

Pernašos teorija ir Boltzmano kinetinė lygtis

- Įvadas

- Elementari pernašos teorija

 - Maksvelo-Boltzmano skirstinys

 - Vidutinis laisvo lėkio kelias

 - Susidūrimų dažnis

 - Savidifuzija (self-diffusion)

 - Klampos ir šiluminio laidumo koeficientai

- Boltzmano kinetinė lygtis

 - Pagrindinės prielaidos

 - Poriniai dalelių susidūrimai

 - Susidūrimų narys ir Boltzmano kinetinė lygtis

 - Boltzmano H – teorema

Pernašos teorija ir Boltzmano kinetinė lygtis

Pusiausvyrinis Boltzmano lygties sprendinys

Termodinamikos dėsniai

Pusiausvyrinis sprendinys esant išoriniam laukui

- **Tvermės dėsniai ir hidrodinaminės lygtys**

Tvermės dėsniai

Vietinė pusiausvyra ir hidrodinaminės lygtys

- nulinis artinys

- pirmas artinys

- pernašos koeficientai

- klampiųjų dujų (skysčio) hidrodinaminės lygtys

- **Boltzmano kinetinės lygties pagrindimas**

Liouvilio lygtis

BBGKY (Bogoliubov, Born, Green, Kirkwood, Yvon) lygčių grandinė

Įvadas (I)

- Šiame skyriuje nagrinėsime **mikroskopinę išretintų dujų teoriją**, kai sistema yra **arti termodinaminės pusiausvyros**. Mes tarsime, kad **išoriniai laukai yra maži ir lėtai kinta laike**. Tuomet galima teigti, kad **bet kurioje mažoje erdvės srityje sistema yra termodinaminėje pusiausvyroje (vietinėje pusiausvyroje) ir jos būseną galima charakterizuoti termodinaminiais kintamaisiais**. Tačiau šių termodinaminių kintamųjų vertės yra skirtingos skirtinguose erdvės taškuose.
- Nepusiausvyrinės sistemos sugrįžimas į termodinaminės pusiausvyros būseną yra sąlygotas **tarpmolekulinių dūžių** ir paprastai vyksta **dviem** (arba daugiau) **etapais**. Kintamieji, kurie kinta tarpmolekulinio dūžio metu greitai (per keletą dūžių) pasiekia pusiausvyrą, o kintamieji kurie nekinta dūžio metu (**dūžių invariantai arba tvarieji dydžiai**) ilgesnį laiką lieka nepusiausvyrinėje būsenoje. Todėl po trumpo pereinamo proceso **nepusiausvyrinę būseną galima aprašyti kintamaisiais, kurie nekinta tarpmolekulinių dūžių metu**. Dinaminės lygtys aprašančios tvariųjų dydžių (invariantų) tankius vadinamos **hidrodinaminėmis lygtimis**.
- Nekintantys dūžių metu dydžiai (tvarieji dydžiai) yra **pilnas dalelių skaičius, pilnas impulsas ir pilnoji energija**. Jeigu šių dydžių tankiai nehomogeniškai pasiskirstę erdvėje, tai turi egzistuoti tų dydžių srautai, pernešantys tuos dydžius iš vienos sistemos dalies į kitą, nes ilgainiui sistema turi pasiekti termodinaminę pusiausvyrą. Charakteringi laikai, per kuriuos sistema pasiekia termodinaminę pusiausvyrą apibūdinami vadinamaisiais **pernašos koeficientais (transport coefficients)**.

- Kai nuokrypiai nuo pusiausvyros maži, tai tiriamų dydžių srautai proporcingi atitinkamų dydžių gradientams, kurie tuos srautus sukėlė. Pernašos koeficientais vadinami šio proporcingumo ryšio konstantos, t.y.

$$\boxed{\text{Tvaraus dydžio tankio } \textbf{SRAUTAS}} = \boxed{\textbf{PERNAŠOS KOEFICIENTAS}} \times \boxed{\text{Tvaraus dydžio tankio } \textbf{GRADIENTAS}}$$

Pavyzdys (Fiko dėsnis):
$$j_d = -D \frac{\partial n}{\partial x}$$

- Pernašos teorijos tikslas yra išvesti hidrodinamines lygtis ir apskaičiuoti pernašos koeficientus, t.y. išreikšti juos per mikroskopinius dujų parametrus.**
- Intuityviam pernašos reiškinių supratimui, mes pradžioje pateiksime elementarią pernašos teoriją. Remiantis paprasta vidutinio laisvo lėkio kelio samprata mes išvesime **savidifuzijos, klampos ir šiluminio laidumo koeficientų** formules.
- Tikslesnė pernašos reiškinių teorija remiasi **Boltzmano kinetine lygtimi**. Ši lygtis išvedama iš pirmųjų principų, t.y. remiantis mikroskopinėmis dalelių judėjimo lygtimis, kurios yra apgrėžiamos laike. Tačiau pati Boltzmano lygtis yra neapgrėžiama laike. Iš jos išplaukia entropijos didėjimo dėsnis (**Boltzmano H – teorema**), kuris nusako sistemos artėjimą prie pusiausvyros.
- Panaudodami Boltzmano kinetinę lygtį, mes išvesime hidrodinamines lygtis, aprašančias tvariųjų dydžių dinamiką, ir pakartotinai aptarsime pernašos koeficientų išvedimą.

Elementari pernašos teorija (I)

- Elementari pernašos teorija grindžiama paprasta laisvo lėkio kelio samprata ir remiasi tikimybių teorijos argumentais. Jos rezultatai visiškai nepriklauso nuo tarpdalelinės sąveikos tipo. Daroma vienintelė prielaida, kad vidutinis atstumas tarp dalelių yra žymiai didesnis už charakteringą tarpmolekulinės sąveikos atstumą.

Maksvelo-Boltzmano skirstinys

- Tarkime, kad tūryje V yra išretintos dujos sudarytos iš N dalelių. Tegul dujos yra pusiausvyroje ir dalelių kinetinė energija yra žymiai didesnė už dalelių tarpusavio sąveikos energiją. Tuomet iš pusiausvyrinės statistinės fizikos žinome, kad tikimybė surasti sistemą fazinės erdvės taške $(\vec{p}^N, \vec{q}^N) \equiv (\vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N, \vec{q}_1, \vec{q}_2, \dots, \vec{q}_N)$ nusakoma **Gibso tankio funkcija (kanoninis skirstinys)**

$$\rho(\vec{p}^N, \vec{q}^N) = \frac{\exp\left(-\beta \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}\right)}{\int d\vec{p}^N \int d\vec{q}^N \exp\left(-\beta \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}\right)}$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$d\vec{p}^N d\vec{q}^N \equiv d\vec{p}_1 \times \dots \times d\vec{p}_N \times d\vec{q}_1 \times \dots \times d\vec{q}_N$$

- Tikimybės tankis $\rho(\vec{p}_1)$, kad 1 –os dalelės impulsas yra $\vec{p}_1$ surandamas integruojant Gibso paskirstymo funkciją pagal visų dalelių koordinates $d\vec{q}_1 \times \dots \times d\vec{q}_N$ ir pagal impulsus $d\vec{p}_2 \times \dots \times d\vec{p}_N$:

$$\rho(\vec{p}_1) = \int \dots \int d\vec{p}_2 \times \dots \times d\vec{p}_N \times d\vec{q}_1 \times \dots \times d\vec{q}_N \rho(\vec{p}^N, \vec{q}^N) = \left(\frac{\beta}{2\pi m} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\beta p_1^2}{2m} \right)$$

- Iš čia galima nesunkiai užrašyti tikybės tankį $F(\vec{v}_1)$, kad 1 dalelės greitis yra $\vec{v}_1$

$$\left(\vec{v}_1 = \frac{\vec{p}_1}{m} \right)$$

$$F(\vec{v}_1) = \left(\frac{m\beta}{2\pi} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\beta m v_1^2}{2} \right)$$

– Maksvelo-Boltzmano skirstinys

Ši funkcija normuota į vienetą, kai integruojama pagal $\vec{v}_1$. Kartais dar reikia žinoti tikimybės tankio funkciją $f(v_1)$, kad dalelės greičio modulis yra $v_1 = |\vec{v}_1|$

$$f(v_1) = 4\pi v_1^2 F(\vec{v}_1) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} (m\beta)^{3/2} v_1^2 \exp\left(-\frac{\beta m v_1^2}{2} \right)$$

Vidutinis laisvo lėkio kelias

- Vidutinis laisvo lėkio kelias yra vidutinis kelias, kurį dalelė nueina tarp dviejų gretimų susidūrimų. Mes tariame, kad dujose dūžiai yra atsitiktiniai. Mūsų tikslas yra surasti tikimybę, kad dalelė nueis atstumą r be dūžių.
- Kadangi susidūrimai yra atsitiktiniai, dalelė turi vienodus šansus susidurti bet kurioje vietoje. Pažymėkime

$1/\lambda$ – vidutinis susidūrimų skaičius, kurį dalelė patiria vienetinio ilgio intervale

$P_0(r)$ – tikimybė, kad intervale $[0, r]$ dalelė nepatirs nė vieno susidūrimo.

Tuomet

dr/λ – tikimybė, kad dalelė susidurs intervale dr

$(1-dr/\lambda)$ – tikimybė, kad dalelė nesusidurs intervale dr

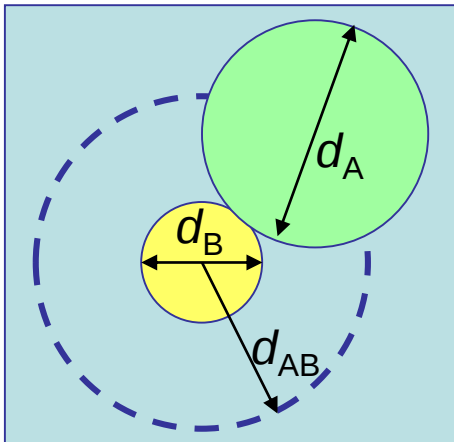
$P_0(r+dr) = P_0(r)(1-dr/\lambda)$ – tikimybė, kad dalelė nesusidurs intervale $[0, r+dr]$

$$\frac{d}{dr} P_0(r) = -\frac{1}{\lambda} P_0(r) \Rightarrow \boxed{P_0(r) = e^{-r/\lambda}} \Rightarrow \langle r \rangle = \int_0^\infty r P_0(r) \frac{dr}{\lambda} = \lambda$$

Vidutinis laisvo lėkio kelias

Susidūrimų dažnis

- Tarkime, kad dujos sudarytos iš dviejų rūšių dalelių A ir B. Tegul dalelių A masė m_A , diametras d_A , ir tankis n_A , o dalelių B masė m_B , diametras d_B , ir tankis n_B . Dalelės atsitiktinai pasiskirsčiusios erdvėje, o jų greičių pasiskirstymas tenkina Maksvelo-Boltzmano skirstinio dėsnį. Mūsų **tikslas yra nustatyti vidutinį dalelių A ir B susidūrimų dažnį.**



$$d_{AB} = \frac{d_A + d_B}{2} \quad \text{– dalelių A ir B sąveikos sferos spindulys}$$

Vidutinis reliatyvus dalelių A ir B greitis:

$$\langle v_r \rangle_{AB} = \int d\vec{v}_A \int d\vec{v}_B F(\vec{v}_A) F(\vec{v}_B) |\vec{v}_A - \vec{v}_B|$$

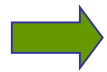
Šį greitį lengviau apskaičiuoti perėjus prie masių centro koordinatų sistemos:

$$\vec{V}_{mc} = \frac{m_A \vec{v}_A + m_B \vec{v}_B}{m_A + m_B} \quad \text{– dalelių A ir B masių centro greitis}$$

$$\vec{v}_r = \vec{v}_A - \vec{v}_B \quad \text{– reliatyvus dalelių A ir B greitis}$$

- Nesunku patikrinti, kad transformacijos $(\vec{v}_A, \vec{v}_B) \rightarrow (\vec{v}_r, \vec{V}_{mc})$ jakobianas lygus 1. Todėl skaičiuojant vidutinį reliatyvų greių integravimą pagal $(\vec{v}_A, \vec{v}_B)$ galime pakeisti integravimu pagal $(\vec{v}_r, \vec{V}_{mc})$:

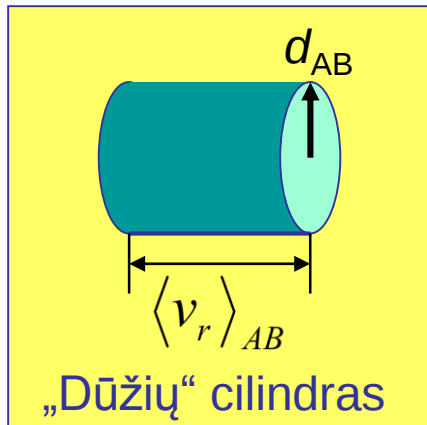
$$\langle v_r \rangle_{AB} = \left(\frac{\beta M_{AB}}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{\beta \mu_{AB}}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \int d\vec{v}_r \int d\vec{V}_{mc} |\vec{v}_r| \exp \left[-\frac{\beta}{2} (M_{AB} V_{mc}^2 + \mu_{AB} v_r^2) \right]$$



$$\langle v_r \rangle_{AB} = \left(\frac{8k_B T}{\pi \mu_{AB}} \right)^{1/2}$$

$$\mu_{AB} = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B} \quad \text{– dalelių A ir B redukuota masė}$$

$$M_{AB} = m_A + m_B \quad \text{– dalelių A ir B pilna masė}$$



- Tarkime, kad dalelės B nejuda, o dalelės A juda reliatyviu greičiu $\langle v_r \rangle_{AB}$. Tuomet per vieną sekundę dalelė A vidutiniškai patirs tiek dūžių kiek yra B dalelių pavaizduotame cilindre, t.y. **vidutinis dalelės A susidūrimo dažnis su B dalelėmis** yra:

$$f_{AB} = n_B \pi d_{AB}^2 \langle v_r \rangle_{AB} = n_B \pi d_{AB}^2 \left(\frac{8k_B T}{\pi \mu_{AB}} \right)^{1/2}$$

- Pilnas dalelių A ir B susidūrimų skaičius vieneto tūryje per vieną sekundę:**

$$\nu_{AB} = n_A f_{AB} = n_A n_B \pi d_{AB}^2 \langle v_r \rangle_{AB} = n_A n_B \pi d_{AB}^2 \left(\frac{8k_B T}{\pi \mu_{AB}} \right)^{1/2}$$

Jeigu dalelės identiškos, tai šią formulę reikia padalinti iš 2, nes joje kiekviena dalelė įskaitoma du kartus

$$\nu_{AA} = \frac{1}{2} n_A^2 \pi d_{AA}^2 \langle v_r \rangle_{AA} = \frac{1}{2} n_A^2 \pi d_{AA}^2 \left(\frac{16k_B T}{\pi m_A} \right)^{1/2}$$

- Identiškoms dalelėms **vidutinis laisvo lėkio kelias** λ gaunamas, vidutinį dalelės greitį $\langle v \rangle$ padalinus iš vidutinio vienos dalelės susidūrimo dažnio f_{AA} :

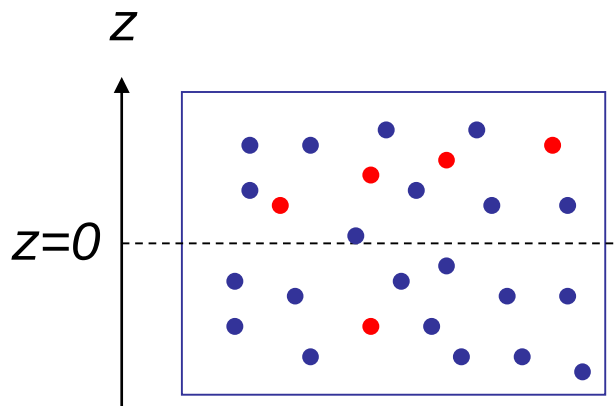
$$\lambda = \frac{\langle v \rangle}{f_{AA}} = \langle v \rangle \tau = \frac{\langle v \rangle}{n_A \pi d_{AA}^2 \langle v_r \rangle_{AA}} = \frac{1}{\sqrt{2} n_A \pi d_{AA}^2}$$

Čia $\tau = 1/f_{AA}$ yra **vidutinis laisvo lėkio laikas**. Mes panaudojome paprastą sąryšį tarp vidutinio $\langle v \rangle$ ir vidutinio reliatyvaus $\langle v_r \rangle_{AA}$ greičių:

$$\langle v \rangle = \int d\vec{v} F(\vec{v}) |\vec{v}| = \frac{m_A \beta}{2\pi} \int d\vec{v} \exp\left(-\frac{\beta m_A v^2}{2}\right) |\vec{v}| = \left(\frac{8k_B T}{\pi m_A} \right)^{1/2} = \frac{\langle v_r \rangle_{AA}}{\sqrt{2}}$$

Savidifuzija (Self-diffusion)

- Remiantis elementaria pernašos teorija išvesime savidifuzijos koeficiento D išraišką. Nagrinėsime dujas sudarytas iš identiškų dalelių, tačiau tarsime, kad **nedidelė dalelių dalis yra pažymėta** koku nors žymekliu, kuris nekeičia dalelės fizinių savybių, pavyzdžiui, dalis dalelių yra radioaktyvios. Teoriniuose samprotavimuose mes tiesiog tarsime, kad pažymėtos dalelės yra kitos spalvos (raudonos).
- Jeigu pradiniu momentu pažymėtų dalelių pasiskirstymas yra netolygus, tai dėl difuzijos pažymėtos dalelės turės artėti prie homogeninio pasiskirstymo. Charakteringas šio artėjimo laikas apspręstas **savidifuzijos koeficientu D** . Mūsų tikslas nustatyti šio koeficiento išraišką.



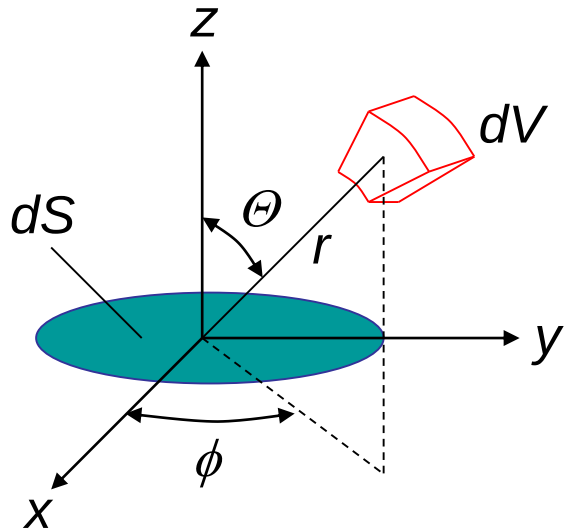
Prielaidos:

$n = \text{const}(z)$ – pilna dalelių koncentracija
nepriklauso nuo z

$n_p = n_p(z)$ – pažymėtų (raudonų) dalelių koncentracija **priklauso** nuo z .

$n_p(z) \ll n$ – pažymėtų dalelių yra nedaug.

Elementari pernašos teorija (VIII)



- Surasime pažymėtų dalelių skaičių, kurios per vieną sekundę susiduria tūrelyje $dV = r^2 dr \sin \Theta d\Theta d\phi$ ir be dūžių pasiekia plotelį dS ties $z=0$.

- Mes tariame, kad susidūrusių tūrelyje dV dalelių judėjimo kryptys yra atsitiktinės (vienoda tikimybė juda bet kuria kryptimi).

