Прикладная математика и механика. Том 49, вып. 4, 1985

УДК 532.582.7; 541.12.012

ФЛУКТУАЦИОННАЯ ГИДРОДИНАМИКА БРОУНОВСКОГО ДВИЖЕНИЯ ЧАСТИЦЫ В НЕПОДВИЖНОМ ДИСПЕРСНОМ СЛОЕ

Башкиров А. Г.

Рассматривается влияние возмущения, которое оказывает нерегулярная решетка из случайно размещенных в пространстве неподвижных сферических частиц на броуновскую диффузию взвешенной частицы в потоке жидкости, пронизывающей эту решетку. Наличие неподвижных частиц двояким образом сказывается на значении коэффициента поперечной (по отношению к потоку) диффузии: с одной стороны — снижает его в соответствии с увеличением коэффициента вязкого трения (по сравнению с коэффициентом Стокса), а с другой — увеличивает его вследствие влияния случайного поля скоростей, порождаемого при обтекании потоком случайно расположенных частиц. Вывод уравнения конвективной диффузии дается на основе уравнения Фоккера—Планка для функции распределения. Полученное стохастическое уравнение диффузии (типа уравнения Ланжевена) со случайным полем скоростей решается методом функции Грина, откуда находится искомый коэффициент диффузии. Выявлены ошибки, допущенные при решении аналогичной задачи в [1].

Флуктуационная гидродинамика броуновского движения частицы в однородной вязкой жидкости была рассмотрена в работе [2], где было, в частности, получено выражение для коэффициента сопротивления частицы через флуктуационные характеристики жидкости. Позже [3] было исследовано влияние гидродинамических флуктуаций на диффузию частицы в однородной жидкости и показано, что коэффициент диффузии крупной (по сравнению с межмолекулярным расстоянием) частицы целиком определяется тепловыми флуктуациями поля скоростей жидкости. Этот результат нашел подтверждение также и в микроскопической кинетической теории броуновского движения [4, 5], где было получено выражение типа формулы Кубо для коэффициента сопротивления крупной частицы через флуктуации тензора напряжений жидкости и показано, что в случае несжимаемой вязкой жидкости из этого выражения следует известная формула Стокса.

Здесь будет исследовано влияние флуктуационной гидродинамики на диффузию взвешенной в ней частицы. Гидродинамические флуктуации порождаются при протекании жидкости со скоростью $\mathbf{v}_0$ через разреженную систему случайно расположенных неподвижных частиц. Эти флуктуации налагаются на тепловые флуктуации скорости жидкости и приводят к увеличению коэффициента диффузии взвешенной частицы. Анализ этого эффекта составляет цель данной работы.

1. Уравнение диффузии броуновской частицы. При выводе диффузионного уравнения будем исходить из полученного в [6] кинетического уравнения Фоккера — Планка для N-частичной функции распределения $f^N(\{\mathbf{R}_i, \mathbf{P}_i\}, t)$ координат и импульсов частиц с массами M_i, взвешенных в вязкой жидкости

$$\frac{\partial f^N}{\partial t}+\sum_i\left[\frac{\mathbf{P}_i}{M_i}\frac{\partial f^N}{\partial \mathbf{R}_i}+(\mathbf{F}_i^h+\mathbf{F}_i^A)\frac{\partial f^N}{\partial \mathbf{P}_i}\right]=$$
$$=\sum_{ij}\frac{\partial}{\partial \mathbf{P}_i}\xi_{ij}\left[\left(\frac{\mathbf{P}_j}{M_j}-\mathbf{v}_{0j}\right)f^N+kT\frac{\partial f^N}{\partial \mathbf{P}_j}\right] \tag{1.1}$$

