130 лет уравнению Больцмана

В.В. Веденяпин

Виктор Валентинович Веденяпин, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, лауреат Государственной премии СССР (1989). Руководитель проекта 01-01-00407.

Уравнение Больцмана и его дискретные модели

Уравнение Больцмана — основное уравнение в кинетической теории газов. Оно описывает изменение функции распределения $F(t, v, x)$ молекул газа по скоростям v и координатам x в момент времени t. Для описания тех или иных физических процессов в газах часто используют различные дискретные модели этого уравнения. Они привлекли пристальное внимание исследователей в период бурного развития вычислительной техники в 70-х годах XX в. Однако, еще Дж. Максвелл и Л. Больцман использовали эти модели для прояснения свойств самого уравнения Больцмана, для анализа природы H-теоремы, характера сходимости к равновесию и других фундаментальных вопросов.

В работе «Weitere Studen uber das Warmegleichgewicht unter Gasmolekulen» (1872) [1] Больцман посвящает первую главу уравнению, которое мы сегодня назвали бы пространственно-однородным уравнением Больцмана с зависимостью функции распределения только от модуля скорости (от квадрата скорости или энергии, которую он называет «живой силой»). Именно для этого уравнения Больцман доказывает H-теорему.

Вторая глава называется «Замена интегралов суммами» — там-то и появляются две простейшие дискретные модели уравнения Больцмана. Одна из них похожа на трехскоростную модель, которую мы бы назвали сейчас моделью Годунова-Султангазина [2] или одномерной моделью Бродуэлла. Отличаются эти дискретные модели, как формой коэффициентов уравнения, так и формой H-функции. Было бы интересно максимально обобщить рассматриваемый класс моделей, допускающих обобщенные H-функции. Такая работа проводилась, насколько нам известно, только для обычной формы H-функции [3]. Эта глава замечательно проста, и два исследователя отнеслись к ее содержанию с повышенным вниманием. Один из них — М. Планк — получил за «внимательное прочтение» Нобелевскую премию, введя квантование энергии; другой дотошный читатель — А. Эйнштейн — также удостоился Нобелевской премии, распространив идеи Больцмана и Планка на излучение (тогда были введены так называемые коэффициенты Эйнштейна).

Наконец, в третьей главе появляется то, что мы сейчас называем уравнением Больцмана. Но Больцман — это ясно видно — отдает его Максвеллу следующей фразой: «Если мы подставим это выражение в уравнение (44)... в точности, как это делал Максвелл», — и ссылается на работу Максвелла «On the Dynamical Theory of Gases» (1868)* [5]. Уравнение (44) — это и есть то, что мы сейчас называем уравнением Больцмана. В работе «On Stresses in Rarified Gases arising from Inequalities of temperature» (1879) [6] Максвелл как бы возвращает уравнение Больцману. Высокая этика обоих ученых. Больцман также сетует на то, что не может продвинуться дальше Максвелла на пути вычисления коэффициентов диффузии и теплопроводности, останавливаясь на случае «максвелловских молекул» — потенциале взаимодействия с зависимостью, пропорциональной обратной четвертой степени от расстояния. «В действительности вопрос здесь заключается не только в том, каковы значения коэффициентов диффузии, вязкости и т.д., но и в их постоянстве в случае, когда законы сил иные, чем принял Максвелл» [1, с.162].

* Больцман указал год ошибочно — 1869.

Дискретные модели наследуют многие важнейшие свойства уравнения Больцмана. В частности, для дискретных моделей, равно как и для уравнения Больцмана, имеет место H-теорема [1—4]. Она послужила в свое время математическим обоснованием Второго начала термодинамики. Важность этой теоремы состоит в том, что она показывает необратимость (по времени) уравнения Больцмана. В работе [7] доказана единственность H-функции для уравнения Больцмана, что в то же время дает различные классификационные теоремы для сохраняющихся функционалов — это позволяет уверенно оперировать понятиями «консервативность», «полная консервативность» и «точная консервативность» в дальнейшем.

