НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

ГУМЕНЮК Йосип Андрійович

УДК 532.5; 533.7; 533.1

ПРОЦЕСИ ПЕРЕНОСУ В ГУСТИХ ГАЗОВИХ СУМІШАХ: УЗГОДЖЕНИЙ ОПИС КІНЕТИКИ ТА ГІДРОДИНАМІКИ

01.04.02 – теоретична фізика

АВТОРЕФЕРАТ
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

ЛЬВІВ – 2012

Дисертацією є рукопис.
Робота виконана в Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України.

Науковий керівник – доктор фізико-математичних наук, професор **Токарчук Михайло Васильович,** Інститут фізики конденсованих систем НАН України, завідувач відділу теорії нерівноважних процесів

Офіційні опоненти – член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор **Головко Мирослав Федорович**, Інститут фізики конденсованих систем НАН України, завідувач відділу теорії розчинів

– доктор фізико-математичних наук, професор **Герасименко Віктор Іванович,** Інститут математики НАН України, провідний науковий співробітник відділу диференціальних рівнянь з частинними похідними.

Захист відбудеться “ 24 ” жовтня 2012 року о 15.30 на засіданні спеціалізованої вченої ради Д35.156.01 при Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України за адресою: 79011 м. Львів, вул. Свєнціцького, 1.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту фізики конденсованих систем НАН України за адресою: 79026 м. Львів, вул. Козельницька, 4.

Автореферат дисертації розіслано “ 17 ” вересня 2012 року.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради Т.Є. Крохмальський

Актуальність теми. Дослідження повільних та швидких нерівноважних явищ переносу в густих нейтральних чи йонізованих газах, рідинах і їх сумішах залишаються актуальними як з точки зору їх практичних застосувань у технологічній сфері, так і для розробки підходів узгодженого статистичного опису кінетичних та гідродинамічних процесів у цих системах.

Рівняння переносу звичайної гідродинаміки, що слідують з рівнянь балансу для локальних густин маси, імпульсу та повної енергії, описують пізній етап часової еволюції газу чи рідини на великих просторових і часових масштабах. Щоб досліджувати швидші процеси, наприклад, релаксацію внутрішніх напружень чи потоку тепла, потрібно записати рівняння переносу для відповідних величин, які є незбережувані. Для газу низької густини, виходячи з мікроскопічних позицій, вперше це зробив Ґред на основі рівняння Больцмана, долучивши до збережуваних величин вищі моменти одночастинкової функції розподілу. Розробка загальної схеми такого розширеного гідродинамічного опису для густих систем і виведення точних рівнянь балансу для вищих гідродинамічних змінних є актуальною задачею нерівноважної статистичної механіки.

Труднощів кінетичної теорії в області високих густин, що походять від зіткнень вищої кратности, можна певною мірою уникнути, будуючи кінетичні рівняння для модельних потенціалів у наближенні парних зіткнень. При цьому виникає потреба брати до уваги близькість кінетичного й гідродинамічного етапів часової еволюції, а також враховувати міжчастинкові процеси, що відбуваються на відстанях міжмолекулярного притягання. Важливо мати теорію коефіцієнтів переносу для таких потенціалів, які щонайкраще враховували б характерні риси взаємодії у реальних густих газах, зокрема, притягання. Особливо це стосується багатосортних сумішей, які помітно розширюють як сферу застосувань, так і коло досліджуваних явищ (наприклад, дифузію). Врахування балансу енергії міжчастинкової взаємодії поруч з кінетичним рівнянням якісно змінює структуру теорії, у порівнянні з кінетичною теорією Енскога, зумовлюючи появу нового нерівноважного параметра – оберненої потенціальної квазітемператури.

Тому кінетичні теорії для густих газових сумішей з модельними багатосходинковим потенціалом і потенціалом типу “тверді кульки + плавний хвіст” заслуговують на увагу. Їх розвиток важливий ще з тієї причини, що існує позитивний досвід перенесення як самого підходу, так і результатів для нормального розв’язку і коефіцієнтів переносу на популярні тепер об’єкти фізики м’якої речовини, серед яких – колоїдні розчини, дрібнодисперсні та гранулярні системи.

Зв’язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційну роботу виконано в Інституті фізики конденсованих систем НАН України в рамках таких держбюджетних тем: “Узагальнена статистична теорія узгодженого опису швидких та повільних нерівноважних процесів у рідинах і плазмі” (No 0199U000669, 1999–2001 р.), “Немарківські кінетичні та гідродинамічні процеси у конденсованих системах” (No 0102U000216, 2002–2004 р.), “Розробка сучасних теоретичних методів та їх застосування до вивчення властивостей конденсованих систем” (No 0102U001794, 2002–2006 р.), “Динамічні властивості багатокомпонентних флюїдів та особливості їх поведінки в просторово-обмежених системах” (No 0106U001114, 2006–2008 р.), “Розвиток теорії складних плинів і міжфазних областей: фазова поведінка, структурні, термодинамічні та динамічні властивості” (No 0109U001058, 2009–2013 р.).

Мета і задачі дослідження. Розвинути статистичну теорію нерівноважних явищ переносу в густих газових сумішах, явно врахувавши міжчастинкове притягання, при узгодженому описі кінетичних та гідродинамічних процесів, а саме:

- на основі ланцюжка рівнянь Боголюбова-Борна-Ґріна-Кірквуда-Івона (ББҐКІ) розвинути загальну схему розширення гідродинамічного опису й побудувати точні рівняння балансу для потоків імпульсу та енергії, звернувши увагу на внески від взаємодії;
- на основі кінетичної теорії густої газової суміші з багатосходинковою взаємодією між частинками з’ясувати методологічні зміни, внесені врахуванням балансу потенціальної енергії, й отримати вирази для коефіцієнтів переносу;
- описати процеси переносу в суміші заряджених твердих кульок за допомогою кінетичної теорії Енскога-Ландау й провести розрахунки коефіцієнтів переносу.

Об’єкт дослідження: густі нейтральні та йонізовані газові суміші, рідини.

Предмет дослідження: структура рівнянь балансу розширеної гідродинаміки газів та рідин, явища в’язкости, теплопровідности і дифузії в густих газових сумішах, включаючи йонізовані.

Методи дослідження: метод частинкових функцій розподілу ББҐКІ, підхід кінетичних рівнянь, модифікований метод Чепмена-Енскога.

Наукова новизна одержаних результатів.

- Виведення рівняння балансу для локальних гідродинамічних густин загального вигляду, що описують систему зі взаємодією типу гладкого потенціала чи твердих кульок, поширено на випадок густин із внесками від груп довільної кількости частинок.
- Вперше виведено рівняння балансу для нелокальної двочастинкової густини і отримано точні рівняння балансу для потоків імпульсу та енергії, а також для тензора напружень і теплового потоку.
- Самоузгоджену кінетичну теорію для густих газів з багатосходинковим потенціалом поширено на випадок сумішей. За допомогою граничного переходу за потенціалом показано, що як на кінетичному, так і гідродинамічному рівнях вона переходить у кінетичну варіаційну теорію KVT-III (G.Stell, J.Karkheck, H. van Beijeren). Для останньої запропоновано модифікацію рівняння балансу кінетичної енергії, яка призводить до узгодження з нерівноважною термодинамікою.
- Знайдено нормальні розв’язки рівнянь кінетичної теорії для густих газових сумішей з багатосходинковим потенціалом і виведено аналітичні вирази для коефіцієнтів переносу. Вперше показано, що теорія узгоджується зі співвідношеннями взаємности Онзаґера. Вперше знайдено аналітичний вираз для поправки першого порядку до оберненої потенціальної квазітемператури. Послідовно з’ясовано вплив нерівноважности парної функції розподілу на коефіцієнти переносу і знайдено нові внески до об’ємної в’язкости, теплопровідности і дифузійного теплопереносу.

- Отримано нормальний розв'язок системи кінетичних рівнянь Енскога-Ландау для суміші заряджених твердих кульок і виведено вирази для коефіцієнтів переносу. Дифузійні сили одержано у формі, що узгоджується з лінійною нерівноважною термодинамікою. З'ясовано вплив інтеґралів зіткнень середнього поля і типу Ландау в больцманівській формі на процеси в'язкости, теплопровідности і дифузії.

Практичне і наукове значення одержаних результатів. Отримані рівняння розширеної гідродинаміки можна застосувати до опису швидких гідродинамічних процесів, зокрема, релаксації внутрішніх напружень чи потоку тепла в простих густих газах і рідинах. Запропоновану загальну схему розширення гідродинаміки можна поширити на наступні рівні гідродинамічного опису, а також перенести на системи зі складнішими потенціалами. Побудована кінетична теорія для густих газових сумішей частинок з багатосходинковою взаємодією засвідчує важливу роль оберненої потенціальної квазітемператури і може служити одним зі зразків для побудови кінетичних теорій систем з реалістичними потенціалами. Отримані вирази для в'язкости, теплопровідности і дифузії можна використати в розрахунку коефіцієнтів переносу реальних густих газових сумішей в області густин і температур, де важливе міжчастинкове притягання.

