

ВЫВОД УРАВНЕНИЙ ГРЭДОВСКОГО ТИПА И ИЗУЧЕНИЕ ИХ РЕЛАКСАЦИОННЫХ СВОЙСТВ МЕТОДОМ МАКСИМИЗАЦИИ ЭНТРОПИИ

А. М. К о г а н

(Москва)

Рассматривается вывод макроскопических уравнений для неравновесных процессов в разреженном газе путем обрыва цепочки моментных уравнений при помощи распределения максимальной энтропии (п. 1). При описании одноатомного газа используются десятимоментное (п. 2) и тринадцатимоментное (п. 3) приближения. Показано, что метод легко обобщается на случай многоатомного (п. 4), а также вырожденного (п. 5) газа.

Для различных неравновесных процессов находятся неравновесные выражения для энтропии, возникновения энтропии и диссипации энергии, а также для механической энергии малого возмущения.

На простых примерах обсуждается различие полученных систем и обычных систем уравнений навье-стоксовского типа (п. 6).

1. Уравнение Больцмана, дающее микроскопическое описание движения разреженного газа, с одной стороны, достаточно сложно для анализа, а с другой, — содержит в себе информацию о поведении системы, слишком подробную с практической точки зрения [1]. Поэтому обычно используют более грубое описание системы при помощи конечного числа макроскопических величин. В различных приближениях метода Чэпмена — Энскога [2] в качестве таких макроскопических величин выбираются плотность ρ , скорость u_i и энергия E газа, при этом вязкие напряжения σ_{ij} и поток тепла Q_i не являются независимыми, а связываются определенными соотношениями с производными функций u_i и E . В связи с этим метод Чэпмена — Энскога не в состоянии описать собственно релаксационный процесс, в результате которого и устанавливаются отмеченные связи. Показательным в этом отношении является максвелловский пример релаксации напряжений в однородном покоящемся газе. Подобная ограниченность метода Чэпмена — Энскога становится понятной, если учесть, что неравновесные состояния в процессе релаксации должны помимо ρ , u_i и E , характеризоваться и другими независимыми величинами, например, величинами σ_{ij} , Q_i , а может быть и более высокими моментами функции распределения $f(x, v, t)$. При этом дополнительные моменты должны подчиняться релаксационным уравнениям, независимым от уравнений сохранения.

Для получения этих уравнений естественно исходить из эквивалентной уравнению Больцмана бесконечной цепочки моментных уравнений

Максвелла

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0, \quad \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i u_k + P_{ik})}{\partial x_k} = 0 \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial (P_{ik} + \rho u_i u_k)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i u_k u_l + 2Q_{ikl} + P_{ik} u_l + P_{il} u_k + P_{kl} u_i)}{\partial x_l} = J_{ik} \quad \text{и т. д.}$$

$$(P_{ik} = \int m (v_i - u_i) (v_k - u_k) f dv, \quad Q_{ikl} = \int 1/2 m (v_i - u_i) (v_k - u_k) (v_l - u_l) f dv)$$

Здесь J_{ik} означает момент тензора $v_i v_k$ относительно интеграла столкновений. Макроскопическое огрубление цепочки (1.1) осуществляется обрывом ее при помощи той или иной статистической гипотезы относительно вида функции распределения.

Удерживая при обрыве цепочки определенное число выделенных моментов, следует выразить высшие моменты через выделенные. Это осуществляется, как правило, выбором функции распределения, зависящей от выделенных моментов, как от параметров. При этом не учитывается самостоятельное влияние высших моментов на развитие процесса.

Именно так поступает Грэд [3], используя статистическую гипотезу, по которой функция распределения молекул представляется конечным отрезком ряда по ортогональным функциям Эрмита, причем число членов соответствует количеству выделенных моментов данного приближения.

Метод Грэда обладает некоторыми недостатками. Будучи привязан к определенной ортогональной системе функций, он непосредственно не обобщается на многоатомный или вырожденный газ. В каждом новом случае требуется выбор соответствующей ортогональной системы функций, причем метод Грэда не дает принципа для такого выбора.

Другим недостатком метода является следующее обстоятельство. Если вычислить локальную энтропию с помощью распределения Грэда как функцию выделенных моментов, то из грэдовских уравнений нельзя получить в качестве следствия уравнение типа баланса этой энтропии, в результате чего оказывается невозможным доказать возрастание полной грэдовской энтропии изолированного газа со временем.

Ниже рассматривается статистическая гипотеза, свободная от указанных недостатков, но вместе с тем, для одноатомных газов практически мало отличающаяся от грэдовской. Она состоит в том, что среди всех распределений с одними и теми же значениями выделенных моментов данного приближения выбирается распределение максимальной энтропии. В пользу этой гипотезы можно привести следующие чисто эвристические соображения. Система уравнений для выделенных моментов способна сколько-нибудь правдоподобно описывать действительность лишь в том случае, когда реальная функция распределения, изменяясь по уравнению Больцмана, будет успевать, хотя бы приближенно, подстраиваться под статистическую гипотезу. Это означает, что характерное время изменения θ произвольной функции распределения много меньше интервала времени Δt минимально заметного изменения выделенных моментов. В противном случае не было бы никаких оснований предполагать, что распределение вообще отвечает какой-либо статистической гипотезе и нужно было бы использовать уравнение Больцмана, отказавшись от макроскопического описания. На интервале Δt значения выделенных моментов практически не изменяются, кроме того для изолированного газа полная энтропия растет с характерным временем θ ; поэтому в силу большой разницы Δt и θ можно предположить, что к концу интервала макроскопического времени Δt энтропия успевает вырасти до максимальной величины, совместимой с практически постоянными в интервале Δt значениями выделенных моментов. Так как ограничения при максимизации энтропии носят локальный характер (значения моментов задаются