где $\mathbf{F}_i^h$ — упругая сила потенциального взаимодействия (типа твердых сфер) между частицами, $\mathbf{F}_i^A={}^4/_3\pi a_i^3\nabla p_0$ — архимедова сила, действующая на частицу радиуса a_i в жидкости с градиентом давления ∇p_0, $\mathbf{v}_{0j}$ — скорость жидкости, не возмущенной частицами, в точке $\mathbf{R}_j$, ξ_{ii} — коэффициент сопротивления i-й частицы, ξ_{ij} $(i \neq j)$ — коэффициенты, описывающие гидродинамическое взаимодействие между частицами. Последние совпадают с коэффициентами, входящими в выражение для силы, действующей на частицу в системе частиц, движущихся со скоростями $\mathbf{V}_i = \mathbf{P}_i/M_i$ в вязкой жидкости

$$\mathbf{F}_i = -\sum_j \xi_{ij}(\mathbf{V}_j - \mathbf{v}_{0j}) \tag{1.2}$$

В рассматриваемом здесь случае положения всех частиц, кроме одной $(i = 1)$, фиксированы, т. е. $\mathbf{V}_i = \mathbf{V}_1\delta_{1i}$, где δ_{ij} — символ Кронекера. Скорость невозмущенного потока $\mathbf{v}_0$ для простоты будем считать не зависящей от координаты и направленной вдоль оси z.

Уравнение диффузии броуновской частицы получим как первое моментное уравнение кинетического уравнения (1.1) путем интегрирования правой и левой его частей по координатам всех неподвижных частиц и импульсам всех частиц. Это дает

$$\frac{\partial}{\partial t}c + \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}_1}c\mathbf{v}_0 + \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}_1}c\mathbf{V}_d = 0 \tag{1.3}$$

$$c(\mathbf{R}_1, t) = \langle 1 \rangle, \quad c(\mathbf{R}_1, t)\,\mathbf{V}_d(\mathbf{R}_1, t) = \langle \mathbf{P}_1/M - \mathbf{v}_0 \rangle$$

$$\langle A \rangle \equiv \int d\mathbf{R}_2 \ldots d\mathbf{R}_N\, d\mathbf{P}_1 \ldots d\mathbf{P}_N A f^N$$

Второе слагаемое в левой части уравнения (1.3) описывает конвективный перенос частиц, а третье — диффузионный. Поскольку диффузионная скорость $\mathbf{V}_d$ броуновской частицы неизвестна, найденное уравнение незамкнуто. Для его замыкания воспользуемся вторым моментным уравнением, которое получается из (1.1) путем умножения всех его членов на $(\mathbf{P}_1 - M_1\mathbf{v}_0)$ и последующего интегрирования по $\mathbf{R}_2, \ldots, \mathbf{R}_N, \mathbf{P}_1, \ldots, \mathbf{P}_N$. В стационарном по диффузионной скорости приближении оно с учетом (1.3) приводится к виду

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}_1}ckT - (\overline{\mathbf{F}_1{}^h} + \mathbf{F}_1{}^A)c = -c\mathbf{V}_d\bar{\xi}_{11} + c\sum_{j\neq 1}\bar{\xi}_{1j}\mathbf{v}_0 \tag{1.4}$$

где использованы следующие моменты:

$$\langle(\mathbf{P}_1 - M, \mathbf{V}_d - M, \mathbf{v}_0)(\mathbf{P}_i - M_i\mathbf{V}_d - M_i\mathbf{v}_0)\rangle = \delta_{1i}M_1c(\mathbf{R}_1, t)\,kT$$

$$\left\langle(\mathbf{F}_i{}^h + \mathbf{F}_i{}^A)\,\mathbf{P}_1\frac{\partial}{\partial \mathbf{P}_i}\right\rangle = -\delta_{1i}c(\mathbf{R}_1, t)(\overline{\mathbf{F}_1{}^h} + \mathbf{F}_1{}^A)$$

$$\left\langle \mathbf{P}_1\frac{\partial}{\partial \mathbf{P}_i}\xi_{ii}\left(\frac{\mathbf{P}_i}{M_i} - \mathbf{v}_0 + kT\frac{\partial}{\partial \mathbf{P}_i}\right)\right\rangle = -\delta_{1i}c(\mathbf{R}_1, t)\,\mathbf{V}_d\bar{\xi}_{11}$$

$$\left\langle \mathbf{P}_1\frac{\partial}{\partial \mathbf{P}_i}\sum_{j(\neq i)}\xi_{ij}\left(\frac{\mathbf{P}_j}{M_j} - \mathbf{v}_0 + kT\frac{\partial}{\partial \mathbf{P}_j}\right)\right\rangle = \delta_{1i}\mathbf{v}_0c(\mathbf{R}_1, t)\sum_{j(\neq 1)}\bar{\xi}_{1j}$$

Черта сверху означает усреднение по координатам неподвижных частиц.

