Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки. 2011. № 1 (22). С. 158–164

УДК 517.958

УРАВНЕНИЕ БОЛЬЦМАНА И H-ТЕОРЕМА В ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ ФОРМУЛИРОВКЕ КЛАССИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

А. С. Трушечкин[1,2]

[1] Математический институт им. В. А. Стеклова РАН,
119991, Москва, ул. Губкина, 8.
[2] Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,
115409, Москва, Каширское ш., 31.

E-mails: trushechkin@mi.ras.ru

Предлагается процедура получения уравнения Больцмана из уравнения Лиувилля в пределе, отличном от термодинамического. Она основывается на цепочках Боголюбова, функциональной формулировке классической механики и различении двух масштабов пространства-времени — макро- и микроскопического. В соответствии с функциональным подходом к механике начальное состояние системы частиц формируется на основе измерений, которые имеют погрешности. Следовательно, можно говорить о точности, с которой задана начальная функция плотности вероятности в уравнении Лиувилля. Допустим, измерительные приборы прослеживают изменения физических величин лишь на макромасштабе, много большем, чем характерный радиус взаимодействия частиц (микромасштаб). Тогда соответствующую начальную функцию плотности нельзя использовать в качестве начального данного для уравнения Лиувилля, поскольку последнее представляет собой описание динамики на микромасштабе и в него явно входит потенциал взаимодействия между частицами (с характерным радиусом взаимодействия). Тем не менее для макроскопической начальной функции плотности можно получить уравнение Больцмана, воспользовавшись уравнением Лиувилля и идеологией цепочек Боголюбова, если предположить, что начальные условия для микроскопических функций плотности задаются макроскопической функцией. Показано, что для полученного уравнения верна H-теорема о возрастании энтропии.

Ключевые слова: *статистическая механика, физическая кинетика, уравнение Больцмана, уравнение Лиувилля, цепочка уравнений Боголюбова.*

Введение. Работа посвящена проблеме вывода кинетического уравнения Больцмана из уравнений микроскопической динамики (уравнения Лиувилля). Основной интерес заключается в том, что уравнение Лиувилля обратимо по времени (симметрично относительно замены t на $-t$), в то время как уравнение Больцмана необратимо. Напротив, для него справедлива так называемая H-теорема о возрастании энтропии. Проблема согласования необратимых по времени уравнений макроскопической динамики (Больцмана, Навье—Стокса и др.) с обратимыми уравнениями классической и квантовой микроскопической динамики (Ньютона, Гамильтона, Лиувилля, Шрёдингера) носит название проблемы необратимости [1].

Изящный вариант вывода уравнения Больцмана из уравнения Лиувилля предложен Н. Н. Боголюбовым [2], который ввёл иерархию времён. Но данный вывод приводит к расходимостям в членах разложения по степеням плотности более высокого порядка [3], что требует дальнейших исследований.

Антон Сергеевич Трушечкин (к.ф.-м.н.), научный сотрудник, отд. математической физики[1]; доцент, каф. системного анализа[2].

В данной работе представлен несколько иной вариант вывода уравнения Больцмана из уравнения Лиувилля. Идеи метода цепочек Боголюбова здесь дополняются идеями недавно предложенной в работах И. В. Воловича функциональной формулировки механики [4], а также идеей различения двух масштабов пространства-времени — микро- и макроскопического (кинетического).

Другая попытка вывести уравнение типа Боголюбова—Больцмана в рамках функционального подхода к механике предпринята в работе [5]. Но полученное в этой работе кинетическое уравнение для системы из двух частиц по-прежнему (как и уравнение Лиувилля, из которого оно выведено) является обратимым. В настоящей работе получено необратимое уравнение Больцмана, для которого верна H-теорема.

1. Уравнение Лиувилля. Пусть даны N частиц, находящихся в области $G \subset \mathbb{R}^3$ конечного объёма V. Их состояние в произвольный момент времени t описывается функцией $f(x_1, x_2, \dots, x_N, t)$, где $x_i = (q_i, p_i)$, $q_i \in G$ (координата), $p_i \in \mathbb{R}^3$ (импульс), $i = 1, 2, \dots, N$, причём $\frac{1}{V^N} f$ имеет смысл плотности вероятности нахождения системы частиц около соответствующей фазовой точки. Динамика функции f задаётся уравнением Лиувилля

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \{H, f\},$$

где

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

— гамильтониан системы, $m > 0$ — масса одной частицы, $\{\cdot,\cdot\}$ — скобка Пуассона. Первое слагаемое в H соответствует кинетической энергии системы, $\Phi(r)$ — потенциал взаимодействия частиц, $U(q_i)$ — потенциал взаимодействия частицы с границей области G (стенкой сосуда).

