§ 16. Динамический вывод кинетического уравнения

Хотя изложенный в § 3 вывод кинетического уравнения удовлетворителен с физической точки зрения, представляет значительный интерес проследить за тем, каким образом это уравнение можно аналитически получить из математического аппарата теории, т. е. из уравнений движения частиц газа; такой вывод дан *Н. Н. Боголюбовым* (1946). Значение этого метода состоит также и в том, что он дает регулярную процедуру, позволяющую в принципе получить не только уравнение Больцмана, но и поправки к нему, т. е. члены следующих порядков по малому «параметру газовости» — отношению $(d/\bar{r})^3$, где d — молекулярные размеры (радиус действия молекулярных сил), а $\bar{r}$ — среднее расстояние между молекулами. Излагаемый ниже вывод относится к одноатомному газу в чисто классических рамках, т. е. в предположении, что не только свободное движение, но и процессы столкновения частиц газа описываются классической механикой.

Исходным пунктом метода является теорема Лиувилля для функции распределения газа в целом как системы $\mathscr{N}$ частиц. Обозначим такую функцию (в $6\mathscr{N}$-мерном фазовом пространстве) посредством $f^{(\mathscr{N})}(t, \tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_{\mathscr{N}})$, где символы τ_a обозначают совокупности координат и компонент импульса a-й частицы: $\tau_a = (\mathbf{r}_a, \mathbf{p}_a)$; эта функция будет предполагаться нормированной на единицу:

$$\int f^{(\mathscr{N})}(t, \tau_1, \ldots, \tau_{\mathscr{N}})\, d\tau_1 \ldots d\tau_{\mathscr{N}} = 1, \quad d\tau_a = d^3x_a\, d^3p_a.$$

Фигурирующая в уравнении Больцмана «одночастичная» функция распределения получается интегрированием функции $f^{(\mathscr{N})}$ по всем $d\tau_a$, кроме одного:

$$f^{(1)}(t, \tau_1) = \int f^{(\mathscr{N})}\, d\tau_2 \ldots d\tau_{\mathscr{N}}; \qquad (16,1)$$

функция $f^{(1)}$ тоже нормирована на 1; обозначение же f (без индекса) сохраним для функции распределения, нормированной на полное число частиц: $f = \mathscr{N} f^{(1)}$.

Напомним (см. V, § 3), что теорема Лиувилля возникает как следствие уравнения непрерывности в фазовом пространстве, которому должна удовлетворять функция распределения замкнутой системы:

$$\frac{\partial f^{(\mathscr{N})}}{\partial t} + \sum_{a=1}^{\mathscr{N}} \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_a}\left(f^{(\mathscr{N})} \dot{\mathbf{r}}_a\right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_a}\left(f^{(\mathscr{N})} \dot{\mathbf{p}}_a\right) \right\} = 0. \qquad (16,2)$$

С помощью уравнений Гамильтона

$$\dot{\mathbf{r}}_a = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_a}, \quad \dot{\mathbf{p}}_a = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_a} \tag{16,3}$$

отсюда получается равенство

$$\frac{\partial f^{(\mathcal{N})}}{\partial t} + \sum_{a=1}^{\mathcal{N}} \left\{ \frac{\partial f^{(\mathcal{N})}}{\partial \mathbf{r}_a} \dot{\mathbf{r}}_a + \frac{\partial f^{(\mathcal{N})}}{\partial \mathbf{p}_a} \dot{\mathbf{p}}_a \right\} = \frac{d f^{(\mathcal{N})}}{dt} = 0, \tag{16,4}$$

причем $\dot{\mathbf{r}}_a \equiv \mathbf{v}_a$ и $\dot{\mathbf{p}}_a$ предполагаются выраженными через $\tau_1, \tau_2, \ldots$ согласно уравнениям (16,3); равенство (16,4) и составляет содержание теоремы Лиувилля.

Функцию Гамильтона одноатомного газа представим в виде

$$H = \sum_{a \leqslant \mathcal{N}} \frac{p_a^2}{2m} + \sum_{b < a \leqslant \mathcal{N}} U(|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|). \tag{16,5}$$

Здесь предполагается, что внешнее поле отсутствует, а взаимодействие частиц газа друг с другом сводится к сумме их попарных взаимодействий[1]). С такой функцией Гамильтона уравнение (16,4) принимает вид

$$\frac{\partial f^{(\mathcal{N})}}{\partial t} + \sum_{a=1}^{\mathcal{N}} \left\{ \frac{\partial f^{(\mathcal{N})}}{\partial \mathbf{r}_a} \mathbf{v}_a - \frac{\partial f^{(\mathcal{N})}}{\partial \mathbf{p}_a} \sum_{b<a} \frac{\partial U_{ab}}{\partial \mathbf{r}_a} \right\} = 0, \tag{16,6}$$

где $U_{ab}\,(a \neq b)$ обозначает $U(|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|)$.