в каждой точке пространства, занятого газом), максимум полной энтропии влечет за собой максимум локальной энтропии в каждой пространственной точке. На возможность подобной статистической гипотезы для случая одноатомного газа указано в работе [4]

2. Наиболее прозрачным примером служит второе гредовское приближение, в котором в качестве «медленных» выделяются следующие десять моментов

$$\rho = \int m f dv, \quad \rho u_i = \int m v_i f dv, \quad P_{ik} = \int m (v_i - u_i)(v_k - u_k) f dv \quad (2.1)$$

Здесь m — означает массу молекулы, P_{ik} — тензор давлений.

Использование лишь десяти моментов означает, что не учитывается влияние теплопроводности и, разумеется, высших моментов.

Максимум энтропии единицы объема

$$\rho S = -k \int f \ln f dv \quad (2.2)$$

где k — постоянная Больцмана, при дополнительных условиях (2.1) легко получить с помощью множителей Лагранжа. Он достигается на функции,

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \frac{\rho}{m (2\pi)^{3/2}} \left(\frac{\rho^3}{\det \| P_{ik} \|} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{\rho}{2} P^{ik} (v_i - u_i)(v_k - u_k) \right\} \quad (2.3)$$

Здесь P^{ik} — элементы матрицы, обратной P_{ik} . Так как $P_{ik} = p \delta_{ik} + \sigma_{ik}$, где $p = 1/3 P_{ii}$ — изотропное давление, (2.3) при $\sigma_{ik} = 0$ переходит в локально-максвелловское распределение. Если считать σ_{ik} малым и разложить (2.3) по σ_{ik} до первого порядка, то получится функция

$$f_{\Gamma}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \frac{\rho}{m (2\pi RT)^{3/2}} \exp \left(-\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2RT} \right) \left[1 + \frac{\sigma_{ik}}{2pRT} (v_i - u_i)(v_k - u_k) \right] \quad (2.4)$$

Здесь R — газовая постоянная, а температура T определена равенством $p = \rho RT$.

Функция (2.4) в точности совпадает с гредовским распределением для второго приближения. Таким образом, (2.3) лишь во втором порядке по напряжениям исправляет функцию Грэда (2.4). Обрыв цепочки (1.1) при помощи (2.3) на десяти моментах дает систему уравнений

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} &= 0, & \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i u_k + P_{ik})}{\partial x_k} &= 0 \\ \frac{\partial (P_{ik} + \rho u_i u_k)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i u_k u_l + P_{ik} u_l + P_{il} u_k + P_{kl} u_i)}{\partial x_l} &= -\frac{p}{\mu} \sigma_{ik} \end{aligned} \quad (2.5)$$

где μ — коэффициент вязкости. Система (2.5) совпадает с системой второго приближения, получающейся методом Грэда. Следует, однако, отметить, что момент тензора $v_i v_k$ относительно интеграла столкновений в правой части (2.5) имеет в точности указанный вид лишь для максвелловских молекул. Для других моделей молекул правая часть в (2.5) представляет

собой первый член разложения точного выражения по σ_{ik} . Для межмолекулярной силы, степенным образом зависящей от межмолекулярного расстояния $F \sim d^{-6}$, можно при помощи (2.3) вычислить квадратичную поправку к правой части (2.5). Эта поправка

$$\frac{s-5}{s-1} \frac{1}{24\mu} (\sigma_{jr}\sigma_{jr}\delta_{ik} - 3\sigma_{ij}\sigma_{jk}) \quad (2.6)$$

вдвое больше грэдовской поправки, вычисленной при помощи (2.4). Здесь сказывается различие (2.3) и (2.4) во втором порядке. Это различие приводит также к несколько другим граничным условиям скольжения. Используя соображения, приведенные в [3], можно получить при помощи (2.3) следующие граничные условия скольжения

$$\sigma_{1i} + \frac{2(1-\alpha)}{(1+\alpha)} u_i \left(\frac{\rho(p+\sigma_{11})}{2\pi} \right)^{1/2} = 0 \quad (i=2, 3) \quad (2.7)$$

Здесь предполагается, что нормаль к элементу поверхности направлена по оси x_1 в положительную сторону; α — доля зеркально отраженных молекул, остальные молекулы отражаются диффузно. Если в (2.7) произвести разложение корня до первого порядка по σ_{11} , то получаются грэдовские условия второго приближения

$$\sigma_{1i} + \frac{2(1-\alpha)}{1+\alpha} u_i \left(\frac{\rho p}{2\pi} \right)^{1/2} \left(1 + \frac{\sigma_{11}}{2\rho} \right) = 0 \quad (i=2, 3) \quad (2.8)$$

Разложение (2.4) функции (2.3) использовалось в работе [5] для получения условия скольжения (2.8), причем автор ограничился нулевым порядком, отбросив $1/2\sigma_{11}/\rho$.