Все дальнейшие расчеты будем вести в приближении точечных частиц. В этом гидродинамическом приближении размеры частиц считаются много меньше любых других характерных размеров системы, в том числе среднего расстояния между частицами. Как известно, такое приближение дает ошибку порядка объемной концентрации частиц φ, поэтому в дальнейшем можно не учитывать члены с $\overline{\mathbf{F}}^h$ и $\mathbf{F}^A$, пропорциональные φ. Тогда из (1.4) следует выражение для диффузионного потока

$$J \equiv c\mathbf{V}_d = -\bar{\xi}_{11}^{-1} kT\nabla c + \bar{\xi}_{11}^{-1} \sum_{j\neq 1} \bar{\xi}_{1j}\mathbf{v}_0 c$$

Подставив его в первое моментное уравнение (1.3), получаем уравнение диффузии

$$\partial c/\partial t + (\mathbf{v}_0 + \bar{\mathbf{v}})\nabla c - D\nabla^2 c = 0 \tag{1.5}$$

$$D = kT\bar{\xi}_{11}^{-1}, \quad \bar{\mathbf{v}} = \bar{\xi}_{11}^{-1} \sum_{j\neq 1} \bar{\xi}_{1j}\mathbf{v}_0 \tag{1.6}$$

где D — коэффициент диффузии, $\bar{\mathbf{v}}$ — среднее возмущение скорости потока, обусловленное обтеканием случайной конфигурации неподвижных частиц.

2. Стохастическое уравнение диффузии. Последующий анализ близок проведенному в работе [3], где было показано, что диффузия одной крупной частицы в чистой жидкости целиком определяется тепловыми флуктуациями скорости жидкости, а исходный коэффициент диффузии, не учитывающий влияние этих флуктуаций, считался равным нулю.

В рассматриваемой здесь системе имеют место не только тепловые флуктуации скорости жидкости, но и случайные ее возмущения, возникающие при обтекании неподвижных сфер. Влияние тепловых флуктуаций уже учтено в выражении (1.6) для D (это было сделано в [6] при выводе уравнения Фоккера — Планка (1.1)). Как было показано выше, вывод уравнения конвективной диффузии из уравнения Фоккера — Планка включает в себя усреднение возмущения конвективного потока по координатам случайно расположенных неподвижных частиц. Учет флуктуаций этого возмущения приводит к дополнительной модификации коэффициента диффузии.

Рассмотрим вместо уравнения диффузии (1.5) соответствующее ему стохастическое уравнение Ланжевена, в котором вместо среднего возмущения скорости потока будет стоять случайная величина $\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \bar{\xi}_{11}^{-1}\Sigma\xi_{1j}\mathbf{v}_0$. Введя в правую часть этого уравнения дельта-образный источник, запишем его сразу для функции Грина, или пропагатора $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t, t_0)$, описывающего вероятность обнаружить частицу в точке $\mathbf{r}$ в момент t при условии нахождения ее в $\mathbf{r}_0$ в начальный момент t_0

$$(\partial/\partial t - D\nabla^2 + (\mathbf{v}_0 + \mathbf{v}(\mathbf{r}))\cdot\nabla) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t, t_0) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\,\delta(t - t_0) \tag{2.1}$$

с граничными условиями $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t, t_0) = 0$ при $t < t_0$ и $(\nabla G)\cdot\mathbf{n} = 0$ на поверхности каждой частицы ($\mathbf{n}$ — нормаль к этой поверхности). Согласно определению пропагатора, имеем

$$\langle(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)^n\rangle_d = \int d\mathbf{r}\,(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)^n G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t, t_0) \tag{2.2}$$