Проинтегрируем теперь это уравнение по $d\tau_2 \ldots d\tau_{\mathcal{N}}$. В результате такого интегрирования из всех членов под знаком суммы в (16,6) останутся лишь те, которые содержат дифференцирования по $\mathbf{p}_1$ или $\mathbf{r}_1$; интегралы от остальных членов преобразуются в интегралы по бесконечно удаленным поверхностям в импульсном или координатном пространстве и обращаются в нуль. Таким образом, получим

$$\frac{\partial f^{(1)}(t, \tau_1)}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \frac{\partial f^{(1)}(t, \tau_1)}{\partial \mathbf{r}_1} = \mathcal{N} \int \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial f^{(2)}(t, \tau_1, \tau_2)}{\partial \mathbf{p}_1} d\tau_2, \tag{16,7}$$

где $f^{(2)}$ — нормированная на 1 двухчастичная функция распределения, т. е. интеграл

$$f^{(2)}(t, \tau_1, \tau_2) = \int f^{(\mathcal{N})} d\tau_3 \ldots d\tau_{\mathcal{N}} \tag{16,8}$$

[1]) Последнее предположение имеет модельный характер. Подчеркнем, однако, что на результате первого приближения (отвечающего уравнению Больцмана) оно вообще не сказывается: в этом приближении фигурируют только двойные столкновения частиц, в которых другие (не парные) взаимодействия не участвуют.

(множитель $\mathcal{N}$ в (16,7) учитывает члены, отличающиеся лишь обозначением переменных интегрирования; строго говоря, число таких членов есть $\mathcal{N}-1$, но, ввиду очень большой величины $\mathcal{N}$, $\mathcal{N}-1\approx\mathcal{N}$).

Аналогичным образом, проинтегрировав (16,6) по $d\tau_3\ldots$ $\ldots d\tau_{\mathcal{N}}$, получим уравнение

$$\frac{\partial f^{(2)}}{\partial t}+\mathbf{v}_1\frac{\partial f^{(2)}}{\partial \mathbf{r}_1}+\mathbf{v}_2\frac{\partial f^{(2)}}{\partial \mathbf{r}_2}-\frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1}\frac{\partial f^{(2)}}{\partial \mathbf{p}_1}-\frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_2}\frac{\partial f^{(2)}}{\partial \mathbf{p}_2}=$$
$$=\mathcal{N}\int\left[\frac{\partial f^{(3)}}{\partial \mathbf{p}_1}\frac{\partial U_{13}}{\partial \mathbf{r}_1}+\frac{\partial f^{(3)}}{\partial \mathbf{p}_2}\frac{\partial U_{23}}{\partial \mathbf{r}_2}\right]d\tau_3, \qquad (16,9)$$

где $f^{(3)}(t,\tau_1,\tau_2,\tau_3)$ — трехчастичная функция распределения.

Продолжая таким образом, мы получили бы практически неограниченную ($\mathcal{N}$ очень велико!) цепочку последовательных уравнений, каждое из которых выражает $f^{(n)}$ через $f^{(n+1)}$. Все эти уравнения — точные в том смысле, что никаких предположений, связанных с разреженностью газа, в них еще не делалось. Но для получения замкнутой системы уравнений эту цепочку надо где-то оборвать, воспользовавшись условием разреженности газа. В частности, первому приближению метода отвечает обрыв цепочки уже на первом уравнении (уравнение (16,7)), в котором двухчастичная функция $f^{(2)}$ будет приближенно выражена через $f^{(1)}$. Последнее осуществляется с учетом разреженности газа с помощью уравнения (16,9).

