

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Иркутский государственный университет»

Физический факультет

Кафедра теоретической физики

Валл А.Н., Растёгин А.Э., Первалова И.А.

ФИЗИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА

Учебное пособие

Иркутск — 2022

УДК 536.11, 536.12, 536.2.01, 536-12

Физическая кинетика. Учебное пособие. ИГУ, Иркутск, 2022

Курс физической кинетики является продолжением и развитием курса «Термодинамика и статистическая физика», который проходится студентами физического факультета ИГУ и в котором основное внимание уделяется системам в состоянии термодинамического равновесия. В рамках дисциплины «Физическая кинетика» изучается теория неравновесных систем, рассматриваются базовые методы описания случайных процессов, анализируются основные кинетические уравнения и их применения для изучения эволюции макроскопических систем.

Данное пособие представляет собой исправленное и дополненное издание выпущенного в 2001 г. конспекта лекций по физической кинетике за авторством Валла А.Н., Наумова В.А. и Растёгина А.Э. Оба издания отражают многолетний опыт чтения лекций и проведения практических занятий по физической кинетике со студентами физического факультета.

В настоящем пособии представлены теоретические сведения по основным разделам физической кинетики, а также задачи, предлагаемые студентам для самостоятельного решения. В условиях многих задач даны указания с целью облегчить их решение и способствовать правильному усвоению теоретического материала. В тексте опущены некоторые промежуточные выкладки, что определяет место представленного пособия как промежуточного между учебником и сборником задач.

Пособие предназначено для студентов 4-го курса физического факультета ИГУ, обучающихся по направлению подготовки «Физика».

Рецензент: д.ф.-м.н. Марков Юрий Адольфович

Печатается по решению учебно-методической комиссии физического факультета ИГУ

Оглавление

Введение	5
Глава 1. Случайные блуждания	6
1.1. Одномерные случайные блуждания	6
1.2. Предельные случаи биномиального распределения	11
1.3. Задача Маркова	17
1.4. Случай гауссовского распределения	21
Глава 2. Основные кинетические уравнения	25
2.1. Стохастические процессы	25
2.2. Уравнение Смолуховского (Чепмена – Колмогорова)	31
2.3. Гауссовский стационарный марковский процесс	33
2.4. Уравнение Фоккера – Планка	38
2.5. Броуновское движение	42
2.6. Статистика гравитационного поля, созданного случайным распределением звезд	52
2.7. Уравнение Больцмана	59
2.8. H-теорема Больцмана	64
2.9. Основное кинетическое уравнение Паули	67
2.10. Ленгмюровские колебания плазмы	73
2.11. Электронная плазма в металле. Проводимость	77
2.12. Теплопроводность электронного газа в металле	81
Глава 3. Элементы теории переноса	85
3.1. Сечения ядерных процессов и их связь с макроскопическими характеристиками нейтронных потоков	86
3.2. Уравнение баланса числа частиц в односкоростной модели	88

3.3. Плотность тока	89
3.4. Односторонние токи. Граничные условия на границе среда – вакуум	92
3.5. Точечный источник в среде с поглощением и рассеянием	93
3.6. Перенос в среде без поглощения и источников	95
3.7. Среда с поглощением при наличии источника без рассеяния	96
3.8. Уравнение переноса пучков нейтронов в активной среде	97
Заключение	101
Литература	102

Введение

Предмет физической кинетики в общем смысле — это описание эволюционных процессов в статистически неравновесной среде. В частном случае влияние окружения в такой среде может рассматриваться как некоторая случайная (стохастическая) сила, и тогда задача кинетики заключается в описании эволюции физической системы под действием этой силы. Характерный пример такой ситуации — броуновское движение. Как правило, в изучаемой среде возникают типичные для нее элементарные возбуждения, которые отвечают коллективным степеням свободы. В этом случае целью физической кинетики является описание динамики элементарных возбуждений (квазичастиц). Примерами коллективных возбуждений могут служить фононы и экситоны в твердых телах, ленгмюровские колебания плазмы, и т.д.

Стандартная схема исследования кинетических проблем включает в себя этап получения кинетических уравнений на те или иные величины, такие как функции распределения, пропагаторы, совместные плотности вероятностей, вероятности перехода и т. д. При выводе кинетических уравнений в них привносится и закладывается определенная информация о динамике микропроцессов, а также ряд предположений общего характера. Например, гипотеза динамического хаоса при выводе уравнения Больцмана, требование согласования высших порядков с низшими для совместной плотности вероятности n -го порядка при выводе уравнения Смолуховского и т. д. В любом случае задачи физической кинетики всегда предполагают два этапа: во-первых, получение кинетического уравнения для данного физического процесса и, во-вторых, решение (в том или ином смысле) этого уравнения.

Глава 1

Случайные блуждания

Изучение стохастических методов целесообразно начать с проблемы случайных блужданий. С одной стороны, случайные блуждания интересны сами по себе как содержательные вероятностные модели для многих практически важных задач. С другой стороны, на примере случайных блужданий можно познакомиться с некоторыми понятиями и методами, которые широко используются при изучении стохастических процессов.

1.1. Одномерные случайные блуждания

Рассмотрим частицу, которая может перемещаться по горизонтальной оси, занимая точки с целочисленными координатами. В каждую единицу времени частица смещается либо на единицу влево с вероятностью q , либо на единицу вправо с вероятностью p . Разумеется, положительные числа p и q связаны условием $p + q = 1$. Без потери общности будем считать, что в начальный момент времени частица находится в начале координат (точка с координатой 0). Величина смещения на j -том шаге s_j равна ± 1 , причем вероятность

$$\omega(s_j) = \begin{cases} p, & \text{если } s_j = +1, \\ q, & \text{если } s_j = -1. \end{cases} \quad (1.1)$$

Нас будет интересовать смещение R_n за большое число n шагов; это смещение равно

$$R_n = \sum_{j=1}^n s_j. \quad (1.2)$$

Величина (1.2) является суммой n одинаково распределенных независимых случайных величин. Ясно, что случайная величина R_n принимает целые значения, причем $-n \leq R_n \leq +n$.

Найдем вероятность $W_n(m)$ того, что через n шагов наша частица окажется в точке с координатой m , т. е.

$$W_n(m) = \omega(R_n = m). \quad (1.3)$$

Пусть k — число шагов $+1$ и l — число шагов -1 . Числа k и l удовлетворяют условиям

$$k + l = n, \quad k - l = m. \quad (1.4)$$

Отсюда получаем

$$k = \frac{n + m}{2}, \quad l = \frac{n - m}{2}. \quad (1.5)$$

Заметим, что целые числа n и m имеют одинаковую четность. Например, из начальной точки 0 за четное число шагов n можно попасть только в точку с четным m . Вероятность отдельного пути с количеством шагов в положительном направлении k и в отрицательном направлении l равна $p^k q^l$. Общее количество таких путей равно количеству способов выбрать k мест из n , т. е. биномиальному коэффициенту

$$\binom{n}{k} = \frac{1}{k!} \prod_{j=0}^{k-1} (n - j). \quad (1.6)$$

(Данная форма записи биномиального коэффициента является более общей по сравнению с формой

$$C_n^k = \frac{n!}{k!(n - k)!},$$

в которой числа n должны быть натуральными). Для целых $k > n$ это выражение автоматически обращается в нуль. В результате искомая вероятность

$$W_n(m) = \binom{n}{k} p^k (1 - p)^{n-k}, \quad (1.7)$$

где k связано с m и n согласно (1.5). Если n и m имеют разную четность, то принимаем вероятность $W_n(m) = 0$.

В теории вероятностей аналогичное распределение связано со схемой последовательных испытаний. При этом случайной величиной является число успехов в проведенных испытаниях. Пусть вероятность успеха в одном испытании равна p . Чтобы случайная величина (1.2) описывала количество успехов в n испытаниях, мы просто считаем, что

в j -том испытании величина s_j принимает либо значение 0 с вероятностью q , либо значение 1 с вероятностью p . Тогда правая часть (1.7) дает вероятность k успехов в n испытаниях при вероятности успеха p в одном испытании. Такое распределение называется *биномиальным*. Ясно, что число успехов принимает значения из множества $\{0, 1, \dots, n-1, n\}$. При одномерных случайных блужданиях само распределение то же самое, но величина R_n принимает значения из множества $\{-n, -n+2, \dots, n-2, n\}$.

Чтобы исследовать в целом характер того или иного распределения вероятностей, удобно вычислить так называемые моменты распределения. Они вычисляются с помощью процедуры усреднения. Пусть дана некоторая функция $x \mapsto f(x)$ с подходящей областью определения. Пусть дискретная случайная величина R принимает целочисленное значение m с вероятностью $W(m)$. Тогда $f(R)$ есть новая случайная величина, которая принимает с вероятностью $W(m)$ значение $f(m)$. Далее, среднее значение этой случайной величины определяется как

$$\langle f(R) \rangle = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} f(m) W(m). \quad (1.8)$$

Первым моментам распределения соответствуют функции вида $x \mapsto x^\nu$ с натуральным ν . В частности, первый и второй моменты записываются как

$$\langle R \rangle = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} m W(m), \quad \langle R^2 \rangle = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} m^2 W(m). \quad (1.9)$$

Чаще используют центральный второй момент, или дисперсию

$$\mathcal{D}(R) = \langle (R - \langle R \rangle)^2 \rangle. \quad (1.10)$$

С помощью элементарной алгебры и линейности процедуры усреднения получаем удобную формулу

$$\mathcal{D}(R) = \langle R^2 \rangle - \langle R \rangle^2. \quad (1.11)$$

Из (1.10) видно, что всегда $\mathcal{D}(R) \geq 0$. Квадратный корень из дисперсии называется *среднеквадратическим отклонением* и характеризует степень ширины или узости данного вероятностного распределения. В случае непрерывной случайной величины используются аналогичные выражения, но с заменой сумм на соответствующие интегралы. Более подробно мы обсудим этот случай в следующих разделах.

Найдем моменты $\langle R_n \rangle$ и $\mathcal{D}(R_n)$ для одномерных случайных блужданий по целочисленной решетке. Разумеется, это можно сделать прямой подстановкой вероятностей (1.7) с дальнейшим вычислением получившихся сумм. Мы воспользуемся другим методом, использующим линейность операции усреднения. Пусть Q и R — две случайные величины и пусть α — некоторое число. Линейность операции усреднения означает, что всегда выполняются два равенства

$$\langle Q + R \rangle = \langle Q \rangle + \langle R \rangle, \quad \langle \alpha R \rangle = \alpha \langle R \rangle. \quad (1.12)$$

Отметим, что первое свойство верно также и в том случае, когда случайные величины Q и R являются зависимыми. Усредняя (1.2), получаем

$$\langle R_n \rangle = \left\langle \sum_{j=1}^n s_j \right\rangle = \sum_{j=1}^n \langle s_j \rangle = n \langle s \rangle, \quad (1.13)$$

так как вероятностные свойства случайной величины s_j одни и те же независимо от j . Среднее значение смещения за один шаг вычисляется очень легко:

$$\langle s \rangle = (-1)q + (+1)p = p - q. \quad (1.14)$$

Таким образом, среднее значение смещения блуждающей частицы за n шагов равно

$$\langle R_n \rangle = n(p - q). \quad (1.15)$$

Отметим очевидные свойства. Во-первых, эта величина зануляется для симметричных блужданий, когда $p = q = 1/2$. Во-вторых, частица в среднем смещается именно в том направлении, шаг в котором более вероятен; например, $\langle R_n \rangle > 0$ при $p > q$ и $n \geq 1$. Наконец, при фиксированных вероятностях среднее значение увеличивается с ростом n .

Теперь найдем дисперсию смещения, для чего нам нужно вычислить второй момент $\langle R_n^2 \rangle$. Используя те же идеи, запишем

$$R_n^2 = R_n R_n = \sum_{j=1}^n s_j \sum_{k=1}^n s_k, \quad (1.16)$$

откуда

$$\langle R_n^2 \rangle = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \langle s_j s_k \rangle = \sum_{j=1}^n \langle s_j^2 \rangle + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^n \langle s_j s_k \rangle. \quad (1.17)$$

Последнее выражение учитывает тот факт, что при вычислении среднего $\langle s_j s_k \rangle$ следует различать два случая $j = k$ и $j \neq k$. Поскольку $s_j^2 = 1$,

первая сумма в правой части (1.17) равна просто n . Для нахождения $\langle s_j s_k \rangle$ при $j \neq k$ занесем возможные варианты в табл. 1.1.

Таблица 1.1. Значения $s_j s_k$ и их вероятности

s_j	s_k	$s_j s_k$	Вероятность
-1	-1	+1	qq
-1	+1	-1	qp
+1	-1	-1	pq
+1	+1	+1	pp

Как видно из последних двух столбцов табл. 1.1, случайная величина $s_j s_k$ принимает значение -1 с вероятностью $2pq$ и значение $+1$ с вероятностью $p^2 + q^2$. Поэтому среднее значение

$$\langle s_j s_k \rangle = (-1)2pq + (+1)(p^2 + q^2) = (p - q)^2. \quad (1.18)$$

Так как число слагаемых с $j \neq k$ равно $n^2 - n$, вторая сумма в правой части (1.17) равна $(n^2 - n)(p - q)^2$. В результате второй момент

$$\langle R_n^2 \rangle = n + (n^2 - n)(p - q)^2. \quad (1.19)$$

Подставляя это выражение и (1.15) в правую часть (1.11), вычисляем дисперсию

$$\mathcal{D}(R_n) = n[1 - (p - q)^2] = 4npq. \quad (1.20)$$

Здесь мы учли равенство $p + q = 1$. При фиксированном n дисперсия максимальна в симметричном случае $p = q = 1/2$, принимая значение $\mathcal{D}(R_n) = n$. С увеличением разницы между p и q дисперсия убывает, исчезая в детерминированном случае (скажем, при $p = 1$, когда каждый раз делается шаг вправо). Формула (1.20) также показывает, что с ростом числа шагов дисперсия возрастает линейно. Такое поведение выглядит правдоподобным.

Задача 1.1.1. Рассмотреть схему последовательных испытаний с вероятностью успеха в одном испытании p . Вероятность k успехов в n

проведенных испытаниях определяется правой частью (1.7). Используя идеи этого параграфа, найти среднее значение и дисперсию числа успехов в n испытаниях.

Ответ. Среднее число успехов — np , его дисперсия — npq .

1.2. Предельные случаи биномиального распределения

При описании макроскопических систем или процессов мы имеем дело с очень большим числом частиц или отдельных событий. Поэтому при использовании конкретных вероятностных моделей приходится рассматривать известные предельные случаи. Например, в схеме последовательных испытаний вероятность k успехов в n испытаниях равна

$$w_n(k) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}, \quad (1.21)$$

где p — вероятности успеха в одном испытании. Распределение вероятностей (1.21) называется биномиальным. В случае больших значений n формула (1.21) становится непригодной для вычислений. Следовательно, нужно найти ту или иную аппроксимацию, которая правильно передает основные характеристики исходной модели и в то же время подходит для вычислений при $n \gg 1$. Ниже рассмотрены два предельных вероятностных распределения, которые очень важны и сами по себе.

Случай 1. Распределение Пуассона. Предположим, что $n \rightarrow \infty$ и $p \rightarrow 0$, но таким образом, что произведение np остается неизменным: $np = \lambda$. В финальном распределении k будет принимать целочисленные значения от 0 до ∞ . Нас интересует правая часть (1.21) при $n \rightarrow \infty$ и заданном k . Сначала мы проанализируем выражение

$$\binom{n}{k} p^k = \frac{n(n-1) \cdots (n-k+1)}{k!} p^k = \frac{\lambda^k}{k!} \prod_{j=1}^{k-1} \left(1 - \frac{j}{n}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{\lambda^k}{k!}. \quad (1.22)$$

Действительно, в пределе $n \rightarrow \infty$ мы имеем $(1 - j/n) \rightarrow 1$. Далее, относительно оставшихся множителей в (1.21) замечаем $(1-p)^{-k} \rightarrow 1$ при $p \rightarrow 0$. Наконец, записываем

$$(1-p)^n = \left(1 - \frac{\lambda}{n}\right)^n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \exp(-\lambda). \quad (1.23)$$

В результате получаем распределение Пуассона

$$P_\lambda(k) = \exp(-\lambda) \frac{\lambda^k}{k!}, \quad (1.24)$$

где вещественный параметр $\lambda > 0$ и целое $k \geq 0$. Это распределение часто встречается в прикладных дисциплинах. Найдем среднее значение и дисперсию. Во многих случаях вычисление моментов распределения удобно проводить с использованием производящих функций. Рассмотрим функцию

$$G_\lambda(z) = \sum_{k=0}^{\infty} P_\lambda(k) z^k. \quad (1.25)$$

В известном смысле эта величина содержит информацию о распределении в целом. Дифференцируя по формальной переменной z , получаем

$$\frac{d}{dz} G_\lambda(z) = \sum_{k=0}^{\infty} P_\lambda(k) k z^{k-1}, \quad (1.26)$$

$$\frac{d^2}{dz^2} G_\lambda(z) = \sum_{k=0}^{\infty} P_\lambda(k) k(k-1) z^{k-2}. \quad (1.27)$$

Полагая в этих равенствах $z = 1$, находим

$$\langle k \rangle = G'_\lambda(1), \quad \langle k^2 - k \rangle = G''_\lambda(1). \quad (1.28)$$

Аналогичным образом получаются выражения для моментов более высокого порядка. Подставляя (1.24) в (1.25) и суммируя ряд, находим

$$G_\lambda(z) = \exp(-\lambda) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\lambda z)^k}{k!} = \exp(\lambda(z-1)). \quad (1.29)$$

Зная производящую функцию (1.29), по формулам (1.26) и (1.27) получаем

$$\langle k \rangle = \lambda, \quad \langle k^2 \rangle = \lambda^2 + \lambda. \quad (1.30)$$

Дисперсия равна $\mathcal{D}(k) = \lambda$, как и среднее. Ввиду $\langle k \rangle = \lambda$, правую часть (1.24) часто записывают со средним $\langle k \rangle$ вместо параметра λ .

Из формулы (1.24) следует, что отношение вероятностей для соседних значений k равно

$$\frac{P_\lambda(k)}{P_\lambda(k-1)} = \frac{\lambda}{k}. \quad (1.31)$$

Эта величина больше единицы для $k < \lambda$ и меньше единицы для $\lambda < k$. В случае нецелого λ вероятность (1.24) сначала возрастает с ростом целого $k \geq 0$, достигая максимума при $k = \lambda$. Затем с дальнейшим увеличением k величина $P_\lambda(k)$ монотонно убывает. В случае целого λ максимум достигается в двух точках $k = \lambda - 1$ и $k = \lambda$. Отсюда можно сделать следующий вывод. Так как наибольший практический интерес представляют распределения с большим λ , точка максимума величины $P_\lambda(k)$ очень близка к среднему $\langle k \rangle$. Такое свойство вообще довольно типично для распределений, возникающих в статистической физике.

Случай 2. Распределение Гаусса. Перед детальным рассмотрением второй полезной аппроксимации обсудим в общих чертах поведение правой части (1.21) при $n \gg 1$. Проще всего сделать это на примере симметричного случая $p = q = 1/2$, когда

$$\omega_n(k) = \frac{1}{2^n} \binom{n}{k}. \quad (1.32)$$

Задача по сути сводится к сопоставлению биномиальных коэффициентов друг с другом и со степенью 2^n . Имеем очевидное соотношение

$$\omega_n(n - k) = \omega_n(k). \quad (1.33)$$

Подставляя биномиальные коэффициенты для $k = 0, 1, 2$, получаем

$$\omega_n(0) = \frac{1}{2^n}, \quad \omega_n(1) = \frac{n}{2^n}, \quad \omega_n(2) = \frac{n(n-1)}{2^{n+1}}. \quad (1.34)$$

При больших значениях n эти выражения исчезающе малы. Далее, мы вспоминаем, что из биномиальных коэффициентов можно построить треугольник Паскаля. Из структуры треугольника Паскаля следует, что при заданном n биномиальный коэффициент максимален для $k = n/2$, когда n четно, и для $k = (n \pm 1)/2$, когда n нечетно. То есть то значение k , для которого вероятность (1.32) максимальна, практически совпадает со средним значением $\langle k \rangle = n/2$ (это np при $p = 1/2$). При рассмотрении максимума ограничимся случаем четных $n = 2m$. Индукцией нетрудно показать, что при $m \geq 3$ выполняется неравенство

$$\binom{2m}{m} = \frac{(2m)!}{(m!)^2} > 2 \cdot 3^{m-1}. \quad (1.35)$$

Иначе говоря, имеем отношение $\omega_n(n/2)/\omega_n(0) > 2 \cdot 3^{(n/2)-1}$, которое очень велико при $n \gg 1$. Таким образом, максимальная вероятность

значительно превосходит значения вероятности на краях распределения. Далее, для соседних с $n/2 = m$ целочисленных значений k получаем

$$\frac{\omega_n(m)}{\omega_n(m \pm 1)} = \frac{m + 1}{m}. \quad (1.36)$$

Эта величина больше 1, но очень близка к ней при больших m . Иными словами, в окрестности максимального значения вероятность (1.32) меняется достаточно плавно. При дальнейшем смещении от точки максимума рано или поздно начнется область резкого убывания вероятности. Положение этой области на оси k относительно максимума характеризуется среднеквадратичным отклонением, которое в симметричном случае равно $\sqrt{n/4}$.

Сделанные выше заключения остаются справедливыми и в общем случае $p \neq 1/2$. Конечно, симметрия (1.33) здесь уже не имеет места. Вероятность (1.7) будет максимальна для целых значений k , близких к среднему значению np . По-прежнему значения вероятности на краях распределения очень малы, тогда как в окрестности $k \approx np$ вероятность значительна и изменяется сравнительно плавно. Иными словами, в окрестности пика распределения мы имеем

$$|\omega_n(k) - \omega_n(k \pm 1)| \ll \omega_n(k). \quad (1.37)$$

По обе стороны от пика между ним и исчезающими краями распределения находятся области резкого спадания вероятности. Их положение можно найти, отступив от максимума на величину порядка среднеквадратичного отклонения. Для биномиального распределения среднеквадратичное отклонение равно \sqrt{npq} . Ввиду очень малых значений вероятности на краях распределения эти значения не оказывают существенного влияния на основные характеристики распределения. Поэтому мы стремимся хорошо аппроксимировать формулу (1.7) только в районе пика, охватывая точку максимума $k \approx np$ и ее окрестность шириной $\sim 2\sigma = 2\sqrt{npq}$. На краях распределения погрешность аппроксимации может быть значительной. Но, поскольку вероятности там исчезающе малы, величина такой погрешности не будет иметь какого-либо влияния. Все основные характеристики распределения определяются значениями вероятности (1.21) в районе пика.

Принимая во внимание (1.37), мы можем далее считать k непрерывно изменяющейся величиной. Это значительно упростит аналитиче-

ские преобразования. Далее мы можем попробовать найти подходящее разложение в ряд по степеням $k - k_1$, где k_1 обозначает точку максимума. Функция $w_n(k)$ меняется довольно плавно вблизи максимума, но при удалении от него на расстояния $\sim \sigma$ начинает резко убывать. Чтобы получить хорошую аппроксимацию, мы рассмотрим разложение не самой быстро изменяющейся функции $w_n(k)$, а ее логарифма. Такой подход оправдывает себя во многих случаях. Начнем с того, что перепишем (1.21) без использования факториалов. Для этого применяется формула Стирлинга

$$n! = \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n. \quad (1.38)$$

Данное равенство следует понимать как асимптотическое. Выражая факториалы $n!$, $k!$ и $(n - k)!$ согласно (1.38) и подставляя их в (1.21), после очевидных упрощений находим

$$\begin{aligned} \ln w_n(k) = & n \ln n - k \ln k - (n - k) \ln(n - k) + k \ln p + (n - k) \ln q + \\ & + \frac{1}{2} \ln n - \frac{1}{2} \ln(2\pi k(n - k)). \end{aligned} \quad (1.39)$$

Дифференцируя по k , с учетом равенства $(x \ln x)' = \ln x + 1$ получаем

$$\frac{d \ln w_n(k)}{dk} = -\ln k + \ln(n - k) + \ln p - \ln q - \frac{1}{2k} + \frac{1}{2(n - k)}. \quad (1.40)$$

Чтобы найти точку максимума k_1 , приравняем производную к нулю. Мы рассматриваем значения k в интервале примерно между $np \pm \sqrt{npq}$, где оба числа k и $(n - k)$ достаточно велики. Поэтому при определении k_1 двумя дробями в правой части (1.40) можно пренебречь. В результате получаем уравнение

$$\frac{n - k_1}{k_1} = \frac{q}{p}, \quad (1.41)$$

откуда $k_1 = np$ ввиду $q = 1 - p$. Далее записываем разложение в ряд Тейлора:

$$\begin{aligned} \ln w_n(k) = & \ln w_n(k_1) + \left. \frac{d \ln w_n(k)}{dk} \right|_{k_1} (k - k_1) \\ & + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 \ln w_n(k)}{dk^2} \right|_{k_1} (k - k_1)^2 + \dots \end{aligned} \quad (1.42)$$

Поскольку k_1 является точкой максимума, первая производная в разложении (1.42) равна нулю, поэтому

$$w_n(k) \approx w_n(k_1) \exp\left(\left. \frac{d^2 \ln w_n(k)}{dk^2} \right|_{k_1} \frac{(k - k_1)^2}{2}\right). \quad (1.43)$$

Дифференцируя (1.40), получаем далее

$$\frac{d^2 \ln \omega_n(k)}{dk^2} = -\frac{1}{k} - \frac{1}{n-k} + \frac{1}{2k^2} + \frac{1}{2(n-k)^2}. \quad (1.44)$$

Когда числа k и $(n-k)$ велики, мы можем пренебречь дробями, содержащими квадраты в знаменателе. С учетом этого замечания и $p+q=1$ после подстановки $k_1 = np$ в (1.44) находим

$$\left. \frac{d^2 \ln \omega_n(k)}{dk^2} \right|_{k_1} = -\frac{1}{np} - \frac{1}{nq} = -\frac{1}{npq}. \quad (1.45)$$

Остается вычислить величину $\omega_n(k_1)$. В силу $k_1 = np$ и $n - k_1 = nq$ формула (1.39) дает

$$\begin{aligned} \ln \omega_n(k_1) &= n \ln n - np(\ln n + \ln p) - nq(\ln n + \ln q) + np \ln p + nq \ln q + \\ &+ \frac{1}{2} \ln n - \frac{1}{2} \ln(2\pi n^2 pq) = -\frac{1}{2} \ln(2\pi npq), \end{aligned} \quad (1.46)$$

откуда $\omega_n(k_1) = 1/\sqrt{2\pi npq}$. Так наша аппроксимация биномиального распределения принимает вид

$$\tilde{\omega}_n(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi npq}} \exp\left(-\frac{(k - np)^2}{2npq}\right). \quad (1.47)$$

Это распределение удовлетворяет условию нормировки в следующем смысле. Нетрудно проверить, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\omega}_n(k) dk = 1. \quad (1.48)$$

Фактически гистограмма распределения просто заменяется гладкой кривой — функцией Гаусса.

