ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 7, № 3 (2003) с. 291–297

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 7, No. 3 (2003) p. 291–297

ДИНАМІЧНА ПОВЕДІНКА БІНАРНОЇ СУМІШІ З НЕКОНСЕРВАТИВНИМИ ДИНАМІЧНИМИ ЗМІННИМИ

О. Ф. Бацевич[2], І. М. Мриглод[1], Ю. К. Рудавський[2], М. В. Токарчук[1]
[1] *Інститут фізики конденсованих систем НАН України*
вул. Свєнціцького, 1, Львів, 79011, Україна
[2] *Національний університет "Львівська Політехніка"*
вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, Україна
(Отримано 18 лютого 2002 р.; в остаточному вигляді — 6 березня 2003 р.)

Лінеаризовані рівняння гідродинаміки, як відомо, добре описують динамічні властивості рідин та їх сумішей у ділянці гідродинамічного режиму, тобто для великих часових та просторових масштабів. У статті поставлено питання про поведінку системи при виході з гідродинамічного режиму, коли до набору динамічних змінних включені неконсервативні параметри системи, тобто змінні, які не є густинами величин, що зберігаються. Зокрема розглянуто двокомпонентну суміш рідин, до базисного набору змінних якої включені парціяльні густини енерґій обох систем. Показано, що в цьому випадку існують дві теплові моди, одна з яких гідродинамічна й відповідає за термодифузійні процеси в системі, а інша — кінетична й описує процеси вирівнювання температур обох підсистем. У гідродинамічній границі внесок другої з мод є незначним і тому ним можна знехтувати.

Ключові слова: бінарна суміш, теплові збудження, гідродинамічні та кінетичні моди, узагальнена гідродинаміка.

PACS number(s): 67.55.Fa

I. ВСТУП

Метод нерівноважного статистичного оператора Зубарєва [1,2] розглядають сьогодні як один із найефективніших при теоретичному описі нерівноважних властивостей багаточастинкових систем. У попередніх наших роботах [3,4] метод нерівноважного статоператора був використаний, щоб отримати рівняння узагальненої гідродинаміки суміші магнетних та немагнетних частинок. Одержані у статті [3] узагальнені рівняння переносу можна використати для опису як сильно- так і слабонерівноважних динамічних процесів. У статті [4] ці рівняння, що є сильно нелінійними, проаналізовано для малих відхилень від рівноваги в границі великих просторових та часових масштабів (малі k та ω). Слід відзначити, що при отриманні рівнянь переносу для двокомпонентної суміші магнетних та немагнетних частинок ми виходили з розгляду двох граничних умов, які відповідають різним фізичним уявленням про систему. У першому випадку вважали, що визначальною є парціяльна динаміка підсистеми. Така ситуація часто трапляється, коли мова йде про опис підсистем, характерні часи яких сильно відрізняються. Зокрема прикладом може служити суміш з великою різницею мас чи розмірів частинок різних сортів. У цьому разі до набору динамічних змінних зручно включити парціяльні густини імпульсу $\hat{\boldsymbol{p}}_1(k)$, $\hat{\boldsymbol{p}}_2(k)$ та енерґії $\hat{\varepsilon}_1(k)$, $\hat{\varepsilon}_2(k)$ окремих підсистем. В іншому випадку, коли домінують колективні процеси й особливості парціяльної динаміки нас не цікавлять, зручно виходити з густин повного імпульсу $\hat{\boldsymbol{p}}(k)$ та повної енерґії $\hat{\varepsilon}(k)$ — величин, для яких виконуються локальні закони збереження. Тому цікавим і правомірним є питання про різницю між цими двома підходами до опису динаміки бінарної суміші, зокрема при виході з гідродинамічного режиму. Дослідженню саме цього питання присвячена ця стаття. Зауважимо, що така постановка задачі є цікавою і в загальнішому контексті — порівняльного аналізу аналітичних результатів, що випливають із двох підходів, а саме — гідродинамічного та методу узагальненої гідродинаміки. У першому випадку враховуємо явно лише динаміку повільного (гідродинамічного) процесу, тоді як другий підхід дає змогу проаналізувати динаміку швидких процесів кінетичної природи на фоні повільної гідродинамічної релаксації та дослідити, таким чином, співвідношення між ними в явній формі.

Структура роботи така. У другому розділі наведено лінійні рівняння гідродинаміки, на основі яких проведено подальший розгляд. У третьому — сформульовано основні ідеї дослідження та записано вихідні вирази для спрощеної задачі динаміки, у якій приймаються до розгляду лише флюктуації температури. У четвертому та п'ятому розділах знайдено розв'язки відповідних рівнянь переносу та проаналізовано отримані результати.