Обращаясь к этому уравнению, покажем прежде всего, что интеграл в его правой стороне мал. Действительно, функция $U(r)$ заметно отлична от нуля лишь в радиусе действия сил, т. е. при $r\leqslant d$. Поэтому и в обеих частях интеграла в (16,9) интегрирования по координатам происходят фактически лишь по областям $|\mathbf{r}_3-\mathbf{r}_1|\leqslant d$ или $|\mathbf{r}_3-\mathbf{r}_2|\leqslant d$, т. е. по объему $\sim d^3$. Заметив также, что при интегрировании по всему объему газа $\mathcal{V}\sim\mathcal{N}\bar{r}^3$ было бы $\int f^{(3)}\,d\tau_3=f^{(2)}$, находим следующую оценку:

$$\mathcal{N}\int\frac{\partial f^{(3)}}{\partial \mathbf{p}_1}\frac{\partial U_{13}}{\partial \mathbf{r}_1}\,d\tau_3\sim\frac{\partial U(r)}{\partial r}\frac{\partial f^{(2)}}{\partial p_1}\frac{d^3}{\bar{r}^3}.$$

Отсюда видно, что правая сторона уравнения (16,9) мала в отношении $(d/\bar{r})^3$ по сравнению с содержащими $\partial U/\partial\mathbf{r}$ членами в левой стороне уравнения и поэтому ею можно пренебречь. Совокупность же членов в левой стороне уравнения представляет собой полную производную $df^{(2)}/dt$, в которой $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$, $\mathbf{p}_1$, $\mathbf{p}_2$ рассматриваются как функции времени, удовлетворяющие уравнениям движения (16,3) с функцией Гамильтона задачи двух тел:

$$H=\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m}+\frac{\mathbf{p}_2^2}{2m}+U(|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|).$$

Таким образом, имеем

$$\frac{d}{dt} f^{(2)}(t, \tau_1, \tau_2) = 0. \tag{16,10}$$

До сих пор все преобразования уравнений носили чисто механический характер. Разумеется, для вывода кинетического уравнения необходимо сделать также и некоторое предположение статистического характера. Оно может быть сформулировано как утверждение о статистической независимости каждой пары частиц, вступающих в столкновение (по существу именно это предположение подразумевалось при выводе кинетического уравнения в § 3, когда вероятность столкновения записывалась в виде (2,1), пропорциональном произведению ff_1). В излагаемом методе это утверждение играет роль начального условия к дифференциальному уравнению (16,10). Именно оно вносит асимметрию по отношению к обоим направлениям времени, в результате чего из инвариантных к обращению времени уравнений механики получается необратимое кинетическое уравнение. Корреляция между положениями и импульсами частиц газа возникает лишь в течение времени их столкновения ($\sim d/\bar{v}$) и простирается на расстояния $\sim d$. Таким образом, предположение о статистической независимости сталкивающихся частиц является также и источником принципиальных ограничений в допускаемых кинетическим уравнением расстояниях и промежутках времени, о которых говорилось уже в § 3.

Пусть t_0 — некоторый момент времени, предшествующий столкновению, когда две частицы находятся еще далеко друг от друга ($|\mathbf{r}_{10} - \mathbf{r}_{20}| \gg d$, где индекс нуль отличает значения величин в этот момент). Статистическая независимость сталкивающихся частиц означает, что в такой момент t_0 двухчастичная функция распределения распадается на произведение двух одночастичных функций $f^{(1)}$. Поэтому интегрирование уравнения (16,10) от t_0 до t дает

$$f^{(2)}(t, \tau_1, \tau_2) = f^{(1)}(t_0, \tau_{10}) f^{(1)}(t_0, \tau_{20}). \tag{16,11}$$

Здесь $\tau_{10} = (\mathbf{r}_{10}, \mathbf{p}_{10})$ и $\tau_{20} = (\mathbf{r}_{20}, \mathbf{p}_{20})$ надо понимать как те значения координат и импульсов, которые должны иметь частицы в момент t_0 для того, чтобы к моменту t приобрести требуемые значения $\tau_1 = (\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)$ и $\tau_2 (\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)$; в этом смысле τ_{10}, τ_{20} являются функциями от τ_1, τ_2 и $t - t_0$ (причем от $t - t_0$ зависят лишь $\mathbf{r}_{10}$ и $\mathbf{r}_{20}$; значения же $\mathbf{p}_{10}$ и $\mathbf{p}_{20}$, относясь к свободно движущимся перед столкновением частицам, от выбора $t - t_0$ не зависят).

Возвратимся к уравнению (16,7) — будущему кинетическому уравнению. Его левая сторона уже имеет требуемый вид; нас будет интересовать теперь интеграл в его правой части, который должен превратиться в конце концов в интеграл столкновений уравнения Больцмана. Подставив в этот интеграл $f^{(2)}$ из (16,11) и перейдя в обеих сторонах уравнения от функции $f^{(1)}$ к функции $f=\mathcal{N}f^{(1)}$, пишем

$$\frac{\partial f(t, \tau_1)}{\partial t}+\mathbf{v}_1\frac{\partial f(t, \tau_1)}{\partial \mathbf{r}_1}=\operatorname{St} f,$$