откуда с учетом (2.1) в приближении точечных частиц, т. е. пренебрегая поверхностными интегралами, получаем

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\rangle_d = \mathbf{v}_0 + \langle\mathbf{v}(\mathbf{r})\rangle_d \tag{2.3}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle(r_\alpha - r_{0\alpha})^2\rangle_d = 2D\Theta(t) + 2\langle(r_\alpha - r_{0\alpha})(v_{0\alpha} + v_\alpha(\mathbf{r}))\rangle_d \tag{2.4}$$

Для вычисления правых частей этих уравнений необходимо найти явную форму пропагатора $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t, t_0)$. Из фурье-преобразования уравнения (2.1)

$$(-i\omega - D\nabla^2 + \mathbf{v}_0\cdot\nabla) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) - \mathbf{v}(\mathbf{r})\cdot\nabla G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \omega)$$

следует интегральное уравнение

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \omega) = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \omega) - \int d\mathbf{r}' G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)\, \mathbf{v}(\mathbf{r}') \cdot \nabla_{r'} G(\mathbf{r}', \mathbf{r}_0, \omega)$$

где $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \omega)$ — функция Грина уравнения

$$(-i\omega - D\nabla^2 + \mathbf{v}_0 \cdot \nabla) G_0 = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$$

Методом итераций решение интегрального уравнения для $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \omega)$ находим в виде ряда по степеням возмущения скорости $\mathbf{v}(\mathbf{r})$. В первом приближении оно имеет вид

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \omega) = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, \omega) - \int d\mathbf{r}' G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)\, \mathbf{v}(\mathbf{r}') \cdot \nabla_{r'} G_0(\mathbf{r}', \mathbf{r}_0, \omega)$$

Подставив это соотношение в (2.4), для среднеквадратичного смещения в поперечном относительно $\mathbf{v}_0$ направлении получаем

$$(2.5)\qquad -i\omega \overline{\langle (x - x_0)^2 \rangle_d} = \frac{2Di}{\omega} + 2 \int d\mathbf{r}\, (x - x_0)\, \overline{v_x(\mathbf{r})}\, G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0, \omega) -$$
$$- 2 \int d\mathbf{r}\, d\mathbf{r}'\, (x - x_0)\, G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \omega)\, \overline{v_x(\mathbf{r})\, v_\alpha(\mathbf{r}')}\, \frac{\partial}{\partial r'_\alpha} G_0(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0, \omega)$$

Вводя в (2.5) новые переменные $\rho = \mathbf{r} - \mathbf{r}_0$, $\rho' = \mathbf{r}' - \mathbf{r}_0$ и интегрируя по каждой из них по всему объему (что дает ошибку порядка φ), находим (с учетом того, что $\overline{v_x(\mathbf{r})} = 0$)

$$-i\omega \overline{\langle (x - x_0)^2 \rangle_d} =$$
$$= \frac{2Di}{\omega} - 2 \int d\rho\, d\rho' \rho_x G_0(\rho - \rho', \omega)\, \Gamma_{x\alpha}(\rho - \rho') \frac{\partial}{\partial \rho_\alpha} G_0(\rho', \omega)$$
$$(\Gamma_{x\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \overline{v_x(\mathbf{r})\, v_\alpha(\mathbf{r}')})$$

Интегральный член представляет собой свертку, поэтому его удобно записать в пространственном фурье-представлении

$$(2.6)\qquad -i\omega \overline{\langle (x - x_0)^2 \rangle_d} = \frac{2Di}{\omega} + \frac{2i}{\omega (2\pi)^3} \int d\mathbf{k}\, \Gamma_{xx}(-\mathbf{k})\, G_0(\mathbf{k}, \omega)$$

$$(2.7)\qquad G_0(\mathbf{k}, \omega) = (-i\omega + Dk^2 + iv_0 k_z)^{-1}$$

где использовано соотношение $\rho_x(\mathbf{k}) = -i(2\pi)^3 \partial\delta(\mathbf{k})/\partial k_x$.

