

# Kinematika a Hydrodynamika

J. Klusoň

# 1 Základní principy

Hydrodynamika je teorií dynamiky tekutin. Tekutina je společný název pro následující fáze látky:

- Kapaliny
- Plyny

Další forma látky, *Plazma* se obecně odlišuje od neutrálních tekutin. Ukazuje se, že hydrodynamika je vhodnou makroskopickou teorií pouze v případě slabě magnetizovaného plazmatu. Pro makroskopický popis magnetizovaného plazmatu existuje vlastní teorie známá jako *magnetohydrodynamika*. Je také důležité poznamenat, že mikroskopické teorie neutrálních tekutin a plazmatu jsou velmi rozdílné, což vyplývá ze skutečnosti, že nabitě částice interagují pomocí dalekodosahových sil, zatím co v případě hydrodynamiky uvažujeme pouze kratkodosahové síly.

Mechanika tekutin se zabývá popisem dynamiky kapalin a plynů. Protože z definice mechanika tekutin poskytuje makroskopický popis, uvažujeme tekutinu jako spojité médium. Jinými slovy řečeno, mechanika tekutin může a má být definována bez ohledu na potenciální mikroskopickou strukturu látky. Na druhou stranu je užitečné vyjít z představy o mikroskopické struktuře látky, kdy předpokládáme, že libovolně malý element tekutiny je dostatečně velký, že obsahoval statisticky významný počet molekul. Jinými slovy řečeno, musíme hovořit o fyzikálním infinitizemálně malém objemu, který je malý vzhledem k charakteristickým rozměrům tělesa, ale dostatečně velký vzhledem k charakteristickým vzdálenostem mezi molekulami. Pojmy jako *částice kapaliny* a *bod v kapalině* by měly být chápány podobným způsobem. Například, když hovoříme o posunutí částice kapaliny, nemyslíme samozřejmě posun jedné individuální molekuly, ale to, že objemový element, který v hydrodynamickém popisu obsahuje mnoho molekul, by měl být uvažován jako bod.

Tyto pojmy jsou intuitivně jasné, protože kapaliny, jako například voda, či plyny, jako například vzduch, můžeme za normálních podmínek skutečně uvažovat jako kontinuum. Problém ovšem nastává v situacích, kdy máme velice řídký plyn, jako jsou například sluneční vítr či mezigalaktická hmota, která obsahuje několik částic na krychlový centimetr. Poté se můžeme ptát, jaké jsou nutné předpoklady pro platnost hypotézy kontinua? Ukazuje se,

že pro pochopení této myšlenky bychom měli být schopni odvodit rovnice hydrodynamiky z obecnější a fundamentálnější teorie.

## 1.1 Dynamické teorie

Jak již bylo řečeno, našim cílem je formulovat hydrodynamiku jako teorii dynamiky tekutin, kde **Dynamickou teorií** myslíme teorii, která popisuje časový vývoj systému. Příkladem takových dynamických teorií je například klasická mechanika, klasická elektrodynamika, či kvantová mechanika. Pro každou z těchto dynamických teorií je základní předpoklad nějakým způsobem charakterizovat **Stav systému**.

- Klasická dynamika: stav systému  $N$  částic je popsán jejich zobecněnými souřadnicemi  $q_i, i = 1, \dots, N$  a sdruženými impulsy.
- Klasická elektrodynamika: elektrické a magnetické pole  $\rightarrow E(\mathbf{x}), \rightarrow B(\mathbf{x})$ , kde  $\mathbf{x} = (x^1, x^2, x^3)$  a kde  $\mathbf{E} = (E_1, E_2, E_3), \mathbf{B} = (B_1, B_2, B_3)$ .
- Kvantová fyzika: Stav systému je popsán s pomocí vlnové funkce  $\psi(\mathbf{x})$ .

Dynamické teorie umožňují sledovat časový vývoj daného systému pomocí rovnic, které určují, jak se dané proměnné vyvíjejí v čase. Jinými slovy, jakmile známe stav systému v počátečním čase, jsme schopni s pomocí těchto rovnic určit stav systému v nějakém pozdějším čase. Tyto rovnice mají různou formu pro různé dynamické teorie

- Klasická mechanika: Hamiltonovy či Lagrangeovy či Newtonovy pohybové rovnice
- Klasická elektrodynamika: Maxwellovy rovnice
- Kvantová mechanika: Schrödingerova rovnice

Tedy, naši otázkou je, jaké jsou vhodné proměnné, které charakterizují mechaniku tekutin a jaký je jejich časový vývoj. Ukazuje se, že odpověď na tuto otázku závisí na hloubce studia problému.

Ukážeme problematiku úrovní různých popisů na příkladu systému  $N$  kvantových částic, kde  $\log N \gg 1$ . Fundamentální popis, označme jej jako **Úroveň 0**, je dán pomocí kvantové mechaniky, kdy stav daného systému je

charakterizován vlnovou funkcí  $\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$ , kde časový vývoj této vlnové funkce je dán Schrödingerovou rovnicí

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi, \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}_i^2} + V(\{\mathbf{x}\}) \quad (1)$$

Druhá úroveň, označíme ji jako **Úroveň 1** je dán pomocí  $N$  klasických částic. Stav je popsán pomocí zobecněných souřadnic  $q_s$  a impulzů  $p^s$ , jejichž časový vývoj je dán Hamiltonovými rovnicemi.

$$\dot{q}_s = \frac{\partial H}{\partial p^s}, \quad \dot{p}_s = -\frac{\partial H}{\partial q_s},$$

$$H(\{q_s, p^s\}, t) = \sum_s \dot{q}_s p^s - L, \quad L(\{q_s, \dot{q}_s, t\}, t) = T - V, \quad p^s = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_s}. \quad (2)$$

Kinetický popis částic je další úrovní popisu, kterou označíme jako **Úroveň 2**. V tomto případě je stav systému popsán pomocí rozdělovací funkce  $f(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ , která splňuje Boltzmannovu rovnici

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\mathbf{x}} \cdot \nabla f + \dot{\mathbf{v}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = C(f), \quad \dot{\mathbf{x}} = \mathbf{v}, \quad \dot{\mathbf{v}} = \frac{\mathbf{F}(\mathbf{x}, t)}{m}. \quad (3)$$

Od třetí úrovně již zbývá pouze poslední krok k popisu dané látky jako spojitého prostředí, což je mechanika kontinua. Označíme tuto úroveň jako **Úroveň 3**. Stav tohoto systému je popsán pomocí polí  $\rho(\mathbf{x}), T(\mathbf{x}), \mathbf{v}(\mathbf{x})$  a jejich dynamika je dána hydrodynamickými rovnicemi.

Pro plné pochopení hydrodynamiky je dobré nastínit, jakým způsobem přecházíme mezi různými úrovněmi.

## 1.2 Úroveň 0 $\rightarrow$ Úroveň 1

Je možné nahradit kvantový popis klasickým v případě, kdy hustota částic je dostatečně nízká tak, že kvantové interference jsou zanedbatelné. Uvažujme de Brogliho vlnovou délku

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (4)$$

Na druhou stranu typická hybnost částice o hmotnosti  $m$  a při teplotě  $T$  je dána

$$E \sim k_B T \sim \frac{p^2}{m} \Rightarrow p \sim \sqrt{mk_B T}. \quad (5)$$

Na druhou stranu předpokládejme, že máme hustotu částic  $n$  definovanou jako  $n = N/V$ , kde  $V$  je objem, v kterém se dané částice nacházejí. Poté je jasné, že veličina, která charakterizuje vzdálenost částic, je  $\sim n^{-1/3}$  (Rozměr  $n$  je  $[m^{-3}]$ .) Tedy pokud platí

$$\lambda \ll n^{-1/3} \Rightarrow 1 \gg \frac{\hbar n^{1/3}}{\sqrt{mk_B T}} \quad (6)$$

můžeme zanedbat kvantovou interferenci různých částic. Je jasné, že tato podmínka je splněna pro zředěné plyny. Otázka je, zda-li také platí pro hustější plyny. Pro vzduch při pokojové teplotě  $T = 273 \text{ K}$  a standardním tlaku je pravá strana nerovnosti rovna 0.015. Dá se ukázat, že pro vodu při teplotě  $T = 293 \text{ K}$  toto platí přibližně také.

Jestliže je tato podmínka splněna, pak vlnová klubka částic se šíří podle Schrödingerovy rovnice pro volnou částici

$$i\hbar \frac{\partial \psi_i(\mathbf{x}_i, t)}{\partial t} = \hat{H}_i \psi_i, \quad \hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V(\mathbf{x}_i). \quad (7)$$

Poté střední hodnoty  $\langle \hat{\mathbf{x}}_i \rangle(t)$  a  $\langle \hat{\mathbf{p}}_i \rangle(t)$  mají časový vývoj, který je určený klasickými pohybovými rovnicemi, což je známý Ehrenfestův teorém.

### 1.3 Od Úrovně 1 k Úrovní 2

Na úrovni 1 je stav systému  $N$  klasických částic popsán jejich souřadnicemi  $(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$  a rychlostmi  $(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N)$ . Jejich dynamika je určena Newtonovými pohybovými rovnicemi.

Fázový prostor  $\Gamma$  je  $6N$  dimensionální se souřadnicemi  $(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N)$ . Každý bod v prostoru  $\Gamma$  odpovídá rozdílnému stavu systému a zřejmě časový vývoj systému odpovídá křivce ve fázovém prostoru  $\Gamma$ . Pro velmi velké  $N$  je nemožné prakticky řešit  $6N$  pohybových rovnic, které jsou diferenciálními rovnicemi prvního řádu. Pro tyto systémy je právě vhodný statistický popis odpovídající úrovni 2. Na této úrovni zavedeme distribuční funkci  $f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ , která udává hustotu částic v šesti dimensionálním  $\mu$ -prostoru  $(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ . Jedná se tedy o jedno-částicovou distribuční funkci, obecnější případ bude diskutován níže. Poté jediný bod v  $\Gamma$  prostoru je zobrazen do  $N$  bodů v  $\mu$  prostoru, kde každé částici odpovídá jeden bod odpovídající její souřadnici a rychlosti. Jinými slovy převedli jsme problém popisu časového vývoje  $N$  bodů na problém časového vývoje distribuční funkce, který je dán Boltzmannovou rovnicí.

Obecně hovoříme o  $N$ -částicové rozdělovací funkci.

Dynamika tekutin je popsána klasickou teorií pole, jejíž počátek sahá až do 19 století. Je pozoruhodné, že sdílí mnoho společného s Maxwellovou teorií elektromagnetického pole.

Je užitečné ukázat, proč je studium hydrodynamiky tak zajímavé i z hlediska dnešní moderní fyziky. Je podstatné, že mechanika tekutin může být odvozena z konkrétní mikroskopické teorie pomocí vhodného vystředování. Můžeme například uvažovat Boltzmannovu rovnici pro distribuční funkci  $f(\mathbf{X}, \mathbf{P}, t)$ , která splňuje rovnici

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{m} P_i \frac{\partial f}{\partial X_i} + F_i \frac{\partial f}{\partial P_i} = C(f) , \quad (8)$$

kde  $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)$  a  $\mathbf{P} = (P_1, \dots, P_n)$   $i = 1, \dots, d$  jsou fázové souřadnice jedné částice o hmotnosti  $m$  a kde  $F_i$  je vnější síla působící na tuto částici. Dále,  $C(f)$  je srážkový integrál, který vyjadřuje změnu distribuční funkce způsobenou srážkou s ostatními částicemi. Bezsrážkový případ odpovídá situaci, kdy  $C(f) = 0$ . V tomto případě Boltzmannova rovnice je rovnicí pro distribuční funkci částice, která splňuje klasické pohybové rovnice. Ukazuje se, že najít řešení Boltzmannovy rovnice je velmi obtížné. Obecně předpokládáme řešení ve formě  $f = f^{(0)} + f^{(1)} + \dots$  kde  $f^{(0)} = n_p$  je rovnovážná distribuční funkce, jejíž forma závisí na skutečnosti, zda se jedná o bosony či fermiony. Transportní koeficienty a pohybové rovnice kapaliny jsou poté určeny poruchovými opravami.

Je dobré zdůraznit, že tento popis vystihuje podstatu problému, jak získat rovnice hydrodynamiky z fundamentální mikroskopické teorie, na druhou stranu má svá podstatná omezení. První je to, že takto zjednodušená Boltzmannova rovnice určuje pouze distribuční funkci jedné částice a druhé je to, že popis je čistě klasický, nebere do úvahy kvantové jevy.

Co se týká prvního bodu, můžeme uvažovat obecnou  $N$  částicovou Liouvillovu rovnici pro distribuční funkci  $\rho(X_n, P_n)$ ,  $n = 1, 2, \dots, N$ . Jednočásticová distribuční funkce je poté dána integrálem  $\int d\mu_{N-1} \rho(X_n, P_n)$ , dvoučásticová distribuční funkce je dána integrálem  $\int d\mu_{N-2} \rho(X_n, P_n)$  kde  $d\mu_N$  je objemový element  $N$ -dimensionálního fázového prostoru. Poté Liouvillova rovnice vede k hierarchii tzv. BBGKY (Bogoljubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon) hierarchii, která zahrnuje korelační funkce vyšších řádů. Například pro jednočásticovou distribuční funkci dostáváme Boltzmannovu rovnici, kde ale kolizní integrál je určen dvoučásticovou distribuční funkcí. Je jasné, že výsledná teorie je velmi komplikovaná a většinou se omezujeme právě na studium jednočásticové

rozdělovací funkce.

Co se týká problematiky fundamentální kvantové formulace hydrodynamiky, ukazuje se, že je opět v principu možné najít takovouto formulaci. Na druhou stranu abychom získali nějaké užitečné informace, je nutné přistoupit k semiklasické aproximaci, což opět vede k formalismu, jenž má limitovanou platnost.

I když předchozí diskuse odvození hydrodynamických rovnic z fundamentálních teorií vede k zjištění, že hydrodynamika by měla mít platná pouze pro klasický popis systémů, které jsou blízko termodynamické rovnováhy. Na druhou stranu hydrodynamické rovnice mohou být odvozeny z obecných principů, což nás vede k zjištění, že tyto rovnice mají širší oblast platnosti, a my ve skutečnosti používáme tyto rovnice v tomto širším smyslu. Toto je známé pod pojmem universalita mechaniky tekutin. Ukazuje se, že dynamika tekutin má své místo v současné moderní fyzice v případě popisu velkého množství jevů. O některých z nich pohovoříme v této přednášce podrobněji.

## 1.4 Od Úrovně 2 k Úrovní 3

Jedno-komponentový plyn v termodynamické rovnováze je plně popsán dvěma termodynamickými proměnnými. Obecně vzato tekutina jako celek není v termodynamické rovnováze jako celek. Na druhou stranu malý element tekutiny v jeho klidové souřadnicové soustavě můžeme chápat jako element v lokální termodynamické rovnováze. Stav elementu tekutiny je dán dvěma termodynamickými veličinami (hustotou  $\rho$  a teplotou  $T$ ) a rychlostí  $\mathbf{v}$ . Poté všechny elementy tekutiny tvoří kontinuum, kde nyní  $\rho(\mathbf{x})$ ,  $T(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{v}(\mathbf{x})$  popisují celý systém.

Hydrodynamické rovnice poté určují časový vývoj těchto proměnných. Tyto rovnice mohou být odvozeny z Boltzmanovy rovnice.

## 1.5 Hamiltonovský popis Úrovně 1

Nyní přistoupíme k podrobnějšímu studiu přechodu od Úrovně 1 k Úrovní 2. Abychom toto plně pochopili, musíme stručně shrnout několik základních faktů týkajících se hamiltonovské formulace klasické mechaniky.

Uvažujme dynamický systém popsáný pomocí sdružených souřadnic  $(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n)$  a Hamiltonovou funkcí  $H(q_s, p^s, t)$ . Pak

$$\dot{p}_s = -\frac{\partial H}{\partial q_s}, \quad \dot{q}_s = \frac{\partial H}{\partial p^s}. \quad (9)$$

Abychom uvedli nějaký příklad hamiltonovského systému, můžeme uvažovat konzervativní systém  $N$  stejných částic, kdy hamiltonian má tvar

$$H = T + V = \frac{1}{2m} \sum_s (p^s)^2 + V(q_s) . \quad (10)$$

Pro tuto Hamiltonovu funkci dostáváme z (53)

$$\begin{aligned} \dot{q}_s &= p^s/m \Rightarrow p^s = m\dot{q}_s , \\ \dot{p}_s &= -\frac{\partial H}{\partial q_s} = -\frac{\partial V}{\partial q_s} , \end{aligned} \quad (11)$$

kde první rovnice vyjadřuje známý vztah mezi impulsem dané částice a její rychlostí a kde druhá rovnice není nic jiného než Newtonova pohybová rovnice. Přesněji, s použitím první rovnice dostáváme

$$m\ddot{q}_s = -\frac{\partial V}{\partial q_s} . \quad (12)$$

### 1.5.1 Dynamická reverzibilita

Uvažujme systém, jehož hamiltonián je invariantní vůči změně směru času, tedy vůči záměně  $t \rightarrow -t$ . Nyní předpokládejme, že  $\{q(t), p(t)\}$  je trajektorie daného systému ve fázovém prostoru. Poté i  $\{q(-t), -p(-t)\}$  je řešením pohybových rovnic a tedy je také trajektorií ve fázovém prostoru.

Abychom dokázali toto tvrzení, výjdeme z Hamiltonových rovnic

$$\frac{dp^s}{dt} = -\frac{\partial H(t)}{\partial q_s} , \quad \frac{dq_s}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p^s} . \quad (13)$$

Pomocí  $t' = -t$  dostáváme

$$\frac{dp^s(t)}{dt'} = -\frac{dp^s}{dt} = \frac{\partial H(t)}{\partial q_s(t)} . \quad (14)$$

Když výjdeme z předpokladu, že  $H(-t) = H(t') = H(t)$  a zavedeme  $q_s(t) = q_s(-t) = q_s(t')$  a také  $p^s(-t) = p^s(t') = -p^s(t)$ , pak rovnice (14) má tvar

$$\frac{dp^s(t')}{dt'} = -\frac{\partial H(t')}{\partial q_s(t')} . \quad (15)$$



což je jedna z Hamiltonových rovnic. Stejným způsobem budeme postupovat i s druhou rovnicí

$$\begin{aligned} \frac{dq_s(t)}{dt} &= -\frac{dq_s(t)}{dt'} = \frac{\partial H(t)}{\partial p^s(t)} \Rightarrow \\ -\frac{dq_s(t')}{dt'} &= -\frac{\partial H(t')}{\partial p^s(t')} \Rightarrow \frac{dq_s(t')}{dt'} = \frac{\partial H(t')}{\partial p^s(t')} . \end{aligned} \quad (16)$$

Tímto způsobem jsme tedy dokázali, že  $\{q(-t), -p(-t)\}$  je řešením Hamiltonových rovnic a tudíž definuje trajektorii ve fázovém prostoru.

### 1.5.2 Kanonické transformace

Uvažujme transformaci souřadnic ve fázovém prostoru

$$q, p \rightarrow q', p' . \quad (17)$$

Aby tyto nové proměnné dávaly popis toho samého systému, pak musí zjevně platit

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt L(q, \dot{q}) = 0 , \quad \delta \int_{t_1}^{t_2} dt L(q', \dot{q}') = 0 . \quad (18)$$

V případě, že je tato podmínka splněna, pak nazýváme transformaci od nečárkovaných k čárkovaným proměnným (17) jako *kanonickou transformaci*. Je zřejmé, že rovnost variací daných v (18) je splněna, pokud existuje následující vztah mezi odpovídajícími lagrangiány

$$L(q, \dot{q}) = L(q', \dot{q}') + \frac{dG_1(q, q')}{dt} . \quad (19)$$

Abychom dokázali tento vztah, použijeme (19) v definici a akce. Následně provedeme její variaci a čímž dostáváme

$$\begin{aligned} \delta \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}) dt &= 0 = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(q', \dot{q}') dt + \delta G_1(q, q')|_{t_2} - G_1(q, q')|_{t_1} = \\ &= \delta \int_{t_1}^{t_2} L(q', \dot{q}') dt = 0 \end{aligned} \quad (20)$$

kde jsme využili skutečnost, že při odvozování pohybových rovnic požaduje, aby variace souřadnic byly rovny nule v časech  $t_1$  a  $t_2$ .

Je užitečné přepsat vztah mezi lagrangiany pomocí odpovídající hamiltonovského formalismu formulace

$$L(q, \dot{q}) = \sum_s p^s \dot{q}_s - H(p, q) = \sum_s p'^s \dot{q}'_s - H'(p', q') + \frac{dG_1(q, q', t)}{dt} \quad (21)$$

což můžeme přepsat do ekvivalentního tvaru

$$\sum_s (p^s dq_s - p'^s dq'_s) - (H - H')dt = \sum_s \left( \frac{\partial G_1}{\partial q_s} dq_s + \frac{\partial G_1}{\partial q'_s} dq'_s \right) + \frac{\partial G_1}{\partial t} dt . \quad (22)$$

Z předchozí rovnice dostáváme následující důležité vztahy

$$p^s = \frac{\partial G_1}{\partial q_s} , \quad p'^s = -\frac{\partial G_1}{\partial q'_s} , \quad H - H' = -\frac{\partial G_1}{\partial t} . \quad (23)$$

Analyzujeme nyní strukturu těchto transformací podrobněji. Rovnice (23) budeme interpretovat jako vztah mezi  $(q_s, p^s)$  a  $(q'_s, p'^s)$ . Podrobněji, levá rovnice v (23) může být řešena pro  $q'_s = q'_s(q_k, p^k)$ . Samozřejmě, podmínka pro existenci tohoto řešení je

$$\det \frac{\partial^2 G_1}{\partial q_i \partial q'_k} \neq 0 . \quad (24)$$

Jakmile tedy najdeme  $q'_l = q'_l(q_k, p^k)$ , pak pravá rovnice v (23) dává  $p'^l = p'^l(q_k, p^k)$ .

Jako příklad spojitě funkce  $q, q'$  která negeneruje kanonické transformace, uvažujme

$$G_1(q, q') = f(q) + h(q') , \quad (25)$$

kde  $f$  and  $h$  jsou libovolné spojitě funkce. Je zřejmé, že tato funkce nespĺňuje (24) a tedy negeneruje kanonické transformace. Na druhou stranu uvažujme následující funkci

$$G_1(q, q') = -q_s \delta^{sr} q'_r . \quad (26)$$

Pro tuto funkci z rovnice (23) dostaneme

$$p^s = -\delta^{sr} q'_r , p'^s = \delta^{sr} q_s . \quad (27)$$

Vidíme, že souřadnice a impulsy si vyměnily role pomocí této generující funkce. Z toho důvodu se tato transformace nazývá transformace výměny.

Je dobré vědět, že můžeme najít další formy funkcí, které generují kanonické transformace. Pro naše účely je ale podstatné, že kanonické transformace jsou základem Liouvillova theoremu, který má fundamentální význam v kinetické teorii.

## 1.6 Kanonické invarianty

Kanonickým invariantem nazýváme dynamickou veličinu, která zůstává invariantní vůči kanonickým transformacím. Důležitým příkladem kanonického invariantu je Poissonova závorka mezi dvěma funkcemi  $A, B$ . Tedy, jestliže platí

$$\begin{aligned} A(p, q) &\xrightarrow{C} A'(q', p') \\ B(q, p) &\xrightarrow{C} B'(q', p') \end{aligned} \quad (28)$$

then

$$\{A, B\}_{q,p} \xrightarrow{C} \{A', B'\}_{q',p'} = \{A, B\}_{q,p} \quad (29)$$

Uvažujme nyní případ, kdy  $B$  je Hamiltoniánem daného systému  $B = H$ . Pak definice časového vývoje fyzikální veličiny říká

$$\frac{dA(q, p)}{dt} = \{A, H\}_{q,p} . \quad (30)$$

Na druhou stranu (29) nám říká

$$\frac{dA(q, p)}{dt} = \{A, H\}_{q,p} = \{A'(q', p'), H(q', p')\} = \frac{dA'(q', p')}{dt} . \quad (31)$$

Jinými slovy časová změna proměnné  $A$  je nezávislá na souřadnicích, které jsou použity na popis daného systému.

## 1.7 Konstanty pohybu a symetrie

Zachovávající se veličiny mají úzký vztah k symetriím daného systému. Uvažujme systém, který je popsán souřadnicemi  $(q_1, q_2, \dots, q_n)$  a předpokládejme, že platí  $\frac{\partial H}{\partial q_j} = 0$ . Pak z pohybové rovnice dostáváme  $p_j = \text{const}$ . Jinými slovy, jestliže systém nezávisí na určité souřadnici, pak impuls sdružený s touto souřadnicí je konstantní. Takovéto souřadnice se nazývají *cyklické souřadnice*.

Invariance Hamiltoniánu vzhledem k určité souřadnici může být vyjádřena pomocí Hamiltonovských rovnic nebo pomocí Poissonových závorek. V tomto případě, jestliže  $H$  je nezávislý na souřadnici  $q_j$ , pak dostáváme

$$\frac{dp^j}{dt} = \{p_j, H\} = 0 \quad (32)$$

a tedy  $p^j$  je konstantní.

### 1.7.1 Liouvillův teorém

V jedné svoji formulaci Liouvillův teorém říká, že jakobián kanonických transformací je roven jedné. Pro systém o  $N$  stupních volnosti, máme

$$J \left( \begin{array}{c} q', p' \\ q, p \end{array} \right) = \frac{\partial(q', p')}{\partial(q, p)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial q'_1}{\partial q_1} & \frac{\partial q'_2}{\partial q_1} & \cdots & \frac{\partial p'^1}{\partial q_1} & \cdots & \frac{\partial p'^N}{\partial q_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial q'_1}{\partial p^N} & \frac{\partial q'_2}{\partial p^N} & \cdots & \frac{\partial p'^1}{\partial p^N} & \cdots & \frac{\partial p'^N}{\partial p^N} \end{vmatrix} = 1. \quad (33)$$

Na tomto místě je vhodné zdůraznit, že existuje celá řada formulací Liouvillova teorému. V této části naší přednášky dokážeme její čistě geometrický význam založený na vlastnostech kanonických transformací.

Liouvillův teorém má následující geometrický význam. Pro libovolnou transformaci  $(q, p) \rightarrow (q', p')$  se integrál ve fázovém prostoru transformuje takto

$$\int_{\Omega} dqdp = \int_{\Omega'} J \left( \begin{array}{c} (q, p) \\ (q', p') \end{array} \right) dq'dp' \quad (34)$$

kde  $\Omega$  značí objem ve fázovém prostoru, ve kterém provádíme danou transformaci. Nyní vidíme, že v případě kanonických transformací máme

$$\int_{\Omega} dqdp = \int_{\Omega'} dq'dp'. \quad (35)$$

Protože tyto veličiny nejsou nic jiného než objemové elementy ve fázovém prostoru dostáváme, že tyto objemové elementy fázového prostoru jsou invariantní vzhledem ke kanonickým transformacím.

### 1.7.2 Akce jako generátor kanonických transformací

Jedním z nejdůležitějších poznatků, které se týkají kanonických transformací je ten, že samotná akce může být uvažována jako generátor kanonických transformací.

Uvažujme akční integrál odpovídající pohybu v intervalu od  $t$  do  $t + T$

$$\begin{aligned} S(t, T) &= \int_t^{t+T} dt' L(q, \dot{q}) = \\ &= \int_0^{t+T} dt' [\sum_s p^s \dot{q}_s - H] - \int_0^t dt' [\sum_s p^s \dot{q}_s - H] . \end{aligned} \quad (36)$$

Jestliže nyní provedeme derivaci vzhledem k  $t$  dostáváme

$$\frac{dS(t, T)}{dt} = \sum_s (p'^s \dot{q}'_s - p^s \dot{q}_s) + (H - H') , \quad (37)$$

kde jsme zavedli značení

$$q'_s = q_s(t + T) , \quad p'^s = p^s(t + T) . \quad (38)$$

Jestliže budeme předpokládat, že  $H$  je integrál pohybu, tedy  $H(t+T) = H(t)$ , pak dostáváme

$$dS = \sum_s (p'^s dq'_s - p^s dq_s) . \quad (39)$$

Tento výsledek nám říká, že akce je generátor kanonických transformací. Jinými slovy řečeno časový vývoj systému může být uvažován jako kanonická transformace. Skutečnost, že časový vývoj systému ve fázovém prostoru, jenž je určen pohybovými rovnicemi, je jedna z forem kanonické transformace, je fundamentální předpoklad pro určení Liouvillovy rovnice.

## 1.8 Ansambl a fázový prostor

Jak již víme, stav systému je reprezentován bodem ve fázovém prostoru. Tak, jak se systém vyvíjí s časem, tento bod se pohybuje po trajektorii  $(q_1(t), \dots, q_N(t), p^1(t), \dots, p^N(t))$  kde nyní předpokládáme systém tvořený z  $N$  částic pohybujících se v jednom rozměru. Zobecnění na případ pohybu ve třech a vyšších dimenzích provedeme později.

Ansámbl je definován jako množina kopií téhož systému, které jsou identické ve všech svých vlastnostech až na to, že odpovídají rozdílným stavům systému v určitém časovém okamžiku. Z této definice je zřejmé, že každý prvek Ansámblu může být reprezentován bodem ve fázovém prostoru  $\Gamma$  v

určitém časovém okamžiku a jejich časový vývoj je reprezentován určitou trajektorií v tomto fázovém prostoru. Jinými slovy řečeno, když budeme předpokládat, že máme  $\mathcal{N}$  kopií daného systému v Ansamblu, pak stav tohoto Ansamblu v čase  $t = 0$  je reprezentován  $\mathcal{N}$  body v prostoru  $\Gamma$ . Necht' uvažujeme funkci  $\rho_{ans} = \rho_{ans}(q_s, p^s, t)$  a uvažujme následující číslo

$$\rho_{ans}(q_s, p^s, t) d^N q d^N p \quad (40)$$

které budeme interpretovat jako počet bodů ansámblu v elementu fázového prostoru  $d^N q d^N p$  v okolí bodu  $(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$ . Pak můžeme definovat  $\rho_{ans}$  jako

$$\rho_{ans}(q_s, p^s, t) = \frac{d\mathcal{N}}{d^N q d^N p} . \quad (41)$$

Samozřejmě je dobré předpokládat, že body Ansamblu jsou hustě a spojitě distribuovány ve fázovém prostoru  $\Gamma$ , což umožňuje předpokládat, že  $\rho_{ans}$  je spojitá funkce na fázovém prostoru.

Jako příklad uvažujme systém  $N$  volných harmonických jedno-dimensionálních oscilátorů. Tento systém má Hamiltonian

$$H = \sum_{s=1}^N H_s , \quad H_s = \frac{1}{2m}(p^s)^2 + \frac{m\omega_0}{2}q_s^2 = E_s \quad (42)$$

Díky tomu, že tyto oscilátory jsou volné, každý oscilátor se nachází ve stavu se zachovávající se energií  $E_s$ . Mikrostav systému, je neznám. Na druhou stranu statisticky reprezentativní ansambl tohoto systému má hustotu bodů danou jako

$$\rho_{ans}(q_s, p^s, t) = \left(\frac{\omega_0}{2\pi}\right)^N \prod_{s=1}^N \delta(H_s(q_s, p^s) - E_s) , \quad (43)$$

která je normalizovaná jako

$$\int \prod_s dq_s dp^s \rho_{ans} = 1 . \quad (44)$$

Nyní můžeme interpretovat  $\rho_{ans}$  jako *hustotu pravděpodobnosti, že najdeme daný systém v daném bodě fázového prostoru  $\Gamma$ , tedy v daném bodě mikrostavu  $(q_s, p^s)$ .*

## 1.9 Liouvillův theorem

Louvilův theorem říká, že fázová distribuční funkce se zachovává podél fázové trajektorie systému. Jak již bylo řečeno,  $\rho_{ans}(q, p, t)d^N q d^N p$  udává počet prvků Ansamblu, které se nacházejí v elementu fázového prostoru  $d^N q d^N p$ .

Důležitou vlastností Ansamblu je to, že trajektorie jeho prvků se nikdy nekříží, což vyplývá ze skutečnosti, že pro systém o  $N$  stupních volnosti je jeho trajektorie jednoznačně určena  $2N$  počátečními podmínkami  $[q_1(0), \dots, q_N(0), p^1(0), \dots, p^N(0)]$ .

Uvažujme, že v určitém časovém okamžiku body Ansamblu obsažené v diferenciálním objemovém elementu fázového prostoru jsou ohraničeny uzavřenou plochou. Díky tomu, že rozdílné trajektorie se nemohou křížit dostáváme, že vnitřní body v daném objemu zůstanou vnitřními body, tak jako každý hraniční bod zůstane hraničním bodem. Jestliže tedy označíme počet bodů v daném objemu jako  $d\mathcal{N}$ , pak dostáváme

$$d\mathcal{N} = d\mathcal{N}' . \quad (45)$$

Označme  $d\Omega$  malý element fázového prostoru, v kterém se nacházejí dané prvky Ansamblu. Nyní použijeme důležitou skutečnost odvozenou v předchozí části, která říká, že časový vývoj systému, který je určen Hamiltonovými rovnicemi, odpovídá kanonické transformaci. Protože ale při kanonických transformacích se zachovává objemový element fázového prostoru, pak dostáváme

$$d\Omega = d\Omega' . \quad (46)$$

Kombinací (45) a (46) dostáváme důležitý výsledek

$$\frac{d\mathcal{N}'}{d\Omega'} = \frac{d\mathcal{N}}{d\Omega} , \quad (47)$$

který nám říká, že

$$\rho_{ans}(p, q, t) = \rho_{ans}(p', q', t') . \quad (48)$$

Jinými slovy řečeno, Liouvillův theorem má tvar

$$\frac{D\rho_{ans}}{Dt} = 0 , \quad (49)$$

kde  $\frac{D}{Dt}$  označuje časovou derivaci podél trajektorie ve fázovém prostoru, což má explicitní tvar

$$\frac{D\rho_{ans}}{Dt} = \frac{\partial\rho_{ans}}{\partial t} + \sum_{s=1}^N \left( \frac{\partial\rho_{ans}}{\partial q_s} \dot{q}_s + \frac{\partial\rho_{ans}}{\partial p^s} \dot{p}^s \right) , \quad (50)$$

kde časové derivace fázových proměnných jsou určeny Hamiltonovými rovnicemi.

Tento výsledek může být zapsán v následujícím elegantním tvaru. Je známo, že časový vývoj libovolné fázové funkce  $u(p, q, t)$  může být vyjádřen pomocí Poissonovy závorky

$$\frac{Du}{Dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + \{u, H\} , \quad (51)$$

kde Poissonova závorka je definována jako

$$\{f, g\} = \sum_{s=1}^N \left( \frac{\partial f}{\partial q_s} \frac{\partial g}{\partial p^s} - \frac{\partial f}{\partial p^s} \frac{\partial g}{\partial q_s} \right) . \quad (52)$$

Vstah (51) vychází ze skutečnosti, že Hamiltonovy rovnice mají tvar

$$\dot{q}_s = \frac{\partial H}{\partial p^s} , \quad \dot{p}^s = -\frac{\partial H}{\partial q_s} . \quad (53)$$

Jestliže nyní použijeme (53) v definici (51) dostaneme

$$\frac{Du}{Dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + \sum_{s=1}^N \left( \frac{\partial f}{\partial q_s} \dot{q}_s + \frac{\partial f}{\partial p^s} \dot{p}_s \right) . \quad (54)$$

Pak je zřejmé, že Liouvillova rovnice má tvar

$$\frac{\partial \rho_{ans}}{\partial t} + \{\rho_{ans}, H\} = 0 . \quad (55)$$

### 1.9.1 Obecné řešení Liouvillovy rovnice

Zde bychom rádi ukázali, jakým způsobem je možné najít nejobecnější řešení Liouvillovy rovnice.

Nechť  $g(p, q, t)$  je zachovávaná se veličina, t.j.

$$\frac{Dg}{Dt} = \frac{\partial g}{\partial t} + \{g, H\} = 0 \quad (56)$$

a tedy  $g$  je řešením Liouvillovy rovnice.

