Тому враховуючи, що функції $\bar{L}_0$ є дійсними, бачимо, що другий доданок у правій частині формули (4.4) повинен занулятись. Це можна також довести, виходячи із властивостей самих мікроскопічних потоків J_0 та J_i. Тому можемо переписати рівняння (4.4) в наступному вигляді:

$$L_{ij}(k) = (-1)^{i+j}\bar{L}_0 + k^2\bar{L}_{ij}, \quad i,j=\{1,2\}. \tag{4.5}$$

Оскільки ми цікавимося динамікою змінних $\hat{\varepsilon}_1(k)$, $\hat{\varepsilon}_2(k)$ у контексті її порівняння із динамікою єдиної змінної $\hat{\varepsilon}(k) = \hat{\varepsilon}_1(k) + \hat{\varepsilon}_2(k)$, то перейдемо до нових змінних

$$\hat{E}_1(k) = \hat{\varepsilon}_1(k) + \hat{\varepsilon}_2(k), \quad \hat{E}_2(k) = \hat{\varepsilon}_1(k) - \hat{\varepsilon}_2(k).$$

Це перетворення можна записати у вигляді $\hat{E}_i(k) = A_{ij}\hat{\varepsilon}_j(k)$, де матриця $\tilde{A}$ та обернена до неї мають наступний вигляд:

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}, \quad \tilde{A}^{-1} = \frac{1}{2}\tilde{A} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}.$$

У зв'язку з тим, що частотна матриця для нашого випадку тотожно рівна нулю, рівняння переносу (4.1) для малих відхилень $\Delta_i \equiv \langle\Delta\hat{E}_i(k)\rangle^t$ нових змінних від положення рівноваги набуде вигляду:

$$\dot{\Delta}_i = -\phi'_{ij}\Delta_j, \tag{4.6}$$

де $\phi'_{ij}(k) = L'_{il}(k)\cdot(\hat{\varepsilon}',\hat{\varepsilon}')^{-1}_{lj}$. Нова матриця кінетичних коефіцієнтів $L'_{il}(k)$ та нова матриця статичних кореляційних функцій, яку ми символічно позначили як $(\hat{\varepsilon}',\hat{\varepsilon}')$ (залежність від k для простоти запису опускаємо), задаються наступними виразами

$$\tilde{L}'(k) = \tilde{A}\cdot\tilde{L}(k)\cdot\tilde{A}, \quad (\hat{\varepsilon}',\hat{\varepsilon}') = \tilde{A}\cdot(\hat{\varepsilon},\hat{\varepsilon})\cdot\tilde{A}.$$

Порахувавши дію матричних обкладок з матрицею $\tilde{A}$, для $\tilde{L}'(k)$ отримаємо:

$$\tilde{L}'(k) = \begin{pmatrix}\sum\limits_{ij} L_{ij} & \sum\limits_{ij}(-)^{j+1}L_{ij}\\ \sum\limits_{ij}(-)^{i+1}L_{ij} & \sum\limits_{ij}(-)^{i+j}L_{ij}\end{pmatrix}. \tag{4.7}$$

Аналогічне співвідношення справджується для матриці $(\hat{\varepsilon}',\hat{\varepsilon}')$. За допомогою формули (4.7) легко переконатись, що величини $(\hat{\varepsilon}',\hat{\varepsilon}')$ є, насправді, статичними кореляційними функціями, побудованими на нових змінних $\hat{E}_1(k)$ та $\hat{E}_2(k)$, тобто

$$(\hat{\varepsilon}',\hat{\varepsilon}')_{ij} = (\hat{E}_i(k),\hat{E}_j(-k)),$$

тому, наприклад, величина $(\hat\varepsilon',\hat\varepsilon')_{11}=(\hat E_1,\hat E_1)$ визначає узагальнену теплоємність системи [5].