Таким образом, из уравнения (2.6) видим, что в пределе $\omega \to 0$ эффективный коэффициент диффузии в поперечном направлении

$$(2.8)\qquad D_\perp = D + \Delta D_\perp = D + \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}\, \Gamma_{xx}(-\mathbf{k})\, G_0(\mathbf{k}, 0)$$

Явный вид всех входящих в это выражение величин и окончательная его форма будут получены ниже.

3. Расчет коэффициента ξ_{11} и возмущений скорости жидкости. Рассмотрим частицу, движущуюся со скоростью $\mathbf{V}_i = \delta_{i1}\mathbf{V}_1$ в жидкости, имеющей в отсутствие этой частицы скорость $\mathbf{v}_0 + \mathbf{v}_i$. На эту частицу будет действовать сила сопротивления

$$(3.1)\qquad F_i = -\zeta_i (\mathbf{V}_i - \mathbf{v}_0 - \mathbf{v}_i); \quad \zeta_i = 6\pi\eta a_i, \quad a_i = \delta_{1i} a_1 + (1 - \delta_{1i}) a_2$$

где ζ_i — стоксовский коэффициент сопротивления частицы с радиусом a_i. Эта частица, в свою очередь, порождает возмущение потока жидкости, которое в приближении точечных частиц можно записать в виде

$$\Delta\mathbf{v}(\mathbf{r}) = T(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \cdot (-\mathbf{F}_i) = \zeta_i T(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \cdot (\mathbf{V}_i - \mathbf{v}_0 - \mathbf{v}_i)$$

$$T(\mathbf{r}) = (8\pi\eta r)^{-1} (U + \mathbf{r}\mathbf{r}/r^2)$$

где $T(\mathbf{r})$ — тензор Озеена, представляющий собой функцию Грина уравнения Стокса, U — единичный тензор. Отсюда имеем

$$\mathbf{v}_i = -\sum_j \zeta_j T_{ij}\cdot(\mathbf{v}_0 - \mathbf{V}_j + \mathbf{v}_j), \quad T_{ij} = T(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)$$

откуда методом итераций получаем

$$\mathbf{v}_i = -\sum_j \zeta_i T_{ij}\cdot(\mathbf{v}_0 - \mathbf{V}_j) + \sum_{jk} \zeta_j\zeta_k T_{ij}T_{jk}\cdot(\mathbf{v}_0 - \mathbf{V}_k) - \\ - \sum_{jkl} \zeta_j\zeta_k\zeta_l T_{ij}T_{jk}T_{kl}\cdot(\mathbf{v}_0 - \mathbf{V}_l) + \ldots \tag{3.2}$$

Из выражений (1.2) и (3.1) для силы, действующей на частицу, имеем соотношение

$$\sum_j \xi_{ij}(\mathbf{V}_j - \mathbf{v}_0) = \zeta_i(\mathbf{V}_i - \mathbf{v}_0 - \mathbf{v}_i) \tag{3.3}$$

Подставив в него разложение (3.2) для $\mathbf{v}_i$ и приравняв коэффициенты при $\mathbf{V}_i - \mathbf{v}_0$, находим

$$\xi_{ii} = \zeta_i + \zeta_i^2 \sum_j \zeta_j T_{ij}T_{ji} - \zeta_i^2 \sum_{jk} \zeta_j\zeta_k T_{ij}T_{jk}T_{ki} + \ldots$$

Усредняя все слагаемые этого ряда по положениям каждой из промежуточных частиц (по которым ведется суммирование) с однородной функцией распределения, получаем

$$\bar{\xi}_{11} = \zeta_1 + \zeta_1^2\zeta_2 c_2 \int d\mathbf{R}_2 T_{12}T_{21} - \\ - \zeta_1^2\zeta_2^2 c_2^2 \int d\mathbf{R}_2\, d\mathbf{R}_3 T_{12}T_{23}T_{31} + \ldots, \quad c_2 = N_2/\Omega$$

