

На прошлой лекции мы получили уравнение Больцмана в следующем виде:

Функция распределения F:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\bar{\mathbf{G}}}{m} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = I(\mathbf{v})$$

$I(\mathbf{v})$ - столкновение

$$I(\mathbf{v}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \omega(\bar{\mathbf{v}}, \bar{\mathbf{v}}_1, \bar{\mathbf{v}}', \bar{\mathbf{v}}_1') (f(\bar{\mathbf{v}}')f(\bar{\mathbf{v}}_1') - f(\bar{\mathbf{v}})f(\bar{\mathbf{v}}_1)) d\bar{\mathbf{v}}' d\bar{\mathbf{v}}_1' d\bar{\mathbf{v}}_1,$$

где

\mathbf{v}, \mathbf{v}_1 - это скорости двух частиц до столкновения;

$\bar{\mathbf{v}}, \bar{\mathbf{v}}_1$ - это скорости двух частиц после столкновения.

Напоминаем, что в этом случае у нас должны быть выполнены законы сохранения :

$$m\mathbf{v} + m\mathbf{v}_1 = m\mathbf{v}' + m\mathbf{v}_1'$$

Так как мы считаем что столкновения упругие, кинетическая энергия тоже должна остаться:

$$\frac{m\mathbf{v}^2}{2} + \frac{m\mathbf{v}_1^2}{2} = \frac{m\mathbf{v}'^2}{2} + \frac{m\mathbf{v}_1'^2}{2}$$

Наша цель - доказать H-теорему, которая показывает, что молекулярные процессы в силу некоторой присущей ей хаотичности идут таким образом, что направление стрелы времени у нас вполне однозначно определена, то есть несмотря на то, что мы вроде бы при выводе уравнения используем упругие столкновения, которые казалось бы обратимы, но вероятностный кусок уравнения, делает их необратимыми.

Для того чтобы получить эту H теорему, необходимо получить некоторые свойства интеграла столкновений. Для этого рассмотрим следующую величину:

$$I_\phi = \int_{-\infty}^{\infty} I(\bar{\mathbf{v}}) \phi(\bar{\mathbf{v}}) d\bar{\mathbf{v}}$$

Если подставить выражение для интеграла столкновения, мы получим следующее:

$$I_\phi = \int_{-\infty}^{\infty} \omega(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}', \mathbf{v}_1') * (f(\mathbf{v}')f(\mathbf{v}_1') - f(\mathbf{v})f(\mathbf{v}_1)) \phi(\mathbf{v}) d\mathbf{v}' d\mathbf{v}_1' d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v} =$$

$$\begin{aligned}
&= \int_b^a \int_a^b \psi(x, y) dx dy = \int_a^b \int_a^b \varphi(z, y) dz dy = \int_a^0 \int_a^0 \varphi(z, x) dz dx = \int_a^b \int_a^b \varphi(y, x) dy dx = \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \omega(v_1, v, v', v'_1) * (f(v)f(v'_1) - f(v_1)f(v))\varphi(v_1) dv' dv'_1 dv_1 dv = \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} I(v)\varphi(v_1) dv dv_1 dv' dv'_1
\end{aligned}$$

Считаем что вероятностная ω от прямого и обратного процесса одинакова, поэтому можем записать что в формуле выше:

$$\omega(v_1, v, v', v'_1) = \omega(v, v_1, v', v'_1) = \omega(v', v'_1, v, v_1)$$

То есть вероятность столкновения частиц со скоростями v, v_1 так чтобы получились скорости v', v'_1 равна вероятности столкновений частиц со скоростями v', v'_1 так чтобы получились скорости v, v_1 .

