Краткие сообщения по физике № 10-1990 г.

УДК 536.75

К КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ПЛОТНЫХ ГАЗОВ НА ОСНОВЕ ЭФФЕКТИВНОГО ПОТЕНЦИАЛА

В.И. Курочкин

На основе приближенного решения цепочки уравнений ББГКИ путем введения эффективного потенциала получены аналитические выражения для коэффициента переноса в произвольном порядке разложения по степеням плотности.

В последнее время возрос интерес к модельным кинетическим уравнениям для плотных газов, в которых многочастичные корреляции приближенно учитываются при помощи равновесной парной функции распределения (ПФР). В данной работе предлагается модель, в которой многочастичные корреляции учитываются при помощи введения эффективного потенциала.

Динамика s-частичных функций распределения (ФР) описывается системой уравнений ББГКИ /1/:

$$(\partial_t + \mathbf{v}_1\nabla_1)F(x_1) = m^{-1}\int \nabla_1\varphi_{12}\partial_{12}F(x_1x_2)\,dx_2,$$

$$(\partial_t + \mathbf{v}_1\nabla_1 + \mathbf{v}_2\nabla_2 - \frac{1}{m}\nabla_1\varphi_{12}\partial_{12})F(x_1x_2) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{2}\int \nabla_i\varphi_{i3}\partial_{i3}F_3(x_1x_2x_3)\,dx_3. \tag{1}$$

Здесь $\mathbf{v}_i$ – скорость i-ой частицы; $x_i = (\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i)$; $\partial_t = \partial/\partial t$; $\nabla_i = \partial/\partial \mathbf{r}_i$; $\partial_i = \partial/\partial \mathbf{v}_i$; $\partial_{ij} = \partial_i - \partial_j$; $\varphi_{ij} = \varphi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ – потенциал взаимодействия частиц.

Для получения кинетического уравнения необходимо выразить двухчастичную ФР F_2 через одночастичную ФР F. В работе /2/ двухчастичная ФР представлена в виде

$$F_2(x_1x_2) = \chi(r)F(\mathbf{r}_1', \mathbf{v}_1')F(\mathbf{r}_2', \mathbf{v}_2'), \tag{2}$$

где r_i' и v_i' – координата и скорость i-ой частицы, сдвинутые определенным образом вдоль траектории частицы при парном столкновении, $\chi(r)$ однозначно связана с ПФР $g(r)$:

$$\chi(r) = g(r)\exp[\varphi(r)/\Theta], \tag{3}$$

где $r = |r_2 - r_1|$; Θ – температура газа, выраженная в энергетических единицах. В работах /2, 3/ представлено решение получающегося с учетом (2) кинетического уравнения и получены линейные по плотности поправки к коэффициентам переноса, соответствующие второму вириальному коэффициенту. Квадратичные и более высокого порядка по плотности поправки не рассчитывались, по-видимому, из-за сложности в вычислении ПФР. Эффективные методы расчета ПФР при помощи метода возмущений разработаны в /4/. В связи с этим целесообразно иметь выражения для расчета коэффициентов переноса в произвольном порядке разложения по степеням плотности. В данной работе эта задача решается на основе приближенного решения второго уравнения цепочки (1) путем введения эффективного потенциала.

Допустим, что правую часть второго уравнения системы (1) можно представить в виде $\nabla_1(u_{12} - \varphi_{12}) \times \partial_{12}F_2(x_1x_2)$. Тогда это уравнение преобразуется к более простому

$$(\partial_t + \mathbf{v}_1\nabla_1 + \mathbf{v}_2\nabla_2 - m^{-1}\nabla_1 u_{12}\partial_{12})F_2(x_1x_2) = 0, \tag{4}$$

где $u_{12} = u(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|)$ – эффективный потенциал. Решение уравнения (4) известно /1/:

$$F_2(x_1 x_2) = F(r_1', v_1') F(r_2', v_2'), \tag{5}$$

где r_i' и v_i' определяются так же, как и в /1/, но на основе парного столкновения для частиц с потенциалом взаимодействия $u(r)$. Эффективный потенциал взаимодействия найдем предельным переходом к равновесным распределениям. В равновесии для двухчастичной ФР из выражения (5) получим:

$$F_2^{(0)}(r, v_1, v_2) = F^{(0)}(v_1) F^{(0)}(v_2) \exp[-u(r)/\Theta],$$

где $F^{(0)}$ – равновесная максвелловская ФР. В равновесии $F_2^{(0)} = g(r) F^{(0)}(v_1) F^{(0)}(v_2)$. Отсюда находим, что эффективный потенциал должен иметь вид $u(r) = -\Theta \ln g(r)$.