Из формулы (2.2) при помощи (2.3) легко получается выражение энтропии через макроскопические параметры

$$S = -5/2 R \ln \rho + 1/2 R \ln \det \|P_{ik}\| \quad (2.9)$$

В равновесии $P_{ik} = p\delta_{ik}$ и (2.9) переходит в равновесное выражение для энтропии. Рассмотрим изменение энтропии во времени в силу (2.5). Воспользовавшись соотношением $d \ln \det \|P_{ik}\| = P^{ik} dP_{ik}$ из (2.5) и (2.9), легко получить

$$\rho \frac{dS}{dt} = \frac{\partial \rho S}{\partial t} + \frac{\partial \rho S u_i}{\partial x_i} = \frac{R}{6} \frac{\rho p}{\mu} [P_{kk} P^{ll} - 9] \quad (2.10)$$

Пусть p_1, p_2, p_3 — собственные значения положительно определенной матрицы P_{ik} . Тогда собственные значения P^{ik} будут $p_1^{-1}, p_2^{-1}, p_3^{-1}$.

Отсюда

$$P_{kk} P^{ll} - 9 = (p_1 + p_2 + p_3) \left(\frac{1}{p_1} + \frac{1}{p_2} + \frac{1}{p_3} \right) - 9 = \\ = \left[\left(\frac{p_1}{p_2} \right)^{1/2} - \left(\frac{p_2}{p_1} \right)^{1/2} \right]^2 + \left[\left(\frac{p_1}{p_3} \right)^{1/2} - \left(\frac{p_3}{p_1} \right)^{1/2} \right]^2 + \left[\left(\frac{p_2}{p_3} \right)^{1/2} - \left(\frac{p_3}{p_2} \right)^{1/2} \right]^2$$

Поэтому правая часть (2.10) неотрицательна и равна нулю лишь, если $P_{ik} = p\delta_{ik}$. Если теперь проинтегрировать (2.10) по объему газа и учесть что на границе $u_n = 0$, получим, что полная энтропия может только расти.

Легко видеть, что, так как при выводе (2.5) не учитывалась теплопроводность, в (2.10) отсутствует энтропийный потоковый член, связанный с теплопроводностью, и газ оказывается автоматически теплоизолированным от окружения.

Нетрудно показать, что (2.9) единственная энтропия, отвечающая системе (2.5). Говоря точнее, если на $S(\rho, P_{ik})$ наложить требования:

а) как следствие (2.5) имеет место баланс (типа (2.10)), позволяющий установить рост полной энтропии.

б) в состоянии равновесия выражение для S переходит в известную формулу для равновесной энтропии, то функция $S(\rho, P_{ik})$ совпадает с (2.9). Действительно, в силу (2.5)

$$\rho \frac{dS}{dt} = -\rho \left(2P_{kl} \frac{\partial S}{\partial P_{ik}} + P_{jk} \frac{\partial S}{\partial P_{jk}} \delta_{il} + \rho \frac{\partial S}{\partial \rho} \delta_{il} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_l} - \frac{\rho p \sigma_{jk}}{\mu} \frac{\partial S}{\partial P_{jk}} \quad (2.11)$$

Очевидно, что при данных ρ и P_{ik} можно подобрать u_i так, чтобы интеграл от правой части по объему имел бы любой знак, за исключением случая, когда

$$2P_{kl} \frac{\partial S}{\partial P_{ik}} + P_{jk} \frac{\partial S}{\partial P_{jk}} \delta_{il} + \rho \frac{\partial S}{\partial \rho} \delta_{il} = 0 \quad (2.12)$$

Из (2.12) легко получить (взяв предварительно след от (2.12)), что

$$\frac{\partial S}{\partial P_{ik}} = -\frac{1}{5} \rho \frac{\partial S}{\partial \rho} P^{ik} \quad (2.13)$$

Отсюда

$$dS = -\frac{1}{5} \rho \frac{\partial S}{\partial \rho} d[\ln \det \|P_{ik}\| - 5 \ln \rho], \quad \text{или} \quad S = F(\ln \det \|P_{ik}\| - 5 \ln \rho)$$

Условие б) позволит теперь определить вид функции F и установить, что S совпадает с (2.9).

Таким образом, лишь гипотеза максимальной энтропии дает правильное выражение энтропии (2.9), однозначно соответствующей системе (2.5). Разложение (2.9) по σ_{ik} до второго порядка дает

$$S = -\frac{5}{2} R \ln \rho + \frac{3}{2} R \ln p - \frac{1}{4} R \sigma_{ik} \sigma_{ik} p^{-2} \quad (2.14)$$

При помощи же (2.4) получается неправильной уже квадратичная поправка ($-\frac{1}{2} R \sigma_{ik} \sigma_{ik} p^{-2}$) к равновесной энтропии.

Разложив вблизи равновесия правую часть (2.10) по σ_{ik} , легко получить, что возникновение энтропии в единице объема равно $\frac{1}{2} \sigma_{ik} \sigma_{ik} / \mu T$, а диссипация энергии единицы объема

$$\rho T \frac{dS}{dt} = \frac{\sigma_{ik} \sigma_{ik}}{2\mu} \quad (2.15)$$

Рассмотрим малые возмущения состояния покоя с плотностью ρ_0 и давлением p_0 . Линеаризация (2.5) дает

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho_0 \frac{\partial u_k}{\partial x_k} = 0, \quad \rho_0 \frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} = 0 \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{5}{3} \rho_0 \frac{\partial u_k}{\partial x_k} = 0, \quad \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial t} + \rho_0 \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) + \frac{\rho_0}{\mu} \sigma_{ik} = 0$$