Вводя обозначения $\mu = np$, $\sigma^2 = npq$ и используя непрерывную переменную x , запишем распределение (1.47) в более привычном виде

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right). \quad (1.49)$$

Эта плотность вероятности описывает нормальное распределение, известное также как распределение Гаусса. Параметры μ и σ дают среднее значение и среднеквадратическое отклонение непрерывной случайной величины X :

$$\mu = \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x) dx, \quad \sigma^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \mu)^2 f(x) dx. \quad (1.50)$$

Для μ и σ часто используются термины «математическое ожидание» и «стандартное отклонение» соответственно. При значениях $\mu = 0$ и $\sigma = 1$ формула (1.49) дает так называемое стандартное нормальное распределение. Нормальное распределение очень широко применяется в вероятностных моделях. Оно является «типичным» распределением в том смысле, который определен центральной предельной теоремой теории вероятностей. Не вдаваясь в детали, напомним, что это набор результатов, характеризующих поведение суммы большого числа независимых (или слабо зависимых) случайных величин близких масштабов. Подробное изложение этой темы содержится в курсах теории вероятностей. В дальнейшем мы будем часто иметь дело с распределениями типа (1.49).

Задача 1.2.1. Считая $|k - k_1| \sim \sqrt{npq}$, рассмотреть возможное значение членов разложения (1.42) со степенями $(k - k_1)^3$ и $(k - k_1)^4$. Для этого оценить по порядку величины отношение каждого слагаемого к учтенному слагаемому с квадратом $(k - k_1)^2$, вычисляя нужные производные в точке $k_1 = np$. При дальнейшем дифференцировании выражения (1.44) не учитывать дроби с квадратами в знаменателе.

Ответ. Соответствующие отношения по модулю равны

$$\frac{|(p - q)\Delta k|}{3npq} \sim \frac{|p - q|}{3\sqrt{npq}}, \quad \frac{(p^3 + q^3)\Delta k^2}{6(npq)^2} \sim \frac{p^3 + q^3}{6npq}. \quad (1.51)$$

При достаточно больших n влияние неучтенных членов разложения (1.42) будет пренебрежимо малым.

1.3. Задача Маркова

Изучение стохастических методов проще всего начать с проблемы случайных блужданий в трехмерном пространстве, впервые рассмотренной А.А. Марковым. Задача, которая при этом решается, формулируется следующим образом: какова вероятность того, что некоторая частица, начав свое движение из точки $\vec{r} = \vec{0}$ и совершив N случайных блужданий, окажется в точке $\vec{r} = \vec{R}$? Решение этой задачи не требует составления и решения кинетических уравнений – оно основано на простых вероятностных законах для независимых случайных процессов. Эта про-

стая модель играет важную роль в теории стохастических процессов и будет часто использоваться в дальнейшем, поэтому изучим ее подробнее.

Рассмотрим цепочку случайных перемещений \vec{r}_j ($j = 1, 2, \dots, N$) частицы (рис. 1.1).

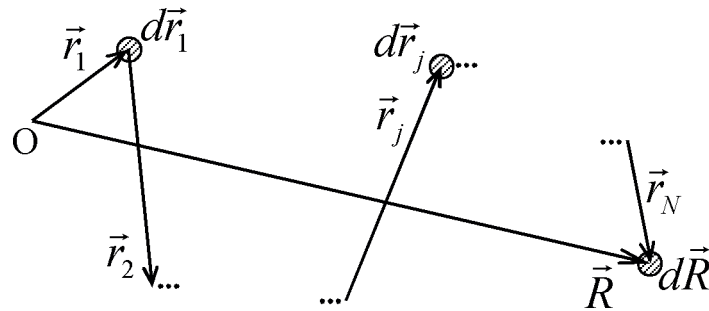


Рис. 1.1. Случайные перемещения частицы из точки O в точку \vec{R}

В начальный момент времени частица находилась в точке $\vec{r} = \vec{0}$, при первом шаге переместилась в окрестность $d\vec{r}_1$ точки с радиусом-вектором \vec{r}_1 , затем в окрестность $d\vec{r}_2$ некоторой точки \vec{r}_2 и так далее до конечной точки $\vec{r} = \vec{R}$ на N -м шаге. Радиус-вектор результирующей точки тогда есть сумма всех радиусов-векторов

$$\vec{R} = \sum_{j=1}^N \vec{r}_j.$$

Сделаем два предположения относительно таких перемещений частицы. Во-первых, пусть перемещения совершаются независимо друг от друга. Во-вторых, пусть вероятность попадания частицы на j -том шаге в окрестность точки $d\vec{r}_j$ задается некоторой известной функцией τ_j :

$$d\omega_j = \tau_j(\vec{r}_j) d\vec{r}_j. \quad (1.52)$$

Для начала решим задачу случайных блужданий в общем виде, используя функции распределения $\tau_j(\vec{r}_j)$ как заданные *a priori*, а в дальнейшем будем делать физические предположения о конкретном их виде.

Таким образом, каждой случайной величине \vec{r}_j мы поставили в соответствие функцию распределения $\tau_j(\vec{r}_j)$, определяющую вероятность $d\omega_j$ обнаружить частицу после j шагов в окрестности точки $d\vec{r}_j$. Тогда искомая в задаче вероятность обнаружить частицу через N шагов в окрестности точки $d\vec{R}$ задается выражением

$$dW = W(\vec{R}, N)d\vec{R}, \quad (1.53)$$

где $W(\vec{R}, N)$ — соответствующая функция распределения. Итак, задача случайных блужданий свелась к нахождению функции распределения $W(\vec{R}, N)$ случайной величины \vec{R} . Проблема нахождения функции распределения для суммы независимых случайных величин выходит далеко за рамки проблемы случайных блужданий в трехмерном пространстве. В более общей постановке задача была рассмотрена Марковым. Далее все вычисления будут проведены для трехмерного пространства, но результат легко обобщить на случай произвольного n -мерного пространства.

В силу предположения о независимости перемещений вероятность перемещения по данной конкретной цепочке $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$ есть произведение вероятностей $d\omega_j$:

$$\prod_{j=1}^N \tau_j(\vec{r}_j) d\vec{r}_j. \quad (1.54)$$

Чтобы найти вероятность попадания после N перемещений в окрестность $d\vec{R}$ точки с радиусом-вектором \vec{R} , нужно просуммировать (1.54) по всем траекториям

$$dW = W(\vec{R}, N)d\vec{R} = \int_{\Omega} \prod_{j=1}^N \tau_j(\vec{r}_j) d\vec{r}_j. \quad (1.55)$$

Однако траектории, по которым ведется интегрирование, должны удовлетворять условию попадания частицы после N шагов именно в окрестность $d\vec{R}$, которое можно записать в виде:

$$\vec{R} - \frac{1}{2}d\vec{R} \leq \sum_{j=1}^N \vec{r}_j \leq \vec{R} + \frac{1}{2}d\vec{R}. \quad (1.56)$$

Это условие определяет область интегрирования Ω в (1.55), которая представляет из себя слой в $3N$ -мерном пространстве. Для выполнения интегрирования по области (1.56) в уравнении (1.55) удобно ввести вспомогательную функцию следующего вида:

$$\Delta(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \begin{cases} 1, & \text{если } \vec{r}_j \text{ удовлетворяют (1.56),} \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

Это позволяет перейти в (1.55) от интегрирования по области Ω к интегрированию по всему $3N$ -мерному пространству V_N :

$$W(\vec{R}, N) d\vec{R} = \int_{V_N} \Delta(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \prod_{j=1}^N \tau_j(\vec{r}_j) d\vec{r}_j. \quad (1.57)$$

Для дальнейшего интегрирования представим введенную функцию $\Delta(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ в виде разрывного интеграла Дирихле, который по определению имеет вид (см., например, Фихтенгольц Г. М. «Курс дифференциального и интегрального исчисления», том II)

$$\delta(\gamma, \alpha) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(\alpha\rho)}{\rho} e^{i\gamma\rho} d\rho = \begin{cases} 1, & |\gamma| < \alpha, \\ 0, & |\gamma| > \alpha. \end{cases} \quad (1.58)$$

Данное определение записано в одномерном случае, следовательно, нам для установления точной аналогии необходимо перейти к трехмерным векторам. Для этого запишем интеграл Дирихле для каждой компоненты трехмерного пространства:

$$\delta^k(\gamma^k, \alpha^k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin \alpha^k \rho^k}{\rho^k} \exp(i\gamma^k \rho^k) d\rho^k, \quad k = 1, 2, 3 \quad (1.59)$$

и установим соответствие

$$\alpha^k = \frac{1}{2} dR^k; \quad \gamma^k = \sum_{j=1}^N r_j^k - R^k. \quad (1.60)$$

Тогда введенная нами функция $\Delta(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ имеет вид

$$\Delta(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{k=1}^3 \delta(\gamma^k, \alpha^k). \quad (1.61)$$

Условие (1.56) в точности соответствует случаю $|\gamma^k| < \alpha^k$, когда введенная нами вспомогательная функция $\Delta(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ равна единице. Подставляя обозначения (1.60) в интеграл Дирихле (1.59) и учитывая, что величина dR^k является малой, найдем явный вид функций $\delta^k(\gamma^k, \alpha^k)$ и $\Delta(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$. После этого, подставив полученное выражение в искомую вероятность (1.57), получим результат Маркова

$$W(\vec{R}, N) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int A_N(\vec{\rho}) \exp(-i\vec{\rho} \cdot \vec{R}) d\vec{\rho}, \quad (1.62)$$

где

$$A_N(\vec{\rho}) = \prod_{j=1}^N \int \tau_j(\vec{r}_j) \exp(i\vec{\rho} \cdot \vec{r}_j) d\vec{r}_j. \quad (1.63)$$

Отметим, что при выводе этих соотношений размерность случайной величины (в данном случае перемещений \vec{r}_j в 3-мерном пространстве) конструктивно определила лишь размерность элементов объема $d\vec{r}_j$ и $d\vec{\rho}$, а также определила $d = 3$ в степени множителя $(2\pi)^{-d}$ в формуле (1.62).

Итак, мы нашли вероятность попадания частицы в окрестность некоторой конкретной точки после N ее случайных блужданий (согласно (1.53) полученное распределение $W(\vec{R}, N)$ полностью определяет эту вероятность). Однако этот результат зависит от функций распределения $\tau_j(\vec{r}_j)$, которые мы считали известными. Напомним, что величина $\tau_j(\vec{r}_j)$ задает вероятность попадания частицы на j -м шаге в окрестность $d\vec{r}_j$ точки с радиусом-вектором \vec{r}_j (1.52). Но какова может быть эта вероятность? Каким физическим распределением она может быть обусловлена? Ответы на эти вопросы могут быть разными в зависимости от рассматриваемой физической модели. Однако наиболее естественным и пространственным является распределение Гаусса. Рассмотрим этот случай подробно.

1.4. Случай гауссовского распределения

Зададим функции распределения $\tau_j(\vec{r})$ в гауссовском виде

$$\tau_j(\vec{r}) = \left(\frac{2\pi l_j^2}{3} \right)^{-3/2} \exp \left[-\frac{3\vec{r}^2}{2 l_j^2} \right], \quad (1.64)$$

где

$$l_j^2 = \int \vec{r}^2 \tau_j(\vec{r}) d\vec{r} \quad (1.65)$$

— величина среднего квадрата перемещения по распределению $\tau_j(\vec{r})$ на j -м шаге. Этот результат получается непосредственно, если в интеграл (1.65) подставить выражение (1.64) для $\tau_j(\vec{r})$. Именно такой вид распределения диктуется необходимостью получения в конечном итоге максвелловского распределения частиц, его вывод подробно рассмотрен в [8]. При подстановке этого распределения в (1.63) получим для величины $A_N(\vec{\rho})$

$$A_N(\vec{\rho}) = \prod_{j=1}^N \exp \left[-\frac{\vec{\rho}^2 l_j^2}{6} \right]. \quad (1.66)$$

Введем теперь усредненный квадрат величины перемещения по всем N шагам:

$$\langle l^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N l_j^2,$$

тогда произведение экспонент можно переписать в виде

$$A_N(\vec{\rho}) = \exp \left[-\frac{\vec{\rho}^2 N \langle l^2 \rangle}{6} \right]. \quad (1.67)$$

Для искомого распределения $W(\vec{R}, N)$ получим

$$W(\vec{R}, N) = \left(\frac{2\pi}{3} N \langle l^2 \rangle \right)^{-3/2} \exp \left[-\frac{3\vec{R}^2}{2 N \langle l^2 \rangle} \right]. \quad (1.68)$$

Теперь приведем это выражение к более удобному виду, проведя следующие преобразования. Введем число шагов в единицу времени $n = N/t$ и перейдем от числа шагов N к непрерывному времени t , полагая $N = nt$. Перейдем также к произвольной системе координат с помощью соотношения

$$\vec{y} - \vec{x} = \vec{R},$$

т. е. положим, что изначально частица находилась в точке с радиусом-вектором \vec{x} , а не в начале координат. Координаты точки \vec{x} считаются известными, а сама эта точка называется точкой *детерминированности*. Кроме того, введем величину

$$D = \frac{1}{6} n \langle l^2 \rangle,$$

которая, как мы увидим в дальнейшем, оказывается коэффициентом диффузии. Тогда нетрудно получить функцию распределения:

$$W(\vec{y} | \vec{x}, t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} \exp \left[-\frac{(\vec{y} - \vec{x})^2}{4Dt} \right]. \quad (1.69)$$

Эта функция определяет вероятность перехода частицы за время t из точки с радиусом-вектором \vec{x} в точку \vec{y} . С этим простейшим примером гауссовской функции распределения мы будем работать в дальнейшем для иллюстрации различных процессов физической кинетики. Подчеркнем, что здесь мы получили это распределение из общих соображений, не решая каких бы то ни было кинетических уравнений.

Задача 1.4.1. Получить результат (1.69) для гауссовского распределения (1.64).

Задача 1.4.2. Найти дифференциальное уравнение первого порядка по времени и второго порядка по пространственным переменным, которому удовлетворяет полученное распределение (1.69). Какие физические процессы описывает данное уравнение?

Задача 1.4.3. Вычислить среднее значение отклонения от точки детерминированности $\langle y - x \rangle$ в одномерном случае, когда функция распределения имеет вид

$$\omega(y | x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp \left[-\frac{(y - x)^2}{4Dt} \right]. \quad (1.70)$$

Указание. Из статистической физики известно, что для нахождения средней величины функции $f(y)$ при известной функции распределения по переменной y необходимо вычислить интеграл

$$\langle f(y) \rangle = \int f(y) \omega(y|x, t) dy,$$

где $\omega(y|x, t)$ — функция распределения, x — точка детерминированности.

Задача 1.4.4. Вычислить средний квадрат отклонения от точки детерминированности $\langle (y - x)^2 \rangle$ для функции распределения (1.70).

Задача 1.4.5. Вычислить средний квадрат отклонения от точки детерминированности $\langle (\vec{y} - \vec{x})^2 \rangle$ для трехмерного случая, когда функция распределения задается выражением (1.69).

Задача 1.4.6. Рассмотреть следующую модель движения: частица может двигаться только в одном направлении. При этом за одну итерацию она либо делает один шаг размером a , либо остается на месте. Шаги считать независимыми друг от друга. Определить вероятность обнаружить частицу через N итераций в точке R (расстояние R кратно a).

Указание. Сравнить данную задачу с задачей 1.1.1.

Функцию распределения на j -м шаге в данном случае можно записать в виде

$$\tau_j(x_j) = q\delta(x_j) + p\delta(x_j - a),$$

где q — вероятность того, что частица останется на месте, p — вероятность шага. Таким образом, полная вероятность $q + p = 1$. Если частица в итоге сделала k шагов, значит, на месте она оставалась $(N - k)$ итераций. Результирующее смещение частицы $x = ka$ должно совпасть с расстоянием R .

Ответ. Искомое распределение $W(R, N)$ имеет биномиальный вид

$$W(R, N) = \sum_{k=0}^N P_k(N) \delta(R - ka), \quad P_k(N) = \frac{N!}{k!(N - k)!} p^k (1 - p)^{N-k}.$$

Необходимо дать наглядное объяснение этому результату, вспомнить формулу Бернулли теории вероятностей. Необходимо также проверить, что полная вероятность, просуммированная по всем возможным конечным состояниям, равна единице: $\int W(R, N) dR = 1$.

Глава 2

Основные кинетические уравнения

2.1. Стохастические процессы

В предыдущих пунктах были рассмотрены случайные блуждания частицы в пространстве в качестве введения в изучение стохастических методов физической кинетики. Теперь приступим к более детальному изучению этих методов и выстроим *теорию случайных, или стохастических* процессов.

Обозначим через Y интересующую нас случайную величину, например, ею может быть координата или скорость частицы в газе или жидкости. Если бы переменная Y была детерминированной величиной, мы могли бы построить функцию времени $Y = y(t)$, которая определяла бы значение y в каждый момент времени t . Однако если Y — случайная переменная, то такой функции не существует. В каждый момент времени переменная Y может иметь любое значение, лежащее в области ее изменения. Тогда всякому возможному значению y в момент времени t присваивается некоторая вероятность (от 0 до 1). Если при этом Y — непрерывная величина, то говорят, что она обладает некой *плотностью* вероятности $W(y, t)$; тогда вероятность найти значение случайной величины Y в бесконечно малом интервале $(y, y + dy)$ в момент времени t задается выражением $W(y, t)dy$. Зависимость случайной величины от времени называется случайным *процессом*. В случайном процессе в каждый момент времени случайная величина Y описывается отдельной функцией распределения. Получается, что даже на конечном интервале времени случайный процесс задается континуумом случайных величин. Наглядное представление понятия случайного процесса можно увидеть на рис. 2.2.

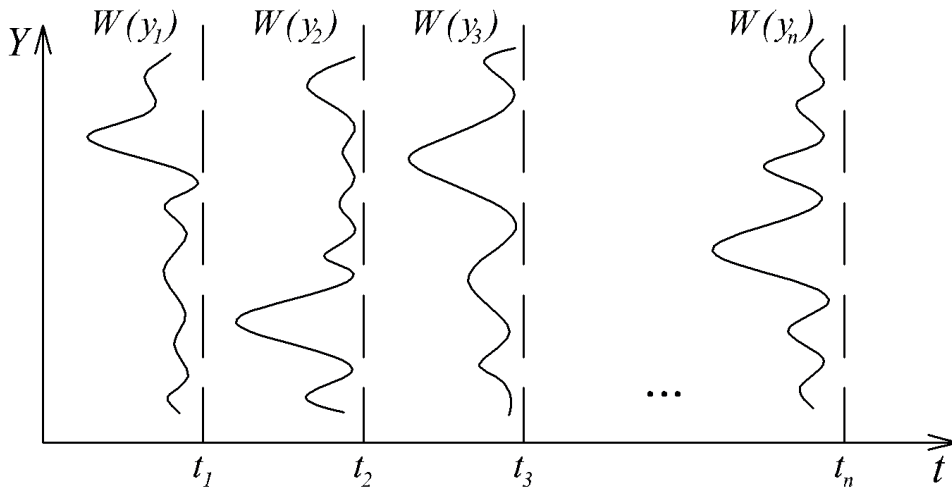


Рис. 2.2. Изображение случайного процесса

Как видно, для каждого отдельного момента времени у случайной величины есть свое наиболее вероятное значение (оно отвечает максимальному пику в каждом распределении $W(y_i)$). Через наиболее вероятные значения в разные моменты времени можно провести линию, которая отвечала бы наиболее вероятной *траектории* протекания случайного процесса. Однако очевидно, что такая траектория не является единственно возможной для данного случайного процесса, он может протекать и по любой другой траектории, только с меньшей вероятностью.

Заметим, что при описании случайного процесса, вообще говоря, недостаточно знать плотность вероятности $W(y, t)$. Положение случайной величины в некоторый момент времени в некоторой точке может влиять на ее положение в следующий момент времени, т. е. различные точки отнюдь не обязательно независимы. В этом случае необходимо ввести *совместную* плотность вероятности $W_2(y_2, t_2 | y_1, t_1)$, определяющую вероятность того, что в момент времени t_1 случайная величина принимает значение y_1 , а в момент t_2 — значение y_2 . Следовательно для того, чтобы описать случайный процесс, необходимо задать совместную плотность вероятности n -го порядка

$$W_n(y_n, t_n | \dots | y_2, t_2 | y_1, t_1), \quad (2.1)$$

которая задает вероятность

$$dW_n = W_n(y_n, t_n | \dots | y_2, t_2 | y_1, t_1) dy_1 dy_2 \dots dy_n \quad (2.2)$$

того, что значение случайной величины $Y(t_1)$ лежит в окрестности dy_1 точки y_1 , значение случайной величины $Y(t_2)$ лежит в окрестности dy_2 точки y_2 , ... значение случайной величины $Y(t_n)$ лежит в окрестности dy_n точки y_n .

С учетом введения совместной плотности вероятности случайный процесс будет описываться уже не с помощью моментов $\langle Y^n \rangle$, а n -точечными корреляционными функциями

$$\begin{aligned} F(t_1, \dots, t_n) &= \langle Y(t_1) \dots Y(t_n) \rangle = \\ &= \int y_1 y_2 \dots y_n W_n(y_n, t_n | \dots | y_2, t_2 | y_1, t_1) dy_1 dy_2 \dots dy_n. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Такой подход дает описание процесса в грубом приближении. Полное описание подразумевает переход от функций W_n к соответствующему функционалу.

Совместная плотность вероятности W_n должна удовлетворять трем необходимым условиям:

1) условию положительной определенности (так как W_n представляет собой плотность вероятности)

$$W_n(y_n, t_n | \dots | y_1, t_1) \geq 0;$$

2) условию согласования высших порядков с низшими

$$\int W_n(y_n, t_n | \dots | y_1, t_1) dy_k = W_{n-1}(y_n, t_n | \dots | y_{k+1}, t_{k+1} | y_{k-1}, t_{k-1} | \dots | y_1, t_1).$$

В соответствии с этим условием интегрирование по любой переменной y_j понижает порядок функции W_n на единицу и автоматически снимает зависимость от соответствующей переменной t_j ;

3) условию нормировки (полная вероятность)

$$\int W_1(y, t) dy = 1.$$

Чтобы получить для совместных плотностей вероятностей какие-либо определяющие соотношения, необходимо как-то конкретизировать характер рассматриваемых процессов. Разумеется, всякое предположение о свойствах реальных физических процессов является идеализацией

и выполняется лишь приближенно; искусство исследователя состоит в том, чтобы найти для физической задачи такое представление, в котором основные величины с хорошей точностью удовлетворяют свойствам того вероятностного процесса, который используется в качестве математической модели. Простейшим случаем идеализации (называемым *чисто случайным* процессом) является процесс, в котором функции распределения не зависят друг от друга:

$$W_2(y_2, t_2|y_1, t_1) = W_1(y_2, t_2) \cdot W_1(y_1, t_1).$$

В этом случае для решения задачи достаточно знать только функцию первого порядка $W_1(y, t)$, корреляции во времени совершенно отсутствуют. Однако в случае непрерывного физического процесса такое предположение заведомо нереалистично, так как на достаточно малых промежутках времени между событиями должна существовать причинная связь.

Следующим по простоте и имеющим фундаментальное значение для статистической физики является так называемый *марковский* процесс. Для полного математического описания такого процесса необходимо знать уже первые две функции W_1 и W_2 . При этом они связаны между собой через новый объект, называемый *вероятностью перехода* $\omega(y_2, t_2|y_1, t_1)$:

$$W_2(y_2, t_2|y_1, t_1) = \omega(y_2, t_2|y_1, t_1) W_1(y_1, t_1). \quad (2.4)$$

Из этого соотношения видно, что функция $\omega(y_2, t_2|y_1, t_1)$ задает плотность вероятности перехода случайной величины от значения y_1 к значению y_2 за время $t_2 - t_1$. При этом данное свойство факторизации совместной плотности вероятности можно применить для любого порядка:

$$W_n(y_n, t_n | \dots | y_1, t_1) = \omega(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1}) W_{n-1}(y_{n-1}, t_{n-1} | \dots | y_1, t_1), \quad (2.5)$$

что позволяет выразить все функции W_n при $n \geq 3$ только через W_1 и W_2 . Оказывается, что при надлежащем выборе переменных состояния многие физические процессы являются приближенно марковскими. Остановимся на изучении этих процессов подробнее. В соответствии с условием согласования высших порядков с низшими можно записать

$$W_1(y_2, t_2) = \int \omega(y_2, t_2|y_1, t_1) W_1(y_1, t_1) dy_1. \quad (2.6)$$

Далее, если положить $W_1(y_1, t_1) = \delta(y_1 - y_0)$ и домножить на dy_2 , то легко увидеть, что величина

$$d\omega = \omega(y_2, t_2|y_1, t_1) dy_2$$

есть вероятность обнаружить в момент времени t_2 значение случайной величины Y в окрестности dy_2 точки y_2 при условии, что в момент времени t_1 случайная величина Y с достоверностью равнялась y_1 .

Интегрируя равенство (2.4) по dy_2 и используя условие согласования порядков, легко получить нормировку для плотности вероятности перехода

$$\int \omega(y_2, t_2|y_1, t_1) dy_2 = 1. \quad (2.7)$$

Здесь существенно, что интегрирование проводится именно по значению в конечном состоянии y_2 .