Тогда можем записать интеграл по другому:

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} \omega(v, v_1, v', v'_1) * (f(v)f(v_1) - f(v'_1)f(v'))\varphi(v') dv dv_1 dv' dv'_1 = \\
&= - \int_{-\infty}^{\infty} I(v)\varphi(v') dv dv_1 dv' dv'_1 = - \int_{-\infty}^{\infty} I(v)\varphi(v'_1) dv dv_1 dv' dv'_1
\end{aligned}$$

Значение I_φ можно записать по другому:

$$I_\varphi = \int_{-\infty}^{\infty} I(\bar{v})\varphi(\bar{v}) d\bar{v} = \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{\infty} I(v)(\varphi(v) + \varphi(v_1) - \varphi(v') - \varphi(v'_1)) dv dv' dv_1 dv'_1$$

Если интеграл выше окажется равным 0, тогда функция φ называется сумматорным инвариантом. В частности, в качестве сумматорного инварианта можно назвать скорость, $\varphi(v) = v, \varphi(v) = v^2$.

Введем функцию:

$$H(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, v, t) * \ln f(x, v, t) d\bar{v} d\bar{x}$$

Вспоминая теорию вероятностей, обращаем внимание на множество:

$$f \ln f$$

Оно у нас связано с информацией и грубо говоря различает количество информации.

Функция $H(t)$ характеризует информативность состояния распределения функции $f(x)$ на момент времени t , наша теорема Больцмана утверждает

следующее, что количество информации, которое у нас соответствует молекулярному состоянию может лишь только убывать.

Теорема Больцмана заключается в следующем:

$$\frac{dH}{dt} \leq 0$$

Для доказательства уравнение Больцмана умножим на величину $(1 + \ln f)$ и проинтегрируем.

$$\frac{\partial f}{\partial t} (1 + \ln f) = \frac{\partial}{\partial t} f \ln f = \frac{\partial f}{\partial t} \ln f + f \frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial t}$$

Аналогично с $\frac{\partial f}{\partial x}$ и с $\frac{\partial f}{\partial v}$.

$$\frac{\partial f \ln f}{\partial t} + v \frac{\partial f \ln f}{\partial x} + \frac{\bar{G}}{m} \frac{\partial f \ln f}{\partial v} = I(v)(1 + \ln f(x, v, t))$$

$\frac{\bar{G}}{m}$ - это массовые силы.

Теперь проинтегрируем по x и по v .

Поскольку интеграл производится по переменным x и v , $\frac{\partial}{\partial t}$ можно вынести за знак интеграла.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} f \ln f dv dx$$

От первого члена имеем $\frac{\partial H}{\partial t}$.

Для того, чтобы разобраться со вторым членом нам нужно при интегрировании по пространственным переменным произвести интегрирование по частям. Каждый член в отдельности будет иметь следующий вид:

$$\int_{-\infty}^{\infty} v \frac{\partial}{\partial x} f \ln f dx = v \frac{f \ln f}{\partial x} \Big|_{-\infty}^{\infty}$$

Мы считаем, что область, занятая газом, ограниченная. Тогда, когда мы интегрируем от $-\infty$ до ∞ , на бесконечности нет никаких частиц, и это 0.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{G_x}{m} \frac{\partial}{\partial v} f \ln f dv = \frac{G_x}{m} \frac{f \ln f}{\partial v} \Big|_{-\infty}^{\infty}$$

Массовые силы мы считаем не зависящими от скорости.

Таким образом,

$$\frac{\partial H}{\partial t} + 0 + 0 = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} I(v)(1 + \ln f(x, v, t)) dv \right] dx.$$

Тогда

$$\begin{aligned}\frac{\partial H}{\partial t} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{\infty} \omega(v, v_1, v', v'_1) (f(v')f(v'_1) - f(v)f(v_1)) \cdot \\ &\quad \cdot (\ln v + \ln v_1 - \ln v' - \ln v'_1) dv dv_1 dv' dv'_1 dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{\infty} \omega(v, v_1, v', v'_1) (f(v')f(v'_1) - f(v)f(v_1)) \ln\left(\frac{f(v)f(v_1)}{f(v')f(v'_1)}\right) dv dv_1 dv' dv'_1 dx\end{aligned}$$

Величина ω всегда неотрицательная.

Если величина $(f(v')f(v'_1) - f(v)f(v_1))$ положительная, то

$$f'f'_1 - ff_1 > 0, \text{ и тогда } \ln\left(\frac{f(v)f(v_1)}{f(v')f(v'_1)}\right) < 1.$$

Если же $(f(v')f(v'_1) - f(v)f(v_1))$ отрицательна, то $\ln\left(\frac{f(v)f(v_1)}{f(v')f(v'_1)}\right) > 1$.