Na druhou stranu předpokládejme, že  $g$  je řešením Liouvillovy rovnice

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \{g, H\} = 0 . \quad (57)$$



Na druhou stranu víme, že levá strana této rovnice má tvar  $\frac{Dg}{Dt} = 0$  a tedy libovolné řešení Liouvillový rovnice je také integrálem pohybu. Z tohoto výsledku dostáváme, že nejobecnějším řešením Liouvillový rovnice je libovolná funkce všech zachovávajících se veličin, tedy

$$\rho_s = \rho_s(g_1, \dots, g_{2N}) . \quad (58)$$

Jinými slovy řečeno, znalost nejobecnějšího řešení Liouvillový rovnice je ekvivalentní znalosti všech zachovávajících se veličin

$$\begin{aligned} g_1 &= g_1(p, q, t) \\ g_2 &= g_2(p, q, t) \\ &\vdots \\ g_{2N} &= g_{2N}(q, p, t) \end{aligned} \quad (59)$$

### 1.9.2 Druhé odvození Liouvillový rovnice

Rádi bychom ukázali druhý způsob odvození Liouvillový rovnice.

Tento důkaz je založen na faktu, že Liouvillova rovnice může být zapsána ve tvaru

$$\frac{\partial \rho_{ans}}{\partial t} + \sum_{s=1}^N \left( \frac{\partial(\rho_{ans} q_s)}{\partial q_s} + \frac{\partial(\rho_{ans} \dot{p}^s)}{\partial p^s} \right) = 0 \quad (60)$$

což má formu rovnice spojitosti, kde tok hustoty je dán  $2N$ -dimensionálním vektorem ve fázovém prostoru

$$\mathbf{j}_{ans} = (\rho_{ans} \dot{q}_1, \dots, \rho_{ans} \dot{q}_N, \rho_{ans} \dot{p}^1, \dots, \rho_{ans} \dot{p}^N) \quad (61)$$

Poznamenejme, že rozdíl mezi (50) a (60) je dán výrazem

$$\sum_{s=1}^N \left( \frac{\partial \dot{q}_s}{\partial q_s} + \frac{\partial \dot{p}_s}{\partial p^s} \right) = \sum_{s=1}^N \left( \frac{\partial^2 H}{\partial q_s \partial p^s} - \frac{\partial^2 H}{\partial q_s \partial p^s} \right) = 0 \quad (62)$$

kde  $H$  je hamiltonián daného systému a kde jsme vyšli z faktu, že systém splňuje Hamiltonovy rovnice.

Protože Liouvillova rovnice má tvar rovnice spojitosti, můžeme ji odvodit následovně. Základním bodem je předpoklad, že počet členů daného ansamblu se zachovává. Nyní uvažujme určitou oblast fázového prostoru  $V_\Gamma$ . Pak

zjevně časová změna počtu členu ansamblu v daném objemu je rovna toku hranicí daného objemu  $\partial V_\Gamma$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_\Gamma} \rho_{ans} dV = - \int_{\partial V_\Gamma} j_{ans}^i dS_i \quad (63)$$

kde  $dS_i \equiv n_i dS$  je povrchový element, jehož normovaný normálový vektor  $n_i$ ,  $n_i n^i = 1$  směřuje ven z daného objemu. Poté s pomocí Gaussovy věty

$$\int_{\partial V} F^i dS_i = \int_V \partial_i F^i \quad (64)$$

můžeme přepsat rovnici (63) do tvaru

$$\int_{V_\Gamma} \left( \frac{\partial \rho_{ans}}{\partial t} + \sum_{s=1}^N \frac{\partial(\rho_{ans} \dot{q}_s)}{q_s} + \frac{\partial(\rho_{ans} \dot{p}^s)}{\partial p_s} \right) = 0 . \quad (65)$$

Protože tato rovnice musí platit pro libovolné  $V_\Gamma$ , pak zjevně musí platit

$$\frac{\partial \rho_{ans}}{\partial t} + \sum_{s=1}^N \frac{\partial(\rho_{ans} \dot{q}_s)}{q_s} + \frac{\partial(\rho_{ans} \dot{p}^s)}{\partial p_s} = 0 . \quad (66)$$

Tato rovnice, s použitím Hamiltonových rovnic, dává Liouvillovu rovnici (50).

### 1.9.3 Druhá interpretace distribuční funkce

Uvažujeme izolovaný systém o  $N$  stupních volnosti s hamiltoniánem

$$H(p, q) = E = \text{const} . \quad (67)$$

Je jasné, že systém se nachází na podprostoru fázového prostoru  $\Omega$ , který je vymezen podmínkou (67). V předchozí diskusi jsme zavedli počet bodů Ansamblu  $\mathcal{N}$  a  $\rho_{ans}$  jako funkci, která udává hustotu bodů v Ansamblu. Celkový počet bodů v Ansamblu je dán výrazem

$$\mathcal{N} = \int_{\Omega} \rho_{ans} d^N q d^N p . \quad (68)$$

Zřejmě v objemu  $\Delta\Omega \in \Omega$  je počet bodů dán intergálem

$$\Delta\mathcal{N} = \int_{\Delta\Omega} \rho_{ans} d^N q d^N p . \quad (69)$$

Podělením těchto dvou výrazů dostáváme

$$\frac{\Delta \mathcal{N}}{\mathcal{N}} \quad (70)$$

což můžeme intepretovat jako pravděpodobnost, že libovolný stav je obsažen v  $\Delta\Omega$ . Označíme tuto veličinu jako

$$\int_{\Delta\Omega} f_N d^N q d^N p \quad (71)$$

a tedy můžeme psát

$$\int_{\Delta\Omega} f_N d^N q d^N p = \frac{\int_{\Delta\Omega} \rho_{ans} d^N q d^N p}{\int_{\Omega} \rho_{ans} d^N q d^N p} . \quad (72)$$

Vidíme, že můžeme psát

$$f_N(p, q, t) = C \rho_{ans}(p, q, t) \quad (73)$$

kde  $C$  je konstanta. Jinými slovy řečeno je zde jednoznačná souvislost mezi funkcemi  $\rho_{ans}$  a  $f_N$ . Přesněji řečeno, můžeme položit otázku, co znamená, že  $f_N(q, p) d^N q d^N p$  je pravděpodobnost, že stav daného systému se nachází v objemovém elementu v okolí bodu  $(q, p)$  kde nyní používáme konvenci, kde  $(q, p) \equiv (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N)$ , kde  $\mathbf{x} \equiv (x^1, \dots, x^D)$  a kde  $\mathbf{p} \equiv (p_1, \dots, p_N)$  Explicitně, jestliže stav  $(q, p)$  je obsažen, pak to znamená, že částice 1 je v objemovém elementu v okolí bodu  $\mathbf{x}_1, \mathbf{p}_1$ , druhá částice je v objemovém elementu  $d\mathbf{x}_2 d\mathbf{p}_2$  v okolí  $(\mathbf{x}_2, \mathbf{p}_2)$  atd. Jinými slovy  $f_N$  je *hustota pravděpodobnosti* pro  $N$ -částicový systém, zatím co  $\rho_{ans}$  je veličina spojená s Ansámblem různých systému,  $f_N(q, p, t)$  je veličina spojená s jedním konkrétním systémem. Je také důležité připomenout, že  $f_N$  je normovaná jako

$$\int_{\Omega} f_N dq dp = 1 , \quad (74)$$

kde se integrace provádí přes celý dosažitelný fázový prostor. Jinými slovy je to prostor vymezený podmínkou konstantní energie. Jestliže nyní  $G(q, p, t)$  je libovolná dynamická veličina, pak s pomocí známé hustoty pravděpodobnosti  $f_N$  můžeme definovat následující střední hodnotu dané veličiny

$$\langle G \rangle = \int f_N G dq dp . \quad (75)$$

### 1.9.4 Řešení Liouvillových rovnic s počáteční podmínkou

Nyní se zaměříme na určité možnosti, jak řešit Liouvillovu rovnici s určitou počáteční podmínkou.

#### 1. Taylorův rozvoj

Předpokládejme, že známe počáteční formu distribuční funkce  $f_N$

$$f_N(q, p, 0) \equiv f_N^0(q, p) . \quad (76)$$

Nyní provedeme Taylorův rozvoj  $f_N(q, p, t)$  v okolí bodu  $t = 0$  při pevných  $q$  a  $p$

$$f_N(q, p, \Delta t) = f_N(q, p, 0) + \frac{\partial f_N}{\partial t}(0, q, p)\Delta t + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f_N}{\partial t^2}(0, q, p)(\Delta t)^2 + \dots \quad (77)$$

Víme, že  $f_N$  splňuje Liouvillovu rovnici a tedy

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_N}{\partial t} &= \{H, f_N\} , \\ \frac{\partial^2 f_N}{\partial t^2} &= \frac{\partial}{\partial t} \{H, f_N\} = \left\{ H, \frac{\partial f_N}{\partial t} \right\} = \\ &= \{H, \{H, f_N\}\} , \end{aligned} \quad (78)$$

kde předpokládáme, že  $H$  nezávisí explicitně na čase. S použitím těchto vztahů dostaneme

$$\begin{aligned} f_N(q, p, \Delta t) &= f_N(q, p, 0) + \Delta t \{H, f_N(q, p, 0)\} + \frac{1}{2}(\Delta t)^2 \{H, \{H, f_N(q, p, 0)\}\} + \dots = \\ &= \left( 1 + \Delta t \{H, \} + \frac{(\Delta t)^2}{2} \{H, \{H, \}\} + \dots \right) f_N(q, p, 0) . \end{aligned} \quad (79)$$

Geometricky si můžeme představit jako časový vývoj funkce  $f_N$  v pevném bodě  $q, p$ . Poznamenejme, že pro konečný časový interval můžeme tento vztah přepsat do formy

$$f_N(q, p, \Delta t) = f_N(q, p, 0) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\Delta t)^n}{n!} \overbrace{\{H, \dots, \{H, \{H, f_N(q, p, 0)\}\}\}}^n . \quad (80)$$

#### Případ 2: Liouvillovův operátor

Z předchozího popisu je zřejmé, že výraz  $\{H, \}$  má formu operátoru působící na  $f_N$ . Proto je užitečné přepsat Liouvillovu rovnici do tvaru

$$i \frac{\partial f_N}{\partial t} = i \{H, f_N\} \equiv \hat{\Lambda} f_N \quad (81)$$

kde

$$i \hat{\Lambda} = i \{H, \} = i \sum_{s=1}^N \left( \frac{\partial H}{\partial q_s} \frac{\partial}{\partial p^s} - \frac{\partial H}{\partial p^s} \frac{\partial}{\partial q_s} \right) . \quad (82)$$

Je možné ukázat, že  $\hat{\Lambda}$  je Hermiteovský operátor v prostoru spojitých normovaných funkcí na fázovém prostoru tak, že pro tuto funkci platí

$$\|\psi\|^2 = \int \psi^* \psi d^N q d^N p < \infty . \quad (83)$$

Operátor je Hermiteovský, když platí  $\hat{\Lambda} = \hat{\Lambda}^\dagger$ , kde  $\hat{\Lambda}^\dagger$  je Hermiteovsky sdružený operátor. Z toho dostaneme, že vlastní hodnoty  $\hat{\Lambda}$  jsou reálné a že vlastní vektory daného operátoru jsou ortogonální. Je důležité, že tyto vlastnosti jsou zcela obecné a nezávisí na druhu interakce mezi molekulami. Další důležitá vlastnost je ta, že vlastní hodnoty  $\hat{\Lambda}$  jsou reálné, pak vlastní hodnoty  $\{H, \} = -i \hat{\Lambda}$  jsou imaginární, což má za následek, že mohou existovat řešení Liouvillových rovnic, které oscilují v čase.

Pomocí operátoru  $\hat{\Lambda}$  přejdeme k dalšímu způsobu řešení počáteční podmínky u Liouvillových rovnic. Přepíšeme Liouvillovu rovnici do tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \left( \exp i \int_0^t dt' \hat{\Lambda} \right) D(t) \right] = 0 \quad (84)$$

Abychom viděli, že tato rovnice je ekvivalentní Liouvillově rovnici, provedeme derivaci vzhledem k  $t$

$$\begin{aligned} i \hat{\Lambda}(t) D(t) \exp(i \int_0^t dt' \hat{\Lambda}) + \exp(i \int_0^t dt' \hat{\Lambda}) \frac{\partial}{\partial t} D(t) = 0 \Rightarrow \\ i \exp(i \int_0^t dt' \hat{\Lambda}) (\hat{\Lambda}(t) D(t) - \frac{\partial}{\partial t} D(t)) = 0 \end{aligned} \quad (85)$$

a ekvivalence s Liouvillovou rovnicí je zřejmá. Nyní, jestliže zintegrujeme rovnici (84) dostaneme řešení ve tvaru

$$D(p, q, t) = e^{-i \int_0^t dt' \hat{\Lambda}} D(q, p, 0) , \quad (86)$$

kde opět je nutné zdůraznit, že uvažujeme pevné  $p, q$ , jinými slovy, můžeme si představit, že  $p, q, t$  jsou nezávislé souřadnice na  $6N + 1$  dimensionálním prostoru.

Pro mále intervaly opět máme

$$\int_0^{\Delta t} dt' \hat{\Lambda} \simeq \Delta t \hat{\Lambda} \quad (87)$$

a tedy (86) může být přepsána do tvaru

$$\begin{aligned} D(p, q, t) &= [1 - i\Delta t \hat{\Lambda} + \frac{1}{2}(-i\Delta t \hat{\Lambda})^2 + \dots] D(q, p, t) = \\ &= \left[ 1 + \Delta t \{H, \} + \frac{(\Delta t)^2}{2} \{H, \{H, \}\} + \dots \right] D(q, p, 0) \end{aligned} \quad (88)$$

což souhlasí s Taylorovým rozvojem, který byl nalezen v předchozí kapitole.

Nyní přistoupíme k analýze s použitím vlastních vektorů a vlastních hodnot operátoru  $\hat{\Lambda}$ . Opět musíme předpokládat, že počáteční forma rozdělovací funkce  $f_N$  je známa  $f_N(q, p, 0) \equiv f_N^0(q, p)$ . Dále musíme předpokládat, že známe vlastní vektory a vlastní hodnoty operátoru  $\hat{\Lambda}$ , kdy budeme předpokládat časově nezávislé  $\hat{\Lambda}$

$$\hat{\Lambda} \psi_n = \omega_n \psi_n . \quad (89)$$

Jestliže předpokládáme, že  $\psi_n$  tvoří bázi Hilbertova prostoru, můžeme psát počáteční rozdělovací funkci ve tvaru

$$f_N^0(q, p) = \sum_{\forall n} D_n \psi_n \quad (90)$$

kde koeficienty  $D_n$  je možné určit s pomocí předpokládáme ortogonalitu vektorů  $\psi_n$

$$\begin{aligned} D_n &= \langle \psi_n | f_N^0(q, p) \rangle = \int d^N q d^N p \psi_n^*(q, p) f_N^0(q, p) , \\ \int d^N q d^N p \psi_n^*(q, p) \psi_m(q, p) &= \delta_{nm} . \end{aligned} \quad (91)$$

Pak zřejmě dostáváme

$$f_N(q, p, t) = e^{-it\hat{\Lambda}} \sum_{\forall n} D_n \psi_n . \quad (92)$$

Tato rovnice, s použitím faktu, že  $\psi_n$  je vlastním vektorem  $\hat{L}$ , má řešení ve tvaru

$$f_N(q, p, t) = \sum_{\forall n} D_n e^{-it\omega_n} \psi_n . \quad (93)$$

### 1.9.5 Rozdělovací funkce ideálního plynu

Uvažujme ideální plyn, který je dán  $N$  neinteragujícími molekulami a jenž je obsažen v krychli o velikosti hrany  $L$ . V tomto případě Hamiltonián je dán ve tvaru

$$H = \sum_{s=1}^N \frac{p_s^2}{2m} , \quad 0 \leq x_s^{(i)} \leq L \quad (94)$$

Víme, že časový vývoj rozdělovací funkce má formu

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \{H, f\} = - \sum_s \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_s} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}_s} = - \sum_s \mathbf{v}_s \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}_s} . \quad (95)$$

Pak zřejmě operátor  $\hat{\Lambda}$  má tvar

$$\hat{\Lambda}_0 = -i \sum_{s=1}^N \frac{\mathbf{p}_s}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_s} . \quad (96)$$

Vlastní vektory operátoru splňují rovnici

$$\hat{\Lambda}_0 \psi_{(\mathbf{k})} = \omega_{(\mathbf{k})} \psi_{(\mathbf{k})} , \quad (97)$$

kde  $(\mathbf{k})$  je posloupnost vlastních vektorů

$$(\mathbf{k}) \equiv (\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_N) . \quad (98)$$

Pak dostáváme

$$\hat{\Lambda}_0 \psi_{(\mathbf{k})} = -i \sum_{s=1}^N \frac{\mathbf{p}_s}{m} \cdot \frac{\partial \psi_{(\mathbf{k})}}{\partial \mathbf{x}_s} = \omega_{(\mathbf{k})} \psi_{(\mathbf{k})} . \quad (99)$$

Budeme předpokládat řešení ve tvaru

$$\psi_{(\mathbf{k})} = A \exp \left( i \sum_{s=1}^N \mathbf{k}_s \cdot \mathbf{x}_s \right) \quad (100)$$

pak po jeho vložení do předchozí rovnice dostaneme

$$\omega_{(\mathbf{k})} = \sum_{s=1}^N \frac{\mathbf{p}_s}{m} \cdot \mathbf{k}_s . \quad (101)$$

Dále, hraniční podmínky nám dávají

$$\mathbf{k}_s = \frac{2\pi}{L} \mathbf{n}_s , \quad (102)$$

kde komponenty vektoru  $\mathbf{n}$  jsou celá čísla. Konečně, konstanta  $A$  je zafixována normalizací a tedy dostáváme

$$\psi_{(\mathbf{k})} = \frac{1}{L^{3N/2}} \exp \left( i \sum_{s=1}^N \mathbf{k}_s \cdot \mathbf{x}_s \right) . \quad (103)$$

Pak je zřejmé, že obecná forma  $N$ -částicové rozdělovací funkce má tvar

$$f(\mathbf{x}^N, \mathbf{p}^N) = \sum_{(\mathbf{k})} D_{(\mathbf{k})}(\mathbf{p}^N) \psi_{(\mathbf{k})}(\mathbf{x}^N) e^{-i\omega_{(\mathbf{k})}t} . \quad (104)$$

Abychom určili konečný tvar rozdělovací funkce  $f_0$ , musíme určit koeficienty  $D_{(\mathbf{k})}(\mathbf{p}^N)$ . Označíme si hodnotu rozdělovací funkce  $f$  v čase  $t = 0$  jako  $f_0$

$$f_0(\mathbf{x}^N, \mathbf{p}^N) = \sum_{(\mathbf{k})} D_{(\mathbf{k})}(\mathbf{p}^N) \psi_{(\mathbf{k})}(\mathbf{x}^N) . \quad (105)$$

Protože vektory  $\psi_{(\mathbf{k})}$  jsou ortogonální, dostáváme

$$D_{(\mathbf{k})}(\mathbf{p}) = \frac{1}{L^{3N/2}} \int \prod_{i=1}^N d^3 \mathbf{x}_i [\exp(-i \sum_s \mathbf{k}_s \cdot \mathbf{x}_s)] D_0(\mathbf{x}^N, \mathbf{p}^N) \quad (106)$$

Tedy ze známe počáteční hodnoty distribuční funkce dostaneme obecné řešení Liouvilovy rovnice pro ideální plyn ve tvaru

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{L^{3N/2}} \sum_{(\mathbf{k})} D_{(\mathbf{k})}(\mathbf{p}^N) e^{i \sum_{s=1}^N \mathbf{k}_s \cdot (\mathbf{x}_s - \frac{\mathbf{p}_s}{m} t)} . \quad (107)$$

Je užitečné poznamenat, že rozdělovací funkce závisí na  $6 \times N$  integrálech pohybu

$$\left( \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N, \mathbf{x}_1 - \frac{\mathbf{p}_1}{m} t, \mathbf{x}_2 - \frac{\mathbf{p}_2}{m} t, \dots, \mathbf{x}_N - \frac{\mathbf{p}_N}{m} t \right) \quad (108)$$



což je přesně v souladu s předchozí diskusí obecného řešení Liouvillový rovnic. Explicitně, je jasné, že  $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N$  jsou integrály pohybu pro systém definovaný hamiltoniánem (94). Dále ukážeme, že  $g_i \equiv \mathbf{x}_i - \frac{\mathbf{p}_i}{m}t$  splňuje rovnici zachování

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_i}{\partial t} + \{g_i, H\} &= -\frac{\mathbf{p}_i}{m} + \sum_{s=1}^N \left( \frac{\delta \mathbf{x}_s}{\delta \mathbf{x}_i} \cdot \frac{\delta H}{\delta \mathbf{p}_s} - \frac{1}{m} \frac{\delta(-\mathbf{p}_i)}{\delta \mathbf{p}_s} \frac{\delta H}{\delta \mathbf{x}_s} \right) = \\ &= -\frac{\mathbf{p}_i}{m} + \sum_{s=1}^N \delta_i^s \frac{\delta H}{\delta \mathbf{p}_s} = 0 \end{aligned} \quad (109)$$

Je také užitečné poznamenat, že v případě ideálního plynu, můžeme operátor  $\hat{\Lambda}_0$  napsat jako  $\hat{\Lambda}_0 = \sum_{s=1}^N \hat{\Lambda}_0^s$ , kde  $\{\hat{\Lambda}_0^i, \hat{\Lambda}_0^j\} = 0$ . Pak je zřejmé, že můžeme hledat řešení Liouvillový rovnic ve tvaru  $f_N = \prod_{s=1}^N f_1(\mathbf{x}_s, \mathbf{p}_s, t)$ , kde  $f_1$  je jednočásticová rozdělovací funkce, která v případě ideálního plynu je dána výrazem

$$f_1(\mathbf{x}_1, \mathbf{p}_1, t) = \exp\left(-t \frac{\mathbf{p}_1}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1}\right) f_1(\mathbf{x}_1, \mathbf{p}_1, 0). \quad (110)$$

## 1.10 Redukované distribuční funkce

Pro jednoduchost zápisu zavedeme následující konvenci

$$d1 \equiv d\mathbf{x}_1 d\mathbf{p}_1, d2 \equiv d\mathbf{x}_2 d\mathbf{p}_2, \dots \quad (111)$$

která odpovídá částicím  $1, 2, \dots$

Uvažujme nyní systém  $N$  stejných částic a zaměřme se na subsystém, který je tvořen  $s < N$  částicemi. Pravděpodobnost, že najdeme subsystém ve fázovém prostoru  $d1d2 \dots ds$  v okolí stavu  $(1, 2, \dots, s)$  je

$$f_s(1, \dots, s) d1 \dots ds. \quad (112)$$

Je zřejmé, že můžeme očekávat vztah mezi  $f_s$  a  $f_N$ . Poznamenejme, že  $f_N$  udává pravděpodobnost, že se systém nachází v okolí bodu  $(1, \dots, s, s+1, \dots, N)$ . Poté je zřejmé, že jestliže se nazačínáme o situaci v okolí bodů  $s+1, \dots, N$ , musíme provést součet pravděpodobností, že je systém v daných bodech. Explicitně dostáváme

$$f_s(1, \dots, s) = \int f_N(1, \dots, N) d(s+1) \dots dN \quad (113)$$

## 1.11 s-násobná distribuční funkce

Tuto distribuční funkci, kterou si označíme jako  $F_s(1, \dots, s)$  definujeme následujícím způsobem. Výraz

$$F_s(1, \dots, s) d1 \dots ds \quad (114)$$

reprezentuje pravděpodobnost, že jedna z částic je ve fázovém prostoru  $dl$  v okolí bodu 1, jiná je ve fázovém prostoru  $d2$  v okolí bodu 2 atd v daném časovém okamžiku. Je zde důležitý rozdíl vzhledem k distribuční funkci  $f_s$ , protože  $F_s$  nerozlišuje, která konkrétní částice se nachází v okolí bodu 1 atd. Podrobněji,  $f_s$  určuje  $s$ -částicový stav specifické skupiny částic. Na druhou stranu  $F_s$  také odpovídá stejnému specifickému stavu, ale je nezávislá na tom, které částice se nacházejí v tomto stavu. Například,  $f_2(1, 2)$  udává pravděpodobnost, že částice 1 je ve stavu 1 a částice 2 ve stavu 2, na druhou stranu  $F_2(1, 2)$  udává počet dvojic částic, které se nacházejí v daném stavu. Abychom našli vztah mezi  $F_s$  a  $f_s$  musíme znát počet způsobů, jakým můžeme vybrat  $s$  částic z celkových  $N$

$$\binom{N}{s} = \frac{N!}{s!(N-s)!} \quad (115)$$

Jestliže předpokládáme, že dané částice jsou identické, pak každý takový výběr dává stejnou funkci  $f_s$ . Pak dostáváme

$$\bar{F}_s = \binom{N}{s} f_s, \quad (116)$$

kde čára nad  $F_s$  dává, že daný  $s$ -částicový stav byl započítán pouze 1. Je zřejmé, že musíme vzít do úvahy fakt, že  $s$ -částic můžeme distribuovat  $s!$  způsoby tak, že stále dávají  $s$ -částicový stav. Tento fakt dává konečný výsledek

$$F_s = s! \bar{F}_s = s! \binom{N}{s} f_s = \frac{N!}{(N-s)!} f_s \quad (117)$$

## 2 Analýza Liouvillový rovnice

V této kapitole odvodíme posloupnost rovnic známou jako BBKGY rovnice. Toto jsou rovnice pro redukované distribuce a hrají klíčovou roli v kinetické teorii plynů a tekutin. Začneme s Liouvillovou rovnicí pro  $N$ -částicovou distribuční funkci

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} + \{f_N, H\} = 0 \quad (118)$$

a přepíšeme ji do tvaru

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} - \hat{L}_N f_N = 0, \quad (119)$$

kde

$$\hat{L}_N = \{H, \} \quad (120)$$

což explicitně dává

$$\hat{L}_N = \sum_{l=1}^N \left( \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_l} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_l} - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_l} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_l} \right), \quad (121)$$

kde

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_l} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_l} \equiv \frac{\partial H}{\partial x_{(l)}^i} \cdot \frac{\partial}{\partial p_i^{(l)}} \quad (122)$$

kde  $x_{(l)}^i$  je  $i$ -tá komponenta polohového vektoru  $l$ -té částice a  $p_i^{(l)}$  je  $i$ -tá komponenta sdružené hybnosti. Hamiltonian  $H$  má tvar

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i<j}^N \sum \Phi_{ij}, \quad (123)$$

kde

$$\Phi_{ij} \equiv \Phi(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|) \quad (124)$$

je dvoučásticový interakční potenciál. Poté dostaneme

$$\hat{L} = - \sum_{l=1}^N \frac{\mathbf{p}_l}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_l} + \sum_{i<j}^N \sum_{l=1}^N \frac{\partial \Phi_{ij}}{\partial \mathbf{x}_l} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_l}. \quad (125)$$

Uvažujme nyní operátor

$$\hat{O}_{ij} \equiv \sum_l \frac{\partial \Phi_{ij}}{\partial \mathbf{x}_l} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_l}. \quad (126)$$

Z definice potenciálu je zřejmé, že tento výraz je nenulový pouze v případě, když  $l = i$  nebo  $l = j$ . Tedy dostáváme

$$\hat{O}_{ij} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i} \Phi_{ij} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} \Phi_{ij} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j}. \quad (127)$$

Protože potenciál  $\Phi_{ij}$  závisí na  $|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|$  zřejmě dostaneme

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i} \Phi_{ij} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_j} \Phi_{ij} . \quad (128)$$

Pak můžeme psát

$$\hat{O}_{ij} = -\mathbf{G}_{ij} \cdot \left( \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j} \right) , \quad (129)$$

kde jsme definovali

$$\mathbf{G}_{ij} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i} \Phi_{ij} \quad (130)$$

což je síla působící na  $i$ -tou částici způsobenou interakcí s  $j$ -tou částicí. Pomocí těchto definicí můžeme přepsat  $\hat{L}_N$  do tvaru

$$\hat{L}_N = -\sum_{l=1}^N \frac{\mathbf{p}_l}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_l} + \sum_{i<j}^N \sum \hat{O}_{ij} \quad (131)$$

nebo ekvivalentně

$$\hat{L}_N = -\sum_{l=1}^n \hat{K}_l + \sum_{i<j}^N \sum \hat{O}_{ij} \quad (132)$$

kde jsme definovali  $\hat{K}_l$  jako kinetický operátor. Protože se zajímáme o rovnici pro distribuční funkci  $f_s$ , rozdělíme  $\hat{L}_N$  následujícím způsobem

$$\hat{L}_N = \hat{L}_s + \hat{L}_{N,s+1} , \quad (133)$$

kde  $s$ -částicový Liouvillův operátor  $\hat{L}_s$  je dán

$$\hat{L}_s = -\sum_{l=1}^s \hat{K}_l + \sum_{i<j}^s \sum \hat{O}_{ij} . \quad (134)$$

Zbytkový operátor  $\hat{L}_{N,s+1}$  je dán předpisem

$$\hat{L}_{N,s+1} = -\sum_{l=s+1}^N \hat{K}_l + \hat{R}_{N,s+1} \quad (135)$$

a kde  $\hat{R}_{N,s+1}$  můžeme lehce odvodit z definice  $\hat{L}_N$

$$\hat{R}_{N,s+1} = \sum_{i=1}^s \sum_{j=s+1}^N \hat{O}_{ij} + \sum_{i=s+1}^N \sum_{j=s+1, (i<j)}^N \hat{O}_{ij} . \quad (136)$$

## 2.1 Redukce Liouvilovy rovnice

S pomocí takto definovaných operátorů můžeme přistoupit k integraci Liouvilovy rovnice (119). Je jasné, že můžeme provést integraci přes  $s+1, \dots, N$  v rovnici (119), kde zřejmě můžeme zaměnit integraci přes  $s+1, \dots, N$  a působení operátoru  $\hat{L}_s$ . Konkrétně

$$\begin{aligned} \int d(s+1) \dots dN \frac{\partial}{\partial t} f_N &= \frac{\partial}{\partial t} \int d(s+1) \dots dN f_N = \frac{\partial}{\partial t} f_s, \\ \int d(s+1) \dots dN \hat{L}_s f_N &= \hat{L}_s \int d(s+1) \dots dN f_N = \hat{L}_s f_s, \end{aligned} \quad (137)$$

a tedy (119) má tvar

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial}{\partial t} - \hat{L}_s \right) f_s &= \int d(s+1) \dots dN \hat{L}_{N,s+1} f_N = \\ &= \int d(s+1) \dots dN \left( - \sum_{l=s+1}^N \hat{K}_l + \hat{R}_{N,s+1} \right) f_N. \end{aligned} \quad (138)$$

Budeme se podrobně věnovat pravé straně rovnice (138)

$$\int d(s+1) \dots dN \left( - \sum_{l=s+1}^N \frac{\mathbf{p}_l}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_l} + \sum_{i=1}^s \sum_{j=s+1}^N \hat{O}_{ij} + \sum_{i=s+1, (i < j)}^N \sum_{j=s+1}^N \hat{O}_{ij} \right) f_N \quad (139)$$

První člen dává pouze povrchové integrály a z definice rozdělovací funkce musí být rovny nule. To vyplývá z faktu, že

$$\int d\mathbf{x}_1 \int d\mathbf{p}_l \frac{\mathbf{p}_l}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_l} f_N \sim \int d\mathbf{p}_l \frac{\mathbf{p}_l}{m} f_N(\mathbf{x}_l = \infty) - f_N(\mathbf{x}_l = -\infty) = 0 \quad (140)$$

Stejným způsobem budeme analyzovat třetí příspěvek

$$\begin{aligned}
& \int d(s+1) \dots dN \hat{O}_{ij} f_N = - \int d(s+1) \dots dN \mathbf{G}_{ij} \left( \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{p}_j} \right) = \\
& = \int d^3 \mathbf{x}_{(s+1)} d^3 \mathbf{p}_{(s+1)} \dots d^3 \mathbf{p}_{(i-1)} d^3 \mathbf{x}_i \dots d^3 \mathbf{x}_j d^3 \mathbf{p}_{(j+1)} \dots d^3 \mathbf{x}_N d^3 \mathbf{p}_N \mathbf{G}_{ij} \times \\
& \quad \times (f_N(\mathbf{p}_i = \infty) - f_N(\mathbf{p}_i = -\infty) - f_N(\mathbf{p}_j = \infty) - f_N(\mathbf{p}_j = -\infty)) = 0
\end{aligned} \tag{141}$$

Výsledkem dostáváme

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} - \hat{L}_s \right) f_s = \int d(s+1) \dots dN \sum_{i=1}^s \sum_{j=s+1}^N \hat{O}_{ij} f_N . \tag{142}$$

S použitím explicitní formy  $\hat{O}_{ij}$  dostáváme, že pravá strana rovnice má tvar

$$\text{P.S.R(142)} = - \int d(s+1) \dots dN \sum_{i=1}^s \sum_{j=s+1}^N N \mathbf{G}_{ij} \cdot \left( \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j} \right) f_N \tag{143}$$

Opět vidíme, že derivace v proměnné  $\mathbf{p}_j, j \geq s+1$  dávají, při současné integraci, povrchové příspěvky a tudíž jsou rovny nule. Výsledkem dostáváme

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} - \hat{L}_s \right) f_s = - \sum_{i=1}^s \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \int d(s+1) \dots dN \sum_{j=s+1}^N \mathbf{G}_{ij} f_N . \tag{144}$$

Toto je klíčová rovnice určující časový vývoj redukované distribuční funkce. Vidíme, že dynamika distribuční funkce  $f_s(1, \dots, s)$  se zbývajícími částicemi v tekutině je dán pravou stranou rovnice (144).

Abychom pokročili dále ve zjednodušení rovnice (144) musíme zavést předpoklad, že částice v tekutině jsou identické a tedy  $f_s(1, 2, \dots, s)$  je symetrická při výměně jednodlivých stavů částic. Jinými slovy předpokládáme, že

$$f_3(1, 2, 3) = f_3(1, 3, 2) = f_3(3, 2, 1) = f_3(3, 1, 2) = f_3(2, 3, 1) = f_3(2, 1, 3) . \tag{145}$$

Abychom ukázali ekvivalenci integrálů, když provádíme sumaci přes  $j$ , musí například platit

$$\int d2d3 \dots \mathbf{G}_{12} f_N(1, 2, 3, \dots) = \int d2d3 \dots \mathbf{G}_{13} f_N(1, 2, 3, \dots) \tag{146}$$

což můžeme, při provedení integrace přes  $4, \dots, N$  psát jako

$$\int d2d3\mathbf{G}_{12}f_3(1, 2, 3) = \int d2d3\mathbf{G}_{13}f_3(1, 2, 3) . \quad (147)$$

Jestliže nyní provedeme na levé straně integraci přes  $d3$  a pravou stranu přes  $d2$  dostaneme (kde jsme využili předpoklad (145), tedy  $f_3(1, 2, 3) = f_3(1, 3, 2)$ )

$$\int d2\mathbf{G}_{12}f_2(1, 2) = \int d3\mathbf{G}_{13}f_2(1, 3) . \quad (148)$$

Jestliže nyní nahradíme integrační proměnnou na pravé straně 3 proměnnou 2 dostaneme rovnost. Pak tedy vidíme, že každý člen v  $(N - 1)j$  sumě dává identický příspěvek a tedy dostáváme

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \hat{L}_s\right) f_s + (N - s) \sum_{i=1}^s \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \int d(s+1) \dots dN \mathbf{G}_{i,s+1} f_N . \quad (149)$$

Nyní vidíme, že při integraci přes  $d(s+2) \dots dN$  dostaneme  $f_{s+1}$ , což nám dává fundamentální rovnici

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \hat{L}_s\right) f_s + (N - s) \sum_{i=1}^s \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \int d(s+1) \mathbf{G}_{i,s+1} f_{s+1} , 1 \leq s \leq N . \quad (150)$$

Tento systém  $N$  vázaných rovnice se nazývá BBKGY rovnice podle jejich autorů, kterými jsou N.N. Bogoliubov, M. Born, G. Kirkwood, H. S. Green and J. Yvon. Tyto rovnice se nazývají hierarchie. V následující diskuzi použijeme notaci  $BY_s$ , abychom označili  $s$ -tou rovnici v této hierarchii. Nechť uvedeme následující vlastnosti tohoto systému

- Toto je systém  $N$  rovnic, kde  $N$ -tá z nich je Liouvillova rovnice pro  $f_N$ .
- Definujeme

$$\frac{Df_s}{Dt} \equiv \frac{\partial f_s}{\partial t} - \hat{L}_s f_s \quad (151)$$

pak z (150) dostaneme pro podskupinu  $s$  částic, kde  $s < N$

$$\frac{Df_s}{Dt} \neq 0 . \quad (152)$$

Jinými slovy,  $f_s(1, 2, \dots, s)$  není konstantní podél trajektorie ve fázovém prostoru podprostoru odpovídajícímu  $s$ -částicím, což je důsledek interakce mezi  $s$ -částicemi a zbývajících částicemi v souboru  $N$  částic.