где N_2 — число неподвижных частиц в системе, Ω — объем системы. В фурье-представлении, где $T(\mathbf{k}) = (U - \mathbf{kk}/k^2)/(\eta k^2)$, этот ряд при помощи теоремы о свертке представляется в виде

$$\bar{\xi}_{11} = \zeta_1 + \zeta_1^2\zeta_2 c_2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\left(U - \frac{\mathbf{kk}}{k^2}\right)\left[\left(\frac{1}{\eta k^2}\right)^2 - \zeta_2 c_2 \left(\frac{1}{\eta k^2}\right)^3 + \\ + \zeta_2^2 c_2^2 \left(\frac{1}{\eta k^2}\right)^4 - \ldots\right] = \zeta_1 + \zeta_1^2 \zeta_2 c_2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\left(U - \frac{\mathbf{kk}}{k^2}\right)\frac{1}{\eta k^2 + \zeta_2 c_2}$$

(использовано выражение для суммы геометрической прогрессии, стоящей в квадратных скобках). После вычисления интеграла находим, что $\bar{\xi}_{11}$ — диагональный тензор с коэффициентами

$$\bar{\xi}_{11} = \zeta_1\left(1 + 3\frac{a_1}{a_2}\sqrt{\frac{\varphi_2}{2}}\right); \quad \varphi_2 = \frac{4}{3}\pi a_2^3 c_2 \tag{3.4}$$

где φ_2 — объемная концентрация неподвижных частиц.

Усредняя соотношение (3.2) по координатам всех неподвижных частиц, при помощи (3.4) можно убедиться, что в низшем порядке по φ_2 среднее возмущение скорости потока действительно определяется выражением, фигурирующим в уравнении (1.5). Следовательно, корреляционную функцию $\Gamma_{xx}(\mathbf{k})$ в (2.6) можно вычислить исходя из разложения (3.2).

Запишем усредненное произведение таких разложений

$$\overline{\mathbf{v}(\mathbf{r})\mathbf{v}(\mathbf{r}')} = \Big\{\Big[-\zeta_2 \sum_i T_{ri} + \zeta_2^2 \sum_{ij} T_{rj}T_{ji} + \zeta_2^3 \sum_{ijk} T_{rk}T_{kj}T_{ji} + \ldots\Big] \times \\ \times \Big[-\zeta_2 \sum_l T_{r'l} + \zeta_2^2 \sum_{lm} T_{r'm}T_{ml} - \zeta_2^3 \sum_{lmn} T_{r'n}T_{nm}T_{ml} + \ldots\Big]\Big\}_{av} : \mathbf{v}_0\mathbf{v}_0 \tag{3.5}$$

где фигурные скобки $\{\Phi\}_{av}$ эквивалентны черте над выражением Φ.

Перемножая квадратные скобки, представим (3.5) в виде

$$\overline{\mathbf{v}(\mathbf{r})\mathbf{v}(\mathbf{r}')} = (\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \ldots) : \mathbf{v}_0\mathbf{v}_0 \tag{3.6}$$

$$\lambda_1 = \frac{\zeta_2^2}{\Omega} \sum_i \int d\mathbf{R}_i T_{ri} \left[T_{r'i} - \frac{\zeta_2}{\Omega} \sum_m \int d\mathbf{R}_m T_{r'm} T_{mi} + \ldots \right]$$

$$\lambda_2 = \frac{\zeta_2^2}{\Omega^2} \sum_{\substack{il \\ (i \neq l)}} \int d\mathbf{R}_i \, d\mathbf{R}_l T_{ri} \left[T_{r'l} - \frac{\zeta_2}{\Omega} \sum_m \int d\mathbf{R}_m T_{r'm} T_{ml} + \ldots \right]$$

$$\lambda_3 = \frac{\zeta_2^3}{\Omega^2} \sum_{ij} \int d\mathbf{R}_i \, d\mathbf{R}_j T_{rj} T_{ji} \left[T_{r'i} - \zeta_2 T_{r'j} T_{ji} - \right.$$

$$\left. - \frac{\zeta_2}{\Omega} \sum_{m(\neq j)} \int d\mathbf{R}_m T_{r'm} T_{mi} + \ldots \right]$$

Выражение λ_1 соответствует произведению первого слагаемого из первой квадратной скобки в (3.5) на все члены из второй квадратной скобки с $l = i$, оно порядка c, а выражение λ_2 — с $l \neq i$, оно порядка c^2. Поэтому в случае малых c вкладом λ_2 можно пренебречь. Физически это означает, что основной вклад в корреляционную функцию $\Gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ дают возмущения, порождаемые одной и той же i-й частицей (с последующим суммированием по всем i).