- Tikimybė, kad susidūrusi dalelė pasieks plotelį dS yra $e^{-r/\lambda}$ (tikimybė kad ji nesusidurs atstume r).

$$f n_p(z) dV = \frac{\langle v \rangle}{\lambda} n_p(z) dV \quad - \text{vidutinis pažymėtų dalelių skaičius, kurios per vieną sekundę susiduria tūrelyje } dV.$$

f – vienos dalelės susidūrimų dažnis.

$$\frac{d\Omega}{4\pi} = \frac{dS |\cos \theta|}{4\pi r^2} \quad - \text{santykinė susidūrusių dalelių dalis judančių plotelio } dS \text{ kryptimi.}$$

$d\Omega$ – erdvinis kampas, išeinantis iš centrinio dV tūrelio taško ir gaubiantis plotelį dS .

$$dn_p(\vec{r}) = \left(\frac{\langle v \rangle n_p(z) dV}{\lambda} \right) \left(\frac{dS |\cos \theta|}{4\pi r^2} \right) e^{-r/\lambda} \quad - \text{vidutinis pažymėtų dalelių skaičius, kurios per vieną sekundę susiduria tūrelyje } dV \text{ ir pasiekia plotelį } dS \text{ be papildomų susidūrimų.}$$

- Pilnas pažymėtų dalelių skaičius, iš viršaus ($z>0$) per vieną sekundę pasiekusių vienetinį plotą plokštumoje $z=0$, gaunamas integruojant pagal visą tūrį $z>0$:

$$\dot{N}_+ = \frac{\langle v \rangle}{4\pi\lambda} \int_0^\infty r^2 dr \int_0^{\pi/2} \sin \Theta d\Theta \int_0^{2\pi} d\phi n_P(z) \cos \theta \frac{e^{-r/\lambda}}{r^2}$$

- Analogiškai galima apskaičiuoti dalelių skaičių, pasiekusių plokštumą $z=0$ iš apačios $z<0$. Dėl to viršutinėje formulėje reikia $|\cos \theta|$ pakeisti į $-\cos \theta$ ir integravimą pagal θ atlikti režiuose $\theta = [\pi/2, \pi]$:

$$\dot{N}_- = -\frac{\langle v \rangle}{4\pi\lambda} \int_0^\infty r^2 dr \int_{\pi/2}^\pi \sin \Theta d\Theta \int_0^{2\pi} d\phi n_P(z) \cos \theta \frac{e^{-r/\lambda}}{r^2}$$

- Pilnas pažymėtų dalelių skaičius perneštų per plokštumos $z=0$ ploto vienetai iš viršutinės srities į apatinę per vieną sekundę yra:

$$(\dot{N}_+ - \dot{N}_-) = \frac{\langle v \rangle}{4\pi\lambda} \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin \Theta d\Theta \int_0^{2\pi} d\phi n_P(z) \cos \theta \frac{e^{-r/\lambda}}{r^2}$$

- Jeigu pažymėtų dalelių koncentracijos pokyčiai z kryptimi yra nedideli, tai $n_p(z)$ galima išskleisti Teiloro eilute ties $z=0$:

$$n_p(z) = n_p(0) + z \left(\frac{\partial n_p}{\partial z} \right)_0 + \frac{z^2}{2} \left(\frac{\partial^2 n_p}{\partial z^2} \right)_0 + \dots$$

Kadangi $n_p(z)$ yra lėtai kintanti z funkcija ir $(\dot{N}_+ - \dot{N}_-)$ integralo išraiškoje yra daugiklis $e^{-r/\lambda}$, tik mažos z vertės ($z \approx \lambda$) duos indėlį į integralą. Todėl $n_p(z)$ skleidime galime apsiriboti keliais pirmais nariais. Čia apsiribojame trim nariais.

- Nesunku įsitikinti, kad pirmo ir trečio $n_p(z)$ nario indėlis į $(\dot{N}_+ - \dot{N}_-)$ integralą lygus nuliui. Indėlį duoda tik antras skleidimo narys:

$$\begin{aligned} (\dot{N}_+ - \dot{N}_-) &= \frac{\langle v \rangle}{4\pi \lambda} \left(\frac{\partial n_p}{\partial z} \right)_0 \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin \Theta d\Theta \int_0^{2\pi} d\phi z \cos \theta \frac{e^{-r/\lambda}}{r^2} \\ &= \frac{\langle v \rangle}{2 \lambda} \left(\frac{\partial n_p}{\partial z} \right)_0 \int_0^\infty e^{-r/\lambda} r dr \int_0^\pi \sin \Theta \cos^2 \Theta d\Theta = \frac{\langle v \rangle \lambda}{3} \left(\frac{\partial n_p}{\partial z} \right)_0 \end{aligned}$$

- Taigi mes gavome, kad pažymėtų dalelių srautas, kertančių vienetinį plotą per vieną sekundę teigiama z kryptimi yra

$$j_D(z) = -D \frac{\partial n_p(z)}{\partial z},$$

$$D = \frac{\langle v \rangle \lambda}{3}$$

Čia D yra savidifuzijos koeficientas (self-diffusion coefficient).

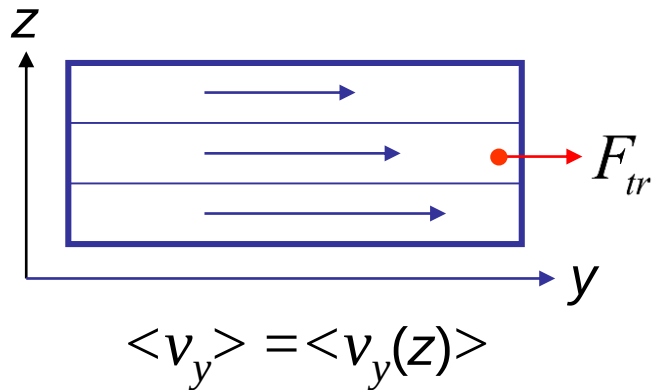
- Pažymėtoms dalelėms galioja tolydumo lygtis ir todėl $n_p(z, t)$ tenkina difuzijos lygtį:

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} = -\frac{\partial j_D}{\partial z} = D \frac{\partial^2 n_p}{\partial z^2},$$

Šios formulės gautos iš labai paprastų prielaidų, tačiau jos gerai kokybiškai aprašo išretintų dujų eksperimentinius rezultatus.

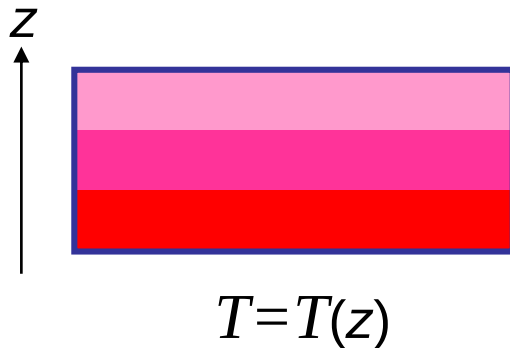
- Toliau mes panagrinėsime dar du pernašos koeficientus – klamos ir šiluminio laidumo. Mes parodysime, kad visus pernašos koeficientus galima gauti remiantis paprastais bendrais samprotavimais.

Klamos ir šiluminio laidumo koeficientai



- Jeigu skirtingi dujų (arba skysčio) sluoksniai juda skirtingais greičiais, tai „trintis“ (klampa) tarp skirtingų sluoksnių suvienodins dalelių greičius ir sistema pasieks termodinaminę pusiausvyrą. Šiuo atveju pernešamas vidutinis greitis (impulsas). Jo pernešimo intensyvumas charakterizuojamas **klamos koeficientu** η

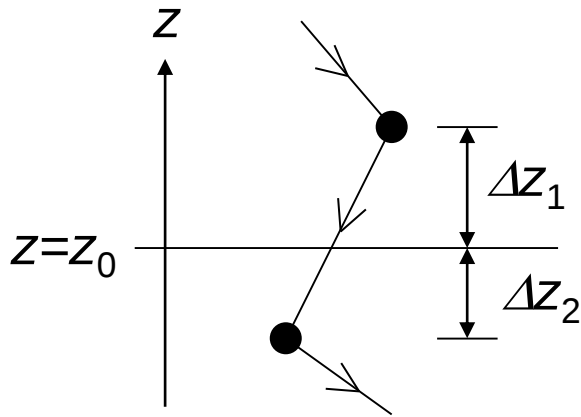
$$j_{m\langle v \rangle} = -\eta \frac{\partial \langle v_y(z) \rangle}{\partial z} = F_{tr}$$



- Jeigu skirtingi dujų (arba skysčio) sluoksniai turi skirtingą kinetinę energiją (temperatūrą), tai dėl kinetinės energijos pernašos vidutinė kinetinė energija išsilygins ir sistema pasieks termodinaminę pusiausvyrą. Temperatūros pernašos greitis charakterizuojamas **šiluminio laidumo koeficientu** K

$$j_Q = -K \frac{dT}{dz}$$

Elementari pernašos teorija (XIII)



• Visiems pernašos reiškiniams galima taikyti vieningą teoriją. Tarkime, kad dydis $A=A(z)$, charakterizuojantis tam tikrą **molekulių savybę**, kinta išilgai z ašies. Nubrėškime dujose plokštumą $z=z_0$. Kai dalelė kerta šią plokštumą, ji perneša vertę $A(z)$, įgytą paskutinio susidūrimo metu, ir perduoda ją kitai daleliai sekančio susidūrimo metu.

• Tariame, kad atstumai Δz_1 ir Δz_2 proporcingi vidutiniam laisvo lėkio keliui λ :

$$\Delta z_1 = a_1 \lambda, \quad \Delta z_2 = a_2 \lambda$$

Vidutinis dalelių skaičius, kertantis vienetinį plokštumos $z=z_0$ plotą per vieną sekundę, yra $n\langle v \rangle$. Todėl dydžio A perneštas kiekis per vieną sekundę teigiama z kryptimi bus:

$$n\langle v \rangle [A(z_0 - \Delta z_2) - A(z_0 + \Delta z_1)] = -(a_1 + a_2) n\langle v \rangle \lambda \frac{dA}{dz}$$

Tai reiškia, kad dydžio A srautas teigiama z kryptimi yra:

$$j_A(z) = -bn\langle v \rangle \lambda \frac{dA}{dz} \quad (b = a_1 + a_2)$$

Toliau tarsime, kad proporcingumo konstanta b yra **vienoda** visiems pernešamiems dydžiams. Jos vertę galima nustatyti iš jau išspęsto savidifuzijos uždavinio.

- **Savidifuzijos** atveju pernešamas dydis yra santykinė pažymėtų dalelių koncentracija

$$A(z) = \frac{n_P(z)}{n} \quad \longrightarrow \quad j_A(z) = j_D(z) = -bn\langle v \rangle \lambda \frac{dA}{dz} = -b\langle v \rangle \lambda \frac{dn_P(z)}{dz} = -D \frac{dn_P}{dz}$$

Kadangi mes jau nustatėme difuzijos konstantą $D = \frac{\langle v \rangle \lambda}{3}$ tai $b = \frac{1}{3}$

Šią konstantos b vertę panaudosime nustatinėjant kitų kinetinių koeficientų reikšmes

- **Klampa** nusako trintį, kuri atsiranda, kai skirtingi dujų sluoksniai juda skirtingais greičiais. Tarkime, kad judėjimas vyksta y kryptimi, o vidutinis greitis kinta z kryptimi. Tuomet pernešamas dydis yra impulso y komponentė:

$$A(z) = m\langle v_y(z) \rangle \quad \longrightarrow \quad j_A = j_{zy} = -bn\langle v \rangle \lambda \frac{dA}{dz} = -\frac{mn\langle v \rangle \lambda}{3} \frac{d\langle v_y(z) \rangle}{dz} = -\eta \frac{d\langle v_y(z) \rangle}{dz}$$

$\eta = \frac{1}{3} nm\langle v \rangle \lambda$

 – klamos koeficientas

$\eta = \frac{m\langle v \rangle}{3\sqrt{2}\pi d^2}$

 – kai dalelės kietos sferos, d – sferos diametras

- Įdomu pastebėti, kad klamos koeficientas nepriklauso nuo dujų tankio n . Kai Maksvelas gavo šį rezultatą, jis labai nustebo ir nusprendė patikrinti jį eksperimentiškai. Eksperimentai paliudijo, kad ši išvada teisinga.

- **Šiluminio laidumo** atveju pernešamas dydis yra vidutinė energija (temperatūra)

$$A(z) = \frac{1}{2} m \langle v^2(z) \rangle = \frac{3}{2} k_B T(z)$$

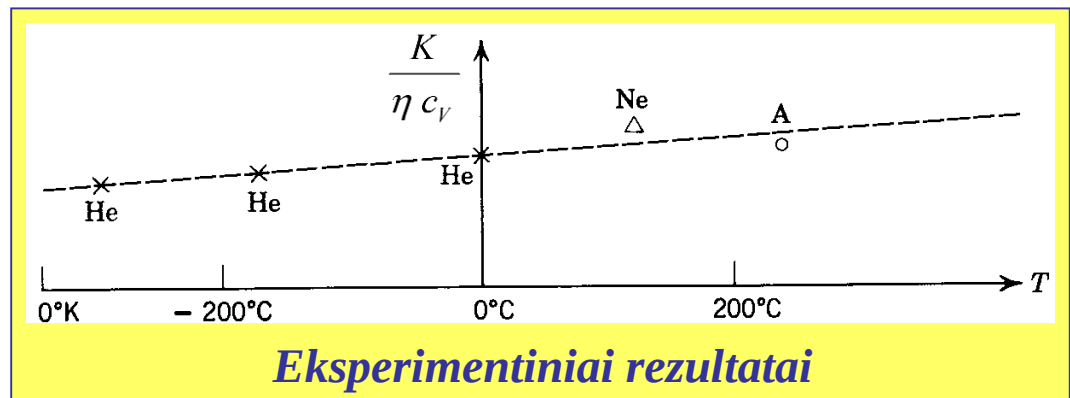
$$j_A = j_Q = -\frac{1}{3} n \langle v \rangle \lambda \frac{3}{2} k_B \frac{dT}{dz} = -K \frac{dT}{dz}$$

$$K = \frac{1}{2} n \langle v \rangle \lambda k_B \quad \text{– šiluminio laidumo koeficientas}$$

- Įdomu pastebėti, kad iš šių išraiškų išplaukia, jog šiluminio laidumo ir klampos koeficientų santykis visoms dujoms yra vienodas ir nepriklauso nuo temperatūros:

$$\frac{K}{\eta} = \frac{3}{2} \frac{k_B}{m} = c_V$$

c_V – vienetinės masės idealių dujų šiluminė talpa



- Tikslesnis pernašos koeficientų nustatymas remiasi Boltzmano kinetine lygtimi.

Boltzmano kinetinė lygtis (I)

- 1872 m. Boltzmannas (Boltzmann) išvedė pagrindinę lygtį pernašos reiškiniams išretintose dujose aprašyti. Ši lygtis nustato dalelių tankio $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ evoliuciją koordinačių ir greičių erdvėje. Lygties išvedimas remiasi dalelių judėjimo lygtimis, kurios yra invariantinės laiko apgręžimo atžvilgiu. Tačiau Boltzmano lygtis nėra invariantinė laiko apgręžimui. Ji nusako antrą termodinamikos dėsnį – entropijos augimą.

Pagrindinės prielaidos

- Nagrinėsime dujas esančias tūrio V inde. Tegul molekulės masė yra m , o jų skaičius yra N . Mes tariame, kad molekulių tarpusavio sąveiką galima aprašyti sferiškai simetriniu potencialu $\phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$.

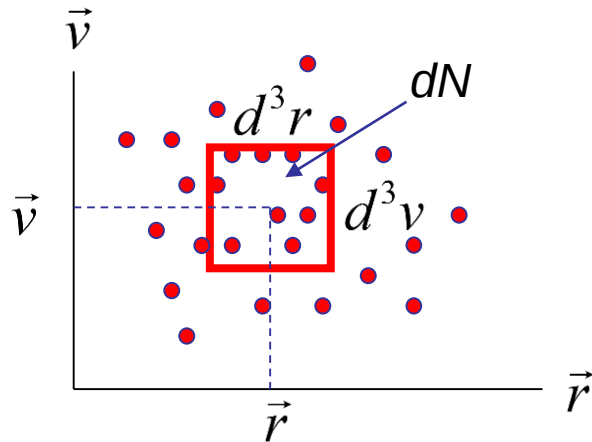
r_0 – charakteringas sąveikos atstumas (charakteringas molekulės dydis)

Tarsime, kad vidutinis atstumas tarp molekulių yra žymiai didesnis už molekulės dydį (**išretintų dujų prielaida**):

$$\frac{V}{N} \gg r_0^3 \quad \text{arba ekvivalenčiai} \quad nr_0^3 \ll 1 \quad \left(n = \frac{N}{V} \right)$$

Esant šiai sąlygai **galima nepaisyti tri-dalialių, ketur-dalelių ir t.t. susidūrimų**, nes jie yra reti palyginus su dvi-daleliais. Be to mes tarsime, kad laikas, kurį dalelės praleidžia tarp dūžių yra žymiai didesnis už dūžio trukmę.

Tolydumo lygtis



- Nagrinėsime dalelių evoliuciją 6-matėje fazinėje erdvėje $(\vec{r}, \vec{v})$. Tokia erdvė vadinama **μ erdve**. Apibrėšime šioje erdvėje dalelių tankį

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t)$$

- Tuomet mažame išskirtame šios erdvės tūrelyje $d^3r d^3v$ dalelių skaičius yra:

$$dN = f(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3r d^3v$$

Erdvinis tankis taške $\vec{r}$ yra $n(\vec{r}, t) = \int d^3v f(\vec{r}, \vec{v}, t)$

o pilnas dalelių skaičius: $N = \int d^3r n(\vec{r}, t) = \int d^3r \int d^3v f(\vec{r}, \vec{v}, t)$

- Tūrelio dydį $d^3r d^3v$ parinksime taip, kad iš vienos pusės jis būtų pakankamai didelis, jog jame būtų daug dalelių, o iš kitos pusės pakankamai mažas, kad funkcija $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ jo ribose kistų nežymiai.

- Dalelių skaičius išskirtame tūrelyje kinta dėl dviejų priežasčių:

- Dalelės tarp susidūrimų juda pagal antrą Niutono dėsnį, t. y.:
- Dalelės patiria susidūrimus.

$$\dot{\vec{v}}_i = \frac{\vec{F}}{m}, \quad \dot{\vec{r}}_i = \vec{v}_i$$

Čia $\vec{F}$ yra išorinė jėga.

- Tankio funkcijai galima užrašyti **tolydumo lygtį** (tolydumo lygtis bendruoju atveju buvo išvesta nagrinėjant Fokero-Planko lygtį):

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{v}, t) = -\vec{v} \nabla_{\vec{r}} f(\vec{r}, \vec{v}, t) - \frac{\vec{F}}{m} \nabla_{\vec{v}} f(\vec{r}, \vec{v}, t) + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{susid}}$$

Čia pirmi du dešinėsios pusės nariai aprašo dalelių pokytį dėl judėjimo tarp susidūrimų, o paskutinis – dėl susidūrimų.

- Užrašyta tolydumo lygtis ir yra Boltzmano kinetinė lygtis, tačiau joje kol kas neapibrėžtas paskutinis narys, aprašantis dalelių susidūrimus. Dalelių skaičiaus kitimą išskirtame tūrelyje dėl dužių galima suskaidyti į du narius:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{susid}} = -\Gamma_- + \Gamma_+$$

Pirmasis narys Γ_- aprašo dalelių mažėjimą įskirtame tūrelyje, dėl to kad tam tikros dalelės susidūrusios tūrelio viduje išeina iš išskirto tūrelio. Šį narį vadinsime **išėjimo nariu**. Antrasis narys Γ_+ yra **atėjimo narys**. Jis nusako kiek dalelių ateina į išskirtą tūrelį dėl susidūrimų už tūrelio ribų. Tiksliau kalbant, apibrėžimai Γ_- ir Γ_+ tokie:

$\Gamma_- \delta t d^3 r d^3 v$ – susidūrimų skaičius laiko intervale tarp t ir $t + \delta t$, kuriuose viena iš molekulių **iki susidūrimo** yra tūrelyje $d^3 r d^3 v$ ties tašku $(\vec{r}, \vec{v})$

$\Gamma_+ \delta t d^3 r d^3 v$ – susidūrimų skaičius laiko intervale tarp t ir $t + \delta t$, kuriuose viena iš molekulių **po susidūrimo** atsiduria tūrelyje $d^3 r d^3 v$ ties tašku $(\vec{r}, \vec{v})$

- Šių narių įvertinimui reikia panagrinėti porinių dalelių susidūrimų teoriją.