Таким образом, марковский процесс однозначно определяется заданием вероятности перехода $\omega(y_2, t_2|y_1, t_1)$ во всей области изменения переменных и заданием распределения $W(y, t)$ в начальный момент времени $t = t_0$. Далее согласно (2.4) однозначно восстанавливаются W_1 и W_2 во всей области, а затем по уравнению (2.5) W_n для всех $n \geq 3$. При этом вероятность обнаружить случайную величину в окрестности dy_n точки y_n в момент времени t_n , если в момент t_{n-1} она находилась в точке y_{n-1} , никак не зависит от того, каким путем и откуда эта случайная величина попала в точку y_{n-1} . Случайная величина «забывает» свою предысторию, и это является характерной чертой марковского процесса.

В дальнейшем важную роль будут играть процессы, для которых плотность вероятности перехода $\omega(y_2, t_2|y_1, t_1)$ зависит только от разности времен $(t_2 - t_1) > 0$. Такие процессы называются *стационарными*. В этом случае плотность вероятности перехода есть функция трех переменных и ее стандартное обозначение

$$\omega(y_2|y_1, t_2 - t_1) \equiv \omega(y_2, t_2|y_1, t_1).$$

Задача 2.1.1. Проверить, что плотность вероятности перехода (1.69) удовлетворяет условию нормировки (2.7).

Задача 2.1.2. Пусть одномерная случайная величина $Y(t)$ описывается плотностью вероятности перехода

$$\omega(y|x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp \left[-\frac{(y-x)^2}{4Dt} \right].$$

Найти плотность вероятности перехода $\omega^*(r|\rho, t)$ для новой случайной величины

$$R(t) = |Y(t)|.$$

Указание. Если случайная величина Y описывается функцией распределения $\omega(y)$, то среднее значение произвольной функции $f(y)$:

$$\langle f(y) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(y) \omega(y) dy. \quad (2.8)$$

Если мы ищем новую функцию распределения $\omega^*(f(y))$, описывающую введенную величину $f(y)$, то необходимо в равенстве (2.8) сделать замену переменных $f(y) = z$. Если y выражается через z как $y = g(z)$, дифференциал $dy = g'(z)dz$, учитывая соответствующие пределы интегрирования, получим

$$\langle z \rangle = \int z \omega(g(z)) g'(z) dz.$$

Отсюда видно, что новая функция распределения имеет вид $\omega^*(z) = \omega(g(z)) \cdot g'(z)$. В предложенной задаче нужно сделать замену переменных $|y| = z$ и аккуратно учесть пределы интегрирования по z .

Задача 2.1.3. Пусть трехмерная случайная величина $\vec{Y}(t)$ описывается плотностью вероятности перехода (1.69). Найти плотность вероятности перехода $W^*(r|\rho, t)$ для новой случайной величины

$$R(t) = |\vec{Y}(t)|.$$

Указание. Нужно провести аналогичные рассуждения, что и в предыдущей задаче. Однако в данном случае, чтобы перейти от трехмерного интеграла к одномерному, удобно ввести сферическую систему координат, ось z которой направлена вдоль вектора \vec{x} , и взять интегралы по углам.

2.2. Уравнение Смолуховского (Чепмена – Колмогорова)

Из определения и свойств совместной плотности вероятности можно легко получить важное соотношение для плотности вероятности перехода, которое является универсальным свойством этого объекта. По условию согласования высших порядков с низшими и согласно определению вероятности перехода (2.4)

$$\begin{aligned} W_2(y_3, t_3|y_1, t_1) &= \int dy_2 W_3(y_3, t_3|y_2, t_2|y_1, t_1) = \\ &= \int dy_2 \omega(y_3, t_3|y_2, t_2) \omega(y_2, t_2|y_1, t_1) W_1(y_1, t_1). \end{aligned}$$

Далее, выражая левую часть этого равенства снова через вероятность перехода согласно определению и сокращая $W_1(y_1, t_1)$, можно записать нелинейное интегральное соотношение

$$\omega(y_3, t_3|y_1, t_1) = \int \omega(y_3, t_3|y_2, t_2) \omega(y_2, t_2|y_1, t_1) dy_2. \quad (2.9)$$

Данное уравнение, которому подчиняется плотность вероятности перехода, называется уравнением Смолуховского (в математической литературе более употребителен термин «уравнение Чепмена – Колмогорова»). Это соотношение носит общий характер и позволяет найти вероятность перехода от начального состояния y_1 к конечному состоянию y_3 за время $t_3 - t_1$ как произведение вероятностей перехода к некоторому промежуточному состоянию y_2 , проинтегрированное по всем этим возможным промежуточным состояниям. Нетрудно убедиться, что плотность вероятности перехода $W(\vec{y}, N_2|\vec{x}, N_1)$ из \vec{x} в \vec{y} за число шагов $N = N_2 - N_1$ при трехмерных случайных блужданиях, полученная ранее в п. 1.3, удовлетворяет уравнению (2.9) при произвольных распределениях $\tau_j(\vec{r}_j)$.

Для стационарных процессов уравнение Смолуховского (2.9) принимает вид

$$\omega(z|x, t + \tau) = \int \omega(z|y, t) \omega(y|x, \tau) dy.$$

Задача 2.2.1. Проверить, удовлетворяет ли гауссовское распределение

$$\omega(\vec{y}|\vec{x}, t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} \exp \left[-\frac{(\vec{y} - \vec{x})^2}{4Dt} \right]$$

уравнению Смолуховского для трехмерного случая

$$\omega(\vec{y}|\vec{x}, t) = \int \omega(\vec{y}|\vec{\xi}, t - \tau) \omega(\vec{\xi}|\vec{x}, \tau) d\vec{\xi}.$$

Задача 2.2.2. Показать, что вероятность перехода пуассоновского процесса (см. (1.24))

$$\omega(m|n, t) = \begin{cases} \exp(-\lambda t) \frac{(\lambda t)^{m-n}}{(m-n)!}, & \text{если } m \geq n, \\ 0, & \text{если } m < n, \end{cases} \quad (2.10)$$

удовлетворяет уравнению Смолуховского, записанному для дискретного случая:

$$\omega(l|n, t + \tau) = \sum_m \omega(l|m, t) \omega(m|n, \tau).$$

Вспомнить из теории вероятностей, какие процессы описывает распределение Пуассона, кроме рассмотренного в п. 1.2 дискретного блуждания частицы.

Задача 2.2.3. Показать, что плотность вероятности перехода $\omega^*(r|\rho, t)$, полученная в задаче 2.1.2 предыдущего пункта, удовлетворяет уравнению

$$\omega(r|\rho, t + \tau) = \int_0^\infty \omega(r|\lambda, t) \omega(\lambda|\rho, \tau) d\lambda.$$

Обратить внимание на область интегрирования.

Задача 2.2.4. Показать то же самое для плотности вероятности перехода $W^*(r|\rho, t)$ из задачи 2.1.3 предыдущего пункта.

Задача 2.2.5. Рассмотреть распределение Коши, в котором одномерная случайная величина $Y(t)$ описывается плотностью вероятности перехода

$$\omega(y|x, t) = \frac{1}{\pi} \frac{vt}{v^2 t^2 + (y - x)^2},$$

где v — величина с размерностью скорости. Данное распределение является примером применения законов физической кинетики за пределами данного раздела физики (оно описывает, например, амплитудно-частотные характеристики линейных колебательных систем в окрестно-

сти резонансных частот). Показать, что приведенная здесь плотность вероятности перехода удовлетворяет уравнению Смолуховского.

Задача 2.2.6. Если броуновскую частицу, находящуюся изначально в точке x_0 , поместить в потенциальное поле $U = \alpha x^2$, то плотность вероятности ее перехода в произвольную точку x за время t будет описываться выражением

$$\begin{aligned} \omega(x|x_0, t) &= \\ &= \left[\frac{\pi D \gamma}{\alpha} \left(1 - \exp \left[-\frac{4\alpha}{\gamma} t \right] \right) \right]^{-1/2} \exp \left[-\frac{\alpha \left(x - x_0 \exp \left[-\frac{2\alpha}{D\gamma} t \right] \right)^2}{D\gamma \left(1 - \exp \left[-\frac{4\alpha}{\gamma} t \right] \right)} \right], \end{aligned} \quad (2.11)$$

где γ — коэффициент вязкости среды. Вывести два предельных случая этого распределения:

1. Время t , прошедшее с момента начала движения частицы, очень мало $t \ll \tau_r = \gamma/2\alpha$ (величина τ_r называется временем релаксации системы до состояния равновесия). В этом случае получить свободное броуновское движение

$$\omega(x|x_0, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{4Dt} \right].$$

2. При больших временах $t \gg \tau_r$ получить больцмановское распределение в поле осциллятора $U = \alpha x^2$

$$\omega(x)_{Boltz} = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi D \gamma}} \exp \left[-\frac{\alpha}{D \gamma} x^2 \right].$$

Показать, что распределение (2.11) удовлетворяет уравнению Смолуховского.

Задача 2.2.7. Чему равен предел

$$\lim_{t \rightarrow 0} \omega(\vec{y} | \vec{x}, t)$$

для рассмотренного в задаче 2.2.1 гауссовского распределения? В чем его физический смысл?

2.3. Гауссовский стационарный марковский процесс

Как было выяснено в п. 2.1, марковский случайный процесс может быть описан с помощью лишь двух объектов: плотности вероятности

перехода и функции распределения случайной величины в начальный момент времени. Однако не существует процедуры вычисления этой начальной функции распределения, этот вопрос является одним из центральных в теории случайных процессов. В отличие от статистической механики равновесных систем, в физической кинетике нет какого-то общего выражения для функции распределения (в равновесной статистической механике таким распределением является распределение Гиббса). Наиболее физичным в этом случае оказывается *гауссовское* распределение, которое чаще всего и выбирают в качестве основного при решении задач физической кинетики. В данном параграфе мы рассмотрим, как можно находить важные характеристики случайного процесса – двухточечные корреляционные функции, основываясь лишь на определении гауссовского стационарного марковского процесса.

Зададим плотность вероятности гауссовского стационарного процесса в общем виде:

$$W_n(y_n, t_n | \dots | y_2, t_2 | y_1, t_1) = C_n \exp \left[-\frac{1}{2} (y^T \Lambda^{(n)} y) \right], \quad (2.12)$$

где $y^T = (y_1, \dots, y_n)$ – n -мерный вектор, $\Lambda^{(n)}$ – $(n \times n)$ -матрица, которая строится для различных n следующим образом:

$$\Lambda^{(1)} = \Lambda_{11}, \quad \Lambda^{(2)} = \begin{pmatrix} \Lambda_{11} & \Lambda_{12} \\ \Lambda_{21} & \Lambda_{22} \end{pmatrix}, \quad \Lambda^{(3)} = \begin{pmatrix} \Lambda_{11} & \Lambda_{12} & \Lambda_{13} \\ \Lambda_{21} & \Lambda_{22} & \Lambda_{23} \\ \Lambda_{31} & \Lambda_{32} & \Lambda_{33} \end{pmatrix} \text{ и т. д.}$$

В общем случае матричные элементы зависят от конкретных элементов времени, к которым они отнесены. Выражение, стоящее в показателе экспоненты (2.12), представляет собой матричный элемент

$$(y^T \Lambda^{(n)} y) = \sum_{j,k=1}^n y_j \Lambda_{jk}^{(n)} y_k,$$

константа C_n обеспечивает выполнение условия нормировки

$$\int W(y) dy_1 dy_2 \dots dy_n = 1. \quad (2.13)$$

Распределение (2.12) обладает одним замечательным свойством, позволяющим найти явную зависимость двухточечной корреляционной функции от времени (определение n -точечных корреляционных функций бы-

ло введено в (2.3)). Требование стационарности процесса и его принадлежности к классу марковских процессов сильно ограничивает произвол в выборе матрицы $\Lambda^{(n)}$. В частности, нетрудно получить соотношение

$$\sum_{j=1}^n F_{ij}^{(n)} \Lambda_{jk}^{(n)} = \delta_{ik}^{(n)}, \quad (2.14)$$

или в матричной форме просто

$$F^{(n)} \cdot \Lambda^{(n)} = I^{(n)}, \quad (2.15)$$

где $I^{(n)}$ — единичная $(n \times n)$ -матрица, а элементы матрицы $F^{(n)}$ есть корреляционные функции

$$F_{ij}^{(n)} = \langle y_i y_j \rangle = \int y_i y_j W(y) dy_1 dy_2 \cdots dy_n. \quad (2.16)$$

Корректность выражения (2.14) легко проверяется в случае, когда матрица $\Lambda^{(n)}$ диагональна, т. е. $\Lambda_{jk} = \lambda_k \delta_{jk}$. В этом случае в показателе экспоненты плотности вероятности (2.12) стоит комбинация

$$-\frac{1}{2} \sum_{k=1}^n \lambda_k y_k^2 = -\frac{1}{2} (\lambda_1 y_1^2 + \lambda_2 y_2^2 + \dots + \lambda_n y_n^2),$$

которая позволяет разбить данную экспоненту на произведение соответствующих экспонент. Тогда в интересующем нас выражении (2.14)

$$\begin{aligned} \left(F^{(n)} \cdot \Lambda^{(n)} \right)_{ik} &= \sum_{j=1}^n F_{ij} \lambda_k \delta_{jk} = \\ &= C_n \lambda_k \int y_i y_k \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{k=1}^n \lambda_k y_k^2 \right] dy_1 dy_2 \cdots dy_n \end{aligned} \quad (2.17)$$

интеграл равен нулю при всех $i \neq k$. В случае же, когда $i = k$, интегралы по всем $dy_1, dy_2 \dots dy_n$, кроме dy_k , являются обычными гауссовскими интегралами, а оставшийся интеграл по dy_k также является хорошо известным читателю:

$$\int_{-\infty}^{\infty} y_k^2 \exp \left[-\frac{1}{2} \lambda_k y_k^2 \right] dy_k = \frac{\sqrt{2\pi}}{\lambda_k^{3/2}}.$$

С учетом нормировочной константы C_n , которая легко вычисляется из выражения (2.13)

$$C_n = \frac{\sqrt{\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n}}{(\sqrt{2\pi})^n} = \sqrt{\frac{\det \Lambda^{(n)}}{(2\pi)^n}},$$

получаем в правой части выражения (2.17) единицу при $i = k$ и ноль при всех $i \neq k$, т. е. в точности доказываемое выражение (2.14).

В случае же, когда матрица $\Lambda^{(n)}$ не диагональна, нужно провести соответствующее линейное преобразование, которое диагонализует данную матрицу:

$$y = Az, \quad y^T = z^T A^T, \quad y^T \Lambda^{(n)} y = z^T A^T \Lambda^{(n)} A z = z^T \tilde{\Lambda}^{(n)} z,$$

где новая матрица $\tilde{\Lambda}^{(n)} = A^T \Lambda^{(n)} A$ – диагональна. Далее доказательство выражения (2.14) проводится аналогично.

Итак, мы получили важное соотношение для двухточечных корреляционных функций (2.14). Найдем теперь из него явную зависимость этих корреляционных функций от времени. Для этого рассмотрим два случая, для $n = 3$ и $n = 2$. Потребуем, чтобы процесс был марковским, т. е. должно выполняться условие

$$W_3(y_3, t_3 | y_2, t_2 | y_1, t_1) = \omega(y_3, t_3 | y_2, t_2) W_2(y_2, t_2 | y_1, t_1). \quad (2.18)$$

Отсюда следует, что отношение W_3/W_2 не зависит от y_1 . С учетом (2.12) это отношение равно

$$\frac{W_3}{W_2} = \frac{C_3}{C_2} \exp \left\{ \frac{1}{2} \left[-y_j \Lambda_{jk}^{(3)} y_k + y_j \Lambda_{jk}^{(2)} y_k \right] \right\}. \quad (2.19)$$

Если в показателе экспоненты здесь сократить одинаковые слагаемые, останется комбинация

$$-\frac{1}{2} [y_1 \Lambda_{13} y_3 + y_2 \Lambda_{23} y_3 + y_3 \Lambda_{31} y_1 + y_3 \Lambda_{33} y_3].$$

Отсюда видно, что для того, чтобы правая часть (2.19) не зависела от y_1 , необходимо выполнение условий $\Lambda_{13} = 0$ и $\Lambda_{31} = 0$. Распишем равенство (2.14) для случая $n = 3$ и $k = 1$:

$$\begin{aligned} F_{11} \Lambda_{11} + F_{12} \Lambda_{21} + F_{13} \Lambda_{31} &= 1, \\ F_{21} \Lambda_{11} + F_{22} \Lambda_{21} + F_{23} \Lambda_{31} &= 0, \\ F_{31} \Lambda_{11} + F_{32} \Lambda_{21} + F_{33} \Lambda_{31} &= 0, \end{aligned} \quad (2.20)$$

или, с учетом того, что равенство $\Lambda_{31} = 0$ нам уже известно:

$$\begin{aligned} F_{11} \Lambda_{11} + F_{12} \Lambda_{21} &= 1, \\ F_{21} \Lambda_{11} + F_{22} \Lambda_{21} &= 0, \\ F_{31} \Lambda_{11} + F_{32} \Lambda_{21} &= 0. \end{aligned} \quad (2.21)$$

В данной системе уравнений на Λ_{11} и Λ_{21} нетривиальное решение возможно в случае совпадения двух последних уравнений, т. е. возникает условие, которому должны удовлетворять корреляционные функции:

$$F_{21}F_{32} - F_{22}F_{31} = 0. \quad (2.22)$$

Если рассматриваемый процесс является стационарным, то корреляционные функции зависят только от разности времен, поэтому

$$F_{jk} = F(t_j - t_k). \quad (2.23)$$

Совместно последние два соотношения приводят к функциональному уравнению

$$F(0)F(t_3 - t_1) = F(t_3 - t_2)F(t_2 - t_1), \quad t_3 > t_2 > t_1. \quad (2.24)$$

Его решение есть (см. задачу 2.3.1)

$$F(t) = F(0) \exp(-\gamma t). \quad (2.25)$$

Окончательный результат для корреляционной функции

$$\langle y(t_2)y(t_1) \rangle = F(0) \exp(-\gamma|t_2 - t_1|), \quad t_2 > t_1. \quad (2.26)$$

Таким образом, мы получили зависимость двухточечных корреляционных функций от времени в общем виде, без конкретизации случайной величины, для которой вычислялась данная корреляционная функция, и без задания плотности вероятности марковского процесса в явном виде. Этот результат (2.26) известен как теорема Дуба (G. Doob, 1944), а изложенный здесь метод доказательства принадлежит М. Кацу. Данный результат является универсальным и окажется полезным при дальнейшем исследовании стохастических процессов, при решении уравнения Ланжевена для броуновских частиц и исследовании функции распределения звезд в рамках модели Хольцмарка.

Задача 2.3.1. Считая функцию $F(t)$ гладкой, решить функциональное уравнение (2.24), продифференцировав его по t_2 и подставив $t_1 = t_2$. Начертить график зависимости двухточечной корреляционной функции $F(\Delta t)$ от времени при $\Delta t > 0$ и $\Delta t < 0$.

2.4. Уравнение Фоккера – Планка

Уравнение Смолуховского основано на довольно общих свойствах марковских процессов, что не позволяет использовать его в качестве конструктивного метода нахождения вероятностей перехода. С математической точки зрения уравнение (2.9) является нелинейным интегральным уравнением, которое имеет массу решений как физических, так и нефизического характера. Для реального описания стохастических процессов необходима дальнейшая детализация. Покажем, что при некоторых допущениях можно вывести дифференциальное уравнение в частных производных для вероятности перехода ω , решение которого уже вполне физично. С этой целью рассмотрим стационарные марковские процессы и сразу сделаем следующие предположения относительно поведения некоторых функций:

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int (y - z) \omega(y|z, \Delta t) dy &= A(z), \\ \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int (y - z)^2 \omega(y|z, \Delta t) dy &= B(z), \\ \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int (y - z)^n \omega(y|z, \Delta t) dy &= 0, \text{ при всех } n \geq 3. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Такие средние от степеней $(y - z)$ называются *моментами* перехода. Относительно первого и второго момента $A(z)$ и $B(z)$ предполагается, что они конечны и заданы как феноменологические параметры модели. Определяющим для сужения класса процессов является последнее требование, благодаря которому возникающее дифференциальное уравнение на плотность вероятности перехода имеет порядок не выше, чем 2. Такое требование является физически обоснованным, так как все моменты порядка 3 и выше в пределе $\Delta t \rightarrow 0$ пропорциональны по крайней мере $(\Delta t)^2$.

Для получения уравнения напишем очевидное равенство для произвольной, достаточно регулярной функции $R(y)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int dy R(y) \omega(y|x, t) &= \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int dy R(y) [\omega(y|x, t + \Delta t) - \omega(y|x, t)]. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Положим, что функция $R(y)$ аналитична и исчезает на границах изменения одномерной случайной величины Y . Эта функция будет играть

вспомогательную роль при вычислении поверхностных интегралов. Рассмотрим отдельно первое слагаемое в правой части (2.28). Оно преобразуется с учетом уравнения Смолуховского:

$$\int dy R(y) \omega(y|x, t + \Delta t) = \int dy R(y) \int dz \omega(y|z, \Delta t) \omega(z|x, t). \quad (2.29)$$

Изменим здесь порядок интегрирования и разложим $R(y)$ в ряд Тейлора в точке z :

$$\begin{aligned} & \int dy R(y) \omega(y|x, t + \Delta t) = \\ & = \int dz \int dy \omega(y|z, \Delta t) \omega(z|x, t) \times \\ & \times \left[R(z) + \frac{\partial R}{\partial z} (y - z) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 R}{\partial z^2} (y - z)^2 + \dots \right]. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Далее нужно раскрыть скобки, учесть условие нормировки (2.7) и вернуться к уравнению (2.28). Получим, что первый и последний член в правой части сокращаются. Полученное уравнение

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int dy R(y) \omega(y|x, t) = \\ & = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int dz \frac{\partial R}{\partial z} \omega(z|x, t) \int dy (y - z) \omega(y|z, \Delta t) + \\ & + \frac{1}{2} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int dz \frac{\partial^2 R}{\partial z^2} \omega(z|x, t) \int dy (y - z)^2 \omega(y|z, \Delta t) + \dots \end{aligned} \quad (2.31)$$

можно переписать с учетом введенных в (2.27) моментов $A(z)$ и $B(z)$:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int dy R(y) \omega(y|x, t) = \\ & = \int dz \frac{\partial R(z)}{\partial z} A(z) \omega(z|x, t) + \frac{1}{2} \int dz \frac{\partial^2 R(z)}{\partial z^2} B(z) \omega(z|x, t). \end{aligned} \quad (2.32)$$

Интегрируем по частям первое слагаемое в правой части один раз, а второе дважды, учитывая при этом, что $R(z)$ — убывающая функция при граничных значениях переменной z . Получим

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int dy R(y) \omega(y|x, t) = \\ & = - \int dz R(z) \frac{\partial}{\partial z} [A(z) \omega(z|x, t)] + \frac{1}{2} \int dz R(z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} [B(z) \omega(z|x, t)]. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Изменим обозначение переменной интегрирования в правой части $z \rightarrow y$ и учтем, что данное уравнение должно выполняться для произвольной функции $R(y)$, тогда получим дифференциальное уравнение Фоккера – Планка

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega(y|x, t) = -\frac{\partial}{\partial y} [A(y) \omega(y|x, t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} [B(y) \omega(y|x, t)], \quad (2.34)$$

где неоднородные коэффициенты $A(y)$ и $B(y)$ определены в (2.27). Данное уравнение играет ведущую роль в статистической физике и с математической точки зрения является линейным дифференциальным уравнением параболического типа. Решения этого уравнения должны удовлетворять условиям:

$$\int \omega(y|x, t) dy = 1, \quad \lim_{t \rightarrow 0} \omega(y|x, t) = \delta(y - x). \quad (2.35)$$

В отличие от исходного нелинейного уравнения Смолуховского, полученное уравнение является, на первый взгляд, линейным уравнением с неоднородными феноменологическими коэффициентами. Однако «отклик» нелинейности заключен в необходимости согласования полученного решения $\omega(y|x, t)$ с условиями (2.27), так как само уравнение (2.34) не гарантирует их автоматического выполнения. Коэффициенты $A(z)$ и $B(z)$ по смыслу их определения в (2.27) характеризуют флуктуацию случайной величины $Y(t)$ относительно ее значения в детерминированном состоянии. Вычисление этих флуктуаций требует привлечения соответствующих динамических принципов или уравнений. Например, при описании броуновского движения такую роль выполняет уравнение Ланжевена (см. ниже).

Отметим аналогию между этим уравнением и уравнением диффузии в макроскопической физике (полученное читателем в задаче 1.4.2 главы 1):

$$\frac{\partial \omega(y|x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \omega(y|x, t)}{\partial y^2}. \quad (2.36)$$

Уравнение диффузии описывает монотонную необратимую эволюцию любого начального распределения плотности вещества к равновесному состоянию. Дополнительный член первого порядка в уравнении Фоккера – Планка описывает систематическое торможение, называемое динамическим трением среды. Таким образом, уравнение Фоккера – Планка

описывает суперпозицию процессов диффузии и трения в пространстве переменной y .

В заключение отметим, что обобщение полученного уравнения на случай большей размерности не представляет трудности. Если случайная величина $Y(t)$ представляет собой d -мерный вектор с компонентами $Y_i(t)$, $i = 1, 2, \dots, d$, то приведенные выше одномерные интегралы нужно заменить на d -мерные, а скалярные коэффициенты $A(z)$ и $B(z)$ на вектор $A_i(z)$ и тензор $B_{ij}(z)$ в соответствии с модифицированным условием (2.27):

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int dy_1 \cdots dy_d (y_i - z_i) \omega(y|z, \Delta t) &= A_i(z), \\ \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int dy_1 \cdots dy_d (y_i - z_i) (y_j - z_j) \omega(y|z, \Delta t) &= B_{ij}(z). \end{aligned} \quad (2.37)$$

Задача 2.4.1. При каких условиях плотность вероятности перехода

$$\omega(\vec{y} | \vec{x}, t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} \exp \left[-\frac{(\vec{y} - \vec{x})^2}{4Dt} \right]$$

удовлетворяет уравнению Фоккера – Планка? Обратит внимание на трехмерность пространственных векторов.