Рассмотрим теперь λ_3. Второе слагаемое в этом выражении содержит сомножитель T_{ji}, совпадающий с сомножителем перед квадратной скобкой. Оба они описывают распространение возмущения от i-й частицы к j-й. Такое двойное описание одного и того же процесса физически неоправданно, поэтому слагаемое с T_{ij} можно просто отбросить как имеющее более высокий порядок малости по a_2/R_{ij} по сравнению с первым слагаемым в λ_3. По той же причине можно опустить во всех последующих λ_n ($n > 3$) члены, представляющие собой произведения слагаемых из разных квадратных скобок в (3.5) с совпадающими индексами. Тогда (3.6) принимает вид

(3.7)
$$\overline{\mathbf{v}(\mathbf{r})\,\mathbf{v}(\mathbf{r}')} = \zeta_2^2 c_2 \int d\mathbf{R}_2 \Big[T_{r2} - \zeta_2 c_2 \int d\mathbf{R}_3 T_{r3} T_{32} +$$
$$+ \zeta_2^2 c_2^2 \int d\mathbf{R}_3 \, d\mathbf{R}_4 T_{r4} T_{43} T_{32} - \ldots \Big] \Big[T_{r'2} - \zeta_2 c_2 \int d\mathbf{R}_3 T_{r'3} T_{32} +$$
$$+ \zeta_2^2 c_2^2 \int d\mathbf{R}_3 \, d\mathbf{R}_4 T_{r'4} T_{43} T_{32} - \ldots \Big] : \mathbf{v}_0 \mathbf{v}_0$$

или в фурье-представлении

(3.8)
$$\Gamma_{xx}(\mathbf{k}) = \zeta_2^2 c_2 v_0^2 \left[T(\mathbf{k}) - \zeta_2 c_2 (T(\mathbf{k}))^2 + \zeta_2^2 c_2^2 (T(\mathbf{k}))^3 - \ldots \right]_{xz}^2 =$$
$$= \zeta_2^2 c_2 v_0^2 \left(\frac{1}{\eta k^2} \right)^2 \frac{k_x^2 k_z^2}{k^4 (1 + \zeta_2 c_2/(\eta k^2))^2} = (6\pi a_2 v_0)^2 c_2 \frac{k_x^2 k_z^2}{k^4 (k^2 + \varkappa^2)^2}$$
$$\left(\varkappa = \sqrt{\zeta_2 c_2/\eta} = \sqrt{6\pi a_2 c_2} \right)$$

где $\varkappa$ — обратная длина экранировки в дисперсной системе (в приближении точечных частиц).

4. Коэффициент диффузии. Подставляя в (2.8) выражения (2.7) и (3.8), получаем

(4.1)
$$\Delta D_\perp = \frac{(6\pi a_2 v_0)^2 c_2}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \frac{k_x^2 k_z^2}{k^4 (k^2 + \varkappa^2)^2 (Dk^2 + i v_0 k_z)}$$

В результате вычисления этого интеграла находим

$$\Delta D_\perp = \frac{9}{2} \pi a_2^2 D c_2 \varkappa^{-1} \left[\frac{1}{3} + \alpha(1 - 2\alpha) - \frac{\alpha}{2}(1 - 4\alpha^2) \ln \frac{\alpha + 1}{\alpha} \right],$$
$$\alpha = \frac{\varkappa D}{v_0}$$

В предельном случае $\alpha \ll 1$ это выражение принимает вид

(4.2)
$$\Delta D_\perp = \frac{3}{2} \pi a_2^2 D c_2 \varkappa^{-1} = \frac{3}{4} \sqrt{\frac{\varphi_2}{2}} D$$