- Třetí vlastnost má speciální význam pro kinematiku, která nás speciálně zajímá. Týká se první rovnice v daném systému  $BY_1$ . Tato rovnice je obecnou formou všech kinetických rovnic. *Kinetická rovnice* je uzavřená rovnice pro  $f_1(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ . Abychom viděli původ této rovnice uvažujme první rovnici v (150), kterou přepíšeme do formy

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1} f_1 = -\hat{A}_1 f_2(1, 2) \quad (153)$$

kde  $\hat{A}_1$  vyplývá z (150). Kinetickou rovnici dostaneme, jestliže budeme schopni provést následující operaci

$$\hat{A}_1 f_2(1, 2) = \hat{J}(f_1) , \quad (154)$$

kde  $\hat{J}$  se typicky nazývá kolizním integrálem, zobrazuje funkci na funkci. Nejjednodušší způsob, jak takový integrál zavést, je předpokládat, že  $f_2(1, 2)$  je funkcí  $f_1(1)$ . Například, ve Vlasovově aproximaci uvažujeme  $f_2(1, 2) = f_1(1)f_1(2)$ . V případě obecnějšího Bogoliubovova ansatzu máme  $f_s(1, 2) = f_2[1, 2, f_1]$ .

## 2.2 Vlasovova aproximace

Uvažujme  $BY_s$  rovnici v limitě, kdy  $N \gg s$

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} - \hat{L}_s \right) f_s = \hat{I}_s f_{s+1} , \quad (155)$$

kde

$$\hat{I}_s \equiv -N \sum_{i=1}^s \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \int d(s+1) \mathbf{G}_{i,s+1} . \quad (156)$$

Předpokládejme, že tekutina je tvořena z  $N$  částic, které jsou obsaženy v objemu  $N$ . Pak je možné zavést charakteristický počet částic

$$n_0 \equiv \frac{N}{V} . \quad (157)$$

Dále předpokládejme, že můžeme zavést střední teplotní rychlost,  $C$ , a odpovídající teplotu  $T$  v tekutině, tak že

$$mC^2 \equiv k_B T , \quad (158)$$



kde  $k_B$  je Boltzmanova konstanta. Síla potenciálu a charakteristická délková škála  $r_0$  jsou definovány jako

$$G_{ij} = \frac{\Phi_0}{r_0} \bar{G}_{ij} , \quad (159)$$

kde  $\bar{G}_{ij}$  je bezrozměrná veličina. Dále provedeme renormalizaci funkce  $f_s$ , tak že

$$F_s \equiv V^s f_s \quad (160)$$

V případě prostorově homogenního plynu dostaneme, že

$$f_1(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{1}{V} F_1(\mathbf{p}) . \quad (161)$$

Jestliže víme, že  $f_1(\mathbf{x}, \mathbf{p})$  udává pravděpodobnost, že jedna částice se nachází ve fázovém objemu v okolí bodu  $\mathbf{x}, \mathbf{p}$  o velikosti  $d^3\mathbf{x}, d^3\mathbf{p}$ , pak je jasné, že hustota počtu částic v bodě  $\mathbf{x}$ , kterou označíme jako  $n(\mathbf{x}, t)$  je dána výrazem

$$n(\mathbf{x}, t) = N \int f_1 d^3\mathbf{p} = n_0 \int F_1 d^3\mathbf{p} \quad (162)$$

Abychom dostali rovnici pro  $F_s$ , vynásobíme obě strany rovnice (155)  $V^s$  a dostaneme

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \sum_l \hat{K}_l - \sum_{i < j} \sum \hat{O}_{ij} \right) F_s = \frac{1}{V} \hat{I}_s F_{s+1} . \quad (163)$$

V následujícím kroku zavedeme bezrozměrné veličiny, které označíme pruhem nad daným symbolem

$$\begin{aligned} x &= r_0 \bar{x} , p = mC \bar{p} , \\ t &= \frac{r_0}{C} \bar{t} , \quad F_s = (mC)^{-3s} \bar{F}_s . \end{aligned} \quad (164)$$

Poznamenejme, že je zde velmi mnoho možností volby charakteristických škál pro danou analýzu. Můžeme položit  $r_0$ , aby bylo rovno charakteristické délce silového působení, či můžeme definovat  $r_0$  jako

$$r_0 = n_0^{-1/3} \quad (165)$$

nebo

$$r_0 = V^{1/3} . \quad (166)$$

Pomocí bezrozměrných veličin dostáváme

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \frac{C}{r_0}, \\ \hat{K} &= \sum_l \frac{\mathbf{p}_l}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_l} = \sum_l \frac{C}{r_0} \bar{\mathbf{p}}_l \cdot \frac{\partial}{\partial \bar{\mathbf{x}}_l} = \frac{C}{r_0} \hat{\bar{K}}, \\ \hat{O}_{ij} &= \mathbf{G}_{ij} \cdot \left( \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j} \right) = \frac{\Phi_0}{r_0 C} \bar{\mathbf{G}}_{ij} \cdot \left( \frac{\partial}{\partial \bar{\mathbf{p}}_i} - \frac{\partial}{\partial \bar{\mathbf{p}}_j} \right) \equiv \frac{\Phi_0}{m r_0 C} \bar{\hat{O}}_{ij}, \end{aligned} \quad (167)$$

a konečně máme

$$\begin{aligned} \hat{I}_s &= -N \sum_{i=1}^s \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \int d^3 \mathbf{x}_{s+1} d^3 \mathbf{p}_{s+1} \mathbf{G}_{i,s+1} = \\ &= -n_0 V \frac{1}{mC} \frac{\Phi_0}{r_0} r_0^3 (mC)^3 \sum_{i=1}^s \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \int d^3 \bar{\mathbf{x}}_{s+1} d^3 \bar{\mathbf{p}}_{s+1} \bar{\mathbf{G}}_{i,s+1} = \Phi_0 r_0^2 (mC)^2 \bar{\hat{I}}_s. \end{aligned} \quad (168)$$

Nyní vložíme tyto výrazy do (163) a dostaneme

$$\begin{aligned} &\frac{C_0}{r_0} \left( \frac{\partial}{\partial \bar{t}} + \sum_l \hat{K}_l - \frac{\Phi_0}{mC^2} \sum_{i<j} \hat{O}_{ij} \right) (mC)^{-3s} \bar{F}_s = \\ &= \frac{1}{V} n_0 V \Phi_0 r_0^2 (mC)^2 \bar{\hat{I}}_s (mC)^{-3(s+1)} \bar{F}_{s+1} \Rightarrow \\ &\left( \frac{\partial}{\partial \bar{t}} + \sum_l \hat{K}_l - \frac{\Phi_0}{mC^2} \sum_{i<j} \hat{O}_{ij} \right) \bar{F}_s = (n_0 r_0^3) \left( \frac{\Phi_0}{mC^2} \right) \hat{\bar{I}}_s \bar{F}_{s+1}. \end{aligned} \quad (169)$$

Nyní definujeme parametry

$$\alpha \equiv \frac{\Phi_0}{mC^2} = \frac{\Phi_0}{k_B T}, \gamma^{-1} \equiv n_0 r_0^3. \quad (170)$$

Poté berzorměrná rovnice (169), když nebudeme psát čárku nad symboly, má tvar

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{l=1}^s \hat{K}_l - \alpha \sum_{i<j}^s \hat{O}_{ij} \right) F_s = \frac{\alpha}{\gamma} \hat{I}_s F_{s+1}. \quad (171)$$

Uvažujme nyní koeficient

$$\frac{\alpha}{\gamma} = \frac{n_0 r_0^3 \Phi_0}{k_B T} . \quad (172)$$

Jesliže nyní zvolíme, že  $r_0$  odpovídá charakteristické škále interakce, je vhodné zavést veličinu  $\mathcal{N}_0$  následujícím způsobem

$$\mathcal{N}_0 = n_0 r_0^3 , \quad (173)$$

která udává počet částic ve sféře dosahu dané interakce. Pak dostaneme

$$\frac{\alpha}{\gamma} = \frac{\mathcal{N}_0^2 \Phi_0}{\mathcal{N}_0 k_B T} \simeq \frac{\langle E_\Phi \rangle}{\langle E_k \rangle} , \quad (174)$$

kde  $\langle E_\Phi \rangle$  reprezentuje střední interakční energy na jednotku dosahu dané interakce, zatím co veličina  $\langle E_k \rangle$  reprezentuje termální energii obsaženou v daném objemu. Je zřejmé, že můžeme jejich podíl interpretovat jako míru průměrné potenciální a kinetické energie v dané tekutině. Poté je přirozené definovat jako *silně interagující tekutinu*, jestliže platí  $\alpha/\gamma \geq 1$ , pak hovoříme o slabě interagujícím tekutině, jestliže platí  $\alpha/\gamma \ll 1$ .

Nyní přistoupíme k diskuzi důležitého pojmu, jakým je statistická nezávislost částic v tekutině. Intuitivně je zřejmé, že částice jsou statisticky nezávislé, jesliže jsou nekorelované. Podrobněji, definujeme korelační funkci mezi dvěma částicemi pomocí relace

$$f_2(1, 2) = f_1(1)f_1(2) + C_2(1, 2) . \quad (175)$$

Jinými slovy, v případě, že neexistuje korelace mezi dvěma částicemi, to jest  $C_2(1, 2) = 0$ , pak dané částice jsou statisticky nezávislé a tudíž pravděpodobnost, že najdeme 1 částici v určitém bodě fázového prostoru a 2 částici v dalším bodě fázového prostoru, reprezentovanou funkcí  $f_2(1, 2)$ , je dána součinem pravděpodobnosti  $f_1(1)f_1(2)$ . Jestliže budeme pokračovat dále, dostaneme vstah

$$(f_1, f_2, \dots, f_N) \rightarrow (f_1, C_2, C_3, \dots, C_N) . \quad (176)$$

kde opakováním předchozí iterace dostaneme

$$\begin{aligned} f_2(1, 2) &= f_1(1)f_1(2) + C_2(1, 2) , \\ f_3(1, 2, 3) &= f_2(1, 2)f_1(3) + f_2(1, 3)f_1(2) + f_2(2, 3)f_1(1) + C_3(1, 2, 3) = \\ &= f_1(1)f_1(2)f_1(3) + \sum_{P(1,2,3)} f_1(1)C_2(2, 3) + C_3(1, 2, 3) \end{aligned} \quad (177)$$

Pomocí těchto pojmů můžeme přistoupit k definování tzv. Vlasovovy limity, kdy předpokládáme, že  $\Phi_0/k_B T \ll 1$  a zároveň předpokládáme dalekodosahové interakce, kdy zjevně i dosah daných interakcí je velký, což nám říká, že  $r_0$  je velké a tedy  $n_0 r_0^3 \gg 1$ . Jinými slovy řečeno, Vlasovova limita odpovídá případu

$$\alpha = \frac{\Phi_0}{k_B T} \ll 1, \quad \gamma^{-1} = n_0 r_0^3 \gg 1. \quad (178)$$

Je užitečné zavést parametr malosti  $\epsilon \ll 1$  s tím, že definujeme Vlasovovu limitu následujícím způsobem

$$\alpha \rightarrow \epsilon \alpha, \quad \gamma^{-1} \rightarrow \frac{1}{\epsilon} \gamma^{-1}. \quad (179)$$

Zjevně také máme  $\alpha/\gamma = \mathcal{O}(1)$ . V případě, kdy  $k_B T \gg \Phi_0$  můžeme očekávat, že korelace mezi částicemi v tekutině jsou malé. Matematicky můžeme toto vyjádřit tím, že vložíme faktor  $\epsilon$  ke každé korelační funkci. Explicitně máme

$$\begin{aligned} f_2 &= f_1 f_1 + \epsilon C_2, \\ f_3 &= f_1 f_1 f_1 + \epsilon \sum_P f_1 C_2 + \epsilon^2 C_3 \end{aligned} \quad (180)$$

kde předpokládáme, že tyto rozdělovací funkce jsou bezrozměrné a tedy  $f_s = F_s$ . Pak dostáváme

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial}{\partial t} + \hat{\kappa}_1 \right) F_1 &= \frac{\alpha}{\gamma} \hat{I}_1 [F_1(1)F_2(2) + \epsilon C_2(1, 2)], \\ \left( \frac{\partial}{\partial t} + \hat{\kappa}_2 - \epsilon \alpha \hat{O}_{12} \right) [F_1(1)F_2(2) + \epsilon C_2(1, 2)] &= \\ &= \frac{\alpha}{\gamma} \hat{I}_2 [F_1(1)F_1(2)F_1(3) + \epsilon F_1(1)C_2(2, 3) + \\ &\quad + \epsilon F_1(2)C_2(3, 1) + \epsilon F_1(3)C_2(1, 2)] \\ &\quad \vdots \end{aligned} \quad (181)$$

kde

$$\hat{\kappa}_s \equiv \sum_{i=1}^s \hat{K}_i. \quad (182)$$

Porovnáním členů stejného řádu v  $\epsilon$  a když se omezíme na členy nejnižších řádů, dostaneme

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \hat{\kappa}_1\right) F_1(1) &= \frac{\alpha}{\gamma} \hat{I}_1 F_1(1) F_1(2) , \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} + \hat{\kappa}_2\right) F_1(1) F_2(2) &= \frac{\alpha}{\gamma} \hat{I}_2 F_1(1) F_1(2) F_1(3) , \\ &\vdots \end{aligned} \tag{183}$$

Ukazuje se, že obecně dostaneme  $N$  rovnic pro jednu neznámou funkci  $F_1$ , což nám logicky dává, že  $N$  těchto rovnic musí být redundantní. Dá se ukázat, že tomu je skutečně tak, neboli jestliže  $F_1(1)$  splňuje první rovnici v (181), pak všechny další rovnice jsou také splněny. Nyní přepíšeme tedy tuto první rovnici do plného tvaru s přesně danými rozměry fyzikálních veličin

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) F_1(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = -\frac{n_0}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \int d^3 \mathbf{x}' d^3 \mathbf{v}' \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') F_1(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) F_1(\mathbf{x}', \mathbf{v}', t) . \tag{184}$$

kde jsme použili rovnost  $F_1(\mathbf{p}) d^3 \mathbf{p} = F_1(\mathbf{v}) d^3 \mathbf{v}$ . Tato rovnice se nazývá *Vlasovovou rovnicí*. Abychom získali větší fyzikální náhled na tuto rovnici, je vhodné použít hustoty počtu částic

$$n(\mathbf{x}', t) = N \int d^3 \mathbf{p}' f_1(\mathbf{x}', \mathbf{p}', t) = \frac{N}{V} \int d^3 \mathbf{v} F_1(\mathbf{x}', \mathbf{v}, t) . \tag{185}$$

Poté zavedeme střední hodnotu síly

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}, t) = \int d^3 \mathbf{x}' n(\mathbf{x}', t) \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') . \tag{186}$$

což můžeme fyzikálně interpretovat jako sílu od všech částic v daném objemu působící na částici v bodě  $\mathbf{x}$ . Pak integrál v (184) má tvar

$$\begin{aligned} &\frac{n_0}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \int d^3 \mathbf{x}' d^3 \mathbf{v}' \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') F_1(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) F_1(\mathbf{x}', \mathbf{v}', t) = \\ &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} F_1(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \cdot \int d^3 \mathbf{x}' n(\mathbf{x}', t) \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \\ &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} F_1(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \cdot \mathbf{G}(\mathbf{x}, t) . \end{aligned} \tag{187}$$

Vidíme tedy, že Vlasovovu rovnici (184) můžeme přepsat do tvaru

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\mathbf{G}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \right) F_1(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = 0. \quad (188)$$

Fyzikální interpretace této rovnice je následující. Časový vývoj  $F_1(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$  je ovlivněn silovým polem, které je dány okamžitým působením všech částic v dané tekutině. Je velice zajímavé, že Vlasovova rovnice (184) je velmi podobná jednočásticové *Liouvillově rovnici*, která odpovídá částici pohybující se ve vnějším silovém poli. Hamiltonian pro tuto částici má tvar

$$H = \frac{p^2}{2m} + \Phi(\mathbf{x}) \quad (189)$$

kde  $\tilde{\mathbf{G}} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \Phi(\mathbf{x})$  je vnější síla. Liouvillova rovnice pro tento systém má tvar

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\} &= \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial F}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} = \\ &= \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} + \frac{\partial F}{\partial \mathbf{p}} \cdot \tilde{\mathbf{G}} = 0 \end{aligned} \quad (190)$$

Je lehké dokázat, že řešení jednočásticové Liouvillovy rovnice má tvar

$$F = F\left[\frac{p^2}{2m} + \Phi(\mathbf{x})\right] \quad (191)$$

neboť

$$\frac{\partial F}{\partial \mathbf{p}} = F' \frac{\mathbf{p}}{m}, \quad \frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}} = -F' \tilde{\mathbf{G}}, \quad (192)$$

kde samozřejmě je nutné poznamenat, že  $\Phi$  je potenciál vnější síly, zatím co v případě Vlasovovy rovnice máme

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{x}} = -n_0 \int F(\mathbf{x}', \mathbf{v}', t) \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d^3 \mathbf{x}' d^3 \mathbf{v}' \quad (193)$$

což znamená, že je možné určit  $\Phi$  za předpokladu, že známe funkci  $F$ .

### 2.3 Prigoginova analýza

V této kapitole stručně nastíníme princip poruchové techniky řešení Liouvillovy rovnice. Jednou z důležitých aplikací této metody je odvození Boltzmanovy rovnice.

### 2.3.1 Poruchy Liouvillova operátoru

Uvažujme opět Liouvillov operátor

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} = \hat{L}_N f_N \quad (194)$$

kde

$$\hat{L}_N = \{H, \} \quad (195)$$

nebo explicitně

$$\hat{L}_N = \sum_l \hat{K}_l + \sum_{i < j} \sum_{i < j}^N \hat{O}_{ij} . \quad (196)$$

Nyní přepíšeme tento operátor do tvaru

$$\hat{L}_N = \hat{L}_0 + \delta\hat{L} , \quad (197)$$

kde  $\hat{L}_0$  je kinetický operátor volných částic a kde

$$\delta\hat{L} = \sum_{i < j} \sum_{i < j} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i} \Phi_{ij} \cdot \left[ \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j} \right] \quad (198)$$

je porucha  $\hat{L}_0$ .

Nyní se zaměříme na kinetický operátor volných částic, které jsou obsaženy v krychli o velikosti  $L$ . V tomto případě máme

$$\hat{K} = - \sum_{s=1}^N \frac{\mathbf{p}_s}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_s} , 0 \leq x_s^{(i)} \leq L . \quad (199)$$

Vlastní vektory daného operátoru jsou

$$\begin{aligned} \hat{K} \psi_{(\mathbf{k})} &= -i\omega_{(\mathbf{k})} \psi_{(\mathbf{k})} , \\ \psi_{(\mathbf{k})} &= L^{-3N/2} \exp[i \sum \mathbf{k}_l \mathbf{x}_l] \equiv |(\mathbf{k})\rangle \\ \omega_{(\mathbf{k})} &= \sum \mathbf{k}_l \cdot \mathbf{v}_l \end{aligned} \quad (200)$$

kde  $\mathbf{v}_l = \frac{\mathbf{p}_l}{m}$  a kde  $(\mathbf{k}) = (\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_N)$ . Poznamenejme, že periodické hraniční podmínky dávají

$$\mathbf{k}_i = \frac{2\pi}{L} \mathbf{n}_i , \quad (201)$$

kde  $\mathbf{n}_i$  jsou celá čísla. Nyní použijeme tuto bázi pro hledání řešení obecné Liouvillový rovnice, kde předpokládáme řešení ve tvaru

$$f_N(1, \dots, N) = \sum_{(\mathbf{k})} a_{(\mathbf{k})}(\mathbf{p}^N, t) \psi_{(\mathbf{k})}(\mathbf{x}^N) e^{-i\omega_{(\mathbf{k})}t}. \quad (202)$$

Nyní ukážeme, že toto řešení může být přepsáno do vhodného tvaru, kde koeficienty mají speciální fyzikální význam. Tento přepis má tvar

$$\begin{aligned} f_N = & \frac{1}{V^N} \left[ a_0(\mathbf{p}_j | \dots, t) + \frac{1}{\bar{V}} \sum_{j=1}^N \sum_{\mathbf{k}_j} a_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}^N, t) e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{x}_j} e^{-i\omega_j t} + \right. \\ & + \frac{1}{\bar{V}^2} \sum_j \sum_n \sum_{\mathbf{k}'_j} \sum_{\mathbf{k}_l, \mathbf{k}_j + \mathbf{k}_l \neq 0} \times \times a_{\mathbf{k}_j, \mathbf{k}_l}(\mathbf{p}_j, \mathbf{p}_l | 0, t) e^{i[\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{x}_j + \mathbf{k}_l \cdot \mathbf{x}_l]} e^{-i\omega_j t} + \\ & \left. + \frac{1}{\bar{V}} \sum_j \sum_l \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}}(\mathbf{p}_j, \mathbf{p}_l | 0, t) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l)} + \dots \right] \end{aligned} \quad (203)$$

kde čárka nad sumačním symbolem znamená, že provádíme sumu, kde dané vektory jsou nenulové, v opačném případě by tento koeficient měl být započítán do předchozího řádu. Koeficienty v tomto rozvoji mají tu důležitou vlastnost, že  $a_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n}(\mathbf{p}^N, t)$  obsahují  $n$  nenulových vektorů, například  $a_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}$  obsahuje 2 nenulové vektory. Dále, hybnosti, na kterých závisí daná Fourierova komponenta, se rozdělují na dvě skupiny, rozdělené vertikální čarou. Vektory na levo od čárky odpovídají částicím, jejichž vlnové vektory jsou nenulové a napravo od čárky jsou uvedené všechny ostatní hybnosti. Konečně, objem  $\bar{V}$  je definován jako  $\bar{V} \equiv V/(2\pi)^3$ .

Členy v druhé sumě, kdy  $\mathbf{k}_j + \mathbf{k}_l = 0$  jsou důležité při tzv. limitě homogenity, která nám říká, že systém je homogenní, pak  $f_N$  je invariantní při posunu souřadnic

$$(\mathbf{x}_l) \rightarrow (\mathbf{x}'_l) = (\mathbf{x}_l + \mathbf{b}) \quad (204)$$

pak dostáváme

$$\sum_{(\mathbf{k})} a_{(\mathbf{k})} e^{i \sum \mathbf{k}_l \cdot \mathbf{x}_l} = \sum_{(\mathbf{k})} a_{(\mathbf{k})} e^{i \sum \mathbf{k}_l \cdot \mathbf{x}_l} e^{i \mathbf{b} \cdot \sum \mathbf{k}_l} \quad (205)$$

Tato rovnost je splněna pro všechna  $\mathbf{k}_l$  a  $\mathbf{x}_l$  za předpokladu, že  $\sum \mathbf{k}_l = 0$  pro všechny  $(\mathbf{k})$  sequence.



Nyní můžeme přistoupit k interpretaci koeficientů, které vystupují v (203)  
Nejdříve provedeme integraci přes  $\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_N$

$$\begin{aligned} & \int d^3\mathbf{x}_1 \dots d^3\mathbf{x}_N f_N = \\ & = \frac{1}{V^N} \int d^3\mathbf{x}_1 \dots d^3\mathbf{x}_N \left[ a_0(\mathbf{p}^N, t) + \frac{1}{V} \sum_j \sum_{\mathbf{k}_j} a_1(\mathbf{k}_j, \mathbf{p}^N, t) e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{x}_j} e^{-i\omega_j t} + \dots \right] \end{aligned} \quad (206)$$

Nyní v limitě velkého objemu můžeme nahradit sumu integrací

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int d^3\mathbf{k} \quad (207)$$

což také dává

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} d^3\mathbf{x} = \delta(\mathbf{k}) . \quad (208)$$

což nám říká, že druhý člen v (206) dává  $\delta(\mathbf{k})$  při integraci přes  $d\mathbf{x}^N$ . Pak dostáváme, že všechny další příspěvky při integraci dávají nulu Jinými slovy

$$\int d^3\mathbf{x}_1 \dots d^3\mathbf{x}_N f_N = a_0(\mathbf{p}^N, t) \quad (209)$$

kde z definice normování funkce  $f_N$  platí

$$\int d^3\mathbf{p}_1 \dots d^3\mathbf{p}_N a_0(\mathbf{p}^N, t) = 1 . \quad (210)$$

Vidíme tedy, že  $a_0(\mathbf{p}^N, t)$  je distribuční funkce rozložení hybnosti pro  $N$  částic.

Hustota počtu částic je dána integrálem

$$n_1(\mathbf{x}) = n_1(\mathbf{x}_l) = N \int f_N d^3\mathbf{p}_1 \dots d^3\mathbf{p}_N d^3\mathbf{x}_1 d^3\mathbf{x}_2 \dots d^3\mathbf{x}_{l-1} d^3\mathbf{x}_{l+1} \dots d^3\mathbf{x}_N \quad (211)$$

zatím co distribuce dvojic je dána integrálem

$$\begin{aligned} n_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= n_2(\mathbf{x}_s, \mathbf{x}_n) = \\ &= \frac{N(N-1)}{2} \int f_N d^3\mathbf{p}_1 \dots d^3\mathbf{p}_N d^3\mathbf{x}_1 \dots d^3\mathbf{x}_{s-1} d^3\mathbf{x}_{s+1} \dots d^3\mathbf{x}_{n-1} d^3\mathbf{x}_{n+1} \dots d^3\mathbf{x}_N . \end{aligned} \quad (212)$$

Nyní určíme hodnoty těchto funkcí pro  $f_N$  danou (203)

$$n_1(\mathbf{x}_s) = \frac{N}{V^N} \int d^3\mathbf{p}_1 \dots d^3\mathbf{p}_N \prod_{i \neq s} d^3\mathbf{x}_i \cdot \left[ a_0(\mathbf{p}, t) + \frac{1}{V} \sum_{j=1}^N \sum_{\mathbf{k}_j} a_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}_j | 0, t) e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{x}_j - i\omega_j t} + \dots \right] \quad (213)$$

V limitě velkého integrálu při integraci přes  $\mathbf{x}_i, i \neq s$  dostáváme  $\delta(\mathbf{k}_i)$ , což nám dává  $\mathbf{k}_i = 0, i \neq s$ . Pak tedy všechny členy, pro které platí, že  $j \neq s$  jsou rovny nule, protože z definice máme  $a_1(0, \mathbf{p}, t) = 0$ . Dále, každý člen v sumě, která obsahuje  $a_2(\mathbf{k}_j, \mathbf{k}_l, \mathbf{p}, t)$  obsahují buď  $\delta(\mathbf{k}_j)$  nebo  $\delta(\mathbf{k}_l)$  jako důsledek integrace  $\int d^3\mathbf{x}_j$  nebo  $\int d^3\mathbf{x}_l$ . Pak dostáváme, že všechny členy v dané sumě jsou rovny nule díky tomu, že z definice máme

$$a_2(0, \mathbf{k}_l) = a_2(\mathbf{k}_j, 0) = 0. \quad (214)$$

Stejně argumenty můžeme použít pro členy vyšších řádu v rozvoji (203). Výsledkem dostaneme

$$n_1(\mathbf{x}) = \frac{N}{V} \left[ 1 + \int \prod_{i=1}^N d^3\mathbf{p}_i a_{\mathbf{k}}(\mathbf{p} | \dots, t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} d^3\mathbf{k} \right]. \quad (215)$$

V limitě prostorové homogenity dostaneme  $\mathbf{k} = 0, a_{\mathbf{k}}(0, \mathbf{p}, t) = 0$  a tedy

$$n_1 = \frac{N}{V}. \quad (216)$$

### 2.3.2 Pohybové rovnice pro koeficienty $a_{(\mathbf{k})}$

Nyní přejdeme k odvození pohybové rovnice pro koeficienty  $\mathbf{a}_{(\mathbf{k})}$ . Jestliže vložíme (203) do Liouvillových rovnic dostaneme

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{(\mathbf{k}')} a_{(\mathbf{k}')} e^{-i\omega_{(\mathbf{k}')} t} |(\mathbf{k}')\rangle = (\hat{L}_0 + \delta\hat{L}) \sum_{(\mathbf{k}')} \langle(\mathbf{k}')| a_{(\mathbf{k}')} e^{-i\omega_{(\mathbf{k}')} t}. \quad (217)$$

Provedeme derivaci vzhledem k času na levé straně rovnice, poté ji vynásobíme zleva vektorem  $\langle(\mathbf{k})|$  a s užitím ortogonality vektorů dostaneme pohybovou

rovnici pro  $a$  ve tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t} a_{(\mathbf{k})} = \sum_{(\mathbf{k}')} e^{i\omega_{(\mathbf{k})}t} \langle (\mathbf{k}) | \delta \hat{L} | (\mathbf{k}') \rangle e^{i\omega_{(\mathbf{k}')}t} a_{(\mathbf{k}')} . \quad (218)$$

Další analýza této rovnice probíhá podobným způsobem jako v případě poruchového počtu v kvantové mechanice. Ukazuje se, že různé členy v poruchovém rozvoji mohou být reprezentovány graficky podobným způsobem, jako Feynmanovy diagramy. Tato analýza je ovšem velice složitá a nemůže být obsažena v této přednášce, pro podrobnější popis odkazují na I. Prigogine, *Non-equilibrium Statistical Mechanics*.

## 2.4 Bogoliubova Hypotéza

### 2.4.1 Intervaly času a délky

V této kapitole se budeme stručně zabívat Bogoliubovou hypotézou týkající se dosažení rovnováhy v původním nerovnovážném plynu. Týká se plynu v uzavřeném prostoru a definuje tři časové intervaly, které označíme jako  $\tau_1, \tau_2$  a  $\tau_3$ . V časovém intervalu  $\tau_1$  se dvě molekuly nacházejí ve vzájemném interakčním dosahu. Interval  $\tau_2$  je střední doba mezi dvěma interakcemi. Konečně  $\tau_3$  je průměrná doba, za kterou molekula překoná vzdálenost mezi dvěma stěnami, které vymezují oblast, kde se daný plyn nachází. Je zřejmé, že mezi těmito časovými úseky existuje následující souvislost

$$\tau_1 \ll \tau_2 \ll \tau_3 . \quad (219)$$

K těmto časovým intervalům můžeme přiřadit odpovídající charakteristické délky  $\lambda_1, \lambda_2$  and  $\lambda_3$ , kde  $\lambda_1$  je charakteristická vzdálenost interakce,  $\lambda_2$  je střední volná dráha a  $\lambda_3$  je charakteristická rozměr oblasti, v které se nacházejí částice. Například pro plyn, kde střední molekulová rychlost je  $300 \text{ms}^{-1}$  a za standartních podmínek, kdy je plyn obsažen v nádobě o charakteristickém rozměru  $\lambda_3 = 3 \text{cm}$  dostáváme

	$\lambda_1$	$\lambda_2$	$\lambda_3$
cm	$3 \times 10^{-8}$	$3 \times 10^{-5}$	3
	$\tau_1$	$\tau_2$	$\tau_3$
sec	$10^{-12}$	$10^{-9}$	$10^{-4}$

Bogoljubova hypotéza se týká funkcionální závislosti  $N$ –částicové distribuční funkce  $f_N(1, \dots, N)$ , která je závislá na relaxaci plynu směrem k rovnovážné konfiguraci. Tyto časové intervaly jsou definované následující tabulkou

$0 < t < \tau_1$	počáteční fáze
$\tau_1 < t \leq \tau_2$	Kinetická fáze
$\tau_2 < t$	Hydrodynamická fáze

V počátečním intervalu nenexistuje žádná srážky mezi molekulami a tedy počáteční nerovnovážný stav není ovlivněn žádnou silou, která popisuje interakci mezi srážkami. To znamená, že v počáteční fázi musíme použít celou,  $N$ –částicovou distribuční funkci pro popsání stavu plynu.

Během *kinetické fáze* dochází ke kolizím molekul a tedy existuje tendence k rovnovážné konfiguraci. V tomto případě je vyslovena hypotéza, že všechny  $s$ –částicové distribuční funkce jsou funkcionály jednočásticové distribuční funkce

$$f_s = f_s(1, \dots, s, f_1) \quad (220)$$

kde explicitní časová závislost vystupuje zcela v  $f_1$ . Například, v případě, že molekuly jsou statisticky nezávislé, dostáváme

$$f_s = \prod_{i=1}^s f_1(i) . \quad (221)$$

Konečně, během *hydrodynamické fáze* se předpokládá, že distribuční funkce je funkcí hydrodynamických veličin  $n, \mathbf{u}$  a  $T$ , kde  $n$  je hustota částic,  $\mathbf{u}$  je makroskopická rychlost tekutiny a  $T$  je její teplota.

Jinými slovy máme následující popis. Jak systém relaxuje z původní nerovnovážného stavu do konečného rovnovážného stavu, dochází k redukci v úrovni popisu, která je odpovídající pro danou tekutinu. Na počátku je nutné znát obecnou  $N$ –částicovou distribuční funkci. V rovnovážném stavu je dostatečné znát  $n, \mathbf{u}$  a  $T$ .

## 2.4.2 Bogoljubovy distribuční funkce

Uvažujme opět distribuční funkci

$$F_s = V^s f_s . \quad (222)$$

Poznamenejme, že pro homogenní tekutinu,  $F_s$  je funkcí pouze hybností. Jesliže přepíšeme  $s$ -tou Bogoljubovu rovnice pomocí této distribuce, dostaneme

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \hat{L}_s\right) F_s - \frac{N-s}{V} \sum_{i=1}^s \int \hat{O}_{i,s+1} F_{s+1} d(s+1) = 0 \quad (223)$$

kde  $\hat{O}_{ij}$  má tvar

$$\hat{O}_{ij} = -\mathbf{G}_{ij} \left( \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j} \right), \quad (224)$$

a kde, což je fundamentální fakt,  $\hat{L}_s$  má tvar

$$\hat{L}_s = - \sum_{l=1}^s \hat{K}_l + \sum_{i<j}^s \hat{O}_{ij}, \quad (225)$$

kde  $\hat{O}_{ij}$  specifikuje interakci mezi  $s$ - částicemi. Je důležité, že uvažujeme částice, které spolu interagují, že se nejedná o volné částice. Je zřejmé, že tento interakční člen také implicitně zahrnuje srážky mezi částicemi, což můžeme modelovat pomocí interakčního členu velice krátkého dosahu, byť matematický popis je velice obtížný.