Полагаем, что функция $\Phi(r)$ непрерывно дифференцируема, ограничена снизу, $\Phi(r) \to +\infty$ при $r \to 0$, $\Phi(r) \to 0$ при $r \to \infty$. Также для простоты будем предполагать, что $\Phi(r)$ монотонно убывает с ростом r, а функция U непрерывно дифференцируема, $U(q) \to +\infty$ при $q \to \partial G$, где ∂G — граница области G.

Далее, $\mu > 0$ — малый параметр, который имеет смысл отношения характерного радиуса взаимодействия частиц r_0 к характерному расстоянию l изменения одночастичной функции распределения f_1, т. е. $\mu = r_0/l$. Предел $\mu \to 0$ соответствует стремлению к нулю характерного радиуса взаимодействия частиц в сравнении с характерным расстоянием изменения одночастичной функции распределения (или, эквивалентно, стремлению характерного расстояния изменения f_1 к бесконечности в сравнении с характерным радиусом взаимодействия частиц).

Следуя Боголюбову, определим частичные функции распределения f_s, $s = 1, 2, \dots, N-1$:

$$f_s(x_1, \dots, x_s, t) = V^{N-s} \int_{\Omega_V^{N-s}} f(x_1, \dots, x_N, t) dx_{s+1} \dots dx_N,$$

где $\Omega_V = G \times \mathbb{R}^3$ — фазовое пространство одной частицы, $f_N \equiv f$.

2. Микро- и макроскопический масштабы. Вывод Боголюбова уравнения Больцмана начинается с задачи Коши для уравнения Лиувилля:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f}{\partial t} = \{H, f\}, \\ f(x_1, \ldots, x_N, 0) = f^0(x_1, \ldots, x_N), \end{cases} \tag{1}$$

Здесь необходимо вспомнить, что начальная функция распределения f^0 не задана «объективно», а формируется на основе измерений [6,7]. Оказывается, существенным здесь является то, с какой степенью точности проведены эти измерения. Если они позволяют проследить изменение физических величин на масштабах порядка радиуса взаимодействия, то решение задачи Коши для уравнения Лиувилля теоретически возможно.

Нас интересует случай, когда измерения позволяют прослеживать изменение физических величин (и начальной функции распределения) лишь на масштабах, превышающих радиус взаимодействия частиц (и этот случай почти всегда и имеет место на практике, когда мы находимся на кинетическом уровне рассмотрения) [2,8]. Условие малости параметра $\mu = r_0/l$ означает то, что чувствительность наших приборов намного грубее, чем радиус взаимодействия. Характерное расстояние изменения одночастичной функции распределения l как раз непосредственно связано с чувствительностью прибора, можно сказать, l — характерное расстояние, на котором прибор улавливает изменения функции распределения. Масштаб порядка радиуса взаимодействия r_0 будем называть «микромасштабом», масштаб порядка характерного изменения одночастичной функции распределения l — «макромасштабом» (точнее было бы сказать «кинетическом масштабом»). Следовательно, мы не знаем N-частичную функцию распределения $f^0(x_1, \ldots, x_N)$, поскольку она должна содержать информацию о корреляциях частиц на масштабе порядка радиуса их взаимодействия. Причём эта информация является существенной. Например, когда расстояние между всеми частицами большое ($|q_i - q_j| \gg r_0$ при всех $i \neq j$), корреляции между ними могут отсутствовать, т. е. выполнено свойство

$$f^0(x_1, x_2, \ldots, x_s, 0) = \prod_{i=1}^{N} f_1^0(x_i, 0).$$

Именно это свойство и установит прибор, т. к. он прослеживает изменение функций распределения лишь на масштабах, много превышающих r_0. Однако если мы распространим это свойство на всё фазовое пространство Ω_V^N, то система будет обладать бесконечной средней энергией

$$E = \frac{1}{V^N} \int_{\Omega_V} H f \, dx_1 \ldots dx_N$$

(вследствие того, что $\Phi(r) \to +\infty$ при $r \to 0$).

Итак, на масштабе порядка радиуса взаимодействия корреляции между частицами становятся существенными, но прибор не может их установить. Следовательно, мы не знаем начальной многочастичной функции распределения f^0 и задача Коши (1) не имеет непосредственного физического смысла.