В термодинамике все величины делятся на интенсивные и экстенсивные. Интенсивные — плотность, давление, удельные энергия и энтропия — не меняются с изменением объема. Экстенсивные — число частиц, энергия, энтропия — пропорциональны объему. В описании с помощью функции распределения F этим характеристикам, естественно, соответствуют функционалы. Интенсивным величинам соответствуют локальные характеристики, экстенсивным — интегральные. При этом число частиц, средняя скорость, энергия, давление выражаются линейными функционалами, а энтропия — нелинейным по F функционалом. Все это показывает, насколько само введение функции распределения связано с теорией измерений: мы всегда имеем дело со средними величинами — локальными или интегральными характеристиками, которые измеряются теми или иными приборами: манометром, термометром и т.п. При этом сама функция распределения подразумевает некую ячейку в фазовом пространстве (x, v) координат x и скоростей v.

Больцман и Максвелл определяют функцию распределения по-разному. Больцман определяет величину $F(x, v)dxdv$ как долю времени, проведенную молекулой в окрестности точки (x, v). При этом он пользуется и функцией распределения в многомерном фазовом пространстве, проектируя на одномерное и вычисляя различные интегралы, предвосхищая работу Н.Н. Боголюбова. Максвелл проводит мысленный эксперимент с множеством одинаковых систем. При этом, не выписывая уравнения, он угадывает функцию распределения для различных ситуаций как отклонение от максвелловского распределения. И Больцмана, и Максвелла в первую очередь интересуют наблюдаемые характеристики — коэффициенты диффузии, вязкости (диффузия импульсов, как называет ее Максвелл), теплопроводности (диффузия энергии по Максвеллу).

Теорема о единственности H-функции Больцмана формулируется так: для газа, описываемого уравнением Больцмана, энтропия есть единственная экстенсивная величина, возрастающая со временем — с точностью до добавки из линейной комбинации пяти законов сохранения числа частиц, трех компонент импульса и энергии. Теорема дает классификацию наблюдаемых измеримых величин, а также обосновывает, какие законы сохранения нужно учитывать при численном моделировании.

Весьма важно строить аккуратные модели для малого количества скоростей (здесь современное состояние вопроса будет продемонстрировано для случая смесей двух газов с различными молекулярными массами). Дискретные модели для газовых смесей широко обсуждаются в современных публикациях и очень актуальны. Однако часто при переходе от уравнения Больцмана к дискретной модели возникают «неприятности», отсутствовавшие в изначальной континуальной постановке. Например, в модели газа появляются несколько групп частиц, для каждой из которых сохраняется суммарная энергия. Таким образом, мы имеем дело с сохраняющимися величинами, не имеющими реальных физических аналогов. Некоторые лишние инварианты, такие как энергия каждой компоненты или энергия отдельной группы частиц, мешают построению хороших моделей, что в свою очередь влечет неправильность получающейся гидродинамики. Действительно, каждый лишний инвариант даст даже в уравнениях нулевого порядка — уравнениях без вязкости типа Эйлера — новую функцию (кроме стандартных: плотности, компонент скоростей и температуры), которая войдет в систему уравнений. В уравнениях следующего порядка появляются вязкие члены — это традиционно называется методом Чепмена—Энскога (хотя фактически метод придумал Максвелл, но реализовал его только для молекул с максвелловским потенциалом; С. Чепмен и Д. Энског распространили его на другие потенциалы, пользуясь решением Максвелла и давая приближенную поправку к этому решению). Здесь имеются трудности, так как функция распределения в методе Максвелла—Чепмена—Энскога не является положительной, и очень желателен метод, свободный от такого недостатка. Это функция вида (45) или (46) из работы Больцмана, где линейные множители перед экспонентой можно было бы попробовать превратить в экспоненты (тогда, естественно, положительность восстановится), для чего надо придумать схему теории возмущений вместо схемы Максвелла—Чэпмена—Энскога.

Для плоского и трехмерного случаев лишь недавно были предложены первые дискретные модели без лишних инвариантов, а также алгоритм построения таких моделей [8—12]. Этот алгоритм позволяет построить сколь угодно большое число различных дискретных моделей. Однако для одномерного случая ситуация оказалась прямо противоположной: для двухкомпонентной смеси известна лишь одна конечная модель [9—11] для отношения молекулярных масс, равного 3, с правильным числом инвариантов.