Умножим второе уравнение на u_i , третье — на $^{3/5}p / p_0$, четвертое на $^{1/2}\sigma_{ik} / p_0$ и сложим эти уравнения. Если использовать связь $p = ^{5/3}p_0\rho/\rho_0$, не нарушающуюся системой (2.16), то легко получить, что

$$\frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{\rho_0 u^2}{2} + \frac{5}{6} \frac{p_0}{\rho_0^2} \rho^2 + \frac{\sigma_{ik} \sigma_{ik}}{4p_0} \right\} + \frac{\partial (p\delta_{ik} + \sigma_{ik}) u_i}{\partial x_k} + \frac{\sigma_{ik} \sigma_{ik}}{2\mu} = 0 \quad (2.17)$$

Второй член в (2.17) есть работа возмущения в единицу времени, третий член в силу (2.15) — диссипация энергии. Поэтому выражение под знаком производной по времени следует отождествить с механической энергией возмущения, так что (2.17) представляет собой баланс механической энергии возмущения. Первые два члена в выражении для механической энергии — известные равновесные члены энергии звуковой волны, третий член — энергия, обусловленная неравновесным вязким процессом.

Если в интеграле столкновений стоит большой параметр, то μ можно формально считать малым параметром. Разлагая решение в ряд по малому параметру, из (2.16) получим в первом приближении

$$\sigma_{ik} = -\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) \quad (2.18)$$

Возникновение энтропии перейдет тогда в выражение, соответствующее термодинамике необратимых процессов

$$\rho \frac{dS}{dt} = \frac{\mu}{2T} \sum_{i,k} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right)^2$$

3. Для учета теплопроводности нужно, кроме (2.1), выделить еще моменты, соответствующие потоку тепла

$$Q_i = \int \frac{m (v_i - u_i) (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2} f d\mathbf{v} \quad (3.1)$$

При применении изложенного метода в данном случае имеется некоторая особенность. Следы этой особенности видны уже в гредовской функции распределения для 13-моментного приближения

$$f = f_0 \left\{ 1 + \frac{\sigma_{ij}}{2pRT} (v_i - u_i) (v_j - u_j) - \frac{Q_i (v_i - u_i)}{pRT} \left[1 - \frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{5RT} \right] \right\} \quad (3.2)$$

где f_0 — максвелловское распределение. При достаточно больших v_i (по модулю) функция (3.2) становится отрицательной. Это обстоятельство, очевидно, не вносит существенной трудности, если Q_i достаточно малы. Дело заключается в том, что для изолированного газа с полной энергией H скорость молекулы ограничена: $v^2 \leq 2H/m$. В этой области скоростей при достаточно малых Q_i (3.2) будет положительной. Вне этой области f_0 оказывается весьма малой, так что отрицательные значения f практически не сказываются и формулой (3.2) можно пользоваться в бесконечном диапазоне скоростей. Максимизация энтропии в области $-(2H/m)^{1/2} \leq v_i \leq (2H/m)^{1/2}$ при дополнительных условиях (2.1) и (3.1) приводит к функции

$$f = c \exp [-\alpha_i (v_i - u_i) (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 - \beta (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 - \gamma_{ik} (v_i - u_i) (v_k - u_k)] \quad (3.3)$$

При использовании (3.3) следует учесть ограниченность скорости, так как в бесконечном диапазоне (3.3) вообще не интегрируема. При достаточно малых α_i и γ_{ik} можно разложить (3.3) в указанной области до первого порядка по этим величинам и использовать это разложение уже в бесконечном диапазоне. Если теперь связать

$\alpha_i, \beta, \gamma_{ik}$, с выделенными моментами при помощи (2.1) и (3.1), то получится формула (3.2). Грэдовская функция (3.2), как и в случае десяти моментов, в принципе не дает возможности вычислить уже квадратичных поправок к энтропии. Преимущество (3.3) заключается в возможности разлагать это выражение до более высоких порядков по α_i и γ_{ik} . Таким путем можно получить энтропию, например, до третьего порядка

$$S = -\frac{5}{2} R \ln \rho + \frac{3}{2} R \ln p - \frac{1}{4} R \frac{\sigma_{ik}\sigma_{ik}}{p^2} + \frac{1}{6} R \frac{\sigma_{ik}\sigma_{kl}\sigma_{li}}{p^3} - \frac{R}{5} \frac{\rho Q_i Q_i}{p^3} + \frac{9R}{25} \frac{\rho \sigma_{ik} Q_i Q_k}{p^4} \quad (3.4)$$

В силу 13-моментных уравнений [3] для S имеет место с точностью до второго порядка следующий баланс:

$$\frac{\partial \rho S}{\partial t} + \frac{\partial \rho S u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{Q_i}{T} - \frac{2}{5} \frac{\sigma_{il} Q_i}{pT} \right] = \frac{\sigma_{ik}\sigma_{jk}}{2\mu T} + \frac{Q_i Q_i}{\kappa T^2} \quad (3.5)$$

где κ — коэффициент теплопроводности.