Задача 2.4.2. Пусть положение частицы описывается одномерным свободным уравнением Фоккера – Планка

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega(y|x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial y^2} \omega(y|x, t),$$

причем в момент времени $t = 0$ частица находилась в точке $x = 0$. Получить отсюда результат Эйнштейна для среднеквадратичного отклонения (не решая само уравнение)

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle = \langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = 2Dt.$$

Указание. Ввести функцию $\langle x^2(t) \rangle = f(t)$. Тогда по определению среднего значения

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \omega(x, t) dx.$$

Далее составить и решить дифференциальное уравнение на $f(t)$, продифференцировав левую и правую части последнего равенства по t , учитывая уравнение Фоккера – Планка и начальные условия.

Задача 2.4.3. Найти решение одномерного уравнения Фоккера – Планка в поле силы тяжести $U(x) = mgx$, если в начальный момент времени $t = 0$ частица находилась в точке $x = x_0$. Изобразить на графике поведение найденной плотности вероятности $\omega(x, t)$ в зависимости от координаты для различных моментов времени.

Указание. Использовать следующую форму записи уравнения Фоккера – Планка во внешнем поле

$$\frac{\partial \omega(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \omega(x, t)}{\partial x^2} + \frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \left(\omega(x, t) \frac{\partial U}{\partial x} \right),$$

где γ — характеристика вязкости среды. Ввести новую переменную, содержащую зависимость сразу от времени и координаты:

$$z(x, t) = x - x_0 + \frac{mg}{\gamma} t,$$

решить уравнение относительно нее.

2.5. Броуновское движение

Броуновским движением называют непрекращающееся хаотическое движение маленьких, но макроскопических (коллоидных) частиц, погруженных в среду, состоящую из достаточно легких молекул. Это движение не связано с какими-либо внешними воздействиями, а его оживленность повышается с ростом температуры и с уменьшением размера частиц и вязкости жидкости.

Броуновское движение и родственные ему явления интересны не только сами по себе. Они имеют большое значение в химии, радиофизике, теории фазовых переходов и даже в некоторых задачах звездной динамики. Основы современной теории броуновского движения были заложены в работах Эйнштейна, Смолуховского и Ланжевена.

Особенность броуновского движения заключается в том, что движение коллоидной частицы можно описать в рамках уравнения Ньютона, при этом сила, действующая на коллоидную частицу, состоит из двух частей — регулярная сила $\vec{F}_S(t)$ и случайная сила $\vec{F}_L(t)$. Наблюдения за

броуновской частицей показывают, что на интервале времени, когда ее скорость $\vec{V}(t)$ изменяется очень мало, случайная сила $\vec{F}_S(t)$ испытывает большое количество флуктуаций. В нормальных условиях броуновские частицы в жидкости испытывают за одну секунду около 10^{21} столкновений. Этим определяется, что флуктуационное изменение случайной силы $\vec{F}_S(t)$ на много порядков больше, чем изменение за это же время скорости частицы $\vec{V}(t)$. В соответствии с этим описание движения броуновской частицы мы разделим на два этапа.

Первый этап — описание динамики броуновской частицы в малой окрестности точки детерминированности $t = 0$ (момент погружения коллоидной частицы в жидкость). При этом, несмотря на то что сила Ланжевена $\vec{F}_S(t)$ представляет собой случайный процесс, мы не будем фиксировать функцию распределения этой силы, а будем считать ее некой заданной величиной. Это задание может быть сделано при решении уравнения Фоккера – Планка для вероятности перехода значения скорости броуновской частицы от значения \vec{U} к значению \vec{V} (аналогично можно рассматривать случай координат). Решение уравнения Ньютона, в котором сила имеет случайную составляющую, мы будем искать в окрестности точки $t = 0$ при заданной функции распределения. Ее задание в случае броуновского движения связано с определенной гипотезой Эйнштейна, а в случае расчета распределения по массам и плотностям в звездной динамике ее задание будет опираться на гипотезу Хольцмарка.

Второй этап описания движения броуновской частицы будет заключаться в решении уравнения Фоккера – Планка.

Уравнение Ланжевена

Начнем описание динамики броуновской частицы в малой окрестности точки детерминированности $t = 0$. Будем пренебрегать столкновениями броуновских частиц друг с другом, т. е. взвесь будем предполагать достаточно разреженной. Это предположение позволяет свести задачу к анализу одночастичного уравнения движения. Согласно Ланжевону, суммарную силу $\vec{F}(t)$, действующую на частицу со стороны среды,

можно разделить на две части:

$$\begin{aligned}\vec{F}(t) &= \vec{F}_S(t) + \vec{F}_L(t), \\ \langle \vec{F}_L(t) \rangle &= 0, \quad \vec{F}_S(t) = \langle \vec{F}(t) \rangle, \\ \vec{F}_L(t) &= \vec{F}(t) - \langle \vec{F}(t) \rangle.\end{aligned}\tag{2.38}$$

Сила $\vec{F}_S(t)$ характеризует действие среды, находящейся в равновесном состоянии. Она соответствует испытываемому частицей динамическому трению, которое при малых числах Рейнольдса описывается законом Стокса. Согласно данному закону, сила трения, действующая на сферическую частицу радиуса R и массы m , дается выражением

$$\begin{aligned}\vec{F}_S(t) &= -\gamma m \vec{V}(t), \\ \gamma &= 6\pi R \eta / m,\end{aligned}\tag{2.39}$$

где γ — коэффициент, характеризующий сопротивление среды, η — коэффициент вязкости окружающей жидкости, $\vec{V}(t)$ — скорость частицы.

Сила $\vec{F}_L(t) = m\vec{L}(t)$ является стохастической величиной и характеризует собственно броуновское движение. Она связана с флуктуациями среды относительно ее равновесного состояния. После выделения множителя массы величина $\vec{L}(t)$ называется ланжевенским источником. Относительно него делаются следующие общие предположения:

- 1) $\vec{L}(t)$ не зависит от скорости \vec{V} ;
- 2) $\vec{L}(t)$ изменяется весьма быстро по сравнению с \vec{V} .

Второе допущение подразумевает, что существует такой интервал времени, в течение которого изменение скорости будет весьма малым, в то время как флуктуационная сила $\vec{L}(t)$ может испытать много флуктуаций. Такое предположение весьма оправданно, если исходить из наблюдений за коллоидными частицами в жидкости, которые были описаны выше.

С учетом всего сказанного можно записать уравнение движения частицы, соответствующее ньютоновской механике, для каждой компоненты скорости:

$$\frac{dV_j(t)}{dt} = -\gamma V_j(t) + L_j(t), \quad j = 1, 2, 3.\tag{2.40}$$

Это уравнение называется уравнением Ланжевена. Если рассматривать его как обыкновенное неоднородное дифференциальное уравнение первого порядка, то формальное его решение находится методом вариации

постоянной и имеет вид

$$V_j(t) = V_j(0)e^{-\gamma t} + \int_0^t d\tau e^{\gamma(\tau-t)} L_j(\tau). \quad (2.41)$$

Если предполагать, что среднее отклонение флуктуационной силы от равновесного состояния нулевое, т. е. $\langle L_j(t) \rangle = 0$, то можно получить выражения для среднего значения скорости и среднего значения ее отклонения от начального значения:

$$\begin{aligned} \langle V_j(t) \rangle &= V_j(0)e^{-\gamma t}, \\ \langle V_j(t) - V_j(0) \rangle &= \langle \Delta V_j(t) \rangle = V_j(0) (e^{-\gamma t} - 1). \end{aligned} \quad (2.42)$$

Можно также найти скорость этого отклонения (первый коэффициент в уравнении Фоккера – Планка):

$$A_j(V_j(0)) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \langle V_j(t) - V_j(0) \rangle = -\gamma V_j(0). \quad (2.43)$$

Для вычисления квадратичной флуктуации скорости частицы требуется знание двухвременной корреляционной функции $\langle L_j(\tau_2) L_k(\tau_1) \rangle$. Следуя Ланжевону, предположим, что

$$\langle L_j(\tau_2) L_k(\tau_1) \rangle = \delta_{jk} \phi(\tau_2 - \tau_1), \quad (2.44)$$

где $\phi(\tau_2 - \tau_1)$ — некоторая неизвестная пока функция. По введенному определению (2.44) функция $\phi(t)$ должна быть четной по t . Разложим ее в интеграл Фурье:

$$\phi(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \Phi(\omega). \quad (2.45)$$

Здесь $\Phi(\omega)$ — спектральная плотность источника Ланжевона. Теперь из (2.41) нетрудно получить выражения для средних через $\phi(t)$ и $\Phi(\omega)$ соответственно:

$$\begin{aligned} \langle V_j(t) V_k(t) \rangle &= V_j(0) V_k(0) e^{-2\gamma t} + \delta_{jk} e^{-2\gamma t} \int_0^t d\tau \int_0^t dT e^{\gamma(\tau+T)} \phi(T - \tau), \\ \langle V_j(t) V_k(t) \rangle &= V_j(0) V_k(0) e^{-2\gamma t} + \\ &+ \delta_{jk} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} [1 - 2e^{-\gamma t} \cos \omega t + e^{-2\gamma t}] \frac{\Phi(\omega) d\omega}{\omega^2 + \gamma^2}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Из последнего соотношения видно, что при временах $t \gg 1/(2\gamma)$ броуновская частица теряет «механическую память» и среднее значение квадрата ее скорости стремится к постоянной величине независимо от начальных условий

$$\langle \vec{V}^2(t) \rangle = \frac{3}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Phi(\omega) d\omega}{\omega^2 + \gamma^2}, \quad \text{при } t \gg \frac{1}{2\gamma}. \quad (2.47)$$

Для дальнейшего описания необходимо задать более детальные свойства ланжевеновского источника, т. е. определить более конкретно функцию $\phi(t)$. В данном случае применима модель Эйнштейна, который предположил, что столкновения молекул с броуновской частицей, значительно разделенные во времени, являются статистически независимыми. Это означает, что функция $\phi(t)$ отлична от нуля лишь в области $|t| < \tau_c$, где τ_c — длительность столкновения. Простейшей моделью такого рода является δ -функция Дирака (мгновенные столкновения):

$$\phi(t) = 2D \delta(t). \quad (2.48)$$

Введенный здесь коэффициент D имеет размерность $[m^2/c^3]$ и отличается от используемого выше коэффициента диффузии размерным множителем γ^2 . При этом параметр D сохраняет физический смысл коэффициента диффузии, однако уже в пространстве скоростей, а не в координатном пространстве.

В рамках модели Эйнштейна из (2.46) получаем

$$\langle V_j(t) V_k(t) \rangle = V_j(0) V_k(0) e^{-2\gamma t} + \delta_{jk} \frac{D}{\gamma} [1 - e^{-2\gamma t}]. \quad (2.49)$$

В этой простой модели хорошо видно, что при малых временах $|t| \ll 1/(2\gamma)$ средний квадрат скорости определяется главным образом начальным значением $\vec{V}^2(0)$. Однако при $|t| \gg 1/(2\gamma)$ начальное значение скорости постепенно забывается, и средний квадрат скорости определяется уже механизмом столкновений, т. е. зависит от параметров среды:

$$\langle \vec{V}^2(t) \rangle \simeq \frac{3D}{\gamma}, \quad \text{при } t \gg \frac{1}{2\gamma}. \quad (2.50)$$

Далее из (2.41) с учетом (2.48) легко получить соотношение для среднеквадратичного отклонения скорости от начального значения

$$\langle \Delta V_j(t) \Delta V_k(t) \rangle = V_j(0) V_k(0) [1 - e^{-\gamma t}]^2 + \delta_{jk} \frac{D}{\gamma} [1 - e^{-2\gamma t}]. \quad (2.51)$$

Отсюда для скорости этих квадратичных флуктуаций имеем

$$B_{jk} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \langle \Delta V_j(t) \Delta V_k(t) \rangle = \delta_{jk} 2D, \quad (2.52)$$

где $\Delta V_j(t) = V_j(t) - V_j(0)$.

Зная величины $A_j(v_j)$ и B_{jk} , можно записать уравнение Фоккера – Планка для плотности вероятности перехода $\omega(\vec{v}|\vec{u}, t)$ стохастической величины $\vec{V}(t)$ – скорости броуновской частицы:

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega(\vec{v}|\vec{u}, t) = \gamma \frac{\partial}{\partial v_j} [v_j \omega(\vec{v}|\vec{u}, t)] + D \frac{\partial}{\partial v_k} \frac{\partial}{\partial v_k} \omega(\vec{v}|\vec{u}, t). \quad (2.53)$$

Вычислим теперь среднеквадратичное отклонение от начального состояния броуновской частицы по координате. Интегрирование (2.41) по времени дает

$$X_j(t) - X_j(0) = V_j(0) \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \int_0^t dT \int_0^T d\tau e^{\gamma(\tau-T)} L_j(\tau), \quad (2.54)$$

где $\vec{X}(t)$ – радиус-вектор броуновской частицы. Во втором слагаемом меняем порядок интегрирования, в результате чего вычисляется интеграл по промежуточной переменной T . Далее, проводя соответствующую замену переменных в оставшемся интеграле, получим

$$X_j(t) - X_j(0) = V_j(0) \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{\gamma} \int_0^t d\tau L_j(t - \tau) (1 - e^{-\gamma \tau}). \quad (2.55)$$

Отсюда после усреднения получаем (как и выше, предполагаем, что $\langle L_j(t) \rangle = 0$)

$$\langle X_j(t) - X_j(0) \rangle = \langle \Delta X_j(t) \rangle = V_j(0) \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}).$$

Для квадратичных флуктуаций в рамках модели Эйнштейна (2.48) нетрудно вывести соотношение

$$\begin{aligned} \langle \Delta X_j(t) \Delta X_k(t) \rangle &= V_j(0) V_k(0) \frac{1}{\gamma^2} [1 - e^{-\gamma t}]^2 + \\ &+ \delta_{jk} \frac{1}{\gamma^2} \int_0^t d\tau \int_0^t dT (1 - e^{-\gamma \tau}) (1 - e^{-\gamma T}) \phi(T - \tau). \end{aligned} \quad (2.56)$$

Далее так же, как и в случае со скоростью, перейдем к модели мгновенных столкновений и при этом вернемся к коэффициенту диффузии D в координатном пространстве:

$$\phi(t) = 2D\gamma^2\delta(t) \quad (2.57)$$

(сравнить с (2.48)). Получим

$$\begin{aligned} \langle \Delta X_j(t) \Delta X_k(t) \rangle = & V_j(0)V_k(0) \frac{1}{\gamma^2} [1 - e^{-\gamma t}]^2 + \\ & + \delta_{jk} 2D \left[t + \frac{2}{\gamma} (e^{-\gamma t} - 1) - \frac{1}{2\gamma} (e^{-2\gamma t} - 1) \right]. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Отсюда легко найти результат Эйнштейна (1908)

$$\langle \Delta \vec{X}^2(t) \rangle = \begin{cases} \vec{V}^2(0) t^2, & \text{если } \gamma t \ll 1, \\ 6Dt, & \text{если } \gamma t \gg 1. \end{cases} \quad (2.59)$$

Общепринятая интерпретация этого утверждения состоит в том, что марковский характер эволюции стохастической величины $\vec{X}(t)$ наступает при времени $\gamma t \gg 1$. Другими словами, непосредственно после погружения в жидкость броуновская частица движется равномерно прямолинейно, а затем на характере ее движения начинает отражаться результат действия флуктуационных сил среды.

В заключение данного пункта можно отметить, что по прошествии достаточно большого времени после помещения броуновской частицы в среду среднеквадратичное значение ее скорости перестает зависеть от времени и стремится к некоторому постоянному числу. В отличие от этого, в координатном пространстве зависимость от времени среднеквадратичного отклонения частицы от начального положения никогда не исчезает, т. е. процесс смещения частицы в случае свободного броуновского движения никогда не становится стационарным.

Задача 2.5.1. Основываясь на материале п. 2.5, получить результат Эйнштейна (2.59).

В следующих двух задачах рассматривается случай, когда броуновская частица может быть нестабильной, т. е. ее размер и масса

уменьшаются в результате столкновения с частицами окружающей среды.

Задача 2.5.2. Среда, окружающая броуновскую частицу, каждую секунду растворяет с единицы ее поверхности α частиц (броуновская частица полагается сферической, плотность числа частиц ее материала n задана). В начальный момент времени частица находилась в точке $X(0) = 0$, ее радиус был R_0 . Определить, как меняется с течением времени величина среднеквадратичного ее отклонения от начального положения $\langle X^2 \rangle$. Считать, что коэффициент диффузии D_0 в момент времени $t = 0$ задан. Изобразить на графике полученную зависимость $\langle X^2(t) \rangle$ и сравнить ее с результатом Эйнштейна $\langle X^2(t) \rangle = 2Dt$.

Указание. Уравнение Фоккера – Планка в случае отсутствия потенциальных сил записывается в виде

$$\frac{\partial \omega(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \omega(x, t)}{\partial x^2},$$

причем коэффициент диффузии в данном случае зависит от времени по неизвестному закону $D = D(t)$. Необходимо найти этот закон изменения через определение коэффициента диффузии

$$D(t) = \frac{kT}{m\gamma(t)},$$

где k — постоянная Больцмана, T — температура среды, а коэффициент γ был введен в (2.39):

$$\gamma(t) = \frac{6\pi R(t)\eta}{m}.$$

Зависимость радиуса броуновской частицы от времени можно найти следующим образом. С одной стороны, число частиц, составляющих броуновскую частицу, равно

$$N(t) = \frac{4}{3}\pi n R^3(t),$$

n — плотность вещества броуновской частицы. Отсюда изменение числа частиц со временем

$$\frac{dN}{dt} = 4\pi n R^2(t) \frac{dR}{dt}.$$

С другой стороны, по условию задачи среда каждую секунду растворяет с единицы поверхности α частиц, т.е.

$$\frac{dN}{dt} = -4\pi \alpha R^2(t).$$

Из этих соотношений нужно найти зависимость радиуса и коэффициента диффузии от времени. После этого необходимо решить уравнение Фоккера – Планка, при этом удобно сделать замену переменных

$$t = \beta \left(1 - e^{-\tau/\beta} \right), \quad \text{где } \beta = \frac{nR_0}{\alpha}.$$

Задача 2.5.3. Частицы, нестабильные в силу своих внутренних причин, распадаются по закону

$$\left(\frac{\partial \omega}{\partial t} \right)_{\text{распада}} = -\frac{\omega}{\tau},$$

где τ — характерное время их жизни. Определить зависимость от времени величины $\langle X^2 \rangle$, если в момент времени $t = 0$ они находились в окрестности начала координат. Изобразить на графике полученную зависимость $\langle X^2(t) \rangle$ и сравнить ее с результатом Эйнштейна $\langle X^2(t) \rangle = 2Dt$.

Указание. В данном случае уравнение Фоккера – Планка выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial \omega(x, t)}{\partial t} - \left(\frac{\partial \omega}{\partial t} \right)_{\text{распада}} = D \frac{\partial^2 \omega(x, t)}{\partial x^2}.$$

Для его решения целесообразно сделать замену

$$\omega(x, t) = e^{-t/\tau} \varphi(x, t).$$

Обратить внимание на условие нормировки.

Задача 2.5.4. Броуновская частица имеет размер $R \sim 10^{-4}$ см и находится в равновесии со средой типа газа при комнатной температуре $T = 300$ К. Оценить среднее время τ' между отдельными соударениями частиц среды с броуновской частицей и среднюю длительность одного соударения τ . Сравнить эти времена между собой и со временем установления для броуновской частицы максвелловского распределения по скоростям $\tau_M \sim 10^{-10}$ с.

Указание. Интервал между отдельными соударениями можно оценить как

$$\tau' = \frac{1}{S \alpha},$$

S — площадь поперечного сечения броуновской частицы, α — количество частиц среды, падающих на единицу поверхности в единицу вре-

мени, которое для равновесного классического газа дается выражением

$$\alpha = \int_0^{\infty} n v_x \sqrt{\frac{m}{2\pi k T}} \exp\left[-\frac{m v_x^2}{2k T}\right] = \frac{n \langle v \rangle}{4}.$$

Здесь $n = N/V$ — плотность числа частиц среды, которую можно оценить из определения числа Авогадро $N_A = 6 \cdot 10^{23}$; m — масса молекулы среды, которую легко оценить, например, если среда является воздухом; $\langle v \rangle$ — средний модуль скорости максвелловского газа, находится при взятии данного интеграла. Постоянная Больцмана $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К.

Время отдельного соударения можно оценить как время, за которое частица среды проходит расстояние в свой диаметр со средней скоростью:

$$\tau \sim \frac{2r_0}{\langle v \rangle},$$

диаметр молекулы газа $2r_0 \sim 5 \cdot 10^{-8}$ см.

Задача 2.5.5. На основе материала данного пункта найти автокорреляционную функцию «импульс – импульс» $f(\Delta t) = \langle \Delta p(t) \Delta p(t + \Delta t) \rangle$ в одномерном случае, где под Δp подразумевается отклонение импульса частицы от среднего значения $\Delta p = p - \langle p \rangle$. Проанализировать полученный результат, начертить график этой зависимости как функции Δt (сравнить с результатами задачи 2.3.1).

Указание. Одномерное уравнение Ланжевена в терминах импульса отличается от (2.40) только множителем массы:

$$\frac{dp(t)}{dt} = -\gamma p(t) + F_L(t).$$

Среднее значение импульса $\langle p \rangle$ находится аналогично первому равенству в (2.42). Затем легко найти отклонение от среднего значения Δp и комбинацию $\Delta p(t) \Delta p(t + \Delta t)$. При ее усреднении использовать модель Эйнштейна (2.48) и (2.57). Отдельно проанализировать случаи $\Delta t > 0$ и $\Delta t < 0$. Посмотреть, при каких временах t начинает проявляться зависимость автокорреляционной функции от интервала Δt .

2.6. Статистика гравитационного поля, созданного случайным распределением звезд

Проблема, описываемая в этом параграфе, очень тесно связана с проблемами, рассмотренными при описании броуновского движения. Одна из основных задач звездной динамики состоит в анализе природы силы, действующей на звезду, принадлежащую к некоторой звездной системе. Общие соображения показывают, что нужно проводить резкое различие между влиянием всей системы в целом и локальным влиянием непосредственной окрестности звезды: первое является плавно меняющейся функцией пространства и времени, в то время как второе подвержено относительно быстрым флуктуациям. Таким образом, силы, действующие на наблюдаемую звезду, являются разными в разный интервал времени. За малый промежуток времени флуктуационные силы очень сильно меняются, а изменение скорости самой звезды происходит относительно медленно. В целях выяснения природы и источника флуктуаций случайной силы окружим рассматриваемую звезду элементарным объемом, который будем считать достаточно малым, чтобы в среднем он содержал относительно немного звезд. Действительное число звезд, которое будет обнаружено в этом элементарном объеме в любой данный момент, не совпадает со средним ожидаемым числом, оно подвержено флуктуациям. Влияние ближайшего окружения на рассматриваемую звезду изменяется во времени именно вследствие изменения состава локального звездного распределения. Средний период такой флуктуации можно оценить напрямую: его порядок равен порядку времени, необходимому для расхождения двух звезд на расстояние, которое для данной звездной системы является средним. Следует ожидать, что этот период по порядку величины приблизительно равен

$$T \cong \frac{L}{\sqrt{\langle |\vec{V}|^2 \rangle}}, \quad (2.60)$$

где L — среднее расстояние между звездами в данной окрестности, $\langle |\vec{V}|^2 \rangle$ — средний квадрат относительной скорости двух звезд.

В окрестности Солнца $L \sim 3$ парсека, $\sqrt{\langle |\vec{V}|^2 \rangle} \sim 50$ км/с, так что период флуктуации T (вблизи Солнца) $\approx 6 \cdot 10^4$ лет. Если мы сравним

это время с периодом галактического вращения (около $2 \cdot 10^8$ лет), то в полном согласии с нашими предыдущими замечаниями обнаружим, что флуктуации силы, действующей на звезду со стороны изменчивого состава локального распределения звезд, действительно оказываются весьма *быстрыми* по сравнению со скоростью изменения всех других физических параметров.

Таким образом, в случае звездной динамики, как и в предыдущем пункте, есть две физики: в окрестности некоторого начального момента времени (момент помещения рассматриваемой звезды или коллоидной частицы в среду, точка детерминированности) и на больших интервалах времени. В окрестности точки детерминированности характер движения звезды определяется быстро флуктуирующей стохастической силой при малом изменении скорости самой звезды. На большом промежутке времени движение звезды стабилизируется и описывается уравнением Фоккера – Планка.

Модель Хольцмарка

При изучении поведения броуновской частицы мы не строили конкретную модель стохастической силы, действующей со стороны среды, мы сразу вычислили средние величины отклонения скорости и координаты от начального состояния. В случае звездной динамики мы рассмотрим модель Хольцмарка, в которой он попытался построить модель случайной силы. Это позволит нам записать функцию распределения в явном виде.