Квантовые гамильтонианы и кинетические уравнения: принцип соответствия

Соответствие между процессами рождения-уничтожения частиц и химической кинетикой принадлежит, видимо, Эйнштейну. В работах 1916—1917 гг., где он ввел коэффициенты спонтанного и вынужденного излучений, рассматриваются именно вероятности перехода атомов с уровня на уровень с поглощением и рождением фотонов. В учебнике Л.Д. Ландау и Е.М. Лившица это соответствие является одним из основных приемов выписывания (но не вывода) кинетических уравнений в X томе «Физическая кинетика»: берется квантовый гамильтониан (скажем, из V тома «Статистическая физика» для фононов), получается кинетическое уравнение (для описания газа фононов в металлах) типа квантового уравнения Больцмана (уравнение Улинга—Уленбека).

Позже это соответствие рассматривалось Р. Стритером для той самой модели излучения Эйнштейна [15]. Оно изучено крайне слабо: неясно, как выводить кинетические уравнения, не обсуждались и условия, при которых вывод возможен. Тем не менее, кинетические уравнения типа переноса излучения или нейтронов активно используются для расчета атмосферных явлений и реакторов, где сечения реакций и рассеяния рассчитываются по квантово-механическим формулам, — и соответствие используется тоже в неявной форме.

Общему виду этого соответствия посвящены работы [8, 10], где рассмотрены полиномиальные по операторам рождения—уничтожения квантовые гамильтонианы и соответствующие им кинетические уравнения типа уравнений химической кинетики.

При этом получается очень важное соответствие и для законов сохранения. Особую роль, как для кинетических уравнений, так и для квантовых гамильтонианов играют линейные по числу частиц законы сохранения. Например, для уравнения Больцмана именно они являются основными макроскопическими величинами при переходе к сплошной среде, когда выписываются уравнения гидродинамики для средних значений плотности, импульса и температуры. Это же свойство переносится и на дискретные модели, и на их обобщения для химической кинетики.

Поэтому, если мы получаем нетривиальную модель с правильным числом инвариантов для кинетических уравнений, автоматически имеем модель (еще более нетривиальную, но тоже с правильным числом инвариантов) и для квантовых гамильтонианов. Обратно: если есть утверждение об отсутствии моделей с правильным числом инвариантов для кинетической теории, то такое же отсутствие имеет место и для квантовых гамильтонианов. Таким образом, соответствие приобретает формально-математическую и предсказательную силу. Например, для одномерного случая существуют пока только модели с отношением молекулярных масс, равным 3 [10—12]. Возникает задача о классификации дискретных моделей столкновений. В двумерном и трехмерном случаях их довольно много для классических законов столкновений [9—11], а для релятивистских законов столкновений их подозрительно мало [12]. Желательно классифицировать все фундаментальные реакции в дискретном варианте.

О построении здания физики

Шестая проблема Гильберта призывает развивать аксиоматический метод в естествознании и называется «Математическое изложение аксиом физики». Она начинается фразой «С исследованиями по основаниям геометрии близко связана задача об аксиоматическом построении по этому же образцу тех физических дисциплин, в которых уже теперь математика играет выдающуюся роль: это в первую очередь теория вероятностей и механика» [14]. Часть этой проблемы была решена для теории вероятностей А.Н. Колмогоровым, а для физики считалась недоступной, хотя ее отдельные разделы подвергались аксиоматизации: теоретическая механика, механика сплошной среды, термодинамика.

