Teoria kinetyczna

Rzeszów University of Technology

15 listopada 2023

Równanie kinetyczne Boltzmanna

Funkcja rozkładu cząstek $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$

W układzie izolowanym bez zderzeń cząsteczek

$$\frac{df}{dt} = 0 \tag{1}$$

Przy istnieniu zderzeń

$$\frac{df}{dt} = \mathrm{Zd}\, f \tag{2}$$

$$\frac{\partial f(\vec{v})}{\partial t} + \frac{\partial \vec{r}}{\partial t}\frac{\partial f(\vec{v})}{\partial \vec{r}} + \frac{\partial \vec{v}}{\partial t}\frac{\partial f(\vec{v})}{\partial \vec{v}} = \int d^3\mathrm{v}' \, \left\{ w(\vec{v}', \vec{v})\, f(\vec{v}')\, [1 - f(\vec{v})] - w(\vec{v}, \vec{v}')\, f(\vec{v})\, [1 - f(\vec{v}')] \right\}$$

Przyjmujemy do uwagi, że

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \frac{\vec{F}}{m}, \qquad \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} = \vec{v} \tag{4}$$

i ma miejsce zasada symetrii

$$w(\vec{v}, \vec{v}') = w(\vec{v}', \vec{v}) \tag{5}$$

Dostajemy równanie kinetyczne Boltzmanna

$$\frac{\partial f(\vec{v})}{\partial t} + \vec{v}\,\frac{\partial f(\vec{v})}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{m}\,\frac{\partial f(\vec{v})}{\partial \vec{v}} = \int d^3\mathrm{v}'\, w(\vec{v}', \vec{v}) \left[f(\vec{v}') - f(\vec{v}) \right] \tag{6}$$

Równanie kinetyczne daje mikroskopowy opis ewolucji stanu gazu.

Równania makroskopowe

Gęstość rozkładu cząstek

$$N(\mathrm{r}, t) = \int d^3\vec{v}\, f(\vec{r}, \vec{v}, t) \tag{7}$$

Prędkość makroskopowego ruchu cząstek

$$\vec{V} = \overline{\vec{v}} = \frac{1}{N} \int d^3\vec{v}\, \vec{v}\, f(\vec{r}, \vec{v}, t) \tag{8}$$

Bez zewnętrznego pola $\vec{F} = 0$, i będziemy pisali równania tak

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha}(v_\alpha f) = \mathrm{Zd}\, f, \tag{9}$$

$$\mathrm{Zd}\, f = \int w\,(f' - f)\, d\Gamma', \tag{10}$$

$$N = \int f\, d\Gamma, \qquad \vec{V} = \int \vec{v}\, f\, d\Gamma \tag{11}$$

gdzie $f = f(\vec{v})$, $f' = f(\vec{v}')$, $d\Gamma = d^3\mathrm{v}$, $d\Gamma' = d^3\mathrm{v}'$, $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3)$, $x_\alpha y_\alpha \equiv \sum_\alpha x_\alpha y_\alpha$. Dla zderzeniowej części zmian

$$\int (\mathrm{Zd}\, f)\, d\Gamma = 0, \qquad \int \varepsilon\, (\mathrm{Zd}\, f)\, d\Gamma = 0, \qquad \int \vec{v}\, (\mathrm{Zd}\, f)\, d\Gamma = 0, \tag{12}$$

Przemnożymy (9) na masę cząsteczki m i scałkujemy względem Γ

$$\int d\Gamma\, m\, \frac{\partial f}{\partial t} + \int d\Gamma\, m\, \frac{\partial}{\partial x_\alpha}\, v_\alpha f = 0 \tag{13}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\, m \int d\Gamma\, f + \frac{\partial}{\partial x_\alpha}\, m \int d\Gamma\, v_\alpha f = 0 \tag{14}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\, mN + \frac{\partial}{\partial x_\alpha}\, mNV_\alpha = 0 \tag{15}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div}\, \rho \vec{V} = 0 \tag{16}$$

- równanie ciągłości (zasada zachowania masy gazu). W tym równaniu $\rho = mN$ - gęstość gazu, $\mathrm{div}\, \vec{V} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha}\, V_\alpha$.

Zasada zachowania pędu

Przemnożymy równanie (9) na $p_\alpha = mv_\alpha$ i scałkujemy

$$\int d\Gamma\, mv_\alpha \frac{\partial f}{\partial t} + \int d\Gamma\, mv_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\beta} v_\beta f = 0 \tag{17}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} m \int d\Gamma\, v_\alpha f + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \int d\Gamma\, mv_\alpha v_\beta f = 0 \tag{18}$$

$$\frac{\partial \rho V_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \Pi_{\alpha\beta} = 0 \tag{19}$$

- zasada zachowania pędu.

Tensor gęstości strumienia pędu

$$\Pi_{\alpha\beta} = \int mv_\alpha v_\beta \, d\Gamma \tag{20}$$

Składowa $\Pi_{\alpha\beta}$ tego tensora jest składową α pędu przenoszonego w 1 s przez cząsteczki przepływające przez jednostkową powierzchnię prostopadłą do osi x_β.

Zasada zachowania energii

Przy przemnożeniu równania (9) na ε

$$\int d\Gamma\, \varepsilon\, \frac{\partial f}{\partial t} + \int d\Gamma\, \varepsilon\, \frac{\partial}{\partial x_\alpha}\, v_\alpha f = 0 \tag{21}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d\Gamma\, \varepsilon f + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \int d\Gamma\, \varepsilon v_\alpha f = 0 \tag{22}$$

$$\frac{\partial (N\overline{\varepsilon})}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{q} = 0 \tag{23}$$

- zasada zachowania energii. $\overline{\varepsilon} = \frac{1}{N} \int \varepsilon d\Gamma$.

Gęstość strumienia energii w gazie

$$\vec{q} = \int \varepsilon \vec{v} f\, d\Gamma \tag{24}$$

$$v'_x = v_x \cos\varphi + v_y \sin\varphi \tag{25}$$
$$v'_y = -v_x \sin\varphi + v_y \cos\varphi \tag{26}$$
$$v'_z = v_z \tag{27}$$

albo

$$\begin{pmatrix} v'_x \\ v'_y \\ v'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} \tag{28}$$

inaczej $\vec{v}' = \hat{A}\vec{v}$, gdzie $\hat{A}$ - macierz transformacji, $\hat{A}^T\hat{A} = 1$ – transformacja ortogonalna.

Tensor 2 rzędu w 3D przestrzeni ma 9 składowych. Przykład: *tensor przewodnictwa*:

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \tag{29}$$

Przy obrotach wokół osi z

$$\sigma'_{xy} = \sigma_{xx}\cos^2\varphi + \sigma_{xy}\cos\varphi\sin\varphi + \sigma_{yx}\cos\varphi\sin\varphi + \sigma_{yy}\sin^2\varphi \tag{30}$$