Предположим, что рассматриваемая звезда находится в точке O нашей координатной системы (т. е. в начале координат). Опишем вокруг этой точки сферу радиуса R , которая содержит N звезд. Прежде всего предположим, что отнесенная к единице массы сила, действующая со стороны всех этих звезд на нашу рассматриваемую звезду, равна

$$\vec{F} = G \sum_{i=1}^N \frac{M_i}{|r_i|^3} \vec{r}_i, \quad (2.61)$$

где M_i — масса типичной звезды из окружения, а \vec{r}_i — радиус-вектор ее положения относительно рассматриваемой звезды. Вероятность обнаружить то или иное значение M_i и \vec{r}_i описывается априори заданной

функцией распределения $\tau_i(\vec{r}_i, M_i)$. Этой функции распределения подчинена вероятность того, что i -я звезда имеет массу M_i и находится в точке \vec{r}_i . Тогда, используя формулу Маркова из п. 1.3, можно написать, что функция распределения $W_N(\vec{F})$ имеет вид

$$W_N(\vec{F}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} A_N(\vec{\rho}) \exp(-i\vec{\rho} \cdot \vec{F}) d\vec{\rho}, \quad (2.62)$$

где

$$A_N(\vec{\rho}) = \prod_{i=1}^N \int_0^{\infty} dM_i \int_0^R d\vec{r}_i \tau_i(\vec{r}_i, M_i) \exp(i\vec{\rho} \cdot \vec{F}_i). \quad (2.63)$$

Теперь сделаем важное предположение, что имеют место только флуктуации, совместимые с постоянством средней плотности, т. е.

$$\tau_i(\vec{r}_i, M_i) = \frac{4}{3}\pi R^3 \tau(M), \quad (2.64)$$

где $\tau(M)$ определяет собой частоту, с которой встречаются звезды различной массы. Если учесть это соотношение, то (2.63) сводится к

$$A_N(\vec{\rho}) = \left[\frac{3}{4\pi R^3} \int_0^{\infty} dM \int_0^R d\vec{r} \tau(M) \exp(i\vec{\rho} \cdot \vec{\varphi}) \right]^N, \quad (2.65)$$

где введена запись

$$\vec{\varphi} = GM \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|^3}. \quad (2.66)$$

Устремим теперь радиус нашей воображаемой сферы и количество звезд внутри нее к бесконечности: $R \rightarrow \infty$ и одновременно $N \rightarrow \infty$, причем так, что

$$\frac{4}{3}\pi R^3 n = N, \quad n = \text{const}. \quad (2.67)$$

Такой предельный переход допустим в том случае, если подавляющая часть силы \vec{F} , действующей на звезду, образуется за счет ближайшего соседа. Ниже будет показано, что это действительно имеет место. После предельного перехода получим:

$$W(\vec{F}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} A(\vec{\rho}) \exp(-i\vec{\rho} \cdot \vec{F}) d\vec{\rho}, \quad (2.68)$$

где

$$A(\vec{\rho}) = \lim_{R \rightarrow \infty} \left[\frac{3}{4\pi R^3} \int_0^\infty dM \int_0^R d\vec{r} \tau(M) \exp(i\vec{\rho} \cdot \vec{\varphi}) \right]^{4\pi R^3 n/3}. \quad (2.69)$$

Учитывая условие нормировки

$$\frac{3}{4\pi R^3} \int_0^\infty dM \int_0^R d\vec{r} \tau(M) = 1, \quad (2.70)$$

выражение для $A(\vec{\rho})$ можно переписать в форме:

$$A(\vec{\rho}) = \lim_{R \rightarrow \infty} \left[1 - \frac{3}{4\pi R^3} \int_0^\infty dM \int_0^R d\vec{r} \tau(M) [1 - \exp(i\vec{\rho} \cdot \vec{\varphi})] \right]^{4\pi R^3 n/3}. \quad (2.71)$$

Интеграл по \vec{r} здесь остается абсолютно сходящимся и при распространении на все значения $|\vec{r}'|$, т. е. и на $|\vec{r}'| \rightarrow \infty$. Соответственно этому можно написать

$$A(\vec{\rho}) = \lim_{R \rightarrow \infty} \left[1 - \frac{3}{4\pi R^3} C(\vec{\rho}) \right]^{4\pi R^3 n/3}, \quad (2.72)$$

$$C(\vec{\rho}) = \int_0^\infty dM \int_0^\infty d\vec{r} \tau(M) [1 - \exp(i\vec{\rho} \cdot \vec{\varphi})].$$

Выражение для $A(\vec{\rho})$, согласно второму замечательному пределу и введенному обозначению $C(\vec{\rho})$, можно свернуть:

$$A(\vec{\rho}) = e^{-nC(\vec{\rho})}. \quad (2.73)$$

Перейдем во втором выражении (2.72), определяющем $C(\vec{\rho})$, к интегрированию по переменной $\vec{\varphi}$ согласно (2.66). Легко убедиться, что

$$d\vec{r} = -\frac{1}{2}(GM)^{3/2} |\vec{\varphi}|^{-9/2} d\vec{\varphi}.$$

Тогда

$$C(\vec{\rho}) = \frac{1}{2} G^{3/2} \int_0^\infty dM M^{3/2} \tau(M) \int_{-\infty}^\infty d\vec{\varphi} |\vec{\varphi}|^{-9/2} [1 - \exp(i\vec{\rho} \cdot \vec{\varphi})], \quad (2.74)$$

где интеграл по M представляет собой среднее значение: $\int_0^{\infty} dM M^{3/2} \tau(M) = \langle M^{3/2} \rangle$. Кроме того, видно, что оставшееся выражение не чувствительно к замене $\vec{\varphi}$ на $-\vec{\varphi}$. Значит, имеет значение только его четная часть:

$$C(\vec{\rho}) = \frac{1}{2} G^{3/2} \langle M^{3/2} \rangle \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{\varphi} |\vec{\varphi}|^{-9/2} [1 - \cos(\vec{\rho} \cdot \vec{\varphi})]. \quad (2.75)$$

Если выбрать сферические координаты с осью z по направлению $\vec{\rho}$, то (2.75) может быть преобразовано к выражению

$$C(\vec{\rho}) = \frac{1}{2} G^{3/2} \langle M^{3/2} \rangle \int_0^{2\pi} d\omega \int_{-1}^1 dt \int_0^{\infty} d|\vec{\varphi}| |\vec{\varphi}|^{-5/2} [1 - \cos(|\vec{\rho}| \cdot |\vec{\varphi}| \cdot t)]. \quad (2.76)$$

Если ввести затем переменную $z = |\vec{\rho}| \cdot |\vec{\varphi}|$, получим

$$C(\vec{\rho}) = \frac{1}{2} G^{3/2} \langle M^{3/2} \rangle |\vec{\rho}|^{3/2} \int_0^{2\pi} d\omega \int_{-1}^1 dt \int_0^{\infty} dz z^{-5/2} [1 - \cos(zt)]. \quad (2.77)$$

Проведя интегрирование по ω и t , имеем

$$C(\vec{\rho}) = 2\pi G^{3/2} \langle M^{3/2} \rangle |\vec{\rho}|^{3/2} \int_0^{\infty} dz (z - \sin z) z^{-7/2}, \quad (2.78)$$

а интегрируя по частям, получим

$$\begin{aligned} C(\vec{\rho}) &= \frac{16}{15} \pi G^{3/2} \langle M^{3/2} \rangle |\vec{\rho}|^{3/2} \int_0^{\infty} dz z^{-1/2} \cos z = \\ &= \frac{4}{15} (2\pi G)^{3/2} \langle M^{3/2} \rangle |\vec{\rho}|^{3/2} \end{aligned} \quad (2.79)$$

с учетом, что

$$\int_0^{\infty} dz \frac{\cos z}{\sqrt{z}} = \sqrt{\frac{\pi}{2}}.$$

При взятии интеграла (2.78) по частям остальные слагаемые зануляются на пределах интегрирования, если аккуратно учесть их все и осуществить предельный переход (на нижнем пределе).

Комбинируя (2.68), (2.73) и (2.79), найдем

$$W(\vec{F}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-i\vec{\rho} \cdot \vec{F} - a|\vec{\rho}|^{3/2} \right] d\vec{\rho}, \quad (2.80)$$

где введена запись

$$a = \frac{4}{15} n (2\pi G)^{3/2} \langle M^{3/2} \rangle. \quad (2.81)$$

Если направить ось z вдоль вектора \vec{F} и перейти к сферическим координатам, то (2.80) можно привести к виду

$$W(\vec{F}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-1}^1 dt \int_0^{\infty} d\rho \rho^2 \exp \left[-i\rho F - a\rho^{3/2} \right]. \quad (2.82)$$

Здесь модуль вектора $|\vec{\rho}| \equiv \rho$. Интегрирование по t легко выполнимо, в результате чего получим

$$W(\vec{F}) = \frac{1}{2\pi^2 F} \int_0^{\infty} d\rho \rho \sin(\rho F) \exp \left[-a\rho^{3/2} \right]. \quad (2.83)$$

Если теперь положить

$$x = \rho F,$$

ввести нормальное поле Q_H

$$Q_H = a^{2/3} = \left(\frac{4}{15} \right)^{2/3} 2\pi G \left(\langle M^{3/2} \rangle n \right)^{2/3} = 2,6031 G \left(\langle M^{3/2} \rangle n \right)^{2/3}$$

и выделить этот множитель из модуля случайной силы

$$F = \beta Q_H = \beta a^{2/3},$$

то (2.83) примет вид

$$W(\vec{F}) = \frac{H(\beta)}{4\pi a^2 \beta^2}, \quad (2.84)$$

где введена функция $H(\beta)$, определяемая выражением

$$H(\beta) = \frac{2}{\pi \beta} \int_0^{\infty} \exp \left[-(x/\beta)^{3/2} \right] x \sin x dx.$$

Поскольку распределение от модуля силы равно

$$W(F) = 4\pi F^2 W(\vec{F}), \quad (2.85)$$

то из введенных обозначений можно вывести, что

$$W(F) = \frac{H(\beta)}{Q_H}. \quad (2.86)$$

В соответствии с этим $H(\beta)$ определяет собой вероятностное распределение модуля силы F в случае, если оно выражено в единицах Q_H . Функция $H(\beta)$ не вычисляется аналитически, однако легко интегрируется численно, что предлагается проделать читателю.

Получим асимптотическое поведение распределения $W(F)$ из асимптотики функции $H(\beta)$:

$$H(\beta) = \frac{4\beta^2}{3\pi} + O(\beta^4) \quad \text{при } \beta \rightarrow 0. \quad (2.87)$$

Отсюда с учетом (2.84) и (2.85) получим

$$W(F) \simeq \frac{4}{3\pi Q_H^3} F^2 \quad \text{при } F \rightarrow 0. \quad (2.88)$$

Другая асимптотика

$$H(\beta) = \frac{15}{8} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \beta^{-5/2} + O(\beta^{-4}) \quad \text{при } \beta \rightarrow \infty \quad (2.89)$$

или

$$W(F) \simeq \frac{4}{3\pi Q_H^3} F^2, \quad (2.90)$$

$$W(F) \simeq 2\pi G^{3/2} \langle M^{3/2} \rangle n F^{-5/2} \quad \text{при } F \rightarrow \infty.$$

Таким образом, видим, что только для полей средней интенсивности вероятность их обнаружения имеет заметную величину, в то время как для слабых ($F \rightarrow 0$) и сильных ($F \rightarrow \infty$) полей эта вероятность оказывается мала. В частности, максимальная вероятность отвечает полю $\sim 1,6 Q_H$.

Итак, мы нашли функцию распределения случайной силы $W(F)$, действующей на звезду, в явном виде, в отличие от п. 2.5, где мы не находили функцию распределения для ланжевеновского источника, а использовали модельные предположения, что среднее значение $\langle L_j(t) \rangle = 0$, а корреляционная функция $\langle L_j(\tau_2) L_k(\tau_1) \rangle = \delta_{jk} \phi(\tau_2 - \tau_1)$. Здесь же, в рамках модели Хольцмарка, мы можем теперь напрямую вычислить среднее значение случайной силы $\langle F_j(t) \rangle$, а также любые необходимые моменты более высоких порядков. Таким образом, в случае звездной динамики

мы сможем получить функцию распределения по скорости или координате звезды в явном виде, а не только средние и среднеквадратичные их отклонения от точки детерминированности, как в п. 2.5. Чтобы это осуществить, нужно найти коэффициенты уравнения Фоккера – Планка A и B (средняя и среднеквадратичная флуктуация случайной величины, например скорости или координаты звезды), составить и решить это уравнение и получить искомую функцию распределения по данной случайной величине. Данная задача выходит из рамок настоящего пособия, так как по физической сути повторяет п. 2.5. Принципиальным здесь было получить именно функцию распределения случайной силы для демонстрации еще одного подхода к изучению теории броуновского движения.

Задача 2.6.1. Получить точные и асимптотические значения функции распределения $W(F)$ (2.86), (2.88) и (2.90).

Указание. При взятии возникающих интегралов учесть, что

$$\int_0^{\infty} \frac{1}{\sqrt{x}} \cos x \, dx = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \quad \text{и} \quad \int_0^{\infty} \frac{1}{\sqrt{x}} \sin x \, dx = \sqrt{\frac{\pi}{2}}$$

(и доказать это).

2.7. Уравнение Больцмана

Рассмотрим еще одно важное кинетическое уравнение, позволяющее вычислять одночастичную функцию распределения. Пусть изучаемая система представляет собой достаточно разреженный газ классических частиц равной массы, на который не действуют внешние поля. Межмолекулярные силы обладают малым радиусом действия R_0 , и газ столь разрежен, что длина свободного пробега частиц l значительно превышает этот радиус: $l \gg R_0$. Тогда большую часть времени частицы движутся по своим свободным прямолинейным траекториям, взаимодействуя только при сближении на достаточное для этого расстояние. Пусть

$$dN = F(\vec{x}, \vec{v}, t) \, d\vec{x} \, d\vec{v}$$

— есть число частиц в элементе фазового объема $d\vec{x} d\vec{v}$ в окрестности точки (\vec{x}, \vec{v}) . Величина $F(\vec{x}, \vec{v}, t)$ называется одночастичной функцией распределения. Она является важной, хотя и неполной, характеристикой эволюции системы. Полное описание требует введения n -частичной функции распределения и приводит к бесконечной системе уравнений — цепочке ББГКИ (Боголюбова, Борна, Грина, Кирквуда, Ивона). В данном учебном пособии мы будем работать с одночастичной функцией распределения. Предположим, что ее зависимость от переменных факторизуется, т. е.

$$F(\vec{x}, \vec{v}, t) = n(\vec{x}) f(\vec{v}, t). \quad (2.91)$$

Кроме того, будем считать, что характерный масштаб изменений функции $n(\vec{x})$ много больше l , так что $n(\vec{x}) \simeq \text{const} = n$. Тогда, если принять, что V — объем системы, N — полное число частиц, то плотность числа частиц $n = N/V$, а условие нормировки для одночастичной функции распределения будет иметь вид

$$\int f(\vec{v}, t) d\vec{v} = 1. \quad (2.92)$$

В рамках перечисленных выше допущений можно получить замкнутое уравнение для одночастичной функции распределения $f(\vec{v}, t)$ — кинетическое уравнение Больцмана. Рассмотрим его вывод.

Согласно теореме Лиувилля функция распределения не меняется вдоль фазовой траектории, если в системе отсутствуют столкновения. При наличии же столкновений гидродинамическая производная отлична от нуля и определяется интегралом столкновений $I(\vec{v}, t)$:

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \right\} [n f(\vec{v}, t)] = I(\vec{v}, t). \quad (2.93)$$

Величина

$$I(\vec{v}, t) d\vec{x} d\vec{v} \Delta t$$

есть изменение за время Δt числа частиц в объеме $d\vec{x}$, имеющих скорости в окрестности $d\vec{v}$ вектора \vec{v} . Это изменение числа частиц можно представить в виде

$$I(\vec{v}, t) d\vec{x} d\vec{v} \Delta t = \Delta N^{(+)} - \Delta N^{(-)},$$

где $\Delta N^{(+)}$ — число столкновений в объеме $d\vec{x}$ за время Δt , в результате каждого из которых произошло рождение частицы со скоростью \vec{v} .

$\Delta N^{(-)}$ — число столкновений в объеме $d\vec{x}$ тех частиц, которые до взаимодействия имели скорость \vec{v} , а в результате столкновения приобрели какую-то другую скорость. Таким образом, $\Delta N^{(+)}$ — это «прибыль» частиц в фазовом объеме $d\vec{x} d\vec{v}$, а $\Delta N^{(-)}$ — «убыль» частиц из данного фазового объема.

Прибыль и убыль таких частиц можно найти из законов классической механики. Рассмотрим столкновение двух частиц со скоростями \vec{v} и \vec{v}_1 , которые после взаимодействия стали обладать скоростями \vec{v}' и \vec{v}'_1 соответственно. Из законов сохранения импульса и энергии

$$\begin{aligned}\vec{v} + \vec{v}_1 &= \vec{v}' + \vec{v}'_1, \\ v^2 + v_1^2 &= (v')^2 + (v'_1)^2\end{aligned}\tag{2.94}$$

можно вывести вспомогательное соотношение

$$\vec{v} \cdot \vec{v}_1 = \vec{v}' \cdot \vec{v}'_1\tag{2.95}$$

(для этого нужно скалярно домножить первое равенство из (2.94) поочередно на каждый из четырех векторов скорости, сложить попарно получившиеся уравнения и учесть закон сохранения энергии). Далее, если рассмотреть модули относительных скоростей

$$\begin{aligned}|\vec{v}_1 - \vec{v}|^2 &= v_1^2 + v^2 - 2\vec{v}\vec{v}_1, \\ |\vec{v}'_1 - \vec{v}'|^2 &= (v'_1)^2 + (v')^2 - 2\vec{v}'_1\vec{v}',\end{aligned}\tag{2.96}$$

с учетом (2.95) видно, что они одинаковы:

$$|\vec{v}_1 - \vec{v}| = |\vec{v}'_1 - \vec{v}'| \equiv u.\tag{2.97}$$

Таким образом, результат столкновения частиц заключается в изменении направления вектора их относительной скорости без изменения его величины. Запишем неизвестные векторы \vec{v}' и \vec{v}'_1 через введенный модуль относительной скорости u в виде

$$\vec{v}' = \frac{1}{2}(\vec{v} + \vec{v}_1 - u\vec{e}), \quad \vec{v}'_1 = \frac{1}{2}(\vec{v} + \vec{v}_1 + u\vec{e}),\tag{2.98}$$

где введен единичный вектор

$$\vec{e} = \frac{\vec{v}'_1 - \vec{v}'}{u}.$$

Направление этого вектора однозначно задается углом рассеяния в эквивалентной одночастичной механической задаче в системе центра масс.

Искомая убыль частиц из фазового объема $d\vec{x} d\vec{v}$ обусловлена количеством рассеянных частиц на выбранной молекуле, с которой связана система координат. Поместим начало системы отсчета на выбранную частицу, которая в момент времени t находится в точке \vec{x} и имеет скорость \vec{v} . Налетающие частицы будут рассеиваться на ней, только если попадут в сферу радиуса взаимодействия R_0 вокруг нее. Рассмотрим поток падающих за время Δt частиц с относительной начальной скоростью $(\vec{v}_1 - \vec{v})$ и прицельными параметрами от b до $(b + db)$. Все эти частицы содержатся между двумя цилиндрами радиусами b и $b + db$ и высотой $u\Delta t$. Число таких частиц равно

$$f(\vec{v}_1, t) d\vec{v}_1 d\varphi b db u\Delta t.$$

Здесь φ — азимутальный угол, относительно которого задача симметрична. Общее число столкновений, испытываемых центральной частицей за время Δt , получается интегрированием по всем значениям скорости \vec{v}_1 и прицельного параметра b :

$$2\pi \int d\vec{v}_1 db f(\vec{v}_1, t) u b \Delta t.$$

Если теперь умножить этот результат на плотность числа частиц, имеющих скорость \vec{v} , т. е. на $f(\vec{v}, t)d\vec{v}$, то получится общее число столкновений в точке \vec{x} , происходящих за время Δt . Таким образом, полную убыль частиц можно записать в виде

$$\Delta N^{(-)} = 2\pi n^2 \int d\vec{v}_1 db f(\vec{v}, t)f(\vec{v}_1, t) u b d\vec{x} d\vec{v} \Delta t. \quad (2.99)$$

Теперь легко вычислить слагаемое, соответствующее прибыли частиц в фазовый объем $d\vec{x}d\vec{v}$. В силу симметричности решенной механической задачи вероятность двухчастичного процесса $\vec{v}\vec{v}_1 \rightarrow \vec{v}'\vec{v}'_1$ и обратного этому процесса одинаковы, и выражение для $\Delta N^{(+)}$ получается из (2.99) заменой $\vec{v} \leftrightarrow \vec{v}'$, $\vec{v}_1 \leftrightarrow \vec{v}'_1$.

Заметим теперь, что начальные и конечные скорости связаны между собой каноническим преобразованием (2.94), следовательно,

$$d\vec{v} d\vec{v}_1 = d\vec{v}' d\vec{v}'_1.$$

Учитывая найденные прибыль и убыль частиц, а также учитывая, что факторизованная функция распределения $f(\vec{v}, t)$ не зависит в нашем слу-

чае от координаты \vec{x} , запишем уравнение (2.93) в виде

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \right\} f(\vec{v}, t) = n \int (f' f'_1 - f f_1) |\vec{v}_1 - \vec{v}| d\sigma d\vec{v}_1, \quad (2.100)$$

где введены обозначения

$$d\sigma = 2\pi b db, \quad (2.101)$$

$$f' \equiv f(\vec{v}', t), \quad f'_1 \equiv f(\vec{v}'_1, t), \quad f \equiv f(\vec{v}, t), \quad f_1 \equiv f(\vec{v}_1, t). \quad (2.102)$$

Кинетическое уравнение для разреженных газов (2.100) называется уравнением Больцмана и в приведенной форме записи через сечение $d\sigma$ является справедливым и в квантовой механике при описании невырожденных квантовых газов.

Симметричная форма уравнения Больцмана получается при переходе к дифференциальному сечению в соответствии с представлением в виде

$$|\vec{v}_1 - \vec{v}| d\sigma = \int \omega(\vec{v}\vec{v}_1 \rightarrow \vec{v}'\vec{v}'_1) d\vec{v}' d\vec{v}'_1. \quad (2.103)$$

Это соотношение основано на том, что дифференциальное сечение содержит в качестве сомножителей функции Дирака, которые выражают законы сохранения и «снимают» соответствующее число интегралов. С учетом этого в случае отсутствия внешних сил перепишем (2.100) в симметричной форме

$$\frac{\partial f}{\partial t} = n \int (f' f'_1 - f f_1) \omega(\vec{v}\vec{v}_1 \rightarrow \vec{v}'\vec{v}'_1) d\vec{v}_1 d\vec{v}' d\vec{v}'_1. \quad (2.104)$$

Задача 2.7.1. Используя замену независимых переменных

$$\tau = t, \quad \xi_j = x_j - v_j t \quad (j = 1, 2, 3),$$

найти общее решение уравнения

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right\} F(\vec{x}, \vec{v}, t) = 0.$$

Задача 2.7.2. В начальный момент времени $t = 0$ газ занимает полупространство $x < 0$; плотность и температура постоянны и равны n_0 и T соответственно, а распределение газа по скоростям — максвелловское. Пренебрегая столкновениями, определить плотность числа частиц $n(\vec{x}, t)$ при $t > 0$.

Задача 2.7.3. Внутри шара радиуса R с постоянной плотностью n_0 распределены частицы массой m при температуре T . В момент $t = 0$ оболочка шара исчезает, и начинается свободный разлет частиц. В пренебрежении столкновениями найти плотность частиц $n(\vec{x}, t)$ в последующие моменты времени.

Задача 2.7.4. Используя уравнение Больцмана, показать, что в отсутствие внешнего поля распределение частиц бесстолкновительного газа по скоростям неизменно во времени. Объяснить, почему любой другой результат был бы неприемлем.

Задача 2.7.5. Определить, какие из нижеследующих уравнений обратимы (т. е. для каких из них справедливо утверждение «если $y(t)$ — решение, то $y(-t)$ — также решение»):

$$(A) \quad y'(t) = \int_0^a y(x) dx; \quad (B) \quad y'(t) = \int_0^a xy(x) dx;$$

$$(C) \quad y'(t) = \int_0^t y(x) dx; \quad (D) \quad y'(t) = \int_0^a y(x-t) dx.$$

Задача 2.7.6. Показать, что уравнение Больцмана необратимо, т. е. что если $F(\vec{x}, \vec{v}, t)$ — решение, то $F(\vec{x}, -\vec{v}, -t)$ не обязательно таково.

2.8. H-теорема Больцмана

Кинетическое уравнение Больцмана (2.104) играет существенную роль в физической кинетике, поскольку из него следует известное из термодинамики фундаментальное свойство неубывания энтропии при любой спонтанной эволюции изолированной системы. При этом возрастание энтропии достигает своего максимума и прекращается, когда система приходит в равновесное состояние. Факт неубывания энтропии со временем следует из уравнения (2.104) и носит название H -теоремы Больцмана (такое название объясняется тем, что Больцман использовал букву H для обозначения энтропии с обратным знаком).

Чтобы вывести эту теорему, введем безразмерную H -функцию Больцмана

$$H(t) = \int f(\vec{v}, t) \ln[f(\vec{v}, t)] d\vec{v}. \quad (2.105)$$

Как видно, функционал $H(t)$ пропорционален энтропии замкнутой неравновесной системы, состояние которой задано одночастичной функцией распределения $f(\vec{v}, t)$. Перейдем к кратким обозначениям (2.102) и запишем производную по времени в виде

$$\frac{dH}{dt} = \int \frac{\partial f}{\partial t} [1 + \ln f] d\vec{v}. \quad (2.106)$$

Подставим в выражение (2.106) значение производной $\partial f/\partial t$ из полученного выше уравнения Больцмана (2.104):

$$\frac{dH}{dt} = n \int (f' f'_1 - f f_1) (1 + \ln f) \omega(\vec{v}\vec{v}_1 \rightarrow \vec{v}'\vec{v}'_1) d\vec{v} d\vec{v}_1 d\vec{v}' d\vec{v}'_1. \quad (2.107)$$

Обратим внимание, что упругий процесс $\vec{v}\vec{v}_1 \rightarrow \vec{v}'\vec{v}'_1$ характеризуется сечением $\omega(\vec{v}\vec{v}_1 \rightarrow \vec{v}'\vec{v}'_1)$ со следующими свойствами симметрии при перестановке частиц:

- 1). $\omega(\vec{v}\vec{v}_1 \rightarrow \vec{v}'\vec{v}'_1) = \omega(\vec{v}_1\vec{v} \rightarrow \vec{v}'\vec{v}'_1)$,
- 2). $\omega(\vec{v}\vec{v}_1 \rightarrow \vec{v}'\vec{v}'_1) = \omega(\vec{v}'\vec{v}'_1 \rightarrow \vec{v}\vec{v}_1)$.

