Kinetyczna teoria gazów III

Wykład ten poświęcony jest wyprowadzeniu hydrodynamiki na gruncie teorii kinetycznej. Hydrodynamika jest zwykle kojarzona z cieczami, wszak sama nazwa wywodzi się od greckiego $\upsilon\delta\rho\omega$ – woda, lecz tutaj mamy na myśli pewien typ makroskopowego opisu, który stosowany jest zarówno do cieczy jak i gazów. Chcemy więc wywieść równania hydrodynamiki z równania kinetycznego Boltzmanna

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\nabla\right) f(t,\mathbf{r},\mathbf{p}) = C(t,\mathbf{r},\mathbf{p}), \tag{1}$$

w którym dla uproszczenia zadania pomijamy zewnętrzne pole sił.

Makroskopowe prawa zachowania

- Jak pamiętamy z poprzedniego wykładu, człon zderzeniowy spełnia następujące relacje

$$\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\, C(t,\mathbf{r},\mathbf{p}) \;=\; 0, \tag{2}$$

$$\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\, \mathbf{p}\, C(t,\mathbf{r},\mathbf{p}) \;=\; 0, \tag{3}$$

$$\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\, \epsilon_{\mathbf{p}}\, C(t,\mathbf{r},\mathbf{p}) \;=\; 0, \tag{4}$$

  wynikające z zachowania liczby cząstek, pędu i energii w zderzeniach. Pierwsze prawo zachowania jest spełnione tylko w przypadku zderzeń binarnych, które uwzględnia równanie Boltzmanna, pozostałe dwa są ogólnie prawdziwe.

- Dzięki relacjom (2, 3, 4) możemy otrzymać trzy makroskopowe prawa zachowania w formie trzech równań ciągłości. W tym celu mnożymy równanie Boltzmanna przez, odpowiednio, $1, p^i$ i $\epsilon_{\mathbf{p}}$, a następnie wykonując całkowanie po pędzie, znajdujemy

$$\frac{\partial \rho(t,\mathbf{r})}{\partial t} + \nabla\cdot\mathbf{j}(t,\mathbf{r}) \;=\; 0, \tag{5}$$

$$\frac{\partial P^i(t,\mathbf{r})}{\partial t} + \frac{\partial \Pi^{ij}(t,\mathbf{r})}{\partial r^j} \;=\; 0, \tag{6}$$

$$\frac{\partial \varepsilon(t,\mathbf{r})}{\partial t} + \nabla\cdot\mathbf{I}(t,\mathbf{r}) \;=\; 0, \tag{7}$$

  gdzie $i, j = x, y, z$, a wielkości zdefiniowane jako

$$\rho(t,\mathbf{r}) \equiv \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\, f(t,\mathbf{r},\mathbf{p}), \qquad \mathbf{j}(t,\mathbf{r}) \equiv \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\, \frac{\mathbf{p}}{m}\, f(t,\mathbf{r},\mathbf{p}), \tag{8}$$

$$P^i(t,\mathbf{r}) \equiv \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\, p^i f(t,\mathbf{r},\mathbf{p}), \qquad \Pi^{ij}(t,\mathbf{r}) \equiv \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\, \frac{p^i p^j}{m}\, f(t,\mathbf{r},\mathbf{p}), \tag{9}$$

$$\varepsilon(t,\mathbf{r}) \equiv \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\, \epsilon_{\mathbf{p}} f(t,\mathbf{r},\mathbf{p}), \qquad \mathbf{I}(t,\mathbf{r}) \equiv \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\, \frac{\mathbf{p}}{m}\, \epsilon_{\mathbf{p}} f(t,\mathbf{r},\mathbf{p}), \tag{10}$$

  to: ρ - gęstość cząstek, $\mathbf{j}$ - strumień cząstek, P^i gęstość pędu, Π^{ij} strumień pędu, ε - gęstość energii i $\mathbf{I}$ - strumień energii.