Виражаючи нові коефіцієнти переносу через старі за формулою (4.7), отримаємо:

$$\begin{aligned} L'_{11} &= k^2\bar L_{\varepsilon\varepsilon},\\ L'_{12} &= L'_{21}=k^2\cdot\bar L_{\varepsilon\Delta},\\ L'_{22} &= \bar L_0+k^2\cdot\bar L_{\Delta\Delta}, \end{aligned}\tag{4.8}$$

де використано наступні позначення для коефіцієнтів переносу

$$\bar L_{\Delta\Delta}=\int_0^\infty \mathrm{d}t\,(J_\Delta(t),J_\Delta(0))\,,$$

$$\bar L_{\varepsilon\varepsilon}=\int_0^\infty \mathrm{d}t\,(J_\varepsilon(t),J_\varepsilon(0))\,,\quad \bar L_{\varepsilon\Delta}=\int_0^\infty \mathrm{d}t\,(J_\varepsilon(t),J_\Delta(0))\,,$$

а для мікроскопічного потоку $J_\Delta(k)$ маємо: $J_\Delta(k)=J_1(k)-J_2(k)$.

На основі формул (4.8) можемо тепер записати елементи нової частотної матриці ϕ'_{ij} у формі:

$$\phi'_{1i}=k^2\cdot\varphi'_{1i},\quad \phi'_{2i}=\varphi_{2i}+k^2\cdot\varphi'_{2i},\tag{4.9}$$

де

$$\begin{aligned} \varphi'_{1i}&=\bar L_{\varepsilon\varepsilon}(\hat\varepsilon,\hat\varepsilon)^{-1}_{1i}+\bar L_{\varepsilon\Delta}(\hat\varepsilon,\hat\varepsilon)^{-1}_{2i},\quad \varphi_{2i}=\bar L_0(\hat\varepsilon,\hat\varepsilon)^{-1}_{2i},\\ \varphi'_{2i}&=\bar L_{\varepsilon\Delta}(\hat\varepsilon,\hat\varepsilon)^{-1}_{1i}+\bar L_{\Delta\Delta}(\hat\varepsilon,\hat\varepsilon)^{-1}_{2i}. \end{aligned}\tag{4.10}$$

Таким чином, система рівнянь (4.6) набуває вигляду

$$\begin{aligned} \dot\Delta_1&=-k^2(\varphi'_{11}\Delta_1+\varphi'_{12}\Delta_2),\\ \dot\Delta_2&=-(\varphi_{21}\Delta_1+\varphi_{22}\Delta_2)-k^2(\varphi'_{21}\Delta_1+\varphi'_{22}\Delta_2) \end{aligned}\tag{4.11}$$

і її розв'язки характеризуються наступними власними значеннями:

$$\lambda_1=-k^2\gamma_1,\quad \lambda_2=-\Gamma-k^2\gamma_2,\tag{4.12}$$

де $\Gamma=\varphi_{22}$, $\gamma_1=\varphi'_{11}-\varphi'_{12}\varphi_{21}/\varphi_{22}$ та $\gamma_2=\varphi'_{22}+\varphi'_{12}\varphi_{21}/\varphi_{22}$. Вираз для γ_1 можна спростити, використовуючи (4.10) і враховуючи, що доданок із $\bar L_{\varepsilon\Delta}$ скорочується. Отримаємо:

$$\gamma_1=\bar L_{\varepsilon\varepsilon}\left[(\hat\varepsilon,\hat\varepsilon)^{-1}_{11}-(\hat\varepsilon,\hat\varepsilon)^{-1}_{12}(\hat\varepsilon,\hat\varepsilon)^{-1}_{21}/(\hat\varepsilon,\hat\varepsilon)^{-1}_{22}\right].$$