Поменяем в равенстве (2.107) частицы местами, т. е. сделаем замену $\vec{v} \leftrightarrow \vec{v}_1$. Тогда можно записать с учетом первого свойства сечения

$$\frac{dH}{dt} = n \int (f' f'_1 - f f_1) (1 + \ln f_1) \omega(\vec{v}\vec{v}_1 \rightarrow \vec{v}'\vec{v}'_1) d\vec{v} d\vec{v}_1 d\vec{v}' d\vec{v}'_1. \quad (2.108)$$

Возьмем полусумму выражений (2.107) и (2.108):

$$\frac{dH}{dt} = \frac{n}{2} \int (f' f'_1 - f f_1) (2 + \ln f f_1) \omega(\vec{v}\vec{v}_1 \rightarrow \vec{v}'\vec{v}'_1) d\vec{v} d\vec{v}_1 d\vec{v}' d\vec{v}'_1. \quad (2.109)$$

Теперь, используя второе свойство симметрии сечения, т. е. заменив $\vec{v} \leftrightarrow \vec{v}'$ и $\vec{v}_1 \leftrightarrow \vec{v}'_1$, можем записать

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{n}{2} \int (f' f'_1 - f f_1) (2 + \ln f' f'_1) \omega(\vec{v}\vec{v}_1 \rightarrow \vec{v}'\vec{v}'_1) d\vec{v} d\vec{v}_1 d\vec{v}' d\vec{v}'_1. \quad (2.110)$$

Вычисляя полусумму последних двух выражений, получим

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{4} \int (f' f'_1 - f f_1) \ln \left(\frac{f f_1}{f' f'_1} \right) \omega(\vec{v}\vec{v}_1 \rightarrow \vec{v}'\vec{v}'_1) d\vec{v} d\vec{v}_1 d\vec{v}' d\vec{v}'_1. \quad (2.111)$$

Из этого соотношения в силу неравенства (см. задачу 2.8.1)

$$(x - y) \ln \frac{y}{x} \leq 0, \quad \text{если } x, y \geq 0,$$

немедленно следует, что

$$\frac{dH}{dt} \leq 0. \quad (2.112)$$

Значит, энтропия является неубывающей функцией (так как H -функция Больцмана и энтропия имеют противоположные знаки). Таким образом, оказывается, что уравнение Больцмана описывает необратимую во времени эволюцию системы, что принципиально выделяет данное уравнение из класса других уравнений механики, не учитывающих этого факта.

Равновесное распределение в замкнутой однородной системе

Важное с физической точки зрения решение уравнения (2.104) получается, когда

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0.$$

Тогда из равенства нулю интеграла столкновений следует функциональное уравнение для функции распределения:

$$(f'f_1' - f f_1) = 0, \quad (2.113)$$

что эквивалентно равенству

$$\ln f(\vec{v}) + \ln f(\vec{v}_1) = \ln f(\vec{v}') + \ln f(\vec{v}'_1). \quad (2.114)$$

Таким образом, логарифм функции распределения $\ln f(\vec{v})$ представляет собой некоторую аддитивную величину, сохраняющуюся в упругих процессах. В силу законов сохранения эта величина есть просто линейная комбинация импульса и кинетической энергии частицы, т. е.

$$\ln f(\vec{v}) = \alpha + \vec{\beta} \vec{v} + \gamma \vec{v}^2, \quad (2.115)$$

где α , β_j , γ — константы, на которые наложено условие нормировки (2.92). Их всегда можно переопределить так, что функция распределения примет вид

$$f(\vec{v}) = A \exp[-a(\vec{v} - \vec{v}_0)^2]. \quad (2.116)$$

Это и есть общий вид равновесного распределения, которое следует из уравнения Больцмана. Тот факт, что оно совпало с распределением Максвелла, подтверждает разумность предположений, заложенных в вывод уравнения Больцмана.

Задача 2.8.1. Показать, что

$$(x - y) \ln \frac{y}{x} \leq 0, \quad \text{если } x, y \geq 0.$$

Задача 2.8.2. Показать, что для системы с заданными термодинамическими параметрами E (энергия) и T (температура) H -функция Больцмана

$$H = \int f(x, p) \ln[f(x, p)] dx dp$$

достигает своего минимального значения в случае, когда распределение $f(x, p)$ является гиббсовским.

Указание. Напомним, что гиббсовское распределение имеет вид

$$f_0(x, p) = \frac{1}{Z} \exp \left[-\frac{\mathcal{H}(x, p)}{kT} \right],$$

где интеграл состояний

$$Z = \int \exp \left[-\frac{\mathcal{H}(x, p)}{kT} \right] dx dp,$$

$\mathcal{H}(x, p)$ — гамильтониан системы. Нормировочные условия в данной задаче имеют вид:

$$\int f(x, p) dx dp = 1, \quad E = \int \mathcal{H}(x, p) f(x, p) dx dp.$$

Для решения задачи введем вспомогательную функцию $g(f) = f \ln f$ и разложим ее в окрестности точки $f = f_0$ в ряд Тейлора

$$g(f) = g(f_0) + g'(f_0)(f - f_0) + o(f - f_0).$$

Нужно показать, что остаточный член $o(f - f_0)$ неотрицателен. Затем взять интеграл от левой и правой части последнего выражения по $dx dp$ и показать, что во всей области H -функция Больцмана не становится меньше своего значения при гиббсовском распределении: $H \geq H_0$, где $H_0 = \int f_0 \ln f_0 dx dp$.

2.9. Основное кинетическое уравнение Паули

Пусть $\omega(y|x, t)$ — плотность вероятности перехода от значения x к значению y за время t для некоторой случайной величины. Исходя только лишь из свойств плотности вероятности перехода, можно написать для нее выражение в общем виде:

$$\begin{aligned} \omega(y|x, \Delta t) &= [1 - a \Delta t] \delta(y - x) + V(y|x) \Delta t + O[(\Delta t)^2], \\ a &= \int V(y|x) dy + O(\Delta t). \end{aligned} \tag{2.117}$$

Здесь $a \Delta t$ — это вероятность того, что случайная величина изменит свое значение с x на y за время Δt . Соответственно, комбинация в квадратных скобках $[1 - a \Delta t]$ задает вероятность остаться случайной величине неизменной за этот промежуток времени. Величина $V(y|x)$ носит название скорости перехода для процесса $x \rightarrow y$ и, согласно (2.117), имеет вид

$$V(y|x) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} [\omega(y|x, \Delta t) - (1 - a \Delta t)\delta(y - x)]. \quad (2.118)$$

Легко видеть, что начальное условие для плотности вероятности перехода выполнено:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \omega(y|x, \Delta t) = \delta(y - x),$$

а из условия нормировки

$$\int \omega(y|x, \Delta t) dy = 1$$

получим второе равенство в (2.117).

Задание такой характеристики, как скорость перехода $V(y|x)$, сводит проблему нахождения плотности вероятности перехода $\omega(y|x, t)$ к решению линейного интегро-дифференциального уравнения. Действительно, рассмотрим производную по времени

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega(y|x, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} [\omega(y|x, t + \Delta t) - \omega(y|x, t)].$$

Преобразуя первое слагаемое правой части этого выражения по уравнению Смолуховского, получим

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega(y|x, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left\{ \int \omega(y|z, \Delta t) \omega(z|x, t) dz - \omega(y|x, t) \right\}. \quad (2.119)$$

Подставляя сюда (2.117), получим уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega(y|x, t) = \int [V(y|z) \omega(z|x, t) - V(z|y) \omega(y|x, t)] dz. \quad (2.120)$$

Это и есть основное кинетическое уравнение Паули, иногда называемое *master equation*. На решение налагается стандартное условие нормировки.

Рассмотрим две простые модели, приводящие к точным решениям этого уравнения. **Первая** модель — это одномерные случайные блуждания с гауссовским распределением, — полученная ранее,

$$\omega(y|x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(y-x)^2}{4Dt}}.$$

Посмотрим, какой вид принимает уравнение Паули в данном случае. Для этого преобразуем скорость перехода (2.118), учитывая, что по определению δ -функция имеет вид

$$\delta(y - x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(y-x)} dk,$$

а для плотности вероятности перехода проведем Фурье-преобразование

$$\omega(y|x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\omega}(k, t) e^{ik(y-x)} dk.$$

Зная конкретный вид гауссовского распределения $\omega(y|x, t)$, легко вычислить Фурье-образ $\hat{\omega}(k, t)$, который также является гауссианом (предоставляем читателю выполнить это вычисление самостоятельно):

$$\hat{\omega}(k, t) = e^{-k^2 D t}.$$

Отсюда плотность вероятности перехода представима в виде

$$\omega(y|x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-k^2 D t} e^{ik(y-x)} dk.$$

Подставляя это выражение, а также определение δ -функции в скорость перехода (2.118), получим

$$\begin{aligned} V(y|x) &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi t} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[e^{-k^2 D t} - 1 + at \right] e^{ik(y-x)} dk = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} (a - k^2 D) e^{ik(y-x)} dk = \left(a + D \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \delta(y - x). \end{aligned} \tag{2.121}$$

Теперь запишем уравнение Паули для случая гауссовского распределения, подставив в правую часть (2.120) полученную скорость перехода $V(y|x)$:

$$\frac{\partial \omega(y|x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2}{\partial y^2} \omega(y|x, t).$$

Это уже знакомое нам уравнение диффузии, которое, как оказалось, является частным случаем уравнения Паули. Для него можно получить все введенные ранее характеристики, такие как, например, среднеквадратичные флуктуации координаты и скорости.

Прежде чем перейти к описанию второй модели, преобразуем уравнение Паули для случая, когда область значений случайной величины является дискретным множеством. В этой ситуации случайная величина описывается вероятностью перехода $\omega(m|n, t)$, для которой соотношение (2.117) принимает вид

$$\begin{aligned}\omega(m|n, \Delta t) &= [1 - a \Delta t] \delta_{mn} + V(m|n) \Delta t + O[(\Delta t)^2], \\ a &= \sum_m V(m|n) + O(\Delta t), \quad V(n|n) = 0.\end{aligned}\quad (2.122)$$

Основное кинетическое уравнение в этом случае записывается в форме

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega(m|n, t) = \sum_l [V(m|l) \omega(l|n, t) - V(l|m) \omega(m|n, t)]; \quad (2.123)$$

условие нормировки:

$$\sum_m \omega(m|n, t) = 1.$$

Теперь в качестве **второй** модели рассмотрим случайный процесс $N(t)$, описывающий эволюцию числа частиц в «размножающейся системе». Пусть происходит процесс спонтанного рождения нейтронов вида $n \rightarrow (n + 1)$, когда новая частица либо не рождается, либо рождается только одна. Понятно, что в этом случае $\omega(m|n, t) = 0$ при $m < n$. Найти нужно среднее число родившихся нейтронов за конечное время t . В соответствии с условиями задачи положим

$$V(m|n) = \lambda \delta_{m, n+1}, \quad \lambda = \text{const.} \quad (2.124)$$

Тогда из уравнения Паули (2.123) получим

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega(m|n, t) = \lambda \omega(m - 1|n, t) - \lambda \omega(m|n, t). \quad (2.125)$$

Если принять, что в начальный момент времени частиц не было, т. е. $n = 0$ при $t = 0$, то можно переписать предыдущее равенство в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega(m|0, t) = \lambda \omega(m - 1|0, t) - \lambda \omega(m|0, t), \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (2.126)$$

Так как $\omega(-1|0, t) = 0$ (частицы не исчезают), то

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega(0|0, t) = -\lambda \omega(0|0, t),$$

что вместе с условием $\omega(m|n, 0) = \delta_{mn}$ дает

$$\omega(0|0, t) = \exp(-\lambda t). \quad (2.127)$$

Обозначим $\omega(m|0, t) \equiv W(m, t)$ — вероятность обнаружить в системе в момент времени t ровно m частиц при условии, что при $t = 0$ число частиц в системе равнялось нулю. С учетом (2.126) и (2.127) имеем задачу:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} W(m, t) &= \lambda W(m-1, t) - \lambda W(m, t), \\ W(0, t) &= \exp(-\lambda t), \quad W(m, 0) = \delta_{m0}. \end{aligned} \quad (2.128)$$

Решим эту задачу путем введения производящей функции

$$G(z, t) = \sum_{n=0}^{\infty} W(n, t) z^n. \quad (2.129)$$

Продифференцируем это равенство по времени, получим

$$\frac{\partial}{\partial t} G(z, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\partial W(n, t)}{\partial t} z^n.$$

Используя выражение для производной $\partial W(n, t)/\partial t$ из уравнения (2.128), получим для производящей функции:

$$\frac{\partial}{\partial t} G(z, t) = -\lambda G(z, t) + \sum_{l=-1}^{\infty} \lambda W(l, t) z^{l+1},$$

где индекс $l = n-1$. Учитывая, что $W(-1, t) = 0$, легко увидеть в последнем слагаемом комбинацию $\lambda z G(z, t)$. Отсюда получаем новую задачу на производящую функцию:

$$\frac{\partial}{\partial t} G(z, t) = \lambda (z-1) G(z, t), \quad G(z, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} \delta_{n0} z^n = 1. \quad (2.130)$$

Решая такую краевую задачу, получим

$$G(z, t) = \exp[(z-1)\lambda t] = \sum_{n=0}^{\infty} W(n, t) z^n. \quad (2.131)$$

Чтобы найти функцию распределения $W(n, t)$, разложим полученную экспоненту в ряд Тейлора по z и приравняем коэффициенты при одинаковых степенях (это предлагается читателю проделать самостоятельно). Тогда получим

$$W(n, t) = \frac{(\lambda t)^n}{n!} e^{-\lambda t}. \quad (2.132)$$

Таким образом, мы получили уже встречавшееся нам распределение Пуассона (см. п. 1.1), что не удивительно с учетом аналогичности задачи статистики, решенной в указанном пункте, и задачи спонтанного рождения нейтронов, рассмотренной здесь. Функция $W(n, t)$ из выражения (2.132) задает все численные характеристики такого процесса рождения частиц, т. е. все моменты $\langle n^k(t) \rangle$. Например, вычислим первый момент — среднее число родившихся нейтронов за время t . Для этого можно вычислить напрямую сумму

$$\langle n(t) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n W(n, t) = \lambda t, \quad (2.133)$$

а можно один раз продифференцировать выражение (2.131) по z

$$\sum_{n=0}^{\infty} n z^{n-1} W(n, t) = \lambda t e^{(z-1)\lambda t}$$

и, полагая затем $z = 1$, сразу получить тот же результат $\langle n(t) \rangle = \lambda t$. Напомним, что в основе полученного решения лежит определенная модель скорости перехода $V(m|n)$ и кинетическое уравнение Паули.

Задача 2.9.1. Получить основное кинетическое уравнение Паули (2.120).

Задача 2.9.2. Получить $\langle n^2(t) \rangle$ — среднеквадратичное число родившихся частиц за конечное время t в задаче спонтанного рождения частиц по закону $n \rightarrow (n + 1)$, рассмотренной в данном пункте. Вычислить также дисперсию числа частиц для данной задачи.

2.10. Ленгмюровские колебания плазмы

Существует широкая область физических явлений, в которых эволюция многочастичной системы определяется не динамикой парных столкновений, а дальнедействующими силами (например, кулоновскими). В результате действия этих сил возникают коллективные возбуждения – квазичастицы. В таких явлениях для функции распределения определяющей оказывается левая часть кинетического уравнения Больцмана, а интегралом столкновений можно пренебречь. Важный пример такого рода – ленгмюровские колебания плазмы – рассмотрен ниже.

Система представляет из себя газ электронов и тяжелых ионов с равным нулю общим зарядом. Равновесное состояние такой системы характеризуется равенством в единице объема числа электронов и числа ионов, так что в «среднем» напряженность электрического поля равна нулю. Пусть одночастичная функция распределения электронов удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\vec{x}, \vec{p}, t) + \frac{1}{m} \vec{p} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} f(\vec{x}, \vec{p}, t) + \vec{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} f(\vec{x}, \vec{p}, t) = 0. \quad (2.134)$$

где \vec{p} – импульс электрона, \vec{F} – внешняя сила, действующая на него, т.е.

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}.$$

В соответствии со сказанным выше в уравнении (2.134) отсутствует интеграл столкновений. Условие нормировки возьмем в виде:

$$\int f(\vec{x}, \vec{p}, t) d\vec{x} d\vec{p} = N, \quad (2.135)$$

тогда плотность электронов равна

$$n(\vec{x}, t) = \int f(\vec{x}, \vec{p}, t) d\vec{p},$$

плотность тока равна

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \int \vec{v} f(\vec{x}, \vec{p}, t) d\vec{p}.$$

Будем считать ионы тяжелыми и в рассматриваемом интервале времени неподвижными. В равновесном состоянии

$$f(\vec{x}, \vec{p}, t) = f_0(\vec{x}, \vec{p}, t),$$

где равновесная функция удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial}{\partial t} f_0(\vec{x}, \vec{p}, t) + \frac{1}{m} \vec{p} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} f_0(\vec{x}, \vec{p}, t) = 0. \quad (2.136)$$

Что происходит с системой, когда в некоторой ее части возникает отклонение от равновесного распределения? Пусть

$$f(\vec{x}, \vec{p}, t) = f_0(\vec{x}, \vec{p}, t) + \delta f(\vec{x}, \vec{p}, t), \quad |\delta f/f_0| \ll 1. \quad (2.137)$$

Избыток электронов над равновесным генерирует электрическое поле, и кинетическое уравнение принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{x}, \vec{p}, t) + \frac{1}{m} \vec{p} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} f(\vec{x}, \vec{p}, t) + e \vec{E}(\vec{x}, t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} f(\vec{x}, \vec{p}, t) &= 0, \\ \vec{E}(\vec{x}, t) &= 4\pi e \int \delta f(\vec{x}, \vec{p}, t) d\vec{p}. \end{aligned} \quad (2.138)$$

В теории плазмы это уравнение называется *уравнением Власова*. Подставляя сюда $f(\vec{x}, \vec{p}, t)$ в виде (2.137) и линеаризуя (2.138) с учетом малости возмущений, получаем уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta f(\vec{x}, \vec{p}, t) + \frac{1}{m} \vec{p} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \delta f(\vec{x}, \vec{p}, t) + e \vec{E}(\vec{x}, t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} f_0(\vec{x}, \vec{p}, t) = 0. \quad (2.139)$$

Теперь разложим δf и \vec{E} по плоским волнам:

$$\begin{Bmatrix} \delta f(\vec{x}, \vec{p}, t) \\ \vec{E}(\vec{x}, t) \end{Bmatrix} = \int \begin{Bmatrix} \delta f(\vec{k}, \omega | \vec{p}) \\ \vec{E}(\vec{k}, \omega) \end{Bmatrix} \exp [i \vec{k} \vec{x} - i \omega t] d\vec{p}. \quad (2.140)$$

Подставляя эти выражения в (2.139) и полагая, что $f_0 = f_0(\vec{p})$ соответствует однородному стационарному распределению, находим

$$\delta f(\vec{k}, \omega | \vec{p}) = -i e \vec{E}(\vec{k}, \omega) \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \vec{p}} \frac{1}{\omega - m^{-1} \vec{p} \cdot \vec{k}}. \quad (2.141)$$

С другой стороны, из уравнения Максвелла получаем

$$i \vec{k} \cdot \vec{E}(\vec{k}, \omega) = 4\pi e \int \delta f(\vec{k}, \omega | \vec{p}) d\vec{p}. \quad (2.142)$$

Если подставить сюда $\delta f(\vec{k}, \omega | \vec{p})$ из (2.141), то получается однородное уравнение относительно $\vec{E}(\vec{k}, \omega)$. Заметим, что, поскольку рассматриваемая система не имеет выделенного направления, напряженность $\vec{E}(\vec{k}, \omega)$ может быть направлена только вдоль вектора \vec{k} , т. е.

$$\vec{E}(\vec{k}, \omega) = \frac{\vec{k}}{k} E(\vec{k}, \omega). \quad (2.143)$$

С учетом этого из (2.142) следует уравнение

$$E(\vec{k}, \omega) \left\{ 1 + \frac{4\pi e^2}{k} \int \frac{\partial f_0}{\partial p_x} \frac{d\vec{p}}{\omega - m^{-1} p_x k} \right\} = 0. \quad (2.144)$$

Здесь в пространстве переменной интегрирования \vec{p} орт \vec{e}_x направлен вдоль волнового вектора \vec{k} , т. е.

$$\vec{e}_x = \vec{k}/k.$$

Нетривиальное решение уравнения (2.144) существует только в классе обобщенных функций и имеет вид

$$E(\vec{k}, \omega) = \delta(\omega - \Omega(k)) \left[-i \frac{4\pi e^2}{k} \rho(\vec{k}) \right], \quad (2.145)$$

где $\rho(\vec{k})$ — произвольная функция волнового вектора \vec{k} , а $\Omega(k)$ удовлетворяет дисперсионному соотношению:

$$1 = -\frac{4\pi e^2}{k} \int \frac{\partial f_0}{\partial p_x} \frac{d\vec{p}}{\Omega(k) - m^{-1} p_x k}. \quad (2.146)$$

Частота $\Omega(k)$, удовлетворяющая этому уравнению, описывает *ленгмюровские* колебания плазмы. Полученное решение (2.145) позволяет исследовать эволюцию избыточной плотности и ее влияние на электроны плазмы. Для избыточной электронной плотности имеем

$$\rho(\vec{x}, t) = \int \delta f(\vec{x}, \vec{p}, t) d\vec{p} \int \rho(\vec{k}) \exp [i \vec{k} \vec{x} - i \Omega(k) t] d\vec{k}. \quad (2.147)$$

Таким образом, $\rho(\vec{k})$ в (2.145) есть Фурье-образ от начальной флуктуации $\rho(\vec{x}, 0)$. Дальнейшая эволюция определяется дисперсионным соотношением (2.146). Если

$$\Omega(k) \sim k^2,$$

то расплывание флуктуации аналогично расплыванию волнового пакета в нерелятивистской квантовой механике.

Рассмотрим решения дисперсионного уравнения (2.146). Характерные масштабы величин определяются равновесной функцией распределения. Пусть

$$\int f_0(\vec{p}) d\vec{p} = n \quad (2.148)$$

— равновесная плотность электронов,

$$\frac{1}{n} \int \frac{p^2}{2m} f_0(\vec{p}) d\vec{p} = \frac{m}{2} \langle v^2 \rangle \quad (2.149)$$

— средняя кинетическая энергия электрона в плазме. Предположим, функция $f_0(\vec{p})$ такова, что интеграл в (2.146) эффективно обрезается на радиусе, меньшем, чем радиус сходимости ряда Тейлора:

$$\frac{\Omega}{\Omega - m^{-1}kp_x} = 1 + \frac{kp_x}{m\Omega} + \left(\frac{kp_x}{m\Omega}\right)^2 + \left(\frac{kp_x}{m\Omega}\right)^3 + \dots \quad (2.150)$$

Удерживая в разложении первые четыре члена, получим

$$1 = \frac{\omega_0^2}{\Omega^2} \left[1 + \frac{1}{\Omega^2} k\langle v^2 \rangle \right], \quad \omega_0^2 = \frac{4\pi e^2 n}{m}. \quad (2.151)$$

Отсюда с точностью до членов $O(k^4)$

$$\Omega(k) = \omega_0^2 + \frac{k^2\langle v^2 \rangle}{2\omega_0}. \quad (2.152)$$

Это и есть искомый спектр. Величина ω_0 называется плазменной частотой. Таким образом, в бесстолкновительной плазме случайно возникшая флуктуация равновесной плотности электронов порождает колебания в виде плоских волн, спектр которых квадратичен по волновому вектору и определяется плазменной частотой и температурой равновесной плазмы. Полученные колебания не затухают. Однако более строгое рассмотрение сингулярного интеграла в (2.146) показывает, что на самом деле возникшие колебания плазмы будут затухать. Впервые такой анализ проделал Ландау, и данное явление называется *затуханием Ландау*. Физическая причина затухания — передача энергии электрону от волны, что приводит к его ускорению или замедлению.

Формально эффект затухания возникает при доопределении интеграла в (2.146). Подынтегральная функция имеет полюс в точке

$$v_x = \Omega(k)/k,$$

когда скорость электрона равна фазовой скорости волны. Поэтому интеграл расходится и нуждается в доопределении. По Ландау в подынтегральной функции нужно сделать замену

$$\omega \rightarrow \omega + i\varepsilon.$$

Выбор знака диктуется принципом причинности и приводит к тому, что $\delta f = 0$ при $t < 0$. Если теперь повторить вычисления, которые привели к (2.151), то в результате получается

$$\Omega(k) = \omega_0^2 + \frac{k^2\langle v^2 \rangle}{2\omega_0} - i\gamma(k), \quad \gamma(k) > 0, \quad (2.153)$$

т. е. в спектре появляется мнимая добавка. Теперь легко увидеть, что

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta f(\vec{x}, \vec{p}, t) \\ \vec{E}(\vec{x}, t) \end{array} \right\} \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} 0 \\ \vec{0} \end{array} \right\} \text{ при } t \rightarrow +\infty. \quad (2.154)$$

2.11. Электронная плазма в металле. Проводимость

В бесстолкновительной «горячей» плазме, состоящей из электронов и ионов, основным механизмом формирования одночастичной функции распределения является рождение квазичастиц и их дальнейшая эволюция. Здесь будет рассмотрен пример, когда парные столкновения начинают играть существенную роль. Наиболее простая система такого рода – электроны в металле при наличии примесей, нарушающих трансляционную инвариантность. Рассеяния на этих примесях приводят к ненулевому интегралу столкновений. Таким образом, пространственная зависимость одночастичной функции распределения $f(\vec{x}, \vec{p}, t)$ «диктуется» уравнением Шредингера в периодическом поле кристаллической решетки, а импульсная зависимость и эволюция определяются кинетическим уравнением.

Запишем интеграл столкновений через вероятность рассеяния (перехода) $\omega(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')$. Это важная характеристика, определяемая динамикой взаимодействия рассматриваемых частиц (в данном случае электронов) со средой. Определим ее таким образом, чтобы величина $\omega(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')d\vec{p}'$ представляла собою вероятность перехода за единицу времени частицы из состояния с импульсом \vec{p} в одно из состояний, лежащих в окрестности $d\vec{p}'$ импульса \vec{p}' . В этом случае для интеграла столкновений имеем:

$$\begin{aligned} \text{убыль} &= \int f(\vec{x}, \vec{p}, t) \omega(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') d\vec{p}', \\ \text{прибыль} &= \int f(\vec{x}, \vec{p}', t) \omega(\vec{p}' \rightarrow \vec{p}) d\vec{p}'. \end{aligned} \quad (2.155)$$

Тогда уравнение Больцмана принимает вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{x}, \vec{p}, t) + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} f(\vec{x}, \vec{p}, t) + \vec{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} f(\vec{x}, \vec{p}, t) = \\ = \int [f(\vec{x}, \vec{p}', t) \omega(\vec{p}' \rightarrow \vec{p}) - f(\vec{x}, \vec{p}, t) \omega(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')] d\vec{p}'. \end{aligned} \quad (2.156)$$

Нужно отметить, что это уравнение носит самый общий характер и справедливо ровно настолько, насколько правомочно введение одночастичной

функции распределения для частиц, находящихся в среде, с которой они активно взаимодействуют. Вид функции $\omega(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')$ определяется природой этого взаимодействия. Так, если роль среды играют сами частицы и взаимодействие между ними носит чисто упругий характер, то сама вероятность $\omega(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')$ зависит от функции распределения, и в результате получаем интеграл столкновений Больцмана. Если среда представляет собой тяжелые частицы или неподвижные центры, то $\omega(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')$ сводится к дифференциальному сечению упругого рассеяния на этих центрах. В квантово-механических процессах рассеяния на потенциале функция $\omega(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')$ определяется квадратом модуля матричного элемента от матрицы рассеяния. В последних двух случаях $\omega(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')$ не зависит от функции распределения и пропорциональна δ -функции Дирака, поддерживающей закон сохранения энергии. Кроме того, скорость перехода $\omega(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')$ удовлетворяет условию

$$\omega(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') = \omega(\vec{p}' \rightarrow \vec{p}),$$

известному как принцип детального равновесия. Отметим, что если правую часть уравнения (2.156) рассматривать как интегральный оператор, действующий на функцию распределения $f(\vec{x}, \vec{p}, t)$, то он в точности совпадает с соответствующим оператором в кинетическом уравнении Паули, действующим на вероятность перехода. Ядро оператора в обоих случаях одно и то же и определяется скоростью перехода.