II. РІВНЯННЯ УЗАГАЛЬНЕНОЇ ГІДРОДИНАМІКИ

Розгляньмо двокомпонентну рідку суміш, мікроскопічна динаміка якої описується оператором Ліувілля,

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}\hat{L}_H = {} & \sum_i^{N_1} \frac{\mathbf{p}_i^{(1)}}{m_1}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} - \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N_1,N_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} V^{(11)}(r_{ij}) \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i^{(1)}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j^{(1)}}\right) \\
& + \sum_i^{N_2} \frac{\mathbf{p}_i^{(2)}}{m_2}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} - \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N_2,N_2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} V^{(22)}(r_{ij}) \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i^{(2)}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j^{(2)}}\right) - \sum_{i,j}^{N_1,N_2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} V^{(12)}(r_{ij}) \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i^{(1)}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j^{(2)}}\right),
\end{aligned}
$$

де N_1, N_2 — число частинок першого та другого сортів, $V^{(\alpha\beta)}(r_{ij})$ — потенціял взаємодії i-ї частинки сорту α та j-ї частинки сорту β, де $\alpha, \beta = \{1, 2\}$.

Гідродинамічний підхід передбачає вибір у ролі параметрів скороченого опису набору густин динамічних змінних, що зберігаються. Для цієї системи такими змінними є фур'є-компоненти парціяльних густин числа частинок (сортів 1 та 2), повного імпульсу та повної енергії, що залежать від хвильового вектора $\mathbf{k}$:

$$\hat{\boldsymbol{Y}}(\mathbf{k}) = \{\hat{n}_1(\mathbf{k}), \hat{n}_2(\mathbf{k}), \hat{\boldsymbol{p}}(\mathbf{k}), \hat{\varepsilon}(\mathbf{k})\}, \tag{1}$$

відповідно. Локальні закони збереження для цих змінних у k-просторі мають такий вигляд:

$$\frac{d}{dt}\hat{Y}_i(\mathbf{k}) \equiv i\hat{L}\cdot\hat{Y}_i(\mathbf{k}) = i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{J}_i(\mathbf{k}), \tag{2}$$

де $\boldsymbol{J}_i$ — мікроскопічні потоки відповідних величин. Зокрема для густини енерґії маємо, що

$$\dot{\hat{\varepsilon}}(\mathbf{k}) = i\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}_\varepsilon(\mathbf{k}). \tag{3}$$

Можна показати, що для малих відхилень системи від рівноваги лінійні рівняння узагальненої гідродинаміки для поздовжніх флюктуацій матимуть вигляд [3,4]:

$$\{i\omega\cdot\mathbf{1} - i\boldsymbol{\Omega}(k) + \boldsymbol{\phi}(k,\omega)\}\,\langle\Delta\hat{\boldsymbol{Y}}(k)\rangle^{\omega} = 0, \tag{4}$$

де $\langle\Delta\hat{\boldsymbol{Y}}(k)\rangle^{\omega}$ — фур'є-компоненти залежних від часу усереднених відхилень динамічних змінних $\hat{\boldsymbol{Y}}(k)$ від рівноважних значень $\langle\hat{\boldsymbol{Y}}(k)\rangle_0$, а k — модуль хвильового вектора $\mathbf{k}$.

Увівши означення кореляційної функції

$$(\hat{A}, \hat{B}) = \int_0^1 \langle\hat{A}\rho_0^{\tau}\hat{B}\rho_0^{-\tau}\rangle\, d\tau, \tag{5}$$

де $\langle\ldots\rangle$ позначає усереднення за рівноважним розподілом Ґібса, вирази для частотної матриці $\mathrm{i}\boldsymbol{\Omega}(k)$ та матриці функцій пам'яті $\boldsymbol{\phi}(k,z)$ у рівнянні (4) можна записати так [3,4]:

$$i\boldsymbol{\Omega}(k) = (i\hat{L}\cdot\hat{\boldsymbol{Y}}(k), \hat{\boldsymbol{Y}}(-k))\;\left(\hat{\boldsymbol{Y}}(k), \hat{\boldsymbol{Y}}(-k)\right)^{-1}, \tag{6}$$

$$\boldsymbol{\phi}(k,\omega) = \left((1-\mathcal{P})\,i\hat{L}\cdot\hat{\boldsymbol{Y}}, \frac{1}{i\omega + (1-\mathcal{P})\,i\hat{L}}\,(1-\mathcal{P})\,i\hat{L}\cdot\hat{\boldsymbol{Y}}^{+}\right)\left(\hat{\boldsymbol{Y}}(k), \hat{\boldsymbol{Y}}(-k)\right)^{-1}, \tag{7}$$

де $\left(\hat{\boldsymbol{Y}}(k), \hat{\boldsymbol{Y}}^{+}(-k)\right)$ — матриця статичних кореляційних функцій, β — обернена температура, V — об'єм системи, а $\mathcal{P}$ — проєкційний оператор Морі [1,2].