где

$$\operatorname{St} f=\int \frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1}\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1}\{f(t_0, \tau_{10})f(t_0, \tau_{20})\}\,d\tau_2. \tag{16,12}$$

В интеграле (16,12) существенна только область $|\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1|\sim d$ — область, в которой происходит столкновение. Но в этой области можно пренебречь (в рассматриваемом первом приближении!) координатной зависимостью функции f; эта функция заметно меняется лишь на расстояниях L (характерные размеры задачи), во всяком случае больших по сравнению с d. Мы не изменим поэтому окончательного вида интеграла столкновений, если будем рассматривать (с целью некоторого упрощения рассуждений и записи формул) пространственно-однородный случай, т. е. предположив, что функция f вообще не зависит от координат. Сразу же отметим, что в функциях $f(t_0, \mathbf{p}_{10})$, $f(t_0, \mathbf{p}_{20})$ пропадает тогда и явная (через посредство $\mathbf{r}_{10}(t)$ и $\mathbf{r}_{20}(t)$) зависимость от времени.

Преобразуем подынтегральное выражение в (16,12), воспользовавшись тем, что выражение в фигурных скобках является интегралом движения (именно как таковое оно появилось в (16,11); независимо от этого очевидно, что $\mathbf{p}_{10}$ и $\mathbf{p}_{20}$ — значения импульсов в фиксированный момент времени t_0 — уже по определению являются интегралами движения). Учтя также и отмеченное выше отсутствие в них явной зависимости от времени t, имеем

$$\frac{d}{dt}f(t_0, \mathbf{p}_{10})f(t_0, \mathbf{p}_{20})=$$
$$=\left(\mathbf{v}_1\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1}+\mathbf{v}_2\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2}-\frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_1}\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1}-\frac{\partial U_{12}}{\partial \mathbf{r}_2}\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2}\right)f(t_0, \mathbf{p}_{10})f(t_0, \mathbf{p}_{20})=0. \tag{16,13}$$

Выразим отсюда производную по $\mathbf{p}_1$ через производные по $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ и $\mathbf{p}_2$ и подставим в (16,12). Член с производной $\partial/\partial \mathbf{p}_2$ исчезает после преобразования в интеграл по поверхности в импульсном пространстве. После этого получим

$$\operatorname{St} f(t, \mathbf{p}_1)=\int \mathbf{v}_{\text{отн}}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\{f(t_0, \mathbf{p}_{10})f(t_0, \mathbf{p}_{20})\}\,d^3x\,d^3p_2, \tag{16,14}$$

где введена относительная скорость частиц $\mathbf{v}_{\text{отн}}=\mathbf{v}_1-\mathbf{v}_2$ и учтено, что $\mathbf{p}_{10}$ и $\mathbf{p}_{20}$ (а с ними и все выражение в фигурных скобках) зависят от $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ лишь через разность $\mathbf{r}=\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2$. Введя вместо $\mathbf{r}=(x, y, z)$ цилиндрические координаты z, ρ, φ с осью z вдоль

$\mathbf{v}_{\text{отн}}$, заметив, что $\mathbf{v}_{\text{отн}}\partial/\partial\mathbf{r} = v_{\text{отн}}\partial/\partial z$, и проинтегрировав по dz, перепишем (16,14) в виде[1])

$$\mathrm{St}\, f(t, \mathbf{p}_1) = \int \{f(t_0, \mathbf{p}_{10}) f(t_0, \mathbf{p}_{20})\} \Big|_{z=-\infty}^{z=\infty} v_{\text{отн}} \rho\, d\rho\, d\varphi \cdot d^3 p_2. \qquad (16,15)$$

Вспомним теперь, что $\mathbf{p}_{10}$ и $\mathbf{p}_{20}$ — начальные (в момент t_0) импульсы частиц, которые в конечный момент t имеют импульсы $\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{p}_2$. Если в конечный момент $z = z_1 - z_2 = -\infty$, то ясно, что в начальный момент частицы находились «еще дальше» друг от друга, т. е. столкновения вообще не было; другими словами, в этом случае начальные и конечные импульсы совпадают:

$$\mathbf{p}_{10} = \mathbf{p}_1, \quad \mathbf{p}_{20} = \mathbf{p}_2 \quad \text{при} \quad z = -\infty.$$

Если же $z = +\infty$, то $\mathbf{p}_{10}$ и $\mathbf{p}_{20}$ играют роль начальных импульсов для столкновения, в результате которого частицы приобретают импульсы $\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{p}_2$; обозначим в этом случае

$$\mathbf{p}_{10} = \mathbf{p}_1'(\rho), \quad \mathbf{p}_{20} = \mathbf{p}_2'(\rho) \text{ при } z = +\infty.$$

Эти значения являются функциями координаты ρ, играющей роль прицельного параметра столкновения. Произведение же

$$\rho\, d\rho\, d\varphi = d\sigma$$

есть классическое сечение столкновений.