3. Постановка задачи для уравнения Лиувилля. Прибор позволяет нам установить начальную одночастичную функцию распределения $f_1^0(x_1)$. Можно сказать, что f_1^0 — «макроскопическое» распределение вероятностей, поскольку меняется на расстояниях, много превышающих радиус взаимодействия частиц. Будем предполагать, что f_1^0 является непрерывной вместе со своими производными по каждому аргументу.

Определим другую задачу для уравнения Лиувилля для семейства функций $f_N = f_N(x_1, \dots, x_N)$ в пределе $\mu \to 0$, $N \to \infty$, $N\mu^2 \to 0$:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f_N}{\partial t} = \{H, f_N\}, \\ f_1(x_1{,}0) \to f_1^0(x_1), \\ S_{-\Delta t}^{(2)}[f_2(x_1, x_2, t - \Delta t) - f_1(x_1, t - \Delta t) f_1(x_2, t - \Delta t)] \to 0, \\ \dfrac{1}{V^N} \displaystyle\int_{\Omega_V^N} H(x_1, \dots, x_N) f_N(x_1, \dots, x_N, t)\, dx_1 \dots dx_N < \infty, \\ f_N(x_1, \dots, x_N, t) = f_N(x_{i(1)}, \dots, x_{i(N)}, t), \quad \forall i \in P(1, \dots, N), \end{cases} \tag{2}$$

где $\Delta t \to 0$, $\Delta t/\mu \to \infty$ в рассматриваемом пределе, $\delta > 0$. Здесь использовано обозначение $S_t^{(2)}(x_1, x_2)$ — двухчастичный гамильтонов поток, определённый на всех фазовых точках (x_1, x_2) таких, что $q_1 \neq q_2$. Таким образом, $S_t^{(2)}\varphi(x_1, x_2) = \varphi(x_{1t}, x_{2t})$ (φ — произвольная функция), где фазовая точка (x_{1t}, x_{2t}) получена сдвигом фазовой точки (x_1, x_2) вдоль гамильтонова потока

$$H_2 = \sum_{i=1}^{2} \frac{p_i^2}{2m} + \Phi\Big(\frac{|q_1 - q_2|}{\mu}\Big) + \sum_{i=1}^{2} U(q_i)$$

на t. Через $P(1, \dots, N)$ обозначено множество перестановок натуральных чисел от 1 до N.

Отметим, что здесь рассматривается не термодинамический предел $N{\to}\infty$, $V{\to}\infty$, $N/V = \mathrm{const}$, а предел бесконечного числа частиц в конечном объёме при бесконечно малом радиусе взаимодействия.

Третье условие в (2) говорит об ослаблении корреляций на бесконечно далёких от каждого столкновения временах. Оно является аналогом начального условия для двухчастичной функции распределения. Начальные условия для функций распределения большего числа частиц для вывода уравнения Больцмана не нужны, т. к. последнее учитывает только парные взаимодействия. Они нужны при выводе поправок к уравнению Больцмана, которые мы в данной работе не рассматриваем. Четвёртое условие в (2) — условие конечности энергии, пятое условие — условие симметричности многочастичных функций распределения относительно перестановок частиц.

Поясним условия $\Delta t \to 0$ и $\Delta t/\mu \to \infty$ при $\mu \to 0$ в третьем соотношении (2). Здесь Δt — промежуток времени в макроскопической шкале (порядка $l/\bar{u}$, где $\bar{u}$ — средняя скорость движения молекул), $\Delta t/\mu$ — в микроскопической (порядка $r_0/\bar{u}$, параметр $\mu = r_0/l$, напомним, и является масштабирующим множителем, связывающим эти шкалы). Другими словами, эти условия говорят о том, что рассматривается промежуток времени, который в микроскопической шкале в пределе бесконечно велик, а в макроскопической —

бесконечно мал. Образно говоря, то, что на макроскопическом временном масштабе времени длится «мгновение», на микроскопическом — «бесконечно долго». Аналогично с соответствующими областями пространства (шарами радиуса $\Delta t\bar{u}$): что на макромасштабе — «точка», то на микромасштабе — «бесконечное пространство». Таким образом, в нашем выводе явно присутствуют два различных масштаба пространства-времени.

Уравнение Лиувилля есть не что иное, как уравнение динамики на микромасштабе, поскольку в него явно входит потенциал взаимодействия между частицами с характерным радиусом r_0. А в уравнении Больцмана одновременно участвуют микро- и макроскопический масштабы. С одной стороны, столкновение в уравнении Больцмана рассматривается как мгновенное и точечное, с другой — в нём участвует сечение рассеяния, которое определяется как асимптотика при времени, стремящемся к бесконечности. В первом случае (при рассмотрении динамики одночастичной функции распределения f_1) мы имеем дело с макроскопическим масштабом, во втором (при рассмотрении динамики столкновения отдельных частиц) — с микроскопическим.