Poriniai dalelių susidūrimai

- Nagrinėsime dviejų vienodų dalelių susidūrimo uždavinį. Tegul:

$\vec{v}_1, \vec{v}_2$ – dalelių greičiai iki susidūrimo

$\vec{v}'_1, \vec{v}'_2$ – dalelių greičiai po susidūrimo

Energijos ir impulso tvermės dėsniai

$$\vec{v}_1 + \vec{v}_2 = \vec{v}'_1 + \vec{v}'_2$$

$$|\vec{v}_1|^2 + |\vec{v}_2|^2 = |\vec{v}'_1|^2 + |\vec{v}'_2|^2$$

- Patogu pereiti prie masių centro koordinatų:

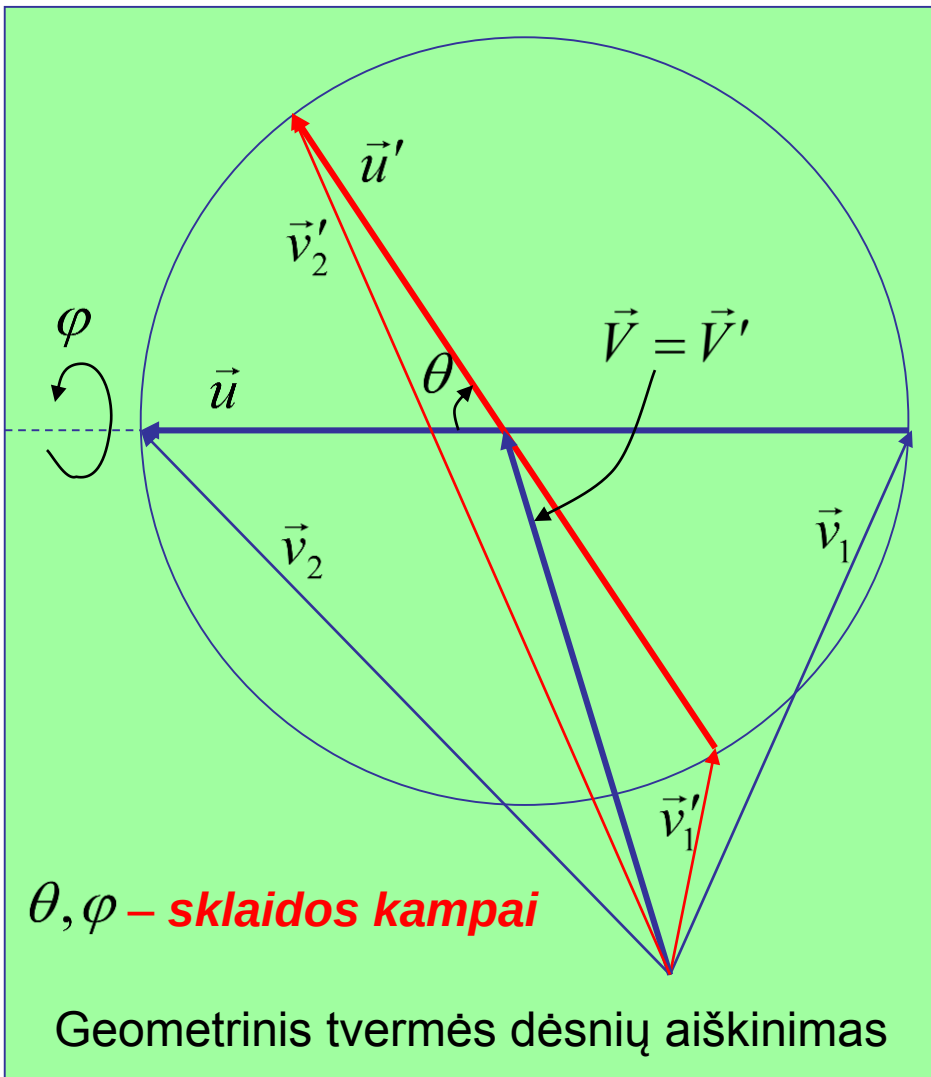
$$\vec{V} = \frac{1}{2}(\vec{v}_1 + \vec{v}_2) \text{ – masių centro greitis}$$

$$\vec{u} = \vec{v}_2 - \vec{v}_1 \text{ – reliatyvus greitis}$$

Tvermės dėsniai
naujiems
kintamiesiems

$$\vec{V} = \vec{V}'$$

$$|\vec{u}| = |\vec{u}'|$$



• Kadangi susidūrimo metu nepasikeičia vektoriaus $\vec{u}$ ilgis, tai susidūrimą galima charakterizuoti parametrais $\vec{V}, \vec{u}, \theta, \varphi$.

• Tarkime, kad esant pastoviems θ ir φ , vektoriai $\vec{V}$ ir $\vec{u}$ šiek tiek pakito ir tapo $\vec{V} + d\vec{V}$ ir $\vec{u} + d\vec{u}$. Kitaip sakant, nagrinėsime susidūrimą su šiek tiek pakeistom pradinėmis sąlygom. Tuomet pasikeis ir būsenos po susidūrimo: $\vec{V}' + d\vec{V}'$ ir $\vec{u}' + d\vec{u}'$. Kadangi $\vec{V} = \vec{V}'$ tai $d\vec{V} = d\vec{V}'$. Be to $d\vec{u} = d\vec{u}'$, nes kampai θ ir φ fiksuoti. Todėl gauname:

$$d^3V d^3u = d^3V' d^3u'$$

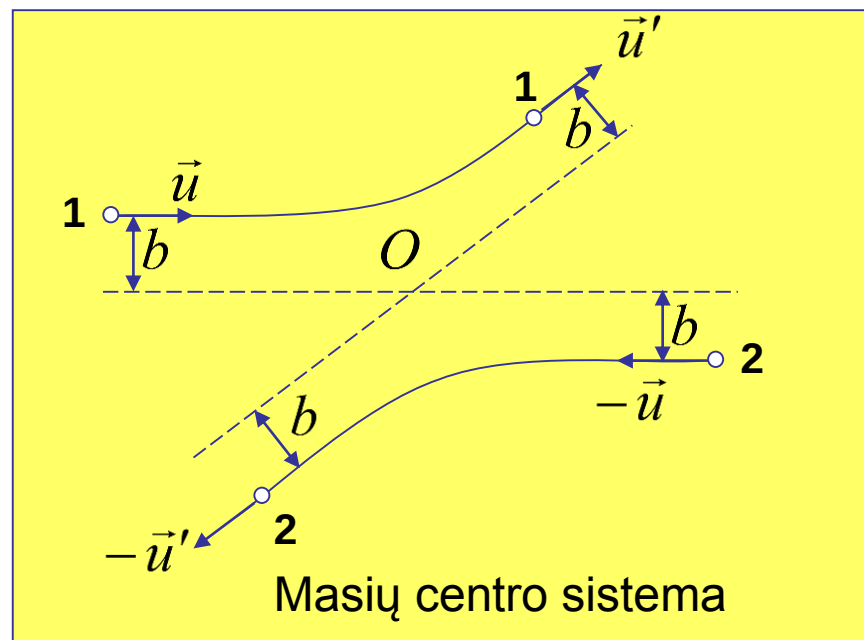
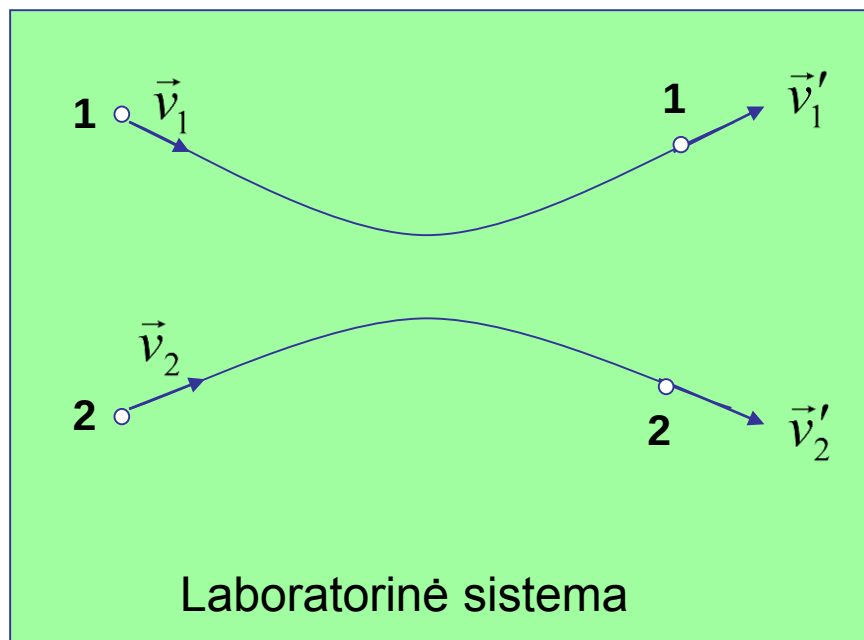
• Transformacijos $\vec{V} = (\vec{v}_1 + \vec{v}_2)/2$,
 $\vec{u} = \vec{v}_1 - \vec{v}_2$ jakobianas lygus vienetui:

$$d^3v_1 d^3v_2 = d^3V d^3u, \quad d^3v'_1 d^3v'_2 = d^3V' d^3u'$$

• Taigi esant fiksuotiems sklaidos kampams, greičių elementariams tūriams galioja lygybė:

$$d^3v_1 d^3v_2 = d^3v'_1 d^3v'_2$$

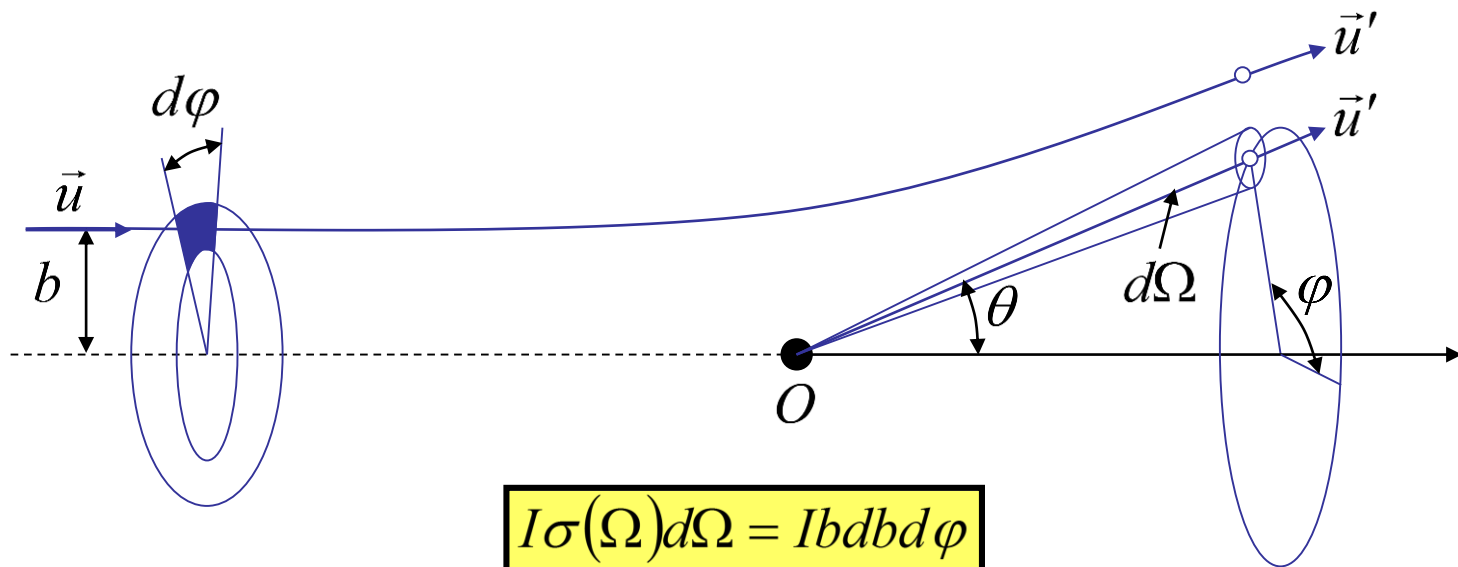
- Dalelių judėjimai laboratorinėje ir masių centro sistemose atrodo taip:



- Masių centro sistemoje (kuri greičiu V juda atžvilgiu laboratorinės sistemos) pakanka nagrinėti tik vieną dalelę, nes antra juda analogiškai pirmai tik priešinga kryptimi. Uždavinys susiveda į ekvivalentų uždavinį apie dalelės sklaidą ant nejudančio **fiktyvaus jėgos centro**, paveiksle pažymėtu raide O .
- Parametras b yra atstumas nuo dalelės iki tiesės einančios per jėgos centrą lygiagrečiai dalelės pradiniam greičiui. Šis parametras vadinamas **taikymo atstumu**.

- Dalelių susidūrimų dinamika charakterizuojama **diferencialiniu sklaidos skerspjūviu** $\sigma(\Omega)$. Šis dydis apibrėžiamas klasikinėje sklaidos teorijoje. Čia priminsime jo sąvoką.

- Vienareikšmiam susidūrimo proceso aprašymui nepakanka užduoti dalelių greičius $\vec{v}_1$ ir $\vec{v}_2$, kadangi jie nenusako taikymo atstumo. Greičių $\vec{v}_1$ ir $\vec{v}_2$ definavimas apibrėžia tam tikrą susidūrimų klasę su ta pačia masių centro sistema ir skirtingais taikymo atstumais. Šią susidūrimų klasę patogiau aprašyti, išsivaizduojant, kad į jėgos centrą yra nukreiptas homogeninis dalelių pluoštas, turintis pradinį greitį $\vec{u}$.



I – molekulių srautas, nukreiptas į jėgos centrą O (molekulių skaičius, per vieną sekundę kertantis vienetinį plotą)

$I\sigma(\Omega)d\Omega$ – molekulių skaičius, per vieną sekundę išsklaidytų į erdvinį kampą $d\Omega$ kryptimi θ, φ .

- Diferencialinis sklaidos skerspjūvis turi ploto dimensiją. Tai eksperimentiškai matuojamas dydis. Geometrinė jo prasmė tokia:

Molekulių skaičius, per vieną sekundę išsklaidytų į erdvinį kampą $d\Omega$

=

Molekulių skaičius pluošte, per vieną sekundę kertančių plotą $\sigma(\Omega)d\Omega$

- Aiškinant sklaidos eksperimentus dažnai naudojamas integralinis (pilnas) sklaidos skerspjūvis:

$$\sigma_{\text{int}} = \int \sigma(\Omega) d\Omega$$

- Konkreči diferencialinio sklaidos skerspjūvio išraiška $\sigma(\Omega)$ priklauso nuo sąveikos potencialo. Kai potencialas žinomas, $\sigma(\Omega)$ galima apskaičiuoti tiek klasikinės tiek ir kvantinės mechanikos rėmuose. Iš tikrųjų šio dydžio nustatymui reikia taikyti kvantinę mechaniką, nes susidūrimo metu molekulės priartėja mažais atstumais taip, kad jų banginės funkcijos persikloja.

- Toliau mums nebus reikalinga tiksli $\sigma(\Omega)$ išraiška. Mums bus reikalingos tik žinios apie šio dydžio **simetriją**. Klasikinėje ir kvantinėje mechanikoje simetrijos savybės paprastai yra vienodos. Kalbant apie simetriją, patogų įvesti tokį žymėjimą:

$$\sigma(\vec{v}_1, \vec{v}_2 | \vec{v}'_1, \vec{v}'_2) \equiv \sigma(\Omega)$$

- Išvardinsime pagrindines diferencialinio sklaidos skerspjūvio simetrijos savybes:

a) Invariantiškumas laiko apgręžimo atžvilgiu (apgėžus laiką kiekviena molekulė pakartoja savo kelią priešinga kryptimi) :

$$\sigma(\vec{v}_1, \vec{v}_2 | \vec{v}'_1, \vec{v}'_2) = \sigma(-\vec{v}'_1, -\vec{v}'_2 | \vec{v}_1, \vec{v}_2)$$

b) Invariantiškumas erdvinio posūkio ir atspindžio atžvilgiu (žvaigždutės ties vektoriais žymi erdviškai pasuktus arba atspindėtus vektorius) :

$$\sigma(\vec{v}_1, \vec{v}_2 | \vec{v}'_1, \vec{v}'_2) = \sigma(\vec{v}_1^*, \vec{v}_2^* | \vec{v}'_1^*, \vec{v}'_2^*)$$

- Remiantis šiomis simetrijos savybėmis nesunku įrodyti, kad **atvirkštinio susidūrimo** (atvirkštinis susidūrimas skiriasi nuo duoto tiesioginio susidūrimo tuo, kad pradinė ir galinė būsenos sukeistos vietomis) diferencialinis sklaidos skerspjūvis sutampa su tiesioginio susidūrimo diferencialiniu sklaidos skerspjūviu:

$$\sigma(\vec{v}_1, \vec{v}_2 | \vec{v}'_1, \vec{v}'_2) = \sigma(\vec{v}'_1, \vec{v}'_2 | \vec{v}_1, \vec{v}_2)$$

- Po šio trumpo ekskurso į dviejų dalelių susidūrimų teoriją mes esame pasiruošę išreikšti pavidalu užrašyti Boltzmano kinetinę lygtį.

Susidūrimo narys ir Boltzmano kinetinė lygtis

- Prisiminkime, kad susidūrimo narys $(\partial f / \partial t)_{\text{susid}}$ tolydumo lygtyje susideda iš dviejų narių – atėjimo Γ_+ ir išėjimo Γ_- . Išvesime šių narių išraiškas.
- **Išėjimo narys.** Mums reikia apskaičiuoti dalelių mažėjimą, sąlygotą dalelių susidūrimais išskirtame μ erdvės tūrelyje $d^3 r d^3 v_1$ ties tašku $(\vec{r}, \vec{v}_1)$. Pasirinkime šiame tūrelyje vieną molekulę su koordinatėmis $(\vec{r}, \vec{v}_1)$. Tame pačiame tūrelyje bus molekulės su laisvais greičiais $\vec{v}_2$, kurias galima aiškinti kaip dalelių srautą, nukreiptą į pasirinktą molekulę. Šio srauto tankis yra:

$$\delta I = \left[f(\vec{r}, \vec{v}_2, t) d^3 v_2 \right] |\vec{v}_1 - \vec{v}_2|$$

- Susidūrimų $(\vec{v}_1, \vec{v}_2) \Rightarrow (\vec{v}_1', \vec{v}_2')$ skaičius erdvės elemente $d^3 r d^3 v_1$ per laiką δt :

$$\begin{aligned} \delta t d^3 r \left[f(\vec{r}, \vec{v}_1, t) d^3 \vec{v}_1 \right] \int d^3 v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) \delta I = \\ = \delta t d^3 r \left[f(\vec{r}, \vec{v}_1, t) d^3 v_1 \right] \int d^3 v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) f(\vec{r}, \vec{v}_2, t) |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| \end{aligned}$$

- Todėl išėjimo narys yra:

$$\Gamma_- = f(\vec{r}, \vec{v}_1, t) \int d^3 v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| f(\vec{r}, \vec{v}_2, t)$$

- **Atėjimo narys.** Šio nario apskaičiavimui reikia nagrinėti susidūrimus $(\vec{v}'_1, \vec{v}'_2) \Rightarrow (\vec{v}_1, \vec{v}_2)$ su fiksuotu greičiu $\vec{v}_1$. Tegul į molekulę, turinčią greitį $\vec{v}'_1$ nukreiptas molekulių srautas su greičiu $\vec{v}'_2$. Srauto tankis yra:

$$\delta I' = f(\vec{r}, \vec{v}'_2, t) d^3 v'_2 |\vec{v}'_2 - \vec{v}'_1|$$

- Susidūrimų $(\vec{v}'_1, \vec{v}'_2) \Rightarrow (\vec{v}_1, \vec{v}_2)$ skaičius erdvės elemente $d^3 r d^3 v'_1$ per laiką δt :

$$\begin{aligned} \delta t d^3 r \left[f(\vec{r}, \vec{v}'_1) d^3 \vec{v}'_1 \right] \int d^3 v'_2 \int d\Omega \sigma'(\Omega) \delta I' = \\ = \delta t d^3 r \left[f(\vec{r}, \vec{v}'_1) d^3 v'_1 \right] \int d^3 v'_2 \int d\Omega \sigma'(\Omega) f(\vec{r}, \vec{v}'_2, t) |\vec{v}'_2 - \vec{v}'_1| \end{aligned}$$

- Kadangi greičiai $(\vec{v}_1, \vec{v}_2)$ ir $(\vec{v}'_1, \vec{v}'_2)$ atitinka atvirkštinius vienas atžvilgiu kito susidūrimus, tai $\sigma(\Omega) = \sigma'(\Omega)$. Be to iš tvermės dėsnių anksčiau gavome, kad

$$|\vec{v}_1 - \vec{v}_2| = |\vec{v}'_1 - \vec{v}'_2|, \quad d^3 v_1 d^3 v_2 = d^3 v'_1 d^3 v'_2$$

- Todėl atėjimo narys yra:

$$\Gamma_+ = \int d^3 v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| f(\vec{r}, \vec{v}'_1, t) f(\vec{r}, \vec{v}'_2, t)$$

- Apjungdami atėjimo ir išėjimo narius galutinai gauname tokią susidūrimo nario išraišką:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{susid}} = \Gamma_+ - \Gamma_- = \int d^3 v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| (f'_1 f'_2 - f_1 f_2)$$

Čia:

$\sigma(\Omega)$ – susidūrimo $(\vec{v}_1, \vec{v}_2) \Rightarrow (\vec{v}'_1, \vec{v}'_2)$ diferencialinis sklaidos skerspjūvis, apskaičiuotas masių centro sistemoje.