Lokalna równowaga termodynamiczna

- Równania hydrodynamiki określanej jako hydrodynamika cieczy idealnej uzyskujemy z makroskopowych praw zachowania (5, 6, 7) podstawiając do wzorów (8, 9, 10) funkcję rozkładu lokalnej równowagi termodynamicznej

$$f^{\mathrm{eq}}(t,\mathbf{r},\mathbf{p}) = \rho(t,\mathbf{r})\left(\frac{2\pi}{mk_BT(t,\mathbf{r})}\right)^{3/2}\exp\left[-\frac{\big(\mathbf{p}-m\mathbf{u}(t,\mathbf{r})\big)^2}{2mk_BT(t,\mathbf{r})}\right], \tag{11}$$

która tym różni się od równowagowej funkcji rozkładu omawianej w poprzednim wykładzie, że gęstość ρ, temperatura T i prędkość $\mathbf{u}$ zależą od czasu i położenia.

- Za postacią funkcji rozkładu (11) kryje się ważne fizyczne dopuszczenie. Zakładamy mianowicie, że zmierzając do równowagi termodynamicznej układ najpierw osiąga lokalną równowagę, co oznacza, że w każdym punkcie układu rozkład pędu staje się równowagowy, lecz wartości parametrów ρ, T i $\mathbf{u}$ są w różnych punktach różne. Następnie poprzez wyrównywanie się wartości tych parametrów układ dochodzi do równowagi globalnej.

- Podstawiając funkcję rozkładu (11) do wzorów (8, 9, 10) i całkując po pędzie, otrzymujemy

$$\mathbf{j} = \rho\,\mathbf{u}, \tag{12}$$

$$\mathbf{P} = m\rho\,\mathbf{u}, \qquad \Pi^{ij} = m\rho\, u^i u^j + \delta^{ij}\rho\, k_BT, \tag{13}$$

$$\varepsilon = \frac{1}{2}m\rho\,\mathbf{u}^2 + \frac{3}{2}\rho\, k_BT, \qquad \mathbf{I} = \frac{1}{2}m\rho\,\mathbf{u}^3 + \frac{5}{2}\rho\,\mathbf{u}\, k_BT, \tag{14}$$

gdzie dla przejrzystości zapisu nie podaliśmy argumentów wszystkich funkcji zależnych od t i $\mathbf{r}$. Podobnie też będziemy postępować dalej. Aby wykonać całki po pędzie, należy na początek zamienić zmienne wprowadzając pęd $\mathbf{k} \equiv \mathbf{p} - m\mathbf{u}$. Dzięki temu funkcje podcałkowe tworzą sumy, w których każdy człon jest parzystą lub nieparzystą funkcją $\mathbf{k}$. Człony nieparzyste nie dają, oczywiście, wkładu do całek, a parzyste dają proste całki gaussowskie. Jeśli obliczamy je we współrzędnych sferycznych, można skorzystać ze wzorów

$$\int_0^\infty dx\, e^{-x^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \qquad \int_0^\infty dx\, x^2 e^{-x^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{4}, \qquad \int_0^\infty dx\, x^4 e^{-x^2} = \frac{3\sqrt{\pi}}{8}. \tag{15}$$

Hydrodynamika cieczy idealnej

Doszliśmy teraz do głównego tematu wykładu, czyli hydrodynamiki cieczy idealnej. Przedstawimy układ odpowiednich równań i omówimy ich zawartość.

- Podstawiwszy strumień (12) do równania ciągłości (5), przybiera ono postać

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\mathbf{u}) = 0. \tag{16}$$

- Równanie (6) po skorzystaniu z formuł (13) i równania (16) staje się znanym równaniem Eulera

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u}\cdot\nabla\right)\mathbf{u} + \frac{1}{m\rho}\nabla p = 0, \tag{17}$$

w którym p jest ciśnieniem. Uwzględniliśmy tutaj równanie stanu gazu doskonałego mówiące, że

$$p = \rho\, k_BT. \tag{18}$$

- Podstawiając gęstość i strumień energii (14) do równania ciągłości (4), otrzymujemy równanie
$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\right) T + \frac{2}{3} T \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \tag{19}$$
gdzie dodatkowo skorzystaliśmy z równań (16, 17).

- Równania (16, 17, 19), których w sumie jest pięć, tworzą układ równań hydrodynamiki cieczy idealnej. Wchodzi do nich sześć nieznanych funkcji czasu i położenia: $\rho, \mathbf{u}, p, T$, więc należy jeszcze dodać równanie stanu (18), żeby układ równań domknąć.