Из (2.8) и (4.2) следует

$$D_\perp = D\left(1+\frac{3}{4}\sqrt{\frac{\varphi_2}{2}}\right) \tag{4.3}$$

Коэффициент D также зависит от концентрации неподвижных частиц. Действительно, из определения (1.6) коэффициента D и выражения (3.4) имеем

$$D = D_0\left(1-3\frac{a_1}{a_2}\sqrt{\frac{\varphi_2}{2}}\right), \quad D_0=\frac{kT}{6\pi a_1\eta} \tag{4.4}$$

где D_0 — коэффициент диффузии частицы с радиусом a_1 в чистой жидкости с вязкостью η. Таким образом, окончательно из (4.3) и (4.4) получаем

$$D_\perp = D_0\left[1-3\left(\frac{a_1}{a_2}-\frac{1}{4}\right)\sqrt{\frac{\varphi_2}{2}}\right] \tag{4.5}$$

Из этого выражения видно, что в зависимости от отношения a_1/a_2 коэффициент диффузии $D_\perp$ может быть больше или меньше коэффициента диффузии в чистой жидкости D_0. Это связано с изменением относительного вклада двух конкурирующих механизмов влияния неподвижных примесей на диффузию броуновской частицы. С одной стороны, наличие неподвижных примесей увеличивает коэффициент сопротивления движению частицы ξ_{11} и соответственно уменьшает коэффициент диффузии (4.4). С другой стороны, при обтекании потоком случайной конфигурации примесей возникает случайное поле скоростей, которое приводит к дополнительному (по отношению к тепловому) флуктуационному движению частицы и, соответственно, к увеличению коэффициента диффузии.

Вычисление коэффициента $D_\perp$ в рассматриваемой системе проводилось также в работе [1]. Однако полученный в ней результат неверен, так как авторы не учли отличие D от D_0, приведенное в формуле (4.4). Кроме того, при вычислении $\Delta D_\perp$ они использовали неправильное выражение для $\Gamma_{xx}(\mathbf{k})$ в виде произведения $c_2 u_x(\mathbf{k})\, v_x(-\mathbf{k})$, где $\mathbf{u}(\mathbf{k})$ — фурье-образ неэкранированного поля скоростей одной неподвижной частицы. Такой выбор $\Gamma_{xx}(\mathbf{k})$ соответствует учету только первого слагаемого λ_1 разложения (3.6) или лишь первого слагаемого в первой квадратной скобке выражения (3.7). При вычислении $\Delta D_\perp$ это приводит к удвоенному по сравнению с (4.2) результату. Кроме того, авторы работы [1] ошиблись при вычислении полученного ими интеграла для $\Delta D_\perp$, в результате чего вычисленная ими поправка к коэффициенту поперечной диффузии оказалась в четыре раза больше выражения (4.2).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Carton J. P., Dubois-Violette E., Prost J.* Brownian diffusion of a small particle in a suspension. II. Hydrodynamic effect in a random fixed bed.— Physica, 1983, v. A119, No. 1—2, p. 307—316.
2. *Fox R. F., Uhlenbeck G. E.* Contribution to non-equilibrium thermodynamics. I. Theory of hydrodynamical fluctuations.— Phys. Fluids, 1970, v. 13, No. 8, p. 1893—1902.
3. *Bedeaux D., Mazur P.* Renormalization of the diffusion coefficient in a fluctuating fluid. III. Diffusion of a brownian particle with finite size.— Physica, 1975, v. A80, No. 2, p. 189—202.
4. *Башкиров А. Г.* Теория броуновского движения, обусловленного флуктуациями тензора напряжений жидкости.— Теорет. и матем. физика, 1977, т. 30, № 1, с. 95—102.
5. *Башкиров А. Г.* Неравновесная статистическая механика гетерогенных систем. III. Броуновское движение крупной частицы в неоднородной жидкости.— Теорет. и матем. физика, 1981, т. 49, № 1, с. 140—144.
6. *Murphy T. J., Aguirre J. L.* Brownian motion of N interacting particles. I.— J. Chem. Phys., 1972, v. 57, No. 5, p. 2098—2104.

Москва

Поступила в редакцию 9.II.1984