Ω – erdvinis kampas tarp vektorių $\vec{v}_2 - \vec{v}_1$ ir $\vec{v}'_2 - \vec{v}'_1$

$$f_1 \equiv f(\vec{r}, \vec{v}_1, t)$$

$$f'_1 \equiv f(\vec{r}, \vec{v}'_1, t)$$

$$f_2 \equiv f(\vec{r}, \vec{v}_2, t)$$

$$f'_2 \equiv f(\vec{r}, \vec{v}'_2, t)$$

- Galutinai Boltzmano kinetinė lygtis išreikštu pavidalu užrašoma taip:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}_1 \nabla_{\vec{r}} + \frac{\vec{F}}{m} \nabla_{\vec{v}_1} \right) f_1 = \int d\Omega \int d^3 v_2 \sigma(\Omega) |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| (f'_2 f'_1 - f_2 f_1)$$

Boltzmano H – teorema

• Boltzmannas įrodė teoremą, kuri teigia, kad nepriklausomai nuo pradinų sąlygų kinetinės lygties sprendinys artėja prie pusiausvyrinio sprendinio, t. y. jo lygtis aprašo **negrįžtamą** sistemos relaksaciją į pusiausvyros būseną.

• Tarsime, kad išorinių jėgų nėra, t.y. $F = 0$. Tuomet galima padaryti prielaidą, kad tankio funkcija nepriklauso nuo erdvinų kintamųjų: $f(\vec{r}, \vec{v}, t) \equiv f(\vec{v}, t)$. Šiuo atveju Boltzmano kinetinėje lygtyje lieka tik susidūrimų narys:

$$\frac{\partial f(\vec{v}_1, t)}{\partial t} = \int d^3 v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_2 - \vec{v}_1| (f'_2 f'_1 - f_2 f_1) \quad (*)$$

• Pažymėkime pusiausvyrinį pasiskirstymą $f_0(\vec{v})$. Tai yra stacionarus Boltzmano lygties sprendinys: $\left(\frac{\partial f(\vec{v}, t)}{\partial t} = 0 \right)$

$$0 = \int d^3 v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_2 - \vec{v}_1| [f_0(\vec{v}'_2) f_0(\vec{v}'_1) - f_0(\vec{v}_2) f_0(\vec{v}_1)] \quad (**)$$

• Norint, kad funkcija $f_0(\vec{v})$ būtų šios lygties sprendinys, **pakanka** pareikalausti

$$f_0(\vec{v}'_2) f_0(\vec{v}'_1) - f_0(\vec{v}_2) f_0(\vec{v}_1) = 0 \quad (***)$$

- Toliau įrodysime, kad ši sąlyga yra ne tik pakankama, bet ir **būtina**. Tokiu būdu **pusiausvyrinis sprendinys** $f_0(\vec{v})$ **nepriklauso nuo** $\sigma(\Omega)$, **t.y. nuo to, koku dėsniu aprašoma sąveika tarp dalelių**.

- Mūsų tikslas yra įrodyti, kad nestacionarios kinetinės lygties sprendinys artėja prie sprendinio $f_0(\vec{v})$, tenkinančio sąlygą (***) . Tuo tikslu apibrėšime funkcionalą

$$H(t) = \int d^3v f(\vec{v}, t) \ln f(\vec{v}, t) > 0$$

Boltzmanas pažymėjo jį raide H . Iš čia ir kilo H -teoremos pavadinimas.

- Boltzmano H -teorema formuluojama taip:

Jeigu funkcija $f(\vec{v}, t)$ tenkina kinetinę lygtį (*), tai

$$\frac{dH(t)}{dt} \leq 0$$

- Įrodysime šį teiginį. Dėl to išdiferencijuojame apibrėžtą funkcionalą pagal laiką

$$\frac{dH(t)}{dt} = \int d^3v \frac{\partial f(\vec{v}, t)}{\partial t} [1 + \ln f(\vec{v}, t)] \quad (****)$$

ir įrašome vietoje $\frac{\partial f(\vec{v}, t)}{\partial t}$ dešinę kinetinės lygties (*) pusę:

$$\frac{dH(t)}{dt} = \int d^3v_1 \int d^3v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| (f'_2 f'_1 - f_2 f_1) [1 + \ln f_1]$$

- Šis integralas nepasikeis, jeigu sukeisime vietomis $\vec{v}_1$ ir $\vec{v}_2$, nes diferencialinis sklaidos skerspjūvis $\sigma(\Omega)$ yra invariantinis šiam pakeitimui:

$$\frac{dH(t)}{dt} = \int d^3v_1 \int d^3v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_2 - \vec{v}_1| (f'_2 f'_1 - f_1 f_2) [1 + \ln f_2]$$

- Sudėsiame dvi paskutines išraiškas ir rezultatą padalinsime iš dviejų:

$$\frac{dH(t)}{dt} = \frac{1}{2} \int d^3v_1 \int d^3v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_2 - \vec{v}_1| (f'_2 f'_1 - f_2 f_1) [2 + \ln(f_1 f_2)] \quad (*****)$$

- Šis integralas nepasikeičia sukeičiant $(\vec{v}_1, \vec{v}_2)$ ir $(\vec{v}'_1, \vec{v}'_2)$, nes kiekvieną tiesioginį susidūrimą atitinka atvirkštinis su tuo pačiu skerspjūviu

$$\frac{dH(t)}{dt} = \frac{1}{2} \int d^3v'_1 \int d^3v'_2 \int d\Omega \sigma'(\Omega) |\vec{v}'_2 - \vec{v}'_1| (f_2 f_1 - f'_2 f'_1) [2 + \ln(f'_1 f'_2)]$$

Kadangi $\sigma'(\Omega) = \sigma(\Omega)$, $|\vec{v}_1 - \vec{v}_2| = |\vec{v}'_1 - \vec{v}'_2|$, $d^3v_1 d^3v_2 = d^3v'_1 d^3v'_2$,
tai paskutinį integralą galimą užrašyti taip:

$$\frac{dH(t)}{dt} = \frac{1}{2} \int d^3v_1 \int d^3v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_2 - \vec{v}_1| (f_2 f_1 - f'_2 f'_1) [2 + \ln(f'_1 f'_2)]$$

- Sudedame šį integralą su (****) ir padaliname iš dviejų:

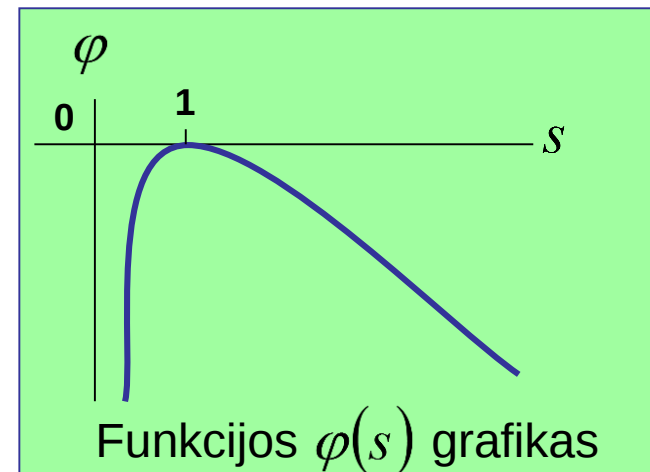
$$\begin{aligned} \frac{dH(t)}{dt} &= \frac{1}{4} \int d^3v_1 \int d^3v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_2 - \vec{v}_1| (f'_2 f'_1 - f_2 f_1) [\ln(f_1 f_2) - \ln(f'_1 f'_2)] \\ &= \frac{1}{4} \int d^3v_1 \int d^3v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_2 - \vec{v}_1| f'_1 f'_2 \left(1 - \frac{f_1 f_2}{f'_2 f'_1}\right) \ln\left(\frac{f_1 f_2}{f'_1 f'_2}\right) \end{aligned}$$

- Čia funkcija po integralu yra neteigiama, nes bet kuriems $s = \frac{f_1 f_2}{f'_2 f'_1} > 0$ galioja nelygybė:

$$\varphi(s) \equiv (1-s) \ln s \leq 0$$

Iš jos išplaukia H –teoremos teiginys, būtent

$$\boxed{\frac{dH(t)}{dt} \leq 0}$$



- Iš išraiškos (****) matyti, kad $dH/dt = 0$ tik tuomet, kai $\partial f / \partial t = 0$. Vadinasi nepriklausomai nuo pradinių sąlygų sistema evoliucionuoja taip, kad $\partial f / \partial t \rightarrow 0$. Pusiausvyrinis sprendinys $dH/dt = 0$ (o reiškia ir $\partial f / \partial t = 0$) pasiekiamas tik tuomet, kai $s = 1$. Tai tiksliai atitinka sąlygą (***):

$$f_0(\vec{v}'_2)f_0(\vec{v}'_1) - f_0(\vec{v}_2)f_0(\vec{v}_1) = 0 \quad (***)$$

- Vadinasi nepriklausomai nuo pradinių sąlygų sistema artėja prie pusiausvyrinio sprendinio $f(\vec{v}, t) \rightarrow f_0(\vec{v})$, nusakomo lygtimi (***). Pastebėsime, kad ši lygtis atitinka **detaliosios pusiausvyros principą**.

- Šis rezultatas atrodo keistas, nes Boltzmano lygties išvedimas lyg tai remiasi grynai dinamikos dėsniais, kurie yra invariantiniai laiko apgręžimo atžvilgiu. Boltzmano lygtyje šis invariantiškumas prarastas. Ji aprašo negrįžtamą sistemos evoliuciją į pusiausvyrinę būseną.

Kurioje vietoje padaryta „klaida“?

- Negrižtamumas atsirado dėl visai atrodo „nekaltos“ prielaidos, kurią padarėme apskaičiuodami susidūrimo narį Boltzmano lygtyje. Mes tarėme, kad mažame tūrio elemente d^3r dviejų **molekulių greičiai yra nekoreliuoti**. Tą prielaidą mes padarėme, kai skaičiavome molekulių porų skaičių, turinčių greičius $\vec{v}_1$ ir $\vec{v}_2$ greičio tūrio elementuose d^3v_1 ir d^3v_2 , nes išreiškėme jį sandaugos pavidalu:

$$\left[f(\vec{r}, \vec{v}_1, t) d^3r d^3v_1 \right] \left[f(\vec{r}, \vec{v}_2, t) d^3r d^3v_2 \right]$$

- Pastaroji prielaida mokslinėje literatūroje vadinama **molekulinio chaoso hipoteze**. Jos originalus (Boltzmano) pavadinimas vokiečių kalba yra: **Stoßzahlansatz**.

- Kaip reiktų teisingai apskaičiuoti susidūrimų narį? Teisingam šio nario apskaičiavimui reikia panaudoti dvidalelę $f(\vec{r}, \vec{v}_1; \vec{r}, \vec{v}_2, t)$ tankio funkciją, kuri bendruoju atveju nelygi viendalelių funkcijų sandaugai:

$$f(\vec{r}, \vec{v}_1; \vec{r}, \vec{v}_2, t) \neq f(\vec{r}, \vec{v}_1, t) f(\vec{r}, \vec{v}_2, t)$$

- Tuomet mes negautume uždaros sistemos, nes į Boltzmano lygtį įeitų dvi nežinomos funkcijos – viendalelė $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ ir dvidalelė $f(\vec{r}, \vec{v}_1; \vec{r}, \vec{v}_2, t)$. Tuomet tektų rašyti lygtį dvidaleliai funkcijai, į kurią įeitų tridalelė ir t.t. Tokiu būdu gautume sistemą N lygčių, kurios būtų grįžtamos, nes jos būtų ekvivalenčios dalelių dinaminėms lygtims (Niutono dėsniams). Tad negrižtamumas atsiranda dėl lygčių grandinėlis nutraukimo panaudojus molekulinio chaoso hipotezę.

Pusiausvyrinis Boltzmano lygties sprendinys

- Surasime pusiausvyrinį Boltzmano lygties sprendinį, kuris tenkina lygtį (***)
Dėl to išlogaritmuosime ją ir užrašysime tokiu pavidalu:

$$\ln f_0(\vec{v}_2) + \ln f_0(\vec{v}_1) = \ln f_0(\vec{v}'_2) + \ln f_0(\vec{v}'_1)$$

- Kadangi $(\vec{v}_1, \vec{v}_2)$ ir $(\vec{v}'_1, \vec{v}'_2)$ yra bet kurio įmanomo susidūrimo, atitinkamai pradiniai ir galiniai molekulių greičiai, tai šią lygtį galima aiškinti kaip **tvermės dėsnį**. Jeigu $\chi_k(\vec{v})$ yra dydis, charakterizuojantis molekulę ir turi tvermės savybę, t.y. $\chi_k(\vec{v}_1) + \chi_k(\vec{v}_2)$ nekinta susidūrimo metu, tai aukščiau užrašytos lygties sprendinys yra tų dydžių tiesinė kombinacija

$$\ln f_0(\vec{v}) = c_1 \chi_1(\vec{v}) + c_2 \chi_2(\vec{v}) + \dots$$

- Kadangi susidūrimo metu nekintantys (tvarieji) dydžiai yra energija, impulsas ir dalelių skaičius, tai $\ln f_0(\vec{v})$ yra $\vec{v}^2$, trijų greičio vektoriaus $\vec{v}$ komponentų ir laisvos konstantos tiesinė kombinacija:

$$\ln f_0(\vec{v}) = -A(\vec{v} - \vec{v}_0)^2 + \ln C \quad \longrightarrow \quad \boxed{f_0(\vec{v}) = C e^{-A(\vec{v} - \vec{v}_0)^2}}$$

Taigi gavome, kad sistemos **pusiausvyrinė būseną yra Gauso skirstinys** (fizikai jį vadina **Maksvelo-Boltzmano skirstiniu**). Čia jis turi 5 laisvas konstantas: $A, C, \vec{v}_0$

Boltzmano kinetinė lygtis (XX)

- Aptarsime šių konstantų fizikinę prasmę. Pirmiausia konstanta $\vec{v}_0 = \langle \vec{v} \rangle$ yra vidutinis greitis. Jis nusako visos dujų sistemos, kaip visumos, judėjimą pastoviu greičiu. Čia nagrinėsime atvejį, kai vidutinis greitis lygus nuliui, $\vec{v}_0 = \vec{0}$.

- Konstanta C nustatoma iš normavimo sąlygos:

$$n = C \int d^3v e^{-A\vec{v}^2} = C \left(\frac{\pi}{A} \right)^{3/2} \quad \longrightarrow \quad C = n \left(\frac{A}{\pi} \right)^{3/2}, \quad n = \frac{N}{V}$$

- Konstanta A surandama iš sąlygos, kad vidutinė kinetinė energija $\langle \varepsilon \rangle = \frac{3}{2} k_B T$

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{n} \int d^3v \frac{m\vec{v}^2}{2} e^{-A\vec{v}^2} = \frac{2\pi m C}{n} \int dv v^4 e^{-Av^2} = \frac{3}{4} \frac{m}{A} \quad \longrightarrow \quad A = \frac{3}{4} \frac{m}{\langle \varepsilon \rangle} = \frac{m}{2k_B T}$$

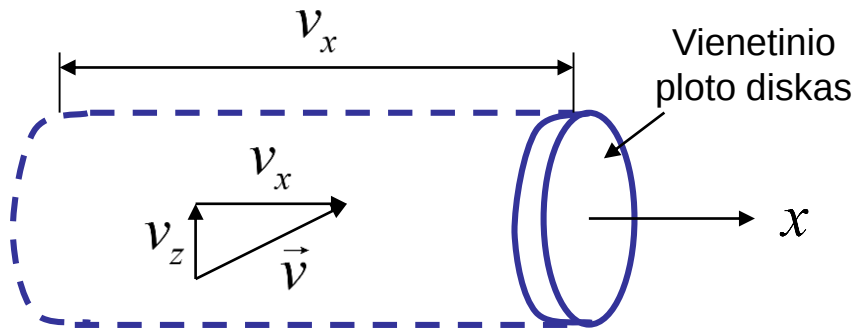
Galutinai pusiausvyrinis Boltzmano lygties sprendinys (**Maksvelo-Boltzmano skirstinys**) yra:

$$f_0(\vec{v}) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-m\vec{v}^2 / 2k_B T}$$

(negrįžtamumo animacija)

Termodinamikos dėsniai

- Pasinaudojus gautu pusiausvyrinio skirstinio nesunku išvesti išretintų dujų termodinamikos dėsnius. Pirmiausia gausime idealių dujų būsenos dėsnį. Dėl to reikia apskaičiuoti slėgį. Pasirinksime vienetinio ploto paviršių ir apskaičiuosime jėgą, kuria molekulės veikia tą paviršių.



- Atsispindėjusi nuo disko molekulė perduoda jam impulsą $2mv_x$. Atsispindėjusių nuo disko molekulių skaičius per vieną sekundę proporcingas pavaizduoto cilindro tūriui:

$$v_x f_0(\vec{v}) d^3v$$

- Tuomet dujų slėgis:

$$\begin{aligned}
 P &= \int_{v_x > 0} d^3v (2mv_x) v_x f_0(\vec{v}) = 2mC \int_0^\infty dv_x v_x^2 e^{-Av_x^2} \int_{-\infty}^\infty dv_y e^{-Av_y^2} \int_{-\infty}^\infty dv_z e^{-Av_z^2} \\
 &= mC \int d^3v v_x^2 e^{-A\vec{v}^2} = \frac{1}{3} mC \int d^3v \vec{v}^2 e^{-A\vec{v}^2} = \frac{2}{3} C \int d^3v \frac{m\vec{v}^2}{2} e^{-A\vec{v}^2} = \frac{2}{3} n \langle \varepsilon \rangle = nk_B T
 \end{aligned}$$

$$P = nk_B T = \frac{N}{V} k_B T \quad \text{– idealių dujų būsenos dėsnis}$$

- **Pirmasis termodinamikos dėsnis** teigia, kad suteikta dujoms šiluma atlieka mechaninį darbą ir pereina į vidinę energiją:

$$dQ = dU + PdV$$

Vidinė šiluminė energija:

$$U = N \langle \varepsilon \rangle = \frac{3}{2} N k_B T$$

Iš čia galime apskaičiuoti dujų šiluminę talpą esant pastoviam tūriui:

$$C_V = \left(\frac{dQ}{dT} \right)_V = \frac{dU}{dT} = \frac{3}{2} N k_B$$

- **Antrasis termodinamikos dėsnis** taps ekvivalentus Boltzmano H -teoremai, jeigu H funkciją sutapatinsime su entropijos tankiu padalintu iš k_B :

$$H = - \frac{S}{V k_B}$$

Tuomet H -teorema teigia, kad esant fiksuotam tūriui V (dujos izoliuotos) entropija nemažėja – antrasis termodinamikos dėsnis.

Įrodysime sąryšį tarp S ir H apskaičiavę pusiausvyrinę H vertę

$$H_0 = \int d^3v f_0 \ln f_0 = n \left\{ \ln \left[n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \right] - \frac{3}{2} \right\}$$

Kadangi entropijos apibrėžimas yra $dS = dQ/T$ mums reikia įrodyti, kad pusiausvyroje galioja sąryšis

$$dQ = T dS = -k_B T V dH_0$$

Kadangi

$$dQ = dU = \frac{3}{2} N k_B dT$$

tai turi galioti lygybė

$$\frac{dH_0}{dT} = - \frac{3}{2} \frac{n}{T}$$

Tiesiogiai diferencijuojant funkciją H_0 galima įsitikinti, kad ši lygybė yra teisinga.

Pusiausvyrinis sprendinys esant išoriniam laukui

Panagrinėkime pusiausvyrinį Boltzmano lygties sprendinį

$$\left(\vec{v} \nabla_{\vec{r}} + \frac{\vec{F}}{m} \nabla_{\vec{v}} \right) f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{susid}},$$

kai dujas veikia išorinis konservatyvus laukas, apibrėžiamas potencialu $\varphi(\vec{r})$

$$\vec{F} = -\nabla_{\vec{r}} \varphi(\vec{r})$$

Nesunku patikrinti, kad kinetinės lygties sprendinys yra

$$f(\vec{r}, \vec{v}) = f_0(\vec{v}) e^{-\frac{\varphi(\vec{r})}{k_B T}}, \quad \left(f_0(\vec{v}) = C e^{-\frac{m \vec{v}^2}{2 k_B T}} \right)$$

Nesunku tiesiogiai patikrinti, kad įrašius šią išraišką į kinetinę lygtį, kairioji jos pusė virsta nuliu.