Легко бачити, що вираз у квадратних дужках являє собою величину $\det||(\hat\varepsilon,\hat\varepsilon)^{-1}||/(\hat\varepsilon,\hat\varepsilon)^{-1}_{22}=1/(\hat\varepsilon',\hat\varepsilon')_{11}$. Враховуючи, що $(\hat\varepsilon',\hat\varepsilon')_{11}=(\hat E_1,\hat E_1)=(\hat\varepsilon(k),\hat\varepsilon(-k))$, остаточно отримуємо:

$$\gamma_1=\bar L_{\varepsilon\varepsilon}\cdot(\hat\varepsilon,\hat\varepsilon)^{-1}\tag{4.13}$$

Власним значенням (4.12) відповідають два власні вектори, які в нульовому наближенні по k мають наступний вигляд:

$$\tilde G_1=\begin{pmatrix}\varphi_{22}\\-\varphi_{21}\end{pmatrix},\quad \tilde G_2=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

Таким чином, вважаючи, що у початковий момент часу мало місце збурення динамічних змінних Δ_1^0 та Δ_2^0, їх еволюція в наступні моменти часу буде відбуватись за законом:

$$\begin{aligned} \Delta_1(t)&=e^{-k^2\gamma_1t}\cdot\Delta_1^0,\\ \Delta_2(t)&=e^{-k^2\gamma_1t}\cdot\frac{(\hat\varepsilon',\hat\varepsilon')_{12}}{(\hat\varepsilon',\hat\varepsilon')_{11}}\cdot\Delta_1^0+e^{-(\Gamma+k^2\gamma_2)t}\cdot\left(\Delta_2^0-\frac{(\hat\varepsilon',\hat\varepsilon')_{12}}{(\hat\varepsilon',\hat\varepsilon')_{11}}\cdot\Delta_1^0\right). \end{aligned}\tag{4.14}$$

Видно, що власне значення $\lambda_1=-k^2\gamma_1$ описує дифузійну гідродинамічну моду, тоді як власне значення $\lambda_2=-\Gamma-k^2\gamma_2$ описує певний кінетичний процес. Відповідна мода в гідродинамічній границі (див другий доданок в (4.14)) може бути знехтувана завдяки швидкому загасанню. Кінетичній моді відповідає початкове збурення параметрів $\langle\Delta\varepsilon_1(k)\rangle^0=-\langle\Delta\varepsilon_2(k)\rangle^0$. Дійсно, в цьому випадку $\Delta_1^0=\langle\Delta\varepsilon_1(k)\rangle^0+\langle\Delta\varepsilon_2(k)\rangle^0=0$ і тоді, згідно з формулами (4.14) отримаємо:

$$\Delta_1(t)=0,\quad \Delta_2(t)=e^{-(\Gamma+k^2\gamma_2)t}\cdot\Delta_2^0,$$

тобто, поведінка $\Delta_2(t)=\langle\Delta\varepsilon_1(k)\rangle^t-\langle\Delta\varepsilon_2(k)\rangle^t$ є чисто кінетичною.

Гідродинамічній моді відповідає вибір початкових збурень у вигляді

$$\langle\Delta\varepsilon_2(k)\rangle^0=\langle\Delta\varepsilon_1(k)\rangle^0\cdot\frac{(\hat\varepsilon_1,\hat\varepsilon_2)+(\hat\varepsilon_2,\hat\varepsilon_2)}{(\hat\varepsilon_1,\hat\varepsilon_1)+(\hat\varepsilon_1,\hat\varepsilon_2)}.$$

У цьому випадку вклад від кінетичної частини у другому рівнянні (4.14) зануляється, і ми отримуємо чисто гідродинамічну поведінку відповідних змінних:

$$\Delta_1(t)=e^{-k^2\gamma_1t}\cdot\Delta_1^0,\quad \Delta_2(t)=e^{-k^2\gamma_1t}\cdot\frac{\Delta_1^0\cdot(\hat\varepsilon',\hat\varepsilon')_{12}}{(\hat\varepsilon',\hat\varepsilon')_{11}},$$

де $\Delta_1^0=\langle\Delta\varepsilon_1(k)\rangle^0\cdot[(\hat\varepsilon_1,\hat\varepsilon_1)+2(\hat\varepsilon_1,\hat\varepsilon_2)+(\hat\varepsilon_2,\hat\varepsilon_2)]\,/\,[(\hat\varepsilon_1,\hat\varepsilon_1)+(\hat\varepsilon_1,\hat\varepsilon_2)]$.