Особистий внесок здобувача: узагальнення виведення рівнянь балансу для гідродинамічних густин на випадок внесків від груп частинок довільної кількости; виведення загального рівняння балансу для двочастинкової нелокальної густини; одержання точних рівнянь для потоків імпульсу й енергії та тензора напружень і теплового потоку.

Автор запропонував параметризацію інтеґралів зіткнень від сходинок багатосходинкового потенціала та модифікацію рівняння балансу кінетичної енергії в кінетичній варіаційній теорії; отримав підтвердження виконання співвідношень взаємности Онзаґера для обох розглянутих кінетичних теорій.

Автор частково брав участь у формулюванні задач і активну участь в аналізі та обговоренні результатів. Йому належать виведення аналітичних співвідношень та виразів і проведення числових розрахунків, результати яких подано в дисертації.

Апробація результатів дисертації. Результати дисертації доповідались і опубліковані в матеріалах таких конференцій і нарад: Міжнародна конференція "Вибрані проблеми фізики рідин" (Одеса, 1999); Нарада "Сучасні проблеми теорії м'якої речовини" (Львів, 2000); 2-га Міжнародна конференція "Фізика рідкого стану: сучасні проблеми" (Київ, 2003); Робоча нарада НАТО "Йонна м'яка речовина: нові напрямки у теорії та застосуванні" (Львів, 2004); Міжнародна конференція "Статистична фізика 2006. Конденсована речовина: теорія і застосування" (Харків, 2006); 2-га Міжнародна конференція з квантової електродинаміки та статистичної фізики (Харків, 2006); 33-тя Конференція середньо-європейської співпраці у статистичній фізиці (Пухберґ/Вельс, Австрія, 2008); 4-та Міжнародна конференція "Фізика рідкого стану: сучасні проблеми" (Київ, 2008); VIII Всеукраїнська школа-семінар і конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 2008); IV Міжнародна наукова конференція "Фізика невпорядкованих систем" (Львів, 2008); 3-тя Конференція "Статистична фізика: сучасні напрямки і застосування" (Львів, 2009); 5-та Міжнародна конференція

“Фізика рідкого стану: сучасні проблеми” (Київ, 2010); 36-та Конференція середньо-європейської співпраці у статистичній фізиці (Львів, 2011), а також на семінарах Інституту фізики конденсованих систем НАН України та інших наукових зустрічах.

Публікації. Результати дисертації опубліковано у 22 роботах, серед яких 7 статтей, виданих у реферованих журналах, зазначених у переліках ВАК України, 1 препринт та 14 тез українських та міжнародних наукових конференцій.

Структура та об’єм дисертації. Дисертаційна робота складається зі вступу, огляду літератури, трьох розділів з викладом результатів оригінальних досліджень, висновків, списку використаних джерел і додатків. Роботу викладено на 164 сторінках (разом з переліком джерел і додатками – на 213 сторінках). Бібліографічний список містить 255 покликів.

ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі подано загальні характеристики дисертації, такі, як актуальність теми, мета роботи, наукова новизна і практичне значення результатів та ін.

У першому розділі відзначено місце кінетичної теорії серед різних способів опису нерівноважних процесів, а також коротко згадано відомості, які вважаються вже класичними: підходи Больцмана, Боголюбова й Енскога в кінетичній теорії газів та близькі питання. Далі наведено огляд праць, що стосуються: рівнянь балансу і проблеми розширення гідродинамічного опису; явного і неявного врахування міжчастинкового притягання в інтеґралах зіткнень через модельні потенціали; фізики плазми та кінетичної теорії кулонівських систем.

Другий розділ називається “Рівняння балансу розширеної гідродинаміки”. У ньому викладено систематичний підхід до питання виведення рівнянь балансу для вищих гідродинамічних змінних – вищих потоків та джерел. За основу взято ланцюжок рівнянь Боголюбова-Борна-Ґріна-Кірквуда-Івона (ББҐКІ) для системи з довільною плавною взаємодією чи потенціалом твердих кульок.

Згідно теорії неперервного середовища густина $a(\boldsymbol{r},\mathrm{t})$ довільної адитивної величини A задовольняє рівняння балансу: $\partial_t a + \nabla \cdot \boldsymbol{J}_a = s_a$, де $\boldsymbol{J}_a(\boldsymbol{r},\mathrm{t})$ – густина потоку величини A через одиничну площадку, а $s_a(\boldsymbol{r},\mathrm{t})$ – інтенсивність її джерел в одиниці об’єму. Ідея розширення полягає в тому, що величини $\boldsymbol{J}_a$ і s_a задовольняють такі ж за структурою рівняння балансу; необхідно лише відшукати відповідні потоки та джерела: $\mathbf{J}_{\boldsymbol{J}a}$, $\boldsymbol{s}_{\boldsymbol{J}a}$ і $\boldsymbol{J}_{sa}$, s_{sa}.

Розглядаючи проблему в загальному, допускаємо, що довільна густина a класичної системи частинок з парним центральним потенціалом $\phi(r)$ у зовнішньому полі $U(\boldsymbol{r}_1)$ може мати внески a_k до S-го порядку включно:

$$a(\boldsymbol{r}_1,\mathrm{t}) = \sum_{k=1}^{S} a_k(\boldsymbol{r}_1,\mathrm{t}), \qquad a_k(\boldsymbol{r}_1,\mathrm{t}) = \langle \psi_a{}^k(x^k,t)\rangle^k_{\mathbf{v}1,x2\ldots xk} = \int d\mathbf{v}_1 dx_2\ldots dx_k\, f_k(x^k,t)\, \psi_a{}^k(x^k,t), \tag{1}$$

де $\langle\ldots\rangle^k_{\mathbf{v}1,x2\ldots xk}$ – усереднення з k-частинковою функцією розподілу f_k; $\psi_a{}^k$ – молекулярна характеристика k-частинкового внеску до a, $x^k=\{x_1,x_2,\ldots,x_k\}$ – фазові змінні, $x_i=\{\boldsymbol{r}_i,\mathbf{v}_i\}$ – координата і швидкість, t – час. Таке представлення макроскопічної густини називається локальним.

Зміна a_k в часі відбувається завдяки часовій зміні ψ_a^k та f_k. Остання описується k-тим рівяннням ланцюжка ББҐКІ, яке після використання для середнього, що містить $\partial_t f_k$, дає кілька доданків від операторів, які діють на f_k та f_{k+1}, пов'язаних з кінетичним рухом, міжчастинковою взаємодією та дією зовнішнього поля. За допомогою переходу до спряжених операторів у кожному доданку дія оператора переноситься з функцій розподілу f_k та f_{k+1} на характеристику ψ_a^k, вигляд якої вважається відомим. Другий крок у виведенні полягає в тому, щоб подати отриманий проміжний результат у вигляді суми диверґенції деякого потоку плюс залишок. Це досягається за допомогою відомої процедури симетризації [W.Noll // Indiana Univ. Math. J.,1955, **4**, 627; origin. publ. in J. Ration. Mech. Anal.; cond-mat.stat-mech/0810.0337v3], що спирається на симетрійні властивості операторів, які є наслідком сферичної симетрії потенціалів взаємодії. Загальне рівняння балансу для $a_k(\boldsymbol{r}_1,\mathrm{t})$ отримано у вигляді [7]:

$$\partial_t\, a_k + \nabla_1\cdot \Big[\, \boldsymbol{J}_{ak}^{\mathrm{k},1} + \sum_{j=2}^{k} \boldsymbol{J}_{ak}^{\phi,1j} + \boldsymbol{J}_{ak}^{\phi,1k+1}\Big] =$$

$$= s_{ak}^{\;t} + \sum_{i=1}^{k} \big[s_{ak}^{\;r,i} + s_{ak}^{\;U,i}\big] + \sum_{i=1}^{s}\sum_{j(>i)}^{s} s_{ak}^{\;\phi,ij} + \sum_{i=1}^{k} s_{ak}^{\;\phi,i\,k+1}. \qquad (2)$$

У лівій частині під диверґенцією стоять внески різного походження до потоку величини a_k: $\boldsymbol{J}_{ak}^{\mathrm{k},1}$ – кінетичний, зумовлений рухом частинок зі швидкістю $\mathbf{v}_1$, $\boldsymbol{J}_{ak}^{\phi,1j}$ та $\boldsymbol{J}_{ak}^{\phi,1k+1}$ виникають завдяки взаємодії. У правій частині записано внески у джерело: $s_{ak}^{\;t}$ і $s_{ak}^{\;r,i}$ – завдяки залежності характеристики ψ_a^k від часу та i-тої просторової координати, $s_{ak}^{\;U,i}$ – внесок від зовнішнього поля, а в останніх двох сумах – внески у джерело завдяки взаємодії. Верхні числові індекси в позначеннях відповідають фазовим координатам частинок. Явні вирази для усіх величин наведено в дисертації. Результат (2) узагальнює відомий раніше для одно- і двочастинкових величин [J.S.Dahler et.al. // Transfer and Storage of Energy by Molecules, V. 3, Eds. G.M.Burnett, A.M.North, L–NY–S–T: Wiley-Interscience, 1970]. Проаналізовано часткові випадки, коли ψ_a^k залежить лише від швидкостей чи лише від координат. Як для плавної взаємодії, так і твердих кульок для густин маси ρ, імпульсу $\boldsymbol{p}$ та повної енергії e як ілюстрації отримано рівняння балансу, які становлять основу звичайної гідродинаміки.