III. ФОРМУЛЮВАННЯ СПРОЩЕНОЇ ЗАДАЧІ

Аналіз гідродинамічної поведінки систем із консервативними динамічними змінними на основі рівнянь (4) дає добре відомі результати [5]. Зокрема для бінарної суміші з набором змінних (1) для спектра колективних збуджень отримаємо такі розв'язки: дві комплексно-спряжені звукові моди, а також два збудження релаксаційного типу — дифузійна та термодифузійна (теплова) гідродинамічні моди.

Проте цікавим залишається питання про докладніший опис системи на базисі змінних, що містять парціяльні характеристики. Для прикладу в роботах [3,4] в ролі таких змінних вибрано набір

$$\{\hat{n}_1(k), \hat{n}_2(k), \hat{\boldsymbol{p}}_1(k), \hat{\boldsymbol{p}}_2(k), \hat{\varepsilon}_1(k), \hat{\varepsilon}_2(k)\},$$

де $\hat{\boldsymbol{p}}_1(k)$, $\hat{\boldsymbol{p}}_2(k)$, $\hat{\varepsilon}_1(k)$, $\hat{\varepsilon}_2(k)$ — парціяльні імпульси та енерґії кожної з підсистем. Розширені набори змінних дають змогу враховувати тонші процеси кінетичної природи, що стають важливими при виході з гідродинамічного режиму. Зокрема, розглядаючи базис

$$\{\hat{n}_1(k), \hat{n}_2(k), \hat{\boldsymbol{p}}(k), \hat{\varepsilon}_1(k), \hat{\varepsilon}_2(k)\}, \tag{8}$$

де парціяльні енерґії для досліджуваної системи є такими

$$\hat{\varepsilon}_1(k) = \sum_i^{N_1} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} \left\{ \frac{{\boldsymbol{p}_i^{(1)}}^2}{2m_1} + \frac{1}{2}\sum_{j(\neq i)}^{N_1} V^{(11)}(\mathbf{r}_{ij}) + \frac{1}{2}\sum_j^{N_2} V^{(12)}(\mathbf{r}_{ij}) \right\}, \tag{9}$$

$$\hat{\varepsilon}_2(k) = \sum_i^{N_2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} \left\{ \frac{{\boldsymbol{p}_i^{(2)}}^2}{2m_1} + \frac{1}{2}\sum_{j(\neq i)}^{N_2} V^{(22)}(\mathbf{r}_{ij}) + \frac{1}{2}\sum_j^{N_1} V^{(12)}(\mathbf{r}_{ij}) \right\}, \tag{10}$$

маємо можливість вивчати особливості процесів релаксації, що зумовлені різницею парціяльних температур у підсистемах. Такі деталі неможливо досліджувати, використовуючи одну динамічну змінну

$$\hat{\varepsilon}(k) = \hat{\varepsilon}_1(k) + \hat{\varepsilon}_2(k). \tag{11}$$

З іншого боку, змінні (9), (10) не є консервативними, тобто для них закони збереження типу (2), (3) не виконуються, і маємо

$$\dot{\hat{\varepsilon}}_1(k) = \hat{J}_0 + i\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}_{\varepsilon_1}(k),$$
$$\dot{\hat{\varepsilon}}_2(k) = -\hat{J}_0 + i\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}_{\varepsilon_2}(k), \tag{12}$$

де $\hat{J}_0$ — деякий мікроскопічний потік, що описує процес вирівнювання температур і є відмінним від нуля в гідродинамічній границі:

$$\hat{J}_0 = -\frac{1}{2}\sum_{i,j}^{N_1,N_2} \frac{\partial V^{(1,2)}(r_{ij})}{\partial \mathbf{r}_i}\left(\frac{\mathbf{p}_i^{(1)}}{m_1} + \frac{\mathbf{p}_j^{(2)}}{m_2}\right). \tag{13}$$