Баланс механической энергии малого возмущения в силу линеаризованных 13-моментных уравнений имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{\rho_0 u^2}{2} + \frac{5}{6} \frac{p_0}{\rho_0^2} \rho^2 + \frac{3}{4p_0} \left[p - \frac{5}{3} \frac{p_0}{\rho_0} \rho \right] \left[p - \frac{1}{3} \frac{p_0}{\rho_0} \rho \right] + \frac{\sigma_{ik}\sigma_{ik}}{4p_0} + \frac{\rho_0}{5p_0^2} Q_i Q_i \right\} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ u_i (p\delta_{ij} + \sigma_{ij}) + \frac{2}{5p_0} \sigma_{ij} Q_i + \frac{T}{T_0} Q_j \right\} + \frac{\sigma_{ij}\sigma_{ij}}{2\mu} + \frac{Q_i Q_i}{\kappa T_0} = 0 \quad (3.6)$$

Член, содержащий квадратные скобки в выражении для механической энергии, обусловлен тем, что при наличии теплопроводности неадиабатичность процесса в элементе газа имеет место, уже в первом порядке по отклонениям.

4. Приступая к изучению газа, состоящего из молекул, обладающих внутренними степенями свободы, рассмотрим для начала случай шероховатых сферических молекул. Если определяющим является процесс второй вязкости, то в число выделенных моментов нужно включить отдельно, например, поступательную энергию

$$\rho = \int m f d\mathbf{v} d\boldsymbol{\omega}, \quad \rho u_i = \int m v_i f d\mathbf{v} d\boldsymbol{\omega} \\ \rho E = \int [1/2 m (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 + 1/2 I \boldsymbol{\omega}^2] f d\mathbf{v} d\boldsymbol{\omega}, \quad \rho \Pi = \int 1/2 m (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 f d\mathbf{v} d\boldsymbol{\omega} \quad (4.1)$$

Здесь $\boldsymbol{\omega}$ — угловая скорость молекулы, I — ее момент инерции, Π — поступательная часть энергии. Максимум энтропии при условиях (4.1) достигается на функции

$$f = \frac{\rho}{(2\pi)^3} m^{1/2} (I\alpha\beta)^{3/2} \exp \left[-\frac{m\alpha}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 - \frac{I\beta}{2} \boldsymbol{\omega}^2 \right] \\ \left(\alpha = \frac{3}{2m\Pi}, \quad \beta = \frac{3}{2m(E - \Pi)} \right) \quad (4.2)$$

Здесь внутренние и поступательные степени свободы находятся при разных температурах, что соответствует предположению, высказанному в работе [6]. Формулы, аналогичные (4.1) и (4.2), легко написать для любого конкретного вида внутренних степеней свободы. В общем случае

удобно вместо E и Π ввести равновесное давление $p = (\gamma - 1) \rho E$ и кинетический добавок к нему $\varepsilon = \rho [^{2/3}\Pi - (\gamma - 1) E]$, где $\gamma = c_p / c_v$ — показатель адиабаты для данной модели молекулы. Обрыв при помощи функции максимальной энтропии цепочки моментных уравнений, следующей из соответствующего данной модели уравнения Больцмана, приводит к системе уравнений релаксационной газодинамики

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} &= 0, & \rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial (p + \varepsilon)}{\partial x_i} &= 0 \\ \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} + (\gamma - 1)(p + \varepsilon) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} &= 0 & (4.3) \\ \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \varepsilon u_i}{\partial x_i} + \left(\frac{5}{3} - \gamma\right)(p + \varepsilon) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\varepsilon}{\tau} &= 0 \end{aligned}$$

Для модели шероховатых сфер $\gamma = 4/3$, а время релаксации τ можно вычислить точно

$$\frac{1}{\tau} = \frac{32}{3} \frac{\sigma^2 \sqrt{\pi}}{m} \frac{K}{(K+1)^2} \sqrt{\rho(p + \varepsilon)} \quad \left(K = \frac{I}{m\sigma^2}\right) \quad (4.4)$$

Здесь σ — диаметр молекулы. Если вблизи равновесия пренебречь ε по сравнению с p , то (4.4) совпадает с выражением, полученным Колером [2]. Для произвольной модели молекулы вычисление τ в явном виде затруднительно. При малых ε τ можно считать функцией лишь от ρ и p и учитывать феноменологически.

Из функции максимальной энтропии можно получить выражение энтропии через ρ , p и ε

$$S = \frac{3}{2} R \ln(p + \varepsilon) + \frac{5 - 3\gamma}{2(\gamma - 1)} R \ln \left[p - \frac{3(\gamma - 1)}{5 - 3\gamma} \varepsilon \right] - \frac{\gamma}{\gamma - 1} R \ln \rho \quad (4.5)$$

Из неравенств $0 < \Pi < E$ следует, что выражения под логарифмами положительны. В силу (4.3) имеет место следующий баланс энтропии:

$$\frac{\partial \rho S}{\partial t} + \frac{\partial \rho S u_i}{\partial x_i} = \frac{R \rho \varepsilon^2}{\tau \left(\frac{5}{3} - \gamma\right) (p + \varepsilon) \left[p - 3\varepsilon(\gamma - 1) / (5 - 3\gamma) \right]} \quad (4.6)$$

Точно так же, как для 10-моментных уравнений, можно проверить, что энтропия (4.5) однозначно соответствует системе (4.3). Линеаризация (4.3) дает

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho_0 \frac{\partial u_i}{\partial x_i} &= 0, & \rho_0 \frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial (p + \varepsilon)}{\partial x_i} &= 0 \\ \frac{\partial p}{\partial t} + \gamma \rho_0 \frac{\partial u_i}{\partial x_i} &= 0, & \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \left(\frac{5}{3} - \gamma\right) \rho_0 \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\varepsilon}{\tau_0} &= 0 \end{aligned} \quad (4.7)$$

Если τ_0 — малый параметр, то, разлагая формально решение в ряд по τ_0 , получим в первом приближении обычную связь

$$\varepsilon = -\xi \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (\xi = \left(\frac{5}{3} - \gamma\right) \rho_0 \tau_0) \quad (4.8)$$

Здесь ξ — коэффициент второй вязкости.