Dešinioji pusė irgi virsta nuliu, nes $\varphi(\vec{r})$ nepriklauso nuo greičio $\vec{v}$:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{susid}} &= e^{-\frac{2\varphi(\vec{r})}{k_B T}} \int d^3 v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_2 - \vec{v}_1| \times \\ &\times (f_0(\vec{v}_2') f_0(\vec{v}_1') - f_0(\vec{v}_2) f_0(\vec{v}_1)) = 0 \end{aligned}$$

Eksponentinį daugiklį $e^{-\varphi(\vec{r})/k_B T}$ galima įtraukti į tankio n apibrėžimą ir galutinai pusiausvyrinį Boltzmano lygties su išoriniu lauku sprendinį galima užrašyti taip:

$$f(\vec{r}, \vec{v}) = n(\vec{r}) \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-m \vec{v}^2 / 2 k_B T}$$

$$n(\vec{r}) = n e^{-\varphi(\vec{r})/k_B T} = \int d^3 v f(\vec{r}, \vec{v})$$

Tvermės dėsniai ir hidrodinaminės lygtys (I)

- Mes jau pateikėm elementarią pernašos reiškinių teoriją. Tikslesnė pernašos reiškinių teorija grindžiama Boltzmano kinetine lygtimi. Tiriant nepusiausvyrinius reiškinius mums reikia žinoti laikiškąją tankio funkcijos evoliuciją. Dėl to būtina išspręsti nestacionarią Boltzmano kinetinę lygtį.
- Bendruoju atveju nestacionarią kinetinę lygtį išspręsti nepavyksta. Tačiau kinetinės lygties sprendiniai turi tenkinti tam tikrus sąryšius, kurie išplaukia iš energijos, impulso ir masės tvermės dėsnų. Bendruoju atveju tie sąryšiai nesudaro uždaros lygčių sistemos. Tačiau jeigu galioja vietinės pusiausvyros principas, tai ta lygčių sistema užsidaro ir virsta hidrodinaminėmis lygtimis. **Vietinės pusiausvyros principas teigia, kad kiekviename erdvės taške dalelių greičiai pasiskirsto pagal Maksvelo-Boltzmano skirstinį, kurio parametrai (vidutinis greitis, temperatūra ir koncentracija) yra skirtingi skirtinguose erdvės taškuose.**
- Hidrodinaminės lygtys išvedamos iš kinetinės lygties gana sudėtingu Čapmano ir Enskogo (Chapman and Enskog) metodu. Mes pateiksime supaprastintą to metodo versiją, kurioje susidūrimo nariui taikoma relaksacijos laiko aproksimacija. Panaudodami šia aproksimaciją, mes ne tik išvesime hidrodinamines lygtis, bet taip pat gausime pernašos koeficientų išraiškas.

Tvermės dėsniai

• Mes parodysime, kad Boltzmano lygties sprendiniai turi tenkinti tam tikrus sąryšius, kurie išplaukia iš to, kad molekulių susidūrimo metu tam tikriems dinaminiam kintamiesiems galioja tvermės dėsniai. Toliau remiantis šiais tvermės dėsniais užrašysime hidrodinamines lygtis makroskopinėms dujų savybėms aprašyti.

• Tegul $\chi(\vec{r}, \vec{v})$ yra dydis, charakterizuojantis molekulę su koordinate $\vec{r}$ ir greičiu $\vec{v}$, kuris susidūrimo metu $(\vec{v}_1, \vec{v}_2) \rightarrow (\vec{v}'_1, \vec{v}'_2)$, vykstančiu taške $\vec{r}$, nekinta, t.y.

$$\chi_1 + \chi_2 = \chi'_1 + \chi'_2$$

• Įrodysime, kad sudauginus dydį χ su susidūrimo nariu ir suintegravus pagal greičius gausime nulį:

$$\int d^3v \chi(\vec{r}, \vec{v}) \left(\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial t} \right)_{\text{susid}} = 0$$

• Ši lygybė įrodoma panaudojus susidūrimo skerspjūvio $\sigma(\Omega)$ simetrijos savybes, panašiai, kaip buvo įrodyta H -teorema. Būtent, mes panaudosime tokius tris kintamųjų pakeitimus

$$(a) \quad \vec{v}_1 \Leftrightarrow \vec{v}_2; \quad (b) \quad (\vec{v}_1, \vec{v}_2) \Leftrightarrow (\vec{v}'_1, \vec{v}'_2); \quad (c) \quad (\vec{v}_1, \vec{v}_2) \Leftrightarrow (\vec{v}'_2, \vec{v}'_1)$$

ir keturiais skirtingais būdais užrašysime pastarąjį integralą:

Tvermės dėsniai ir hidrodinaminės lygtys (III)

$$\int d^3v \chi(\vec{r}, \vec{v}) \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{susid}} = \int d^3v_1 \int d^3v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| \chi_1(f'_2 f'_1 - f_2 f_1) \quad \text{– originalus}$$

$$\int d^3v \chi(\vec{r}, \vec{v}) \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{susid}} = \int d^3v_1 \int d^3v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_2 - \vec{v}_1| \chi_2(f'_2 f'_1 - f_1 f_2) \quad \text{– pakeit. (a)}$$

$$\int d^3v \chi(\vec{r}, \vec{v}) \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{susid}} = \int d^3v_1 \int d^3v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| \chi'_1(f_2 f_1 - f'_2 f'_1) \quad \text{– pakeit. (b)}$$

$$\int d^3v \chi(\vec{r}, \vec{v}) \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{susid}} = \int d^3v_1 \int d^3v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| \chi'_2(f_1 f_2 - f'_1 f'_2) \quad \text{– pakeit. (c)}$$

- Sudėję šias keturias lygybes ir rezultatą padalinę iš 4, gauname lygybę, kurią siekime įrodyti:

$$\begin{aligned} \int d^3v \chi(\vec{r}, \vec{v}) \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{susid}} &= \frac{1}{4} \int d^3v_1 \int d^3v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| (\chi_1 + \chi_2 - \chi'_1 - \chi'_2) \times \\ &\quad \times (f'_2 f'_1 - f_2 f_1) \equiv 0 \end{aligned}$$

Tvermės dėsniai ir hidrodinaminės lygtys (IV)

- Dabar išvesime tvermės dėsnius. Dėl to padauginame Boltzmano kinetinę lygtį iš $\chi(\vec{r}, \vec{v})$ ir integruojame pagal $\vec{v}$:

$$\int d^3v \chi(\vec{r}, \vec{v}) \left| \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \nabla_{\vec{r}} + \frac{\vec{F}}{m} \nabla_{\vec{v}} \right) f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{susid}} \right.$$

- Kadangi susidūrimo narys virsta nuliu, tai gauname:

$$\int d^3v \chi(\vec{r}, \vec{v}) \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \nabla_{\vec{r}} + \frac{\vec{F}}{m} \nabla_{\vec{v}} \right) f = 0$$

- Pastarąją išraišką galima užrašyti taip:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int d^3v \chi f(\vec{r}, \vec{v}) + \nabla_{\vec{r}} \int d^3v \chi \vec{v} f(\vec{r}, \vec{v}) - \int d^3v f \vec{v} \nabla_{\vec{r}} \chi + \\ + \frac{1}{m} \int d^3v \nabla_{\vec{v}} (\chi \vec{F} f) - \frac{1}{m} \int d^3v f \vec{F} \nabla_{\vec{v}} \chi - \frac{1}{m} \int d^3v \chi f \nabla_{\vec{v}} \vec{F} = 0 \end{aligned}$$

$= 0, \text{ nes } f(\vec{r}, \vec{v}, t) \rightarrow 0 \text{ kai } |\vec{v}| \rightarrow \infty$

$= 0, \text{ jeigu } \vec{F} \text{ nepriklauso nuo } \vec{v}$

- Toliau laužtiniais skliaustais žymėsime dydžių vidurkius pagal $\vec{v}$:**

$$\langle A \rangle \equiv \frac{\int d^3v A f}{\int d^3v f} = \frac{1}{n} \int d^3v A f \quad \text{čia} \quad n(\vec{r}, t) \equiv \int d^3v f(\vec{r}, \vec{v}, t)$$

Pastebėkime, kad $\langle nA \rangle = n\langle A \rangle$, nes n nepriklauso nuo $\vec{v}$.

- Tuomet tvermės lygtį bendruoju atveju galima užrašyti taip:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle n\chi \rangle + \frac{\partial}{\partial x_j} \langle nv_j \chi \rangle - n \left\langle v_j \frac{\partial \chi}{\partial x_j} \right\rangle - \frac{n}{m} \left\langle F_j \frac{\partial \chi}{\partial v_j} \right\rangle = 0 \quad \text{— bendroji tvermės lygtis}$$

Čia pasikartojantys indeksai reiškia sumavimą
(**sumavimas pagal nutylėjimą**), pavyzdžiui: $\frac{\partial}{\partial x_j} \langle nv_j \chi \rangle \equiv \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \langle nv_j \chi \rangle$

- Gautoje tvermės lygtyje χ yra bet koks tvarus dydis, t.y. dinaminis kintamasis, kuris nekinta molekulių susidūrimo metu. Toliau visiems tvariems dydžiams išreikštu pavidalu užrašysime tvermės lygtis.

Tvermės dėsniai ir hidrodinaminės lygtys (VI)

- Molekulių susidūrimo metu išsilaiko masė, impulsas ir energija. Taigi bendroje tvermės lygtyje vietoje χ nuosekliai įrašysime:

$$\chi = m \quad (\text{masė arba dalelių skaičius})$$

$$\chi = mv_i \quad (i = 1, 2, 3) \quad (\text{impulsas})$$

$$\chi = \frac{1}{2} m |\vec{v} - \vec{u}(\vec{r}, t)|^2 \quad (\text{šiluminė energija})$$

$$\vec{u}(\vec{r}, t) \equiv \langle \vec{v} \rangle - \text{lokalinis (vietinis) vidutinis greitis}$$

- Pradėsime nuo **masės tvermės** lygties, t.y. bendroje tvermės lygtyje įrašysime $\chi = m$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle mn \rangle + \frac{\partial}{\partial x_j} \langle mn v_j \rangle = 0$$

- Apibrėžus **masės tankį** $\rho(\vec{r}, t) \equiv mn(\vec{r}, t)$, masės tvermės dėsnį galima užrašyti taip:

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla(\rho \vec{u}) = 0} \quad (\text{čia ir toliau } \nabla \equiv \nabla_{\vec{r}})$$

- Impulso tvermės lygtį** gausime, įrašę į bendrąją tvermės lygtį $\chi = mv_i$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \rho v_i \rangle + \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \rho v_i v_j \rangle - \frac{1}{m} \rho F_i = 0$$

- Greičių sandaugos vidurkį galima užrašyti taip:

$$\langle v_i v_j \rangle = \langle (v_i - u_i)(v_j - u_j) \rangle + \langle v_i \rangle u_j + u_i \langle v_j \rangle - u_i u_j = \langle (v_i - u_i)(v_j - u_j) \rangle + u_i u_j$$

- Įrašę tai į viršutinę lygtį, gauname

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) + \underbrace{u_i \frac{\partial \rho}{\partial t} + u_i \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j)}_{=0 \text{ (dėl masės tvermės dėsnio)}} = \frac{1}{m} \rho F_i - \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \rho (v_i - u_i)(v_j - u_j) \rangle$$

arba

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u_j \frac{\partial}{\partial x_j} \right) u_i = \frac{1}{m} F_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} P_{ij}$$

$$P_{ij} \equiv \rho \langle (v_i - u_i)(v_j - u_j) \rangle - \text{slėgio tenzorius}$$

Tvermės dėsniai ir hidrodinaminės lygtys (VIII)

- **Energijos tvermės lygtį** gausime, įrašę į bendrąją tvermės lygtį $\chi = \frac{m}{2} |\vec{v} - \vec{u}(\vec{r}, t)|^2$
- $$m \left[\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho |\vec{v} - \vec{u}|^2 \rangle + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \rho v_j |\vec{v} - \vec{u}|^2 \rangle - \frac{1}{2} \rho \left\langle v_j \frac{\partial}{\partial x_j} |\vec{v} - \vec{u}|^2 \right\rangle \right] = 0$$

- Apibrėšime tokius dydžius:

$$k_B T(\vec{r}, t) \equiv \theta(\vec{r}, t) = \frac{m}{3} \langle |\vec{v} - \vec{u}|^2 \rangle \quad \text{– **lokalinė (vietinė) temperatūra** (tolygus šiluminės energijos pagal laisvės laipsnius pasiskirstymas)}$$

$$\vec{q}(\vec{r}, t) \equiv \frac{m}{2} \rho \langle (\vec{v} - \vec{u}) |\vec{v} - \vec{u}|^2 \rangle \quad \text{– **lokalinis (vietinis) šilumos srautas**}$$

Tada:

$$\frac{m}{2} \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho |\vec{v} - \vec{u}|^2 \rangle = \frac{m}{2} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \langle |\vec{v} - \vec{u}|^2 \rangle \right] = \frac{3}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \theta)$$

$$\frac{1}{2} m \rho \langle v_j |\vec{v} - \vec{u}|^2 \rangle = \frac{1}{2} m \rho \langle (v_j - u_j) |\vec{v} - \vec{u}|^2 \rangle + \frac{1}{2} m \rho u_j \langle |\vec{v} - \vec{u}|^2 \rangle = q_j + \frac{3}{2} \rho \theta u_j$$

$$\frac{1}{2} \rho \left\langle v_j \frac{\partial}{\partial x_j} |\vec{v} - \vec{u}|^2 \right\rangle = \frac{1}{2} \rho \left\langle v_j \frac{\partial}{\partial x_j} \sum_i (v_i - u_i)^2 \right\rangle = \rho \langle v_j (v_i - u_i) \rangle \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$

$$\rho \langle v_j (v_i - u_i) \rangle = \rho \langle (v_j - u_j) (v_i - u_i) \rangle + \rho u_j \langle (v_i - u_i) \rangle = P_{ij}$$

Tvermės dėsniai ir hidrodinaminės lygtys (IX)

- Tuomet energijos tvermės lygtį galima užrašyti taip:

$$\frac{3}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \theta) + \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \frac{3}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \theta u_j) + m P_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = 0$$
$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \theta) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \theta u_j) = \rho \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} + u_j \frac{\partial \theta}{\partial x_j} \right) + \theta \underbrace{\left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j \rho) \right)}_{=0 \text{ (dėl masės tvermės)}}$$

Kadangi $P_{ij} = P_{ji}$ tai paskutinį narį galima simetrizuoti:

$$m P_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = P_{ij} \frac{m}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \equiv P_{ij} \Lambda_{ij}$$
$$\Lambda_{ij} = \frac{m}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

Galutinai energijos tvermės lygtis įgauna tokį pavidalą:

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right) \theta + \frac{2}{3} \frac{\partial q_i}{\partial x_i} = -\frac{2}{3} \Lambda_{ij} P_{ij}$$

Tvermės dėsniai ir hidrodinaminės lygtys (X)

- Režiumuodami gautus rezultatus užrašysime visus tris tvermės dėsnius vienoje vietoje.

Tvermės lygtys:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{u}) = 0 \quad (\text{masės})$$

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \nabla \right) \vec{u} = \frac{\rho}{m} \vec{F} - \nabla \hat{P} \quad (\text{impulso})$$

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \nabla \right) \theta = -\frac{2}{3} \nabla \vec{q} - \frac{2}{3} \hat{P} \hat{\Lambda} \quad (\text{energijos})$$

$\rho(\vec{r}, t)$ – masės tankis

$\vec{u}(\vec{r}, t)$ – vidutinis greitis

$\theta(\vec{r}, t)$ – temperatūra

P_{ij} – slėgio tenzorius

$\vec{q}(\vec{r}, t)$ – šilumos srautas

Žymėjimai:

$$\rho(\vec{r}, t) \equiv m \int d^3 v f(\vec{r}, \vec{v}, t)$$

$$\vec{u}(\vec{r}, t) \equiv \langle \vec{v} \rangle$$

$$\theta(\vec{r}, t) = \frac{m}{3} \langle |\vec{v} - \vec{u}|^2 \rangle$$

$$P_{ij} \equiv \rho \langle (v_i - u_i)(v_j - u_j) \rangle$$

$$\vec{q}(\vec{r}, t) \equiv \frac{m}{2} \rho \langle (\vec{v} - \vec{u}) |\vec{v} - \vec{u}|^2 \rangle$$

$$\Lambda_{ij} \equiv \frac{m}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

$$\hat{P} \equiv \{P_{ij}\} - \text{tenzorius} \quad \hat{P} \hat{\Lambda} \equiv P_{ij} \Lambda_{ij} - \text{skaliaras}$$

$$\nabla \hat{P} \equiv \{\partial P_{ij} / \partial x_j\} - \text{vektorius}$$

Vietinė pusiausvyra ir hidrodinaminės lygtys

- Užrašytos tvermės lygtys yra tiek pat tikslios kiek tiksliai Boltzmano kinetinė lygtis. Tačiau jos nesudaro uždaros lygčių sistemos. Tai lygtys trim kintamiesiems (dviem skaliariniais $\rho(\vec{r}, t)$, $\theta(\vec{r}, t)$ ir vienam vektoriniam $\vec{u}(\vec{r}, t)$), kurie nekinta molekulių susidūrimo metu. Tačiau į šias lygtis įeina slėgio tenzorius P_{ij} ir šilumos srautas $\vec{q}(\vec{r}, t)$. Šie dydžiai neišsireiškia per ρ , θ ir $\vec{u}$, todėl lygčių sistema yra neuždara.
- Nors bendruoju atveju tvermės lygčių sistema nėra uždara, esant tam tikroms fizikinėms sąlygoms ją pavyksta uždaryti. Tai pavyksta padaryti, jeigu yra žinomas dalelių pasiskirstymas pagal greičius. Tuomet tvermės lygtys virsta **hidrodinaminėmis lygtimis**. Aptarsime šį atvejį detaliau.
- Tarkime, kad Boltzmano kinetinėje lygtyje

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \nabla_{\vec{r}} + \frac{\vec{F}}{m} \nabla_{\vec{v}} \right) f - \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{susid}} = 0$$

trys pirmi nariai yra žymiai mažesni už paskutinį narį, t.y. susidūrimo narys yra dominuojantis. Tokia situacija turėtų realizuotis tada, kai išorinė jėga nėra didelė ir kai funkcija f lėtai kinta laike ir erdvėje. Detalesnis šio artėjimo kriterijus bus aptartas vėliau. Tuomet nuliniame artinyje pirmus tris narius galime tiesiog išbraukti. Aptarsime detaliau šio nulinio artinio sprendinius.