Termodynamickou limitu dostaneme, kdy  $N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty$  a současně platí

$$\lim_{N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty} \frac{N-s}{V} = \lim \frac{N}{V} = \frac{1}{v}, \quad (226)$$

kde  $v$  je *specifický objem*, který definujeme jako objem, jenž zaujímá jedna částice. V této limitě rovnice (223) má tvar

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \hat{L}_s\right) F_s - \frac{1}{v} \sum_{i=1}^s \int \hat{O}_{i,s+1} F_{s+1} d(s+1) = 0 \quad (227)$$

Nyní předpokládáme, že rozdělovací funkce má tvar

$$F_s = F_s(1, \dots, s, F_1). \quad (228)$$

Protože explicitní časová závislost je zahrnuta do funkce  $F_1$ , dostaneme

$$\frac{\partial F_s}{\partial t} = \frac{\delta F_s}{\delta F_1} \frac{\partial F_1}{\partial t}. \quad (229)$$

Jako jednoduchý příklad uvažujme statisticky nezávislé molekuly, kdy máme

$$F_s = \prod_{l=1}^s F_l(s) \quad (230)$$

kde (228) dává

$$\frac{\partial F_s}{\partial t} = \sum_k \frac{\partial F_1(k)}{\partial t} \prod_{l \neq k} F_1(l) . \quad (231)$$

Je důležité poznamenat, že Bogoljubova analýza je relevantní pro řídké plyny, kdy specifický objem  $v$  je velký. Pak je možné použít následující rozvoj

$$F_s(1, \dots, s; F_1) = F_s^0 + \frac{1}{v} F_s^{(1)} + \frac{1}{v^2} F_s^{(2)} + \dots . \quad (232)$$

Jestliže vložíme tento rozvoj do  $BY_1$  rovnice (227) dostaneme

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\partial}{\partial t} - \hat{L}_1 \right) F_1 - \frac{1}{v} \int d2 \hat{O}_{12} F_2 = 0 \Rightarrow \\ & \frac{\partial F_1}{\partial t} = -\frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial F_1}{\partial \mathbf{x}_1} + \frac{1}{v} \hat{I}_{12} \left[ F_2^{(0)} + \frac{1}{v} F_2^{(1)} + \dots \right] \equiv \\ & \equiv A^{(0)} + \frac{1}{v} A^{(1)} + \dots, \hat{I}_{12} \equiv \int d2 \hat{O}_{12} \end{aligned} \quad (233)$$

Vložením tohoto výsledku do parciální časové derivace  $F_s$  dostaneme

$$\begin{aligned} & \frac{\partial F_s}{\partial t} = \frac{\delta F_s}{\delta F_1} \frac{\partial F_1}{\partial t} = \\ & = \frac{\delta F_s^{(0)}}{\delta F_1} A^{(0)} + \frac{1}{v} \left( \frac{\delta F_s^{(1)}}{\delta F_1} A^{(0)} + \frac{\delta F_s^{(0)}}{\delta F_1} A^{(1)} \right) + \dots \end{aligned} \quad (234)$$

Nyní se vrátíme k rovnici (227) kde použijeme rozvoj (232)

$$\frac{\partial F_s}{\partial t} = \hat{L}_s \left[ F_s^{(0)} + \frac{1}{v} F_s^{(1)} + \dots \right] + \frac{1}{v} \sum_{i=1}^s \hat{I}_{i,s+1} \left[ F_{s+1}^{(0)} + \frac{1}{v} F_{s+1}^{(1)} + \dots \right] \quad (235)$$

Jestliže nyní vložíme (234) do (235) a porovnáme členy stejného řádu v  $1/v$  dostaneme

$$\begin{aligned} \frac{\delta F_s^{(0)}}{\delta F_1} A^{(0)} &= \hat{L}_s F_s^{(0)} , \\ \frac{\delta F_s^{(1)}}{\delta F_1} A^{(0)} + \frac{\delta F_s^{(0)}}{\delta F_1} A^{(0)} &= \hat{L}_s F_s^{(1)} + \sum_{i=1}^s \hat{I}_{i,s+1} F_{s+1}^{(0)} , \\ &\vdots \end{aligned} \tag{236}$$

Tyto rovnice určují posloupnost  $\{F_s^{(n)}\}$  v rozvoji (232).

Nyní uvažujme opět rovnici pro  $F_1$

$$\frac{\partial F_1}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial F_1}{\partial \mathbf{x}_1} = \frac{1}{v} \int d^2 \hat{O}_{12} F_2^{(0)} . \tag{237}$$

Nyní, když najdeme  $F_2^{(0)}(F_1)$ , dostaneme uzavřenou rovnici pro  $F_1$ . Z rovnice (236) dostaneme

$$\hat{D}^{(0)} F_2^{(0)} = \hat{L}_2 F_2^{(0)} , \tag{238}$$

kde

$$\hat{D}^{(0)} F_2^{(0)} = \frac{\delta F_2^{(0)}}{\delta F_1} A^{(0)} . \tag{239}$$

Musíme vyřešit tuto rovnici pro  $F_2^{(0)}(F_1)$  s odpovídajícími hraničními podmínkami, které zvolíme takovým způsobem, že považujeme částice nekorelované v dostatečně vzdálené minulosti.

Uvažujme nyní Liouvillův operátor  $\hat{L}_s$  pro izolovaný systém  $s$ - částic

$$\frac{\partial F_s}{\partial t} = \{H_s, F_s\} \equiv \hat{L}_s F_s . \tag{240}$$

která má řešení

$$F_s(t) = e^{t\hat{L}_s} F_s(0) \equiv \hat{\Delta}_t^{(s)} F_s(0) \tag{241}$$

kde operátor  $\hat{\Delta}_t^{(s)}$  má následující vlastnosti

$$\begin{aligned} \hat{\Delta}_0 &= 1 , \\ \hat{\Delta}_{t_1} \hat{\Delta}_{t_2} &= \hat{\Delta}_{t_1+t_2} , \\ \frac{\partial \hat{\Delta}_t}{\partial t} &= \hat{L}_s \hat{\Delta}_t . \end{aligned} \tag{242}$$

Protože operátor  $\hat{\Delta}_t$  propaguje s-částicový systém v čase, je přirozené s jeho pomocí vyjádřit hraniční podmínku, že pro dostatečně dlouhý čas v minulosti částice nebyly korelované

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \hat{\Delta}_t^{(s)} F_s(1, \dots, s; F_1) = \lim_{t \rightarrow -\infty} \hat{\Delta}_t^{(s)} \prod_{k=1}^s F_1(k). \quad (243)$$

Poznamenejme, že tyto hraniční podmínky platí pro všechny jednočásticové rozdělovací funkce. Pak také platí pro jednočásticovou rozdělovací funkci, která vznikne z  $F_1$  propagací pomocí jednočásticového operátoru  $F_1'(k) = \lim_{t \rightarrow \infty} \hat{\Delta}_t^{(1)} F_1(k)$ . Vložení této podmínky do předchozího definice hraniční podmínky, dostaneme

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \hat{\Delta}_t^{(s)} F_s(1, \dots, s; F_1) = \lim_{t \rightarrow -\infty} \hat{\Delta}_t^{(s)} \prod_{k=1}^s \hat{\Delta}_{-t}^{(1)} F_1(k). \quad (244)$$

#### **Poznámka: Rozdělovací funkce ideálního plynu**

Uvažujme ideální plyn, který je dán  $N$  neinteragujícími molekulami a jenž je obsažen v krychli o velikosti hrany  $L$ . V tomto případě Hamiltonián je dán ve tvaru

$$H = \sum_{s=1}^k \frac{p_s^2}{2m}, \quad 0 \leq x_s^{(i)} \leq L \quad (245)$$

Víme, že časový vývoj rozdělovací funkce má formu

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \{H, f\} = - \sum_s \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_s} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}_s} = - \sum_s \mathbf{v}_s \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}_s} \equiv \hat{\Lambda}_s f_s. \quad (246)$$

První krok je najít vlastní hodnoty operátoru  $f$ . Tyto hodnoty byly nalezeny v předchozím výkladu a tedy

$$\psi_{(\mathbf{k})} = \frac{1}{L^{3N/2}} \exp(-i \sum_s \mathbf{k}_s \cdot \mathbf{x}_s) \quad (247)$$

s vlastní hodnotou  $\omega_{(\mathbf{k})} = i \sum_{s=1}^N \mathbf{v}_s \cdot \mathbf{k}_s$ . Pak je zřejmé, že obecná forma  $N$ -částicové rozdělovací funkce funkce má tvar

$$f(\mathbf{x}^N, \mathbf{p}^N) = \sum_{(\mathbf{k})} D_{(\mathbf{k})}(\mathbf{p}^N) \psi_{(\mathbf{k})}(\mathbf{x}^N) e^{\omega_{(\mathbf{k})} t} e^{i\omega_{(\mathbf{k})} t}. \quad (248)$$



neboť

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

$$i \sum_{(\mathbf{k})} D_{(\mathbf{k})}(\mathbf{p}^N) (\omega_{(\mathbf{k})} - \sum_{s=1}^N \mathbf{v}_s \cdot \mathbf{k}_s) D_{(\mathbf{k})}(\mathbf{p}^N) \psi_{(\mathbf{k})}(\mathbf{x}^N) e^{i\omega_{(\mathbf{k})}t} e^{i\omega_{(\mathbf{k})}t} = 0 .$$
(249)

Abychom určili konečný tvar rozdělovací funkce  $f_0$ , musíme určit koeficienty  $D_{(\mathbf{k})}(\mathbf{p}^N)$ . Označíme si hodnotu rozdělovací funkce  $f$  v čase  $t = 0$  jako  $f_0$

$$f_0(\mathbf{x}^N, \mathbf{p}^N) = \sum_{(\mathbf{k})} D_{(\mathbf{k})}(\mathbf{p}^N) \psi_{(\mathbf{k})}(\mathbf{x}^N) .$$
(250)

Protože vektory  $\psi_{(\mathbf{k})}$  jsou ortogonální, dostáváme

$$D_{(\mathbf{k})}(\mathbf{p}) = \frac{1}{L^{3N/2}} \int \prod_{i=1}^N d^3 \mathbf{x}_i [\exp(i \sum_s \mathbf{k}_s \cdot \mathbf{x}_s)] D_0(\mathbf{x}^N, \mathbf{p}^N)$$
(251)

Tedy ze známe počáteční hodnoty distribuční funkce dostaneme obecné řešení Liouvillovovy rovnice pro ideální plyn ve tvaru

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{L^{3N/2}} \sum_{(\mathbf{k})} D_{(\mathbf{k})}(\mathbf{p}^N) e^{-\sum_s \mathbf{k}_s \cdot (\mathbf{x}_s - \frac{\mathbf{p}_s t}{m})}$$
(252)

Vidíme tedy, že operátor  $\hat{\Delta}_t^{(1)} F_1(k)$  můžeme interpretovat jako jednočásticovou

funkci v čase  $t$  jenž má tvar  $F_1(\mathbf{x} - \frac{\mathbf{p}}{m}t, \mathbf{p})$  a tedy dostaneme

$$\begin{aligned}
& \lim_{t \rightarrow -\infty} \hat{\Delta}_t^{(s)} \prod_{k=1}^s \hat{\Delta}_{-t}^{(1)} F_1(k) = \\
& = \lim_{t \rightarrow -\infty} \hat{\Delta}_t^{(s)} \prod_{k=1}^s F_1(\mathbf{x}_k + \frac{\mathbf{p}_k}{m}t, \mathbf{p}_k) = \\
& = \lim_{t \rightarrow -\infty} \prod_{k=1}^s F_1[\hat{\Delta}_t^{(s)}(\mathbf{x}_k + \frac{\mathbf{p}_k}{m}t), \hat{\Delta}_t^{(s)} \mathbf{p}_k] = \\
& = \prod_{k=1}^s F_1(\mathbf{x}_k^{(s)}, \mathbf{p}_k^{(s)}) ,
\end{aligned} \tag{253}$$

kde  $\mathbf{x}_k^{(s)}, m\mathbf{p}_k^{(s)}$  jsou hodnoty fázových proměnných  $k$ -té částice v čase  $t = -\infty$ , kdy jsme prováděli časový vývoj v opačném směru od proměnných  $\mathbf{x}_k + \frac{\mathbf{p}_k}{m}t$  a  $\mathbf{p}_k$ .

Uvažujme opět tento výraz

$$\hat{D}^{(0)} F_s^{(0)}(1, \dots, s; F_1) = \frac{\delta F_s^{(0)}}{\delta F_1} A^{(0)} = \frac{\delta F_s^{(0)}}{\delta F_1} \hat{L}_1 F_1 , \tag{254}$$

kde jsme využili toho, že  $A_0$  je rovno  $\hat{L}_1 F_1$ . Naším cílem je najít vhodnou reprezentaci funkcionální derivace, která vystupuje v předchozím vstahu. Protože tento vstah platí pro všechna  $F_1$ , musí platit i pro  $\hat{\Delta}_t^{(1)} F_1$ . Pak tedy můžeme psát

$$\hat{D}^{(0)} F_s^{(0)}(1, \dots, s; \hat{\Delta}_t^{(1)} F_1) = \frac{\delta F_s^{(0)}}{\delta[\hat{\Delta}_t^{(1)} F_1]} \hat{L}_1 \hat{\Delta}_t^{(1)} F_1 , \tag{255}$$

což, s pomocí rovnice  $\frac{\partial \hat{\Delta}_t}{\partial t} = \hat{L} \hat{\Delta}_t$  můžeme přepsat do tvaru

$$\hat{D}^{(0)} F_s^{(0)}(1, \dots, s; \hat{\Delta}_t^{(1)} F_1) = \frac{\delta F_s^{(0)}}{\delta[\hat{\Delta}_t^{(1)} F_1]} \frac{\partial \hat{\Delta}_t^{(1)} F_1}{\partial t} \tag{256}$$

která nám říká

$$\hat{D}^{(0)} F_s^{(0)}(1, \dots, s; \hat{\Delta}_t^{(1)} F_1) = \frac{\partial}{\partial t} F_s^{(0)}[1, \dots, s; \hat{\Delta}_t^{(1)} F_1] . \tag{257}$$

Pak dostáváme z rovnice, kterou jsme odvodili výše

$$\begin{aligned} \hat{D}^{(0)} F_s^{(0)} &= \hat{L}_s F_s^{(0)} \Rightarrow \\ \frac{\partial}{\partial t} F_s^{(0)}[1, \dots, s; \hat{\Delta}_t^{(1)} F_1] &= \hat{L}_s F_s^{(0)}[1, \dots, s; \hat{\Delta}_t^{(1)} F_1] \end{aligned} \quad (258)$$

Z definice operátoru  $\Delta_t^{(s)}$  dostáváme, že řešení předchozí rovnice má tvar

$$F_s^{(0)}[1, \dots, s; \hat{\Delta}_t^{(1)} F_1(0)] = \hat{\Delta}_t^{(s)} F_s^{(0)}[1, \dots, s; F_1(0)] \quad (259)$$

kde  $F_1(0)$  je jednočasticová distribuční funkce vypočítaná v čase  $t = 0$ . Pak je zřejmé, že můžeme psát

$$F_s^{(0)}[1, \dots, s; F_1(0)] = \hat{\Delta}_t^{(s)} F_s^{(0)}[1, \dots, s; \hat{\Delta}_{-t}^{(1)} F_1(0)] \quad (260)$$

Protože levá strana je nezávislá na čase, můžeme přistoupit k limitě  $t \rightarrow -\infty$  a s použitím hraničních podmínek daných nahoře dostaneme

$$\begin{aligned} F_s^{(0)}[1, \dots, s; F_1(0)] &= \lim_{t \rightarrow -\infty} \hat{\Delta}_t^{(s)} F_s^{(0)}[1, \dots, s; \hat{\Delta}_{-t}^{(1)} F_1(0)] = \\ &= \prod_{k=1}^s F_1[\mathbf{x}_k^{(s)}, \mathbf{p}_k^{(s)}] \end{aligned} \quad (261)$$

Vidíme tedy, že  $F_s^{(0)}$  je dané jednočasticovými distribucemi s fázovými proměnnými  $\mathbf{x}^{(s)}, \mathbf{p}^{(s)}$ , odpovídající polohám a impulsům částic, jenž se propagují zpět v čase a jejíž evoluce je dána  $s$ -časticovým Hamiltoniánem. Podrobněji toto uvidíme, když budeme studovat pohybovou rovnici pro souřadnici či impuls  $s$ -té částice

$$\frac{d\mathbf{x}_s}{dt} = \{\mathbf{x}_s, H\}, \quad \frac{d\mathbf{p}_s}{dt} = \{\mathbf{p}_s, H\}. \quad (262)$$

Pak hodnota proměnné v čase  $t + \Delta t$  může být určena Taylorovým rozvojem

$$\mathbf{x}_s(t + \Delta t) = \mathbf{x}_s(t) + \frac{d\mathbf{x}_s}{dt}(t)\Delta t + \frac{1}{2!} \frac{d^2\mathbf{x}_s}{dt^2}(\Delta t)^2 + \dots$$

S použitím pohybové rovnice dostaneme

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}_s}{dt} &= \{\mathbf{x}_s, H\}, \\ \frac{d^2\mathbf{x}_s}{dt^2} &= \left\{ \frac{d\mathbf{x}_s}{dt}, H \right\} = \{ \{\mathbf{x}_s, H\}, H \} \\ &\vdots \end{aligned} \quad (263)$$

a tedy

$$\begin{aligned}
\mathbf{x}_s(t + \Delta t) &= \mathbf{x}_s(t) + \frac{d\mathbf{x}_s}{dt}(t)\Delta t + \frac{1}{2!} \frac{d^2\mathbf{x}_s}{dt^2}(\Delta t)^2 + \dots = \\
&= \mathbf{x}_s(t) + \{\mathbf{x}_s(t), H\} \Delta t + \frac{1}{2!} \{\{\mathbf{x}_s, H\}, H\} (\Delta t)^2 + \dots = \\
&= \mathbf{x}_s(t) - \{H, \mathbf{x}_s(t)\} \Delta t + \frac{1}{2} \{H, \{H, \mathbf{x}_s(t)\}\} (\Delta t)^2 + \dots \\
&= \mathbf{x}_s(t) + \sum_{n=1}^{\infty} \overbrace{\{\mathbf{x}_s, \{H, \dots, \{H, \mathbf{x}_s\}\}\}}^n (-\Delta t)^n
\end{aligned} \tag{264}$$

a tedy vidíme, že  $\hat{\Lambda}$  skutečně propaguje  $\mathbf{x}_s$  zpět v čase.

### 2.4.3 Odvození Boltzmanovy rovnice

Poslední krok k odvození kinematické rovnice je nalezení operátoru  $\hat{L}_2$

$$\hat{L}_2 = -\hat{K}_1 - \hat{K}_2 + \hat{O}_{12} \equiv -\hat{\kappa}_2 + \hat{O}_{12} \tag{265}$$

kde

$$\hat{\kappa}_2 = \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1} + \frac{\mathbf{p}_2}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_2} , \tag{266}$$

S pomocí této rovnice dostaneme

$$\hat{O}_{12}F_2^{(0)} = \hat{\kappa}_2F_2^{(0)} + \hat{L}_2F_2^{(0)} . \tag{267}$$

Naším úkolem je najít formu výrazů, které se vyskytují na pravé straně předchozí rovnice.

S použitím předchozího výrazu máme

$$\hat{L}_2F_s^{(0)} = \hat{D}^{(0)}F_2^{(0)} = \frac{\delta F_2^{(0)}}{\delta F_1} A^{(0)} , \tag{268}$$

kde

$$A^{(0)} = -\frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial F_1}{\partial \mathbf{x}_1} . \tag{269}$$

Nyní použijeme explicitní formu  $F_2^{(0)}$

$$F_2^{(0)} = F_1[\mathbf{x}_1^{(2)}, \mathbf{p}_1^{(2)}]F_1[\mathbf{x}_2^{(2)}, \mathbf{p}_2^{(2)}] \tag{270}$$

a tedy dostaneme

$$\begin{aligned}\hat{L}_2^{(0)} F_2^{(0)} &= -\frac{\mathbf{p}_1^{(2)}}{m} F_1[\mathbf{x}_2^{(2)}, \mathbf{p}_2^{(2)}] \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1^{(2)}} F_1[\mathbf{x}_1^{(2)}, \mathbf{p}_1^{(2)}] - \\ &- \frac{\mathbf{p}_2^{(2)}}{m} F_1[\mathbf{x}_1^{(2)}, \mathbf{p}_1^{(2)}] \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_2^{(2)}} F_1[\mathbf{x}_2^{(2)}, \mathbf{p}_2^{(2)}] .\end{aligned}\quad (271)$$

Naším cílem je najít alternativní tvar operátoru  $\hat{k}_2$ . Zavedeme proměnné  $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \rightarrow (\mathbf{r}, \mathbf{x}_1, \mathbf{g}, \mathbf{p}_1)$  kde

$$\begin{aligned}\mathbf{r} &= \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \mathbf{g} = \frac{\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1}{m} \\ \mathbf{p}_2 &= m\mathbf{g} + \mathbf{p}_1, \mathbf{x}_2 = \mathbf{r} + \mathbf{x}_1 ,\end{aligned}\quad (272)$$

dostaneme

$$\begin{aligned}\hat{k}_2 &= \left(\mathbf{g} + \frac{\mathbf{p}_1}{m}\right) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \left(-\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1}\right) = \\ &= \mathbf{g} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1} = \hat{K}_B + \hat{K}_1 ,\end{aligned}\quad (273)$$

kde  $\hat{K}_B = \mathbf{g} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$ . S použitím těchto výrazů dostaneme

$$\begin{aligned}\frac{\partial F_1}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial F_1}{\partial \mathbf{x}_1} &= \frac{1}{v} \int d\mathbf{p}_2 d\mathbf{x}_2 \hat{O}_{12} F_2^{(0)} \Rightarrow \\ \frac{\partial F_1}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial F_1}{\partial \mathbf{x}_1} &= \frac{1}{v} \int d^3 \mathbf{p}_2 d^3 \mathbf{x}_2 (\hat{k}_2 F_2^{(0)} + \hat{L}_2 F_2^{(0)}) = \\ &= \frac{1}{v} \int d^3 \mathbf{x}_2 d^3 \mathbf{p}_2 \hat{K}_B F_2^{(0)} + \frac{1}{v} \int d^3 \mathbf{x}_2 d^3 \mathbf{p}_2 (\hat{L}_2 - \hat{K}_1) F_2^{(0)} .\end{aligned}\quad (274)$$

Jestliže budeme předpokládat, že  $F_2$  je homogenní v interakční oblasti, pak není funkcí  $\mathbf{x}_1$  a  $\mathbf{x}_2$  a tedy druhý člen v předchozím výrazu na pravé straně je roven nule. Pak srážkový člen má tvar

$$\int d^3 \mathbf{p}_2 d^3 \mathbf{x}_2 \hat{K}_B^{(0)} = \int d^3 \mathbf{x}_2 d^3 \mathbf{p}_2 \mathbf{g} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} [F_1(\mathbf{p}_1^{(2)}) F_1(\mathbf{p}_2^{(2)})] \quad (275)$$

kde  $\mathbf{g}$  je relativní rychlost. Naším cílem je vypočítat tento prostorový integrál, který vystupuje v předchozím výrazu. Poznamenejme, že pro pevné  $\mathbf{x}_1$  máme  $\mathbf{x}_2 = \mathbf{r}$ . Zavedeme válcové souřadnice, kdy osa válce souhlasí se směrem vektoru  $\mathbf{g}$ . Dále zavedeme projekci vektoru  $\mathbf{r}$  na tuto osu

$$z \equiv \frac{\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}}{g} . \quad (276)$$

Pak dostaneme

$$d^3\mathbf{r} = bd\phi bdbz \quad (277)$$

a

$$\mathbf{g} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} = g \frac{\partial}{\partial z} . \quad (278)$$

kde jsme využili faktu, že vektor  $\mathbf{r}$  může být rozložen do směru rovnoběžného s  $\mathbf{g}$  a kolmého na  $\mathbf{g}$  a skalární součin tohoto vektoru s  $\mathbf{g}$  je roven nule. Pak dostaneme

$$\begin{aligned} & \int d^3\mathbf{p}_2 d^3\mathbf{r} \mathbf{g} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} [F_1(\mathbf{p}_1^{(2)}) F_1(\mathbf{p}_2^{(2)})] = \\ & = \int d^3\mathbf{p}_2 \int d\phi bdb \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{d}{dz} [F_1(\mathbf{p}_1^{(2)}) F_1(\mathbf{p}_2^{(2)})] = \\ & \int d^3\mathbf{p}_2 \int d\phi bdb [F_1(\mathbf{p}_1^{(2)}) F_1(\mathbf{p}_2^{(2)}) (\infty) - F_1(\mathbf{p}_1^{(2)}) F_1(\mathbf{p}_2^{(2)}) (-\infty)] . \end{aligned} \quad (279)$$

kde  $z = \infty$  odpovídá oblasti po kolizi. Poznamenejme, že  $\mathbf{p}_1^{(2)}, \mathbf{p}_2^{(2)}$  jsou souřadnice určené pomocí Hamiltoniánu popisující interakci dvou částic, kdy uvažujeme jejich evoluci zpět v čase, tedy před kolizí. To jest tyto částice musí mít takové hybnosti, které označíme jako  $\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2$ , které vedou po interakci částic k jejich hybnostem  $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ .

Oblast  $z = -\infty$  odpovídá oblasti před srážkou. Předpokládejme, že v této oblasti máme částice s danými  $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$  a chceme vědět, jaké hodnoty tyto částice mají, jestliže je budeme sledovat s pomocí dvoučásticového Hamiltoniánu zpět do minulosti. Protože v této oblasti nedochází k žádným interakcím, pohybují se jako volné částice a tedy jejich impulsy jsou stejné  $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ . Pak tedy dostaneme

$$F_1(\mathbf{p}_1^{(2)}) F_1(\mathbf{p}_2^{(2)}) (\infty) - F_1(\mathbf{p}_1^{(2)}) F_1(\mathbf{p}_2^{(2)}) (-\infty) = F_1(\mathbf{p}'_1) F_1(\mathbf{p}'_2) - F_1(\mathbf{p}_1) F_1(\mathbf{p}_2) . \quad (280)$$

Jestliže použijeme tento vztah dostaneme

$$\frac{\partial F_1}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial F_1}{\partial \mathbf{x}_1} = \frac{2\pi}{v} \int d^3 \mathbf{p}_2 \int bdbg[F_1(\mathbf{p}'_1)F_1(\mathbf{p}'_2) - F_1(\mathbf{p}_1)F_1(\mathbf{p}_2)] \quad (281)$$

což je slavná Boltzmanova rovnice. Jejím dalšímu studiu a analýze srážkového členu budeme věnovat následující kapitoly.

### Alternativní odvození Boltzmanovy rovnice

Nyní podáme více fyzikálně intuitivní odvození Boltzmanovy rovnice. Dříve, než k tomuto přistoupíme, provedeme alternativní odvození BBGKY hierarchie. Začneme s 1-násobnou distribuční funkcí

$$F_1(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = N \int \prod_{i=2}^N d^3 \mathbf{x}_i d^3 \mathbf{p}_i f_N(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{p}, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N, t) . \quad (282)$$

kde jsme zavedli faktor  $N$ . Je důležité vědět, že budeme od počátku předpokládat, že všechny částice jsou identické a že tedy funkce  $F_N$  je úplně symetrickou funkcí vzhledem ke svým argumentům, a tedy tím, že jsme vybrali první částici pro definici jednočásticové distribuční není myšleno, že by tato částice byla něčím speciální. Poznamenejme, že díky faktoru  $N$  v definici  $F_1$  dostáváme

$$\begin{aligned} & \int d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{p} F_1(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = \\ & = N \int \prod_{i=1}^N d^3 \mathbf{x}_i d^3 \mathbf{p}_i f_N(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{p}, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N, t) = N . \end{aligned} \quad (283)$$

Funkce  $F_1$  hraje fundamentální roli v kinetické teorii, protože její znalost je ve velkém množství případů dostačující pro popis stavu systému. Například, průměrná hustota částic je

$$n(\mathbf{x}, t) = \int d^3 \mathbf{p} F_1(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) \quad (284)$$

a průměrná rychlost je dána výrazem

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \int d^3 \mathbf{p} \frac{\mathbf{p}}{m} F_1(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) . \quad (285)$$

Vidíme tedy, že je užitečné znát pohybovou rovnici pro funkci  $F_1$ . Z její definice dostáváme

$$\frac{\partial F_1}{\partial t} = N \int \prod_{i=2}^N d^3 \mathbf{x}_i d^3 \mathbf{p}_i \frac{\partial f}{\partial t} = N \int \prod_{i=2}^N d^3 \mathbf{x}_i d^3 \mathbf{p}_i \{H, f\} . \quad (286)$$

Uvažujme nyní Hamiltonian  $H$  pro  $N$  částic, kde vezmeme do úvahy možnost, že se dané částice pohybují ve vnějším poli

$$H = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N p_i^2 + \sum_{i=1}^N V(\mathbf{x}_i) + \sum_{i=1}^N \sum_{i < j} \Phi_{ij}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) . \quad (287)$$

Pak dostáváme

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_1}{\partial t} &= N \prod_{i=2}^N d^3 \mathbf{x}_i d^3 \mathbf{p}_i \times \\ &\times \left[ - \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i}{2m} \cdot \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{x}_i} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial V}{\partial \mathbf{x}_i} \cdot \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{p}_i} + \sum_{i=1}^N \sum_{k < l} \frac{\partial \Phi_{kl}(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_l)}{\partial \mathbf{x}_i} \cdot \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{p}_i} \right] \end{aligned} \quad (288)$$

Pravou stranu můžeme zjednodušit integrací po částech pro proměnné  $\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_i, i = 2, \dots, N$  a zanedbáním hraničních příspěvků. Pak dostáváme

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_1}{\partial t} &= N \int \prod_{i=2}^N d^3 \mathbf{x}_i d^3 \mathbf{p}_i \left[ - \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\partial V}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{k=2}^N \frac{\partial \Phi_{1k}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k)}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{p}} \right] = \{H_1, f_1\} + \\ &\quad + N \int \prod_{i=2}^N d^3 \mathbf{x}_i d^3 \mathbf{p}_i \sum_{k=2}^N \frac{\partial \Phi_{1k}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k)}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{p}} \end{aligned} \quad (289)$$

kde

$$H_1 = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{x}) . \quad (290)$$



Vidíme, že jednočásticový Hamiltonián závisí na potenciálu vnějšího pole, zatím co nezávisí na interakci s ostatními částicemi, která je popsána posledním členem na pravé straně. Můžeme také přepsat rovnici pro  $F_1$  do tvaru

$$\frac{\partial F_1}{\partial t} = \{H_1, F_1\} + \left( \frac{\partial F_1}{\partial t} \right)_{sraz}, \quad (291)$$

kde druhý člen je znám jako *srážkový člen*, který, jestliže vezmeme do úvahy, že všechny částice jsou identické a tedy můžeme nahradit sumu  $\sum_{k=2}^N$  faktorem  $(N-1)$  ve tvaru

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial F_1}{\partial t} \right)_{sraz} &= N(N-1) \int d^3 \mathbf{x}_2 d^3 \mathbf{p}_2 \frac{\partial \Phi_{12}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2)}{\partial \mathbf{x}} \cdot \\ &\cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \int \prod_{i=3}^N d^3 \mathbf{x}_i d^3 \mathbf{p}_i f_N(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{p}, \mathbf{p}_2, \dots, t) \end{aligned} \quad (292)$$

což, když zavedeme 2-násobnou distribuční funkci ve tvaru

$$F_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, t) = N(N-1) \int \prod_{i=3}^N d^3 \mathbf{x}_i d^3 \mathbf{p}_i f_N(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, t) \cdot \quad (293)$$

dostáváme kolizní integrál ve tvaru

$$\left( \frac{\partial F_1}{\partial t} \right)_{sraz} = \int d^3 \mathbf{x}_2 d^3 \mathbf{p}_2 \frac{\partial \Phi_{12}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2)}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\partial F_2}{\partial \mathbf{p}}. \quad (294)$$

Srážkový člen nemění rozdělení částic v prostoru, která je daná výrazem  $n(\mathbf{x}, t) = \int d^3 \mathbf{p} F_1(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ . To je možné vidět z pohybové rovnice pro  $F_1$ , když provedeme integraci přes  $\mathbf{p}$

$$\begin{aligned} \int d^3 \mathbf{p} \left( \frac{\partial F_1}{\partial t} - \{H_1, F_1\} \right) &= \int d^3 \mathbf{p} \left( \frac{\partial F_1}{\partial t} \right)_{sraz} \Rightarrow \\ \frac{\partial n(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \int d^3 \mathbf{p} \{H_1, F_1\} &= 0 \end{aligned} \quad (295)$$

protože

$$\begin{aligned}
& \int d^3 \mathbf{p} \left( \frac{\partial F_1}{\partial t} \right)_{sraz} = \\
& = N(N-1) \int d^3 \mathbf{x}_2 d^3 \mathbf{p}_2 \frac{\partial \Phi_{12}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2)}{\partial \mathbf{x}} \prod_{i=3}^N d^3 \mathbf{x}_i d^3 \mathbf{p}_i \times \\
& \times [f_N(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2, \dots, \infty, \mathbf{p}_2, \dots, t) - f_N(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2, \dots, -\infty, \mathbf{p}_2, \dots, t)] = 0 .
\end{aligned} \tag{296}$$

Na druhou stranu, když bychom uvažovali střední hodnotu rychlosti, tak zjistíme, že srážkové členy hrají důležitou roli pro její změnu.

Závěr této analýzy je ten, že když chceme znát pohybovou rovnici pro  $F_1$ , měli bychom mít pohybovou rovnici pro  $F_2$ . Tuto můžeme opět získat pomocí integrace Liouvillových rovnic s tím, že nyní vystupuje srážkový člen s  $F_3$ . Obecně, jestliže zavedeme  $s$ -násobné distribuční funkce

$$F_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_s, t) = \frac{N!}{(N-s)!} \int \prod_{i=s+1}^N d^3 \mathbf{x}_i d^3 \mathbf{p}_i f(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N, t) \tag{297}$$

tak zjistíme, že splňují rovnice

$$\frac{\partial F_s}{\partial t} = \{H_s, F_s\} + \sum_{i=1}^s \int d^3 \mathbf{x}_{s+1} d^3 \mathbf{p}_{s+1} \frac{\partial \Phi_{i,i+1}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{s+1})}{\partial \mathbf{x}_i} \cdot \frac{\partial F_{s+1}}{\partial \mathbf{p}_i} , \tag{298}$$

kde

$$H_s = \sum_{i=1}^s \left( \frac{p_i^2}{2m} + V(\mathbf{x}_i) \right) + \sum_{i < j \leq s} \Phi_{ij}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) . \tag{299}$$

Tímto způsobem jsme odvodili BBGKY hierarchii.

**Domácí úkol** Dokažte předchozí rovnici

Nyní přistoupíme, pomocí těchto rovnic, k alternativnímu odvození Boltzmanovy rovnice. Jako v předchozím případě budeme předpokládat, že když jsou částice dostatečně vzdálené, jejich distribuční funkce nejsou korelované. Pojem dostatečně vzdálené znamená, že vzdálenost mezi nimi je mnohem větší než atomový rozměr  $d$ , který určuje dosah interakce mezi jednotlivými molekulami. Pak očekáváme

$$F_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \rightarrow F_1(\mathbf{x}_1, \mathbf{p}_1) F_1(\mathbf{x}_2, \mathbf{p}_2) , \text{ pro } |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \gg d . \tag{300}$$

Na druhou stranu když napíšeme rovnice pro  $F_1$  a  $F_2$

$$\begin{aligned}
& \left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1} \right) F_1(\mathbf{x}_1, \mathbf{p}_1, t) = \int d^3 \mathbf{x}_2 d^3 \mathbf{p}_2 \frac{\partial \Phi_{12}(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|)}{\partial \mathbf{x}_1} \cdot \frac{\partial F_2}{\partial \mathbf{p}_1}, \\
& \left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1} + \frac{\mathbf{p}_2}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_2} - \frac{1}{2} \frac{\partial \Phi_{12}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)}{\mathbf{x}_1} \left[ \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} \right] \right) F_2 = \\
& = \int d^3 \mathbf{x}_3 d^3 \mathbf{p}_3 \left( \frac{\partial \Phi_{12}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_3)}{\partial \mathbf{x}_1} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} + \frac{\partial \Phi_{12}(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3)}{\partial \mathbf{x}_2} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} \right) F_3.
\end{aligned} \tag{301}$$

tak vidíme, že pravá strana rovnice dává významný příspěvek pouze na vzdálenostech, kdy  $\frac{\partial \Phi_{12}(|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1|)}{\partial \mathbf{x}_1}$  je nenulové, což je pouze na vzdálenostech  $\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1 < d$ . Z toho důvodu je nutné porozumět  $F_2$  na vzdálenostech, kdy částice jsou blízko sebe.

Abychom tomuto porozuměli, musíme provést určité kvalitativní úvahy založené na dimensionální analýze. Členy, které závisí na atomovém potenciálu, budou nutně mít co do činění s veličinou  $\tau_{coll}$ , která charakterizuje časový interval, po který jsou částice ve vzájemné interakci

$$\frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \sim \frac{p}{d} \sim \frac{1}{\tau_{coll}}, \tag{302}$$

kde  $p$  je charakteristická hybnost, která určuje škálu hybnosti v dané interakci. Podle Bogoljubovy hypotézy toto je nekratší časová škála, která se vyskytuje v daném problému. Z toho důvodu dostáváme, že  $\frac{1}{\tau_{coll}}$  je nejvýznamnější parametr, který vyustupuje v daných rovnicích a tedy  $\frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{x}}$  dávají nejvýznamnější příspěvky a určují, jak rychle se mění distribuční funkce.