Внески від взаємодії у потоки імпульсу $\mathbf{J}_{\boldsymbol{p}}^{\phi,12}$ та кінетичної енергії $\boldsymbol{J}_{e\mathrm{k}}^{\phi,12}$ є новим типом середніх завдяки інтеґруванню за параметром зміщення, а саме *нелокальними* середніми. Щоб вивести рівняння балансу для них, було розглянуто нелокальне двочастинкове середнє загального вигляду:

$$\alpha_2(\boldsymbol{r}_1,t) = \langle \Psi_\alpha^{\,2}(x_{1\lambda},x_{2\lambda'})\rangle^2_{(\mathbf{vR}\lambda)12} = \int_0^1 d\lambda \int d\boldsymbol{R}\, d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2\, f_2(x_{1\lambda}, x_{2\lambda'},t)\, \Psi_\alpha^{\,2}(x_{1\lambda},x_{2\lambda'}), \qquad (3)$$

де $\Psi_\alpha^{\,2}$ – молекулярна характеристика, $x_{1\lambda}= \{\boldsymbol{r}_1- \lambda\boldsymbol{R},\, \mathbf{v}_1\}$, $x_{2\lambda'} = \{\boldsymbol{r}_1+[1-\lambda]\boldsymbol{R},\mathbf{v}_2\}$ – фазові змінні зі зміщеними координатами, $\boldsymbol{R}$ – відносна відстань. Виведення рівняння балансу для α_2 теж складається з двох етапів, як і у випадку локальної густини. Результат має вигляд [7]:

$$\partial_t \alpha_2 + \nabla_1 \cdot [\, \boldsymbol{J}_{\alpha,2}{}^{\mathrm{k},12} + \boldsymbol{J}_{\alpha,2}{}^{\phi,12} + \sum_{k=1}^{2} \boldsymbol{J}_{\alpha,2}{}^{\phi,k3}] =$$

$$= s_{\alpha,2}{}^{t} + \sum_{k=1,R} s_{\alpha,2}{}^{r,k} + \sum_{k=1}^{2} s_{\alpha,2}{}^{U,k} + s_{\alpha,2}{}^{\phi,12} + \sum_{k=1}^{2} s_{\alpha,2}{}^{\phi,k3}, \qquad (4)$$

де позначення мають такий же сенс, що й у формулі (2), а явні вирази подано в дисертації. Усі величини так само нелокальні, як і α_2, за винятком $\boldsymbol{J}_{\alpha,2}{}^{\phi,12}$ і $\boldsymbol{J}_{\alpha,2}{}^{\phi,k3}$. Вони є середніми з *подвійною* нелокальністю: $\boldsymbol{J}_{\alpha,2}{}^{\phi,12}$ – завдяки інтеґруванню за двома параметрами зміщення, а $\boldsymbol{J}_{\alpha,2}{}^{\phi,k3}$ – завдяки інтеґруванню за двома відносними відстанями і двома параметрами зміщення. Розглянуто часткові випадки залежности для Ψ_α^2.

За допомогою цих загальних результатів отримано рівняння балансу для потоків імпульсу $\mathbf{J}_{\boldsymbol{p}} = \mathbf{J}_{\boldsymbol{p}}{}^{\mathrm{k}} + \mathbf{J}_{\boldsymbol{p}}{}^{\phi}$ та енергії $\boldsymbol{J}_e = \boldsymbol{J}_{e\mathrm{k}}{}^{\mathrm{k}} + \boldsymbol{J}_{e\mathrm{k}}{}^{\phi} + \boldsymbol{J}_{e\mathrm{p}}{}^{\mathrm{k}}$ (верхні числові індекси опущено). Результат (2) застосовано до локальних середніх $\mathbf{J}_{\boldsymbol{p}}{}^{\mathrm{k}}$, $\boldsymbol{J}_{e\mathrm{k}}{}^{\mathrm{k}}$ та $\boldsymbol{J}_{e\mathrm{p}}{}^{\mathrm{k}}$ (кінетичний потік потенціальної енергії), а результат (4) – до нелокальних середніх $\mathbf{J}_{\boldsymbol{p}}{}^{\phi}$ та $\boldsymbol{J}_{e\mathrm{k}}{}^{\phi}$. Відповідні рівняння балансу отримано для кожного доданка окремо у випадку обох зазначених потенціалів, і наведено явні вирази для потоків та джерел цих величин. Додавши ці рівняння, отримуємо [7]:

$$\partial_t\, \mathbf{J}_{\boldsymbol{p}} + \nabla_1 \cdot {}_3\mathbf{J}_{\mathbf{J}\boldsymbol{p}} = \mathbf{s}_{\mathbf{J}\boldsymbol{p}}\,, \qquad\qquad \partial_t\, \boldsymbol{J}_e + \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_{\boldsymbol{J}e} = \mathbf{s}_{\boldsymbol{J}e}\,, \qquad (5)$$

де ${}_3\mathbf{J}_{\mathbf{J}\boldsymbol{p}}$ (тензор 3-го ранґу), $\mathbf{s}_{\mathbf{J}\boldsymbol{p}}$ та $\mathbf{J}_{\boldsymbol{J}e}$, $\mathbf{s}_{\boldsymbol{J}e}$ – вищі повні потоки і джерела величин $\mathbf{J}_{\boldsymbol{p}}$ та $\boldsymbol{J}_e$, які мають відповідно 3, 3 та 8, 7 внесків для плавного потенціала і 5, 6 та 5, 6 – для твердих кульок. Ці результати для обох взаємодій порівняно між собою. Рівняння (5) належать до релаксаційного типу і становлять перше розширення рівнянь звичайної гідродинаміки простої рідини чи газу. Виведення подібних рівнянь для все нових вищих потоків та джерел призводить до розгортання ланцюжка гідродинамічних рівнянь балансу до наступних рівнів.

Далі з'ясовується вигляд нових рівнянь у локальній системі відліку, що рухається з гідродинамічною швидкістю $\boldsymbol{V}(\boldsymbol{r}_1,t) \equiv \boldsymbol{p}(\boldsymbol{r}_1,t)/\rho(\boldsymbol{r}_1,t)$ (так званий опис Ляґранжа). Для цього використано підстановку $\mathbf{v}_i = \boldsymbol{V}(\boldsymbol{r}_1,t) + \mathbf{c}_i$, де $\mathbf{c}_i$ – теплова швидкість, у внесках до гідродинамічних величин, означених через функції розподілу. Одночасно, з рівнянь для них, виключаючи конвективні доданки, що містять $\boldsymbol{V}$, отримано рівняння балансу в локальній системі відліку. Це відповідає переходу між двома наборами змінних опису:

$$\{\rho, \boldsymbol{p}, e, \mathbf{J}_{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{J}_e\} \quad \longrightarrow \quad \{\rho, \boldsymbol{V}, \varepsilon, \mathbf{P}, \boldsymbol{q}\},$$

де ε, $\mathbf{P}$, $\boldsymbol{q}$ – густина внутрішньої енергії, тензор напружень і тепловий потік. Для величин ρ, $\boldsymbol{V}$ та ε отримано добре відомі рівняння, а для $\mathbf{P}$ і $\boldsymbol{q}$ – релаксаційні рівняння балансу опису Ляґранжа [7]:

$$\partial_t \mathbf{P} + \nabla\cdot [\boldsymbol{V}\mathbf{P} + {}_3\mathbf{R}] = \mathbf{s_P} - \mathbf{P}^{\mathrm{T}}\cdot\nabla\boldsymbol{V} - [\nabla\boldsymbol{V}]^{\mathrm{T}}\cdot \mathbf{P}, \tag{6}$$

$$\partial_t \boldsymbol{q} + \nabla\cdot [\boldsymbol{V}\boldsymbol{q} + \mathbf{Q}] = \boldsymbol{s_q} - [\mathbf{I}\boldsymbol{q} + {}^{\mathrm{T}}({}_3\mathbf{R})]:\nabla\boldsymbol{V} + \rho^{-1} [\mathbf{I}\varepsilon + \mathbf{P}]\cdot(\nabla\cdot \mathbf{P}), \tag{7}$$

де ${}_3\mathbf{R}$, $\mathbf{s_P}$ та $\mathbf{Q}$, $\boldsymbol{s_q}$ – потоки й джерела тензора напружень $\mathbf{P}$ і теплового потоку $\boldsymbol{q}$, ${}^{\mathrm{T}}({}_3\mathbf{R})$ – позначає транспонування *зліва*, напр., $[{}^{\mathrm{T}}({}_3\mathbf{R})]_{\alpha\beta\gamma} \equiv [{}_3\mathbf{R}]_{\beta\gamma\alpha}$, $\mathbf{I}$ – одиничний тензор другого ранґу. Ці рівняння точні, їх вигляд для обох потенціалів однаковий, хоча самі величини при цьому можуть відрізнятися внесками, явні вирази для яких наведено. Рівняння (6), (7) описують релаксацію внутрішніх напружень і потоку тепла. Для газу низької густини вони переходять у результат Ґреда [H.Grad // Comm. Pure Appl. Math., 1949, **2**, 311], а в загальному випадку, коли важливими є внески від взаємодії, потребують подальшого вивчення; зокрема, для застосувань – вивчення в контексті замикання, задання початкових і граничних умов та у зв'язку з феноменологічними аналогами типу рівнянь Катанео-Максвела.