Nulinis artinys

- Nuliniame artėjime kietinėje lygtyje yra tik susidūrimo narys

$$-\left(\frac{\partial f^{(0)}}{\partial t}\right)_{\text{susid}} = 0$$

- Šią lygtį mes jau sprendėme ir nustatėme, kad jos sprendinys yra pusiausvyrinis Maksvelo-Boltzmano skirstinys

$$f_2' f_1' - f_1 f_2 = 0 \quad \Rightarrow \quad f^{(0)}(\vec{r}, \vec{v}, t) = n \left(\frac{m}{2\pi\theta} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m}{2\theta} (\vec{v} - \vec{u})^2 \right]$$

kuriame n , θ ir $\vec{u}$ yra **laisvi parametrai**. Bendruoju atveju jie gali priklausyti nuo koordinatės $\vec{r}$ ir laiko t , nes susidūrimo narys nepriklauso nuo šių kintamųjų (jis priklauso tik nuo greičio). Kadangi kinetinės lygties pirmi trys nariai yra maži, tai nulinio sprendinio parametrai turi būti **lėtos** laiko ir koordinatės funkcijos:

$$n = n(\vec{r}, t)$$

$$\theta = \theta(\vec{r}, t)$$

$$\vec{u} = \vec{u}(\vec{r}, t)$$

Tvermės dėsniai ir hidrodinaminės lygtys (XIII)

- Taigi matome, kad esant aukščiau išvardintoms prielaidoms kiekviename erdvės taške nusistovi **vietinė (lokali) pusiausvyra** aprašoma Maksvelo-Boltzmano skirstiniu, kurio parametrai (koncentracija, temperatūra ir vidutinis greitis) lėtai kinta laike ir erdvėje. Šie parametrai nekinta molekulių susidūrimo metu ir jiems galioja anksčiau užrašyti tvermės dėsniai. Priminsiu, kad tvermės dėsniai gauti iš tikslios (nedarant jokių prielaidų) kinetinės lygties ir yra tiek pat tikslūs kiek tiksliai yra kinetinė lygtis.
- Žinodami lokalinę skirstinio formą mes galime apskaičiuoti slėgio tenzorių $P_{ij}(\vec{r}, t)$ ir šilumos srautą $\vec{q}(\vec{r}, t)$. Tiksliau sakant mes galime išreikšti juos per pusiausvyrinio skirstinio parametrus n , θ ir $\vec{u}$ ir tuo pačiu uždaryti tvermės lygčių sistemą.
- Pažymėkime (tuos pačius C ir A žymėjimus mes jau naudojome anksčiau):

$$C(\vec{r}, t) = n \left(\frac{m}{2\pi\theta} \right)^{3/2}$$

$$A(\vec{r}, t) = \frac{m}{2\theta}$$

$$\vec{U} = \vec{v} - \vec{u}$$

Nesunku įsitikinti, kad šilumos srautas šiame artinyje lygus nuliui:

$$\begin{aligned} \vec{q}^{(0)}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{2} \frac{m\rho}{n} \int d^3v (\vec{v} - \vec{u}) |\vec{v} - \vec{u}|^2 C(\vec{r}, t) \exp\left(-A(\vec{r}, t) |\vec{v} - \vec{u}|^2\right) \\ &= \frac{1}{2} m^2 C(\vec{r}, t) \int d^3U \vec{U} |\vec{U}|^2 \exp\left(-A(\vec{r}, t) |\vec{U}|^2\right) = 0 \end{aligned}$$

(nulis gaunamas dėl to, kad funkcija po integralu yra nelyginė)

- Panašiai apskaičiuojame slėgio tenzorių:

$$P_{ij}^{(0)}(\vec{r}, t) = \frac{\rho}{n} C(\vec{r}, t) \int d^3v (v_i - u_i)(v_j - u_j) \exp\left(-A(\vec{r}, t) |\vec{v} - \vec{u}|^2\right) \\ = m C(\vec{r}, t) \int d^3U U_i U_j \exp\left(-A(\vec{r}, t) |\vec{U}|^2\right) = \delta_{ij} P$$

Čia:

$$P = \frac{1}{3} m C(\vec{r}, t) \int d^3U |\vec{U}|^2 \exp\left(-A(\vec{r}, t) |\vec{U}|^2\right) = \frac{n}{3} \langle m |U|^2 \rangle = n\theta = \frac{1}{m} \rho \theta$$

yra **hidrostatinis slėgis (idealių dujų būsenos lygtis)**. Pastebėsime, kad pastarąjį integralą mes jau skaičiavome, kai nagrinėjome pusiausvyrinį Boltzmano lygties sprendinį.

- Irašydami šias išraiškas į tvermės lygtis ir pastebėdami, kad

$$\nabla \hat{P}^{(0)} = \left\{ \frac{\partial}{\partial x_j} (\delta_{ij} P) \right\} = \nabla P, \quad \hat{P}^{(0)} \hat{\Lambda} = P \sum_{i=1}^3 \Lambda_{ii} = P \frac{m}{2} \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) = m P \nabla \vec{u}$$

gauname **nulinio artinio hidrodinaminės lygtis:**

Nulinio artinio hidrodinaminės lygtys

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{u}) = 0 \quad (\text{tolydumo lygtis})$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \nabla \right) \vec{u} + \frac{1}{\rho} \nabla P = \frac{\vec{F}}{m} \quad (\text{Oilerio lygtis})$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \nabla \right) \theta + \frac{2}{3} (\nabla \vec{u}) \theta = 0 \quad (\text{energijos tvermės lygtis})$$

idealių dujų
būsenos lygtis:

$$\left(P = \frac{1}{m} \rho \theta \right)$$

- Tai yra **uždara lygčių sistema**. Šių lygčių kintamieji yra dydžiai suvidurkinti pagal molekulių greičius $\mathbf{v}$. Šios lygtys neblogai aprašo **makroskopinį** dujų judėjimą. Tačiau pagrindinis šių lygčių trūkumas yra tas, kad jos **neįskaito klampos**. Šiame artinyje lokalus Maksvelo-Boltzmano skirstinys einant laikui nevirsta tikru Maksvelo-Boltzmano skirstiniu. Vis dėl to šios lygtys neblogai aprašo realius eksperimentus, nes yra žinoma, kad neveikiami išorinių jėgų hidrodinaminiai srautai gęsta gana lėtai.
- Nors šios lygtys gautos su prielaida, kad dujos yra išretintos, jos taip pat **tinka skysčio judėjimui aprašyti**. Taip yra todėl, kad šias lygtis galima išvesti kitaip, remiantis žymiai bendresniais euristiniais samprotavimais.

Tvermės dėsniai ir hidrodinaminės lygtys (XVI)

- Panagrinėsime nulinio artinio hidrodinaminės lygtis. Parodysime, kad tiesinime artinyje iš jų galima gauti bangos lygtį ir nustatyti akustinių bangų sklaidimo greitį. Jeigu dujas neveikia išorinės jėgos, $\vec{F} = 0$, tai stacionarų hidrodinaminių lygčių sprendinį galima užrašyti taip:

$$\rho_0 = \text{const}(\vec{r}, t) \quad \vec{u}_0 = 0 \quad \theta_0 = \text{const}(\vec{r}, t)$$

- Panagrinėsime mažus nuokrypius nuo stacionaraus sprendinio. Dėl to įrašome į hidrodinaminės lygtis

$$\rho = \rho_0 + \delta\rho \quad \vec{u} = \vec{u}_0 + \delta\vec{u} = \delta\vec{u} \quad \theta = \theta_0 + \delta\theta$$

ir linearizuojame jas atžvilgiu mažų nuokrypių $\delta\rho, \delta\vec{u} = \vec{u}, \delta\theta$

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta\rho + \rho_0 \nabla \vec{u} = 0 \quad \Rightarrow \quad \nabla \vec{u} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial t} \delta\rho$$

$$\nabla \left| \frac{\partial}{\partial t} \vec{u} + \frac{1}{m\rho_0} (\theta_0 \nabla \delta\rho + \rho_0 \nabla \delta\theta) = 0 \right. \Rightarrow -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta\rho + \frac{1}{m\rho_0} (\theta_0 \nabla^2 \delta\rho + \rho_0 \nabla^2 \delta\theta) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta\theta + \frac{2}{3} \theta_0 \nabla \vec{u} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial t} \left(\delta\theta - \frac{2}{3} \frac{\theta_0}{\rho_0} \delta\rho \right) = 0 \quad \Rightarrow \quad \delta\theta = \frac{2}{3} \frac{\theta_0}{\rho_0} \delta\rho$$

- Galutinai tankio nuokrypiui gauname bangos lygtį

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta \rho = \frac{5}{3} \frac{\theta_0}{m} \nabla^2 \delta \rho \quad \text{arba} \quad \frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta \rho = c^2 \nabla^2 \delta \rho$$

Čia c yra akustinės bangos sklidimo greitis (garso greitis) :

$$c = \sqrt{\frac{5}{3} \frac{\theta_0}{m}} = \sqrt{\frac{5}{6} \langle v^2 \rangle}$$

Matome, kad garso greitis apytiksliai lygus vidutiniam molekulių šiluminiam greičiui.

- Jau minėjau, kad nulinio artinio hidrodinaminės lygtys neaprašo klampos reiškinių. Klampos reiškiniai atsiranda tik pirmame artinyje. Griežtas hidrodinaminių lygčių išvedimas pirmame artinyje yra gana sudėtingas. Jis paremtas vadinamuoju **Čapmano-Enskogo (Chapman-Enskog) metodu**. Čia panagrinėsime supaprastintą šio metodo versiją.

- Pagrindines idėjas bei problemas, su kuriomis susiduriama išvedinėjant pirmo artinio hidrodinamines lygtis pademonstruosime, panaudodami supaprastintą susidūrimo nario išraišką. Susidūrimo narį aproksimuosime **relaksacijos laiku**. Naudodami šią aproksimaciją mes negausime tikslių pernašos koeficientų išraiškų. Tačiau naudodami relaksacijos laiko aproksimaciją mes gausime teisingas hidrodinamines lygtis ir kokybiškai teisingas pernašos koeficientų išraiškas.

Pirmas artinys

- Įvertinsime nulinio artinio hidrodinaminių lygčių paklaidą. Tegul $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ yra tikslus Boltzmano lygties sprendinys. Tikslaus sprendinio nuokrypį nuo nulinio artinio sprendinio pažymėsime funkcija

$$g(\vec{r}, \vec{v}, t) \equiv f(\vec{r}, \vec{v}, t) - f^{(0)}(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad \longrightarrow \quad f = f^{(0)} + g$$

Mus domins funkcijų g ir $f^{(0)}$ santykio eilė. Pradžioje įvertinsime susidūrimo narį

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{susid}} &= \int d^3 v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_2 - \vec{v}_1| (f'_2 f'_1 - f_2 f_1) \\ &\approx \int d^3 v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_2 - \vec{v}_1| (f_2'^{(0)} g'_1 - f_2^{(0)} g_1 + g'_2 f_1'^{(0)} - g_2 f_1^{(0)}) \end{aligned}$$

Čia mes atmetėme kvadratinis funkcijos g narius nes tariame, kad ši funkcija yra maža. Susidūrimo nario eilės įvertinimui apskaičiuokime antrą šios išraiškos narį:

$$-g(\vec{r}, \vec{v}_1, t) \int d^3 v_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\vec{v}_2 - \vec{v}_1| f_2^{(0)} = -\frac{g(\vec{r}, \vec{v}_1, t)}{\tau} = -\frac{f - f^{(0)}}{\tau}$$

Čia τ pagal eilę lygus laisvo lėkio laikui.

- Toliau susidūrimo narį supaprastinsime, pakeisime jį išraiška

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{susid}} \approx - \frac{f - f^{(0)}}{\tau}$$

– **relaksacijos laiko aproksimacija**

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{f - f^{(0)}}{\tau} \Rightarrow f = (f_0 - f^{(0)})e^{-t/\tau} + f^{(0)} \Rightarrow f \rightarrow f^{(0)} \text{ kai } t \rightarrow \infty$$

Matome, kad taip pakeistas susidūrimo narys kokybiškai teisingai aprašo sistemos artėjimą prie pusiausvyrinio skirstinio. Panaudojus **relaksacijos laiko aproksimaciją**, kinetinė lygtis įgauna tokį pavidalą:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \nabla_{\vec{r}} + \frac{\vec{F}}{m} \nabla_{\vec{v}} \right) (f^{(0)} + g) \approx - \frac{g}{\tau}$$

Esant prielaidai $g \ll f^{(0)}$, kairioje lygties pusėje galime išbraukti funkciją g . Tarkime, kad charakteringas funkcijos $f^{(0)}$ kitimo ilgis yra L (ilgis, kuriame funkcija pasikeičia dydžiu, pagal eilę lygiu funkcijos reikšmei). Tuomet, vertinant kairės ir dešinės pusės narių eiles, gauname

$$\langle |v| \rangle \frac{f^{(0)}}{L} \approx - \frac{g}{\tau} \Rightarrow \frac{g}{f^{(0)}} \approx - \frac{\lambda}{L}$$

Čia $\lambda = \langle |v| \rangle \tau$ pagal eilę lygus laisvo lėkio keliui.

Tvermės dėsniai ir hidrodinaminės lygtys (XX)

- Iš čia matome, kad nulinis artinys $f^{(0)}$ yra geras, jeigu lokalaus tankio ρ , greičio $\vec{u}$ ir temperatūros θ charakteringas kitimo ilgis L yra žymiai didesnis negu laisvo lėkio kelias λ . Funkcijos $f^{(0)}$ pataisos yra $\varepsilon \equiv \lambda/L$ eilės.
- Nuoseklus funkcijos f skleidimas mažo parametro λ/L laipsniais atliekamas gana sudėtingu Chapmano –Enskogo metodu. Čia šio metodo esmę pademonstruosime supaprastintai kinetinei lygčiai, kurioje susidūrimo narys aproksimuojamas relaksacijos laiku. Tuomet pataisos funkcija g paprastai išreiškiama per nulinio artinio funkciją $f^{(0)}$:

$$g = -\tau \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \nabla_{\vec{r}} + \frac{\vec{F}}{m} \nabla_{\vec{v}} \right) f^{(0)} \quad f^{(0)}(\vec{r}, \vec{v}, t) = \frac{\rho}{m} \left(\frac{m}{2\pi\theta} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m}{2\theta} (\vec{v} - \vec{u})^2 \right]$$

- Skaičiuojant pataisą g reikia turėti omenyje, kad **funkcija** g **priklauso nuo** $\vec{r}$ **ir** t **tik per funkcijas** ρ , $\vec{u}$ **ir** θ . Todėl mum bus reikalingos tokios išvestinės:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \rho} &= \frac{f^{(0)}}{\rho} & \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \theta} &= \frac{1}{\theta} \left(\frac{m}{2\theta} \vec{U}^2 - \frac{3}{2} \right) f^{(0)} \\ \frac{\partial f^{(0)}}{\partial u_i} &= \frac{m}{\theta} U_i f^{(0)} & \frac{\partial f^{(0)}}{\partial v_i} &= -\frac{m}{\theta} U_i f^{(0)} \end{aligned}$$

Čia, kaip ir anksčiau,

$$\vec{U} \equiv \vec{v} - \vec{u}(\vec{r}, t)$$

- Panaudodami šių išvestinių išraiškas, apskaičiuojame g :

$$g = -\tau \left\{ \frac{\partial}{\partial t} + v_i \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{\vec{F}_i}{m} \frac{\partial}{\partial v_i} \right\} f^{(0)}$$

$$= -\tau f^{(0)} \left\{ \frac{1}{\rho} D(\rho) + \frac{1}{\theta} \left(\frac{m}{2\theta} \vec{U}^2 - \frac{3}{2} \right) D(\theta) + \frac{m}{\theta} U_j D(u_j) - \frac{1}{\theta} \vec{F} \vec{U} \right\}$$

Čia:

$$D(X) \equiv \left(\frac{\partial}{\partial t} + v_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right) X$$

- Panaudojus nulinio artinio hidrodinamines lygtis, galima gauti tokias išraiškas:

$$D(\rho) = -\rho(\nabla \vec{u}) + \vec{U} \nabla \rho$$

$$D(\theta) = -\frac{2}{3} \theta(\nabla \vec{u}) + \vec{U} \nabla \theta$$

$$D(u_j) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{F_j}{m} + U_i \frac{\partial u_j}{\partial x_i}$$

$$\left(P = \frac{\rho \theta}{m} \right)$$

Tvermės dėsniai ir hidrodinaminės lygtys (XXII)

- Įrašydami šias formules į funkcijos g išraišką, gauname

$$g = -\tau f^{(0)} \left\{ -\nabla \vec{u} + \vec{U} \frac{\nabla \rho}{\rho} + \frac{1}{\theta} \left(\frac{m}{2\theta} \vec{U}^2 - \frac{3}{2} \right) \left(-\frac{2}{3} \theta \nabla \vec{u} + \vec{U} \nabla \theta \right) + \frac{m}{\theta} \left(-\vec{U} \frac{\nabla P}{\rho} + \vec{U} \frac{\vec{F}}{m} + U_i U_j \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{\theta} \vec{F} \vec{U} \right\}$$

Čia tam tikri nariai išsiprastina ir formulė supaprastėja iki:

$$(*) \quad g = -\tau f^{(0)} \left\{ \frac{1}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial x_i} U_i \left(\frac{m}{2\theta} \vec{U}^2 - \frac{5}{2} \right) + \frac{1}{\theta} \Lambda_{ij} \left(U_i U_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \vec{U}^2 \right) \right\} \quad \Lambda_{ij} \equiv \frac{m}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)$$

Prisiminkime, kad tai yra ieškomos funkcijos pataisa. Pilna funkcija yra:

$$f = f^{(0)} + g$$

- Dabar, kai nustatėme funkcijos pataisą, galime apskaičiuoti šiluminio srauto $\vec{q}$ ir slėgio tenzoriaus P_{ij} pataisas, įrašyti jas į tvermės lygtis ir gauti pirmo artinio hidrodinaminės lygtis.

Pernašos koeficientai

- Pradžioje apskaičiuosime šiluminį srautą. Prisiminkime, kad nuliniame artinyje jis lygus nuliui. Pirmame artinyje antro funkcijos g (išraiška $(*)$) nario indėlis taip lygus nuliui, nes po integralu yra nelyginė funkcija. Pirmo nario indėlis yra:

$$\vec{q} = \frac{m\rho}{2n} \int d^3v (\vec{v} - \vec{u}) |\vec{v} - \vec{u}|^2 g = -\frac{\tau m^2}{2} \int d^3U \vec{U} \vec{U}^2 \left(\frac{m}{2\theta} \vec{U}^2 - \frac{5}{2} \right) \frac{1}{\theta} U_i \frac{\partial \theta}{\partial x_i} f^{(0)}$$

Arba:

$$\vec{q} = -\tilde{K} \nabla \theta$$

$$\tilde{K} = \frac{\tau m^2}{6\theta} \int d^3U \vec{U}^4 \left(\frac{m}{2\theta} \vec{U}^2 - \frac{5}{2} \right) f^{(0)} = \frac{5}{2} \tau \theta n$$

Iš čia matome, kad $\tilde{K}$ yra **šiluminio laidumo koeficientas**. Čia mes jį pažymėjome su tilda, nes jis apibrėžtas šiek tiek kitaip, negu elementarioje pernašos teorijoje.

Ten mes rašėme $\vec{q}/m = -K \nabla T$. Kadangi $\theta = k_B T$, tai ryšys tarp K ir $\tilde{K}$ yra toks: $K = (m/k_B) \tilde{K}$. Elementarios teorijos rezultatas buvo toks: $K = (4/\pi) \tau \theta n k_B / m$.

- Dabar apskaičiuosime slėgio tenzorį:

$$P_{ij} = \frac{\rho}{n} \int d^3v (v_i - u_i) (v_j - u_j) (f^{(0)} + g) = \delta_{ij} P + P'_{ij}$$

Čia pirmas narys atitinka nulinį artinį, kurį apskaičiavome anksčiau, $P = \frac{\rho \theta}{m}$, o antras – pataisą, kurią reikia apskaičiuoti.

Į pataisą indėlį duoda tik antras išraiškos (*) narys.

$$P'_{ij} = -\frac{\tau\rho}{\theta n} \Lambda_{kl} \int d^3U U_i U_j \left(U_k U_l - \frac{1}{3} \delta_{kl} \vec{U}^2 \right) f^{(0)}$$

Iš šios išraiškos nesunku įsitikinti, kad tai yra simetrinis tenzorius su nuliniu pėdsaku

$$P'_{ij} = P'_{ji} \qquad \sum_{i=1}^3 P'_{ii} = 0$$

Kadangi P'_{ij} tiesiškai priklauso nuo simetrinio tenzoriaus Λ_{ij} , tai jį galima užrašyti taip

$$P'_{ij} = -\eta \frac{2}{m} \left(\Lambda_{ij} - \frac{m}{3} \delta_{ij} \nabla \vec{u} \right)$$

Čia η yra proporcingumo konstanta (kol kas nežinoma), o $m \nabla \vec{u}$ yra Λ_{ij} tenzoriaus pėdsakas

$$\sum_{i=1}^3 \Lambda_{ii} = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) = m \nabla \vec{u}$$

Belieka nustatyti konstantą η . Dėl to pakanka apskaičiuoti bet kurią vieną tenzoriaus P'_{ij} komponentę, pavyzdžiui P'_{12} .