4. Основная теорема.

Теорема. *Пусть семейство функций $f_N = f_N(x_1, \dots, x_N, t)$ удовлетворяет задаче (2). Пусть дополнительно $\Phi(r)$ в уравнении Лиувилля при $r \to \infty$ имеет асимптотику*

$$\lim_{r\to\infty} r^{\gamma}\Phi(r) = C \neq 0,$$

где $\gamma > 2$. Тогда функция $f_1(x_1, t)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = -\frac{p_1}{m}\frac{\partial f_1}{\partial q_1} + \frac{\partial U}{\partial q_1}\frac{\partial f_1}{\partial p_1} + Stf_1 + o\Big(\frac{1}{\nu}\Big), \quad \mu \to 0 \tag{3}$$

$$Stf_1 = \frac{1}{\nu}\int_D \frac{|p_1 - p_2|}{m}\big[f_1(q_1, p_1', t) f_1(q_1, p_2', t) - f_1(q_1, p_1, t) f_1(q_1, p_2, t)\big]\, d\sigma dp_1, \tag{4}$$

при $\mu \to 0$, $N \to \infty$, $N\mu^2 \to 0$. Здесь $\nu = V/(N\mu^2)$; $D = \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^3$; p_1' и p_2' — импульсы после столкновения двух частиц, которые до столкновения имели импульсы p_1 и p_2 соответственно; $d\sigma = \rho d\rho d\varphi$ — дифференциальное сечение рассеяния; $\rho > 0$ — прицельный параметр; $\varphi \in [0, 2\pi)$ — полярный угол; p_1' и p_2' являются функциями от p_1, p_2 и ρ; зависимость полностью определяется двухчастичным гамильтонианом.

Соотношение (3) представляет собой не что иное, как уравнение Больцмана, для которого имеет место H-теорема:

$$\frac{dS(t)}{dt} \equiv \frac{d}{dt}\left[-\int_{\Omega_V} f(x,t)\ln f(x,t)\, dx\right] = A + o\Big(\frac{1}{\nu}\Big)$$

(для тех функций, для которых интеграл сходится), где $A \geqslant 0$, $A = O(\frac{1}{\nu})$, при $\mu \to 0$, $N \to \infty$, $N\mu^2 \to 0$.

Заключение. Итак, мы получили уравнение Больцмана из уравнения Лиувилля в конечном объёме. Мы воспользовались цепочками Боголюбова, функциональной формулировкой механики и различением двух масштабов пространства-времени: микро- и макроскопического. Главное отличие нашего вывода от вывода Боголюбова состоит в том, что вместо задачи Коши (1) мы исходим из задачи (2) для уравнения Лиувилля. В постановке этой задачи нет начальной многочастичной функции распределения, поскольку она, как правило, не может быть установлена измерительными приборами. Вместо этого начальное условие для многочастичной («микроскопической») функции распределения определяется из условия ослабления корреляций, т. е. на основе одночастичной («макроскопической») функции.

В теоретической и математической физике принята картина, согласно которой динамика системы полностью определена, если заданы начальные условия. Однако сами начальные условия понимаются как нечто внешнее по отношению к уравнениям математической физики («Законы природы хранят молчание относительно всего, что касается состояния мира в данный момент» [9]). Здесь мы предлагаем другую картину: начальные данные для рассматриваемого уровня природы задаются из более высокого уровня.

Автор благодарен И. В. Воловичу за постановку задачи и полезные замечания.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты №№ 11-01-00828-а, 09-01-12161-офи-м), гранта Президента РФ (проект № НШ-7675.2010.1) и программы ОМН РАН.