У третьому розділі з назвою "Кінетична теорія густих газових сумішей з багатосходинковим потенціалом взаємодії" після загального формулювання розглядається граничний перехід за потенціалом, пошук нормального розв'язку в першому порядку за ґрадієнтами і розрахунок коефіцієнтів переносу.

Багатосходинковий (БС) потенціал $\phi_{ij}^{\mathrm{MS}}(r)$ моделює взаємодію між частинками суміші й складається з твердої серцевини 'c' та відштовхувальних 'r' і притягальних 'a' стінок з висотами $\varepsilon_{ij}^{\mathrm{r}l}$ та $\varepsilon_{ij}^{\mathrm{a}l}$ (l – індекс нумерації); $\sigma_{ij}^{\mathrm{c}1}$, $\sigma_{ij}^{\mathrm{r}l}$ та $\sigma_{ij}^{\mathrm{a}l}$ позначають позицію твердої серцевини та відстані, на яких ϕ_{ij}^{MS} зазнає розриву (Рис. 1). Кінетичне рівняння для одночастинкової функції розподілу розподілу f_i частинок сорту i має вигляд [4,8]:

$$[\partial_t + \mathbf{v}_i\cdot\nabla]\, f_i\, (\boldsymbol{r},\mathbf{v}_i,t) = I_i[f_2], \tag{8}$$

де $\partial_t = \partial/\partial t$, $\nabla = \partial/\partial\boldsymbol{r}$, а $I_i[f_2] = \sum_j I_{ij}[f_2^{ij}]$ – інтеґрал зіткнень. Кожен доданок I_{ij} відповідно до структури БС потенціала враховує через інтеґрал зіткнень Енскога взаємодію на твердій серцевині, позначену тут як ©, та процеси опускання ⊕ і піднімання ∅ на сходинці й відбиття ⊗ від неї за допомогою аналогічних інтеґралів зіткнень і згідно закону збереження енергії для пари частинок. Для типів стінок q={c,r,a} і типів процесів p={©,⊕,∅,⊗} введено числову параметризацію, яка дає змогу записати всі зазначені внески до інтеґрала зіткнень спільною формулою, що належним чином враховує обставини парних процесів: просторову конфіґурацію частинок, граничне значення на стінці та ін. Кінетичне рівняння для f_i доповнюється [J.Karkheck et.al. // Phys. Rev. A, 1985, **32**, 2517] рівнянннням балансу для густини енергії взаємодії $e^{\mathrm{p}}(\boldsymbol{r},t)$ з виглядом:

$$\partial_t e^{\mathrm{p}} + \nabla\cdot [\boldsymbol{V}e^{\mathrm{p}}] + \nabla\cdot \boldsymbol{q}^{\mathrm{p}} = s_{\mathrm{p}}, \tag{9}$$

де $\boldsymbol{q}^{\mathrm{p}}(\boldsymbol{r},t)$ та $s_{\mathrm{p}}(\boldsymbol{r},t)$ – потік та джерело потенціальної енергії.

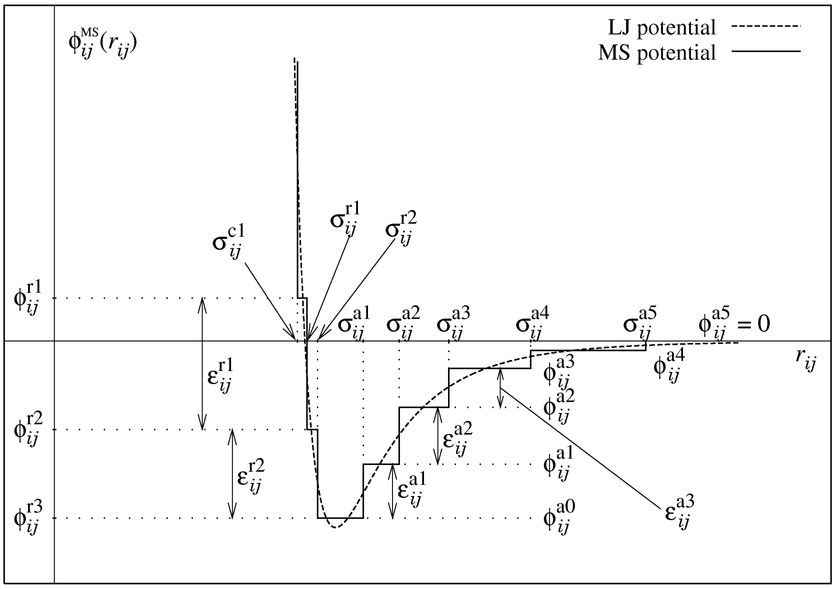


Рис. 1. Модельний багатосходинковий потенціал $\phi_{ij}^{MS}(r_{ij})$ з двома відштовхувальними і п'ятьма притягальними сходинками.

У замиканні знехтувано парними кореляціями в просторі швидкостей,

$$f_2^{ij}(x_i, x_j, t) \approx f_i(x_i,t)\, f_j(x_j,t)\, g_2^{ij}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j, t)\,,$$

а для парної функції розподілу g_2^{ij} прийнято функціональну залежність від густин числа частинок $\{n\} = \{n_1(\boldsymbol{r},t),\ldots,n_M(\boldsymbol{r},t)\}$ й оберненої потенціальної квазітемператури $\beta^p(\boldsymbol{r}, t)$, тобто, $g_2^{ij}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j, t) = g_2^{ij}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j|\{n\},\beta^p)$; вона має такий самий груповий розклад, як у рівновазі, але із $n_k(\boldsymbol{r}, t)$ у вузлах та $\frac{1}{2}[\beta^p(\boldsymbol{r}', t) + \beta^p(\boldsymbol{r}'', t)]$ на кожному зв'язку. Введення β^p обґрунтовується [J.Karkheck et.al. // Phys. Rev. A, 1985, **32**, 2517; Д.Н.Зубарев и др. // Теор. мат. физ., 1984, **60**, 270] на основі принципу екстремуму інформаційної ентропії, а сам цей параметр є спряжений до e^p у відповідному квазірівноважному розподілі. За допомогою кінетичного рівняння (8) отримано [4] рівняння балансу для локальних густини маси, імпульсу та кінетичної енергії густих сумішей газів і загальні вирази для тензора напружень і потоку тепла.

Розглядаючи граничний перехід по потенціалу [М.В.Токарчук та ін. // Укр. фіз. журн., 1990, **35**, 1255] шляхом збільшення кількости сходинок і зменшення відстані між ними, продемонстровано [5], що для граничного потенціала "тверді кульки + плавний хвіст" інтеґрал зіткнень переходить у відповідник кінетичної варіаційної теорії [J.Karkheck et.al. // Phys. Rev. A, 1982, **25**, 3328]. Те саме отримано і для тензора напружень, в той час як для теплового потоку такого відповідника в тій теорії немає. Проаналізовано особливості кінетичної варіаційної теорії для сумішей і запропоновано [5] модифікацію рівняння балансу для кінетичної енергії, яке разом із рівнянням для густини потенціальної енергії задовольняє закон збереження, узгоджується з нерівноважною термодинамікою та містить внески дифузійної природи в потік тепла.