В силу (4.6) возникновение энтропии в единице объема с точностью до второго порядка по ε равно $\varepsilon^2 / \xi T_0$, а диссипация энергии ε^2 / ξ . Умножая второе уравнение системы (4.7) на u_i , третье — на $p / \gamma p_0$, четвертое на $\varepsilon / (\frac{5}{3} - \gamma) p_0$ и складывая, получим баланс механической энергии возмущения

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\rho_0 u^2}{2} + \frac{\gamma p_0}{2\rho_0^2} \rho^2 + \frac{\varepsilon^2}{2(\frac{5}{3} - \gamma) p_0} \right] + \frac{\partial (p + \varepsilon) u_i}{\partial x_i} + \frac{\varepsilon^2}{\xi} = 0 \quad (4.9)$$

В случае, когда τ_0 — малый параметр, т. е. имеется связь (4.8), уравнение (4.9) переходит в обычный баланс энергии звуковой волны для процесса второй вязкости.

Чтобы учесть процессы первой и второй вязкости одновременно, в (4.1) вместо $\rho\Pi$ нужно задать

$$P_{ik} = (p + \varepsilon) \delta_{ik} + \sigma_{ik} = \int m (v_i - u_i) (v_k - u_k) f dv d\omega$$

Здесь p — давление, связанное с энергией E равновесным соотношением, ε — кинетический добавок, обусловленный второй вязкостью, а σ_{ik} — напряжения, характеризующие процесс первой вязкости.

Максимизируя энтропию и обрывая при помощи полученного распределения соответствующую цепочку моментных уравнений, приходим к системе

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} &= 0, & \rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial (p\delta_{ik} + \varepsilon\delta_{ik} + \sigma_{ik})}{\partial x_k} &= 0 \\ \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} + (\gamma - 1) [(p + \varepsilon) \delta_{ik} + \sigma_{ik}] \frac{\partial u_i}{\partial x_k} &= 0 \\ \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial t} + \frac{\partial \sigma_{ik} u_l}{\partial x_l} + \sigma_{kl} \frac{\partial u_i}{\partial x_l} + \sigma_{il} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \sigma_{rs} \frac{\partial u_r}{\partial x_s} + \\ + (p + \varepsilon) \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right] + \frac{p\sigma_{ik}}{\mu} &= 0 \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \varepsilon u_l}{\partial x_l} + \left(\frac{5}{3} - \gamma \right) [(p + \varepsilon) \delta_{ik} + \sigma_{ik}] \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{1}{\xi} \left(\frac{5}{3} - \gamma \right) p\varepsilon = 0$$

Моменты относительно интеграла столкновений в (4.10) учтены до первого порядка по ε и σ_{ik} . Феноменологические коэффициенты μ и ξ вычисляются лишь в исключительных случаях моделей молекул. Энтропия единицы массы, соответствующая системе (4.10), оказывается равной

$$S = \frac{R}{2} \ln \det \| P_{ik} \| + R \frac{5 - 3\gamma}{2(\gamma - 1)} \ln \left[p - \frac{3(\gamma - 1)}{5 - 3\gamma} \varepsilon \right] - \frac{R\gamma}{\gamma - 1} \ln \rho \quad (4.11)$$

Из системы, получающейся в результате линеаризации (4.10), легко вывести баланс механической энергии возмущения

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\rho_0 u^2}{2} + \frac{\gamma p_0}{2\rho_0^2} \rho^2 + \frac{\sigma_{ik} \sigma_{ik}}{4\rho_0} + \frac{\varepsilon^2}{2(\frac{5}{3} - \gamma) p_0} \right] + \\ + \frac{\partial (p\delta_{ik} + \varepsilon\delta_{ik} + \sigma_{ik}) u_i}{\partial x_k} + \frac{\sigma_{ik} \sigma_{ik}}{2\mu} + \frac{\varepsilon^2}{\xi} = 0 \end{aligned} \quad (4.12)$$

К обычному выражению энергии звуковой волны здесь прибавляются члены, обусловленные неравновесными процессами первой и второй вязкости.

5. В качестве примера применение метода к вырожденному газу рассмотрим теплопроводность простой решетки диэлектрика. Пусть $\omega_{\mathbf{k}}^l$ ($l = 1, 2, 3$) — зависимость собственных частот кристалла от волнового вектора \mathbf{k} для трех значений поляризации волны смещения. Если $n_{\mathbf{k}}^l$ — число фононов с волновым вектором \mathbf{k} и поляризацией l , то энергия и поток тепла запишутся в виде [7]

$$E = \sum_{l, \mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}}^l \rangle h\omega_{\mathbf{k}}^l = \sum_n W(\dots, n_{\mathbf{k}}^l, \dots) \sum_{l, \mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^l h\omega_{\mathbf{k}}^l \quad (5.1)$$

$$Q_i = \sum_{l, \mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}}^l \rangle h\omega_{\mathbf{k}}^l \frac{\partial \omega_{\mathbf{k}}^l}{\partial k_i} = \sum_n W(\dots, n_{\mathbf{k}}^l, \dots) \sum_{l, \mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^l h\omega_{\mathbf{k}}^l \frac{\partial \omega_{\mathbf{k}}^l}{\partial k_i}$$