Таким образом, подынтегральное выражение всегда отрицательное.

Следовательно $\frac{dH}{dt} \leq 0$. Что и требовалось доказать.

Уравнение механики сплошной среды для газовых сред может быть получено из уравнения Больцмана. Возьмем три величины: $m, mv, \frac{mv^2}{2}$.

Последовательно умножим ур-е Больцмана на эти величины и проинтегрируем по всем v .

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} m f dv + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial m v f}{\partial x} dv$$

Для простоты рассмотрим случай, когда объемные силы отсутствуют.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} m f dv + \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} m v f dv = \int_{-\infty}^{\infty} m I(v) dv = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{4} I(v) (m + m - m - m) dv = 0$$

Масса частиц, которые находятся в единичном объеме (т.е. плотность):

$$\int_{-\infty}^{\infty} m f(v) dv = \rho$$

Суммарный импульс газа (u - средняя скорость):

$$\int_{-\infty}^{\infty} m v f dv = \rho u$$

Получаем закон сохранения массы:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_x}{\partial x} + \frac{\partial \rho v_y}{\partial y} + \frac{\partial \rho v_z}{\partial z} = 0$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} m v_x f dv + \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} m v v_x f(v) dv &= \int_{-\infty}^{\infty} I(v) m v dv = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} I(v) (m v + m v_1 - m v' - m v'_1) dv \end{aligned}$$

По сути, вместо $I(v)$ нужно вписать выражение для $I(v)$ по 4 интегралам. Значение I_ϕ ранее было записано с ошибкой.

$$\begin{aligned} I_\phi &= \int_{-\infty}^{\infty} I(v) \phi(v) dv = \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{\infty} \omega(v, v_1, v', v'_1) (f(v') f(v'_1) - f(v) f(v_1)) (f(v) \\ &+ f(v)_1 - f(v') - f(v'_1)) dv dv_1 dv' dv'_1 \end{aligned}$$

Подынтегральное выражение зависит от 4-ёх переменных, а $I(v)$ только от одной.

Перепишем также для предыдущего интеграла:

$$\text{Пусть } A(v, v_1, v', v'_1) = \omega(v, v_1, v', v'_1) (f(v') f(v'_1) - f(v) f(v_1))$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} m v_x f dv + \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} m v v_x f(v) dv &= \int_{-\infty}^{\infty} I(v) m v dv = \int_{-\infty}^{\infty} A(m v + m v_1 - \\ &- m v' - m v'_1) dv dv_1 dv' dv'_1 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u_x + \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} m v_x^2 f(v) dv + \frac{\partial}{\partial y} \int_{-\infty}^{\infty} m v_x v_y f(v) dv +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial z} \int_{-\infty}^{\infty} v_x v_z f(v) dv = 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} v_i v_j f(v) dv$$

Для того, чтобы понять физический смысл этого интеграла разобьем скорость v на две составляющие:

$$v = c + u, \text{ где } u = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} m v f dv}{m \int_{-\infty}^{\infty} f dv} - \text{средняя скорость движения газов, а } c -$$

скорость хаотического движения молекул.

Тогда наш интеграл $\int_{-\infty}^{\infty} v_i v_j f(v) dv =$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} (c_i + u_i)(c_j + u_j) f(v) dv = \int_{-\infty}^{\infty} c_i c_j f(v) dv +$$

$$+ \int_{-\infty}^{\infty} c_i u_j f(v) dv + \int_{-\infty}^{\infty} c_j u_i f(v) dv + \int_{-\infty}^{\infty} u_i u_j f(v) dv$$

$\int_{-\infty}^{\infty} c_i c_j f(v) dv$ это перенос импульса за счет хаотического движения

молекул. Это ни что иное, как тензор напряжения.

