О выводе уравнения Больцмана из уравнения Фоккера—Планка—Колмогорова

А.С. Трушечкин

Математический институт им. В.А. Стеклова РАН

Международная конференция
«Проблема необратимости в классических и квантовых динамических системах»
Москва, МИАН, 8—10 декабря 2011 г.

Основной результат

- Предложен вывод необратимого кинетического уравнения Больцмана из уравнения Фоккера—Планка—Колмогорова для микродинамики

Газ как совокупность частиц: уравнения Гамильтона

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \qquad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i},$$

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i,j=1, i>j}^{N} \Phi(|q_i - q_j|)$$

Обратимость: $t \to -t,\ p \to -p$

Газ как сплошная среда: уравнение Больцмана

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = -\frac{p_1}{m}\frac{\partial f_1}{\partial q_1} + \mathsf{St} f_1$$

$$\mathsf{St} f_1 = n\int \frac{|p_1 - p_2|}{m}[f_1(q_1, p_1', t) f_1(q_1, p_2', t) - f_1(q_1, p_1, t) f_1(q_1, p_2, t)]\, d\sigma dp_2$$

$$f_1 = f_1(q_1, p_1, t),\ d\sigma = \rho\, d\rho\, d\varphi,\ n > 0,$$

$$p_1' = p_1'(p_1, p_2, \rho, \varphi), \quad p_2' = p_2'(p_1, p_2, \rho, \varphi).$$

H-теорема: $-\frac{d}{dt}\int f_1(q_1, p_1, t) \ln f_1(q_1, p_1, t)\, dq_1 dp_1 \geq 0$

<u>Необратимость</u> (возрастание энтропии)

Парадокс необратимости

Описываем газ как совокупность частиц – обратимая динамика

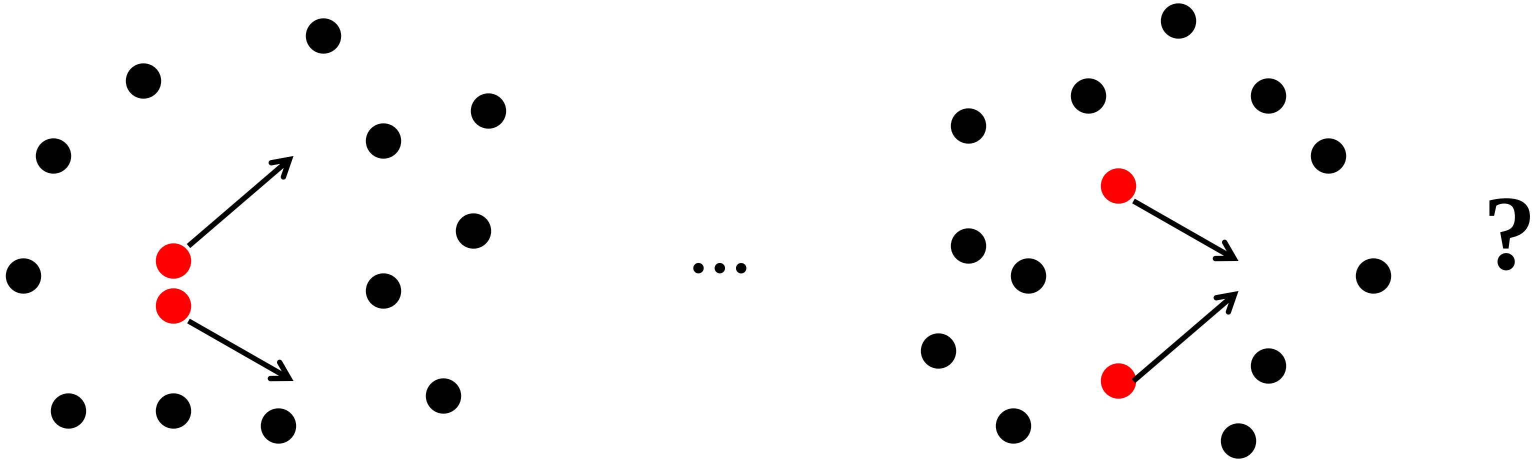
Описываем газ как сплошную среду – необратимая динамика

Гипотеза молекулярного хаоса

$$\mathsf{St} = n \int \frac{|p_1 - p_2|}{m} [\text{``}f_1 f_1 - f_1 f_1\text{''}] d\sigma dp_2.$$

Статистическая независимость
состояний сталкивающихся частиц

Интуитивно: в результате столкновения между состояниями частиц возникает корреляция. Однако прежде, чем они снова столкнуться, они испытают большое число столкновений с другими частицами, что разрушит эту корреляцию.