где $W(\dots, n_{\mathbf{k}}^l, \dots)$ — вероятность данного распределения чисел фононов, а $\langle n_{\mathbf{k}}^l \rangle$ — среднее число фононов. В (5.1) суммирование по всем $n_{\mathbf{k}}^l$ ведется по целым числам от 0 до ∞ в соответствии со статистикой Бозе — Эйнштейна для фононов. Максимизируя энтропию — $k \langle \ln W \rangle$ при условиях (5.1), получим

$$W(\dots, n_{\mathbf{k}}^l, \dots) = \prod_n C_{\mathbf{k}}^l \exp \left[- \left(\beta h\omega_{\mathbf{k}}^l + \sum_i \alpha_i h\omega_{\mathbf{k}}^l \frac{\partial \omega_{\mathbf{k}}^l}{\partial k_i} \right) n_{\mathbf{k}}^l \right] \quad (5.2)$$

где β и α_i — множители Лагранжа, а $C_{\mathbf{k}}^l$ — нормировочная константа. Из (5.2) видно, что $n_{\mathbf{k}}^l$ — независимы. Из (5.2) с учетом нормировки вероятности на единицу легко получить, что

$$\langle n_{\mathbf{k}}^l \rangle = \left[\exp \left(\beta h\omega_{\mathbf{k}}^l + \sum_i \alpha_i h\omega_{\mathbf{k}}^l \frac{\partial \omega_{\mathbf{k}}^l}{\partial k_i} \right) - 1 \right]^{-1} \quad (5.3)$$

Это равенство при $\alpha_i = 0$ переходит в равновесное распределение Бозе для фононов. В (5.3) величины β и α_i при помощи (5.1) выражаются через макроскопические параметры E и Q . Из кинетического уравнения [7]

$$\frac{\partial \langle n_{\mathbf{k}}^l(\mathbf{x}) \rangle}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \omega_{\mathbf{k}}^l}{\partial k_i} \frac{\partial \langle n_{\mathbf{k}}^l(\mathbf{x}) \rangle}{\partial x_i} = J_{\mathbf{k}}^l \quad (5.4)$$

где $J_{\mathbf{k}}^l$ — «интеграл столкновений» фононов, обусловленный ангармоническими членами в потенциальной энергии, примесями или другими дефектами структуры кристалла, следует цепочка уравнений

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial Q_i}{\partial x_i} = 0, \quad \frac{\partial Q_i}{\partial t} + \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} = L_j \quad \text{и т. д.} \quad (5.5)$$

Здесь

$$T_{ij}(\mathbf{x}) = \sum_{l, \mathbf{k}} h\omega_{\mathbf{k}}^l \frac{\partial \omega_{\mathbf{k}}^l}{\partial k_i} \frac{\partial \omega_{\mathbf{k}}^l}{\partial k_j} \langle n_{\mathbf{k}}^l(\mathbf{x}) \rangle, \quad L_i = \sum_{l, \mathbf{k}} h\omega_{\mathbf{k}}^l \frac{\partial \omega_{\mathbf{k}}^l}{\partial k_i} J_{\mathbf{k}}^l$$

Обрыв системы (5.5) осуществляется при помощи (5.3). Явный вид зависимости T_{ij} от E и Q_i можно получить в некоторых предельных случаях. Будем считать поток тепла малым и выпишем лишь линейное приближение к системе. Кроме того, ограничимся случаем низких температур (большое β). В этом случае играют роль лишь малые частоты $\omega_{\mathbf{k}}^l$. Пусть

$$\theta_i^l(\mathbf{n}) = \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \frac{\partial \omega_{\mathbf{k}}^l}{\partial k_i}$$

где $k \rightarrow 0$ по направлению, заданному единичным вектором \mathbf{n} . При малых частотах число колебаний в телесном угле $d\mathbf{n}$ обратного пространства $\sim \omega^2$, т. е.

$$Z^l(\omega, \mathbf{n}) d\mathbf{n} = a^l(\mathbf{n}) \omega^2 d\mathbf{n}$$

Легко показать, что тогда $T_{ij} = A_{ij}E$, где

$$A_{ij} = \sum_l \int \theta_i^l \theta_j^l a^l d\mathbf{n} \quad \left(\sum_l \int a^l d\mathbf{n} \right)^{-1} \quad (5.6)$$

Система уравнений для теплопроводности при низких температурах запишется в следующем виде:

$$\frac{dE}{dt} + \operatorname{div} \mathbf{Q} = 0, \quad \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + A \operatorname{grad} E + c_v A \lambda^{-1} \mathbf{Q} = 0 \quad (5.7)$$

Тензор теплопроводности λ в (5.7) учтен феноменологически. Тензор A согласно (5.6) зависит исключительно от свойств решетки. Если время релаксации мало (при определенных частотах изменений физических параметров), то членом $\partial \mathbf{Q} / \partial t$ можно пренебречь, так что

$$\mathbf{Q} = -c_v^{-1} \lambda \operatorname{grad} E = -\lambda \operatorname{grad} T \quad (5.8)$$

Поэтому первое уравнение системы (5.7) переходит в обычное уравнение теплопроводности в твердом теле. Однако при низких температурах могут встретиться случаи, когда длина свободного пробега велика, и нужно пользоваться полной системой уравнений (5.7).