Мікроскопічні вирази для потоків $\hat{\boldsymbol{J}}_{\varepsilon_1}(k)$ та $\hat{\boldsymbol{J}}_{\varepsilon_2}(k)$ легко отримати, проте для подальшого розгляду їх структура не є суттєвою. Зауважимо лише, що для потоку повної енерґії, очевидно, виконується рівність:

$$\hat{\boldsymbol{J}}_{\varepsilon}(k) = \hat{\boldsymbol{J}}_{\varepsilon_1}(k) + \hat{\boldsymbol{J}}_{\varepsilon_2}(k), \tag{14}$$

Надалі, нехтуючи для простоти всіма іншими змінними, окрім ε_1 та $\hat{\varepsilon}_2$, розглянемо спрощену задачу про динаміку середніх значень лише парціяльних енерґій, яка, однак, дозволить з'ясувати особливості прояву кінетичних процесів при виході з ділянки гідродинамічного режиму. Як обґрунтування доцільности теоретичного аналізу такої спрощеної моделі динаміки можна навести декілька арґументів: (i) абстрагуючись від питання про межі застосовности моделі, відзначимо, що вона є цікавою в теоретичному плані, оскільки є простою й допускає аналітичні розв'язки; (ii) порівняння отриманих результатів з тими, що відомі для моделі з однією змінною (11), дозволить судити про роль динамічних взаємодій між повільними та швидкими процесами як у ділянці гідродинамічного режиму, так і при виході з нього; (iii) результати такого дослідження через зазначені вище обставини матимуть загальніше значення і можуть бути корисними при вивченні складніших моделей динаміки, для яких аналітичні розв'язки отримати важко.

Для спрощеної моделі динаміки система (4) редукується до двох рівнянь:

$$i\omega\langle\Delta\varepsilon_i(k)\rangle^{\omega} = \{i\Omega_{ij}(k) - \phi_{ij}(k,\omega)\}\langle\Delta\varepsilon_i(k)\rangle^{\omega}, \tag{15}$$

які описують флюктуації середніх значень локальних парціяльних енерґій і дозволяють проаналізувати отримані результати в порівнянні з випадком динаміки для змінної $\hat{\varepsilon}(k) = \hat{\varepsilon}_1(k) + \hat{\varepsilon}_2(k)$.

IV. РОЗВ'ЯЗОК РІВНЯНЬ ПЕРЕНОСУ

Коли використати марківське наближення для функцій пам'яті, рівняння (15) в часовому зображенні матиме вигляд:

$$\frac{d}{dt}\langle\Delta\varepsilon_i(k)\rangle^t = \{i\Omega_{ij}(k) - \phi_{ij}(k)\}\,\langle\Delta\varepsilon_i(k)\rangle^t, \qquad (16)$$

де

$$i\Omega_{ij} = (\dot{\varepsilon}_i(k), \varepsilon_l(-k)) \cdot (\hat{\varepsilon}(k), \hat{\varepsilon}(-k))^{-1}_{lj}\,,$$

а

$$\phi_{ij}(k) = \phi_{ij}(k, 0).$$

Легко переконатись, що

$$\left(\dot{\hat{\varepsilon}}_i(k), \hat{\varepsilon}_j(k)\right) = 0,$$

і тому отримуємо

$$\mathrm{i}\Omega(k) \equiv 0.$$

Для елементів матриці функцій пам'яті $\phi_{ij}(k)$ маємо

$$\boldsymbol{\phi}(k, \omega = 0) = \boldsymbol{L}(k) \cdot (\hat{\varepsilon}(k), \hat{\varepsilon}(-k))^{-1}\,, \qquad (17)$$

де елементи матриці $\mathbf{L}(k)$, функції $L_{ij}(k)$ задаються виразами типу Кубо

$$L_{ij}(k) = \int_0^\infty dt\,\left(i\hat{L}\,\hat{\varepsilon}_i(k)\,,\; e^{-i\hat{L}t}\,i\hat{L}\,\hat{\varepsilon}_j(-k)\right) \qquad (18)$$

і описують відповідні процеси переносу. У виразі (18) враховано, що

$$(1 - \mathcal{P})\dot{\hat{\varepsilon}}_i(k) = \dot{\hat{\varepsilon}}_i(k) - i\Omega_{ij}\hat{\varepsilon}_j(k) = \dot{\hat{\varepsilon}}_i(k).$$

Беручи до уваги, що потоки (12) можна записати як

$$\dot{\hat{\varepsilon}}_i(k) = (-1)^{i+1}\hat{J}_0 + i\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}_i(k)$$