5. Висновки

Підсумовуючи результати приведеного вище аналізу для простих моделей температурної релаксації у бінарній суміші, можемо зробити наступні висновки:

а) Порівняльний аналіз двох моделей температурної релаксації (колективної та парціальної) показав, що в гідродинамічній границі, коли мова йде про опис колективних процесів, ці моделі є еквівалентними;

б) Модель парціальної динаміки дозволяє вивчати особливості процесу вирівнювання локальних температур у двох підсистемах, а відповідний час релаксації $\tau = 1/\Gamma$ визначається насамперед конкуруючими кореляціями (неподібністю) між підсистемами;

в) З іншого боку, як і очікувалось, коефіцієнт згасання гідродинамічної моди залежить виключно від колективних ефектів і перехресні кореляції між підсистемами в гідродинамічному режимі не впливають на його величину;

г) Цікавим є прояв повільного гідродинамічного процесу термодифузії у динаміці неконсервативних величин. Суттєвим моментом при цьому є необхідність явного врахування динамічної взаємодії із повільним процесом, що забезпечує коректність отриманих теоретичних результатів. Зауважимо, що в гідродинамічній області намагання описати динаміку однієї із парціальних енергій у формалізмі функцій пам'яті [6,7] привело б до необхідності врахування функцій пам'яті високих порядків і не дозволило б виділити вклад від гідродинамічного процесу в явній формі.

Розглянуті у цій роботі моделі добре ілюструють ієрархію процесів релаксації в динаміці багаточастинкових систем [8] (гідродинамічні та кінетичні процеси добре розділені за своїми характерними часами) і дозволяють краще зрозуміти особливості опису динаміки зв'язаних підсистем (у нашому випадку асоційованих із густинами парціальних енергій), в яких через взаємодію із повільним процесом суттєвим чином може проявлятися гідродинамічна складова.

Робота підтримана Державним фондом фундаментальних досліджень, проект № 02.07/00303, за що автори висловлюють свою вдячність.

Література

1. D.N. Zubarev *Nonequilibrium statical thermodynamics* (Consultant Bureau, New-York, 1974).
2. D.N. Zubarev, V. Morozov and G. Röpke *Statistical mechanics of nonequilibrium Processes. Vol. 1, Basic Concepts, Kinetic Theory* (Akad. Verl, Berlin, 1996).
3. І.М. Мриглод, Ю.К. Рудавський, М.В. Токарчук, О.Ф. Бацевич, УФЖ, **44**, №8, 1030 (1999)
4. І.М. Мриглод, Ю.К. Рудавський, М.В. Токарчук, О.Ф. Бацевич, УФЖ, **44**, №9, 1174 (1999)
5. I.M. Mryglod, M.V. Tokarchuk, R. Folk, Physica A, **220**, 325 (1995).
6. J.P. Boon, S. Yip *Molecular hydrodynamics* (McGraw-Hill Inc., New-York, 1980).
7. J.P. Hansen, I.R. McDonald *Theory of simple liquids*, 2nd ed. (Academic Press, London, 1986).
8. N.N. Bogolyubov In: *Studies in statistical mechanics*, eds. J. de Boer and G.E.Uhlenbeck, vol.1, (North-Holland, Amsterdam, 1962).

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою http://www.icmp.lviv.ua/

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (http://www.icmp.lviv.ua/)

Олександр Флорієвич Бацевич Ігор Миронович Мриглод
Юрій Кирилович Рудавський
Михайло Васильович Токарчук

Динамічна поведінка бінарної суміші з неконсервативними динамічними змінними

Роботу отримано 17 липня 2002 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії нерівноважних процесів

Виготовлено при ІФКС НАН України