Vidíme, že funkce  $F_1$  je speciální, protože její pohybová rovnice neobsahuje kolizní člen (člen úměrný  $\frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}$ ) na levé straně rovnice, na rozdíl od ostatních rovnic pro funkce vyšších řádů  $F_n$ , například  $F_2$  má kolizní členy jak na pravé, tak na levé straně. Je důležité, že pro řídké plyny, příspěvek na pravé straně je mnohem menší než na levé straně. Abychom tomu porozuměli, musíme porovnat  $F_3$  vzhledem k  $F_2$ . Předně víme, že

$$\begin{aligned}
\int d^3 \mathbf{x}_3 d^3 \mathbf{p}_3 F_3 &= \frac{N!}{(N-3)!} \int d^3 \mathbf{x}_3 d^3 \mathbf{p}_3 \prod_{i=4}^N d^3 \mathbf{x}_i d^3 \mathbf{p}_i f_N = \\
&= \frac{N!}{(N-3)!} \int \prod_{i=3}^N d^3 \mathbf{x}_i d^3 \mathbf{p}_i f_N = (N-2)F_2 \approx NF_2.
\end{aligned} \tag{303}$$

Na druhou stranu na pravé straně rovnice (301) neprovádíme integraci přes celý prostor, protože máme pouze nenulový příspěvek úměrný  $d^3$ . To znamená, že srážkový člen na pravé straně (301) je potlačen faktorem

$$Nd^3/V \quad (304)$$

kde  $V$  je objem, v kterém se daný systém nachází. Pro plyn za běžných podmínek dostáváme, že tento faktor je přibližně roven  $10^{-3} - 10^{-4}$ . Pak můžeme ukončit hierarchii rovnic, tím, že řekneme, že pravá strana rovnice pro  $F_2$  je rovna nule

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_1} + \frac{\mathbf{p}_2}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_2} - \frac{1}{2} \frac{\partial \Phi_{12}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)}{\partial \mathbf{x}_1} \cdot \left[ \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} \right] \right) F_2 \approx 0 . \quad (305)$$

Vidíme tedy, že  $F_2$  se mění na vzdálenostech  $d$  a časové škále  $\tau_{coll}$ . Poznamenejme, že tuto rovnici můžeme přepsat do tvaru

$$\frac{\partial F_2}{\partial t} + \{F_2, H_2\} = 0 \quad (306)$$

což můžeme interpretovat jak pohybovou rovnici pro systém dvou těles, kde  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$  splňují odpovídající Hamiltonovy rovnice.

Na druhou stranu z rovnice pro  $F_1$  stejným argumentem dostáváme, že pravá strana rovnice je potlačena faktorem  $\frac{Nd^3}{V}$ , a tedy  $F_1$  se mění na větší časové škále  $\tau$ .

Nechť studujeme změnu  $F_2$  podrobněji. Je zřejmé, že pouze relativní pohyb bude ovlivněn srážkovým členem. Z toho důvodu je vhodné přejít do souřadnicové soustavy hmotného středu

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) , \mathbf{r} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 . \quad (307)$$

a

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 , \mathbf{p} = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) . \quad (308)$$

a uvažovat  $F_2 = F_2(\mathbf{R}, \mathbf{r}, \mathbf{P}, \mathbf{p}, t)$ . Distribuční funkce se bude pomalu měnit s  $\mathbf{R}$  a  $\mathbf{P}$ , podobně, jak  $F_1$  závisí na souřadnici a hybnosti. Na druhou stranu předpokládáme silnou závislost na  $\mathbf{r}$  a  $\mathbf{p}$ , které se mění za časový interval  $\tau_{coll}$ . Jinými slovy můžeme předpokládat, že  $F_2$  dosáhne své ustálené hodnoty, která pak ovlivňuje dynamiku  $F_1$ . Jinými slovy, zanedbáme časový

vývoj funkce  $F_2$ ,  $\frac{\partial F_2}{\partial t} = 0$  a nahradíme rovnice pro  $F_2$  následující rovnovážnou rovnicí

$$\left( \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) F_2 \approx 0 . \quad (309)$$

Pak pro srážkový člen dostáváme

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial F_1}{\partial t} \right)_{sraz} &= \int d^3 \mathbf{x}_2 d^3 \mathbf{p}_2 \frac{\partial \Phi_{12}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{\partial \mathbf{x}_1} \cdot \frac{\partial F_2}{\partial \mathbf{p}_1} = \\ &= \int d^3 \mathbf{x}_2 d^3 \mathbf{p}_2 \frac{\partial \Phi_{12}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \cdot \left[ \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} \right] F_2 = \\ &= \frac{1}{m} \int_{|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1| \leq d} d^3 \mathbf{x}_2 d^3 \mathbf{p}_2 (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \cdot \frac{\partial F_2}{\partial \mathbf{r}} \end{aligned} \quad (310)$$

kde v prvním kroku jsme zavedli dodatečný člen  $\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2}$ , který dává nulový příspěvek při integraci po částech a ve třetím kroku jsme použili (309) s tím, že  $\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2}$ . Také jsme explicitně vyznačili oblast, přes kterou je integrováno, kde nenulový příspěvek je pouze v oblasti  $|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1| \leq d$ .

Abychom pokročili dále, musíme uvažovat následující situaci. Necht'  $t_0$  je časový okamžik před srážkou dvou částic, kdy částice se nacházejí ve velké vzdálenosti od sebe,  $|\mathbf{x}_{10} - \mathbf{x}_{20}| \gg d$ , kde  $\mathbf{x}_{10} \equiv \mathbf{x}_1(t_0)$ ,  $\mathbf{x}_{20} \equiv \mathbf{x}_2(t_0)$ . Statistická nezávislost částic znamená, že v tomto časovém okamžiku dvoučásticová funkce je dána součinem dvou jednočásticových funkcí, to jest

$$F_2(t, \mathbf{x}_{10}, \mathbf{x}_{20}, \mathbf{p}_{10}, \mathbf{p}_{20}, t_0) = F_1(\mathbf{x}_{10}, \mathbf{p}_{20}, t_0) F_1(\mathbf{x}_{20}, \mathbf{p}_{20}, t_2) . \quad (311)$$

pak ale skutečnost, že  $F_2$  splňuje rovnici

$$\frac{d}{dt} F_2(t, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \frac{\partial F_2}{\partial t} + \{F_2, H_2\} = 0 \quad (312)$$

říká, že můžeme provést integraci této rovnice přes časový interval  $t_0$  do  $t$  a dostaneme

$$F_2(t, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = F_1(t_0, \mathbf{x}_{10}, \mathbf{p}_{10}) F_2(t_0, \mathbf{x}_{20}, \mathbf{p}_{20}) , \quad (313)$$

kde musíme porozumět počátečním hodnotám  $(\mathbf{x}_{10}, \mathbf{p}_{10})$  a  $(\mathbf{x}_{20}, \mathbf{p}_{20})$  jako hodnoty souřadnic a hybností, které musí mít částice v čase  $t_0$ , aby v čase  $t$  měly hodnoty  $\mathbf{x}_1, \mathbf{p}_1$  a  $\mathbf{x}_2, \mathbf{p}_2$ . Jinými slovy souřadnice a hybnosti v čase  $t_0$  jsou

dány souřadnicemi a hybnostmi v čase  $t$ , kdy provedeme zpětnou propagaci v čase pomocí dvoučásticového hamiltoniánu  $H_2$ , přičemž hybnosti  $\mathbf{p}_{10}, \mathbf{p}_{20}$  jsou konstantní během volné propagace částic.

S použitím (313) dostáváme, že srážkový člen má tvar

$$\frac{1}{m} \int_{|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1| \leq d} d^3 \mathbf{x}_2 d^3 \mathbf{p}_2 (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} F_1(t_0, \mathbf{x}_{10}, \mathbf{p}_{10}) F_2(t_0, \mathbf{x}_{20}, \mathbf{p}_{20}) \quad (314)$$

kde všechny proměnné pod derivací  $\mathbf{r}$  závisí na  $\mathbf{r}$ . Toto vyplývá z faktu, že funkce  $F_1$  se mění na vzdálenostech, které jsou mnohem větší než  $d$ , a tedy v prvním přiblížení můžeme uvažovat funkci, která vystupuje ve srážkovém členu, jako nezávislou na souřadnicích, a tedy  $F_1 = F_1(t_0, \mathbf{p}_{10})$ . Poznamenejme ale, že funkce nezávisí na souřadnicích  $\mathbf{x}_{01}, \mathbf{x}_{02}$ , ale závisí na  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ , kde tato závislost vyplývá z faktu, že když máme zadané impulsy  $\mathbf{p}_{10}, \mathbf{p}_{20}$  v čase  $t_0$ , pak se propagují volně do oblasti interakce, kde platí  $|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2| \leq d$ . Dále, z homogenity prostoru vyplývá, že tato funkce může záviset pouze na  $\mathbf{r}$ .

Po těchto úvahách můžeme jednoduše provést integraci ve srážkovém členu (314). Opět zavedeme válcové suřadnice  $z, \rho, \phi$  v prostoru  $\mathbf{r}$  tak, že osa  $z$  je podél  $\mathbf{v}_{sráz} \equiv \frac{1}{m}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)$ . Pak máme  $\mathbf{v}_{sráz} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} = v_{sráz} \frac{\partial}{\partial z}$  a provedeme integraci přes  $z$

$$\left( \frac{\partial F_1}{\partial t} \right)_{sráz} = \int d\rho d\phi d^3 \mathbf{p}_2 F_1(t_0, \mathbf{p}_{10}) F_1(t_0, \mathbf{p}_{20}) \Big|_{z=z_1}^{z_2}, \quad (315)$$

kde  $z_1, z_2$  jsou body před a po srážce a kde je je nutné chápat jako vzdálenosti, které jsou velké ve srovnání s  $d$ , na druhou stranu malé vzhledem ke střední volné dráze molekul. Poznamenejme, že  $\mathbf{p}_{10}, \mathbf{p}_{20}$  jsou počáteční hybnosti v čase  $t_0$ , které v konečném čase mají hybnosti  $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ . Pak dostáváme

$$F_2(z_2) = F_1(\mathbf{x}, \mathbf{p}_1, t) F_1(\mathbf{x}, \mathbf{p}_2, t), \quad F_2(z_1) = F_1(\mathbf{x}, \mathbf{p}_{10}, t) F_1(\mathbf{x}, \mathbf{p}_{20}, t) \quad (316)$$

což nám dává očekávaný výsledek.

## 3 Boltzmanova rovnice

### 3.1 Distribuční funkce v $\mu$ -prostoru

Nyní opět statistický popis  $N$  klasických částic, kde stav systému je reprezentován bodem v  $6N$ -dimensionálním fázovém prostoru  $\Gamma$  a jeho časový

vývoj je reprezentován křivkou v tomto prostoru. Stav tohoto systému může být zobrazen v 6– rozměrném  $\mu$ – prostoru  $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ , kde je reprezentován  $N$  body se souřadnicemi  $(\mathbf{x}_i, \mathbf{v}_i)$  a jeho časový vývoj je popsán pomocí  $N$ -křivek. Distribuční funkce v tomto prostoru je definována jako

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \lim_{\delta V \rightarrow 0^+} \frac{\delta N}{\delta V}, \quad (317)$$

kde  $\delta N$  je počet částic v malém objemovém elementu  $\delta V$   $\mu$ –prostoru v okolí bodu  $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ . Limita  $\delta V \rightarrow 0^+$  znamená, že  $\delta V$  je velmi malý vzhledem k celkovému objemu, ale že je také dostatečně velký tak, že obsahuje uvnitř velké množství částic. Pouze v případě, když tato limita existuje, můžeme přejít od úrovně 1 k úrovni 2.

### 3.2 Bezsrážková Boltzmannova rovnice

Víme, že dynamika  $N$ – částic je popsána Hamiltonovskými rovnicemi. Naše otázka nyní je, zda-li je možné získat rovnici podobné Liouvillové rovnici pro distribuční funkci  $f$  v  $\mu$ – prostoru.

Jestliže každá z  $N$  částic má Hamiltonián  $H = H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$  s  $\mathbf{p} = m\mathbf{u}$ , pak dostáváme

$$m\dot{v}_i = -\frac{\partial H}{\partial x_i}, \quad m\dot{x}_i = \frac{\partial H}{\partial v_i}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (318)$$

a

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \dot{x}_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + \dot{v}_i \frac{\partial f}{\partial v_i} = 0 \quad (319)$$

kde nyní je implicitně daná sumace přes  $i$ . Tato distribuční funkce odpovídá  $N$  ne-interagujících částic pohybujících se ve vnějším potenciálu. Tato rovnice se nazývá bez srážková Boltzmannova rovnice.

Je důležité poznamenat, že jakmile se částice dostanou do blízkého kontaktu tak, že interagují, tento vztah neplatí. Poté potenciální energie každé částice je nejen funkcí souřadnice částice, ale také závisí na vzdálenostech dané částice od ostatních částic. V tomto případě Hamiltonovská formulace v  $\mu$ – není možná, samozřejmě, můžeme použít obecnou formulaci problému v  $\Gamma$ – prostoru.

Neutrální plyny jsou charakteristické tím, že částice interagují pouze na krátké vzdálenosti, jinými slovy pouze, když dojde k jejich srážkám. Je pozoruhodné, že v tomto případě je relativně jednoduché modifikovat Boltzmannovu rovnici takovým způsobem, že efekt kolizí může být dodán na pravou stranu této rovnice.

### 3.3 Základní poznatky z rozptylu částic

Uvažujme dvou částicový hamiltonián

$$H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(r) \quad (320)$$

kde hmotnosti částic jsou  $m_1$  a  $m_2$  a kde  $r = |\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1|$ . Provedeme transformaci do souřadnicové soustavy spojené s hmotným středem

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= \frac{m_1 \mathbf{p}_2 - m_2 \mathbf{p}_1}{m_1 + m_2} = \mu \dot{\mathbf{r}} , \\ \mathbf{r} &= \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1 , \\ \mathbf{P} &= \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 , \\ \mathbf{R} &= \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} , \end{aligned} \quad (321)$$

kde inverzní zobrazení má tvar

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_1 &= \mathbf{P} \frac{m_1}{m_1 + m_2} - \mathbf{p} , \\ \mathbf{p}_2 &= \mathbf{P} \frac{m_2}{m_1 + m_2} + \mathbf{p} , \\ \mathbf{x}_1 &= \mathbf{R} - \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{r} , \\ \mathbf{x}_2 &= \mathbf{R} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{r} . \end{aligned} \quad (322)$$

S pomocí těchto výrazů dostaneme následující hamiltonián

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{P^2}{2M} + V(r) , \quad (323)$$

kde  $\mu$  je redukovaná hmotnost

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (324)$$

a

$$H_{CS} = \frac{P^2}{2M} \quad (325)$$



je kinetická energie hmotného středu. Zbývající část

$$H_{rel} = \frac{p^2}{2\mu} + V(r) \quad (326)$$

je hamiltonián částice hmotnosti  $\mu$  v poli daném potenciálem  $V(r)$ . Protože zjevně hamiltonián nezávisí na  $R$  dostaneme, že združená hybnost  $\mathbf{P}$  se zachovává. Jinými slovy originální úloha se redukuje na problém studia pohybu částice o hmotnosti  $\mu$  v centrálním poli  $V(r)$ . Pro další studium je vhodné zavést sférické souřadnice

$$r_1 = r \sin \theta \cos \phi, r_2 = r \sin \theta \sin \phi, r_3 = r \cos \theta \quad (327)$$

a tedy hamiltonián má tvar

$$H_{red} = \frac{1}{2\mu} p_r^2 + \frac{1}{2\mu r^2 \sin^2 \theta} p_\phi^2 + \frac{1}{2\mu r^2} p_\theta^2 + V(r) . \quad (328)$$

kde  $p_r, p_\phi$  a  $p_\theta$  jsou hybnosti kanonicky sdružené s  $r, \phi$  a  $\theta$ . Protože hamiltonián nezávisí na  $\phi$ , dostaneme, že  $p_\phi = const$  a pro jednoduchost budeme uvažovat případ  $p_\phi = 0$ . Vidíme také, že pohybová rovnice pro  $p_\theta$  má tvar

$$\dot{p}_\theta = \{p_\theta, H_{red}\} = \frac{\cos \theta}{\mu \sin^2 \theta} p_\phi^2 = 0, \quad (329)$$

která, v případě  $p_\phi = 0$  dává  $p_\theta \equiv L$ . Konečně, pohybová rovnice pro  $\theta$  má tvar

$$\dot{\theta} = \{\theta, H_{red}\} = \frac{p_\theta}{\mu r^2} = \frac{L}{\mu r^2} . \quad (330)$$

která může být zintegrována při znalosti  $r = r(t)$ . Pohybová rovnice pro  $r$  a  $p_r$  mohou být získány s pomocí  $H_{rel}$

$$\begin{aligned} \dot{p}_r &= \{p_r, H_{rel}\} = \frac{L^2}{2\mu r^3} - \frac{dV}{dr}, \\ \dot{r} &= \{r, H_{rel}\} = \frac{p_r}{\mu}. \end{aligned} \quad (331)$$

Na druhou stranu víme, že Hamiltonián se zachovává a označíme jeho hodnotu jako  $E$ . Pak můžeme vyjádřit  $p_r$  s jeho pomocí jako

$$p_r = \sqrt{2\mu(E - V) - \frac{L^2}{r^2}}, \quad \dot{r} = \sqrt{\frac{2}{\mu}(E - V) - \frac{L^2}{\mu^2 r^2}} . \quad (332)$$

S použitím poslední rovnice můžeme vyjádřit  $dt$  a vložit do pohybové rovnice pro  $\theta$  a pak dostaneme

$$\theta = \int \frac{L}{\mu r^2} dt = \int \frac{L}{r^2 \sqrt{2(E - V) - \frac{L^2}{r^2}}} . \quad (333)$$

Zajímáme se o neomezené trajektorie, kdy  $V(\infty) = 0$  a kdy  $E > 0$ . Lépe řečeno našim cílem je najít rozptylový úhel. Konkrétně, rozdělíme rozptyl do tří po sobě následujících časových intervalů: před, během a po interakci. V intervalech před a po jsou částice volné a nejsou ve vzájemné interakci. Samozřejmě, tyto pojmy úzce souvisí s vlastnostmi potenciálu  $V(r)$ , konkrétně s parametrem  $r_0$ , který charakterizuje dosah interakce, například u interakcí dlouhého dosahu  $r_0 \rightarrow \infty$ . Pak interval před interakcí odpovídá vzdálenosti, kdy  $r > r_0$ , kdy  $V(r) = 0$ , po interakci označuje interval, kdy  $r > r_0$ . Je vhodné také zavést pojem relativní rychlosti před a po interakci. Předpokládejme, že zvolíme časovou osu takovým způsobem, že interakce proběhne v okolí časového okamžiku  $t = 0$ . Pak definujeme relativní rychlost  $\mathbf{g}$  následujícím způsobem

$$\mathbf{g} = \dot{\mathbf{r}} , \text{ pro } t = \pm\infty . \quad (334)$$

Protože před a po kolizi máme potenciál roven nule, dostaneme ze zákona zachování energie

$$E(r \rightarrow -\infty) = \frac{\mu g^2}{2} = E(r \rightarrow \infty) = \frac{\mu g'^2}{2} \quad (335)$$

což nám říká, že velikost relativní rychlosti se zachovává při srážkách.

V souřadnicové soustavě spojené s hmotným středem zavedeme tzv impaktní parametr  $s$  který je definován jako  $L = \mu g s$ . Impaktní parametr a také vektory relativní rychlosti  $\mathbf{g}$  a  $\mathbf{g}'$  jsou vlastnosti, které se vstahují k asymptotickým stavům systému a které se zachovávají během srážek,

Dále zavedeme vektor  $\mathbf{r}_{min}$ , což je bod odpovídající okamžiku, kdy  $\frac{dr}{dt} = 0$ . Definujeme úhel  $\psi$  jako

$$\phi(r_\infty) - \phi(r_{min}) = \psi = \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{L}{r^2 \sqrt{2\mu(E - V) - \frac{L^2}{r^2}}} dr . \quad (336)$$

Pak rozptylový úhel je definovaný vstahem

$$\theta + 2\psi = \pi . \quad (337)$$

Je užitečné zavést proměnnou  $u = r^{-1}$ . Dále,  $L = \mu g s$  vyjádříme pomocí energie

$$E = \frac{g^2}{2\mu} = \frac{L^2}{2\mu s^2} . \quad (338)$$

S použitím těchto výrazů dostaneme

$$\psi = \int_0^{\bar{u}} \frac{du}{\sqrt{1 - s^2 u^2 - \frac{V}{E}}} , \quad (339)$$

kde

$$\bar{u} = \frac{1}{r_{min}} , 1 - s^2 \bar{u}^2 - \frac{V(\bar{u})}{E} = 0 . \quad (340)$$

Pro potenciál ve tvaru

$$V(r) = Kr^{-N} = ku^N \quad (341)$$

dostáváme

$$\psi = \int_0^{\bar{u}} \frac{sdu}{\sqrt{1 - s^2 u^2 - (Ku^N/E)}} . \quad (342)$$

Je užitečné zavést bezrozměrný inverzní poloměr

$$\beta = su \quad (343)$$

a bezrozměrný impaktní parametr ( $[K] = kgm^{2+N}s^{-2}$ )

$$b \equiv s \left( \frac{E}{K} \right)^{1/N} . \quad (344)$$

a pak dostaneme

$$\psi(b) = \int_0^{\bar{\beta}} \frac{d\beta}{\sqrt{1 - \beta^2 - (\beta/b)^N}} ,$$

$$1 - \bar{\beta}^2 - (\bar{\beta}b)^N = 0 . \quad (345)$$

### 3.3.1 Účinný průřez

Nyní zadefinujeme diferenciální účinný průřez. Uvažujme homogenní tok částic o energii  $E$ , intenzitě  $I$ , které dopadají na rozptylové centrum umístěné v počátku. Počet částic, které jsou rozptýlené do elementu  $d\Omega$  v okolí prostorového úhlu  $\Omega$  je úměrné dopadající intenzitě  $I$  a  $d\Omega$ . Faktor úměrnosti je  $\sigma$ , což je diferenciální účinný průřez. Jinými slovy řešeno, výraz

$$I\sigma(\Omega)d\Omega \quad (346)$$

udává počet částic, které jsou rozptýleny v úhlu  $\Omega, \Omega + d\Omega$  za jednu sekundu. Tento počet je roven počtu částic, které projdou malým elementem válce o průřezu  $dssd\phi$  a tedy dostaneme

$$I\sigma d\Omega = Id\phi s ds . \quad (347)$$

Prostorový úhel je roven  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$  a pak tedy dostaneme

$$\sigma(E, \theta) = \frac{d\phi s ds}{d\Omega} = s(E, \theta) \frac{ds(E, \theta)}{\sin\theta d\theta} . \quad (348)$$

Poznamenejme, že  $s(E, \theta)$  je dán rozptylovým integrálem

$$\psi = \int_0^{\bar{u}} \frac{sdu}{\sqrt{1 - s^2u^2 - (V/E)}} . \quad (349)$$

Zatím co  $\sigma$  určuje počet částic rozptýlených do daného prostorového úhlu, celková účinný průřez

$$\sigma_T = \int_{4\pi} \sigma d\Omega = \pi r_0^2 \quad (350)$$

udává celkový počet částic rozptýlených z původního svazku. Víme, že dosah interakce je dán parametrem  $r_0$ , tak tedy částice, pro které platí, že  $s > r_0$ , nejsou rozptýleny z daného svazku. Jinými slovy řešeno, celkový účinný průřez reprezentuje plochu, která je vložena do cesty nalétávajícímu svazku. Pak pro homogenní svazek, který má čelní plochu  $A > \sigma_T$ , veličina  $A/\sigma_T$  udává poměrný počet částic rozptýlených do všech směrů z daného svazku.

Uvažujme nyní faktor, který je významným prvkem srážkového členu

$$g\sigma \sin\theta d\theta = gs ds . \quad (351)$$

Použijeme-li bezrozměrnou veličinu  $b = s(E/K)^{1/N}$ , dostaneme

$$g\sigma \sin \theta d\theta = gbdb \left(\frac{E}{K}\right)^{-2/N} = (2\mu K)^{\frac{2}{N}} g^{1-\frac{4}{N}} bdb . \quad (352)$$

Vidíme, že případ  $N = 4$  je speciální a říkáme, že molekuly, které interagují pomocí tohoto potenciálu, jsou Maxwellovské molekuly. Pro tyto molekuly je veličina  $g\sigma \sin \theta d\theta$  nezávislá na  $g$ , což má za následek zjednodušení výpočtu linearizované Boltzmanovy rovnice.

**Coulombovský účinný průřez** Vypočítáme nyní účinný průřez pro Coulombovský potenciál

$$V = \frac{K}{r} . \quad (353)$$

Provedeme-li integraci rozptylového úhlu pro  $N = 1$ , dostaneme

$$\psi(b) = \int_0^{\bar{\beta}} \frac{d\beta}{\sqrt{1 - \beta^2 - (\beta/b)}} = -\sin^{-1} \left( \frac{1}{2b\sqrt{1 + \frac{1}{4b^2}}} \right) , \quad (354)$$

s použitím

$$\int \frac{dx}{\sqrt{1 - x^2 - ax}} = \sin^{-1} \left( \frac{x + \frac{1}{2b}}{\sqrt{1 + \frac{1}{4b^2}}} \right) \quad (355)$$

a také to, že  $\bar{\beta}$  je řešením rovnice

$$1 - (\bar{\beta})^2 - \frac{\bar{\beta}}{b} = 0 \Rightarrow \bar{\beta} = -\frac{1}{2b} + \sqrt{1 + \frac{1}{4b^2}} . \quad (356)$$

Pak dostáváme

$$b^2 = \frac{1}{4 \tan^2 \psi} . \quad (357)$$

Zavedeme-li rozptylový úhel  $\theta$  pomocí vztahu  $\psi = \frac{\pi - \theta}{2}$  dostaneme

$$b^2 = \frac{1 \cos^2 \frac{\theta}{2}}{4 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \quad (358)$$

Pak z definice účinného průřezu dostaneme

$$\begin{aligned}\sigma &= \left(\frac{2K}{\mu}\right)^2 \frac{1}{g^4} \frac{b}{\sin \theta} \frac{db}{d\theta} = \\ &= \left(\frac{K}{4E}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} .\end{aligned}\tag{359}$$

což je Rutherfordův účinný průřez pro Coulombovské interakce.

### Účinný průřez pro dvě pevné koule

Uvažujme srážky dvou ideálních koulí o poloměrech  $\sigma_{01}, \sigma_{02}$ . Je jasné, že tyto dvě koule se nemohou srazit, jestliže vzdálenost mezi středy těchto koulí je  $r \geq (\sigma_{01} + \sigma_{02})/2$ . Pak dostame pro účinný průřez

$$\begin{aligned}\sigma_{12} &= \frac{\sigma_{01} + \sigma_{02}}{2} , \\ s &= \sigma_{12} \sin \psi , \\ sds &= \sigma_{12}^2 \sin \psi \cos \psi d\psi = \frac{1}{4} \sigma_{12}^2 \sin \theta d\theta ,\end{aligned}\tag{360}$$

a tedy máme

$$\sigma(\theta) = \frac{\sigma_{12}^2}{4} .\tag{361}$$

Pak tedy dostaneme

$$\sigma_T = 2\pi\sigma_{12}^2 .\tag{362}$$

### Kinematika

Uvažujme srážku dvou částic o hybnostech  $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ . Zákon zachování hybnosti a energie má tvar

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 &= \mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2 , \\ \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} &= \frac{p'^2}{2m_1} + \frac{p'^2}{2m_2} ,\end{aligned}\tag{363}$$

které se znatelně zjednoduší v případě, kdy  $m_1 = m_2$ .

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 &= \mathbf{v}'_1 + \mathbf{v}'_2 , \\ v_1^2 + v_2^2 &= v'^2 + v'^2 .\end{aligned}\tag{364}$$

Budeme řešit tyto rovnice vzhledem k  $\mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2$

$$\begin{aligned}\mathbf{v}'_1 &= \frac{1}{2}(\mathbf{v}_2 + \mathbf{v}_1 + g\vec{\epsilon}) , \\ \mathbf{v}'_2 &= \frac{1}{2}(\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 - g\vec{\epsilon}) ,\end{aligned}\tag{365}$$

kde  $\vec{\epsilon}$  je libovoný jednotkový vektor, který vyjadřuje skutečnost, že máme čtyři rovnice pro šest neznámých komponent vektorů  $\mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2$  a kde  $g$  je velikost vektoru  $\mathbf{g} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$ . Jestliže budeme uvažovat rozdíl předchozích dvou rovnic, dostaneme

$$\mathbf{g}' = \mathbf{g} - 2\vec{\alpha}(\vec{\alpha} \cdot \mathbf{g}) .\tag{366}$$

Ukazuje se, že dvě symetrie, které se vyskytují ve srážkách, hrají důležitou roli v kinetické teorii. Je vhodné mluvit o hybnostech  $(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$  před srážkou, a impulsy po srážce označíme jako  $(\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2)$ . Pak charakterizujeme srážku jako

$$[(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \rightarrow (\mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2)]_s ,\tag{367}$$

kde dolní index  $s$  označuje, že impaktní parameter  $s$  je důležitou veličinou, která charakterizuje srážku. Je zřejmé, že inverzní k této srážce je srážka, kdy konečný stav je  $(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$ . Jinými slovy máme (pro pružné srážky, kdy se zachovává energie)

$$([( \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 ) \rightarrow ( \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2 ) ]_s)^{-1} = [ ( \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2 ) \rightarrow ( \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 ) ] .\tag{368}$$

Druhý typ srážek, které hrají důležitou roli, jsou zpětné srážky. Zpětné srážky jsou takové srážky, kdy konečný stav je  $(-\mathbf{p}_1, -\mathbf{p}_2)$ , kdy  $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$  jsou počáteční hybnosti vstupující do srážky. Opět, pro pružné srážky máme

$$([( \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 ) \rightarrow ( \mathbf{p}'_1, \mathbf{p}'_2 ) ]_s)^R = [ ( -\mathbf{p}'_1, -\mathbf{p}'_2 ) \rightarrow ( -\mathbf{p}_1, -\mathbf{p}_2 ) ] .\tag{369}$$

Je zřejmé, že tyto srážky jsou kinematically ekvivalentní a tedy i jejich účinné průřezy jsou stejné.

### 3.4 Srážky ve zředěném plynu

Uvažujme zředěnou tekutinu, kde celkový objem kapaliny je mnohem menší než objem, jenž zaujímá tato tekutiny

$$na^3 \ll 1 ,\tag{370}$$

kde  $n$  je hustota částic a kde  $a$  je poloměr jedné částice. Budeme uvažovat neutrální částice, kde neexistují síly dalekého dosahu (gravitaci můžeme zanedbat), tedy pak můžeme předpokládat, že k interakci mezi částicemi dochází pouze v okamžiku, kdy dojde k jejich srážce, jinými slovy v okamžiku, kdy vzdálenost mezi částicemi není o mnoho větší než  $d = 2a$ . Částice se pohybují volně mezi dvěma kolizemi, kde průměrný vzdálenost mezi kolizemi je dána střední volnou drahou částice

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}n\pi d^2} \quad (371)$$

Je zřejmé, že ve zředěné tekutině platí  $\lambda \gg d$ . Z toho vyplývá, že binární srážky jsou mnohem častější než srážky tří a více částic, které interagují ve stejný časový okamžik. Je také zřejmé, že srážky indukují změny v rozdělovací funkci  $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ : Například, některá částice s počáteční rychlostí  $\mathbf{v}$  může mít po srážkách jinou rychlost, což znamená, že  $\delta f(\mathbf{v}) < 0$ . Druhá možnost je, že některé částice s jinými počátečními rychlostmi mohou mít rychlost  $\mathbf{v}$  po srážce, což si efektivně můžeme představit, jako zvýšení pravděpodobnosti, že danou částici najdeme s rychlostí  $\mathbf{v}$ . Jinými slovy, máme  $\delta f(\mathbf{v}) > 0$ . Z toho důvodu je možné předpokládat, že časová změna jednočásticové distribuční funkce má tvar

$$\frac{Df}{Dt} d^3x d^3u = -C_{out} + C_{in} , \quad (372)$$

kde  $C_{out}$  je dán příspěvkem od částic, které opustí interval rychlosti v okolí bodu  $\mathbf{v}$  zatím co  $C_{in}$  je dán příspěvkem od částic, které vstoupí do daného intervalu. Je jasné, že pro další studium kolizní Boltzmanovy rovnice musíme dát více podrobnější popis těchto příspěvků.

### Binární srážky

Uvažujme srážku dvou stejně hmotných částic a předpokládejme, že jejich počáteční rychlosti jsou  $\mathbf{v}, \mathbf{v}_1$  a konečné rychlosti jsou  $\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1$ . Poté zákony zachování hybnosti a energie mají tvar

$$\begin{aligned} \mathbf{v} + \mathbf{v}_1 &= \mathbf{v}' + \mathbf{v}'_1 , \\ \frac{1}{2}|\mathbf{v}|^2 + \frac{1}{2}|\mathbf{v}_1|^2 &= \frac{1}{2}|\mathbf{v}'|^2 + \frac{1}{2}|\mathbf{v}'_1|^2 \end{aligned} \quad (373)$$

Dále budeme předpokládat, že interakce mezi částicemi má centrální charakter, relativní rychlost částic po srážce,  $\mathbf{g}' = \mathbf{v}' - \mathbf{v}'_1$  leží v rovině počáteční



relativní rychlosti,  $\mathbf{g} = \mathbf{u} - \mathbf{u}_1$  a počáteční relativní vektor mezi částicemi  $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_1$ .

Máme tedy pět podmínek pro šest neznámých veličin, kterými jsou čárkované vektory. Abychom tedy mohli tyto neznáme veličiny určit, musíme zavést šestou podmínku, která vychází z původu interakce mezi částicemi. Ukážeme, že tato šestá podmínka je dána pomocí *diferenciálním účinným průřezem rozptylu*.

Uvažujme molekulu  $M$ , která v čase  $t$  má rychlost  $\mathbf{v}$ . Můžeme si nyní vyznačit sféru okolo této molekuly o poloměru  $r_0$ . Je zřejmé, že nalétávající částice je ovlivněna molekulou  $M$  za předpokladu, kdy bude procházet touto sférickou oblastí.

Nyní předpokládejme, že existuje časový interval  $\Delta t$ , který splňuje následující dvě vlastnosti

- $\Delta t$  je mnohem větší než doba působení interakce  $\tau_c$ .
- $\Delta t$  je mnohem menší, než relaxační doba  $\tau_r$ , což je nutné pro zanedbání změny rozdělovací funkce během tohoto okamžiku, při pevném  $\mathbf{x}$  a  $\mathbf{v}$ .

Dále budeme předpokládat, že daný systém je pouze lehce nehomogenní v prostoru. Jinými slovy, jestliže označíme  $\bar{\mathbf{v}}$  jako typickou molekulární rychlost, pak předpokládáme, že rozdělovací funkce v bodě  $\mathbf{x} + \bar{\mathbf{v}}\Delta t$  je stejná, jako rozdělovací funkce v bodě  $\mathbf{x}$ .