Теперь вернемся к нашей задаче. Будем считать электроны свободными с энергией, равной

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m},$$

где m — эффективная масса, примеси считаем неподвижными, рассеяние электронов на примесях — чисто упругим, так что энергия электрона при рассеянии сохраняется, т. е. $|\vec{p}| = |\vec{p}'|$ и относительные скорости $|\vec{v}| = |\vec{v}'|$. Тогда можно написать

$$\begin{aligned} \omega(\vec{p} \rightarrow \vec{p}') d\vec{p}' &= n_0 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right)_{(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')} v d\Omega', \\ \omega(\vec{p}' \rightarrow \vec{p}) d\vec{p}' &= n_0 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right)_{(\vec{p}' \rightarrow \vec{p})} v' d\Omega', \end{aligned} \quad (2.157)$$

где n_0 — концентрация примесей. Эти соотношения понимаются в том смысле, что интеграл от произвольной функции с левой частью (2.157)

сводится к интегралу по телесному углу. Величина

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right)_{(\vec{p} \rightarrow \vec{p}')}$$

называется дифференциальным сечением и зависит от $\vec{p} \cdot \vec{p}' = p^2 \cos \theta'$, где θ' – угол рассеяния. При получении (2.157) считалось, что в процессе рассеяния электрона на примеси последняя не меняет своего состояния. Таким образом, в сумме по состояниям мишени присутствует только одно слагаемое. Предполагалось также, что относительная скорость «частица – мишень» равна скорости частицы (это приближение оправдано тем, что масса электрона мала по сравнению с массой примеси). Величина

$$\int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right) d\Omega' = \sigma \quad (2.158)$$

есть сечение упругого рассеяния. В общем случае оно зависит от $|\vec{p}| = p$, т. е. $\sigma = \sigma(p)$. С учетом вышеизложенного уравнение (2.156) примет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{x}, \vec{p}, t) + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} f(\vec{x}, \vec{p}, t) + \vec{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} f(\vec{x}, \vec{p}, t) = \\ = -n_0 v \sigma f(\vec{x}, \vec{p}, t) + n_0 v \int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right)_{(\vec{p}' \rightarrow \vec{p})} f(\vec{x}, \vec{p}', t) d\Omega'. \end{aligned} \quad (2.159)$$

В дальнейшем важную роль играет равенство

$$\int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right)_{(\vec{p}' \rightarrow \vec{p})} (\vec{n} \cdot \vec{p}') d\Omega' = (\vec{n} \cdot \vec{p}) \int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right)_{(\vec{p}' \rightarrow \vec{p})} \cos \theta' d\Omega', \quad (2.160)$$

где \vec{n} – произвольный постоянный вектор. Так как $|\vec{p}| = |\vec{p}'|$, справедливо представление

$$\vec{p}' = \vec{p} \cos \theta + \vec{p}'_{\perp}, \quad (2.161)$$

где $\vec{p}'_{\perp} \perp \vec{p}$ и

$$p'_{\perp} = |\vec{p}'_{\perp}| = p \sin \theta'.$$

Ввиду ортогональности \vec{p} и \vec{p}'_{\perp}

$$\vec{n} \cdot \vec{p}'_{\perp} = n_{\perp} (p \sin \theta') \cos \varphi,$$

где

$$\vec{n}_{\perp} = \vec{n} \left(1 - \frac{(\vec{n} \cdot \vec{p})}{np} \right),$$

φ — угол между \vec{p}'_{\perp} и \vec{n}_{\perp} . Из очевидного равенства

$$\int_0^{2\pi} (\vec{n} \cdot \vec{p}'_{\perp}) d\varphi = 0$$

и того факта, что дифференциальное сечение зависит только от угла θ' , нетрудно получить

$$\int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right)_{(\vec{p}' \rightarrow \vec{p})} (\vec{n} \cdot \vec{p}'_{\perp}) d\Omega' = 0. \quad (2.162)$$

Отсюда сразу следует (2.159).

При $\vec{F} = \vec{0}$ уравнение (2.159) имеет равновесное решение

$$f(\vec{x}, \vec{p}, t) = f_0(p), \quad (2.163)$$

где f_0 — произвольная функция. При этом левая и правая части уравнения (2.159) обращаются в нуль независимо. В случае малого отклонения от равновесия, вызываемого слабым внешним полем $\vec{F} \neq \vec{0}$,

$$f(\vec{x}, \vec{p}, t) = f_0(p) + \delta f(\vec{x}, \vec{p}, t) \quad (2.164)$$

и линеаризованное уравнение имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \delta f(\vec{x}, \vec{p}, t) + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \delta f(\vec{x}, \vec{p}, t) + \vec{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} f_0(p) = I, \\ I = -n_0 v \delta f(\vec{x}, \vec{p}, t) + n_0 v \int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right)_{(\vec{p}' \rightarrow \vec{p})} \delta f(\vec{x}, \vec{p}', t) d\Omega'. \end{aligned} \quad (2.165)$$

При заданной функции $f_0(p)$ и силе \vec{F} это уравнение представляет собой неоднородное интегро-дифференциальное уравнение. В некоторых простых случаях его решение можно найти в аналитическом виде. Пусть $\vec{F} = e \vec{E}$, где \vec{E} — напряженность постоянного внешнего электрического поля. Тогда естественно предполагать, что δf есть однородная в пространстве функция, не зависящая от времени. В этом случае уравнение (2.165) примет вид

$$e \vec{E} \cdot \frac{\vec{p}}{p} \frac{\partial f_0}{\partial p} = I. \quad (2.166)$$

Будем искать решение в виде

$$\delta f(\vec{p}) = -\tau e \vec{E} \cdot \frac{\vec{p}}{p} \frac{\partial f_0}{\partial p}, \quad (2.167)$$

где $\tau = const$. Подставляя (2.167) в уравнение (2.166) и учитывая равенство (2.160), получим

$$\frac{1}{\tau} = n_0 v \sigma_{tr}, \quad \text{где} \quad \sigma_{tr} = \int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right) (1 - \cos \theta') d\Omega'. \quad (2.168)$$

Величина σ_{tr} называется транспортным сечением, и, как видно из (2.167), в ней подавлен вклад от дифференциального сечения в области малых углов рассеяния. Величину τ называют временем релаксации. Вычислим плотность электрического тока. Пусть единичный вектор $\vec{k} = \vec{E}/E$, тогда

$$\vec{k} \cdot \vec{j} = \frac{e}{m} \int (\vec{k} \cdot \vec{p}) \delta f(\vec{p}) d\vec{p},$$

или

$$\vec{j} = \Sigma_e \vec{E}, \quad (2.169)$$

где

$$\Sigma_e = \frac{e^2 \tau}{m} n, \quad n = \int f_0(p) d\vec{p}.$$

Величина Σ_e носит название проводимости. Соотношение (2.169) выражает закон Ома. Задача просто обобщается на случай, когда напряженность поля \vec{E} зависит от времени. Разлагая в интеграл Фурье \vec{E} и δf получим, что проводимость зависит от частоты электрического поля

$$\Sigma_e = \frac{e^2 \tau n}{m(1 - i\omega\tau)}.$$

Если ввести диэлектрическую проницаемость

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{4\pi\Sigma_e}{\omega} i,$$

то можно получить все электрические характеристики среды как функцию единого параметра τ .

2.12. Теплопроводность электронного газа в металле

В этом пункте мы продолжим рассмотрение электронной плазмы в металле при наличии примесей. Однако, в отличие от предыдущего, будем предполагать, что электрическое поле отсутствует, но в направлении вектора \vec{n} (произвольный единичный вектор) существует градиент

температуры, поддерживаемый извне. Будем считать также, что на каждом бесконечно малом интервале оси вдоль вектора \vec{n} существует своя локальная температура и соответствующее ей равновесное распределение Ферми – Дирака по одночастичному спектру электронов $\epsilon = p^2/2m$, т. е. равновесное распределение f_0 имеет вид:

$$f_0(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \langle h(\epsilon) \rangle, \quad (2.170)$$

$$\langle h(\epsilon) \rangle = \frac{1}{\exp\left[\frac{\epsilon - \mu}{T(x)}\right] + 1},$$

$$\int f_0(\vec{r}, \vec{p}) d\vec{p} = n - \text{равновесная плотность электронов.}$$

Здесь, в соответствии с вышесказанным, температура есть функция переменной x , т. е. $T = T(x)$, причем система координат выбрана так, что ось x направлена вдоль вектора \vec{n} , таким образом, $x = (\vec{n} \cdot \vec{r})$. Учтено также, что электрон может находиться в двух состояниях.

Ниже мы покажем, что существование градиента температур, а также наличие примесей приводит к появлению ненулевого тока электронов вдоль вектора \vec{n} и ненулевой плотности потока тепла q_x :

$$q_x \equiv (\vec{n} \cdot \vec{q}) = \int (\vec{n} \cdot \vec{v}) \cdot (\epsilon - \mu) \delta f(\vec{r}, \vec{p}) d\vec{p}, \quad (2.171)$$

где $f(\vec{r}, \vec{p}) = f_0(\vec{r}, \vec{p}) + \delta f(\vec{r}, \vec{p})$,

$$\vec{p} = m\vec{v}.$$

Введем коэффициент теплопроводности K через соотношение:

$$q_x = -K \frac{\partial T}{\partial x}. \quad (2.172)$$

Нашей задачей является вычисление этого коэффициента. Для этого необходимо решить уравнение Больцмана и найти δf .

Поскольку внешнее поле отсутствует и нас интересует стационарное распределение, то в левой части уравнения Больцмана останется только одно слагаемое, так что уравнение относительно δf в приближении ее малости имеет вид:

$$\vec{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \vec{x}} = I, \quad (2.173)$$

где интеграл столкновения I приведен в предыдущем пункте.

Далее, в силу того что распределение $f_0(\vec{r}, \vec{p})$ зависит от своих аргументов \vec{r} и \vec{p} через единственный фактор

$$Z = \frac{\epsilon - \mu}{T(x)}, \quad \epsilon = \frac{\vec{p}^2}{2m}, \quad (2.174)$$

нетрудно установить следующие простые соотношения:

$$\begin{aligned} \left(\vec{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \right) f_0 &= \frac{1}{T} (\vec{n} \cdot \vec{v}) \cdot \frac{\partial f_0}{\partial z}, \\ \left(\vec{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right) f_0 &= \frac{1}{T} (\vec{n} \cdot \vec{v}) \cdot \frac{\partial f_0}{\partial z} \cdot \left(-\frac{\epsilon - \mu}{T} \right) \cdot \frac{\partial T}{\partial x}. \end{aligned} \quad (2.175)$$

Отсюда получаем, что

$$\vec{n} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \vec{x}} = \gamma \cdot \left(\vec{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \right) f_0, \quad \gamma = \left(-\frac{\epsilon - \mu}{T} \right) \cdot \frac{\partial T}{\partial x}. \quad (2.176)$$

Это равенство позволяет записать уравнение Больцмана (2.173) в виде

$$e\tilde{E} \cdot \left(\vec{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \right) f_0 = I, \quad (2.177)$$

где $\tilde{E} = \frac{\gamma}{e}$. Таким образом, задача свелась к предыдущей с той разницей, что эффективное электрическое поле \tilde{E} зависит от $(\vec{n} \cdot \vec{r}) = x$. Однако, поскольку в интегральном уравнении (2.177) для $\delta f(\vec{r}, \vec{p})$ координата x входит как параметр, то решение уравнения (2.177) получается из найденного ранее путем замены в нем $E \rightarrow \tilde{E}$. Тогда получим:

$$\begin{aligned} \delta f &= \frac{\tau}{T} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} (\vec{n} \cdot \vec{v}) \cdot (\epsilon - \mu) \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}, \\ q_x &= \frac{\tau}{T} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \int (\vec{n} \cdot \vec{v})^2 \cdot (\epsilon - \mu)^2 \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} d\vec{p}, \end{aligned} \quad (2.178)$$

$$\tau^{-1} = n_0 v \sigma_{tr},$$

где n_0 и σ_{tr} — определенные в предыдущем параграфе плотность примесей и транспортное сечение соответственно.

Вычисление плотности теплового потока q_x приводит к интегралу типа:

$$f(\mu) = \int F(\epsilon) \langle h(\epsilon) \rangle d\epsilon. \quad (2.179)$$

Такие интегралы возникают в практических расчетах статистической физики, и для них широко используется метод приближения, в котором в качестве первого шага «гладкое» распределение $\langle h(\epsilon) \rangle$ заменяется

на «ступеньку», обрезанную при $\epsilon = \mu$. Конкретно, пусть

$$f_0 = \int_0^{\mu} F(\epsilon) d\epsilon, \quad (2.180)$$

тогда

$$f(\mu) - f_0 = T \int_0^{\infty} \frac{F(\mu + Tx)}{e^x + 1} dx - T \int_0^{\mu/T} \frac{F(\mu - Tx)}{e^x + 1} dx. \quad (2.181)$$

Данное выражение является точным, приближение связано с разложением под интегралом

$$F(\mu \pm Tx) \simeq F(\mu) + F'(\mu) \cdot T \cdot x \quad (2.182)$$

и заменой во втором интеграле верхнего предела интегрирования на ∞ . В этом приближении получим

$$f(\mu) = \int_0^{\mu} F(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} T^2 \cdot F'(\mu). \quad (2.183)$$

Здесь использовано соотношение

$$\int_0^{\infty} \frac{x dx}{e^x + 1} = \frac{\pi^2}{12}. \quad (2.184)$$

Соотношение (2.183) позволяет выполнить интегрирование в (2.178), после чего для плотности потока тепла получим:

$$q_x = \tau \cdot \frac{\pi^2 n T}{3m} \cdot \frac{dT}{dx}. \quad (2.185)$$

В этом выражении мы перешли от химического потенциала $\mu = \mu(T)$ к приближенному его значению, т. е. сделали замену

$$2m\mu(T) \simeq 2m\mu(0) = (2\pi\hbar)^2 \cdot \left(\frac{3n}{4\pi}\right)^{2/3},$$

где n — плотность электронов.

Окончательный результат можно представить в виде

$$q_x = -K \cdot \frac{dT}{dx}, \quad (2.186)$$

$$K = \frac{\pi^2 T}{3e^2} \cdot \Sigma_e,$$

где Σ_e — электронная проводимость. В таком виде выражение (2.186) известно как закон Видемана – Франца.

Глава 3

Элементы теории переноса

Теория переноса изучает прохождение сквозь среду потока активно взаимодействующих с ней частиц. В качестве таких частиц мы будем рассматривать нейтроны, поскольку эта задача возникает естественным образом в теории ядерных реакторов и, следовательно, имеет большое практическое значение. Основные идеи и методы расчета были заложены в 1940-е–1950-е гг. при изучении процессов переноса в веществе, состоящем из смеси природного урана (активное вещество) и графита (замедлитель). Было обнаружено, что нейтроны, кинетическая энергия которых порядка $\frac{1}{40} eV$ (тепловые нейтроны), имеют большое сечение захвата ядрами некоторых изотопов урана с последующим делением их на осколки и два «быстрых» нейтрона (энергия $\sim 10^6 eV$). Эти нейтроны в упругих столкновениях с легкими ядрами замедлителя теряют свою энергию и после определенного числа столкновений (~ 110 столкновений на ядре углерода) становятся тепловыми. Таким образом, при определенном соотношении плотностей и взаимном расположении активного вещества и замедлителя возникает лавинообразный процесс рождения нейтронов – цепная реакция, с сопутствующим ему энерговыделением. При рассмотрении этой задачи необходимо учитывать все каналы реакции нейтронов с ядрами вещества. Это сложная кинетическая проблема, и большие трудности возникают уже на стадии написания соответствующих кинетических уравнений. Мы рассмотрим максимально упрощенную модель процесса, в которой механизм возникновения тепловых нейтронов в системе подменяется введением некоторого феноменологического фактора («источника» тепловых нейтронов). Относительно взаимодействия тепловых нейтронов с ядрами поглотителя предполагается, что доминирующую роль играют процессы упругого рассеяния и радиационного захвата. Кроме этого, считается, что отношение энергии нейтронов к числу

нуклонов в ядре есть величина малая, так что при упругом рассеянии меняется только направление скорости нейтронов. Модель, построенная на перечисленных предположениях, называется односкоростной моделью переноса нейтронов.

3.1. Сечения ядерных процессов и их связь с макроскопическими характеристиками нейтронных потоков

Пусть $n(\vec{x}, t)$ — пространственная плотность нейтронов, $N(\vec{x}, t)$ — пространственная плотность ядер, N_a — поверхностная плотность ядер, σ_a — эффективное сечение радиационного захвата, σ_s — эффективное сечение упругого рассеяния,

$$\Sigma_i = N \sigma_i$$

— макроскопическое сечение соответствующего процесса, где индекс i принимает значения $i = a$ (*absorbing* — захват) или $i = s$ (*scattering* — рассеяние). Введем также функцию

$$\phi(\vec{x}, t) = v n(\vec{x}, t), \quad (3.1)$$

которую называют потоком нейтронов.

Представим плоскую моноядерную пластину с площадью S , на которую под прямым углом падает пучок нейтронов с плотностью тока j_0 . Пусть j_1 — плотность тока нейтронов, прошедших через пластину без изменения своих состояний (не рассеялись, не поглотились), тогда величина

$$a = \frac{j_0 - j_1}{j_0} \quad (3.2)$$

есть вероятность столкновения одного нейтрона при прохождении моноядерной пластины. С другой стороны, на площади S размещено $N_a S$ ядер, каждое из которых представляет собой для налетающего нейтрона эффективное сечение σ . Поэтому площадь $\sigma N_a S$ — та часть от общей площади, при пересечении которой нейтрон изменяет свое состояние. Вероятность столкновения равна отношению соответствующих площадей, т. е.

$$a = \frac{\sigma N_a S}{S} = \sigma N_a. \quad (3.3)$$

Приравнивая (3.2) и (3.3), получаем связь макроскопических характеристик пучка с микроскопическим сечением:

$$\frac{j_0 - j_1}{j_0} = \sigma N_a. \quad (3.4)$$

Перейдем от абстрактной моноядерной пластины к реальному образцу конечной толщины. Пусть $j(x)$ — плотность тока нейтронов, прошедших пластину толщиной x и не испытавших столкновения. Тогда величина

$$a(\Delta x) = \frac{j(x) - j(x + \Delta x)}{j(x)} \quad (3.5)$$

есть вероятность столкновения нейтрона при прохождении пластины толщиной Δx . С другой стороны, по аналогии с (3.4) имеем

$$a(\Delta x) = \frac{j(x) - j(x + \Delta x)}{j(x)} = \sigma N \Delta x. \quad (3.6)$$

Здесь величина $N \Delta x$ эквивалентна поверхностной плотности ядер ($\Delta x \sim$ диаметру ядра). Полагая, что пространственная плотность ядер постоянна во всем пространстве, из соотношения (3.6) получаем

$$j(x) = j_0 \exp(-\Sigma x), \quad \Sigma = \Sigma_a + \Sigma_s. \quad (3.7)$$

Таким образом, $\exp(-\Sigma x)$ — вероятность прохождения нейтроном пути длиной x без столкновений, $[1 - \exp(-\Sigma x)]$ — вероятность столкновения нейтрона на пути длиной x . Если в прохождении участвует n нейтронов, то величина

$$n[1 - \exp(-\Sigma x)]$$

есть число столкновений на пути длиной x .

В элементарном объеме $d\vec{x}$ содержится $(nd\vec{x})$ нейтронов. За время Δt нейтрон, обладающий скоростью v , проходит путь $v \Delta t$. Поэтому из этих $(nd\vec{x})$ нейтронов ровно

$$n d\vec{x} [1 - \exp(-\Sigma_s v \Delta t)]$$

испытают упругие столкновения в течение времени Δt , ровно

$$n d\vec{x} [1 - \exp(-\Sigma_a v \Delta t)]$$

нейтронов поглотятся за время Δt . Если элементарный объем $d\vec{x}$ поместить в идеально отражающую замкнутую поверхность, то за время Δt

нейтрон, не выходя за пределы объема, пройдет тот же путь $v \Delta t$, так что записанные выше соотношения дают количества соответствующих столкновений в элементарном объеме $d\vec{x}$, окруженном идеально отражающими стенками. Аккуратно рассуждая, можно показать, что величина

$$n d\vec{x} [1 - \exp(-\Sigma_s v \Delta t)]$$

дает число нейтронов, испытавших упругие столкновения в объеме $d\vec{x}$ в течение времени Δt , величина

$$n d\vec{x} [1 - \exp(-\Sigma_a v \Delta t)]$$

есть число нейтронов, поглощенных в объеме $d\vec{x}$ за время Δt . Считая интервал времени малым ($\Delta t \ll \Sigma v$), мы находим, что число упругих столкновений в единице объема в единицу времени равно $\Sigma_s \phi$, число нейтронов, поглощенных в единице объема в единицу времени, равно $\Sigma_a \phi$. Наконец, из соотношения (3.7) имеем

$$\sigma = \frac{1}{l N} \ln \left(\frac{j_0}{j_l} \right), \quad (3.8)$$

где l — толщина однородной пластины, N — пространственная плотность ядер, j_0 — плотность тока нейтронов перед пластиной, j_l — плотность тока после прохождения пластины, σ — полное сечение взаимодействия нейтрона с ядром. В левой части (3.8) стоит микроскопическое сечение, в правой части — экспериментально наблюдаемые макроскопические величины.

3.2. Уравнение баланса числа частиц в односкоростной модели

Уравнение баланса выражает тот простой факт, что в рассматриваемой системе тепловые нейтроны могут рождаться, поглощаться и рассеиваться, и ничего другого с ними не происходит. Пусть V — произвольный конечный объем. Тогда

$$\Delta N = \int [n(\vec{x}, t + \Delta t) - n(\vec{x}, t)] d\vec{x} \quad (3.9)$$

есть изменение числа нейтронов в этом объеме за малое время Δt . Оно складывается из прибыли и убыли, причем уменьшение числа нейтронов

происходит как за счет поглощения нейтронов в объеме V , так и за счет утечки нейтронов через границу ∂V объема V . Число нейтронов, поглощенных в объеме V за время Δt , равно

$$\Delta t \int [\Sigma_a n(\vec{x}, t)] d\vec{x}.$$

Число нейтронов, покинувших объем V через поверхность ∂V за время Δt , равно

$$\Delta t \int_{\partial V} [\vec{n} \cdot \vec{j}(\vec{x}, t)] dS,$$

где \vec{n} — внешняя нормаль к поверхности ∂V . Прибыль — число нейтронов, рожденных в объеме V за время Δt , — равна

$$\Delta t \int q(\vec{x}, t) d\vec{x}.$$

Переходя к пределу $\Delta t \rightarrow 0$ и учитывая произвольность объема V , получим уравнение баланса в дифференциальной форме:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = -\Sigma_a \phi + q. \quad (3.10)$$

Чтобы это соотношение превратить в уравнение для плотности $n(\vec{x}, t)$ числа нейтронов, нужно получить ее связь с плотностью тока. Такая связь получается в рамках определенных физических предположений. Кроме того, необходимо прояснить смысл источника $q(\vec{x}, t)$, поскольку воспроизводство нейтронов генерируется самими тепловыми нейтронами.

3.3. Плотность тока

Пусть ΔS — произвольная бесконечно малая площадку, проходящая через точку наблюдения P с радиусом-вектором \vec{x} . Пусть \vec{y} — радиус-вектор другой точки P' , окруженной элементарным объемом $d\vec{y}$. Рассмотрим все те нейтроны, которые вышли из объема $d\vec{y}$ и, не испытав по пути ни одного столкновения, достигли площадки ΔS . Эти нейтроны можно разделить на два класса: нейтроны, которые были рождены в объеме $d\vec{y}$ источником, и нейтроны, которые попали в объем $d\vec{y}$ извне и испытали в этом объеме последнее (перед пересечением ΔS) упругое столкновение. Вычислим сперва вклад источника в плотность тока.