У відшуканні [8] нормального розв'язку використано модифікований метод Чепмена-Енскога, що враховує долучення рівняння балансу потенціальної енергії на кінетичному рівні. Подано формулювання методу, наведено розклади за нелокальністю для всіх нелокальних величин і отримано необхідні співвідношення й вирази у двох перших порядках за ґрадієнтами. У нульовому порядку функція розподілу f_i^0 має локально-рівноважний максвелівський вигляд:

$$f_i^0(\boldsymbol{r},\mathbf{v}_i,t) \equiv n_i(\boldsymbol{r},t)\ [m_i/\{2\pi k_\mathrm{B}T^{\,\mathrm{k}0}(\boldsymbol{r},t)\}]^{3/2}\ \exp\{\,-m_i\,[\mathbf{v}_i-\mathbf{V}(\boldsymbol{r},t)]^2\,/\,[2k_\mathrm{B}T^{\,\mathrm{k}0}(\boldsymbol{r},t)]\,\}\ , \tag{10}$$

де m_i – маса частинки сорту i, k_B – стала Больцмана, $T^{\,\mathrm{k}0}(\boldsymbol{r},t)$ – кінетична температура, пов'язана з густиною внутрішньої кінетичної енергії як $\varepsilon^{\mathrm{k}0}(\boldsymbol{r},t) = (3/2)n(\boldsymbol{r},t)k_\mathrm{B}T^{\mathrm{k}0}(\boldsymbol{r},t)$, $n = \sum_i n_i$. Для оберненої потенціальної квазітемператури знайдено, що у нульовому порядку немає різниці між кінетичною і потенціальною шкалами температури: $\beta^{\mathrm{p}0}(\boldsymbol{r},t) = 1/[k_\mathrm{B}T^{\mathrm{k}0}(\boldsymbol{r},t)]$. Потоки маси і тепла відсутні, а тензор напружень має діаґональний вигляд $\mathbf{P}^0 = P\mathbf{I}$, де тиск дорівнює:

$$P \equiv k_\mathrm{B}T^{\,\mathrm{k}0}\ \{n + (2/3)\pi \textstyle\sum_{ij} n_i\, n_j\, \Lambda^{ij}_{3;1q}\,[1-\exp(\beta^{\mathrm{p}0}\varepsilon_{ij})]\ \}\ ; \tag{11}$$

тут введено позначення для конструкції

$$\Lambda^{ij}_{n;\,\alpha\mathrm{c},\alpha q}[\Xi(\beta^{\mathrm{p}0}\varepsilon_{ij})] \equiv \alpha_\mathrm{c}\,(\sigma_{ij}^{\ \mathrm{c}1})^n g_2^{\ ij,0}(\sigma_{ij}^{\ \mathrm{c}1})^+ \ +\sum_{q=r,a}\sum_{l=1}^{K_{ij}^q}\ \alpha_q\,(\sigma_{ij}^{\ ql})^n g_2^{\ ij,0}(\sigma_{ij}^{\ ql})^q\ \Xi(\beta^{\mathrm{p}0}\varepsilon_{ij}^{\ ql}),$$

у якій параметри можуть дорівнювати: $n = \{2;3;4\}$, $\alpha_\mathrm{c} = \{0;1\}$, $\alpha_q = \{q;1\}$, Ξ – функція, що залежить від висоти сходинки, а $g_2^{\ ij,0}$ – локально-рівноважна парна функція розподілу. Як і слід було чекати, у нульовому порядку суміш описується рівняннями ідеальної гідродинаміки із тиском (11). Рис. 2 ілюструє, як залежать від безрозмірної висоти сходинки відносні внески від процесів ⊕, ∅ та ⊗ до тиску.

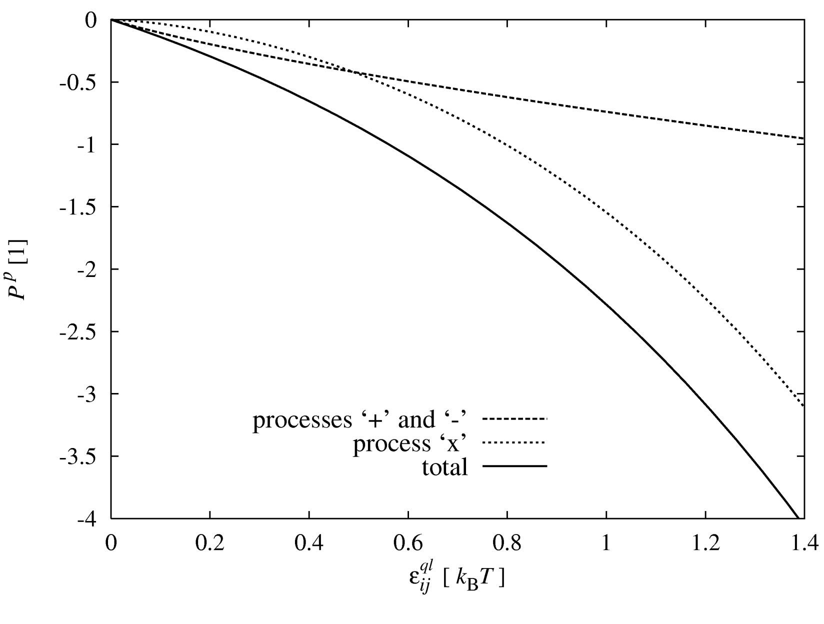


Рис. 2. Відносні внески у локально-рівноважний тиск від процесів ⊕, ∅ і ⊗ в залежності від безрозмірної висоти сходинки.

Для поправок першого порядку $\phi_i(\boldsymbol{r},\mathbf{v}_i,t) \equiv f_i^1(\boldsymbol{r},\mathbf{v}_i,t)/\ f_i^0(\boldsymbol{r},\mathbf{v}_i,t)$ отримано лінійні інтеґральні рівняння вигляду

$$J_i\,[\phi\,] = L_i\,, \tag{12}$$

де J_i – лінеаризований оператор зіткнень, а неоднорідна частина L_i зумовлена диференціальною частиною кінетичного рівняння, просторовою нелокальністю інтеґрала зіткнень (зміщеннями в просторових арґументах) та нерівноважністю парної функції розподілу. Вираз для L_i знайдено у вигляді лінійної комбінації величин $\boldsymbol{X}_T \equiv \nabla \ln T^{k0}$, $\nabla\boldsymbol{V}$, $\nabla\cdot\boldsymbol{V}$, $\boldsymbol{X}_k \equiv -(1/m_k)(\nabla\mu_k)_T$ [ґрадієнт хімічного потенціала сорту k при постійній кінетичній температурі T^{k0}] та поправки першого порядку β^{p1}. Коефіцієнти біля перших трьох ґрадієнтів подано у вигляді суми двох доданків, перший з яких є явною фукцією теплової швидкости $\mathbf{c}_i \equiv \mathbf{v}_i - \boldsymbol{V}$ і *нагадує* результат кінетичної теорії Енскога для твердих кульок, а другий, зумовлений лише сходинками, представлено інтеґралом за $\mathbf{c}_j$. Вперше для БС потенціала вираз для дифузійних внесків до L_i, початково пропорційних до ∇n_j, зведено до лінійної комбінації ґрадієнтів $(\nabla\mu_k)_T$ і цим підтверджено [8] виконання співвідношень взаємности Онзаґера (для високих густин цей результат було отримано раніше лише для суміші твердих кульок [H. van Beijeren et.al. // Physica (Utrecht), 1973, **70**, 225]). Завдяки лінійності рівняння (12) поправку шукаємо у вигляді:

$$\phi_i(\boldsymbol{C}_i) = -A_i(C_i^2)\boldsymbol{C}_i\cdot\boldsymbol{X}_T - B_i(C_i^2)\boldsymbol{C}_i^0\boldsymbol{C}_i{:}\nabla\boldsymbol{V} - H_i(C_i^2)\nabla\cdot\boldsymbol{V} - \textstyle\sum_k E_{ik}(C_i^2)\boldsymbol{C}_i\cdot\boldsymbol{X}_k\,, \tag{13}$$

де $\boldsymbol{C}_i \equiv (m_i/[2k_{\mathrm{B}}T^{k0}])^{1/2}[\mathbf{v}_i - \boldsymbol{V}]$ – безрозмірна теплова швидкість, $\boldsymbol{C}_i^0\boldsymbol{C}_i \equiv \boldsymbol{C}_i\boldsymbol{C}_i - (1/3)C_i^2$. Функції A_i, B_i, H_i та E_{ik} при відшуканні розкладаються за системами многочленів Соніна-Ляґера $\{S_\nu\}$ індексів $\nu = 3/2, 5/2, 1/2$ та $3/2$. Аналіз умов самоузгодження дає у результаті такі ж додаткові умови на коефіцієнти розкладу цих функцій, як у теоріях Больцмана чи Енскога, оскільки показано, що поправка до густини потенціальної енергії перетворюється в нуль: $e^{p1} = 0$.

Розглянувши у першому порядку рівняння для e^{p}, вперше отримано [8] в явному вигляді вираз для поправки β^{p1}:

$$\beta^{p1} = \Omega_\beta\,[H]\,\nabla\cdot\boldsymbol{V}, \tag{14}$$

де $\Omega_\beta\,[H] \equiv \Omega_g^{-1}(\omega'_{ep} - \Omega_\nabla) - \Omega_g^{-1}\,\Omega_\phi[H]$ – функціонал від компонент $\{H\}$, а величини, що до нього входять, виникають з рівняння для e^{p}: ω'_{ep} має локально-термодинамічне походження, а $\Omega_\phi[H]$, Ω_∇ та Ω_g – внески від поправки s_{p}^1 до джерела, зумовлені функціями ϕ_i, нелокальністю s_{p} та нерівноважністю g_2^{ij}. Функціонал $\Omega_\phi[H]$ знайдено в наближенні третього многочлена для функцій $\{H\}$.