Uvažujme dva svazky srážejících se částic, kde označíme hustoty těchto částic jako  $n_1$  a  $n$  s rychlostmi  $\mathbf{v}_1$  a  $\mathbf{v}$ . Můžeme přejít k souřadnicové soustavě spojené s částicí v druhém svazku a pak se tento problém redukuje na problém nalétávajících částic na částici  $M$ . Pak částice v druhém svazku, tedy částic o hustotě  $n$  a rychlostmi  $\mathbf{v}$  jsou ovlivněny tokem částic z prvního svazku. Počet částic, které mají počáteční rychlost  $\mathbf{g}$  a které se srazí s centrální částicí za čas  $\Delta t$  a nacházejí se v mezikruží o parametrech  $s$  a  $s + ds$ , je rovno

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, t) d^3 \mathbf{v}_1 2\pi b d b g \Delta t . \quad (374)$$

Jestliže nyní vynásobíme tento výraz hustotou počtu částic, které mají rychlost  $\mathbf{v}$ ,  $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d^3 \mathbf{v}$ , dostaneme počet srážek, v bodě  $\mathbf{x}$ , které proběhnou za časový okamžik  $\Delta t$  s částicemi, které mají rychlost v intervalu  $\mathbf{v}, \mathbf{v} + d\mathbf{v}$

$$\int d^3 \mathbf{v}_1 f(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) 2\pi |\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}| 2\pi b \Delta t = C_{out} d^3 \mathbf{v} \Delta t . \quad (375)$$

Podobným způsobem můžeme určit i hodnotu  $C_{in}$ , která udává přírůstek počtu částic v intervalu  $d^3\mathbf{v}$ . Jedná se o inverzní proces k původnímu procesu, kdy částice, s počátečními rychlostmi  $\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1$  a se srážkovým parametrem  $s$ . Pak zjevně dostaneme ..

$$\int d^3\mathbf{v}' ds f(\mathbf{x}, \mathbf{v}'_1, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}', t) 2\pi g b d\mathbf{v}' \Delta t = C_{in} d^3\mathbf{v} \Delta t . \quad (376)$$

Je podstatné, že počáteční a konečné rychlosti jsou řešením dynamického problému a tedy jsou vstáhnuty kanonickým zobrazením. Pak Liouvillovův teorém dává

$$d^3\mathbf{v} d^3\mathbf{v}_1 = d^3\mathbf{v}' d^3\mathbf{v}'_1 . \quad (377)$$

Samozřejmě, pro platnost tohoto teorému je důležitý předpoklad, že můžeme uvažovat srážku dvou částic jako izolovaný proces, kdy nemusíme brát do úvahy vliv ostatních částic. Jestliže tedy dáme všechny tyto výrazy dohromady, dostáváme slavnou Boltzmanovu rovnici

$$\begin{aligned} & \partial_t f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) + \mathbf{v} \cdot \nabla f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \\ & = \int d\mathbf{v}_1 ds 2\pi g s (f(\mathbf{x}, \mathbf{v}', t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}'_1, t) - f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, t)) . \end{aligned} \quad (378)$$

K analogickému výsledku můžeme dojít s pomocí definice účinného průřezu, kdy my víme, že

$$\sigma = \frac{d\phi ds}{d\Omega} , \quad (379)$$

kde  $\sigma(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1 | \mathbf{v}', \mathbf{v}'_1)$  je diferenciální účinný průřez. Zákony zachování energie a hybnosti s požadavek, že rozptyl se uskuteční do daného prostorového úhlu  $d\Omega$  určuje čárkované proměnné. Poznamenejme také, že v procesech, kde dochází k rozptylu molekul, předpokládáme, že tyto procesy jsou reverzibilní, tedy mohou probíhat i opačným směrem. Matematicky se toto vyjadřuje jako

$$\sigma(\mathbf{v}', \mathbf{v}'_1 | \mathbf{v}, \mathbf{v}_1) = \sigma(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1 | \mathbf{v}', \mathbf{v}'_1) . \quad (380)$$

Dále víme, že element prostorového úhlu  $\Omega$  je roven

$$d\Omega = d\phi \sin \theta d\theta \quad (381)$$

a pak tedy dostaneme

$$\sigma = \frac{s(\theta)}{\sin \theta} \frac{ds(\theta)}{d\theta} . \quad (382)$$

Pak je konečně zřejmé, že můžeme vyjádřit  $sds$  pomocí diferenciálního účinného průřezu a tedy integrace přes  $2\pi sds$  nahradíme integrací přes prostorový úhel  $d\Omega$  a tím dostaneme Boltzmannovu rovnici ve tvaru

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \int d^3 v_1 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| (f' f'_1 - f f_1) \equiv \mathcal{C}(f) \quad (383)$$

kde pro jednoduchost zápisu jsme zavedli notaci

$$f = f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t), f_1 = f(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, t), f' = f(\mathbf{x}, \mathbf{v}', t), f'_1 = f(\mathbf{x}, \mathbf{v}'_1, t). \quad (384)$$

a kde jsme nahradili  $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{v}$  a  $\mathbf{F} = m\dot{\mathbf{v}}$ . Je důležité zdůraznit, že  $\mathbf{F}$  zahrnuje vnější sílu, jako například gravitaci, a ne mezičasticové interakce, které jsou modelovány srážkami, a tedy srážkovým integrálem.

V předchozím zápisu jsme také předpokládali, že diferenciální účinný průřez je funkcí prostorového úhlu  $\Omega$ , tedy  $\sigma = \sigma(\Omega)$ , což platí za předpokladu, kdy účinný průřez závisí pouze na úhlu mezi relativními rychlostmi částic, tedy na úhlu mezi  $\mathbf{v} - \mathbf{v}_1$  a  $\mathbf{v}' - \mathbf{v}'_1$ . Také poznamenejme, že když provedeme integrály přes  $\Omega$  (určený vektorem  $\mathbf{v}$ ) a přes  $\mathbf{v}_1$ , musíme použít zákony zachování, abychom vyjádřili  $\mathbf{v}'$  a  $\mathbf{v}'_1$  jako funkce  $\mathbf{v}$ , což je pevná proměnná, přes kterou se neintegruje a jako funkcí  $\mathbf{v}_1$ , což je integrační proměnná.

Závěrem řekněme, že Boltzmannova rovnice s kolizním členem je nelineární integro-diferenciální rovnicí pro rozdělovací funkci. Je jasné, že je netriviální úkol najít řešení takové to rovnice.

### 3.4.1 Předpoklady použité při odvození Boltzmannovy rovnice

Nyní shrneme základní předpoklady, které byly použity při odvození Boltzmannovy rovnice.

První důležitý předpoklad je existence časového intervalu  $\Delta t$ , který splňuje

$$\tau_c \ll \Delta t \ll \tau_r. \quad (385)$$

kde  $\tau_c$  je doba působení interakce mezi částicemi, jinými slovy je to interval, během kterého dojde ke znatelným změnám trajektorie částic. Je zřejmé, že tento časový okamžik je úměrný efektivnímu poloměru interakce. Časový interval  $\delta\tau_r$  je časový interval odpovídající času mezi dvěma srážkami, je určena druhým parametrem, který určuje systém. Veličina  $\tau_r$  je velká, když je hustota částic  $n$  malá, kdy zřejmě střední vzdálenost mezi dvěma částicemi

je velká a tedy i srážky jsou méně časté. Pak je zřejmé, že  $\tau_c/\tau_r$  je malé číslo, když platí

$$\gamma = r_c^3 n \ll 1 . \quad (386)$$

V případě, že je toto číslo malé, pak můžeme opravdu najít  $\delta t$  tak, že splňuje (385). Dále, podmínka (386) zaručuje, že srážky jsou dobře definované události v prostoru i času, následné částky, kde se účastní daná částice, se nepřekrývají. Jinými slovy představujeme si srážky, jako posloupnost jednotlivých dvoučásticových srážek.

Předpoklad (386) vede k druhému důsledku. Při určení počtu částic, které nalétávají na centrální, jsme implicitně předpokládali, že rozdělovací funkce se nemění během časového intervalu  $\Delta t$  díky předpokladu  $\Delta t \ll \tau_r$ . Pak bylo možné uvažovat funkci  $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$  v ten samý časový okamžik  $t$ , který určuje čas, kdy dojde ke změně rozdělovací funkce v důsledku srážky. V opačném případě bychom museli použít počet částic ve fázovém bodě  $\mathbf{x}, \mathbf{v}_1$  v předcházejícím časovém okamžiku  $t - \tau$ , kde  $\tau$  je časový interval nutný, aby částice s rychlostí  $\mathbf{v}_1$  dostihla centrální částici. Pak by rychlost změny funkce  $f$  by také závisela na tvaru rozdělovací funkce v minulosti.

Nyní budeme diskutovat další předpoklad týkající se stupně nehomogeneity daného plynu. Toto je předpoklad, že rozdělovací funkce se nemění na na délkových intervalech, kterými projde nalétávající molekula za čas  $\Delta t$ . Když by tento předpoklad neplatil, pak bychom museli uvažovat rozdělovací funkci ve srážkovém členu v místě, z kterého přichází nalétávající molekula. Výsledkem bychom dostali nelokální tvar kinetické rovnice, protože na rychlost změny rozdělovací funkce v bodě  $\mathbf{x}$  by měly vliv rozdělovací funkce definované v okolí tohoto bodu. V prvním přiblížení se tento fakt zanedbává za předpokladu, kdy vlastnosti plynu se znatelně mění na vzdálenostech převyšující poloměr interakčního působení.

Je také zmínit další podstatný předpoklad, který jsme implicitně použili. Vidíme, že srážkový člen závisí na součinu jednočásticových rozdělovacích funkcí  $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)f(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, t)$ . Na druhou stranu víme z předchozích kapitol, že tento předpoklad obecně neplatí. Obecně počet dvojic částic, které se nacházejí ve dvou rozdílných bodech fázového prostoru, je dáno *dvoučásticovou rozdělovací funkcí*  $f_2(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{x}, \mathbf{v}_1, t)$ . Víme ale, že obecně neplatí

$$f_2(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{x}, \mathbf{v}_1, t) \neq f_1(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)f_1(\mathbf{x}, \mathbf{v}_1, t) . \quad (387)$$

Jinými slovy, jestliže budeme předpokládat rovnost těchto dvou výrazů, tak implicitně předpokládáme, že neexistují korelace mezi částicemi. Je zřejmé,

že i kdybychom byli schopni vytvořit systém, kde v čase  $t = 0$  neexistují korelace, pak tyto korelace se objeví v důsledku interakce mezi částicemi. Uvažujme následující případ. Máme dvě částice, které jsou na počátku dostatečně daleko od sebe. V případě, že zde existují interakce krátkého dosahu, pak tyto částice navzájem o sobě nevědí a tedy se chovají jako nezávislé. Jestliže se ale tyto částice navzájem přiblíží, pak dojde ke vzájemné interakci a tedy jejich trajektorie se vzájemně ovlivňují. V případě, kdy je jejich interakce odpuzivá, pak částice po přiblížení k sobě se opět rozletí. Proto pravděpodobnost, že najdeme dvě částice velice blízko u sebe je menší než součin pravděpodobností, že danou částici najdeme kdekoliv uvnitř systému. Jinými slovy, vzájemné působení vede ke korelaci mezi částicemi.

Předpoklad  $f_2 = f_1 f_1$  je velice znám a široce diskutován. Tento předpoklad je také znám jako *Hypotéza molekulárního chaosu*. Je to velice silný předpoklad, který byl široce diskutován. Jedním z nejvýznamnějších důsledků tohoto předpokladu je, při srovnání s formou BBGKY rovnic, že Boltzmanova rovnice je uzavřenou rovnicí pro jednočásticovou funkci. Na druhou stranu tím, že jsme ukončili sekvenci BBGKY rovnic, která ve své podstatě je systém lineárních rovnic, dostaneme Boltzmannovu rovnici, která je nyní nelineární rovnicí. Na druhou stranu existuje množství metod, jak řešit tuto rovnici a s některými z nich se setkáme v dalším výkladu.

### 3.4.2 Multi-komponentový plyn

V této kapitole zobecníme Boltzmannovu rovnici na případ plynu, který je tvořen částicemi různých druhů. Pro tento účel přepíšeme jedno-komponentovou Boltzmannovu rovnici do tvaru

$$\begin{aligned} \partial_t f - \frac{\partial V}{\partial x^i} \frac{\partial f}{\partial p_i} + \frac{p_i}{m} \frac{\partial f}{\partial x^i} = \\ = \partial_t f + \frac{F_i}{m} \frac{\partial f}{\partial u^i} + u_i \frac{\partial f}{\partial x^i} = \hat{J}(f|f), \end{aligned} \quad (388)$$

kde jsme zadefinovali

$$\hat{J}(f|g) = \int d^3 \mathbf{u}_1 \int d\Omega \sigma |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1| (f' g'_1 - f g_1). \quad (389)$$

Poté pro systém z  $\bar{N}$  různých druhů máme

$$\frac{Df_i}{Dt} = \sum_{j=1}^{\bar{N}} \hat{J}(f_i, f_j) , \quad (390)$$

kde například

$$\hat{J}(f_i, f_j) = \int d^3\mathbf{u}_j \int d\Omega |\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j| \sigma_{ij} d\Omega_{ij} (f'_i f'_j - f_i f_j) . \quad (391)$$

Poté systém  $\bar{N}$  svázaných rovnic tvoří zobecnění jednosložkové Boltzmanovy rovnice na případ  $\bar{N}$  druhů částic.

### 3.5 Momenty kinetické rovnice

V této kapitole zavedeme momentové integrály kinetické rovnice, které slouží k přechodu od mikroskopického k makroskopickému popisu tekutiny. Fundamentálním prvkem tohoto popisu je pojem *pole*, to jest funkce  $B(\mathbf{x}, t)$ , což je veličina definovaná v každém bodě  $\mathbf{x}$ , která se vyvíjí v čase  $t$ . Typickými příklady je hustota látky  $\rho(\mathbf{x}, t)$  a lokální rychlost  $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ <sup>1</sup> Tyto makroskopické veličiny určíme jako střední hodnoty mikroskopických funkcí  $b$ . Časová závislost funkce  $B(\mathbf{x}, t)$  je dána rozdělovací funkcí, která je řešením kinetické rovnice, zatím co závislost na  $\mathbf{x}$  vyplývá ze závislosti  $b$  na  $\mathbf{x}$  jako na parametru. Explicitně

$$B(\mathbf{x}, t) = \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{u} b(\mathbf{y}, \mathbf{u}; \mathbf{x}) f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) . \quad (392)$$

Další krok je dán konkrétním výběrem funkce  $b$ . V makroskopickém popisu hrají významnou roli hustota hmoty, hustota toku hybnosti, hustota energie. Tyto funkce budeme definovat následujícím způsobem. Vybereme jeden bod fyzikálního prostoru  $\mathbf{x}$  pomocí delta funkce  $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ . Jestliže se v bodě  $\mathbf{x}$  nenachází částice, pak tento bod dává nutně nulový příspěvek do  $B$ , jestliže se zde ale nachází částice, pak dává příspěvek úměrný  $\beta_1(\mathbf{y}, \mathbf{u})$ , kde  $\beta_1$  bude rovno buď  $m$  nebo  $\mathbf{u}$ . Pak tedy dostaneme

$$b(\mathbf{y}, \mathbf{u}; \mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \beta(\mathbf{y}, \mathbf{u}) . \quad (393)$$

<sup>1</sup>Abychom odlišili tuto veličinu od rychlosti částic, která vystupuje v Boltzmannově rovnici, budeme tuto jednočásticovou rychlost v dalším označovat pomocí symbolu  $\mathbf{u}$ .

Funkce tohoto typu nazýváme lokálními veličinami. Abychom našli časový vývoj této funkce, provedeme derivaci (392) podle času

$$\partial_t B(\mathbf{x}, t) = \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{u} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \beta(\mathbf{y}, \mathbf{u}) \partial_t f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) . \quad (394)$$

Předpokládejme, že kinetická rovnice má nyní tvar

$$\partial_t f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) = \mathcal{O} f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) \quad (395)$$

kde forma operátoru  $\mathcal{O}$  vyplývá z konkrétního tvaru kinetické rovnice. Pak dostaneme

$$\partial_t B(\mathbf{x}, t) = \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{u} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \beta(\mathbf{y}, \mathbf{u}) \mathcal{O} f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) . \quad (396)$$

V dalším kroku se budeme snažit přenést působení operátoru  $\mathcal{O}$  na dynamickou proměnnou místo působení na  $f$ . Obecně je vždy možné toto provést s použitím integrace po částech, kdy předpokládáme, že funkce  $f$  je rovna nule na hranici v nekonečnu, nebo jednoduchým přeskládáním členů. Pak dostaneme

$$\partial_t B(\mathbf{x}, t) = \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{u} f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) [\mathcal{O}^\dagger(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \beta(\mathbf{y}, \mathbf{u})] \quad (397)$$

kde  $\mathcal{O}^\dagger$  je sdružený operátor k operátoru  $\mathcal{O}$ . Nyní zdefinujeme následující veličinu

$$c(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{u}) = \mathcal{O}^\dagger \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \beta(\mathbf{y}, \mathbf{u}) . \quad (398)$$

kde je zřejmé, že  $c(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{u})$  je formálně dynamickou funkcí. Je důležité ale říci, že tato funkce může obecně záviset na  $f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t)$ , neboť operátor  $\mathcal{O}$  může být nelineární, jak například vyplývá ze struktury srážkového členu. Pak tedy konečně dostaneme

$$\partial_t B(\mathbf{x}, t) = \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{u} c(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{u}) f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) \equiv C(\mathbf{x}, t) , \quad (399)$$

kde  $C(\mathbf{x}, t)$  je střední hodnota veličiny  $c(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{u})$ . Význam rovnice (399) je v tom, že časová derivace makroskopické veličiny  $B(\mathbf{x}, t)$  je určena makroskopickou veličinou  $C(\mathbf{x}, t)$ . Jinými slovy řečeno, vidíme, že je možné přejít od mikroskopické rovnice k makroskopické rovnici, které se někdy také nazývají rovnicemi momentů kinetické rovnice.

Je také jasné, že z jedné kinetické rovnice můžeme dostat nekonečné množství rovnic pro momenty odpovídající různým funkcím  $\beta$ . Tyto rovnice mají hierarchickou strukturu:  $\partial_t B$  je dáno novou funkcí  $C$ , pak derivace  $\partial_t C$  je dána novou funkcí  $D$  atd. Ukážeme, že tento systém není nikdy uzavřený, což je analogie BBGKY systému, na druhou stranu je zde určitý specifický rozdíl. Tento rozdíl je znám z makroskopické teorie bez ohledu na formu kinetické teorie. V hydrodynamice dostaneme uzavřený systém rovnic, jestliže zavedeme určité fenomenologické předpoklady.

Budeme nyní podrobně analyzovat přenos operátoru  $\mathcal{O}$  na funkci  $b$ . Nejdříve použijeme tokový člen  $-\mathbf{u} \cdot \nabla$ , kde s pomocí integrace po částech dostaneme

$$\begin{aligned} F &= - \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{u} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \beta(\mathbf{y}, \mathbf{u}) u^i \frac{\partial}{\partial y^i} f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) = \\ &= \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{u} f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) u_i (\partial_{y^i} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \beta(\mathbf{y}, \mathbf{u}) + \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \partial_{y^i} \beta(\mathbf{y}, \mathbf{u})) . \end{aligned} \quad (400)$$

Z definice delta funkce dostaneme

$$\partial_{y^i} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = -\partial_{x^i} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (401)$$

a tedy

$$\begin{aligned} F &= -\nabla \cdot \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{u} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \mathbf{u} \beta(\mathbf{y}, \mathbf{u}) f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) + \\ &+ \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{u} f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) u_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \partial_{y^i} \beta(\mathbf{y}, \mathbf{u}) . \end{aligned} \quad (402)$$

Další krok se týká členu obsahující interakce s vnějším polem

$$\begin{aligned} \sigma_B^{(2)} &= \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{u} \frac{\mathbf{F}(\mathbf{y})}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \beta(\mathbf{y}, \mathbf{u}) = \\ &= - \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{u} \frac{\mathbf{F}(\mathbf{y})}{m} \cdot f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \beta(\mathbf{y}, \mathbf{u}) . \end{aligned} \quad (403)$$

Poslední krok se týká analýzy srážkového členu, který má nejvíce komplikovanou závislost na rozdělovací funkci a jehož forma závisí na konkrétní



kinetické rovnici. Jestliže označíme tento srážkový člen jako  $\mathcal{K}f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t)$ , pak jeho příspěvek do momentové rovnice si označíme jako

$$\sigma_B^{(3)} = \int d^3\mathbf{y}d^3\mathbf{u}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})\beta(\mathbf{y}, \mathbf{u})\mathcal{K}f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) . \quad (404)$$

Nyní zavedeme tok pole  $B$

$$\Phi_B(\mathbf{x}, t) = \int d^3\mathbf{y}d^3\mathbf{u}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})\mathbf{u}\beta(\mathbf{y}, \mathbf{u})f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) \quad (405)$$

a

$$\sigma_B^{(1)} = \int d^3\mathbf{y}d^3\mathbf{u}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})\frac{\partial\beta(\mathbf{y}, \mathbf{u})}{\partial y^i}\mathbf{u}_if(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) . \quad (406)$$

Pak dostaneme momentovou rovnici pro  $B$  ve tvaru

$$\partial_t B(\mathbf{x}, t) = -\partial_i\Phi_B^i(\mathbf{x}, t) + \sigma_B \quad (407)$$

kde

$$\sigma^B = \sigma_B^{(1)} + \sigma_B^{(2)} + \sigma_B^{(3)} \quad (408)$$

je zdroj pole  $B$ . Rovnice (407) jsou známy jako rovnice lokální rovnováhy, které mají následující interpretaci. Při  $\sigma_B = 0$  se redukuje na rovnici, která vyjadřuje lokální formu zákona zachování veličiny  $B$ . Pak je zřejmé, že nenulový člen  $\sigma_B = 0$  odpovídá zdroji, který dodává či ubírá  $B$  do daného objemu.

### 3.6 Boltzmannův H teorém a nevratnost entropie

Předchozí obecný formalism použijeme při sledování časového vývoje veličiny, která je fundamentalní v nerovnovážné termodynamice, kterým je entropie, což je stavová veličina. Tato veličina se vyskytuje v druhém termodynamickém zákoně, který je úzce spojen s pojmem nevratnosti, kdy entropie roste v izolovaném systému v důsledku nevratných procesů. Tento růst se zastaví v okamžiku, kdy se systém dostane do rovnovážného stavu, kdy entropie dosahuje své maximální hodnoty. V lokální formě dostaneme, že časový vývoj entropie, tak jako každé dynamické veličiny, je dán rovnicí

$$\partial_t s(\mathbf{x}, t) = -\nabla \cdot \Phi_s(\mathbf{x}, t) + \sigma_s(\mathbf{x}, t) . \quad (409)$$

Druhý termodynamický zákon není nic jiného, než

$$\sigma_s(\mathbf{x}, t) \geq 0 . \quad (410)$$

Boltzmannova kinetická rovnice, která byla odvozena v roce 1872, byla tak úspěšná a je tak důležitá, že je z ní možné zavést entropii a také to, že entropie roste s časem. Jinými slovy Boltzmannova teorie byla první teorií, která vysvětlovala nevratnost na mechanické úrovni. Tato teorie je také známa pod pojmem *H-teorem*, protože Boltzmann použil funkci  $H = -s(\mathbf{x}, t)$ . O H teorému budeme hovořit dále.

Uvažujme homogenní systém, kdy rozdělovací funkce  $f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$  není funkcí  $\mathbf{x}$ . V tomto případě zavedeme budeme používat symbol  $\phi(\mathbf{u}, t)$  pro homogenní rozdělovací funkci. Přesněji, víme, že rozdělovací funkce  $f$  je normována následujícím způsobem

$$N = \int d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{u} f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) . \quad (411)$$

V případě homogenní rozdělovací funkce tato normovací podmínka dává

$$N = V \int d^3\mathbf{u} f(\mathbf{u}, t) \quad (412)$$

a pak je tedy vhodné zavést funkci  $F(\mathbf{u}, t)$  definovanou jako  $f(\mathbf{u}, t) = n\phi(\mathbf{u}, t)$ ,  $n = \frac{N}{V}$ , což nám dává normovací podmínku

$$1 = \int d^3\mathbf{u} \phi(\mathbf{u}, t) . \quad (413)$$

Pro tuto funkci má Boltzmannova rovnice tvar

$$\partial_t \phi(\mathbf{u}, t) = 2\pi n \int d^3\mathbf{u}_1 dbbg (\phi(\mathbf{u}', t)\phi(\mathbf{u}'_1, t) - \phi(\mathbf{u}, t)\phi(\mathbf{u}_1, t)) \quad (414)$$

Definujeme nyní hustotu entropie ve tvaru

$$s(t) = -k_B n \int d\mathbf{u} \phi(\mathbf{u}, t) \ln[n\phi(\mathbf{u}, t)] + b \quad (415)$$

kde  $k_B$  je Boltzmannova konstanta a  $b$  je konstanta. Nyní provedeme derivaci  $s(t)$  podle času

$$\begin{aligned} \partial_t s(t) &= -k_B n \int d^3\mathbf{u} \partial_t \phi(\mathbf{u}, t) [\ln(n\phi(\mathbf{u}, t)) + 1] = \\ &= -2\pi k_B n^2 \int d^3\mathbf{u} d^3\mathbf{u}_1 dbbg (\phi(\mathbf{u}', t)\phi(\mathbf{u}'_1, t) - \phi(\mathbf{u}, t)\phi(\mathbf{u}_1, t)) [\ln(n\phi(\mathbf{u}, t)) + 1] \end{aligned} \quad (416)$$

Je zřejmé, že v daném integrálu můžeme provést záměnu mezi  $\mathbf{u}$  a  $\mathbf{u}'$  a tedy dostaneme

$$2\pi k_B n^2 \int d^3\mathbf{u} d^3\mathbf{u}_1 dbbg (\phi(\mathbf{u}', t)\phi(\mathbf{u}'_1, t) - \phi(\mathbf{u}, t)\phi(\mathbf{u}_1, t)) [\ln(n\phi(\mathbf{u}, t)) + 1] = \\ \int d^3\mathbf{u} d^3\mathbf{u}_1 dbbg (\phi(\mathbf{u}', t)\phi(\mathbf{u}'_1, t) - \phi(\mathbf{u}, t)\phi(\mathbf{u}_1, t)) [\ln(n\phi(\mathbf{u}_1, t)) + 1] =$$
(417)

Pak máme

$$\partial_t s(t) = -\pi k_B n^2 \int d^3\mathbf{u} d^3\mathbf{u}_1 dbbg (\phi(\mathbf{u}', t)\phi(\mathbf{u}'_1, t) - \phi(\mathbf{u}, t)\phi(\mathbf{u}_1, t)) \times \\ \times [\ln(n\phi(\mathbf{u}, t)) + \ln(n\phi(\mathbf{u}_1, t)) + 2] .$$
(418)

Nakonec poznamenejme, že poslední integrál můžeme přepsat do tvaru

$$\pi k_B n^2 \int d^3\mathbf{u} d^3\mathbf{u}_1 dbbg (\phi(\mathbf{u}', t)\phi(\mathbf{u}'_1, t) - \phi(\mathbf{u}, t)\phi(\mathbf{u}_1, t)) \times \\ \times [\ln(n\phi(\mathbf{u}, t)) + \ln(n\phi(\mathbf{u}_1, t)) + 2] = \\ = \pi k_B n^2 \int d^3\mathbf{u}' d^3\mathbf{u}'_1 dbbg (\phi(\mathbf{u}, t)\phi(\mathbf{u}_1, t) - \phi(\mathbf{u}', t)\phi(\mathbf{u}'_1, t)) \times \\ \times [\ln(n\phi(\mathbf{u}', t)) + \ln(n\phi(\mathbf{u}'_1, t)) + 2] \\ = \pi k_B n^2 \int d^3\mathbf{u} d^3\mathbf{u}_1 dbbg (\phi(\mathbf{u}, t)\phi(\mathbf{u}_1, t) - \phi(\mathbf{u}', t)\phi(\mathbf{u}'_1, t)) \times \\ \times [\ln(n\phi(\mathbf{u}', t)) + \ln(n\phi(\mathbf{u}'_1, t)) + 2]$$
(419)

kde v posledním kroku jsme použili vstah, že  $d^3\mathbf{u} d^3\mathbf{u}_1 = d^3\mathbf{u}' d^3\mathbf{u}'_1$ . S použitím této rovnosti dostaneme

$$\partial_t s(t) = \int d^3\mathbf{u} d^3\mathbf{u}_1 dbbg (\phi(\mathbf{u}', t)\phi(\mathbf{u}'_1, t) - \phi(\mathbf{u}, t)\phi(\mathbf{u}_1, t)) \ln \frac{\phi(\mathbf{u}', t)\phi(\mathbf{u}'_1, t)}{\phi(\mathbf{u}, t)\phi(\mathbf{u}_1, t)} .$$
(420)

Konečně, pro libovolná kladná čísla  $x$  a  $y$  máme

$$(x - y) \ln \frac{x}{y} \geq 0$$
(421)

**: Důkaz** Vidíme, že máme dvě možnosti. První, když  $x - y > 0$  pak máme  $\frac{x}{y} > 0$  a tedy  $\ln \frac{x}{y} > 0$  což dokazuje tuto rovnici. Naopak, pro  $x - y < 0$  dostáváme, že  $\frac{x}{y} < 1$  a tedy  $\ln \frac{x}{y} < 0$ , což opět dokazuje předchozí rovnici. Pak dostaneme výsledek

$$\partial_t s(t) \geq 0 . \quad (422)$$

### Maxwellovo rozdělení

Původní odvození této rozdělovací funkce bylo provedeno Maxwellem s použitím předpokladu isotropie.

Uvažujme rychlosti v  $x$ - směru, a předpokládejme, že jejich rozdělení je dané rozdělovací funkcí  $F(u_x)$ , která je normalizována jako

$$\int_{-\infty}^{\infty} F(u_x) du_x = 1$$

Princip isotropie říká, že zde není nic speciálního, co se týká  $x$ - směru, rychlosti v  $y$ - a v  $z$ - směru mají stejné rozdělení. Pak dostáváme, že pravděpodobnost, že najdeme částic v intervalu  $du_x du_y du_z$  je rovna

$$\frac{1}{n} f(\mathbf{u}) du_x du_y du_z = F(u_x) du_x F(u_y) du_y F(u_z) du_z \quad (423)$$

Na druhou stranu, jestliže  $f$  je isotropní distribuce, pak by měla záviset pouze na velikosti rychlosti, tedy

$$\frac{1}{n} f(\mathbf{u}) = \bar{f}(u_x^2 + u_y^2 + u_z^2) = F(u_x) F(u_y) F(u_z) . \quad (424)$$

Z toho dostáváme, že součet argumentů  $u_i^2$  v argumentu funkce  $\bar{f}$  musí odpovídat součinu  $F(u_i)$ , a to je možné pouze když funkce  $F(u_x)$  je exponenciální funkcí  $u^2$

$$F(u_x) = A^{1/3} e^{-Bu_x^2} \Rightarrow f(\mathbf{u}) = n A e^{-B(u_x^2 + u_y^2 + u_z^2)} = n A e^{-Bu^2} . \quad (425)$$

Konstanta  $A$  může být dán podmínkou normování funkce  $F$  tak, aby byla rovna jedné. Abychom našli hodnotu parametru  $B$ , musíme určit střední hodnotu kinetické energie  $\langle \frac{1}{2} m u^2 \rangle = \frac{3}{2} \kappa_B T$ , které pak dává

$$f(\mathbf{u}) = n \left( \frac{m}{2\pi\kappa_B T} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{m u^2}{2\kappa_B T} \right) \quad (426)$$

Nyní ukážeme, že Maxwelllovo rozdělení je řešením Boltzmannovy rovnice jako její rovnovážné řešení. Uvažujme homogenní plyn bez externích sil. Aby toto řešení bylo rovnovážné, pak  $\partial_t s = 0$  a tedy dostáváme

$$\phi(\mathbf{u}', t)\phi(\mathbf{u}'_1, t) = \phi(\mathbf{u}, t)\phi(\mathbf{u}_1, t) \Rightarrow \ln \phi(\mathbf{u}', t) + \ln \phi(\mathbf{u}'_1, t) = \ln \phi(\mathbf{u}, t) + \ln \phi(\mathbf{u}_1, t) . \quad (427)$$

, Tento výraz pro Maxwelllovo rozdělení dává

$$u'^2 + u_1'^2 = u^2 + u_1^2 \quad (428)$$

což je samozřejmě splněno v případě pružných srážek.

Nyní budeme uvažovat obecnější případ nehomogenního systému, kdy  $f = f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ , kde ale pro jednoduchost nebudeme uvažovat interakci s vnějším polem. Nyní zavedeme lokální hustotu entropie jako pole

$$s(\mathbf{x}, t) = -k_B \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{u} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) \ln f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) + b . \quad (429)$$

Pak zjevně dostaneme

$$\partial_t s(\mathbf{x}, t) = -k_B \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{u} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) [\ln f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) + 1] \partial_t f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) \quad (430)$$

což odpovídá obecnému předpisu provedenému v předchozí části, jestliže identifikujeme

$$\beta(\mathbf{y}, \mathbf{u}) = -k_B [\ln f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) + 1] . \quad (431)$$

Samozřejmě ale vidíme, že toto není dynamická veličina, protože jednak explicitně závisí na čase, a dále je to veličina, která je definována pomocí rozdělovací funkce. Na druhou stranu jestliže použijeme Boltzmannovu rovnici, pak dostaneme

$$\begin{aligned} \partial_t s(\mathbf{x}, t) &= \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{u} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \beta(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) [-u_i \frac{\partial}{\partial y^i} f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) + \mathcal{K} f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t)] = \\ &= -\frac{\partial}{\partial x^i} \Phi'_{s,i}(\mathbf{x}, t) + \sigma_s^{(3)} + \sigma_s^{(1)} \end{aligned} \quad (432)$$

kde

$$\begin{aligned} \sigma_s^{(1)}(\mathbf{x}, t) &= \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{u} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \frac{\partial \beta(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t)}{\partial y_i} v^i f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) , \\ \sigma_s^{(3)}(\mathbf{x}, t) &= \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{y} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \mathcal{K} f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) , \end{aligned} \quad (433)$$

a kde také budeme psát

$$\begin{aligned}
\Phi'_s(\mathbf{x}, t) &= \Phi_s(\mathbf{x}, t) + \vec{\phi}_s(\mathbf{x}, t) , \\
\Phi_s(\mathbf{x}, t) &= -k_B \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{u} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \mathbf{u} \ln f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) , \\
\phi_{s,i}(\mathbf{x}, t) &= -k_B \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{u} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) u_i f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) .
\end{aligned}
\tag{434}$$

Nyní vypočítáme příspěvek  $\sigma_s^{(1)}$

$$\begin{aligned}
\sigma_s^{(1)}(\mathbf{x}, t) &= -k_B \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{u} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \frac{\partial f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t)}{\partial y^i} u_i f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) = \\
&= -k_B \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{u} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) u_i \frac{\partial}{\partial y^i} f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) = \\
&= -k_B \partial_i \int d^3\mathbf{y} d^3\mathbf{u} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) u_i f(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)
\end{aligned}
\tag{435}$$

a my vidíme, že tento příspěvek kompletně vyruší divergenci  $\partial_i \phi_{s,i}$ . Pak tedy dostáváme

$$\partial_t \sigma(\mathbf{x}, t) = -\nabla \Phi(\mathbf{x}, t) + \sigma_s^{(3)} .
\tag{436}$$

Je zřejmé, že  $\sigma_s^{(3)}$  můžeme určit stejným způsobem, jako v homogenním případě, protože kolizní člen se počítá pro pevné  $\mathbf{y}$ . Pak tedy dostáváme

$$\sigma_s^{(3)}(\mathbf{x}, t) \geq 0 .
\tag{437}$$

Jinými slovy, opět jsme dostali druhý termodynamický zákon v lokálním tvaru.

Mikroskopické procesy na molekulární úrovni jsou reverzebilní, tedy mohou probíhat i v opačné časové posloupnosti, na druhou stranu makroskopické procesy nejsou. Když například rozdělení rychlosti relaxuje do Maxwellova rozdělení v důsledku srážek, pak je tento proces ireverzibilní. Je také zajímavé, že když jsme odvozovali Boltzmanovu rovnici, tak jsme předpokládali reverzebilitu na mikroskopické úrovni. Přesto můžeme ukázat, že vedou k ireverzibilním procesům na makroskopické úrovni.

Z odvození zákona růstu entropie aké ukazuje, že příčinou růstu entropie je pouze srážkový člen, zatím co volný pohyb a případné efekty vyvolané středním polem, jsou vratné procesy, které nemají vliv na růst entropie.

Je dobré podrobněji popsat, co myslíme nevratnými procesy, které můžeme rozdělit na dvě základní třídy.

Jako příklad procesu, který spadá do první třídy, uvažujme shluk vzájemně neinteragujících částic, které jsou na počátku lokalizovány v koutě krychle s dokonale odražejícími stěnami. Předpokládejme, že částice mají na počátku rychlosti distribuované kompletně náhodným způsobem. Je jasné, že za nějaký dostatečně dlouhý časový interval částice, které jsou v daném shluku, jsou rozprostřeny spojitě po celé krychli díky volnému pohybu částic, kdy dopadají a odraží se od stěn. Zdá se, že se tento proces jeví jako nevratný. V závislosti na počátečním stavu daný systém se blíží ke stavu s homogenní hustotou částic, kde čas, který je potřebný k dosažení homogenní konfigurace, silně závisí na počátečních podmínkách. Například, jestliže budeme mít dostatečně široký interval počátečních rychlostí, pak homogenní stav dostaneme tím rychleji. Z mikroskopického pohledu je zřejmé, že volný pohyb částic nemá vliv na rozložení rychlosti, neboť částice se spolu nesráží a jejich srážky se stěnami jsou dokonale pružné. Tento nevratný proces se také nazývá proces s fázovým míšením, které jsou charakteristické absencí určité časové škály, jenž nezávisí na počátečních podmínkách. Je zřejmé, že v takových procesech nedochází k růstu entropie.