- W równaniach (17, 19) pojawił się operator
$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\right) \tag{20}$$
zwany pochodną substancjalną. W działaniu na daną wielkość określa on jej zmianę w układzie poruszającym się wraz z cieczą z prędkością $\mathbf{u}$. Jeśli równanie ciągłości (16) zapisać za pomocą pochodnej substancjalnej, to przybiera ono postać
$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\right) \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \tag{21}$$

- Funkcja rozkładu (11) zeruje człon zderzeniowy równania Boltzmanna, więc jak pokazuje dowód twierdzenia H, entropia staje się maksymalna, gdy układ osiągnie równowagę lokalną opisywaną funkcją (11). Spodziewamy się więc, że ewolucja dana równaniami hydrodynamiki cieczy idealnej (16, 17, 19) nie prowadzi do dalszego wzrostu entropii. Rzeczywiście można łatwo pokazać, że proces ewolucji cieczy idealnej jest adiabatyczny, czyli izoentropowy. Właśnie tej własności ciecz idealna zawdzięcza swoją nazwę.

- Dowód adiabatyczności ewolucji cieczy idealnej można przeprowadzić następująco. Omawiając termodynamikę gazu idealnego w Wykładzie II, pokazaliśmy, że podczas procesu adiabatycznego, zachowywana jest wielkość TV^{γ}, gdzie $\gamma \equiv nR/C_V = 2/3$. Dzieląc $TV^{2/3}$ przez $N^{2/3}$, gdzie N jest liczbą cząstek gazu znajdujących się w objętości V, otrzymujemy inną zachowywaną wielkość $T\rho^{-2/3}$. Oczywiście każda potęga tej wielkości, w szczególności $T^{-3/2}\rho$, też będzie zachowana. Pokażemy teraz, że pochodna substancjalna wielkości $T^{-3/2}\rho$ znika, jeśli T i ρ spełniają równania (16, 17, 19). Obliczamy zatem
$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\right) T^{-\frac{3}{2}} \rho = -\frac{3}{2} \rho T^{-\frac{5}{2}} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\right) T + T^{-\frac{3}{2}} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\right) \rho = 0, \tag{22}$$
gdzie skorzystaliśmy z równań (19, 21). A zatem ewolucja cieczy idealnej jest izoentropowa.

- Równania (16, 17), które wyprowadziliśmy na gruncie teorii kinetycznej, są stosowalne bynajmniej nie tylko do opisu rozrzedzonych gazów, lecz również cieczy, na co wskazują proste argumenty heurystyczne. W rzeczywistości równanie Eulera, które jest o przeszło wiek starsze od równania Boltzmanna, wprowadzone zostało pierwotnie dla cieczy nie gazu.

- Cztery równania (16, 17) nie stanowią domkniętego układu równań, bowiem występuje w nich pięć funkcji: $\rho, \mathbf{u}, p$. Stosując te równania do opisu cieczy przyjmuje się często, że ciecz jest nieściśliwa, tzn. gęstość ρ jest wielkością stałą. Równanie ciągłości (16) orzeka wówczas, że $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, czyli pole prędkości $\mathbf{u}$ jest bezźródłowe, co istotnie upraszcza analizę równania Eulera.

- Funkcja rozkładu lokalnej równowagi (11) nie spełnia równania Boltzmanna. Zeruje bowiem człon zderzeniowy i prawa strona równania znika, lecz nie znika lewa strona ze względu na zależność od czasu i położenia funkcji $\rho, \mathbf{u}, T$. Można usunąć ten mankament teorii, usuwając jednocześnie wspomnianą powyżej paradoksalną stałość entropii podczas hydrodynamicznej ewolucji układu. Rozwiązanie polega na zastąpieniu funkcji (11) przez

$$f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) = f^{\mathrm{eq}}(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}) + \delta f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}), \tag{23}$$

  gdzie funkcja f^{eq} ponownie dana jest wzorem (11). Dodatek δf sprawia, że funkcja rozkładu nie zeruje członu zderzeniowego i dzięki temu możliwe jest spełnienie równania Boltzmanna. Przyjmując jednak, że $f^{\mathrm{eq}} \gg |\delta f|$, dodatek można pominąć przy obliczaniu lewej strony równania Boltzmanna, co szalenie upraszcza jego wyznaczenie. Podstawiając funkcję rozkładu (23) do makroskopowych praw zachowania otrzymujemy hydrodynamikę cieczy lepkiej, której ewolucji towarzyszy produkcja entropii. To jest właśnie jeden z tematów następnego wykładu.