і використовуючи загальні властивості кореляційних функцій, після певних спрощень отримуємо:

$$L_{ij}(k) = (-1)^{i+j}\bar{L}_0 + ik\left[(-1)^{i+1}\bar{L}_{0j} + (-1)^{j+1}\bar{L}_{0i}\right] + k^2\bar{L}_{ij}, \quad i, j = \{1, 2\}, \qquad (19)$$

де

$$\bar{L}_0 = \int_0^\infty dt\,(J_0(t), J_0(0))\,,$$

$$\bar{L}_{0i} = \int_0^\infty dt\,(J_0(t), J_i(0))\,,$$

$$\bar{L}_{ij} = \int_0^\infty dt\,(J_i(t), J_j(0))\,,$$

Матриця кінетичних коефіцієнтів $\boldsymbol{L} = ||L_{ij}(k)||$ є ермітовою (див. [6]) і має дійсні власні значення, тобто для неї має виконуватись рівність $L_{ij} = L^*_{ji}$, у якій легко переконатися, використовуючи вираз (18). Ця умова вимагає антисиметричности щодо індексів i та j другого доданка в правій частині формули (19). Тому, враховуючи, що функції $\bar{L}_{0i}$ є дійсними, бачимо, що другий доданок у правій частині формули (19) повинен занулятись. Це можна також довести, виходячи із властивостей просторової симетрії та симетрії при часо-інверсних перетвореннях самих мікроскопічних потоків J_0 та J_i та побудованих на них кореляційних функцій. Тому можемо переписати рівняння (19) так:

$$L_{ij}(k) = (-1)^{i+j}\bar{L}_0 + k^2\bar{L}_{ij}, \quad i, j = \{1, 2\}. \qquad (20)$$

Оскільки ми цікавимося динамікою змінних $\hat{\varepsilon}_1(k)$, $\hat{\varepsilon}_2(k)$ у контексті її порівняння з динамікою єдиної змінної $\hat{\varepsilon}(k) = \hat{\varepsilon}_1(k) + \hat{\varepsilon}_2(k)$, то перейдемо до нових змінних

$$\hat{E}_1(k) = \hat{\varepsilon}_1(k) + \hat{\varepsilon}_2(k), \quad \hat{E}_2(k) = \hat{\varepsilon}_1(k) - \hat{\varepsilon}_2(k).$$

Це перетворення можна записати як $\hat{E}_i(k) = A_{ij}\hat{\varepsilon}_j(k)$, де матриця $\boldsymbol{A}$ та обернена до неї мають такий вигляд:

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{A}^{-1} = \frac{1}{2}\,\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

У зв'язку з тим, що частотна матриця для нашого випадку тотожно дорівнює нулеві, рівняння переносу (16) для малих відхилень $\Delta_i \equiv \langle\Delta\hat{E}_i(k)\rangle^t$ нових змінних від положення рівноваги набере вигляду:

$$\dot{\Delta}_i = -\phi'_{ij}\Delta_j, \qquad (21)$$

де $\phi'_{ij}(k) = L'_{il}(k)\cdot(\hat{\varepsilon}', \hat{\varepsilon}')^{-1}_{lj}$. Нова матриця кінетичних коефіцієнтів $L'_{il}(k)$ та нова матриця статичних кореляційних функцій, яку ми символічно позначили як $(\hat{\varepsilon}', \hat{\varepsilon}')$ (залежність від k для простоти запису опускаємо), задаються такими виразами

$$\boldsymbol{L}'(k) = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{L}(k)\cdot\boldsymbol{A}, \quad (\hat{\varepsilon}',\hat{\varepsilon}') = \boldsymbol{A}\cdot(\hat{\varepsilon},\hat{\varepsilon})\cdot\boldsymbol{A}.$$

Обчисливши дію матричних обкладок з матрицею $\boldsymbol{A}$, для $\boldsymbol{L}'(k)$ отримаємо:

$$\boldsymbol{L}'(k) = \begin{pmatrix} \sum\limits_{ij} L_{ij} & \sum\limits_{ij}(-)^{j+1}L_{ij} \\ \sum\limits_{ij}(-)^{i+1}L_{ij} & \sum\limits_{ij}(-)^{i+j}L_{ij} \end{pmatrix}. \tag{22}$$

Аналогічне співвідношення справджується для матриці $(\hat{\varepsilon}',\hat{\varepsilon}')$. За допомогою формули (22) легко переконатись, що величини $(\hat{\varepsilon}',\hat{\varepsilon}')$ є, насправді, статичними кореляційними функціями, побудованими на нових змінних $\hat{E}_1(k)$ та $\hat{E}_2(k)$, тобто

$$(\hat{\varepsilon}',\hat{\varepsilon}')_{ij} = (\hat{E}_i(k),\hat{E}_j(-k)),$$

і, наприклад, величина $(\hat{\varepsilon}',\hat{\varepsilon}')_{11} = (\hat{E}_1,\hat{E}_1)$ визначає узагальнену теплоємність системи [5]. Тому надалі будемо замість $(\hat{\varepsilon}',\hat{\varepsilon}')$ писати $(\hat{E},\hat{E})$, а замість $(\hat{\varepsilon}',\hat{\varepsilon}')^{-1} \to (\hat{E},\hat{E})^{-1}$.