Энтропия S с точностью до второго порядка по \mathbf{Q} имеет вид

$$S = S_0(E) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S_0}{\partial E^2} (A^{-1} \mathbf{Q}, \mathbf{Q}) = S_0 - \frac{1}{2c_v T} (A^{-1} \mathbf{Q}, \mathbf{Q}) \quad (5.9)$$

где $S_0(E)$ — равновесная энтропия [7], A^{-1} — тензор, обратный A , а скобка означает скалярное произведение. В силу (5.7) имеет место с точностью до второго порядка баланс энтропии (5.9)

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \operatorname{div} \frac{\mathbf{Q}}{T} = \frac{1}{T^2} (\lambda^{-1} \mathbf{Q}, \mathbf{Q}) \quad (5.10)$$

Если имеется связь (5.8), то (5.10) переходит в обычный баланс энтропии, который дает термодинамика необратимых процессов для случая теплопроводности в твердом теле.

6. Рассмотренная гипотеза носит характер рецепта, поэтому нельзя сделать определенных заключений относительно области применимости получающихся уравнений. Судить об их ценности приходится путем изучения их свойств. Было показано, что этим уравнениям соответствуют определенные выражения неравновесной энтропии. Баланс энтропии, вытекающий из самих уравнений, позволяет вычислить диссипацию энергии. В случае малых возмущений имеется возможность определить неравновесное выражение механической энергии и вывести уравнение для ее баланса.

В низкочастотном процессе, когда время релаксации можно считать малым, уравнения и указанные балансы переходят в известные уравнения и балансы, соответствующие термодинамике необратимых процессов. Поэтому интересно рассмотреть высокочастотные процессы.

Плоская монохроматическая волна удовлетворяет системе (4.7), если частота ω и волновое число k связано дисперсионным соотношением

$$k = \omega \sqrt{1 - i\omega\tau_0 (\gamma\rho_0 / \rho_0 - 5i\omega\rho_0\tau_0 / 3\rho_0)^{-1/2}} \quad (6.1)$$

Из (6.1) видно, что волны с большими частотами имеют скорость распространения, стремящуюся к $\sqrt{5/3} \rho_0 / \rho_0$. Это — физически естественный результат, так как

высокочастотные колебания не успевают возбудить внутренние степени свободы и молекулы выступают здесь как твердые шары. Обычные уравнения для второй вязкости, учитывающие (4.8), уступают в этом отношении системе (4.7).

В качестве другого примера рассмотрим малые колебания пластины, ограничивающей полубесконечное пространство с газом, в своей собственной плоскости. В этом случае в газ распространяется поперечная затухающая волна. Применение уравнений Навье — Стокса дает, как известно [8], следующее выражение для глубины проникновения волны с частотой ω

$$\delta = \sqrt{2\mu / \rho_0\omega} \quad (6.2)$$

Формула (6.2) показывает, что $\delta \rightarrow 0$ при $\omega \rightarrow \infty$, т. е. высокие частоты «вытесняются» на поверхность. Из (2.16) для данной задачи легко получить систему

$$\rho_0 \frac{\partial u_1}{\partial t} + \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial x_2} = 0, \quad \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial t} + \rho_0 \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\rho_0}{\mu} \sigma_{12} = 0 \quad (6.3)$$

где индекс 1 означает направление колебания пластины, а 2 — направление нормали к пластине. Дисперсионное соотношение для системы (6.3), связывающее действительное ω с комплексным k , имеет вид

$$\rho_0 k^2 = \rho_0 \omega (\omega + ip_0 / \mu) \quad (6.4)$$

Из (6.4) следует, что

$$\delta = (\text{Im } k)^{-1} \rightarrow 2\mu / \sqrt{\rho_0 p_0} \sim L \quad \text{при } \omega \rightarrow \infty \quad (6.5)$$

где L — длина свободного пробега. Качественно этот результат представляется весьма естественным. Таким образом, видим, что хотя уравнения гредовского типа описывают газ как сплошную среду, они способны отразить (по крайней мере, качественно) эффекты, разыгрывающиеся на расстояниях порядка длины свободного пробега. Аналогичное сравнение системы (5.7) и обычного уравнения Фурье можно сделать для случая высокочастотной волны теплопроводности в твердом теле.

Поступила 4 VII 1964

ЛИТЕРАТУРА

1. T r u e s d e l l C. La crise actuelle dans la théorie cinétique des gaz J. de Math pures et appliquées. Neuvième Serie. 1958, v. 37, N 2, p. 103.
2. Ч э п м е н С., К а у л и н г Т. Математическая теория неоднородных газов. Изд-во иностр. литер. 1960.
3. G r a d H. On the kinetic theory of rarefied gases. Comm. on Pure and Appl. Math. 1949, v. 2, N 4 (Русск. пер. Механика, 1952, вып. 4, 5).
4. К о г а Т. A proposal for Fundamental Equations of Dynamics of Gases under High Stress. J. Chem. Phys. 1954, v. 22, N 10.
5. Э п ш т е й н П. С. О сопротивлении сфер при движении в газах. Сб. Газовая динамика. Изд-во иностр. лит., 1950.
6. W o o d W., K i r k w o o d J. Hydrodynamics of a Reacting and Relaxing Fluid. J. Appl. Phys. 1957, v. 28, N 4.
7. Л е й б ф р и д Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. Физматгиз., М.—Л., 1963.
8. Л а н д а у Л. Д., Л и ф ш и ц Е. М. Механика сплошных сред. Гостехтеоретиздат., 1954.