Автор выражает благодарность за поддержку на конференции «Математическая физика и ее приложения – 2010» лабораторией математической физики СамГУ, грантами АВЦП 3341 и 10854 и контрактом ФЦП 2173.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Козлов В. В.* Тепловое равновесие по Гиббсу и Пуанкаре. М., Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002. 320 с. [*Kozlov V. V.* Thermal equilibrium in the sense of Gibbs and Poincaré. Moscow, Izhevsk: Institut Komp'yuternykh Issledovanij, 2002. 320 pp.]
2. *Боголюбов Н. Н.* Проблемы динамической теории в статистической физике. М., Л.: Гостехиздат, 1946. 119 с. [*Bogolyubov N. N.* Problems of Dynamical Theory in Statistical Physics. Moscow, Leningrad: Gostekhizdat, 1946. 119 pp.]
3. *Боголюбов Н. Н.* Кинетические уравнения и функции Грина в статистической механике / В сб.: *Собрание научных трудов в двенадцати томах.* Т. V. М.: Наука, 2005. С. 616–638. [*Bogolyubov N. N.* Kinetic equations and Green functions in statistical mechanics / In: *Collection of scientific works in twelve volumes.* Vol. V. Moscow: Nauka, 2005. Pp. 616–638].
4. *Волович И. В.* Проблема необратимости и функциональная формулировка классической механики // *Вестн. Сам. гос. ун-та. Естественнонаучн. сер.*, 2008. № 8/1(67). С. 35–55, arXiv: 0907.2445 [cond-mat.stat-mech]. [*Volovich I. V.* Time Irreversibility Problem and Functional Formulation of Classical Mechanics // *Vestn. Samar. Gos. Univ. Estestvennonauchn. Ser.*, 2008. no. 8/1(67). Pp. 35–55].
5. *Волович И. В.* Уравнения Боголюбова и функциональная механика // *ТМФ*, 2010. Т. 164, № 3. С. 354–362; англ. пер.: *Volovich I. V.* Bogoliubov equations and functional mechanics // *Theoret. and Math. Phys.*, 2010. Vol. 164, no. 3. Pp. 1128–1135.
6. *Trushechkin A. S., Volovich I. V.* Functional classical mechanics and rational numbers // *p-Adic Numbers, Ultrametric Analysis, and Applications*, 2009. Т. 1, № 4. С. 361–367, arXiv: 0910.1502 [math-ph].
7. *Трушечкин А. С.* Необратимость и роль измерительного прибора в функциональной формулировке классической механики // *ТМФ*, 2010. Т. 164, № 3. С. 435–440; англ. пер.: *Trushechkin A. S.* Irreversibility and the role of an instrument in the functional formulation of classical mechanics // *Theoret. and Math. Phys.*, 2010. Vol. 164, no. 3. Pp. 1198–1201.
8. *Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Физическая кинетика. М.: Физматлит, 2002. 536 с. [*Lifshitz E. M., Pitaevskii L. M.* Physical Kinetics. Moscow: Fizmatlit, 2002. 536 pp.]
9. *Wigner E.* The Unreasonable Effectiveness of Mathematics in the Natural Sciences // *Commun. Pure Appl. Math.*, 1960. Vol. 13, no. 1. Pp. 1–14; русск. пер.: *Вигнер Е.* Непо-

стижимая эффективность математики в естественных науках / В сб.: *Этюды о симметрии*. М.: Мир, 1971. С. 182–198.

Поступила в редакцию 21/XII/2010;
в окончательном варианте — 21/II/2011.

MSC: 82C05, 82C40

BOLTZMANN EQUATION AND H-THEOREM IN THE FUNCTIONAL FORMULATION OF CLASSICAL MECHANICS

A. S. Trushechkin[1,2]

[1] Steklov Mathematical Institute, Russian Academy of Sciences,
8, Gubkina st., Moscow, 119991, Russia.
[2] National Research Nuclear University "MEPhI",
31, Kashirskoe sh., Moscow, 115409, Russia.

E-mails: trushechkin@mi.ras.ru

We propose a procedure for obtaining the Boltzmann equation from the Liouville equation in a non-thermodynamic limit. It is based on the BBGKY hierarchy, the functional formulation of classical mechanics, and the distinguishing between two scales of space-time, i.e., macro- and microscale. According to the functional approach to mechanics, a state of a system of particles is formed from the measurements, which have errors. Hence, one can speak about accuracy of the initial probability density function in the Liouville equation. Let's assume that our measuring instruments can observe the variations of physical values only on the macroscale, which is much greater than the characteristic interaction radius (*microscale*)*. Then the corresponfing initial density function cannot be used as initial data for the Liouville equation, because the last one is a description of the microscopic dynamics, and the particle interaction potential* (*with the characteristic interaction radius*) *is contained in it explicitly. Nevertheless, for a macroscopic initial density function we can obtain the Boltzmann equation using the BBGKY hierarchy, if we assume that the initial data for the microscopic density functions are assigned by the macroscopic one. The H-theorem* (*entropy growth*) *is valid for the obtained equation.*

Key words: *statistical mechanics, physical kinetics, Boltzmann equation, Liouville equation, BBGKY hierarchy.*

Original article submitted 21/XII/2010;
revision submitted 21/II/2011.

Anton S. Trushechkin (Ph. D. (Phys. & Math.)), Researcher, Dept. of Mathematical Physics[1]; Associate Professor, Dept. of System Analysis[2].