$$\int_{-\infty}^{\infty} c_i c_j f(v) dv = -\pi_{ij}$$

Докажем, что член $\int_{-\infty}^{\infty} c_i u_j f(v) dv + \int_{-\infty}^{\infty} c_j u_i f(v) dv$ обратится в ноль:

$$\int_{-\infty}^{\infty} c_i u_j f(v) dv = u_j \int_{-\infty}^{\infty} (v_i - u_i) f(v) dv = u_j \int_{-\infty}^{\infty} v_i f(v) dv - u_i u_j^*$$

$$* \frac{p}{m} = u_j \frac{\int_{-\infty}^{\infty} m v_i f dv}{m} - \frac{u_i u_j p}{m}$$

Если вынести u_j , мы имеем равномерно распределенную величину c , которая при интегрировании от $-\infty$ до ∞ дает 0.

Для $\int_{-\infty}^{\infty} c_j u_i f(v) dv$ аналогично.

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_i u_j f(v) dv = p u_i u_j$$

$$\text{Тогда } \int_{-\infty}^{\infty} v_i v_j f(v) dv = -\pi_{ij} + p u_i u_j$$

Перенесем минус в правую часть и получим:

$$\frac{\partial p u_x}{\partial t} + \frac{\partial p u_x^2}{\partial x} + \frac{\partial p u_x u_y}{\partial y} + \frac{\partial p u_x u_z}{\partial z} = \frac{\partial \pi_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \pi_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \pi_{xz}}{\partial z}$$

Это уравнение импульса, которое мы получали, используя законы сохранения.

Для того, чтобы получить дифференциальное уравнение энергии необходимо домножить уравнение Больцмана на mv^2 . В результате получится скалярная величина:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{mv^2}{2} f(v) dv \quad - \quad \text{это полная энергия молекул в газовой среде.}$$

Запишем её как $\frac{\partial E}{\partial t}$ — она состоит из двух частей:

1) Кинетической энергии газа как единого целого $\frac{mu^2}{2}$

2) Тепловой энергии $\frac{mc^2}{2}$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} * \int_{-\infty}^{\infty} v_x \frac{mv^2}{2} f(v) dv + \frac{\partial}{\partial y} \int_{-\infty}^{\infty} v_y \frac{mv^2}{2} f(v) dv + \frac{\partial}{\partial z} \int_{-\infty}^{\infty} v_z \frac{mv^2}{2} f(v) dv = 0$$

Раскроем объем из выражений выше:

$$\int_{-\infty}^{\infty} U_x \frac{mv^2}{2} f(v) dv \quad \text{Разложим нашу скорость на скорость } u \text{ и скорость } c :$$

$$\frac{m(v+c)^2}{2} (v_x + c_x) = \frac{mv^2}{2}, \text{ из этого следует :}$$

$$1/2 \int_{-\infty}^{\infty} m [v^2 v_x + 2 v_1 c v_x + c^2 v_x + v^2 c_x + 2 v_1 c c_x + c^2 c_x] f(v) dv$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} m 2 v_1 c v_x f(v) dv \quad - \quad \text{обратится в ноль.}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} m v^2 c_x f(v) dv \quad - \quad \text{обратится в ноль.}$$

В результате мы получаем :

$$1/2 p v^2 * u_x + m v_x \int_{-\infty}^{\infty} c^2 f(v) dz + \int_{-\infty}^{\infty} 2 v_1 c c_x f(v) dv + \int_{-\infty}^{\infty} c^2 c_x f(v) dv$$

Первые два члена дают из уравнения выше дают вместе:

$p (v_1^2 / 2 + \int_{-\infty}^{\infty} c^2 f(v) dz / 2) u_x$ - это не что иное, как полная энергия.

Полная энергия - сумма как направленного движения плюс сумма кинетической энергии хаотического движения.

Далее:

$f(v) dv = \int_{-\infty}^{\infty} (v_x^2 c_x^2 + v_y c_y c_x + c_z c_z + 1/2 c^2 c_x) f(v) dv$, запишем

следующее:

$v_x \int_{-\infty}^{\infty} c_x c_y f(v) dv + v_y \int_{-\infty}^{\infty} c_x c_z f(v) dv + v_z \int_{-\infty}^{\infty} c_x c_z f(v) dv$. решением

будет - $\int c_x c_x, \int c_x c_y, \int c_y c_z$ под компонентой тензор напряжений.