Виражаючи нові коефіцієнти переносу через старі за формулою (22), отримаємо:

$$\begin{aligned} L'_{11} &= k^2\bar{L}_{\varepsilon\varepsilon}, \qquad (23)\\ L'_{12} &= L'_{21} = k^2\cdot\bar{L}_{\varepsilon\Delta},\\ L'_{22} &= \bar{L}_0 + k^2\cdot\bar{L}_{\Delta\Delta}, \end{aligned}$$

де використано такі позначення для коефіцієнтів переносу

$$\bar{L}_{\Delta\Delta} = \int\limits_0^\infty dt\,(J_\Delta(t),J_\Delta(0))\,,$$

$$\bar{L}_{\varepsilon\varepsilon} = \int\limits_0^\infty dt\,(J_\varepsilon(t),J_\varepsilon(0))\,,$$

$$\bar{L}_{\varepsilon\Delta} = \int\limits_0^\infty dt\,(J_\varepsilon(t),J_\Delta(0))\,,$$

а для мікроскопічного потоку $J_\Delta(k)$ маємо:

$$J_\Delta(k) = J_1(k) - J_2(k).$$

На основі формул (23) можемо тепер записати елементи нової частотної матриці ϕ'_{ij} у формі:

$$\phi'_{1i} = k^2\cdot\varphi'_{1i}, \qquad \phi'_{2i} = \varphi_{2i} + k^2\cdot\varphi'_{2i}, \tag{24}$$

де

$$\begin{aligned} \varphi'_{1i} &= \bar{L}_{\varepsilon\varepsilon}(\hat{E},\hat{E})^{-1}_{1i} + \bar{L}_{\varepsilon\Delta}(\hat{E},\hat{E})^{-1}_{2i},\\ \varphi_{2i} &= \bar{L}_0(\hat{E},\hat{E})^{-1}_{2i},\\ \varphi'_{2i} &= \bar{L}_{\varepsilon\Delta}(\hat{E},\hat{E})^{-1}_{1i} + \bar{L}_{\Delta\Delta}(\hat{E},\hat{E})^{-1}_{2i}. \qquad (25) \end{aligned}$$

Таким чином, система рівнянь (21) набирає вигляду

$$\begin{aligned} \dot{\Delta}_1 &= -k^2(\varphi'_{11}\Delta_1 + \varphi'_{12}\Delta_2), \qquad (26)\\ \dot{\Delta}_2 &= -(\varphi_{21}\Delta_1 + \varphi_{22}\Delta_2) - k^2(\varphi'_{21}\Delta_1 + \varphi'_{22}\Delta_2) \end{aligned}$$

і її розв'язки характеризуються такими власними значеннями:

$$\lambda_1 = -k^2\gamma_1, \quad \lambda_2 = -\Gamma - k^2\gamma_2, \tag{27}$$

де $\Gamma = \varphi_{22}$, $\gamma_1 = \varphi'_{11} - \varphi'_{12}\varphi_{21}/\varphi_{22}$ та $\gamma_2 = \varphi'_{22} + \varphi'_{12}\varphi_{21}/\varphi_{22}$. Вираз для γ_1 можна спростити, використовуючи (25) і враховуючи, що доданок із $\bar{L}_{\varepsilon\Delta}$ скорочується. Отримаємо:

$$\gamma_1 = \bar{L}_{\varepsilon\varepsilon}\left[(\hat{E},\hat{E})^{-1}_{11} - (\hat{E},\hat{E})^{-1}_{12}(\hat{E},\hat{E})^{-1}_{21}/(\hat{E},\hat{E})^{-1}_{22}\right].$$

Легко бачити, що вираз у квадратних дужках являє собою величину

$$\det||(\hat{E},\hat{E})^{-1}||/(\hat{E},\hat{E})^{-1}_{22} = 1/(\hat{E},\hat{E})_{11}.$$