Можно ли исходя из <u>динамики</u> доказать <u>статистическое</u> свойство молекулярного хаоса?

Попытки вывода необратимого уравнения Больцмана из обратимых уравнений микродинамики

- Боголюбов, 1946
- Lanford, 1975
- и другие

Уравнение Лиувилля: $\dfrac{\partial \rho}{\partial t} = \{H, \rho\}$

$$\rho = \rho(q, p, t) = \rho(q_1, p_1, \ldots, q_N, p_N, t)$$

Решение: $\rho(q, p, t) = S_{-t}^{(N)} \rho(q, p, 0)$

$\{\cdot, \cdot\}$ – скобки Пуассона $\quad S_{-t}^{(N)}$ – гамильтонов поток

Цепочка уравнений Боголюбова

$$f_s(x_1, \ldots, x_s, t) = V^s \int \rho(x_1, \ldots, x_N, t) dx_{s+1} \ldots dx_N$$

$x_i = (q_i, p_i),\ s = 1, 2, \ldots, N-1,$ V – объём пространства

Интегрируя уравнение Лиувилля (для $\partial\rho/\partial t$) по $dx_{s+1}, \ldots, dx_N$, получаем уравнение для $\partial f_s/\partial t$, выраженное через f_s и f_{s+1}.

В частности, для *s* = 1 имеем

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = -\frac{p_1}{m}\frac{\partial f_1}{\partial q_1} + \frac{N-1}{V}\int \frac{\partial \Phi(|q_1 - q_2|)}{\partial q_1}\frac{\partial f_2(x_1, x_2, t)}{\partial p_1} dq_2 dp_2$$

Сравним с уравнением Больцмана:

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = -\frac{p_1}{m}\frac{\partial f_1}{\partial q_1} + n\int \frac{|p_1 - p_2|}{m}[\text{“}f_1 f_1 - f_1 f_1\text{”}] d\sigma dp_2.$$

Можно ли разложить двухчастичную функцию в произведение одночастичных (~ гипотеза молекулярного хаоса)?

Вывод Лэнфорда уравнения Больцмана

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i,j=1,i>j}^{N} \Phi\left(\frac{|q_i - q_j|}{\mu}\right)$$ (ввели малый безразмерный парметр μ)

- Предел Больцмана—Грэда:

  $N \to \infty,$ (большое число частиц)

  $\mu \to 0,$ (малый радиус взаимодействия частиц)

  $N\mu^2 = const.$ (постоянная длина свободного пробега)
- Все статистические предположения включены в начальные условия
- Представление решения цепочки Боголюбова в виде ряда теории возмущений по числу столкновений
- Ряд сходится лишь для малых времён
- Итого: удаётся строго вывести уравнение Больцмана, но только для малых времён
- Уравнение Больцмана, напротив, интересно с точки зрения асимптотики на больших временах (релаксация к распределению Максвелла)

Вывод Боголюбова уравнения Больцмана

- Иерархия времён
  - Динамический этап (малые времена): синхронизация многочастичных функций f_s с одночастичной функцией f_1.
  - Кинетический этап (большие времена): f_s зависят от времени только через f_1, релаксация f_1 к распределению Максвелла
- Итого: выведено уравнение Больцмана для больших времён. Но:
  - Дополнительные предположения (идеал: все статистические предположения должны быть включены в начальные условия, далее динамика полностью определяется решением задачи Коши)
  - Расходимости в поправках к уравнению Больцмана

Необходим небольшой внешний шум?