Одержано інтеґральні рівняння для A_i, B_i та E_{ik}, що мають вигляд (12) і в загальних рисах нагадують відповідники теорії Енскога. У випадку функцій $\{H\}$ оператор J_i та неоднорідна частина, що походить від L_i, отримують *додаткові внески* завдяки формулюванню теорії через β^{p} і результату (14). Коефіцієнти усіх цих рівнянь виражаються через інтеґральні дужки, побудовані на многочленах Соніна-Ляґера. Для цих дужок отримано формули, у вигляді лінійних комбінацій омега-інтеґралів.

Коефіцієнти переносу зсувної η та об'ємної κ в'язкости, теплопровідности λ, дифузії D_{ij} та термодифузії D_i^T означено з лінійних законів для тензора напружень, потоку тепла і дифузійної швидкости сорту i в першому порядку за ґрадієнтами:

$$\mathbf{P}^1 = -2\eta\mathbf{S} - \kappa(\nabla\cdot\boldsymbol{V})\mathbf{I}, \quad \mathbf{q}^1 = -\lambda\nabla T^{k0} + \sum_l \omega_l \boldsymbol{X}_l, \quad \boldsymbol{V}_i^{d,1} = -D_i^T \nabla \ln T^{k0} + \sum_j D_{ij} \boldsymbol{X}_j,$$

де $\mathbf{S}$ – тензор швидкостей зсуву, ω_l – коефіцієнт дифузійного теплопереносу. Для них виявлено такі внески: $\eta = \eta^{\mathrm{k}} + \eta^{\phi} + \eta^{\nabla}$, $\kappa = \kappa^{\phi} + \kappa^{\nabla} + \kappa^{g}$, $\lambda = \lambda_{\mathrm{k}}^{\mathrm{k}} + \lambda_{\mathrm{k}}^{\phi} + \lambda_{\mathrm{k}}^{\nabla} + \lambda_{\mathrm{k}}^{g} + \lambda_{\mathrm{p}}$, $\omega_l = \omega_{l,\mathrm{k}}^{\mathrm{k}} + \omega_{l,\mathrm{k}}^{\phi} + \omega_{l,\mathrm{p}}$; верхні індекси позначають походження: k – кінетичне, ϕ – від поправок $\{\phi\}$, ∇ – від нелокальности, g – від нерівноважности g_2^{ij}; нижні індекси k та p біля λ й ω_l позначають внески від перенесення кінетичної та потенціальної енергій. Коефіцієнти D_i^T та D_{ij} мають лише кінетичні внески. Внески κ^g, λ_{k}^g, λ_{p} та $\omega_{l,\mathrm{p}}$ нові. При розрахунку $\mathbf{P}^1$, $\mathbf{q}^1$ та $\boldsymbol{V}_i^{d,1}$ функції A_i, B_i, H_i та E_{ik} у поправках $\{\phi\}$ взято в наближенні відповідно 2, 1, 3 та 2-ох многочленів, а внески до коефіцієнтів переносу виражаються через відповідні коефіцієнти розкладу цих функцій.

Четвертий розділ називається "Кінетична теорія Енскога-Ландау для газової суміші". В ньому на основі нормального розв'язку в першому порядку за ґрадієнтами досліджуються процеси переносу в модельній багатосортній системі заряджених і нейтральних твердих кульок в компенсаційному континуумі протилежного знаку. Далекосяжну взаємодію $\phi_{ij}^{\mathrm{t}}(r)$ взято у формі потенціала Кулона.

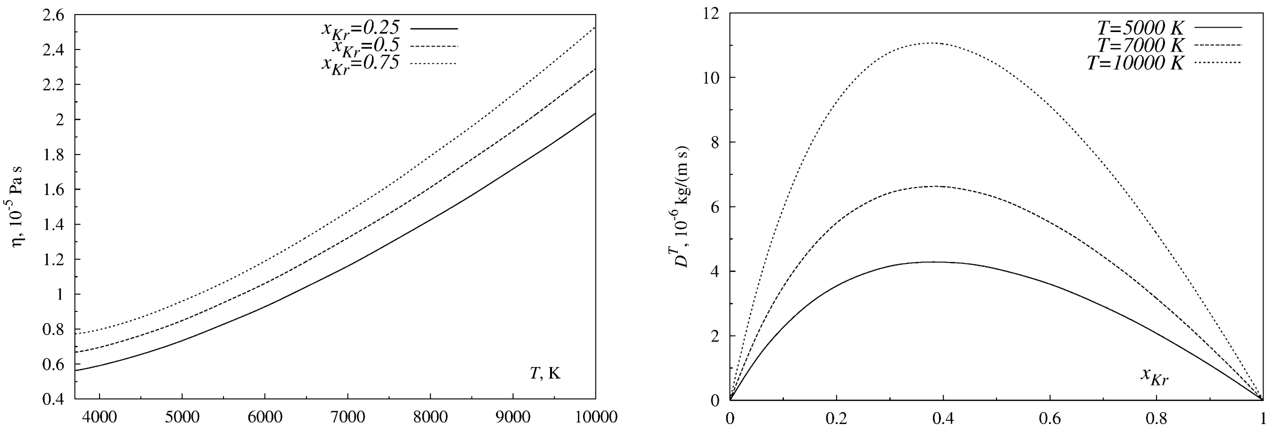
Кінетичне рівняння для f_i має вигляд (8) з інтеґралом зіткнень Енскога-Ландау $I_i^{\mathrm{EL}}[f, f] = \sum_j I_{ij}^{\mathrm{EL}}[f_i, f_j]$, який складається з енскогівського, середньопольового і ландаувського внесків [1,2]: $I_{ij}^{\mathrm{EL}}[f_i, f_j] \equiv I_{ij}^{\mathrm{E}}[f_i, f_j] + I_{ij}^{\mathrm{MF}}[f_i, n_j] + I_{ij}^{\mathrm{L}}[f_i, f_j]$. I_{ij}^{MF} має перший, а I_{ij}^{L} – другий порядок за ϕ_{ij}^{t}, причому, для I_{ij}^{L} використано наближене представлення [Д.Н.Зубарев и др. // Теор. мат. физ., 1991, **87**, 113] у больцманівській формі з припущенням $g_2^{ij}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j, t) \approx 1$. Замикання взято простіше, ніж для БС потенціала: g_2^{ij} залежить від $\{n\}$ і локальної температури $T(\boldsymbol{r},t)$ з таким, як і раніше, груповим розкладом $g_2^{ij}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j|\{n\},\beta)$, де $\beta(\boldsymbol{r},t) \equiv 1/[k_{\mathrm{B}}T(\boldsymbol{r},t)]$. З кінетичного рівняння Енскога-Ландау слідують рівняння балансу для локальних густини маси, імпульсу та кінетичної енергії. Рівняння для останньої містить джерело від I_i^{MF} згідно модифікації, запропонованої для кінетичної варіаційної теорії (розд. 3). Ним, однак, можна знехтувати внаслідок умови слабонеідеальности $e^{\mathrm{p}} << e^{\mathrm{k}}$. Тепловий потік теж містить внесок від I_i^{MF}, а I_i^{L} через свою локальну природу не дає внесків у потоки.

Щоб відшукати нормальний розв'язок, використано розклади інтеґралів зіткнень за нелокальністю і застосовано метод Чепмена-Енскога. У нульовому порядку розв'язком є локально-рівноважний розподіл Максвела (10) з локальною температурою $T(\boldsymbol{r},t)$ замість $T^{k0}(\boldsymbol{r},t)$. Тензор напружень має діаґональний вигляд $\mathbf{P}^0 = P\mathbf{I}$, а інші потоки перетворюються в нуль. Система описується рівняннями ідеальної гідродинаміки з тиском:

$$P \equiv k_{\mathrm{B}}T\,\{n + (2/3)\pi \sum_{ij} n_i n_j\,[\sigma_{ij}^3 g_2^{ij,0}(\sigma_{ij})^+ - (1/k_{\mathrm{B}}T)\int \mathrm{d}r_{ij}\, r_{ij}^3\, g_2^{ij,0}(r_{ij})\, \partial\phi_{ij}^{\mathrm{t}}(r_{ij})/\partial r_{ij}]\,\}, \qquad (15)$$

де σ_{ij} – півсума діаметрів твердих кульок сортів i та j.