Наконец, остается заметить, что явную зависимость функций $f(t_0, \mathbf{p}_{10})$ и $f(t_0, \mathbf{p}_{20})$ от t_0 можно заменить в рассматриваемом приближении такой же зависимостью от t. Действительно, справедливость утверждения (16,11) требует соблюдения лишь неравенства $t - t_0 \gg d/\bar{v}$: в момент t_0 расстояние между частицами должно быть велико по сравнению с радиусом действия сил d. Но разность $t - t_0$ может быть выбрана так, чтобы удовлетворять также и условию $t - t_0 \ll l/\bar{v}$, где l — длина пробега; отношение же $l/\bar{v}$ — время свободного пробега — есть как раз та характерная величина, которая определяет периоды возможного изменения функции распределения со временем. Изменение функции распределения за время $t - t_0$ будет тогда относительно малым, так что им можно пренебречь.

---

[1]) Пределы $z = \pm\infty$ надо понимать как расстояния, большие по сравнению с d, но малые по сравнению с длиной пробега l (при буквально бесконечных пределах все выражение обратилось бы в нуль, поскольку $f \equiv 0$ вне объема, занимаемого газом). Такая ситуация возникла вследствие того, что при переходе от (16,12) к (16,14) было использовано уравнение (16,13), справедливое лишь до тех пор, пока рассматриваемые частицы не испытывают следующих столкновений.

После всего сказанного получаем окончательное выражение для интеграла (16,15):

$$\mathrm{St}\, f(t, \mathbf{p}_1) = \int \{f(t, \mathbf{p}_1') f(t, \mathbf{p}_2') - f(t, \mathbf{p}_1) f(t, \mathbf{p}_2)\} v_{\text{отн}}\, d\sigma\, d^3p_2, \quad (16,16)$$

совпадающее с больцмановским интегралом столкновений (3,9).

§ 17. Кинетическое уравнение с учетом тройных столкновений

Для нахождения первых поправочных членов к уравнению Больцмана надо вернуться к тем пунктам изложенных в § 16 вычислений, в которых были произведены пренебрежения, и продвинуть точность вычислений на один порядок (по параметру газовости) дальше. Эти пренебрежения относились, прежде всего, к уравнению (16,9), в котором были опущены члены, содержащие тройную корреляцию $f^{(3)}$; тем самым были исключены из рассмотрения тройные столкновения атомов. Кроме того, при преобразовании интеграла столкновения (16,12) к окончательному виду (16,16) было пренебрежено изменением функции распределения на расстояниях $\sim d$ и за времена $\sim d/\bar{v}$; тем самым двойные столкновения рассматривались как «локальные» — происходящие в одной точке. Теперь должны быть учтены оба эти источника поправок — тройные столкновения и «нелокальность» парных столкновений.

В первом приближении цепочка уравнений была оборвана на втором уравнении, связывающем $f^{(2)}$ с $f^{(3)}$. Во втором приближении надо дойти до третьего уравнения, связывающего $f^{(3)}$ с $f^{(4)}$, причем члены с $f^{(4)}$ в нем можно опустить (подобно тому, как в первом приближении были опущены члены с $f^{(3)}$ в (16,9)). После этого оно сведется к виду

$$\frac{d}{dt} f^{(3)}(t, \tau_1, \tau_2, \tau_3) = 0, \quad (17,1)$$

аналогичному прежнему уравнению (16,10) для $f^{(2)}$; переменные τ_1, τ_2, τ_3 в (17,1) предполагаются изменяющимися со временем согласно уравнениям движения задачи трех тел (причем взаимодействие между частицами по-прежнему будем считать парным[1])). С учетом статистической независимости частиц перед столкновением решение уравнения (17,1) есть

$$f^{(3)}(t, \tau_1, \tau_2, \tau_3) = f^{(1)}(t_0, \tau_{10}) f^{(1)}(t_0, \tau_{20}) f^{(1)}(t_0, \tau_{30}). \quad (17,2)$$

[1]) В противоположность первому приближению (ср. примечание на стр. 91) теперь это предположение несколько ограничивает общность рассмотрения, поскольку в тройных столкновениях могли бы проявляться и тройные взаимодействия (т. е. члены в функции Гамильтона вида $U(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1)$), не сводящиеся к парным.