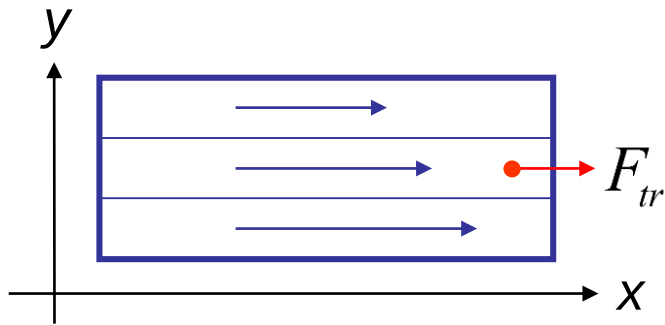
$$P'_{12} = -\frac{\tau m}{\theta} \Lambda_{kl} \int d^3U U_1 U_2 \left(U_k U_l - \frac{1}{3} \delta_{kl} \vec{U}^2 \right) f^{(0)} = -2 \frac{\tau m}{\theta} \Lambda_{12} \int d^3U U U_1^2 U_2^2 f^{(0)}$$

Taigi gauname:

$$\eta = \frac{\tau m^2}{\theta} \int d^3U U U_1^2 U_2^2 f^{(0)} = \tau n \theta$$

$$P_{ij} = \delta_{ij} P - \eta \frac{2}{m} \left(\Lambda_{ij} - \frac{m}{3} \delta_{ij} \nabla \vec{u} \right)$$

- Nesunku įsitikinti, kad proporcingumo konstanta η yra **klamos koeficientas**. Dėl to reikia prisiminti klamos koeficiento apibrėžimą. Jeigu atskiri dujų (skysčio) sluoksniai juda vienas atžvilgio kito taip, kad



$$u_x = A + By, \quad u_y = u_z = 0,$$

tai klamos koeficientas eksperimentiškai nustatomas iš sąryšio

$$F_{tr} = -\eta \frac{\partial u_x}{\partial y}$$

Čia F_{tr} yra trinties jėga į ploto vienetą, kuri veikia skirtingais greičiais judančius skysčio sluoksnius. Iš kitos pusės

$$F_{tr} =$$

impulso x komponentė perduota per vieną sekundę į ploto vienetą y kryptimi.

Tvermės dėsniai ir hidrodinaminės lygtys (XXVI)

- Perduoto impulso dydis yra $m(v_x - u_x)$, o molekulių srautas, dalyvaujantis impulso perdavime yra $n(v_y - u_y)$. Todėl

$$F_{tr} = mn \langle (v_x - u_x)(v_y - u_y) \rangle = m \int d^3v (v_x - u_x)(v_y - u_y) (f^{(0)} + g)$$

Čia indėlis į integralą nuo $f^{(0)}$ lygus nuliui, nes funkcija po integralu yra nelyginė. Funkcijos pataisą g galima gauti iš apytikslės kinetinės lygties (kinetinėje lygtyje išbraukiame išorinę jėgą ir laiko išvestinę, nes nagrinėjame stacionarų procesą):

$$\vec{v} \nabla f^{(0)} = -\frac{g}{\tau} \quad \Rightarrow \quad g = -\tau v_y \frac{\partial f^{(0)}}{\partial y} = -\frac{\tau m}{\theta} v_y (v_x - u_x) B f^{(0)} = -\frac{\tau m}{\theta} U_y U_x \frac{\partial u_x}{\partial y} f^{(0)}$$

Čia mes tarėme, kad tankis ρ ir temperatūra θ yra homogeniniai (nepriklauso nuo $\vec{r}$).

Irašome šią funkcijos g išraišką į trinties jėgos apibrėžimą

$$F_{tr} = -\frac{\partial u_x}{\partial y} \frac{\tau m^2}{\theta} \int d^3U U_x^2 U_y^2 f^{(0)} = -\eta \frac{\partial u_x}{\partial y} \quad \Rightarrow \quad \eta = \frac{\tau m^2}{\theta} \int d^3U U_x^2 U_y^2 f^{(0)} = \tau n \theta$$

Taigi gavome tą pačią η koeficiento išraišką !!! Vadinasi, η iš tikrųjų yra klampos koeficientas. (Elementarioje teorijoje turėjome tokią išraišką: $\eta = (8/3\pi) \tau n \theta$)

- Suformuluosime šio skirsnio pagrindinius rezultatus:
1. Mes parodėme, kad pernašos koeficientus galima nustatyti iš Boltzmano kinetinės lygties. Dėl to kinetinę lygtį reikia išspręsti $\varepsilon = \lambda/L$ tikslumu, t.y., be nulinio artinio $f^{(0)}$ reikia žinoti pirmą pataisą g . Pernašos koeficientai proporcingi funkcijos pataisai g ir todėl yra ε eilės.
 2. Tiesioginis patikrinimas rodo, kad nustatytos iš kinetinės lygties pernašos koeficientų išraiškos sutampa su analogiškais išraiškais gautomis elementariosios teorijos rėmuose vieneto eilės proporcingumo konstantų tikslumu.
 3. Čia nustatytos pernašos koeficientų išraiškos nėra tikslios, nes susidūrimo nariui naudojome grubią relaksacijos laiko aproksimaciją. Nemodifikuodami susidūrimo nario galėjome gauti tikslesnes pernašos koeficientų išraiškas. Tačiau tuomet aprašyta čia Čapmano-Enskogo procedūra tampa gerokai sudėtinga.
 4. Čia be pernašos koeficientų mes dar nustatėme šilumos srauto $\vec{q}$ ir slėgio tenzoriaus P_{ij} išraiškas. Šias išraiškas suradome ε tikslumu. Įrašant jas į tvermės lygtis galima gauti pirmo artinio hidrodinamines lygtis. Tokios lygtys aprašo klampių dujų dinamiką. Toliau ir pereisim prie šių lygčių išvedimo.

Klampiųjų dujų (skysčio) hidrodinaminės lygtys

- Taigi mes nustatėme tokias šilumos srauto ir slėgio tenzoriaus išraiškas

$$\vec{q} = -\tilde{K} \nabla \theta \quad P_{ij} = \delta_{ij} P - \eta \frac{2}{m} \left(\Lambda_{ij} - \frac{m}{3} \delta_{ij} \nabla \vec{u} \right)$$

Mums reikia jas įrašyti į tvermės lygtis. Dėl to reikia apskaičiuoti tokius tris dydžius: $\nabla \vec{q}$, $\nabla \hat{P}$ ir $\hat{P} \hat{\Lambda}$. Išvedinėjant jų išraiškas reikia turėti omenyje, kad η , $\tilde{K}$, $\vec{u}$ ir išvestinės nuo ρ , θ , $\vec{u}$ yra pirmos eilės mažumo dydžiai. Nariai su išvestinėmis nuo η , $\tilde{K}$ yra aukštesnės eilės mažumo ir juos galima atmesti. Tai yra, pirmame artinyje pernašos koeficientus η ir $\tilde{K}$ galima laikyti konstantomis. Tuomet:

$$\nabla \vec{q} = -\tilde{K} \nabla^2 \theta$$

- Apskaičiuosime vektoriaus $\nabla \hat{P}$ i komponentę:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_{ij}}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \delta_{ij} P - \eta \frac{2}{m} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \Lambda_{ij} - \frac{m}{3} \frac{\partial}{\partial x_j} \delta_{ij} \nabla \vec{u} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x_i} P - \eta \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \nabla \vec{u} \right) \end{aligned}$$

$$\Lambda_{ij} \equiv \frac{m}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)$$

(čia, kaip visuomet, turime omenyje sumavimą pagal pasikartojantį indeksą)

$$\frac{\partial P_{ij}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_i} P - \eta \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \sum_{j=1}^3 \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \nabla \vec{u} \right)$$

$$= \frac{\partial}{\partial x_i} P - \eta \left(\nabla^2 u_i + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \nabla \vec{u} \right)$$

$$\nabla \hat{P} = \nabla P - \eta \nabla^2 \vec{u} - \frac{\eta}{3} \nabla (\nabla \vec{u})$$

Pagaliau apskaičiuosime paskutinę išraišką:

$$\hat{P} \hat{\Lambda} = P_{ij} \Lambda_{ij} = \left\{ \delta_{ij} P - \eta \frac{2}{m} \left(\Lambda_{ij} - \frac{m}{3} \delta_{ij} \nabla \vec{u} \right) \right\} \Lambda_{ij}$$

$$\sum_{i=1}^3 \Lambda_{ii} = m \sum_{i=1}^3 \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = m \nabla \vec{u}$$

$$= P \sum_{i=1}^3 \Lambda_{ii} - \eta \frac{2}{m} \Lambda_{ij} \Lambda_{ij} + \frac{2}{3} \eta \sum_{i=1}^3 \Lambda_{ii} \nabla \vec{u} = m P \nabla \vec{u} + (\text{aukštesnės eilės nariai})$$

$$\hat{P} \hat{\Lambda} = m P \nabla \vec{u}$$

- Įrašydami gautas išraiškas $\nabla \vec{q}$, $\nabla \hat{P}$ ir $\hat{P} \hat{\Lambda}$ į tvermės lygtis, gauname pirmo artinio hidrodinaminės lygtis.

Pirmo artinio hidrodinaminės lygtys

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{u}) = 0 \quad (\text{tolydumo lygtis})$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \nabla \right) \vec{u} = \frac{\vec{F}}{m} - \frac{1}{\rho} \nabla \left(P - \frac{\eta}{3} (\nabla \vec{u}) \right) + \frac{\eta}{\rho} \nabla^2 \vec{u} \quad (\text{Navjė-Stokso lygtis})$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \nabla \right) \theta = - \frac{1}{\tilde{c}_V} (\nabla \vec{u}) \theta + \frac{\tilde{K}}{\rho \tilde{c}_V} \nabla^2 \theta \quad (\text{šiluminio laidumo lygtis})$$

$$\left(P = \frac{1}{m} \rho \theta \right) - \text{idealių dujų būsenos lygtis}$$

Šiose lygtyse $\tilde{c}_V = \frac{3}{2}$ yra tenkanti vienai molekulei idealių dujų šiluminė talpa.

Kartu su dujų būsenos lygtimi jos sudaro uždara lygčių sistemą dviem skaliariniais kintamiesiems ρ, θ ir vienam vektoriniam kintamajam $\vec{u}$. Žinant pradinius šių kintamųjų erdvinius pasiskirstymus iš jų galima vienareikšmiškai nustatyti tolimesnę jų evoliuciją. Pabrėšime, kad skirtingai nuo nulinio artinio hidrodinaminių lygčių, **šios lygtys aprašo klampių dujų hidrodinamiką.**

Tvermės dėsniai ir hidrodinaminės lygtys (XXXI)

- Išvedinėdami šias lygtis darėme prielaidą, kad dujos yra išretintos. Tačiau šios lygtys **tinka ir skysčiui**. Taip yra todėl, kad šias lygtis galima gauti ir kitoku būdu – remiantis euristiniais samprotavimais. Taip Navjė-Stokso lygtį galima išvesti užrašant mažam išskirtam skysčio tūreliui antrą Niutono dėsnį.
- Jeigu trečioje lygtyje įrašysime $\vec{u} = 0$ (nagrinėsime nejudančias dujas), tai gausime įprastinę šiluminio laidumo lygtį:

$$\rho \tilde{c}_V \frac{\partial \theta}{\partial t} = \tilde{K} \nabla^2 \theta$$

Nors mes ją išvedėme išretintoms dujoms, eksperimentiškai nustatyta, kad ji taip pat galioja skysčiams ir kietiesiems kūnams.

Taigi pirmo artinio hidrodinaminės lygtys yra universalios – jų taikymas nesiriboja vien tik išretintomis dujomis!

- Išvedinėdami šias lygtis susidūrimo nariui mes taikėme gana grubią relaksacijos laiko aproksimaciją. Nežiūrint į tai mes gavome teisingas pirmo artinio hidrodinamines lygtis, ta prasme, kad tokios pačios lygtys gaunamos nenaudojant relaksacijos laiko aproksimacijos. Dėl grubios susidūrimo nario aproksimacijos nukentėjo tik kinetinių (pernašos) koeficientų išraiškos. Šių išraiškų patikslinimui reikia atlikti Čapmano-Enskogo procedūrą esant tiksliai susidūrimo nario išraiškai.

Boltzmano kinetinės lygties pagrindimas (I)

- Ankstesniuose skyriuose mes pateikėme euristinį Boltzmano kinetinės lygties išvedimo būdą. Mes startavome nuo dalelių judėjimo aprašymo 6-matėje vienos molekulės fazinėje erdvėje, vadinamoje μ -erdvėje. Šioje erdvėje užrašėme tolydumo lygtį. Susidūrimo nariui aprašyti panaudojome molekulinio chaoso hipotezę. Iš esmės mes atkartojome originalų kinetinės lygties išvedimo būdą, kuriuo tą lygtį pirmą kartą išvedė Boltzmannas.
- Vėliau Boltzmano kinetinė lygtis buvo išvesta griežčiau. Griežtesnis išvedimo būdas vadinamas **BBGKY metodu**, pagal jį pasiūliusių autorių pavardes – **Bogoliubov, Born, Green, Kirwood, Yvon**. Šiame metode startuojama nuo tikslios Liouvilio lygties, kuri aprašo N sąveikaujančių dalelių Gibso ansamblį pilnoje $6N$ –matėje visų dalelių fazinėje erdvėje (ši erdvė vadinama **Γ -erdve**). Po to apibrėžiama s -matė tikimybės tankio funkcija f_s nusakanti tikimybę surasti s dalelių su apibrėžtomis koordinatėmis ir greičiais. Tuomet funkcija f_1 yra įprastinė viendalė tankio funkcija, kuriai buvo užrašyta Boltzmano kinetinė lygtis. Remiantis Liouvilio lygtimi, funkcijoms f_s galima išvesti tikslias dinamines lygtis. Pasirodo, kad funkcijos f_1 nustatymui reikia žinoti funkciją f_2 . Funkcijos f_2 nustatymui reikia žinoti funkciją f_3 ir t.t. iki N -dalelės funkcijos f_N . Ši lygčių sistema vadinama BBGKY hierarchija arba BBGKY grandinėle. Boltzmano kinetinė lygtis gaunama nutraukiant šią lygčių grandinę.
- Šiame skyriuje mes pradžioje išvesime Liouvilio lygtį. Iš jos gausime BBGKY lygčių grandinę ir išvesime Boltzmano kinetinę lygtį. Aptarsime jos galiojimo kriterijus.

Liouvilio lygtis

• Nagrinėsime N sąveikaujančių dalelių sistemą. Dalelių dinamiką charakterizuoja N impulsų $(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N) \equiv \vec{p}^N$ ir N koordinačių $(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_N) \equiv \vec{q}^N$ – viso $6N$ skaliarinių kintamųjų. Sistemos būseną vienareikšmiškai nusakoma vektoriumi $(\vec{p}^N, \vec{q}^N)$ $6N$ –matėje fazinėje erdvėje, vadinamoje Γ **erdvėje**.

• Kintamųjų dinamiką galima aprašyti **Hamiltono lygtimis**:

$$\boxed{\dot{\vec{p}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \vec{q}_i}} \quad \boxed{\dot{\vec{q}}_i = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i}} \quad (i = 1, 2, \dots, N)$$

$$\frac{\partial}{\partial \vec{q}_i} \equiv \nabla_{\vec{q}_i}; \quad \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \equiv \nabla_{\vec{p}_i}$$

Čia $H = H(\vec{p}^N, \vec{q}^N)$ – sistemos hamiltonianas.

• Alternatyviai sistemos dinamiką galima aprašyti **Liouvilio lygtimi**. Ši lygtis aprašo vienodų sistemų ansamblio (Gibso ansamblio) dinamiką. Atskiri ansamblio nariai turi skirtingas pradinės sąlygas, kurios vaizduojamos taškais Γ fazinėje erdvėje. Tie taškai evoliucionuoja pagal Hamiltono lygtis. Jeigu ansamblyje yra pakankamai daug sistemų, tai galima apibrėžti jų tankį $\rho(\vec{p}^N, \vec{q}^N, t)$:

$$\rho(\vec{p}^N, \vec{q}^N, t) d\vec{p}^N d\vec{q}^N \equiv$$

ansamblio narių skaičius, kurie momentu t yra mažame tūrelyje $d\vec{p}^N d\vec{q}^N$ ties tašku $(\vec{p}^N, \vec{q}^N)$.

- Ansamblio tankiui galima užrašyti tolydumo lygtį. Tą lygtį mes jau išvedėme bendruoju atveju bet kurios dimensijos dinaminiai sistemai, kai nagrinėjome Lanževeno lygtį:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla(\dot{\vec{z}}\rho)$$

Čia

$$\dot{\vec{z}} \equiv (\dot{\vec{p}}_1, \dots, \dot{\vec{p}}_N, \dot{\vec{q}}_1, \dots, \dot{\vec{q}}_N) \quad \text{ir} \quad \nabla \equiv \left(\frac{\partial}{\partial \vec{p}_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial \vec{p}_N}, \frac{\partial}{\partial \vec{q}_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial \vec{q}_N} \right)$$

Tuomet

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} (\dot{\vec{p}}_i \rho) - \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial \vec{q}_i} (\dot{\vec{q}}_i \rho) \\ &= -\sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \rho}{\partial \vec{p}_i} \dot{\vec{p}}_i + \frac{\partial \rho}{\partial \vec{q}_i} \dot{\vec{q}}_i \right) - \sum_{i=1}^N \rho \left(\frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \dot{\vec{p}}_i + \frac{\partial}{\partial \vec{q}_i} \dot{\vec{q}}_i \right) \end{aligned}$$

Iš Hamiltono lygčių išplaukia, kad paskutinis narys šioje išraiškoje lygus nuliui:

$$\frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \dot{\vec{p}}_i + \frac{\partial}{\partial \vec{q}_i} \dot{\vec{q}}_i = -\frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{q}_i} + \frac{\partial}{\partial \vec{q}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \equiv 0 \quad (i=1,2,\dots,N)$$

- Todėl tolydumo lygtį galima užrašyti taip:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \rho}{\partial \vec{p}_i} \dot{\vec{p}}_i + \frac{\partial \rho}{\partial \vec{q}_i} \dot{\vec{q}}_i \right) \longrightarrow \boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \rho}{\partial \vec{p}_i} \dot{\vec{p}}_i + \frac{\partial \rho}{\partial \vec{q}_i} \dot{\vec{q}}_i \right) = 0} \quad \text{Liouvilio lygtis}$$

Ši lygtis vadinama **Liouvilio lygtimi**. Liouvilio lygtį dar galima užrašyti kitaip:

$$\frac{d\rho(\vec{p}^N, \vec{q}^N, t)}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \rho}{\partial \vec{p}_i} \dot{\vec{p}}_i + \frac{\partial \rho}{\partial \vec{q}_i} \dot{\vec{q}}_i \right) = 0 \longrightarrow \boxed{\frac{d\rho(\vec{p}^N, \vec{q}^N, t)}{dt} = 0} \quad \text{Liouvilio lygtis}$$

Pastaroji išraiška turi paprastą geometrinį paaiškinimą. Jeigu Γ erdvėje judėsime kartu su faziniu tašku $(\vec{p}^N, \vec{q}^N)$, tai pastebėsime, kad jo aplinkoje fazinių taškų tankis nekinta. Tai reiškia, kad Γ erdvėje faziniai taškai juda tarsi **nespūdus skystis**.

- Liouvilio lygtis kartais dar užrašoma taip:

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \{H, \rho\} = 0} \quad \text{- Liouvilio lygtis}$$

$$\boxed{\{H, \rho\} \equiv \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \frac{\partial \rho}{\partial \vec{q}_i} - \frac{\partial H}{\partial \vec{q}_i} \frac{\partial \rho}{\partial \vec{p}_i} \right)} \quad \text{-Puasono skliaustai}$$

BBGKY lygčių grandinė

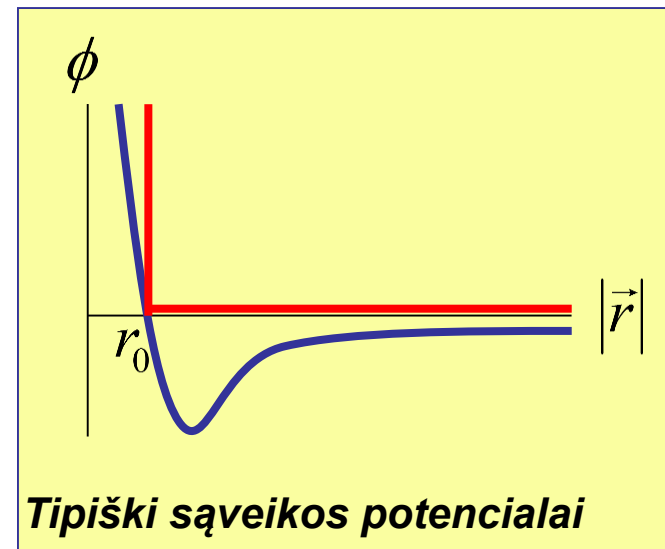
• Pabrėšime, kad Liouvilio lygtis yra ekvivalenti Hamiltono lygtims ir yra tiek pat tiksli, kiek yra tikslios Hamiltono lygtys. Kaip ir Hamiltono lygtys, ji aprašo grįžtamą laiką dalelių dinamiką. Dabar panaudojus Liouvilio lygtį mes gausime BBGKY lygčių grandinę, ir nutraukus ją, išvesime Boltzmano kinetinę lygtį, kuri yra negrįžtama.