У першому порядку за ґрадієнтами поправка ϕ_i до f_i^0 задовольняє інтеґральне рівняння (12) з лінеаризованим інтеґралом зіткнень J_i^{EL}, що відповідає I_i^{EL}. Неоднорідна частина L_i виражається лише через многочлени Соніна-Ляґера і є лінійною комбінацією ґрадієнтів $\nabla \ln T$, $\nabla \boldsymbol{V}$, $\nabla \cdot \boldsymbol{V}$, $\boldsymbol{X}_k \equiv -(1/m_k)(\nabla \mu_k^{\mathrm{hs+t}})_T$. Тут хімічний потенціал стосується повної взаємодії $\phi_{ij}^{\mathrm{hs+t}}$. Як і для БС потенціала, вираження дифузійних внесків до L_i в термінах хімічних потенціалів означає підтвердження виконання співвідношень взаємности Онзаґера. Поправки $\{\phi\}$ шукаються у вигляді (13), а для функцій A_i, B_i, H_i та E_{ik} отримано явно системи лінійних рівнянь для їхніх коефіцієнтів розкладу за відповідними наборами многочленів Соніна-Ляґера $\{S_\nu\}$. Інтеґрал зіткнень Ландау I_i^{L} проявляється через свій лінеаризований внесок J_i^{L} і тому непрямо впливає на розв'язки для цих функцій завдяки внескам в омега-інтеґрали. При розрахунку останніх, кулонівський потенціал приводить до розбіжностей завдяки повільному спаданню, тому його доводиться заміняти на екранований, спричинений компенсаційним континуумом.



а б

Рис. 3. Температурна залежність (а) зсувної в'язкости $\eta(T)$ суміші $\mathrm{Ar}^+ - \mathrm{Kr}^+$ при фіксованих значеннях вмісту Kr^+; концентраційна залежність (б) термодифузії $D^T(x_{\mathrm{Kr}+})$ тієї ж системи при фіксованих значеннях температури.

При відшуканні потоків з'ясовано, які прямі внески дають короткосяжна й далекосяжна частини потенціала. Зокрема, внески від ϕ_{ij}^{hs}, зумовлені нерівноважністю g_2^{ij} перетворюються в нуль. Послідовно показано, що ϕ_{ij}^{t} дає лише внески λ^{t} й ω_l^{t} дифузійного типу в теплопровідність і коефіцієнт дифузійного теплопереносу. Таким чином, коефіцієнти переносу дорівнюють: $\eta = \eta^{\mathrm{k}} + \eta^{\phi} + \eta^{\nabla,\mathrm{hs}}$, $\kappa = \kappa^{\phi} + \kappa^{\nabla,\mathrm{hs}}$, $\lambda = \lambda^{\mathrm{k}} + \lambda^{\phi} + \lambda^{\nabla,\mathrm{hs}} + \lambda^{\mathrm{t}}$, $\omega_l = \omega_l^{\mathrm{k}} + \omega_l^{\phi} + \omega_l^{\mathrm{t}}$, де зазначено, що внески типу '∇' зумовлені винятково відштовхуванням твердих кульок. Числовий розрахунок коефіцієнтів переносу (Рис. 3) проведено [1-3] для кількох характерних сумішей зі зарядженими й нейтральними компонентами. Деякі результати порівняно з наявними експериментальними даними.

Основні результати та висновки

Дотримуючись концепції узгодженого опису кінетичних та гідродинамічних процесів у густих газах та рідинах, у дисертації отримано такі результати:

1. Для потреб розширення рівнянь звичайної гідродинаміки виведено загальні рівняння балансу для довільних *k*-частинкової локальної та двочастинкової нелокальної густин, які у застосуванні до потоків імпульсу та енергії дають точні рівняння балансу першого рівня розширення. У локальній системі відліку отримано релаксаційні рівняння балансу для тензора напружень і потоку тепла, які узагальнюють результат Ґреда на високі густини. Гідродинамічний опис має порівневу структуру з найповільнішими змінними в основі, а долучення вищих потоків і джерел призводить до розгортання ланцюжка гідродинамічних рівнянь балансу.
2. Сформульовано самоузгоджену кінетичну теорію для густих газових сумішей з багатосходинковим потенціалом взаємодії, яка враховує баланс потенціальної енергії на кінетичному рівні. У першому порядку за ґрадієнтами отримано коректні вирази для дифузійних термодинамічних сил, які задовольняють співвідношення взаємности Онзаґера.
3. З’ясовано, що в першому порядку за ґрадієнтами внески до густин кінетичної та потенціальної енергії перетворюються в нуль. Показано, що поправка до оберненої потенціальної квазітемператури, пропорційна до диверґенції гідродинамічної швидкости, зумовлює перенормування інтеґральних рівнянь для об’ємно-в’язкісних компонент поправок першого порядку до одночастинкових функцій розподілу.
4. Отримано аналітичні вирази для коефіцієнтів переносу густої газової суміші з багатосходинковою взаємодією і з’ясовано вплив на них нерівноважности парної функції розподілу, зокрема, знайдено нові внески до об’ємної в’язкости і теплопровідности. Показано, що врахування перенесення потенціальної енергії дає внески у теплопровідність і коефіцієнт дифузійного теплопереносу.
5. Встановлено зв’язок кінетичної теорії для густих сумішей з багатосходинковим потенціалом із кінетичною варіаційною теорією, сформульованою для потенціала “тверді кульки + плавний хвіст”, як на рівні інтеґралів зіткнень, так і в гідродинамічних величинах. В рамках останньої виведено альтернативне рівняння балансу кінетичної енергії, яке разом із рівнянням для густини потенціальної енергії задовольняє локальний закон збереження та узгоджується з нерівноважною термодинамікою.
6. Кінетичну теорію Енскога-Ландау застосовано до дослідження явищ переносу в модельних сумішах заряджених і нейтральних твердих кульок. З’ясовано, що інтеґрал зіткнень середнього поля опосередковано впливає на об’ємну в’язкість, теплопровідність та дифузію і дає прямі внески в теплопровідність і коефіцієнт дифузійного теплопереносу. Показано, що форма дифузійних сил узгоджується з лінійною нерівноважною термодинамікою. Інтеґрал зіткнень типу Ландау в больцманівській формі виявляє непрямий вплив на коефіцієнти переносу через омега-інтеґрали.

Результати дисертації опубліковано в таких роботах

1. Токарчук М. В. Коефіцієнти переносу сумішей густих газів заряджених та незаряджених частинок / М. В. Токарчук, О. Є. Кобрин, Й. А. Гуменюк // Журн. фіз. досл. – 2000. – Т. 4, No 1. – С. 23–36.
2. Kobryn A. E. Enskog-Landau kinetic equation for multicomponent mixture. Analytical calculation of transport coefficients / A. E. Kobryn, M. V. Tokarchuk, Y. A. Humenyuk // Eur. Phys. J. B. – 2000. – V. 13. – P. 579–583.
3. Kobryn A. E. Investigation of transfer coefficients for many-component dense systems of neutral and charged hard spheres / A. E. Kobryn, M. V. Tokarchuk, Y. A. Humenyuk // J. Molec. Liq. – 2001. – V. 93, No 1–3. – P. 109–112.
4. Tokarchuk M. V. Hydrodynamic equations for dense fluid mixtures with multistep interaction between particles / M. V. Tokarchuk, Y. A. Humenyuk // Condens. Matter Phys. – 2007. – V. 10, No 2(50). – P. 151–163.
5. Humenyuk Y. A. Limiting behavior of the kinetic theory for systems with multistep interaction / Y. A. Humenyuk, M. V. Tokarchuk // Ukr. J. Phys. – 2010. – V. 55, No 4. – P. 450–457.
6. Humenyuk Y. A. On the form of the kinetic energy balance equation in the kinetic variational theory / Y. A. Humenyuk, M. V. Tokarchuk // J. Chem. Phys. – 2010. – V. 133, No 1. – P. 014503:1-5.
7. Humenyuk Y. A. Extension of hydrodynamic balance equations for simple fluids / Y. A. Humenyuk, M. V. Tokarchuk // J. Stat. Phys. – 2011. – V. 142, No 5. – P. 1052–1084.
8. Гуменюк Й.А. Кінетична теорія густих газових сумішей з багатосходинковим потенціалом взаємодії: нормальний розв’язок і коефіцієнти переносу / Гуменюк Й. А., Токарчук М. В. – Львів : Ін-т фізики конденс. систем НАН України, 2011. – 126 с. – (Препринт / НАН України, Ін-т фізики конденс. систем ; ICMP-11-06U).
9. Tokarchuk M. V. Investigation of transfer coefficients for many-component dense systems of neutral and charged hard spheres / M. V. Tokarchuk, A. E. Kobryn, Y. A. Humenyuk // International Conference “Special Problems in Physics of Liquids” : Book of abstracts, 31 May – 4 June 1999, Odessa. – Odessa: 1999. – P. 141–142.
10. Humenyuk Y. A. Calculations of the transfer coefficients for the moderately dense gaseous mixture H_2, N_2, NH_3 on the basis of the Enskog-Fokker-Planck kinetic equation / Y. A. Humenyuk // Workshop on Modern Problems of Soft Matter Theory : Book of abstracts, 27–31 August 2000, Lviv. – Lviv: 2000. – P. 134.
11. Humenyuk Y. A. Kinetic equation for many-component liquids with multistep interparticle interaction / Y. A. Humenyuk // The 2nd International Conference “Physics of Liquid Matter: Modern Problems” : Book of abstracts, 12–15 September 2003, Kyiv. – Kyiv: 2003. – P. 48.
12. Tokarchuk M. V. Kinetic equation for a dense gaseous mixture with a multistep interparticle potential of interaction / M. V. Tokarchuk, Y. A. Humenyuk // NATO Advanced Research Workshop “Ionic Soft Matter: Novel trends in theory and applications” : Book of abstracts, 14–17 April 2004, Lviv. – Lviv: 2004. – P. 100.