Пусть $\vec{\rho} = (\vec{y} - \vec{x})$ — вектор, направленный из P в P' , θ — угол между единичной нормалью \vec{n} к площадке ΔS и вектором $\vec{\rho}$, так что

$$\vec{n} \cdot \vec{\rho} = \rho \cos \theta.$$

Число нейтронов, рожденных в объеме $d\vec{y}$ за время Δt , равно $q(\vec{y}, t) d\vec{y} \Delta t$. Если рождение нейтронов в источнике изотропно, то доля нейтронов, имеющих потенциальную возможность пересечь площадку ΔS , определяется отношением площадей

$$\frac{\Delta S \cos \theta}{4\pi\rho^2}.$$

Из этих нейтронов лишь $\exp(-\Sigma\rho)$ дойдут до площадки без столкновений. Поэтому число нейтронов, рожденных источником в объеме $d\vec{y}$ и пересекающих площадку ΔS в интервале времени $(t, t + \Delta t)$, равно

$$\Delta N_q = \frac{\Delta S \cos \theta}{4\pi\rho^2} \exp(-\Sigma\rho) q(\vec{y}, t - \rho/v) d\vec{y} \Delta t. \quad (3.11)$$

Число нейтронов, которые попали в объем $d\vec{y}$ извне и испытали в этом объеме последнее (перед пересечением ΔS) упругое столкновение, определяется плотностью числа столкновений и тем же фактором подавления $\exp(-\Sigma\rho)$:

$$\Delta N_s = \frac{\Delta S \cos \theta}{4\pi\rho^2} \exp(-\Sigma\rho) \Sigma_s \phi(\vec{y}, t - \rho/v) d\vec{y} \Delta t. \quad (3.12)$$

Учитывая соотношения

$$d\vec{y} = d\vec{\rho}, \quad \vec{\nabla} \left(\frac{1}{\rho} \right) = -\frac{\vec{\rho}}{\rho^3},$$

для плотности тока получаем $\vec{j} = \vec{j}_s + \vec{j}_q$, где

$$\vec{j}_s(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi} \int \left[\vec{\nabla} \frac{1}{\rho} \right] \Sigma_s \phi(\vec{x} + \vec{\rho}, t - \rho/v) \exp(-\Sigma\rho) d\vec{\rho}, \quad (3.13)$$

$$\vec{j}_q(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi} \int \left[\vec{\nabla} \frac{1}{\rho} \right] q(\vec{x} + \vec{\rho}, t - \rho/v) \exp(-\Sigma\rho) d\vec{\rho}. \quad (3.14)$$

Перечислим еще раз использованные предположения. Во-первых, моноэнергетичность нейтронов при переносе (односкоростное приближение). Далее, ядра поглотителя распределены в пространстве с постоянной плотностью N . Наконец, изотропность источника и изотропность

при упругом рассеянии. Сделаем еще одно предположение: на временном интервале $\sim 1/(\Sigma v)$ плотность нейтронов и плотность источника меняются слабо, т. е. пренебрежем в выражении для плотности тока временной задержкой. Тогда

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j}_q(\vec{x}, t) = q(\vec{x}, t) - \frac{\Sigma}{4\pi} \int q(\vec{x} + \vec{\rho}, t) \rho^{-2} \exp(-\Sigma\rho) d\vec{\rho}, \quad (3.15)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j}_s(\vec{x}, t) = \Sigma_s \cdot \phi(\vec{x}, t) - \frac{\Sigma}{4\pi} \int \Sigma_s \phi(\vec{x} + \vec{\rho}, t) \rho^{-2} \exp(-\Sigma\rho) d\vec{\rho}. \quad (3.16)$$

При получении этих равенств использовалось соотношение

$$\vec{\nabla}^2 \left(\frac{1}{\rho} \right) = -4\pi \delta(\vec{\rho}).$$

С учетом полученных выражений уравнение баланса (3.10) запишется в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\vec{x}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_s(\vec{x}, t) = Q(\vec{x}, t) - \Sigma_a \phi(\vec{x}, t), \quad (3.17)$$

где

$$Q(\vec{x}, t) = \frac{\Sigma}{4\pi} \int q(\vec{x} + \vec{\rho}, t) \rho^{-2} \exp(-\Sigma\rho) d\vec{\rho}.$$

Таким образом, в плотности тока можно не учитывать вклада прямых нейтронов из источника, если при этом заменить $q(\vec{x}, t)$ на $Q(\vec{x}, t)$. Такую замену можно интерпретировать как эффективную экранировку источника. При достаточно «гладком» источнике $q(\vec{x}, t)$, когда

$$\frac{1}{3\Sigma^2} \vec{\nabla}^2 q \ll q,$$

экранировка отсутствует:

$$Q(\vec{x}, t) \simeq q(\vec{x}, t) \frac{\Sigma}{4\pi} \int \rho^{-2} \exp(-\Sigma\rho) d\vec{\rho} = q(\vec{x}, t). \quad (3.18)$$

Примером существенного влияния экранировки служит точечный источник:

$$q(\vec{x}, t) = q_0 \delta(\vec{x}), \quad Q(\vec{x}, t) = q_0 \frac{\Sigma}{4\pi} |\vec{x}|^{-2} \exp(-\Sigma|\vec{x}|). \quad (3.19)$$

Отсюда следует важное соотношение

$$\int q(\vec{x}, t) d\vec{x} = \int Q(\vec{x}, t) d\vec{x}. \quad (3.20)$$

Таким образом, источник нейтронов q и «экранированный» источник Q рождают в единицу времени во всем пространстве одинаковое количество нейтронов.

Рассмотрим теперь ток $\vec{j}_s(\vec{x}, t)$. Разложим поток $\phi(\vec{x} + \vec{\rho}, t)$ в (3.17) в ряд по степеням $\vec{\rho}$:

$$\phi(\vec{x} + \vec{\rho}, t) = \phi(\vec{x}, t) + \vec{\rho} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{x}} \phi(\vec{x}, t) + \dots \quad (3.21)$$

Если $\phi(\vec{x}, t)$ – достаточно гладкая функция, то, пренебрегая высшими производными, получим закон Фика:

$$\vec{j}_s(\vec{r}, t) = -\frac{\Sigma_s}{3\Sigma^2} \vec{\nabla} \phi(\vec{x}, t). \quad (3.22)$$

В рамках этих приближений уравнение баланса (3.17) становится дифференциальным уравнением второго порядка:

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\vec{x}, t) - L \vec{\nabla}^2 \phi(\vec{x}, t) = -\Sigma_a \phi(\vec{x}, t) + Q(\vec{x}, t), \quad (3.23)$$

где

$$L = \frac{\Sigma_s}{3\Sigma^2}, \quad \phi = v n.$$

При $Q = q$ оно известно как диффузионное уравнение в односкоростном приближении. Его анализ для системы, состоящей из активного вещества, замедлителя и нейтронов, был впервые проделан Ферми (1947).

3.4. Односторонние токи. Граничные условия на границе среда – вакуум

Частицы, пересекающие площадку ΔS в положительном направлении вектора \vec{n} , назовем *выходящими* из площадки ΔS , а соответствующую плотность тока обозначим через $j^{(-)}$. Частицы, пересекающие площадку ΔS в отрицательном направлении вектора \vec{n} , назовем *входящими* в площадку ΔS , а соответствующую плотность тока обозначим через $j^{(+)}$. Таким образом, имеем

$$\vec{n} \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = j^{(+)}(\vec{x}, t) - j^{(-)}(\vec{x}, t). \quad (3.24)$$

Величины $j^{(\pm)}(\vec{x}, t)$ принято называть односторонними токами. Они обычно удобны при постановке граничных условий. Если вещество, в котором переносятся нейтроны, граничит с вакуумом, причем поверхность

границы является прозрачной для нейтронов, то естественным требованием является равенство нулю тока $j^{(-)}$ на границе раздела. Пренебрегая временной задержкой, из (3.15) получаем

$$j_s^{(-)}(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi} \int_{\rho_3 > 0} \frac{\vec{n} \cdot \vec{\rho}}{\rho^3} \Sigma_s \phi(\vec{x} + \vec{\rho}, t - \rho/v) \exp(-\Sigma\rho) d\vec{\rho}. \quad (3.25)$$

Интегрирование ведется по области

$$0 \leq \frac{\vec{n} \cdot \vec{\rho}}{\rho} \leq 1.$$

В сферической системе координат с полярной осью вдоль вектора \vec{n} разложение потока по степеням $\vec{\rho}$ имеет вид

$$\begin{aligned} \phi(\vec{x} + \vec{\rho}, t) &= \phi(\vec{x}, t) + \rho \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial x_1} \phi(\vec{x}, t) + \\ &+ \rho \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial x_2} \phi(\vec{x}, t) + \rho \cos \theta \frac{\partial}{\partial x_3} \phi(\vec{x}, t) + \dots, \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$d\vec{\rho} = \rho^2 d\rho \sin \theta d\theta d\varphi.$$

После интегрирования по азимутальному углу φ второе и третье слагаемые в (3.26) исчезают и в результате, с точностью до высших производных,

$$j_s^{(\pm)}(\vec{x}, t) = \frac{\Sigma_s}{\Sigma} \left\{ \frac{1}{4} \phi(\vec{x}, t) \mp \frac{1}{6\Sigma} (\vec{n} \cdot \vec{\nabla}) \phi(\vec{x}, t) \right\}. \quad (3.27)$$

Отсюда следует закон Фика (3.22).

3.5. Точечный источник в среде с поглощением и рассеянием

Пусть в точке $\vec{x} = \vec{0}$ находится точечный источник нейтронов, испускающий в единицу времени q_0 нейтронов:

$$q(\vec{x}, t) = q_0 \delta(\vec{x}).$$

В среде с поглощением можно ожидать существования стационарного режима, при котором число нейтронов, поглощенных во всем пространстве в единицу времени, равно q_0 , т. е.

$$\int \Sigma_a \phi(\vec{x}, t) d\vec{x} = q_0. \quad (3.28)$$

В данном случае уравнение диффузии имеет вид

$$\vec{\nabla}^2 \phi(\vec{x}, t) - \chi^2 \phi(\vec{x}, t) = -q_0 \frac{\Sigma}{4\pi L} |\vec{x}|^{-2} \exp(-\Sigma|\vec{x}|), \quad (3.29)$$

где $\chi^2 = \Sigma_a/L$. Домножая (3.29) на L и интегрируя по всему пространству, получим

$$\lim_{R \rightarrow \infty} L \int_{S_R} (\vec{\nabla} \phi) \cdot d\vec{S} = \int \Sigma_a \phi(\vec{x}, t) d\vec{x} - q_0 = 0. \quad (3.30)$$

Таким образом, стационарный режим возможен, если существует решение уравнения (3.29), которое исчезает на бесконечности достаточно быстро для того, чтобы поверхностный интеграл в левой части (3.30) в пределе обращался в нуль. Искомое решение выражается через соответствующую функцию Грина

$$G(\vec{x} - \vec{\rho}) = - \frac{\exp[-\chi|\vec{x} - \vec{\rho}|]}{4\pi|\vec{x} - \vec{\rho}|}, \quad (3.31)$$

удовлетворяющую уравнению

$$\left[\vec{\nabla}_{\vec{x}}^2 - \chi^2 \right] G(\vec{x} - \vec{\rho}) = \delta(\vec{x} - \vec{\rho}).$$

Решением уравнения (3.29) будет свертка фундаментального решения (3.31) с правой частью (3.29):

$$\phi(\vec{x}) = \frac{\Sigma q_0}{(4\pi)^2 L} \int \rho^{-2} \exp(-\Sigma\rho) \frac{\exp[-\chi|\vec{x} - \vec{\rho}|]}{|\vec{x} - \vec{\rho}|} d\vec{\rho}. \quad (3.32)$$

Нетрудно увидеть, что это решение удовлетворяет условию (3.28). Решение можно упростить, если воспользоваться хорошо известным Фурье-преобразованием:

$$\frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp(-\chi\xi)}{\xi} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{\xi}) d\vec{\xi} = \frac{1}{k^2 + \chi^2}, \quad (3.33)$$

$$\frac{\exp(-\chi\xi)}{\xi} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{\exp(-i\vec{k} \cdot \vec{\xi})}{k^2 + \chi^2} d\vec{k}. \quad (3.34)$$

Подстановка (3.34) в (3.32) позволяет провести интегрирование по ρ и одному из углов. После несложных преобразований находим, что

$$\phi(\vec{x}) = \frac{\Sigma q_0}{4\pi L} \frac{\exp(-\chi|\vec{x}|)}{|\vec{x}|} g(\vec{x}), \quad (3.35)$$

где

$$g(\vec{x}) = \int_{\Sigma-\chi}^{+\infty} \frac{[1 - \exp(-t|\vec{x}|)]}{t(t+2\chi)} dt.$$

В случае слабого поглощения, когда $\Sigma - \chi > 0$, легко вычисляется асимптотика функции $g(\vec{x})$ при больших $|\vec{x}|$:

$$g(\vec{x}) \rightarrow \int_{\Sigma-\chi}^{+\infty} \frac{1}{t(t+2\chi)} dt = \frac{1}{2\chi} \ln \left[\frac{\Sigma + \chi}{\Sigma - \chi} \right] \quad (3.36)$$

при $|\vec{x}| \rightarrow \infty, \quad \Sigma - \chi > 0.$

В области малых $|\vec{x}|$ функция $g(\vec{x})$ имеет универсальное поведение независимо от знака $(\Sigma - \chi)$:

$$g(\vec{x}) = |\vec{x}| \{g_0 - \ln [|\vec{x}| (\Sigma + \chi)]\} + O(|\vec{x}|^2), \quad (3.37)$$

$$g_0 = \int_1^{\infty} \frac{[1 - e^{-y}]}{y^2} dy.$$

Для получения этого результата необходимо в выражении для $g(\vec{x})$ разбить интервал интегрирования $(\Sigma - \chi, +\infty)$ на две области $(\Sigma - \chi, |\vec{x}|^{-1})$ и $(|\vec{x}|^{-1}, +\infty)$, в каждой из которых легко найти асимптотическое поведение интеграла при малых $|\vec{x}|$.

3.6. Перенос в среде без поглощения и источников

В этом случае уравнение для потока $\phi(\vec{x}, t)$ имеет простой вид, совпадающий с уравнением теплопроводности:

$$\frac{\partial n(\vec{x}, t)}{\partial t} = D \vec{\nabla}^2 n(\vec{x}, t), \quad (3.38)$$

где $D = vL = v/(3\Sigma_s)$. Решение задачи Коши для (3.38) хорошо известно:

$$n(\vec{x}, t) = \int \omega(\vec{x} | \vec{y}, t) n(\vec{y}, 0) d\vec{y}, \quad (3.39)$$

где

$$\omega(\vec{x} | \vec{y}, t) = (4\pi Dt)^{-3/2} \exp \left[-\frac{(\vec{x} - \vec{y})^2}{4Dt} \right].$$

Функция $\omega(\vec{x} | \vec{y}, t)$ является ядром оператора эволюции и допускает наглядную интерпретацию на языке случайных блужданий. Ранее было

показано, что она определяет вероятность перехода за время t из точки \vec{y} в точку \vec{x} для гауссовского распределения случайных перемещений. В простейшем случае точечного начального распределения плотность нейтронов $n(\vec{y}, 0) = N \delta(\vec{y})$ равна

$$n(\vec{x}, t) = N (4\pi Dt)^{-3/2} \exp \left[-\frac{\vec{x}^2}{4Dt} \right]. \quad (3.40)$$

Сосредоточенные в начальный момент времени в точке $\vec{x} = \vec{0}$ нейтроны со временем диффундируют в остальное пространство, и, таким образом, можно говорить о распространении фронта диффузии. Найдем закон его движения из требования, чтобы на фронте односторонний входящий ток был равен нулю:

$$j^{(-)}(|\vec{x}| = R(t), t) = 0. \quad (3.41)$$

Подставляя решение (3.40) в выражение для тока $j^{(-)}$, получим

$$j^{(-)}(\vec{x}, t) = \frac{1}{4} \left\{ 1 - \frac{|\vec{x}|}{vt} \right\} \phi(\vec{x}, t), \quad (3.42)$$

откуда

$$R(t) = vt. \quad (3.43)$$

Таким образом, диффузионный фронт представляет собой сферу с радиусом $R(t)$, линейно растущим во времени.

Задача 3.6.1. Вычислить $n(\vec{x}, t)$ и $j^{(-)}(\vec{x}, t)$ для начального распределения

$$n(\vec{y}, 0) = n_0 \Theta(a - |\vec{y}|),$$

где $\Theta(\xi)$ — ступенчатая функция Хевисайда.

3.7. Среда с поглощением при наличии источника без рассеяния

Уравнение диффузии в этом случае вырождается в обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка по времени

$$\frac{\partial n(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\Sigma_a v n(\vec{x}, t) + Q(\vec{x}, t). \quad (3.44)$$

Его решение находится элементарно:

$$n(\vec{x}, t) = n(\vec{x}, 0) \exp[-\Sigma_a v t] + \exp[-\Sigma_a v t] \int_0^t Q(\vec{x}, \tau) \exp[-\Sigma_a v \tau] d\tau. \quad (3.45)$$

Здесь предполагается, что при $t < 0$ источников в среде не было. Дальнейшая конкретизация связана с выбором определенной модели источника $Q(\vec{x}, t)$.

3.8. Уравнение переноса пучков нейтронов в активной среде

В пунктах 3.1–3.7 мы рассмотрели процессы упругого рассеяния медленных нейтронов на ядрах поглотителя, а также процесс радиационного захвата нейтронов на этих ядрах. Были сделаны предположения, что источник тепловых нейтронов (энергия порядка $1/40$ eV) задается феноменологически и что при упругом рассеянии нейтронов меняется только направление их скорости. Модель, построенная на перечисленных предположениях, называется односкоростной моделью переноса, и ее основные положения также рассмотрены в п. 3.1–3.7.

Следующим шагом будет обобщение этой модели на случай, когда скорости нейтронов в пучке меняются по абсолютному значению в определенном интервале значений. Такая модель лежит в основе многоскоростной теории переноса. Основным недостатком односкоростной теории переноса является предположение о том, что все нейтроны обладают одинаковой энергией. Между тем известно, что при реакции деления ядер испускаются нейтроны высоких энергий, которые затем замедляются в результате соударения с ядрами замедлителя (замедлителем в теории реакторов называют вещество, в котором нейтроны слабо поглощаются, а при рассеянии на его ядрах достаточно быстро теряют свою энергию). Учет нейтронов высоких энергий имеет важное значение в теории ядерных реакторов, поскольку среднее расстояние по прямой, на которое смещается нейтрон в процессе замедления, связано с утечкой нейтронов из реактора и в конечном итоге имеет прямое отношение к критическим размерам реактора.

При выводе уравнения переноса пучка с энергетической зависимостью мы будем использовать результаты односкоростной модели переноса. Введем определение фазовой плотности нейтронов. Пусть $F(\Delta V, \Delta v, \Delta \Omega, t)$ — количество нейтронов в объеме ΔV около некоторой точки \vec{r} , абсолютные значения скоростей которых заключены в интервале $(v, v + \Delta v)$, а направления скоростей — в телесном угле $\Delta \Omega$ около некоторого направления $\vec{\Omega}$, и все это зафиксировано в момент времени t . Тогда фазовая плотность нейтронов $n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)$ определяется соотношением

$$F(\Delta V, \Delta v, \Delta \Omega, t) = n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) \Delta V \Delta v \Delta \Omega. \quad (3.46)$$

Фазовым потоком нейтронов назовем величину

$$\varphi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) = v n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t), \quad (3.47)$$

аналогично (3.1).

Перейдем к выводу уравнения переноса. Пусть имеется некоторая область, заполненная нейтронами. Выделим внутри этой области произвольный объем V и будем вести наблюдение только за теми нейтронами из области V , которые принадлежат пучку со скоростями в окрестности значения v и направлениями в окрестности $\vec{\Omega}$.

Убыль нейтронов из рассматриваемого пучка за промежуток времени Δt в объеме V выражается интегралом

$$\Delta N^{(-)} = \Delta v \Delta \Omega \Delta t \int_V \left[\varphi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) (\Sigma_a + \Sigma_s) + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \varphi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) \right] dV, \quad (3.48)$$

где характеристики убыли за счет поглощения нейтронов Σ_a и их рассеяния Σ_s введены так же, как в п. 3.1.

Прибыль нейтронов в рассматриваемый пучок может складываться из нейтронов, которые претерпели рассеяние с изменением скорости с \vec{v}' на \vec{v} . Для математического выражения этого факта введем в рассмотрение вероятность того, что нейтрон, имевший до акта рассеяния скорость \vec{v}' , приобретает в результате рассеяния скорость \vec{v} . В изотропной среде плотность этой вероятности ω , как и в односкоростном случае, не зависит от каждого из векторов $\vec{\Omega}$ и $\vec{\Omega}'$ в отдельности, а только от их скалярного произведения, т. е. $\omega = \omega(v, v', \vec{\Omega} \vec{\Omega}')$. По определению плот-

ности вероятности должно выполняться нормировочное соотношение

$$\int_0^{\infty} dv \int d\Omega \omega(v, v', \vec{\Omega}\vec{\Omega}') = 1. \quad (3.49)$$

Теперь можно записать прибыль нейтронов в наш пучок за счет рассеяния:

$$\Delta N_s^{(+)} = \Delta v \Delta\Omega \Delta t \int_V dV \int_0^{\infty} dv' \int d\Omega' \Sigma_s(v') \varphi(\vec{r}, v', \vec{\Omega}', t) \omega(v, v', \vec{\Omega}\vec{\Omega}'). \quad (3.50)$$

Однако прибыль нейтронов в данный пучок может быть обусловлена также реакцией деления ядер некоторых изотопов урана или плутония, которые могут находиться в изучаемой среде. Для простоты положим, что в среде находится только один делящийся изотоп. Обозначим через $\nu(v')$ среднее число вторичных нейтронов на один акт деления, вызванного в этом изотопе нейтроном со скоростью v' . Аналогично случаю рассеяния процесс деления можно охарактеризовать вероятностью того, что в результате захвата делящимся изотопом нейтрона с параметрами v' , $\vec{\Omega}'$ высвободившийся вторичный нейтрон будет иметь параметры нашего пучка (скорость в окрестности значения v и направление в окрестности $\vec{\Omega}$). Как показывает эксперимент, угловое распределение вторичных нейтронов сферически изотропно, т. е. не зависит от угла между векторами $\vec{\Omega}$ и $\vec{\Omega}'$. Обозначая плотность такой вероятности $\chi(v, v')/4\pi$, можно в следующем виде записать прибыль нейтронов в наш пучок за счет реакции деления:

$$\Delta N_d^{(+)} = \Delta v \Delta\Omega \Delta t \frac{1}{4\pi} \int_V dV \int_0^{\infty} dv' \nu(v') \Sigma_d(v') \chi(v, v') \int d\Omega' \varphi(\vec{r}, v', \vec{\Omega}', t). \quad (3.51)$$

Наконец, прибыль нейтронов в данный пучок может быть обусловлена функционированием внешнего (постороннего) источника нейтронов с плотностью $q(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)$. Вклад этого источника в пучок выразится интегралом

$$\Delta N_q^{(+)} = \Delta v \Delta\Omega \Delta t \int_V dV q(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t). \quad (3.52)$$

Полная прибыль нейтронов тогда

$$\Delta N^{(+)} = \Delta N_s^{(+)} + \Delta N_d^{(+)} + \Delta N_q^{(+)}. \quad (3.53)$$

Составляя из выражений для убыли и прибыли баланс нейтронов, можно записать уравнение переноса (кинетическое уравнение Больцмана) в виде

$$\begin{aligned}
\frac{1}{v} \cdot \frac{\partial \varphi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)}{\partial t} + \vec{\Omega} \vec{\nabla} \varphi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) + \Sigma(v) \varphi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) = \\
= \int_0^{\infty} \Sigma_s(v') dv' \int \omega(v, v', \vec{\Omega} \vec{\Omega}') \varphi(\vec{r}, v', \vec{\Omega}', t) d\Omega' + \\
+ \frac{1}{4\pi} \int_0^{\infty} \nu(v') \Sigma_a(v') \chi(v, v') dv' \int \varphi(\vec{r}, v', \vec{\Omega}', t) d\Omega' + \\
+ q(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t),
\end{aligned} \tag{3.54}$$

где

$$\Sigma(v) = \Sigma_a(v) + \Sigma_s(v).$$

На границе раздела сред имеем граничное условие

$$\vec{\Omega} \vec{n} \varphi(\vec{r} - 0, v, \vec{\Omega}, t) = \vec{\Omega} \vec{n} \varphi(\vec{r} + 0, v, \vec{\Omega}, t). \tag{3.55}$$

Формулировкой задачи (3.54) – (3.55) подведена математическая основа под многочисленные физические явления, так или иначе связанные с процессами взаимодействия нейтронов с веществом. Решение уравнения (3.54) связано уже с выбором механизма возникновения нейтронных пучков больших энергий, механизма рассеяния этих пучков на поглотителе до состояния тепловых нейтронов, а также механизма появления нейтронов из каких-то других внешних источников. Дальнейшее рассмотрение процессов переноса многоскоростных пучков должно проводиться в рамках конкретных моделей. К примеру, одним из применений теории переноса является изучение процесса распространения космических лучей в атмосфере. Особую роль в теории переноса играет задача прохождения мюонов через атмосферу и водную среду, а также прохождения нейтрино через Землю и водное пространство.

Заключение

В заключение отметим, что предмет «Физическая кинетика» занимает особое положение среди физических курсов, читаемых на физическом факультете Иркутского государственного университета. Изучение этой дисциплины предполагает, что студенты уже овладели основами классической механики, электродинамики, квантовой теории, термодинамики и статистической физики, и подводит своего рода итог процессу получения законченного образования по физическим специальностям. В известном смысле данный курс призван способствовать выработке целостного представления о совокупности различных разделов физики и их роли в построении современной картины реальных явлений.

В предлагаемом нами учебном пособии рассмотрены основные подходы к описанию неравновесных процессов, такие как уравнение Смолуховского, уравнение Фоккера–Планка, уравнение Больцмана, основное кинетическое уравнение Паули, уравнение Власова–Ландау и простейшие варианты уравнения переноса. Мы рассчитываем, что предлагаемое пособие окажется полезным в рамках завершения студентами процесса обучения базовым разделам общей и теоретической физики.

Литература

1. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая, Т.2 / Р. Балеску. – М.: “Мир”, 1978. – 399 с.
2. Квасников И.А. Термодинамика и статистическая физика, Т.3 Теория неравновесных систем / И.А. Квасников. – М.: Изд-во МГУ, 1987. – 447 с.
3. Коткин Г.Л. Лекции по статистической физике / Г.Л. Коткин. – Новосибирск: Изд-во НГУ, 1996. – 172 с.
4. Лифшиц Е.М. Физическая кинетика / Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. – М.: “Наука”, 1979. – 534 с.
5. Резибуа П. Классическая кинетическая теория жидкостей и газов / П. Резибуа, М. Де Ленер. – М.: “Мир”, 1980. – 424 с.
6. Смелов В.В. Лекции по теории переноса нейтронов / В.В. Смелов. – М.: “Атомиздат”, 1978. – 216 с.
7. Хуанг К. Статистическая механика / К. Хуанг. – М.: “Мир”, 1966. – 521 с.
8. Чандрасекар С. Стохастические проблемы в физике и астрономии / С. Чандрасекар. – М.: “ИЛ”, 1958. – 158 с.