В основу физико-математического описания мира можно положить два лагранжиана: Власова—Эйнштейна и Власова—Янга—Миллса [3, гл.3]. Первый из них отвечает за гравитацию, второй — за электрослабые и сильные взаимодействия. Динамика N тел получается из них стандартной подстановкой [3, гл.2]. Надо позаботиться о выводе основных уравнений для всех агрегатных состояний вещества (плазма, газ, жидкость, твердое тело). Плазма описывается уравнением Власова—Максвелла, которое «отщепляется» от уравнения Власова—Янга—Миллса, разреженный газ — уравнением Больцмана, которое можно получить либо по схеме Боголюбова из динамики N тел, либо напрямую из квантовых гамильтонианов по принципу соответствия. Из уравнения Больцмана выводятся уравнения сплошной среды (Эйлера и Навье—Стокса) методом Максвелла—Чэпмена—Энскога.

Квантовые кинетические уравнения в применении к твердым телам и жидкостям должны получаться из соответствия «квантовые гамильтонианы-кинетические уравнения».

Это и есть кинетический подход к построению здания физики, который представляет собой синтез подходов Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшица, Н.Н. Боголюбова и С.К. Годунова. Но уже сейчас соответствие «квантовые гамильтонианы кинетические уравнения» дало единое обобщение кинетических уравнений как для смесей с химическими реакциями, так и для тройных и более столкновений [3, гл.9]. Это соответствие позволило также получить простую формулу для законов сохранения, что привело к методу построения дискретных моделей для смесей с правильным числом инвариантов [3, гл.8].

Важнейшим инструментом являются законы сохранения специального вида — линейные по числу частиц. Именно такие законы сохранения оказываются основными как инварианты столкновений уравнения Больцмана, в теореме о единственности H-функции Больцмана, в условиях химического равновесия, в изучении стационаров марковских процессов и основного уравнения Паули, в исследовании спектров квантовых гамильтонианов при установлении соответствия «квантовые гамильтонианы-кинетические уравнения». Почему именно линейные функционалы, соответствующие измеримым величинам, оказываются важнейшими, — это мы дополнительно объясним ниже.

Больцман, Гиббс, Пуанкаре и численные алгоритмы

В 1902 г. вышла книга Д.В. Гиббса «Основные принципы статистической механики» [13], где он обосновал введение канонического и микроканонического ансамблей. Однако в работе Больцмана «Некоторые общие теоремы о тепловом равновесии» (1871) мы находим формулу для канонического ансамбля Гиббса (последняя формула этой работы), где скорости проинтегрированы по углам. В третьей главе дается набросок того, что мы сейчас бы назвали выводом канонического ансамбля для системы в термостате, — здесь уже видно, что Больцман осознает справедливость канонического распределения без эргодической гипотезы. В первой главе этой работы описываются общие свойства динамических систем, объясняется, что для бездивергентных систем объем сохраняется (теорема Лиувилля). Ставится вопрос: к чему стремится решение уравнения неразрывности? Неявно предполагается, что оно стремится к некоторому решению стационарного уравнения неразрывности. Для каких систем это справедливо? К которому из решений оно стремится? Это очень интересовало А. Пуанкаре, и в работе 1906 г. [16] он обосновывает сходимость для ансамбля частиц в прямоугольном ящике (простейшего бильярда). На современном языке это было сделано В.В. Козловым [17]. Вопрос сходимости важен в общем случае и был бы очень интересен для создателей численных алгоритмов.

Действительно, при решении уравнения неразрывности (оно входит и в гидродинамику, и в систему уравнений Власова [3]) должны удовлетворяться, как минимум, два свойства: положительность плотности и сохранение числа частиц. Компьютер имеет дело с конечным набором чисел — и мы получаем уравнение марковского процесса (или основное уравнение Паули, как называют его в физике). Но такое уравнение показывает сходимость к равновесию, так как для него справедлива *H*-теорема, хотя исходное уравнение вроде бы не имеет равновесия [3]. Теорема о слабой сходимости (Пуанкаре—Козлова) и ее недоказанные (и несформулированные) обобщения дают свет в конце туннеля.