Ураховуючи, що

$$(\hat{E}_1,\hat{E}_1) = (\hat{\varepsilon}(k),\hat{\varepsilon}(-k)),$$

остаточно отримуємо:

$$\gamma_1 = \bar{L}_{\varepsilon\varepsilon}\cdot(\hat{\varepsilon}(k),\hat{\varepsilon}(-k))^{-1} \tag{28}$$

Власним значенням (27) відповідають два власні вектори, які в нульовому наближенні за k мають такий вигляд:

$$\boldsymbol{G}_1 = \begin{pmatrix} \varphi_{22} \\ -\varphi_{21} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{G}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Таким чином, вважаючи, що в початковий момент часу наявне збурення динамічних змінних Δ_1^0 та Δ_2^0, їх еволюція в наступні моменти часу відбуватиметься за законом:

$$\Delta_1(t) = e^{-k^2\gamma_1 t}\cdot\Delta_1^0, \tag{29}$$

$$\Delta_2(t) = e^{-k^2\gamma_1 t}\ \frac{(\hat{E},\hat{E})_{12}}{(\hat{E},\hat{E})_{11}}\ \Delta_1^0 + e^{-(\Gamma+k^2\gamma_2)t} \times \left(\Delta_2^0 - \frac{(\hat{E},\hat{E})_{12}}{(\hat{E},\hat{E})_{11}}\cdot\Delta_1^0\right).$$

Видно, що власне значення

$$\lambda_1 = -k^2\gamma_1$$

описує дифузійну гідродинамічну моду, тоді як власне значення

$$\lambda_2 = -\Gamma - k^2\gamma_2$$

описує певний кінетичний процес. У гідродинамічній границі (для великих часів та великих просторових масштабів) внеском від другої моди [див. другий доданок другої формули в (29)] можна буде знехтувати завдяки швидкому загасанню кінетичного процесу [$\Gamma \gg k^2\gamma_2$ для $k \to 0$]. Кінетичній моді відповідає початкове збурення параметрів

$$\langle\Delta\varepsilon_1(k)\rangle^0 = -\langle\Delta\varepsilon_2(k)\rangle^0.$$

Дійсно, в цьому випадку

$$\Delta_1^0 = \langle\Delta\varepsilon_1(k)\rangle^0 + \langle\Delta\varepsilon_2(k)\rangle^0 = 0$$

і тоді, згідно з формулами (29), отримаємо:

$$\Delta_1(t) = 0,$$
$$\Delta_2(t) = e^{-(\Gamma+k^2\gamma_2)t}\cdot\Delta_2^0,$$

тобто поведінка

$$\Delta_2(t) = \langle\Delta\varepsilon_1(k)\rangle^t - \langle\Delta\varepsilon_2(k)\rangle^t$$

є чисто кінетичною й описує вирівнювання (еквілібризацію) парціяльних температур в обох підсистемах.

Гідродинамічній моді відповідає вибір початкових збурень у вигляді

$$\langle\Delta\varepsilon_2(k)\rangle^0 = \langle\Delta\varepsilon_1(k)\rangle^0\cdot\frac{(\hat{\varepsilon}_1,\hat{\varepsilon}_2)+(\hat{\varepsilon}_2,\hat{\varepsilon}_2)}{(\hat{\varepsilon}_1,\hat{\varepsilon}_1)+(\hat{\varepsilon}_1,\hat{\varepsilon}_2)} = \langle\Delta\varepsilon_1(k)\rangle^0\cdot\frac{(\hat{\varepsilon},\hat{\varepsilon}_2)}{(\hat{\varepsilon},\hat{\varepsilon}_1)}.$$

Неважко переконатися, що ця умова є еквівалентною до вимоги про рівність парціяльних температур у підсистемах. У цьому випадку внесок від кінетичної частини у другому рівнянні (29) зануляється, і ми отримуємо чисто гідродинамічну поведінку для відповідних змінних:

$$\Delta_1(t) = e^{-k^2\gamma_1 t}\cdot\Delta_1^0,$$
$$\Delta_2(t) = e^{-k^2\gamma_1 t}\cdot\frac{\Delta_1^0\cdot(\hat{E},\hat{E})_{12}}{(\hat{E},\hat{E})_{11}},$$

де

$$\Delta_1^0 = \langle\Delta\varepsilon_1(k)\rangle^0\cdot(\hat{\varepsilon},\hat{\varepsilon})/(\hat{\varepsilon},\hat{\varepsilon}_1).$$

Останній розв'язок описує прямування температури системи в цілому до рівноважного значення.