Получается следующее : $\frac{\partial}{\partial x} (U_x \pi_{xy} + U_y \pi_{xy} + U_z \pi_{yz})$.

Рассмотрим $1/2 c^2 c_x$, где :

- 1) c_x - компонента некоторого вектора $c_x c_y c_z$
- 2) $1/2 c^2$ - полная хаотическая энергия - это компонента соответствующая вектору теплового потока :

$$q = m \int_{-\infty}^{\infty} c^2 f(v) dz$$

И вот мы получили уравнение энергии:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial f} + \frac{\partial}{\partial x} U_x E + \frac{\partial}{\partial y} U_y E + \frac{\partial}{\partial z} U_z E = \frac{\partial}{\partial x} (U_x \pi_{xx} + U_y \pi_{xy} + U_z \pi_{yz}) - \frac{\partial}{\partial x} U_x + \\ + \frac{\partial}{\partial y} (U_y \pi_{yx} + U_y \pi_{yy} + U_z \pi_{yz}) - \frac{\partial}{\partial y} U_y + \frac{\partial}{\partial z} (U_y \pi_{zx} + U_y \pi_{zy} + U_z \pi_{zz}) - \frac{\partial U_z}{\partial z} \end{aligned}$$

Данное уравнение в точности совпадает с уравнениями механики сплошной среды, только там теплового потока не было, мы его считали равным 0.

Для того чтобы всё это дело замкнуть в системе, нам нужны выражения для π_{xx} , для теплового потока. Данные выражения выводятся с

использованием конкретных формул функций распределения. В частности

если у нас есть распределение Максвелла, то тогда мы получим уравнение Эйлера. Мы получим, что : диагональные компоненты, внедиагональные компоненты, тензор напряжения равны 0 и получим связь между давлением температуры и плотностью, как уравнение

Клапейрона-Менделеева.

Для того чтобы учесть более тонкие эффекты, нам нужна другая функция распределения. Максвелловская функция распределения удовлетворяет уравнению Больцмана, но она только для постоянных динамических величин. Функцией Максвелла выводимы только локальные Максвелловские функции, которые связаны с конкретными распределениями динамических величин таких как температура, скорость газа, плотность в которые входят распределение Максвелла по пространству.

Уже не будет она удовлетворять уравнению Больцмана.

Построим функцию распределения, которая удовлетворяет такому уравнению:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + V \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{G}{m} \frac{\partial f}{\partial v} = - V(f - f_{M,L})$$

Это уравнение называется уравнением Бхатнагара-Гросса-Крука и оно часто используется, как первое приближение уравнению Больцмана

ВОПРОСЫ К ЗАЧЕТУ

1. Два способа исследования естественных явлений и особенностей.
2. Понятие вычислительного эксперимента.
3. Общая схема ВЭ и ее основные этапы.
4. Особенности вычислительных алгоритмов, использование в ВЭ.
5. Особенности анализа результатов ВЭ.
6. Исследование ??? Консервативность выч. алгоритма.
7. Использование законов сохранения для научных математических моделей.
8. Приближение МСС.
9. Приближения газовой динамики (с уравнениями Грина).

10. Условие Гюгонио.
11. Условие эволюционности ударных волн.
12. Уравнения для энтропии.
13. Автомодельные решения задач.
14. Принцип наименьшего действия в классической механике.
15. Теорема Нетер.
16. Принцип наименьшего действия в электродинамике.
17. Вывод ур-я движения заряда в некотором магнитном поле.
18. Электромагнитное поле?.
19. Вторая пара уравнений Максвелла.
20. Электромагнитные волны (??? волна).
21. Монохроматическая волна.
22. Ф-ция распределения и ее свойства. Кинетическое ур-е?.
23. Интеграция и ее свойства.
24. Теорема Больцмана.
25. Вывод уравнений газовой динамики из кинетического ур-я.
26. Распределение Максвелла.
27. Уравнение Бхатнагара–Гросса–Крука.