Položme si nyní otázku, co se stane, když připustíme srážky mezi částicemi. V takovém případě díky neregulérnosti a velkému množství srážek brzy dojde ke ztrátě informace o počátečním rozložení rychlostí. V tomto případě proces rozprostření v prostoru má jiný charakter (difuze), protože je nyní určen specifickými vlastnostmi interakce mezi částicemi a také obecnými vlastnostmi, jako je hustota a teplota. Tyto specifické parametry udávají relaxační čas, který je nezávislý od počátečního stavu systému. Rozdělení rychlostí se blíží k Maxwellovskému rozdělení a daný proces je spojen s růstem entropie. Tyto procesy se také někdy nazývají jako procesy disipatického typu.

Je velice zajímavé, že jsme vyšli z předpokladu reverzibilní mikroskopické fyziky, ale končíme s veličinou  $H$ , která má nesymetrický časový vývoj. Můžeme to interpretovat jako objevení šipky času.

Je dobré poznamenat, že  $H$  teorém někdy není interpretován jako růst entropie  $S$ . Zde,  $H$  je definována pro jednosložkový plyn, zatím co entropie může být definována pro komplikovanější systémy, běžná definice entropie je definována pouze pro systémy v termodynamické rovnováze či ve stavu jí blízké, zatím co  $H$  je definována pro nerovnovážné systémy.

S existencí  $H$  teorému je spojen následující paradox. Předpokládejme, že v jednom časovém okamžiku obrátíme rychlosti částic v plynu. Pak částice

budou sledovat své původní trajektorie. To znamená, že jestliže jsme původně měli  $\frac{ds}{dt} > 0$  tak v situaci, která probíhá v opačném pozadí, bychom měli mít  $\frac{ds}{dt} < 0$ , což je zřejmý paradox.

Vysvětlení tohoto paradoxu leží v předpokladu týkající se dokazování H teorému. Implicitně jsme předpokládali, že neexistuje korelace mezi částicemi před jejich srážkami. Toto je známé jako molekulární chaos a tento předpoklad je implicitně skryt ve statistické formulaci interakcí pomocí sázkového účinného průřezu. Je jasné, že nemůžeme předpokládat, že molekuly nejsou v korelaci po srážkách. Tedy, v situaci, která by měla probíhat opačným směrem, molekuly nejsou nezkorelované po jejich srážkách, a tudíž předpoklady, které jsou skryté za odvozením Boltzmanovy rovnice, neplatí. Takže, ve skutečnosti, šipka času v Boltzmanově rovnici byla implicitně zvolena předpokladem, že rychlosti částic jsou nezkorelované před srážkami.

### 3.6.1 Poincarého teorém

S pojmem nevrátnosti úzce souvisí tzv Poincarého rekurentní teorém, který říká, že trajektorie systému ohraničeného izolovaného systému o konečné energii se, po dostatečně dlouhé době, přiblíží libovolně blízko své počáteční pozici.

Nastíníme stručný důkaz tohoto teorému. Uvažujme počáteční stav systému ve fázovém prostoru  $z_0 \equiv (q_0, p_0)$  a tento bod je obsažen v množině fázového prostoru  $\Omega_0$ . Pak se systém vyvíjí na povrchu daným podmínkou konstantnosti energie. Pak tento teorém říká, že za dostatečně dlouhou dobu se systém opět dostane do množiny  $\Omega_0$ . Necht'  $\hat{T}$  je operátor, který propaguje  $\Omega_0$  za jednotku času. Pak díky Liouvillovu teorému

$$\Omega_0, \hat{T}\Omega_0, \hat{T}^2\Omega_0 \quad (438)$$

mají stejnou míru. Jestliže se tyto množiny neprotínají, pak povrch, na kterém se pohybují, by měl nekonečnou míru, což je v rozporu s předpokladem. Pak tedy můžeme psát

$$\hat{T}^k\Omega_0 \cap \hat{T}^n\Omega_0 = \bar{\Omega} \neq 0 \quad (439)$$

pro nějaká přirozená čísla  $k, n$ . Dále, díky jednoznačnosti trajektorií dostáváme, že  $\hat{T}$  je bijektivní zobrazení, což nám dovoluje psát

$$\hat{T}(A \cap B) = \hat{T}(A) \cap \hat{T}(B) . \quad (440)$$



Jestliže nyní budeme působit s  $\hat{T}^{-n}$  na (439) dostaneme

$$\hat{T}^{-n}(\hat{T}^k \cap \hat{T}^n \Omega_0) = \hat{T}^{-n} \bar{\Omega} \neq 0 \quad (441)$$

a když použijeme (440) dostaneme

$$\hat{T}^{k-n} \Omega_0 \cap \Omega_0 \neq 0 . \quad (442)$$

Jinými slovy, za  $k - n$  časových jednotek množina  $\Omega_0$  má konečný průnik sama se sebou. Nyní, jestliže vezmeme míru  $\Omega_0$  libovolně malou, dostaneme Poincarého teorém.

Je zřejmé, že tento teorém je založen na následujících předpokladech. Předně systém musí být omezen, například v případě mechanického systému musíme požadovat, aby tento systém byl v ohrazené prostorové oblasti, jinými slovy namůžeme dovolit, aby trajektorie částic směřovaly do nekonečna. A dále, musí platit Liouvilův teorém. Je také zřejmé, že systém nemusí projít celým fázovým prostorem dříve, než se vrátí do původního stavu, kde systémy, které pokryjí celý fázový prostor během svého vývoje, se nazývají ergodickými systémy.

### 3.6.2 Boltzmannova a Gibbsova Entropie

V předchozí části jsme definovali entropii pomocí rozdělovací funkce kinetické teorie. Nyní stručně podáme obecnější definici.

Gibbsova entropie  $\mathcal{H}_N$  je definována pomocí  $N$ -částicové rozdělovací funkce  $f_N$  jako

$$\mathcal{H}_N = \int f_N \ln f_N \prod_{i=1}^N d^3 \mathbf{x}_i d^3 \mathbf{p}_i . \quad (443)$$

Abychom určili časový vývoj této veličiny, výjdeme z Liouvillovy rovnice

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} + \{f_N, H\} = 0 . \quad (444)$$

Pak časový vývoj této entropie je roven

$$\begin{aligned}
\frac{d\mathcal{H}_N}{dt} &= \int \prod_{i=1}^N d^3\mathbf{x}_i d^3\mathbf{p}_i \frac{\partial f_N}{\partial t} (1 + \ln f_N) = \\
&= - \int \prod_{i=1}^N d^3\mathbf{x}_i d^3\mathbf{p}_i \{f_N, H\} (1 + \ln f_N) = \\
&= - \int \prod_{i=1}^N d^3\mathbf{x}_i d^3\mathbf{p}_i \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{x}_i} \cdot \frac{\mathbf{p}_i}{m} - \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \frac{\partial V}{\partial \mathbf{x}_i} \right) (1 + \ln f_N) = \\
&= - \int \prod_{i=1}^N d^3\mathbf{x}_i d^3\mathbf{p}_i \sum_{i=1}^N \left( \frac{1}{m} \frac{\partial f_N \ln f_N}{\partial \mathbf{x}_i} \cdot \mathbf{p}_i - \frac{\partial V}{\partial \mathbf{x}_i} \cdot \frac{\partial f_N \ln f_N}{\partial \mathbf{p}_i} \right) = 0
\end{aligned} \tag{445}$$

kde jsme použili

$$\{f_N, H\} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{x}_i} \cdot \frac{\mathbf{p}_i}{m} - \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \frac{\partial V}{\partial \mathbf{x}_i} \right) \tag{446}$$

a dále integraci po částech. Vidíme tedy, že Gibbsova entropie se zachovává a tedy splňuje reverzibilní rovnici. Tato entropie je vstáhnuta k termodynamické entropii následujícím způsobem

$$S = -k_B \mathcal{H}_N \tag{447}$$

což je kinetická definice entropie izolovaného systému. Druhý termodynamický zákon nám říká, že  $\Delta S \geq 0$  pro izolovaný systém kdy rovnost platí pro reverzibilní procesy. Protože Liouvillova rovnice je reverzibilní, dostaneme, že výsledek  $S = konst$  je v souladu s druhým termodynamickým zákonem.

V případě, kdy neexistují korelace mezi částicemi, máme

$$f_N = \prod_{i=1}^N f_1(i) \tag{448}$$

a tedy

$$\mathcal{H}_N = \sum_{i=1}^N \prod_{j=1}^N \int \prod_{k=1}^N d^3\mathbf{x}_k d^3\mathbf{p}_k \prod_{j=1}^N f_1(j) \ln f_1(i) = \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_1(i) = N\mathcal{H} \tag{449}$$

kde

$$\mathcal{H} = \int d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{p} f_1 \ln f_1 . \quad (450)$$

Jak jsme viděli, pak kinetická rovnice dává  $\dot{\mathcal{H}} < 0$  jako důsledek srážek v tekutině. Jinými slovy řečeno, při sledování jednočásticové funkce dostaneme, že daný proces je ireversibilní, na rozdíl od plného dynamického popisu, který je reversibilní.

### 3.6.3 Kolizní invarianty

V této kapitole budeme definovat operátory, které mají význačné vlastnosti vzhledem k časovému vývoji systému. Poznamenejme, že kolizní integrál je definován jako

$$\hat{J}(f) = \int d^3\mathbf{u}_1 \int d\Omega \sigma |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| (f' f'_1 - f f_1) . \quad (451)$$

Budeme definovat operátor

$$\hat{I}[\phi(\mathbf{u})] = \int d^3\mathbf{u} \hat{J}(f) \phi(\mathbf{u}) = \int d^3\mathbf{u} \int d^3\mathbf{u}_1 \int d\Omega |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| (f' f'_1 - f f_1) \phi(\mathbf{u}) . \quad (452)$$

Změna proměnných

$$(\mathbf{u}, \mathbf{u}_1) \rightarrow (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}) \quad (453)$$

dává

$$\hat{I}(\phi(\mathbf{u})) = \hat{I}(\phi(\mathbf{u}_1)) . \quad (454)$$

Jako další krok uvažujme operátor

$$\hat{I}(\phi(\mathbf{u}')) = \int d^3\mathbf{u} \int d^3\mathbf{u}_1 \int d\Omega \sigma |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| (f' f'_1 - f f_1) \phi(\mathbf{u}') \quad (455)$$

Poté změna proměnných  $(\mathbf{u}, \mathbf{u}_1) \rightarrow (\mathbf{u}', \mathbf{u}'_1)$  má jednotkový Jakobián jako důsledek Liouvillova theoremu pro dvoučásticový systém, což nám dává

$$d^3\mathbf{u} d^3\mathbf{u}'_1 = d^3\mathbf{u} d^3\mathbf{u}_1 . \quad (456)$$

Dále je také jasné, že  $|\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| \sigma d\Omega$  je invariantní vůči této transformaci a pak dostáváme

$$\hat{I}(\phi(\mathbf{u}')) = \int d^3\mathbf{u}' \int d^3\mathbf{u}'_1 \int d\Omega' g' |\mathbf{u} - \mathbf{u}'_1| (f f_1 - f' f'_1) \phi(\mathbf{u}') = -\hat{I}(\phi(\mathbf{u})) . \quad (457)$$

Konečně, změna proměnných  $(\mathbf{u}'_1, \mathbf{u}') \rightarrow (\mathbf{u}', \mathbf{u}'_1)$  dává

$$\hat{I}(\phi(\mathbf{u}')) = \hat{I}(\phi(\mathbf{u}'_1)) . \quad (458)$$

Když nyní zkombinujeme všechny tyto relace, dostaneme

$$4\hat{I}(\phi(\mathbf{u})) = \hat{I}(\phi(\mathbf{u})) + \hat{I}(\phi(\mathbf{u}_1)) - \hat{I}(\phi(\mathbf{u}')) - \hat{I}(\phi(\mathbf{u}'_1)) . \quad (459)$$

Konečně, díky linearitě operátoru  $\hat{I}$ , můžeme tento výsledek přepsat do tvaru

$$\hat{I}(\phi(\mathbf{u})) = \frac{1}{4}\hat{I}(\phi(\mathbf{u}) + \phi(\mathbf{u}_1) - \phi(\mathbf{u}') - \phi(\mathbf{u}'_1)) . \quad (460)$$

Nechť  $\chi(\mathbf{u})$  je srážkový invariant, t.j.

$$\chi(\mathbf{u}) + \chi(\mathbf{u}_1) = \chi(\mathbf{u}') + \chi(\mathbf{u}'_1) . \quad (461)$$

Pak pro tuto veličinu dostáváme z (460)

$$\hat{I}(\psi) = 0 . \quad (462)$$

Nechť  $\chi(\mathbf{u})$  je veličina, jenž se zachovává při srážkách. Pak je jasné, že obecná funkce, která se zachovává při srážkách, má tvar

$$f(\mathbf{u}) = C_0 + \sum_r \chi_r(\mathbf{u}) . \quad (463)$$

kde  $\chi_r$  jsou všechny nezávislé veličiny, které se zachovávají při srážkách. Zákon zachování energie a všech tří komponent hybnosti implikují

$$f(\mathbf{u}) = C_0 + C_1\mathbf{u}^2 + C_{2x}u_x + C_{2y}u_y + C_{2z}u_z = -B(\mathbf{u} - \mathbf{u}_0)^2 . \quad (464)$$

Je zřejmé, že existence pěti nezávislých srážkových invariantů je obecným důsledkem kinetických rovnic, protože jsou svázány s dynamickými zákony zachování počtu částic, energie a hybnosti při srážkách. Tyto zákony nám říkají, že jedna molekula během srážky ztrácí hybnost a energii, zatím co druhá je získává. Na druhou stranu srážkový invariant potřebuje trochu obecnější přístup. Uvažujme zdrojový člen ve tvaru

$$\begin{aligned} \sigma_i^{(3)}(\mathbf{x}) &= \int d^3\mathbf{u}d^3\mathbf{y}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})\psi(\mathbf{u}, \mathbf{y}) \int d\Omega\sigma g(f'f'_1 - ff_1) = \\ &= \int d1d2\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})\psi(\mathbf{u}, \mathbf{y})\delta(\mathbf{y} - \mathbf{y}_1) \int d\Omega\sigma g(f(\mathbf{y}, \mathbf{u}', t)f(\mathbf{y}_1, \mathbf{u}'_1, t) - f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t)f(\mathbf{y}_1, \mathbf{u}_1, t)) \end{aligned} \quad (465)$$

kde jsme zavedli integraci přes  $\mathbf{y}_1$ , abychom dostali symetrické fázové body. Je zřejmé, že výraz se nezmění, jestliže zaměníme 1 a druhou fázovou proměnnou

$$\begin{aligned} \sigma_i^{(3)}(\mathbf{x}) &= \int d1d2\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}_1)\psi(\mathbf{y}_1, \mathbf{u}_1)\delta(\mathbf{y} - \mathbf{y}_1) \times \\ &\times \int d\Omega\sigma g(f(\mathbf{y}_1, \mathbf{u}', t)f(\mathbf{y}, \mathbf{u}', t) - f(\mathbf{y}_1, \mathbf{u}_1, t)f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t)) \end{aligned} \quad (466)$$

Tento výraz můžeme také napsat

$$\begin{aligned} \sigma_i^{(3)}(\mathbf{x}) &= \int d1'd2'\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}_1)\psi(\mathbf{y}_1, \mathbf{u}'_1)\delta(\mathbf{y} - \mathbf{y}_1) \times \\ &\times \int d\Omega\sigma g(f(\mathbf{y}_1, \mathbf{u}_1, t)f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t) - f(\mathbf{y}_1, \mathbf{u}'_1, t)f(\mathbf{y}, \mathbf{u}'_1, t)) \end{aligned} \quad (467)$$

kde  $d1' = d^3\mathbf{y}d^3\mathbf{u}'$ ,  $d2' = d^3\mathbf{y}_1d^3\mathbf{u}'_1$ . Pak díky Liouvillově teorému je tento výraz roven  $d^1d^2$  a tedy dostáváme

$$\begin{aligned} \sigma_i^{(3)}(\mathbf{x}) &= - \int d1d2\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}_1)\psi(\mathbf{y}_1, \mathbf{u}'_1)\delta(\mathbf{y} - \mathbf{y}_1) \times \\ &\times \int d\Omega\sigma g(f(\mathbf{y}_1, \mathbf{u}'_1, t)f(\mathbf{y}, \mathbf{u}'_1, t) - f(\mathbf{y}_1, \mathbf{u}_1, t)f(\mathbf{y}, \mathbf{u}, t)) \end{aligned} \quad (468)$$

kde konečně můžeme provést záměnu mezi první a druhou fázovou proměnnou. Výsledkem dostaneme podmínku, kdy je zdrojový člen roven nule

$$\begin{aligned} \sigma_i^{(3)} &= \frac{1}{4} \int d^3\mathbf{y}d^3\mathbf{u}d^3\mathbf{y}_1d^3\mathbf{u}_2[\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})\psi_i(\mathbf{y}, \mathbf{u}) + \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}_1)\psi_1(\mathbf{y}_1, \mathbf{u}_1) \\ &- \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}_1)\psi(\mathbf{y}_1, \mathbf{u}'_1) - \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})\psi(\mathbf{y}, \mathbf{u}')] \delta(\mathbf{y} - \mathbf{y}_1)(f'f'_1 - ff_1) = 0 \end{aligned} \quad (469)$$

Tento výraz je roven nule pro libovolnou formu rozdělovací funkce, když platí

$$[\psi_i(\mathbf{y}, \mathbf{u}) + \psi_1(\mathbf{y}_1, \mathbf{u}_1) - \psi(\mathbf{y}_1, \mathbf{u}'_1) - \psi(\mathbf{y}, \mathbf{u}')] \delta(\mathbf{y} - \mathbf{y}_1) = 0 \quad (470)$$

kde, oproti předchozímu výrazu, vystupuje explicitní závislost na souřadnicích, byť je dána ve formě delta funkce. Jinými slovy řečeno vidíme důležitou

vlastnost, že daná veličina se stane srážkovým invariantem, jestliže k procesu výměny energie a hybnosti dochází je jednom a tom samém bodě, což je důsledkem faktu, že ve srážkovém členu se vyskytují rozdělovací funkce v jednom a tom samém bodě  $\mathbf{y}$ . Na druhou stranu toto je zjevně pouhé přiblížení, které platí v tzv. hydrodynamickém přiblížení, kdy se rozdělovací funkce málo mění na vzdálenostech odpovídající střední volné dráze molekul. Pak, pro takovou formu kinetických rovnic, kdy bereme do úvahy nelokálnost srážek, některé z těchto funkcí již nemusí být srážkovými invarianty, i přesto, že dynamické zákony zachování zůstávají v platnosti.

V dalším se omezíme pouze na případ hydrodynamického přiblížení, kde srážkové invarianty hrají fundamentální roli.

### 3.7 Rovnice zachování

Uvažujme veličinu  $\chi(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ , která je spojena s částicemi, a která se zachovává v dvoučásticových srážkách

$$\chi + \chi_1 = \chi' + \chi'_1 \quad (471)$$

Celkový množství této veličiny v jednotce objemu je rovna

$$\begin{aligned} n_\chi(\mathbf{x}, t) &= \int d^3\mathbf{u} \chi(\mathbf{x}, \mathbf{u}) f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = \\ &= n(\mathbf{x}, t) \int d^3\mathbf{u} \chi(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \frac{f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)}{n(\mathbf{x}, t)} = n(\mathbf{x}, t) \langle \chi \rangle(\mathbf{x}, t) . \end{aligned} \quad (472)$$

Například

$$n(\mathbf{x}, t) = \int d^3\mathbf{u} f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) , \quad n\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \int d^3\mathbf{u} f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \mathbf{u} , \quad (473)$$

což můžeme také přepsat do tvaru

$$\mathbf{v} = \frac{\int d^3\mathbf{u} f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \mathbf{u}}{\int d^3\mathbf{u} f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)} = \langle \mathbf{u} \rangle . \quad (474)$$

Naším cílem je najít pohybovou rovnici pro  $n_\chi$  v případě, kdy  $f$  splňuje Boltzmanovu rovnici. Abychom ji našli, vynásobíme Boltzmanovu rovnici veličinou  $\chi$  a provedeme integraci přes rychlosti

$$\int \frac{Df}{Dt} \chi d^3\mathbf{u} = \int \mathcal{C}[f] \chi d^3\mathbf{u} . \quad (475)$$

Začneme nejdříve s pravou stranou této rovnice. Nejdříve máme

$$\begin{aligned}
& \int d^3\mathbf{u} \int d^3\mathbf{u}_1 \mathcal{C}(f) \chi(\mathbf{u}) d^3u = \\
& = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{u} \int d^3\mathbf{u}_1 \int \sigma(\Omega) |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| (f' f'_1 - f f_1) \chi(\mathbf{u}) + \\
& + \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{u}_1 \int d^3\mathbf{u} \int \sigma(\Omega) |\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}| (f' f'_1 - f_1 f) \chi(\mathbf{u}_1) = \\
& = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{u} \int d^3\mathbf{u}_1 \int \sigma(\Omega) |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| (f' f'_1 - f f_1) (\chi(\mathbf{u}) + \chi(\mathbf{u}_1)) .
\end{aligned} \tag{476}$$

Jako další krok použijeme argument reverzibility, to znamená jako integrační proměnné budou vystupovat  $\mathbf{u}'$ ,  $\mathbf{u}'_1$ . Výsledkem dostaneme následující výraz

$$\int \mathcal{C}[f] \chi(\mathbf{u}) d^3u = \frac{1}{4} \int d^3\mathbf{u} \int d^3\mathbf{u}_1 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| (f' f'_1 - f f_1) (\chi + \chi_1 - \chi' - \chi'_1) . \tag{477}$$

Tento výraz, díky díky předpokladu (471), je roven nule. Tedy, pro veličinu, která se zachovává v dvoučásticových srážkách, dostáváme

$$0 = \int \frac{Df}{Dt} \chi d^3\mathbf{u} = \int \left( \frac{\partial f}{\partial t} + u^i \frac{\partial f}{\partial x^i} + \frac{F^i}{m} \frac{\partial f}{\partial u^i} \right) \chi d^3\mathbf{u} , \tag{478}$$

kteřou můžeme přepsat do tvaru

$$\begin{aligned}
0 & = \frac{\partial}{\partial t} \int f \chi d^3\mathbf{u} + \frac{\partial}{\partial x^i} \int f \chi u^i d^3\mathbf{u} - \int u^i f \frac{\partial \chi}{\partial x^i} d^3\mathbf{u} + \\
& + \frac{1}{m} \int \frac{\partial}{\partial u^i} (f \chi F^i) d^3\mathbf{u} - \frac{1}{m} \int \frac{\partial F^i}{\partial u^i} f \chi d^3\mathbf{u} - \frac{1}{m} \int \frac{\partial \chi}{\partial u^i} f F^i d^3\mathbf{u} .
\end{aligned} \tag{479}$$

První člen na druhém řádku je roven nule, neboť může být vyjádřen jako povrchový integral

$$\int \frac{\partial}{\partial u^i} (f \chi F^i) d^3\mathbf{u} = \int_{|\mathbf{u}| \rightarrow \infty} f \chi F^i u_i u d\Omega \tag{480}$$

kde budeme předpokládat, že rozdělovací funkce  $f$  se blíží k nule daleko rychleji, než  $\chi F^i u_i u$  roste pro  $u \rightarrow \infty$ . Například, toto platí pro rozdělovací

funkcí exponenciálního typu. Poté, když zadefinujeme pro libovolnou veličinu  $Q$

$$n \langle Q \rangle = \int d^3u Q f \quad (481)$$

dostáváme rovnici, která určuje časový vývoj veličiny  $\langle \chi \rangle$

$$\frac{\partial}{\partial t} (n \langle \chi \rangle) + \frac{\partial}{\partial x^i} (n \langle u^i \chi \rangle) - n \left\langle u^i \frac{\partial \chi}{\partial x^i} \right\rangle - \frac{n}{m} \left\langle F^i \frac{\partial \chi}{\partial u^i} \right\rangle - \frac{n}{m} \left\langle \frac{\partial F^i}{\partial u^i} \chi \right\rangle = 0 . \quad (482)$$

Tato rovnice nám říká, jak hustota  $n_\chi = n \langle \chi \rangle$  libovolné veličiny  $\chi$ , jenž se zachovává v dvoučásticových srážkách, se vyvíjí v čase. Tato forma rovnice se bude často opakovat při odvození hydrodynamických rovnic

### 3.8 Odvození hydrodynamických rovnic

Rovnice (482) určuje přechod od mikroskopického popisu (pomocí molekulární veličiny  $\chi$ ) k makroskopické veličině, dány množstvím veličiny  $\chi$  v jednotkovém objemu,  $n \langle \chi \rangle$ . V následujícím budeme předpokládat, že síla  $F$  nezávisí na rychlostech.

#### Rovnice zachování hmoty

Tato rovnice vyjadřuje zachování hmoty ve srážkových procesech. Jinými slovy předpokládáme, že  $\chi = m$ . Pro tuto volbu (482) má tvar

$$\frac{\partial}{\partial t} (nm) + \frac{\partial}{\partial x^i} (nm \langle u^i \rangle) = 0 . \quad (483)$$

kde jsme využili faktu

$$\langle m \rangle = \frac{1}{n} \int d^3u f m = \frac{m}{n} \int d^3u f = m . \quad (484)$$

Jestliže zadefinujeme hustotu hmoty jako

$$\rho = nm \quad (485)$$

pak rovnice (483) má tvar rovnice spojitosti

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 , \quad (486)$$

kde  $\mathbf{v} = \langle \mathbf{v} \rangle$  je střední rychlost částic.



## Zákon zachování hybnosti

Nyní uvažujme  $\chi^i = mu^i$ . Pak dostáváme

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial t}(nm \langle u \rangle^i) + \frac{\partial}{\partial x^j}(nm \langle u^j u^i \rangle) - n \left\langle F^j \frac{\partial u^i}{\partial u^j} \right\rangle = \\ &= \frac{\partial}{\partial t}(\rho v^i) + \frac{\partial}{\partial x^j}(nm \langle u^j u^i \rangle) - nF^j \end{aligned} \quad (487)$$

kde jsme použili  $\frac{\partial u^i}{\partial u^j} = \delta_j^i$  a dále skutečnosti, že pro sílu, která nezávisí na rychlostech, máme

$$\langle F^i \rangle = \frac{1}{n} \int d^3u F^i f = \frac{F^i}{n} \int d^3u f = F^i . \quad (488)$$

zavedeme tensor tlaku definovaný vzhledem ke klidové soustavě

$$p^{ij} = m \int d^3\mathbf{u} u^i u^j f = n \langle mu^i u^j \rangle . \quad (489)$$

Pak momentová rovnice má tvar

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v^i) + \frac{\partial}{\partial x^j} p^{ij} = \frac{\rho}{m} F^i . \quad (490)$$

## Zákon zachování energie

V případě, kdy máme jednosložkový plyn, translační kinetická energie se zachovává při srážkách a můžeme tedy uvažovat

$$\chi = \frac{1}{2} m \mathbf{u}^2 . \quad (491)$$

Pak definujeme  $\epsilon_K$  jako střední hodnotu kinetické energie

$$\epsilon_K = \int d^3\mathbf{u} \frac{m}{2} u^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{x}, t) = n \left\langle \frac{1}{2} m u^2 \right\rangle . \quad (492)$$

Pro tuto veličinu má momentová rovnice tvar

$$\frac{\partial}{\partial t} \epsilon_K + \frac{\partial}{\partial x^i} (q_K) - \frac{n}{m} \langle F^i m u_i \rangle = 0 \quad (493)$$

což dává známý výsledek

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_K) + \frac{\partial}{\partial x^i}(q^i) = \frac{\rho}{m} F^i v_i, \quad (494)$$

kde jsme zavedli vektor toku energie

$$q^i = \int d^3\mathbf{u} \frac{m}{2} u^2 u^i f. \quad (495)$$

### 3.8.1 Relativistické makroskopické proměnné

Nyní přepíšeme tyto zachovávající se rovnice pomocí více fyzikálních relativních proměnných, což jsou proměnné odpovídající odchylce od středních hodnot. Označíme odchylku vektoru rychlosti od střední hodnoty pomocí symbolu  $\mathbf{c}$

$$\mathbf{c} = \mathbf{u} - \mathbf{v}. \quad (496)$$

Pak definujeme relativní tensor tlaku,

$$\begin{aligned} P^{ij} &= m \int d^3\mathbf{u} c^i c^j f = \rho \langle (u^i - v^i)(u^j - v^j) \rangle = \\ &= \rho (\langle u^i u^j \rangle - \langle u^i \rangle v^j - v^i \langle u^j \rangle + \langle v^i v^j \rangle) = \\ &= \rho (\langle u^i u^j \rangle - v^i v^j - v^j v^i + v^i v^j) = \rho (\langle u^i u^j \rangle - v^i v^j) \end{aligned} \quad (497)$$

a tedy

$$\rho \langle u^i u^j \rangle = p^{ij} = P^{ij} + \rho v^i v^j. \quad (498)$$

Stejným způsobem definujeme relativní tok tepla

$$Q^i = \int d^3\mathbf{u} \frac{1}{2} m c^2 c^i d^3\mathbf{u} = n \left\langle \frac{1}{2} m c^2 c^i \right\rangle \quad (499)$$

explicitně dostaneme

$$\begin{aligned} Q^i &= \int d^3\mathbf{u} \left( \frac{m}{2} u^2 u^i - \frac{m}{2} u^2 v^i - m u^j u^i v_j + m u^j v^j v^i + \frac{m}{2} v^2 u^i - \frac{m}{2} v^2 v^i \right) = \\ &= q^i - v^i \epsilon_K - P^{ij} v_j + \rho v^2 v^i. \end{aligned} \quad (500)$$

Dále zavedeme vnitřní energii

$$\epsilon(\mathbf{x}, t) = \int d^3\mathbf{u} \frac{1}{2} m c^2 f(\mathbf{u}, \mathbf{x}, t) \quad (501)$$

která souvisí s energií  $\epsilon_K$  následujícím způsobem

$$\epsilon = \frac{m}{2} \int d^3\mathbf{u} (u^i - v^i)(u_i - v_i) f = \epsilon_K - \frac{1}{2} \rho v^2 . \quad (502)$$

Pak také máme

$$q^i = Q^i + v^i \epsilon + P^{ij} v_j + v^i \frac{\rho}{2} v^2 . \quad (503)$$

Z (498) vidíme, že absolutní tlak je větší než relativní, na druhou stranu toto není to, co my myslíme tlakem. Tlak měříme v souřadnicové soustavě spojené s tekutinou, jinými slovy je to tlak, který nezávisí na makroskopické rychlosti  $\mathbf{v}$ . Nyní, když použijeme (498), (500) a (502) v rovnicích (490) a (493) tak dostaneme

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho v^i) + \frac{\partial}{\partial x^j} p^{ij} &= \frac{\rho}{m} F^i \Rightarrow \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} v^i + \rho \frac{\partial v^i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^j} P^{ij} + \frac{\partial}{\partial x^j} (\rho v^j) v^i + \rho v^j \frac{\partial}{\partial x^j} v^i &= \frac{\rho}{m} F^i \Rightarrow \\ \rho \left( \frac{\partial}{\partial t} v^i + v^j \frac{\partial}{\partial x^j} v^i \right) + \frac{\partial}{\partial x^j} P^{ij} &= \frac{\rho}{m} F^i \end{aligned} \quad (504)$$

kde jsme užili faktu, že výraz  $v^i(\partial_t \rho + \partial_i(\rho v^i))$  je roven nule jako důsledek zákona zachování.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \epsilon_K + \frac{\partial}{\partial x^i} \rho q^i &= \frac{\rho}{m} F^i v_i \Rightarrow \\ \partial_t \epsilon + \partial_i q^i + \partial_i (v^i \epsilon) + P^{ij} \partial_i v_j + \\ &+ \frac{1}{2} v^2 (\partial \rho + \partial_i(\rho v^i)) + \\ + v_j [\rho (\partial_t v^j + v^i \partial_i v^j) + \partial_i P^{ij} - \frac{1}{m} F^j] &= 0 \Rightarrow \\ \partial_t \epsilon + \partial_i q^i + \partial_i (v^i \epsilon) + P^{ij} \partial_i v_j &= 0 \end{aligned} \quad (505)$$

### 3.8.2 Souhrn momentových rovnic

Závěrem dáme přehled všech momentových rovnic

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v^i)}{\partial x^i} &= 0, \\ \frac{\partial v^i}{\partial t} + v^j \frac{\partial v^i}{\partial x^j} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P^{ij}}{\partial x^j} + \frac{F^i}{m}, \\ \partial_t \epsilon + \partial_i q^i + \partial_i(v^i \epsilon) + P^{ij} \partial_i v_j &= 0.\end{aligned}\tag{506}$$

Vidíme, že máme pět rovnic. Neznámými jsou následující momenty rozdělovací funkce  $f$

$$\begin{aligned}\rho &= m \int d^3 \mathbf{u} f, & v^i &= \frac{1}{n} \int d^3 \mathbf{u} u^i f, & P^{ij} &= m \int d^3 \mathbf{u} c^i c^j f, \\ \epsilon &= \frac{m}{2} \int d^3 \mathbf{u} c^2 f, & q^i &= \frac{m}{2} \int d^3 \mathbf{u} c^2 c^i f.\end{aligned}\tag{507}$$

Vidíme, že máme  $1 + 3 + 6 + 1 + 3 = 14$  neznámých funkcí. Z toho vidíme, že momentové rovnice netvoří dynamickou teorii kapalin.

V principu bychom mohli zavést více momentových rovnic tím, že vezmeme vyšší momenty Boltzmanovy rovnice. Na druhou stranu tyto rovnice by vždy zavedly vyšší momenty distribuční funkce díky členu  $u^i \partial_i f$  v Boltzmanově rovnici. Jinými slovy musíme najít způsob, jak nějakým způsobem získat dynamickou teorii kapalin z kinetické teorie.

Jinými slovy, abychom odvodili dynamickou teorii kapalin, musím najít vztahy mezi 14 neznámými  $\rho, v^i, P^{ij}, \epsilon$  a  $q^i$  takovým způsobem, že dostaneme uzavřený systém rovnic.

Nejdříve musíme zdůraznit, že srážky jsou jediný způsob předávání hybnosti a energie v tekutině, která je složena z neutrálních částic, což je podstatné pro její vlastnosti.

### 3.8.3 Teplota: Variace distribuce rychlosti

Teplota tekutiny, který je tvořen molekulami bez vnitřních stupňů volnosti, je dán výrazem

$$\epsilon = \int d^3 \mathbf{u} \frac{m}{2} c^2 f(\mathbf{u}) = \frac{3}{2} k_B T.\tag{508}$$

Význam definice teploty dané touto rovnicí je následující. Uvažujeme molekuly, které jsou všechny v klidu. Necht' se tekutina pohybuje jako pevné těleso s rychlostí  $\mathbf{v}$ . Vidíme z rovnice (508), že v tomto případě  $T \sim \epsilon = 0$ , což je očekávaný výsledek. Vidíme také, že (508) může být přepsána do tvaru

$$\frac{3k_B T}{m} = \langle (\mathbf{u} - \langle \mathbf{u} \rangle)^2 \rangle, \quad (509)$$

která dokazuje, že  $\frac{3k_B T}{m}$  je míra variace hustoty pravděpodobnosti rychlosti.

Je zřejmé, že můžeme obecně definovat další makroskopické proměnné k již definovaným  $n, \mathbf{v}, T, \epsilon, Q^i, P^{ij}$ , například následující tensor

$$n\Lambda_{i_1 i_2, \dots, i_n} = \int d^3 \mathbf{u} f(\mathbf{c}, \mathbf{x}, t) c_{i_1} c_{i_2} \dots c_{i_n}. \quad (510)$$

kde proměnná  $\Lambda(\mathbf{x}, t)$  je tensor  $n$ -tého řádu ve třech dimensích.