V. ВИСНОВКИ

Підсумовуючи результати наведеного вище аналізу для двох простих моделей температурної релаксації в бінарній суміші, можемо зробити такі висновки:

а) порівняльний аналіз отриманих результатів для двох моделей температурної релаксації (колективної та парціяльної) показав, що в гідродинамічній границі, коли мова йде про опис колективних процесів, ці моделі є еквівалентними;

б) модель парціяльної динаміки дає змогу вивчати особливості вирівнювання локальних температур у двох підсистемах, а відповідний час релаксації $\tau = 1/\Gamma$ визначається насамперед конкурентними кореляціями (неподібністю) між підсистемами;

в) з іншого боку, як і очікувалось, коефіцієнт згасання гідродинамічної моди залежить виключно від колективних ефектів і перехресні кореляції між підсистемами в гідродинамічному режимі не впливають на його величину;

г) цікавим є прояв повільного гідродинамічного процесу термодифузії в динаміці неконсервативних величин. Суттєвим моментом при цьому є доконечність явного врахування динамічної взаємодії з повільним процесом, що забезпечує коректність отриманих теоретичних результатів. Тому намагання описати динаміку однієї з парціяльних енерґій у формалізмі функцій пам'яті [7,8] в ділянці гідродинамічного режиму неминуче привело б до потреби враховувати функції пам'яті високих порядків і не дозволило б виділити внесок від гідродинамічного процесу в явній формі.

Розглянуті в цій статті моделі добре ілюструють ієрархію процесів релаксації в динаміці багаточастинкових систем [9] (гідродинамічні та кінетичні процеси добре розділені за своїми характерними часами) і дають змогу ліпше зрозуміти особливості опису динаміки зв'язаних підсистем (у нашому випадку асоційованих із густинами парціяльних енерґій), у яких через взаємодію з повільним процесом суттєво може проявлятися гідродинамічна складова. Робота підтримана Державним фондом фундаментальних досліджень, проєкт № 02.07/00303, за що автори висловлюють свою вдячність.

[1] D. N. Zubarev, *Nonequilibrium statical thermodynamics* (Consultant Bureau, New York, 1974).

[2] D. N. Zubarev, V. Morozov, G. Röpke, *Statistical mechanics of nonequilibrium Processes. Vol. 1, Basic Concepts, Kinetic Theory* (Akad. Verl., Berlin, 1996).

[3] І. М. Мриглод, Ю. К. Рудавський, М. В. Токарчук, О. Ф. Бацевич, Укр. фіз. журн. **44**, 1030 (1999)

[4] І. М. Мриглод, Ю. К. Рудавський, М. В. Токарчук, О. Ф. Бацевич, Укр. фіз. журн. **44**, 1174 (1999)

[5] I. M. Mryglod, M. V. Tokarchuk, R. Folk, Physica A **220**, 325 (1995).

[6] Ф. М. Куни, *Статистическая физика и термодинамика* (Наука, Москва, 1981).

[7] J. P. Boon, S. Yip, *Molecular hydrodynamics* (McGraw-Hill Inc., New York, 1980).

[8] J. P. Hansen, I. R. McDonald, *Theory of simple liquids, 2nd ed.* (Academic Press, London, 1986).

[9] N. N. Bogolyubov, In *Studies in statistical mechanics*, edited by J. de Boer and G. E. Uhlenbeck, vol. 1, (North-Holland, Amsterdam, 1962).

THE DYNAMICAL BEHAVIOUR OF THE BINARY MIXTURE WITH NON-CONSERVATIVE DYNAMICAL VARIABLES

O. F. Batsevych[2], I. M. Mryglod[1], Yu. K. Rudavskii[2], M. V. Tokarchuk[1]

[1]*Institute for Condensed Matter Physics, National Academy of Sciences of Ukraine*
1 Svientsitskii Str., Lviv, UA–79011, Ukraine

[2]*National University "Lvivska Politekhnika"*
12 Bandera Str., Lviv, UA–79013, Ukraine

It is known that the linearized hydrodynamic equations well describe the dynamical properties of liquids and liquid mixtures in the range of hydrodynamic regime, i.e. for large spatial and time scales. The goal of this paper is to study the behaviour of a system just beyond the hydrodynamic region for a case, when non-conserved parameters, i.e., parameters, which cannot be represented as densities of conserved quantities, are included into the basic set of dynamic variables. In particular, the dynamics of a binary mixture is considered within the basic set of dynamic variables which includes the partial energies' densities of both subsystems. It is shown that there exist two heat modes, one of which is a hydrodynamic one and describes thermodiffusion in the system, and the second mode is a kinetic one and describes the process of temperature equilibration between subsystems. In the hydrodynamic limit the contribution of the second mode is negligible.