Подставляя выражение (5) в первое уравнение цепочки (1), получим замкнутое кинетическое уравнение, совпадающее по форме с уравнением работы /3/, в котором величины r_i' и v_i' определяются из динамики парного столкновения с эффективным потенциалом и которое справедливо в любом порядке разложения по степеням плотности. Воспользовавшись результатами работы /3/ с соответствующими поправками на эффективный потенциал, получим следующие выражения для коэффициентов сдвиговой вязкости η, объемной вязкости κ и теплопроводности λ:

$$\eta = \frac{5\Theta}{16\Omega}\left[\frac{p}{n\Theta} - \frac{n}{12\pi^{3/2}}\left(R^{(15)} - \frac{2}{3}R^{(19)}\right)\right]\left[1 - \frac{n}{10\pi^{3/2}}R^{(6)} + \frac{2\pi n}{15\Theta}\left(\omega^{(1)} - \omega^{(0)}\right)\right] + \frac{n^2}{20\pi^{3/2}}\left(\frac{m}{\Theta}\right)^{1/2} R^{(8)}, \tag{6}$$

$$\kappa = \frac{n^2}{36\pi^{1/2}\Theta^2\Omega}\left(R^{(20)} - \frac{5}{2}R^{(19)}\right)\left(\omega^{(1)} - \omega^{(2)}\right) + \frac{n^2}{18\pi^{3/2}}\left(\frac{m}{\Theta}\right)^{1/2} R^{(21)}, \tag{7}$$

$$\lambda = \frac{75k}{64\Omega}\left[\frac{p}{n\Theta} - \frac{n}{15\pi^{3/2}\Theta}\left(R^{(15)} - R^{(19)}\right)\right]\left[1 - \frac{n}{15\pi^{3/2}\Theta}R^{(6)} + \frac{2\pi n}{15\Theta}\left(\omega^{(1)} - \omega^{(0)} - 5e^{(1)}\right)\right] + \frac{n^2 k}{12\pi^{3/2}}\left(\frac{m}{\Theta}\right)^{1/2} R^{(21)}, \tag{8}$$

где $\Omega = -(1/4\pi^{3/2}\sqrt{\Theta m}) \int \chi(\varphi'/r) \exp(-\vec{\gamma}_0^2)(\vec{\gamma}\vec{\gamma}_0)(\vec{\gamma}_0 r)\, dr d\vec{\gamma}$, $p = n\Theta - (2\pi/3) n^2 \omega^{(0)}$, $\omega^{(k)} = \int g\varphi'(\varphi/\Theta)^k r^3 dr$, $e^{(k)} = \int g\varphi(\varphi/\Theta)^k r^2 dr$, $\vec{\gamma} = (m/4\Theta)^{1/2}(v_2 - v_1)$, $\vec{\gamma}_0 = (m/4\Theta)^{1/2}(v_2' - v_1')$.

Величины $R^{(i)}$, входящие в выражения (6) – (8), получаются из соответствующих выражений работы /1/ заменой $\varphi' \exp(-\varphi/\Theta)$ на $\varphi' g$. В частном случае $\chi = 1$ результаты данной работы могут совпадать с аналогичными результатами работы /3/.

Полученные выражения (6) – (8) могут служить основой для расчетов коэффициентов переноса в плотных газах в произвольном порядке по плотности. В частности, используя вириальное разложение для ПФР, можно получить соответствующие вириальные разложения для коэффициентов переноса.

ЛИТЕРАТУРА

1. Уленбек Дж., Форд Дж. Лекции по статистической механике. М., Мир, 1965.
2. Hoffman D.K., Curtiss C.F. Phys. Fluids, 7, 1887 (1964).
3. Bennet D.E., Curtiss C.F. J. Chem. Phys., **51**, 2811 (1969).
4. Weeks I.D., Chandler D. J. Chem. Phys., **54**, 5237 (1971).

Поступила в редакцию 18 июня 1990 г.