- Сложность доказательства интуитивно понятной гипотезы молекулярного хаоса
- Возможный выход (И.В. Волович): введение шума, который будет разрушать корреляцию между столкнувшимися частицами
- Шум мал на «макромасштабе», но велик на «микромасштабе» (по сравнению с радиусом взаимодействия $\mu \to 0$), чтобы разрушать корреляции
- Тогда характерное время разрушения корреляции – время столкновения частиц ~ μ^{-1}
- Переход от уравнения Лиувилля к уравнению Фоккера—Планка—Колмогорова (ФПК):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H, \rho\} + D\frac{\partial^2 \rho}{\partial p^2}$$

Теорема

Пусть ρ удовлетворяет уравнению ФПК. Осуществим предел Больцмана—Грэда (Б—Г):

$N \to \infty,$	(большое число частиц)
$\mu \to 0,$	(малый радиус взаимодействия частиц)
$N\mu^2 = const.$	(постоянная длина свободного пробега)

Пусть также $D \to 0$ так, что $D/\mu^{2+\varepsilon} \to \infty$ (смысл: шум мал на макроскопическом масштабе, но велик микроскопическом).

Пусть далее

$g_2(x_1, x_2, t) = f_2(x_1, x_2, t) - f_1(x_1, t) f_1(x_2, t) \to 0$ при $\mu \to 0, \frac{|q_1 - q_2|}{\mu} \to \infty.$

Тогда:

1) $$\lim_{\Delta t \to 0} \lim_{(\mathrm{BG})} \frac{f_1(x_1, t + \Delta t) - f_1(x_1, t)}{\Delta t} = -\frac{p_1}{m}\frac{\partial f_1}{\partial q_1} + \mathrm{St} f_1,$$

2) $$\lim_{\Delta t \to 0} \lim_{(\mathrm{BGq})} \frac{g_2(x_1, x_2, t + \Delta t) - g_2(x_1, x_2, t)}{\Delta t} = 0.$$

(BG): предел Б—Г, (BGq): предел Б—Г и $\frac{|q_1 - q_2|}{\mu} \to \infty.$

Обсуждение теоремы (1)

- Если в начальный момент бесконечно малого промежутка времени Δt отсутствуют двухчастичные корреляции, то на этом промежутке:
  - одночастичная функция удовлетворяет уравнению Больцмана
  - двухчастичные корреляции к началу следующего бесконечно малого промежутка не появляются
- Вывод согласуется с физической (статистической) интуицией, стоящей за уравнением Больцмана. Совмещение динамического и статистического описаний

Обсуждение теоремы (2)

Однако:

- «В идеале» требуется доказать, что для любого t функция $f_1(x_1,t)$ сходится к решению уравнения Больцмана в пределе Больцмана—Грэда.
- Тогда надо проанализировать возрастание корреляций на конечном промежутке времени и лишь затем осуществить предел Б—Г.
- Однако не удаётся доказать даже, что $f_1(x_1,t)$ существует в пределе Б—Г для произвольного t.
- Возможно, «идеальное» утверждение о стремлении решений неверно. Надо понять смысл повторного предела (своеобразной «производной»)

$$\lim_{\Delta t \to 0} \lim_{(\mathrm{BG})} \frac{1}{\Delta t}[\ldots]$$

Обратимость и необратимость

- Поскольку в рассматриваемом пределе коэффициент диффузии $D \to 0$, то необратимое уравнение ФПК переходит в обратимое уравнение Лиувилля.
- Таким образом, обратимость – это не точное, а приближённое свойство микродинамики, справедливое на небольших временах, когда можно пренебречь действием (малого) внешнего шума.
- В этом смысле можно говорить о согласовании обратимой микродинамики и необратимой макродинамики

Заключение

- Предложен вывод уравнения Больцмана из уравнения Фоккера—Планка—Колмогорова
- Вывод согласуется с физической (статистической) интуицией, стоящей за уравнением Больцмана. Совмещение статистического и динамического описаний
- Необходимо понять физический смысл специального предельного перехода («производной»)

$$\lim_{\Delta t \to 0} \lim_{(\mathrm{BG})} \frac{1}{\Delta t}[\ldots]$$

- Можно ли согласовать статистику и динамику?
В каком смысле?

Спасибо за внимание!