• Pradžioje mes konkretizuosime Hamiltonianą:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N U_i + \sum_{i<j} V_{ij}$$

$U_i = U(\vec{r}_i)$ – išorinio lauko potencialas

$V_{ij} = V_{ji} = \phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$ – molekulių sąveikos potencialas



Paveiksliuke pavaizduoti tipiški tarpmolekulinės sąveikos potencialai. Raudona linija atitinka kietų sferų sąveiką (r_0 yra sferos diametras). Kartais vartojamas Lenardo-Džonsono potencialas(mėlyna kreivė):

$$\phi(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right], \quad r = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$$

- Toliau naudosime tokius žymėjimus:

$$\vec{z}_i \equiv (\vec{p}_i, \vec{r}_i)$$

$$\int dz_i \equiv \int d^3 p_i d^3 r_i$$

$$\rho(1, \dots, N, t) \equiv \rho(\vec{z}_1, \dots, \vec{z}_N, t)$$

Tarsime, kad tankio funkcija normuota į vienetą

$$\int dz_1 \cdots dz_N \rho(1, \dots, N, t) = 1$$

Tuomet bet kurios funkcijos $O(1, \dots, N)$, priklausančios nuo molekulių koordinačių, ansamblio vidurkis yra:

$$\langle O \rangle = \int dz_1 \cdots dz_N \rho(1, \dots, N, t) O(1, \dots, N)$$

- Užrašysime šiai sistemai Liouvilio lygtį:
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \frac{\partial \rho}{\partial \vec{r}_i} - \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} \frac{\partial \rho}{\partial \vec{q}_i} \right) = 0$$

$$\frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} = \frac{\vec{p}_i}{m}$$

$$\vec{F}_i = - \frac{\partial U(\vec{r}_i)}{\partial \vec{r}_i}$$

– išorinio jėga, veikianti i -tą molekulę

$$\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} = -\vec{F}_i - \sum_{i \neq j} \vec{K}_{ij}$$

$$\vec{K}_{ij} = - \frac{\partial \phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)}{\partial \vec{r}_i}$$

– tarpmolekulinės sąveikos jėga

Liouvilio lygtį galima užrašyti taip:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \hat{h}_N(1, \dots, N) \right] \rho(1, \dots, N, t) = 0$$

Čia

$$\hat{h}_N(1, \dots, N) = \sum_{i=1}^N \hat{S}_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \hat{Q}_{ij}$$

$$\hat{S}_i = \frac{\vec{p}_i}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} + \vec{F}_i \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i}$$

$$\begin{aligned} \hat{Q}_{ij} &= \bar{K}_{ij} \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} + \bar{K}_{ji} \frac{\partial}{\partial \vec{p}_j} \\ &= \bar{K}_{ij} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} - \frac{\partial}{\partial \vec{p}_j} \right) \end{aligned} \quad \left(\bar{K}_{ji} = -\bar{K}_{ij} \right)$$

$$\hat{Q}_{ij} = \hat{Q}_{ji}$$

Viendalelė tankio funkcija apibrėžiama taip:

$$\begin{aligned} f_1(\vec{r}, \vec{p}, t) &= \left\langle \sum_{i=1}^N \delta(\vec{p} - \vec{p}_i) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \right\rangle \\ &= N \int dz_2 \cdots dz_N \rho(1, \dots, N, t) \end{aligned}$$

Čia daugiklis N atsiranda dėl to, kad visi nariai sumoje duoda tą pačią vertę, nes ρ yra simetrinė atžvilgiu $\vec{z}_1, \dots, \vec{z}_N$.

Funkcijos f_1 apibrėžimas sutampa su Boltzmano lygties tankio funkcija. Skirtumas tik toks, kad čia vietoj greičio kintamojo $\vec{v}$ mes naudojame impulsą: $\vec{p} = m\vec{v}$

Bendruoju atveju s-dalelė tankio funkcija apibrėžiama taip:

$$f_s(1, \dots, s, t) \equiv \frac{N!}{(N-s)!} \int dz_{s+1} \cdots dz_N \rho(1, \dots, N, t)$$

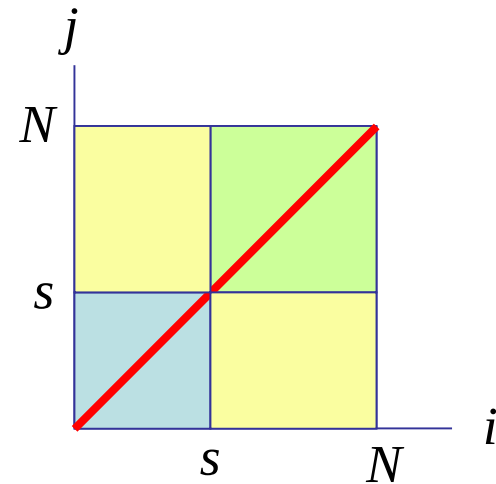
- Kombinatorinis daugiklis funkcijos f_s apibrėžime yra dėl to, kad mums nerūpi, kuri dalelė yra taške $\vec{z}_1$, kuri taške $\vec{z}_2$ ir t.t. Toliau tarsime, kad funkcija f_s yra simetrinė $\vec{z}_1, \dots, \vec{z}_s$ atžvilgiu, t.y. sukeitus bet kuriuos $\vec{z}_i$ ir $\vec{z}_j$ kintamuosius vietom ji nepasikeičia.

- Padauginę Liouvilio lygtį iš $\frac{N!}{(N-s)!}$ ir suintegravę pagal $z_{s+1}, \dots, z_N$ gauname funkcijos f_s dinaminę lygtį:

$$\left. \frac{N!}{(N-s)!} \int dz_{s+1} \cdots dz_N \right| \frac{\partial}{\partial t} \rho = -\hat{h}_N \rho \quad \longrightarrow \quad \boxed{\frac{\partial}{\partial t} f_s = -\frac{N!}{(N-s)!} \int dz_{s+1} \cdots dz_N \hat{h}_N \rho}$$

- Operatoriuje $\hat{h}_N$ išskiriame narius su koordinatėmis $\vec{z}_1, \dots, \vec{z}_s$:

$$\begin{aligned} \hat{h}_N(1, \dots, N) &= \sum_{i=1}^s \hat{S}_i + \sum_{i=s+1}^N \hat{S}_i + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^s \hat{Q}_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=s+1 \\ (i \neq j)}}^N \hat{Q}_{ij} + \sum_{i=1}^s \sum_{j=s+1}^N \hat{Q}_{ij} \\ &= \hat{h}_s(1, \dots, s) + \hat{h}_{N-s}(s+1, \dots, N) + \sum_{i=1}^s \sum_{j=s+1}^N \hat{Q}_{ij} \end{aligned}$$



- Pastebėsime, kad $\int dz_{s+1} \cdots dz_N \hat{h}_{N-s}(s+1, \dots, N) \rho(1, \dots, N, t) = 0$

Ši lygybė yra dėl to, kad operatorius $\hat{h}_{N-s}$ sudarytas iš išvestinių pagal $\vec{p}$ su nepriklausomais nuo $\vec{p}$ koeficientais ir iš išvestinių pagal $\vec{r}$ su nepriklausomais nuo $\vec{r}$ koeficientais. Todėl integralas išreiškiamas per funkcijos ρ vertes ant fazinės erdvės ribų. Mes tariame, kad ρ lygi nuliui, kai erdviniai ar impulso kintamieji artėja prie $\pm\infty$

- Atsižvelgiant į tai, kad nariai su $\hat{h}_{N-s}$ išnyksta, funkcijos f_s lygtį galima užrašyti taip:

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial}{\partial t} + \hat{h}_s \right) f_s &= - \frac{N!}{(N-s)!} \int dz_{s+1} \cdots dz_N \sum_{i=1}^s \sum_{j=s+1}^N \hat{Q}_{ij} \rho(1, \dots, N, t) \\
 &= - \frac{N!}{(N-s)!} \sum_{i=1}^s \sum_{j=s+1}^N \int dz_{s+1} \cdots dz_N \hat{Q}_{ij} \rho(1, \dots, N, t) \\
 &= - \frac{N!}{(N-s)!} \sum_{i=1}^s (N-s) \int dz_{s+1} \cdots dz_N \hat{Q}_{i,s+1} \rho(1, \dots, N, t) \quad \text{(suma pagal } j \text{ duoda } N-s \text{ vienodų narių)} \\
 &= - \sum_{i=1}^s \int dz_{s+1} \hat{Q}_{i,s+1} \frac{N!}{(N-s+1)!} \int dz_{s+2} \cdots dz_N \rho(1, \dots, N, t) \\
 &= - \sum_{i=1}^s \int dz_{s+1} \hat{Q}_{i,s+1} f_{s+1}(1, \dots, s+1, t)
 \end{aligned}$$

Dabar prisimename, kad operatorius $\hat{Q}_{ij} = \bar{K}_{ij} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} - \frac{\partial}{\partial \vec{p}_j} \right)$, todėl

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \hat{h}_s \right) f_s(1, \dots, s, t) = - \sum_{i=1}^s \int dz_{s+1} \bar{K}_{i,s+1} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} - \frac{\partial}{\partial \vec{p}_{s+1}} \right) f_{s+1}(1, \dots, s+1, t)$$

Čia integralas nuo antro nario lygus nuliui, nes funkcija $f_{s+1} \rightarrow 0$ kai $\vec{p}_{s+1} \rightarrow \pm\infty$. Todėl galutinai gauname tokią **BBGKY lygčių grandinę (hierarchiją)**:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \hat{h}_s \right) f_s(1, \dots, s, t) = - \sum_{i=1}^s \int dz_{s+1} \bar{K}_{i,s+1} \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} f_{s+1}(1, \dots, s+1, t) \quad (s = 1, \dots, N)$$

- Čia kairios pusės nariai aprašo s-dalelių kompleksų dinamiką. Kai $s > 1$, kairioji pusė įskaito susidūrimus tarp s molekulių. Dešinę šios lygties pusę galima aiškinti kaip „susidūrimo integralą“, kuris aprašo nagrinėjamų s dalelių susidūrimus su „išorinėmis dalelėmis“ ir tokiu būdu suriša f_s su f_{s+1} .
- Taigi BBGKY lygtys yra N lygčių grandinė, siejanti s-daleles tankio funkcijas su s+1 -dalelėmis funkcijomis, pradedant nuo viendalelės funkcijos ir baigiant N-dalele funkcija. Išvedinėdami šią lygčių grandinę nedarėme jokių rimtų prielaidų, tad ji yra tiek pat tiksli, kiek yra tiksli Liouvilio lygtis, arba Hamiltono lygtys.

Boltzmano kinetinės lygties pagrindimas (XI)

Dabar panagrinėsime sąlygas, kada šią lygčių grandinę galima nutraukti, t.y. kada galima apsiriboti keliomis pirmomis, o galbūt tik viena pirma lygtimi. Dėl to užrašysime išreikštu pavidalu pirmas dvi šios grandinės lygtis:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}_1}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{r}_1} + \vec{F}_1 \frac{\partial}{\partial \vec{p}_1} \right) f_1(\vec{z}_1, t) = - \int dz_2 \vec{K}_{1,2} \frac{\partial}{\partial \vec{p}_1} f_2(\vec{z}_1, \vec{z}_2, t)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}_1}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{r}_1} + \frac{\vec{p}_2}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{r}_2} + \vec{F}_1 \frac{\partial}{\partial \vec{p}_1} + \vec{F}_2 \frac{\partial}{\partial \vec{p}_2} + \frac{1}{2} \vec{K}_{1,2} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{p}_1} - \frac{\partial}{\partial \vec{p}_2} \right) \right] f_2(\vec{z}_1, \vec{z}_2, t) =$$

$$= - \int dz_3 \left(\vec{K}_{1,3} \frac{\partial}{\partial \vec{p}_1} + \vec{K}_{2,3} \frac{\partial}{\partial \vec{p}_2} \right) f_3(\vec{z}_1, \vec{z}_2, \vec{z}_3, t)$$

Šių lygčių nariai turi dimensiją $\frac{f_s}{\text{laikas}}$. Visus narius galima surūšiuoti pagal tris skirtingus laiko mastelius:

$\left(\vec{K} \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \propto \frac{1}{\tau_c} \right)$	τ_c – molekulių susidūrimo laikas	$\left(\vec{F} \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \propto \frac{1}{\tau_e} \right)$	τ_e – laikas, per kurį molekulė nukeliauja charakteringą atstumą, ant kurio esminiai pakinta išorinis potencialas
$\left(\frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \propto \frac{1}{\tau_s} \right)$	τ_s – laikas, per kurį molekulė nukeliauja charakteringą atstumą, ant kurio esminiai pakinta tankio funkcija f_s		

- Dabar aptarsime kada antroje lygtyje galima atmesti paskutinį narį ir gauti uždara lygčių sistemą. Po to parodysime, kad pirma lygtis virsta Boltzmano kinetine lygtimi.
- Pastebėsime, kad pirmoji lygtis BBGKY grandinėlėje yra išskirtinė. Tik jos kairėje pusėje nėra narių, aprašančių tarpmolekulinę sąveiką, nes f_1 yra viendalelė funkcija. Todėl visi kairės pusės nariai yra santykinai maži (lėti). Susidūrimo integralas dešinėje šios lygties pusėje apsprendžia šios funkcijos charakteringą laiko mastelį.
- Antroje grandinės lygtyje (ir aukštesnės eilės lygtyse) kairėje pusėje yra susidūrimo narys, kurio eilė $1/\tau_c$. Susidūrimo narys dešinėje pusėje yra santykinai mažas, nes jis aprašo tridalelę sąveiką. Jis yra $\varepsilon_n \equiv nr_0^3 \ll 1$ kartų mažesnis (čia n yra dalelių tankis, o r_0 – charakteringas tarpmolekulinės sąveikos atstumas) už $1/\tau_c$, nes integralas pagal $\vec{r}_3$ yra ne nulis tik atstumuose eilės r_0 . Parametro ε_n įvertinimui įrašome standartinius dydžius $r_0 \approx 10^{-8} \text{ cm}$, $n \approx 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ir gauname, kad $\varepsilon_n \approx 10^{-5}$.
- Išbraukę antroje lygtyje dešinę pusę nutraukiame BBGKY grandinėlę:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}_1}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{r}_1} \right) f_1(\vec{z}_1, t) = - \int_{r_0} dz_2 \vec{K}_{1,2} \frac{\partial}{\partial \vec{p}_1} f_2(\vec{z}_1, \vec{z}_2, t) \equiv \left(\frac{\partial f_1}{\partial t} \right)_{\text{susid}}$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}_1}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{r}_1} + \frac{\vec{p}_2}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{r}_2} + \frac{1}{2} \vec{K}_{1,2} \left(\frac{\partial}{\partial \vec{p}_1} - \frac{\partial}{\partial \vec{p}_2} \right) \right] f_2(\vec{z}_1, \vec{z}_2, t) = 0$$

- Tai yra funkcijų f_1 ir f_2 dvi sukabintos lygtys. Kad būtų paprasčiau, čia mes nerašome išorinės jėgos narių. Mes taip pat tariame, kad tarpmolekulinė jėga veikia (nelygi nuliui) tik atstumu r_0 . Tą faktą mes pabrėžiame, pažymėdami pirmos lygties integralą indeksu r_0 . Tai reiškia, kad tas integralas pagal erdvinius kintamuosius skaičiuojamas srityje $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| < r_0$.
- Pagrindinė gautos lygčių sistemos kokybinė savybė yra ta, kad funkcijos f_2 charakteringi laiko ir erdvės masteliai yra τ_c ir r_0 , o funkcijos f_1 tie masteliai yra $1/\varepsilon_n$ kartų didesni. Kitaip tariant, **funkcijos f_1 kitimas erdvėje ir laike yra žymiai lėkštesnis, negu funkcijos f_2 .**
- Funkcijoje f_2 koreliacijos atsiranda dėl sąveikos tarp dalelių 1 ir 2. Jeigu atstumas tarp dalelių 1 ir 2 yra didelis, tai f_2 galima išreikšti viendalelių funkcijų sandauga:

$$f_2(\vec{z}_1, \vec{z}_2, t) \xrightarrow{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \gg r_0} f_1(\vec{z}_1, t) f_2(\vec{z}_2, t)$$

- Tačiau susidūrimo nario $\left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{\text{susid}}$ apskaičiavimui mums reikia žinoti f_2 ne srityje, kur dalelės nekoreliuoja, o atvirkščiai, toje srityje kur dalelės susiduria, t. y. srityje $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| < r_0$.

- Pasinaudojus tuo faktu, kad funkcijos f_2 lygtis yra greita, joje galima išbraukti laiko išvestinę ir surasti funkciją f_2 srityje $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| < r_0$. Tuomet paaiškėja, kad ši lygtis aprašo jau nagrinėtą dviejų sąveikaujančių dalelių sklaidos uždavinį. Kai dalelės yra toli viena nuo kitos, funkciją f_2 galima išreikšti viendalelių funkcijų sandaugos pavidalu $f_2(\vec{z}_1, \vec{z}_2, t) = f_1(\vec{z}_1, t)f_1(\vec{z}_2, t)$ - iš esmės tai funkcijos f_2 kraštinė sąlyga. Čia šios lygties sprendimo detalių neaptarinėsime, jas galima surasti knygoje: Kerson Huang, „Statistical mechanics“, p. 69. Įrašius surastą dvidalelės funkcijos f_2 išraišką į pirmą lygtį gaunama tokia susidūrimo nario formulė :

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{\text{susid}} = \int d^3 p_2 d\Omega |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| \sigma(\Omega) [f_1(\vec{p}_1', \vec{r}, t) f_1(\vec{p}_2', \vec{r}, t) - f_1(\vec{p}_1, \vec{r}, t) f_1(\vec{p}_2, \vec{r}, t)]$$

- Tai tiksliai sutampa su susidūrimo nario išraiška, kurią gavome, kai Boltzmano kinetinę lygtį išvedinėjome euristiciniu, Boltzmano pasiūlytu metodu. Pirmoji BBGKY grandinės lygtis tuomet tiksliai sutampa su Boltzmano kinetine lygtimi:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}_1}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{r}_1}\right) f_1(\vec{z}_1, t) = \left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{\text{susid}}$$

- Taigi Boltzmano kinetinę lygtį galima išvesti iš tikslios Liouvilio lygties atliekant tokias operacijas:

1. Pradžioje iš Liouvilio lygties gaunama sukabintų BBGKY lygčių grandinėle daugiadalelėms funkcijoms $f_1, f_2, \dots, f_N$.
2. Išretintoms dujoms ($nr_0^3 = \varepsilon_n \ll 1$) ją galima nutraukti ties antra lygtimi. BBGKY grandinės nutraukimas ekvivalentus tridalelių susidūrimų nepaisymui.
3. Išretintų dujų atveju dvidalelė funkcija greitai kinta laike ir erdvėje. Todėl dvidalelės funkcijos lygtį galima apytiksliai išspręsti ir išreikšti ją viendalelės funkcija. Įrašius šią išraišką į viendalelės funkcijos lygtį gaunama uždara kinetinė lygtis, kuri sutampa su Boltzmano kinetine lygtimi.

- **Pastabos:**

1. Viendalelė funkcija f_1 yra pilnos tankio funkcijos ρ (kuri apibrėžiama $6N$ – matėje Γ -erdvėje) projekcija į vienos dalelės 6 -matę μ -erdvę:

$$f_1(\vec{r}, \vec{p}, t) = N \int dz_2 \cdots dz_N \rho(1, \dots, N, t)$$

Toks drastiškas dinaminių kintamųjų sumažinimas įmanomas tik išretintoms dujoms ($\varepsilon_n = nr_0^3 \ll 1$).

2. Istoriškai, kinetinės fizikos tyrinėtojai padėjo nemažai pastangų, norėdami išvesti Boltzmano lygtį esant dideliems dalelių tankiams, kai ε_n yra vieneto eilės. Tačiau 1970 m. E.G.D. Cohen ir J.R. Dorfman įrodė, kad BBGKY grandinės neįmanoma išspręsti skleidžiant sprendinį ε_n laipsniais (**animacija dideliems ε_n**).