13. Humenyuk Y. A. Extension of hydrodynamic equations obtained from the BBGKY hierarchy / Y. A. Humenyuk, M. V. Tokarchuk // International Conference in Ukraine “Statistical Physics 2006. Condensed Matter: Theory and Applications” : Book of abstracts, 12–15 September 2006, Kharkiv. – Kharkiv: 2006. – P. 80.
14. Humenyuk Y. A. Hydrodynamic-type transport equation hierarchy for a fluid with a smooth central interparticle interaction / Y. A. Humenyuk, M. V. Tokarchuk // The 2nd International Conference on Quantum Electrodynamics and Statistical Physics : Book of abstracts, 19–23 September 2006, Kharkiv. – Kharkiv: 2006. – P. 149.
15. Humenyuk Y. A. Extended hydrodynamics from the BBGKY hierarchy / Y. A. Humenyuk, M. V. Tokarchuk // The 33rd Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics : Book of abstracts, 14–16 April 2008, Puchberg/Wels, Austria. – Puchberg/Wels: 2008. – P. P16.
16. Humenyuk Y. A. Extended hydrodynamics for hard spheres from the BBGKY hierarchy / Y. A. Humenyuk, M. V. Tokarchuk // The 4th International Conference “Physics of Liquid Matter: Modern Problems” : Book of abstracts, 23–26 May 2008, Kyiv. – Kyiv: 2008. – P. 88.
17. Гуменюк Й. А. Рівняння розширеної гідродинаміки, отримані з ланцюжка рівнянь ББГКІ / Й. А. Гуменюк // VIII Всеукраїнська школа-семінар і конкурс молодих вчених у галузі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини : Зб. тез, 5–6 червня 2008 року, Львів. – Львів: 2008. – С. 22–23.
18. Гуменюк Й. А. Кінетичне рівняння для систем з багатосходинковим потенціалом взаємодії. Границя гладкого потенціалу / Й. А. Гуменюк, М. В. Токарчук // IV Міжнародна наукова конференція “Фізика невпорядкованих систем” : Зб. матеріалів, 14–16 жовтня 2008 року, Львів. – Львів: 2008. – С. 54–55.
19. Humenyuk Y. A. Kinetic theory of transport coefficients for dense gaseous mixtures with multistep interaction / Y. A. Humenyuk, M. V. Tokarchuk // The 3rd Conference “Statistical Physics: Modern Trends and Applications” : Book of abstracts, 23–25 June 2009, Lviv. – Lviv: 2009. – P. 157.
20. Humenyuk Y. A. Normal solution to equations of the kinetic theory for fluid mixture with a multistep potential / Y. A. Humenyuk, M. V. Tokarchuk // The 5th International Conference “Physics of Liquid Matter: Modern Problems” : Book of abstracts, 21–24 May 2010, Kyiv. – Kyiv: 2010. – P. 104.
21. Humenyuk Y. A. On the form of the kinetic energy balance equation in the kinetic variational theory / Y. A. Humenyuk, M. V. Tokarchuk // The 5th International Conference “Physics of Liquid Matter: Modern Problems” : Book of abstracts, 21–24 May 2010, Kyiv. – P. 108.
22. Humenyuk Y. A. Transport coefficients of a dense fluid mixture with multistep interaction between particles / Y. A. Humenyuk, M. V. Tokarchuk // The 36th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics : Book of abstracts, 5–7 April 2011, Lviv. – Lviv: 2011. – P. 94.

Гуменюк Й. А. Процеси переносу в густих газових сумішах: узгоджений опис кінетики та гідродинаміки. – На правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика, Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України, Львів, 2012.

Запропоновано систематичний підхід до виведення рівнянь балансу гідродинамічного типу для систем з довільним плавним потенціалом і потенціалом твердих кульок. Виведено загальні рівняння для середніх локального й нелокального типів. За їх допомогою одержано точні рівняння балансу для потоків імпульсу й енергії та тензора напружень і теплового потоку.

В рамках підходу кінетичних рівнянь з’ясовано особливості явищ в’язкости, теплопровідности, дифузії та термодифузії в густих газових сумішах і вплив на них далекосяжної взаємодії. Для цього у випадку частинок з модельним багатосходинковим потенціалом сформульовано кінетичну теорію в наближенні парних зіткнень, що враховує баланс енергії взаємодії на кінетичному рівні опису. Для багатосортної системи заряджених і нейтральних твердих кульок у компенсаційному полі розглянуто кінетичну теорію Енскога-Ландау. За допомогою методу Чепмена-Енскога у першому порядку за ґрадієнтами побудовано нормальні розв’язки для обох цих теорій та отримано аналітичні вирази для коефіцієнтів переносу.

Ключові слова: розширена гідродинаміка, рівняння балансу, кінетична теорія, в’язкість, теплопровідність, дифузія.

Гуменюк И. А. Процессы переноса в плотных газовых смесях: согласованное описание кинетики и гидродинамики. – На правах рукописи.

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, 2012.

Предложен систематичный подход к выведению уравнений баланса гидродинамического типа для систем с произвольным плавным потенциалом и потенциалом твёрдых шаров. Выведены общие уравнения для средних локального и нелокального типов. С их помощью получены точные уравнения баланса для потоков импульса и энергии, а также тензора напряжений и теплового потока.

В рамках подхода кинетических уравнений выяснены особенности явлений вязкости, теплопроводности, диффузии и термодиффузии в плотных газовых смесях и влияние на них дальнодействующего взаимодействия. Для этого в случае частиц с модельным многоступенчатым потенциалом сформулирована кинетическая теория в приближении парных столкновений, которая учитывает баланс энергии взаимодействия на кинетическом уровне описания. Для многосортной системы заряженных и нейтральных твёрдых шаров в компенсирующем поле рассмотрена кинетическая теория Энскога-Ландау. С помощью метода Чепмена-Энскога в первом порядке по градиентам построены нормальные решения для обеих этих теорий и получены аналитические выражения для коэффициентов переноса.

Ключевые слова: расширенная гидродинамика, уравнения баланса, кинетическая теория, вязкость, теплопроводность, диффузия.

Humenyuk Y. A. Transport processes in dense gaseous mixtures: Consistent description of kinetics and hydrodynamics. – Manuscript.

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 National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2012.

In the thesis a statistical theory for description of nonequilibrium transport phenomena in dense gaseous systems is developed taking explicitly into account interparticle attraction and ensuring self-consistent consideration of kinetic and hydrodynamic processes.

The problem of extension of usual hydrodynamic equations for systems with a smooth continuous potential as well as hard-sphere repulsion is studied. The idea of the extension is described. A systematic approach to derivation of general hydrodynamic-like balance equations for arbitrary many-particle local and two-particle nonlocal densities is constructed, which is based on the Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon hierarchy. The first step of the extension is performed and balance equations for the fluxes of momentum and energy are derived. Explicit balance equations for the stress tensor and the heat flux in the local frame of reference are obtained. The results for the two potentials are compared with each other.

A self-consistent kinetic theory for dense gaseous mixtures with model multistep interparticle interaction is formulated. Using the modified Chapman-Enskog method a normal solution is found in the first order in gradients. The linear theory is shown to be in agreement with the Onsager relations of reciprocity. Fluxes of mass, momentum, and energy are calculated and analytical expressions for the transport coefficients of viscosity, thermal conductivity, diffusion, and thermal diffusion are derived. The role of a new parameter of the theory, the inverse potential quasitemperature, in the first order in gradients is elucidated and an analytical formula for its first-order correction is found. Influence of the nonequilibrium part of the pair distribution function on the transport coefficients is consistently revealled and new terms to the bulk viscosity, the thermal conductivity and the diffusional heat transport coefficients are found out.

Besides, the passage to the limit of the arbitrary smooth potential in the collision integrals as well as hydrodynamic quantities is effected. It manifests the connection of the general theory with the kinetic variational theory for dense fluids formulated previously for the potential “hard spheres + smooth tail”. For the latter, a modification of the kinetic energy balance equation is proposed to satisfy requirements of nonequilibrium thermodynamics.

The Enskog-Landau kinetic theory is applied to investigation of transport processes in a model multicomponent system of charged and neutral hard spheres in the compensative continuum of opposite sign. In the first order in gradients the role of the mean-field term is analysed in detail, specifically its influence on the form of the diffusion forces is established. The normal solution is constructed and analytical expressions for the transport coefficients are obtained. Calculation of these for some characteristic mixtures are carried out and compared with available experimental data.

Key words: Extended hydrodynamics, Balance equations, Kinetic theory, Viscosity, Thermal conductivity, Diffusion.