Под слабой сходимостью понимается сходимость для произвольного линейного функционала с произвольной пробной функцией. Это соответствует сходимости для измеримой величины. Но к чему сходится распределение? Оказывается, мы должны взять среднее от начальной функции распределения при фиксированных интегралах движения системы. Тогда получается функция, зависящая только от интегралов — она и оказывается предельной при времени, стремящемся к бесконечности. Это объяснено (но не доказано) на примере частиц с одной степенью свободы [18, с.100—112]. «Частицы различных энергий имеют различные периоды (колебаний. — *В.В.*). После нескольких колебаний частицы разных энергий окажутся в разных местах, с течением времени пакет расплывается, ансамбль приблизится к стационарному». Тут же отмечается, что в случае гармонического осциллятора «период колебаний не зависит от энергии. Даже пакет с различными энергиями не расплывается» [18, с.112]. Стационарным снова оказывается функция распределения, зависящая только от энергии — единственного интеграла системы. Для уравнения неразрывности такой интеграл является линейным по функции распределения. И вообще любой интеграл исходной динамической системы дает линейный интеграл для уравнения неразрывности — этим и выделяются линейные функционалы для функции распределения уравнения неразрывности. Именно через них выражается асимптотическая стационарная функция распределения в двух примерах (Пуанкаре—Козлова и Зельдовича—Мышкиса). Возникает вопрос: к чему стремится функция распределения для уравнения неразрывности произвольной динамической системы? Можно высказать гипотезу, что для почти всех бездивергентных систем обыкновенных дифференциальных уравнений решение соответствующего уравнения неразрывности стремится к стационарному распределению, зависящему только от интегралов системы. Эти интегралы дают для уравнения неразрывности линейные функционалы — таким образом определяется выделенная роль линейных функционалов. Они и соответствуют основным измеримым характеристикам.

ЛИТЕРАТУРА

1 *Больцман Л. Дальнейшие исследования теплового равновесия между молекулами газа // Больцман Л. Избранные труды. М., 1984. С.125—189.*

2 *Годунов С.К., Султангазин У.М. Дискретные модели кинетического уравнения Больцмана // Успехи математических наук. 1971. Т.26, №3 (159). С.3—51.*

3 *Веденяпин В.В. Кинетические уравнения Больцмана и Власова. М., 2001.*

4 *Platkowski T., Illner R. Discrete velocity models of the Boltzmann equation: a survey on the mathematical aspects of the theory // SIAM Review. 1988. V.30, №2. P.213—255.*

5 *Maxwell J.C. // Phil. Mag. 1868. 4 ser. Vol. 35, №235. P.141—144.*

6 *Maxwell J.C. Collected papers. P.713—741.*

7 *Веденяпин В.В. О единственности Н-функции Больцмана // Доклады АН СССР. 1977. Т.233, вып.5. С.765—768.*

8 *Веденяпин В.В., Орлов Ю.Н. О законах сохранения для полиномиальных гамильтонианов и для дискретных моделей уравнения Больцмана // Журнал теоретической и математической физики. 1999. Т.121, №2. С.307—315.*

9 *Vedenyapin V.V. Velocity inductive construction for mixtures // Transport theory and statistical physics. 1999. V.28, №7. P.727—742.*

10 *Веденяпин В.В., Амосов С.А., Тоскано Л. Инварианты гамильтонианов и кинетических уравнений // Успехи математических наук. 1999. Т.54, вып. 5. С.153—154.*

11 *Веденяпин В.В., Амосов С.А. О дискретных моделях уравнения Больцмана для смесей // Дифференциальные уравнения. 2000. Т.36, №7. С.15—20.*

12 *Amossov S.A. Discrete kinetic models of relativistic Boltzmann equation for mixtures // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2001. V.301, issue 1—4. P.330—340.*

13 *Гиббс Д.В. Термодинамика. Статистическая механика. М., 1982.*

14 *Проблемы Гильберта / Под редакцией П.С. Александрова. Челябинск, 2000.*

15 *Streater R. Statistical Dynamics. London, 1995.*

16 *Пуанкаре А. Замечания о кинетической теории газов // Пуанкаре А. Избранные труды. Т.3. М., 1974.*

17 *Kozlov V.V. Kinetics of Collisionless Continuous Medium. (Regular and chaotic dynamics. V.6, №3). 2001.*

18 *Зельдович Я.Б., Мышкис А.Д. Элементы математической физики. М., 1973.*

19