### 3.8.4 Statistická rovnováha

Vrátíme se opět k obecné analýze Boltzmanovy rovnice a budeme zkoumat otázku, za jakých podmínek dojde k vynulování kolizního integrálu. Vidíme, že toto je splněno za předpokladu, kdy

$$f' f'_1 = f f_1. \quad (511)$$

Tato podmínka se nazývá podmínkou *statistické rovnováhy*. Explicitně, tato podmínka říká, že množství částic, které přitečenou do elementu  $d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{u}$  je roven počtu částic, které z daného elementu odtečou. Také je jasné, že tato podmínka je nutná podmínka pro existenci rovnovážného stavu, kdy  $\partial_t f = 0$ . Jinak řečeno, podmínka rovnováhy  $\partial_t f = 0$  implikuje, že entropie dosáhla své rovnovážné hodnoty, neboť

$$\frac{ds}{dt} = -k_B \int d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{x} \frac{\partial f}{\partial t} (1 + \ln f) \quad (512)$$

a tedy  $\partial_t f$  implikuje  $\frac{ds}{dt} = 0$  a my víme, že tato podmínka je splněna pouze za předpokladu kdy platí (511). Vidíme tedy, že tato podmínka je nutná pro existenci rovnovážného stavu a je to i dostatečná podmínka v případě homogenní tekutiny bez působení vnějšího pole.

Když se nyní vrátíme k Maxwellovskému rozdělení, tak vidíme, že toto rozdělení nutně splňuje podmínku statistické rovnováhy. Je jasné, že tomu tak

musí být, neboť Maxwellovské rozdělení jsme odvodili právě z předpokladu, že pro ně kolizní člen je roven nule. Na druhou stranu je zřejmé, že Maxwellovské rozdělení bude splňovat podmínku statistické rovnováhy (511) i za předpokladu, kdy konstantní hodnoty  $n$ ,  $\mathbf{v}$  a  $T$  jsou nahrazeny  $n(\mathbf{x}, t)$ ,  $T(\mathbf{x}, t)$  a  $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ . Výsledná rovnovážná distribuce se nazývá *Lokální Maxwellovské rozdělení*

$$f^0(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = \frac{n(\mathbf{x}, t)}{(2\pi \frac{k_B}{m} T(\mathbf{x}, t))^{3/2}} \exp\left(-\frac{m(\mathbf{u} - \mathbf{v}(\mathbf{x}, t))^2}{2k_B T(\mathbf{x}, t)}\right). \quad (513)$$

Je jasné, že pro toto rozdělení platí

$$\begin{aligned} n(\mathbf{x}, t) &= \int d^3\mathbf{u} f^0(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t), \\ \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{n(\mathbf{x}, t)} \int d^3\mathbf{u} f^0(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \mathbf{u}, \\ \frac{3}{2} n(\mathbf{x}, t) \kappa_B T(\mathbf{x}, t) &= \int d^3\mathbf{u} f^0(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \frac{m}{2} (\mathbf{u} - \mathbf{v})^2 \end{aligned} \quad (514)$$

jak vyplývá z těchto integrálů

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2/b} &= \sqrt{b} \sqrt{\pi}, \\ \int_{-\infty}^{\infty} dx x e^{-(x-v)^2/b} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx (x-v) e^{-(x-v)^2/b} + \\ &+ v \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-(x-v)^2/b} = v \sqrt{b} \sqrt{\pi}. \end{aligned} \quad (515)$$

Je nutné rozlišit dva druhy Maxwellovského rozdělení: **Absolutní Maxwellovské rozdělení**, které označíme jako  $f_0$ , kde  $n$ ,  $\mathbf{v}$ ,  $T$  jsou konstantní, a **Lokální Maxwellovské rozdělení**, které označíme jako  $f^0$ , kde  $n$ ,  $\mathbf{v}$ ,  $T$  závisí na souřadnicích  $\mathbf{x}$  a čase  $t$ . Je ale zřejmé, že toto není rovnovážná distribuční funkce, neboť i když je srážkový člen roven nule pro toto rozdělení, tak ještě stále neplatí  $\partial_t f = 0$ , protože víme, že časový vývoj rozdělovací funkce je jednak zapříčiněn srážkovým členem, a jednat členem v kinetické rovnici, který obsahuje tok a dále interakci s vnějším polem.

Nyní přijdeme k důležitému závěru, který říká, že lokální Boltzmanovo rozdělení je rovnovážně rozdělení ve smyslu, že pro něj platí

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt}(f^0) = 0 . \quad (516)$$

Abychom toto ukázali, budeme uvažovat obecnější formu Boltzmanovy  $\mathcal{H}$ -funkce

$$\mathcal{H} = \int d^3\mathbf{x}d^3\mathbf{u}f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \ln f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) . \quad (517)$$

Víme, že když necháme tekutinu v klidu samu o sobě, během určitého časového okamžiku se tento systém dostane do stavu termodynamické rovnováhy. Tento jev je právě popsán klesáním  $H$  funkce. Když nyní provedeme derivaci této funkce, dostaneme

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \int d^3\mathbf{x}d^3\mathbf{u}(1 + \ln f)\partial_t f \quad (518)$$

Jestliže nyní použijeme Boltzmanovu rovnici, dostanem

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{H}}{dt} &= - \int d^3\mathbf{x}d^3\mathbf{u} \left( \mathbf{u} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{u}} \right) (1 + \ln f) + \int d^3\mathbf{x} \hat{I}(1 + \ln f) = \\ &= \int d^3\mathbf{x} \hat{I}(1 + \ln f) , \end{aligned} \quad (519)$$

kde jsme použili

$$\begin{aligned} \int d^3\mathbf{x}d^3\mathbf{u} \mathbf{u} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} (1 + \ln f) &= \int d^3\mathbf{x}d^3\mathbf{u} \frac{\partial(\mathbf{u}f \ln f)}{\partial \mathbf{x}} = \int d^3\mathbf{u} \int_{S_\infty} u^i (f \ln f) dS_i \rightarrow 0 \\ \int d^3\mathbf{x}d^3\mathbf{u} \frac{\mathbf{F}}{m} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{u}} (1 + \ln f) &= \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{u} \frac{\mathbf{F}}{m} \frac{\partial f \ln f}{\partial \mathbf{u}} = \int d^3\mathbf{x} \int_{S(u)_\infty} \frac{F^i}{m} f \ln f dS_i \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (520)$$

Kde jsme předpokládali, že funkce  $f$  se blíží nule na hranici daného objemu, což je dané sférou  $S_\infty$  a také, že funkce  $f$  se blíží nule na hranicích rychlostního objemu.

Nyní s použitím předchozím úprav dostáváme

$$\begin{aligned} 4\hat{I}(1 + \ln f) &= \hat{I}(1 + \ln f) + \hat{I}(1 + \ln f_1) - \hat{I}(1 + \ln f') - \hat{I}(1 + \ln f'_1) = \\ &= \hat{I} \left( \ln \frac{f_1 f}{f'_1 f'} \right) = -\hat{I} \left( \ln \frac{f'_1 f'}{f_1 f} \right) \end{aligned} \quad (521)$$

Nyní diskuse stejná jako v předchozí části dokazuje platnost H-teorému pro obecnou rozdělovací funkci, která splňuje Boltzmanovu rovnici.

Vidíme, že jak absolutní, tak lokální Maxwelllovské rozdělení splňují, že srážkový člen je roven nule a tedy pro ně platí

$$\frac{d\mathcal{H}(f_0)}{dt} = \frac{d\mathcal{H}(f^0)}{dt} = 0 . \quad (522)$$

Z tohoto důvodu mohou být obě rozdělení nazvány jako rovnovážné distribuční funkce. Na druhou stranu termodynamická rovnováha pro tekutinu, která není vystavena vnějším polím, implikuje, že všechny makroskopické veličiny jsou konstantní. Z tohoto důvodu je tato situace popsána pomocí absolutní Maxwelllovské rozdělovací funkce  $f_0$ . Můžeme ale předpokládat, že před dosáhnutím termodynamické rovnováhy, plyn je ve stavu lokální tepelné rovnováhy, a tedy je popsán pomocí lokální Maxwelllovské rozdělovací funkce  $f^0$ . Jinými slovy můžeme si představit situaci, kdy máme tekutinu v obecném stavu. Během časového vývoje, při kterém neprovádíme na dané tekutině nějaké vnější zásahy, dochází k poklesu  $\mathcal{H}$  funkce až do té doby, dokud stav systému je popsán pomocí lokální Maxwelllovské rozdělovací funkce, kdy je ustanovena lokální termodynamická rovnováha v každém malém objemu tekutiny, zatím co tekutina jako celek se nenachází ve stavu globální termodynamické rovnováhy. Poté bude docházet k dalším procesům uvnitř tekutiny, kdy dochází k relaxaci všech makroskopických veličin do stavu, kdy tyto veličiny mají konstantní hodnoty v celém objemu tekutiny. Poté se tekutina nachází ve stavu globální termodynamické rovnováhy.

### 3.8.5 Lokální termodynamická rovnováha a makroskopické proměnné

Ukázali jsme, že lokální Maxwelllovské rozdělení splňuje podmínku lokální termodynamické rovnováhy, což má za následek, že srážkový integrál je roven nule. Na druhou stranu, jestliže vložíme toto rozdělení do Boltzmanovy rovnice, je jasné, že levá strana je nenulová pro obecné hodnoty parametrů. Na druhou stranu je zřejmé, že prostorová a časová závislost lokálního Maxwelllovského rozdělení je vyjádřena prostřednictvím funkcí  $n, \mathbf{v}, T$ , vidíme, že abychom našli kompletní lokální rovnovážné řešení je dostačující najít závislost těchto funkcí na prostorových souřadnicích.

Dále také ukážeme, že lokální Maxwelllovské rozdělení je důležitý prvek v Chapman-Enskogově rozvoji Boltzmanovy rovnice. V tomto procesu  $f^0$  jako řešení nejnižšího řádu, kde  $n, \mathbf{v}$  a  $T$  jsou funkcemi  $\mathbf{x}, t$ .



### 3.8.6 Barometrická rovnice

Uvažujme, že máme tekutinu ve vnějším poli, které je konservativní a tedy se dá vyjádřit pomocí skalárního potenciálu

$$F_i = -\frac{\partial\Phi}{\partial x^i} . \quad (523)$$

Označíme rovnovážnou distribuci pro tuto konfiguraci jako  $\bar{f}_0$  a budeme požadovat, že  $\frac{\partial\bar{f}_0}{\partial t} = 0$ . Zbývající členy na levé straně rovnice dávají

$$\begin{aligned} \mathbf{v} \cdot \frac{\partial\bar{f}_0}{\partial\mathbf{x}} + \frac{F^i}{m} \frac{\partial\bar{f}_0}{\partial u^i} &= 0 \Rightarrow \\ m\mathbf{v} \cdot \frac{\partial\bar{f}_0}{\partial\mathbf{x}} &= \frac{\partial\Phi}{\partial\mathbf{x}} \frac{\partial\bar{f}_0}{\partial\mathbf{v}} . \end{aligned} \quad (524)$$

Budeme předpokládat, že obecnější forma řešení statické rovnováhy má tvar

$$\ln \bar{f}_0 = \frac{-A(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2 + \ln B - 2A\psi(\mathbf{x})}{m} . \quad (525)$$

Je zřejmé, že toto řešení splňuje podmínku statické rovnováhy (511). Na druhou stranu dosazením do levé strany Boltzmanovy rovnice dostáváme

$$\frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{x}} \cdot \mathbf{u} = \frac{\partial\Phi}{\partial\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{u} - \mathbf{v}) \quad (526)$$

a my vidíme, že můžeme ztotožnit  $\psi(\mathbf{x}) = \Phi(\mathbf{x})$  za předpokladu, když  $\frac{\partial\Phi}{\partial\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} = 0$ . Když poté budeme postupovat standartním způsobem dostaneme rozdělovací funkci ve tvaru

$$\bar{f}_0 = \frac{n_0}{(2\pi k_B T_0)^{3/2}} \exp\left(-\frac{[m(\mathbf{u} - \mathbf{v})^2/2 + \Phi(\mathbf{x})]}{k_B T_0}\right) , \quad (527)$$

kde nyní  $n_0$ ,  $\mathbf{v}$  a  $T_0$  jsou konstanty. Je také důležité, že  $\mathbf{v}$  je normální k  $\nabla\Phi$ .

Díky této rozdělovací funkci můžeme určit rovnovážnou hustotu částic jako

$$n(\mathbf{x}) = \int d^3\mathbf{u} \bar{f}_0(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = n_0 \exp\left[-\frac{\Phi(\mathbf{x})}{k_B T_0}\right] , \quad (528)$$

která nám říká, že  $n_0$  je hodnota hustoty částic v bodě, kde  $\Phi(\mathbf{x}) = 0$ . Rovnovážná teplota je dána výrazem

$$\begin{aligned} \frac{3}{2}k_B T(\mathbf{x})n(\mathbf{x}) &= \int d^3\mathbf{u} \frac{1}{2}m(\mathbf{u} - \mathbf{v})^2 \bar{f}_0 \Rightarrow \\ 3n(\mathbf{x})T(\mathbf{x}) &= 3n_0 T_0 \exp\left[-\frac{\Phi(\mathbf{x})}{\kappa_B T_0}\right]. \end{aligned} \quad (529)$$

Jestliže do předchozího výrazu dosadíme hodnotu hustoty částic  $n(\mathbf{x}, t)$ , kterou jsme určili v (528), dostaneme

$$3n(\mathbf{x})T(\mathbf{x}) = 3n_0 T_0 \exp\left[-\frac{\Phi(\mathbf{x})}{\kappa_B T_0}\right] = 3n(\mathbf{x})T \quad (530)$$

z čehož plyne, že můžeme stotožnit  $T_0$  s  $T$ . Nakonec tedy můžeme psát

$$\bar{f}_0(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \frac{n(\mathbf{x})}{(2\pi\kappa_B T)^{3/2}} \exp\left[-\frac{(\mathbf{u} - \mathbf{v})^2}{2\kappa_B T}\right]. \quad (531)$$

Pro homogenní gravitační pole dostáváme

$$\Phi(\mathbf{x}) = mg(z - z_0). \quad (532)$$

Vložením tohoto potenciálu do předpis pro hustotu částic dostáváme

$$n(z) = n_0 \exp\left[-\frac{mg(z - z_0)}{\kappa_B T}\right]. \quad (533)$$

Tento exponenciální úbytek hustoty částic je znám jako *barometrická rovnice*.

## 3.9 Transportní koeficienty

### 3.9.1 Odezva na poruchy

Uvažujme systém, který je v rovnováze s odpovídajícími konstantními hodnotami  $n, \mathbf{v}, T$ . Jakmile se objeví vnější poruchy, tyto hydrodynamické veličiny se změní odpovídajícím způsobem. Z pozorování je jasné, že tekutina odpoví

na tyto změny takovým způsobem, kterým se snaží obnovit rovnováhu. Tedy, když definujeme  $\mathcal{R}$  jako odezva, dostaneme

$$\begin{aligned}\mathcal{R}[\partial_i n] &= n v_i , \\ \mathcal{R}[\partial_i v_j] &= S_{ij} , \\ \mathcal{R}[\partial_i T] &= Q_i .\end{aligned}\tag{534}$$

Jinými slovy, pohyb tekutiny je odpověď na objevení gradientu hustoty, komponenty deformačního tensoru jsou odpovědí na objevení se gradientů v rychlosti tekutiny. Dále, teplotní tok je odpovědí na vznik gradientu teploty.

Koeficienty, které vyjadřují úměrnost mezi gradienty poruch k odpovídajícím tokům, se nazývají transportní koeficienty.

#### **Koeficient difuze**

Tento koeficient se vyskytuje v relaci odezvy mezi gradientem hustoty a rychlostí a má tvar

$$n\mathbf{v} = -D\nabla n .\tag{535}$$

Tento vztah nám říká, že při objevení změny hustoty v kapalině od homogenní k nehomogenní konfiguraci, začne v tekutině probíhat transport částic proti růstu hustoty částic, jinými slovy řečeno tok probíhá takovým způsobem, aby došlo k obnovení homogenní konfigurace.

**Termální konduktance** Tento koeficient se vyskytuje v relaci

$$Q_i = -\kappa\partial_i T .\tag{536}$$

Intepretace tohoto vztahu je stejná jako v předchozím případě. V případě objevení nehomogenity v rozložení teploty dochází k transportu tepla z místa s vyšší teplotou do oblasti s nižší teplotou, kde transport tepla je zprostředkován tokem  $Q_i$ .

A konečně, koeficient viskozity odvedeme z následující úvahy. Je užitečné rozepsat tensor tlaku ve formě

$$P^{ij} = \delta^{ij}p - S^{ij} .\tag{537}$$

V tomto výrazu,  $p$  je skalární tlak a  $S^{ij}$  označuje komponenty tensoru tlaku, které odpovídají jako odezva na gradient rychlosti. Předpokládáme, že  $S^{ij}$  splňuje následující dvě vlastnosti

- $S^{ij}$  neobsahuje jiné členy než  $\partial_i u_j$ , protože požadujeme,  $S^{ij} = 0$  za předpokladu, když  $\partial_i u_j = 0$ .
- Dále požadujeme, aby platilo  $S^{ij} = 0$  pro tekutinu v rovnoměrném rotačním pohybu. Rovnoměrný rotační pohyb je charakterizován konstantním vektorem úhlové rychlosti  $\Omega^i$  tak, že makroskopický pohyb elementu kapaliny je dán

$$\mathbf{v} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{x} . \quad (538)$$

Tato vlastnost nám říká, že  $S^{ij} = 0$  pro  $\mathbf{v} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{x}$ . Tensor, který toto splňuje, má obecný tvar

$$a \left( \frac{\partial v^i}{\partial x^j} + \frac{\partial v^j}{\partial x^i} \right) + b \delta_j^i \partial_i v^i , \quad (539)$$

kde  $a$  a  $b$  jsou libovolné konstanty. Toto vyplývá z následujícího

$$\begin{aligned} \frac{\partial v^i}{\partial x^j} + \frac{\partial v^j}{\partial x^i} \text{ (pro } v^i = \epsilon^{ijk} \Omega_j x_k) &= \epsilon^{ikl} \partial_j (\Omega_k x_l) + \epsilon^{jkl} \partial_i (\Omega_k v_l) = \\ &= \epsilon^{ikl} \Omega_k \delta_j^l + \epsilon^{jkl} \Omega_k \delta_i^l = \epsilon^{ikj} \Omega_k + \epsilon^{jki} \Omega_k = \epsilon^{ikj} \Omega_k - \epsilon^{ikj} \Omega_k = 0 \end{aligned} \quad (540)$$

a také

$$\partial_i v^i = \epsilon^{ijk} \Omega_j \partial_i (x^k) = \epsilon^{ijk} \Omega_j \delta_i^k = \epsilon^{kjk} \Omega_j = 0 . \quad (541)$$

Pomocí tohoto výrazu dostáváme, že můžeme napsat tensor  $S_{ij}$  ve tvaru

$$S_{ij} = \eta \left( \frac{\partial v_i}{\partial x^j} + \frac{\partial v_j}{\partial x^i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial v_k}{\partial x^k} \right) + \zeta \delta_{ij} \frac{\partial v^i}{\partial x^i} . \quad (542)$$

Konstanty, které vystupují v tomto výrazu, jsou  $\eta$ , známá jako *koefficient smykové viskozity*, zatím co  $\zeta$  je *koefficient objemové viskozity*. Poznamenejme také, že tekutina je nestlačitelná, jestliže platí  $\partial_i v^i = 0$ . Tensor  $S_{ij}$  můžeme také napsat s pomocí symetrického deformačního tensoru

$$\Lambda_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v^i}{\partial x^j} + \frac{\partial v^j}{\partial x^i} \right) . \quad (543)$$

kde z definice dostáváme  $\text{Tr} \Lambda = \Lambda_{ij} \delta^{ji} = \partial_i v^i$ . Pak můžeme napsat tensor tlaku  $P^{ij}$  ve tvaru

$$P^{ij} = \delta^{ij} p - S^{ij} = \delta^{ij} p - 2\eta (\Lambda^{ij} - \frac{1}{3} \delta^{ij} \partial_k v^k) - \zeta \delta^{ij} \partial_k v^k \quad (544)$$

kteřá má následující vlastnost

$$\text{Tr}P^{ij} = P^{ij}\delta_{ji} = 3p - 2\eta(\text{Tr}\Lambda^{ij} - \partial_i v^i) - 3\zeta\partial_i v^i = 3p - 3\zeta\partial_i v^i, \quad (545)$$

kteřá, v případě nestlačitelné tekutiny, má tvar

$$\text{Tr}P^{ij} = 3p. \quad (546)$$

Síla, kteřá působí na element tekutiny okolní tekutina, je vyjádřena tensorem tlaku  $P^{ij}$ , kteřý pro nestlačitelnou tekutinu má tvar

$$P^{ij} = \delta^{ij}p - 2\eta\Lambda^{ij}. \quad (547)$$

Uvažujme nyní tekutinu, kteřá se pohybuje ve směru osy  $x$  s rychlostí, kteřá je funkcí  $z$

$$\mathbf{v} = [v_x(z), 0, 0]. \quad (548)$$

Pak síla působící na plochu o obsahu  $\Delta x\Delta y$  s normálnou  $n = [0, 0, 1]$  je rovna

$$F_x = P_{xz}\Delta x\Delta y = (-2\eta\Lambda_{xz})\Delta x\Delta y = -\eta\frac{\partial u_x}{\partial z}\Delta x\Delta y. \quad (549)$$

Vidíme tedy, že síla působí opačným směrem, než je růst rychlosti. Poznamenejme také, že tensor deformace vystupuje v mechanice pevných látek, kdy ovšem uvažujeme vektor posunutí místo vektoru rychlosti, což odpovídá vynásobení vektoru deformace daného výše elementem  $\Delta t$ . Obecně můžeme říci, že deformace spojitého prostředí je výsledkem napětí, které na ně působí.

Důležitou vlastností transportních koeficientů je ta, že díky vztahům, kterými jsou definovány, dostáváme dodatečné rovnice, které slouží k uzavření momentových rovnic. Například, s pomocí (542) má momentová rovnice rychlosti  $v^i$  tvar

$$\begin{aligned} \rho \left( \frac{\partial}{\partial t} v^i + v^j \frac{\partial}{\partial x^j} v^i \right) + \frac{\partial}{\partial x^j} P^{ij} = \frac{\rho}{m} F^i \Rightarrow \\ \rho (\partial_t v^i + v^j \partial_j v^i) + \partial_i p - \eta \partial_j \partial^j v^i - \eta \partial_i \partial_j v^j - \left( \zeta + \frac{\eta}{3} \right) \partial_i \partial_j v^j = \frac{\rho}{m} F^i. \end{aligned} \quad (550)$$

Toto jsou tři rovnice pro pět neznámých  $v^i, \rho, p$ . Rovnice spjitosti spolu s další skalární rovnicí dělá z tohoto systému systém uzavřených rovnic. Další rovnicí myslíme rovnicí vyjadřující vztah mezi hustotou a tlakem. Touto rovnicí se budeme věnovat později při dalším výkladu hydrodynamiky.

### 3.9.2 Formulování transportních koeficientů

V této kapitole popíšeme, jak je možné najít transportní koeficienty. Uvažujme malý objem tekutiny v rovnováze s hustotou částic  $n$ . Zavedeme střední rychlost částic  $C$

$$\langle v^2 \rangle = C^2 . \quad (551)$$

Pro bodové částice ekvipartační teorém dává

$$\frac{1}{2}mC^2 = \frac{3}{2}k_B T . \quad (552)$$

Uvažujme střední tok částic  $\Gamma$  v libovolném ze šesti směrů (osa  $x, -x, y, -y, z, -z$ ) a v libovolném časovém okamžiku  $t$ . Nyní si představme, že máme válec o výšce  $C$  a jednotkové ploše. Protože střední rychlost částic je  $C$ , pak  $1/6$  částic v daném válci projde povrchem horní podstavy za sekundu. Jestliže si označíme tento směr jako  $z$ , dostaneme

$$\Gamma_z = \frac{1}{6}nC . \quad (553)$$

Dalším důležitým pojmem je střední volná dráha  $l$ . Implicitně předpokládáme, že k předávání hybností a energie mezi molekulami dochází pouze při srážkách. Například, dosažení rovnováhy hustoty částic je zprostředkováno srážkami, kdy částice z oblasti s větší hustotou jsou přenášeny do oblasti s menší hustotou. Jak my již víme, s pojmem srážek se váže pojem účinný průřez, kdy můžeme najít následující odhad

$$n\sigma l \simeq 1 , \quad (554)$$

který vyplývá z toho, že střední rovná dráha je nepřímo úměrná jak počtu částic  $n$ , tak účinnému průřezu.

Nyní můžeme přistoupit k odvození koeficientu vlastní difuze. Uvažujme, že máme částice jednoho druhu a dále, že zde existuje gradient hustoty  $n$  ve směru osy  $z$ . Pak tok částic, které se pohybují ve kladném směru osy  $z$  a které protnou rovinu  $z$ , je roven počtu částic, které se nacházejí v místě  $n - l$ . Na druhou stranu počet částic, které se pohybují v záporném směru osy  $z$  a které protnou rovinu  $z$ , je roven počtu částic v bodě  $z + l$ . Pak celkový tok částic v bodě  $z$  je roven

$$\Gamma_z = \Gamma_{z-l} - \Gamma_{z+l} , \quad (555)$$

což, s pomocí (553), dává

$$\begin{aligned}
 \Gamma_z &= \frac{1}{6}C[n(z-l) - n(z+l)] = \\
 &= \frac{2lC}{6} \left[ \frac{n(z-l) - n(z+l)}{2l} \right] = \\
 &= -\frac{1}{3}lC \frac{\partial n}{\partial z} .
 \end{aligned} \tag{556}$$

Na druhou stranu my víme, že tok částic v daném bodě  $z$  ve směru osy  $z$  je dán výrazem  $\Gamma_z = nv_z$  a tedy

$$nv_z = -\frac{1}{3}lC \frac{\partial n}{\partial z} . \tag{557}$$

Poznamenejme, že definice koeficientu difuze je dána výrazem

$$n\mathbf{v} = -D\nabla n \Rightarrow nv_z = -D \frac{\partial n}{\partial z} . \tag{558}$$

Pak porovnáním těchto dvou rovnic dostaneme hledaný výraz pro koeficient difuze

$$D = -\frac{1}{3}lC . \tag{559}$$

### Viskozita

Uvažujme tekutinu, která se pohybuje jedním směrem s rychlostním profilem

$$\mathbf{v} = [v_x(z), 0, 0] \tag{560}$$

Je zřejmé, že pro tuto konfiguraci máme nenulové následující komponentu  $P_{xz}$

$$P_{xz} = -S_{xz} = -\eta \frac{\partial v_x}{\partial z} . \tag{561}$$

Každá částice na ploše  $z-l$ , která se srazí a pohybuje se ve směru osy  $+z$ , unáší střední komponentu hybnosti ve směru osy  $x$  z oblasti  $z-l$ , to jest  $mv_x(z-l)$ . Tok těchto částic je roven

$$\Gamma_z = \frac{1}{6}nC . \tag{562}$$

Pak tedy střední hodnota  $x$ -komponenty toku hybnosti napříč rovinou  $z$  díky transportu částic ve směru osy  $z$  je rozdíl mezi kladným příspěvkem

$$\Gamma_p^+ = \frac{1}{6}n C m v_x(z-l) \quad (563)$$

a její ztrátou

$$\Gamma_p^- = \frac{1}{6}n C m v_x(z+l) . \quad (564)$$

Pak změna hybnosti na ploše  $z$  ve směru  $x$  je rovna

$$\begin{aligned} \Gamma_p^+ - \Gamma_p^- &= \\ &= \frac{1}{6}n C m 2l \left[ \frac{v_x(z-l) - v_x(z+l)}{2l} \right] = \\ &= -\frac{1}{3}\rho C l \frac{\partial v_x}{\partial z} . \end{aligned} \quad (565)$$

Tento rozdíl můžeme interpretovat jako sílu, působící ve směru osy  $x$  na ploše  $z$ , což je

$$P_{xz} = -\frac{1}{3}\rho C l \frac{\partial u_x}{\partial z} . \quad (566)$$

což nám dává klasický Maxwellův výsledek

$$\eta = \frac{1}{3}\rho C l . \quad (567)$$

### Termální konduktce

Stejným způsobem můžeme pokračovat s transportem kinetické energie. Uvažujme změnu kinetické energie  $\epsilon_K(z)$ . Pak stejným způsobem, jako v předchozí části, kdy definujeme

$$\Gamma_Q^+ = \frac{1}{6}n C \epsilon_K(z-l) , \Gamma_Q^- = \frac{1}{6}n C \epsilon_K(z+l) \quad (568)$$

dostaneme následující výraz pro změnu kinetické energie

$$\Gamma_Q^+ - \Gamma_Q^- = -\frac{1}{3}n C l \frac{\partial \epsilon_K}{\partial z} . \quad (569)$$



Jestliže si nyní uvědomíme, že máme vstah  $\epsilon_K = \epsilon + \frac{1}{2}\rho v^2$  a budeme předpokládat, že  $v$  a  $n$  nezávisí na  $z$ , pak máme  $\frac{\partial \epsilon_K}{\partial z} = \frac{\partial \epsilon}{\partial z}$  a tento rozdíl je roven toku tepla ve směru osy  $z$

$$Q_z = -\frac{1}{3}nCl\frac{\partial \epsilon}{\partial z} . \quad (570)$$

Nyní definujme  $c_V$  jako specifické teplo na jednu částici

$$c_v = \frac{\partial \epsilon}{\partial T} . \quad (571)$$

Pak dostaneme

$$Q_z = -\frac{1}{3}nCl\frac{\partial \epsilon}{\partial z} = -\frac{1}{3}nCl\frac{\partial \epsilon}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial z} = -\frac{1}{3}nClc_V\frac{\partial T}{\partial z} \quad (572)$$

a tedy

$$\kappa = \frac{1}{3}nClc_V . \quad (573)$$

### 3.10 Momentové rovnice a hydrodynamické rovnice- Pokračování

Jak jsme také ukázali, srážky implikují, že distribuční funkce se blíží rovnovážnému Maxwellovskému rozdělení s možnou nenulovou střední rychlostí. Nechť předpokládáme, že distribuční funkci ve tvaru

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = n(\mathbf{x}, t) \left( \frac{m}{2\pi k_B T(\mathbf{x}, t)} \right)^{3/2} \exp \left( -m \frac{(\mathbf{u} - \mathbf{v}(\mathbf{x}, t))^2}{2k_B T(\mathbf{x}, t)} \right) , \quad (574)$$

což je Maxwellovo rozdělení s lokálními středními hodnotami rychlosti, hustoty a teploty. Nechť pomocí této funkce vypočítáme  $P^{ij}(\mathbf{x}, t)$

$$\begin{aligned} P^{ij} &= m \int d^3\mathbf{u} (u^i - v^i)(u^j - v^j) f(\mathbf{u} - \mathbf{v}) = \\ &= mn(\mathbf{x}, t) \left( \frac{m}{2\pi k_B T(\mathbf{x}, t)} \right)^{3/2} \int d^3\mathbf{u} c^i c^j \exp \left( -\frac{mc^2}{2k_B T} \right) = p\delta^{ij} \end{aligned} \quad (575)$$

kde

$$p(\mathbf{x}, t) = n(\mathbf{x}, t)k_B T(\mathbf{x}, t)$$

je tlak kapaliny. Při odvozování tohoto vstahu jsme využili faktu, že

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x e^{-x^2} = 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-x^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}. \quad (576)$$

Stejným způsobem dostáváme

$$\epsilon = \frac{m}{2} \int d^3 \mathbf{u} c^2 f = \frac{3}{2} n k_B T. \quad (577)$$

a

$$Q^i = \frac{1}{2} \int d^3 \mathbf{u} c^i c^2 f = 0, \quad (578)$$

kde  $\epsilon$  je vnitřní energie pro jednočásticový plyn. Konečně

$$P^{ij} \Lambda_{ij} = p \delta^{ij} \Lambda_{ji} = p \frac{\partial v^i}{\partial x^i}. \quad (579)$$

Díky těmto předpokladům dostáváme momentové rovnice v nultém řádu

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) &= 0, \\ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} &= -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{m} \mathbf{F}, \\ \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \partial_i (v^i \epsilon) &= -p \nabla \cdot \mathbf{v} \end{aligned} \quad (580)$$

což je pět rovnic pro šest veličin  $\rho, \mathbf{v}, p$  a  $\epsilon$ . Na druhou stranu tři termodynamické veličiny mohou být vyjádřeny jako funkce hustoty částic a teploty, tedy

$$\rho = mn, \quad p = n k_B T, \quad \epsilon = \frac{3}{2} n k_B T. \quad (581)$$

Jinými slovy dostáváme, že číslo nezávislých rovnic je shodné s číslem nezávislých proměnných a tudíž tento systém je uzavřený a má formu dynamické teorie kapalin.

Na druhou stranu této dynamické teorii chybějí některé důležité vlastnosti jako teorii reálných tekutin.

- Protože  $Q^i = 0$  dostáváme, že neexistuje transport vnitřní energie. Jinými slovy řečeno, v této tekutině neexistuje konvence.

- Protože  $P^{ij}$  is diagonální, tato tekutina je charakterizována absencí viskozity.

Jinými slovy řečeno, v této formulaci dynamiky tekutin chybí vlastní popis transportních jevů.

Je vhodné si položit otázku, co je příčinou, že jsme nebyli schopni popsat tyto jevy vhodným způsobem. Ukazuje se, že lokální Maxwellova distribuce je příliš restriktivní. Jestliže zde existuje teplotní gradient, částice, které přicházejí na určité po směru gradientu mají určitě vyšší energii než částice, které sem přicházejí z opačného směru gradientu. Je jasné, že tyto transportní jevy jsou úzce svázány s opuštěním předpokladu Maxwellovo rozdělení.

## 3.11 Chapman-Enskogův Rozvoj

### 3.11.1 Kolizní frekvence

Srážkový integrál v Boltzmanově rovnici může být napsán ve tvaru

$$\hat{J}(f|f) = -f(\mathbf{u}) \int d^3\mathbf{u}_1 \int d\Omega \sigma |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| f(\mathbf{u}_1) + \int d^3\mathbf{u}_1 \int d\Omega |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| f' f'_1 \quad (582)$$

Uvažujme následující výraz

$$\nu(\mathbf{u}) = \int d^3\mathbf{u}_1 \int d\Omega \sigma |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| f(\mathbf{v}_1) . \quad (583)$$

Protože tento výraz je úměrný relativní rychlosti, účinnému průřezu a počtu nalétávajících částic daný funkcí  $f(\mathbf{u}_1)$  a následnou integrací přes  $\mathbf{u}_1$  a  $\Omega$  můžeme tento výraz interpretovat jako počet srážek s částicí o rychlosti  $\mathbf{u}$ , tedy můžeme ho nazvat *Kolizní frekvencí*.

Necht' napíšeme Boltzmanovu rovnici ve tvaru

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{F_i}{m} \frac{\partial f}{\partial u^i} + u^i \frac{\partial f}{\partial x^i} = \hat{I}f , \quad (584)$$

která nám definuje kolizní integrál-operátor  $\hat{I}$ . Protože  $\nu(\mathbf{v})$  je srážková frekvence, její fyzikální rozměr je  $s^{-1}$ , z čehož vyplývá, že oprátor  $\hat{I}$  ma tu samou fyzikální dimenzi. Pak je užitečné napsat operátor  $\hat{I}$  ve tvaru

$$\hat{I} = \nu_0 \tilde{\hat{I}} \quad (585)$$

kde  $\tilde{I}$  je nyní bezrozměrný operátor a kde  $\nu_0$  je konstanta o fyzikálním rozměru  $s^{-1}$ . Pomocí této terminologie dostáváme Boltzmanovu rovnici ve tvaru

$$\frac{Df}{Dt} = \nu_0 \tilde{I} f . \quad (586)$$

Chapman-Enskogův rozvoj může být proveden v oblasti s velkými srážkovými frekvencemi, což ekvivalentně znamená v oblastech s malou střední volnou dráhou. Explicitně, jestliže  $C$  je střední termální rychlost částic, pak jeřejmé, že tato rychlost je dána jako podíl střední volné dráhy a doby mezi dvěma srážkami, což je převrácená hodnota srážkové frekvence, a tedy

$$C \simeq lv . \quad (587)$$

První krok k provedení této expanse je napsat Boltzmanovu rovnici ve tvaru

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \hat{\mathcal{D}} \right) f = \frac{1}{\epsilon} \hat{I} f , \quad (588)$$

kde

$$\mathcal{D} = \mathbf{u} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} , \quad (589)$$

a kde předpokládáme bezrozměrný malý parametr  $\epsilon \ll 1$ , kde si ale musíme uvědomit, že tento parametr byl zaveden pro korektně definovaný rozvoj s tím, že by měl být položen jedné na závěr této analýzy.

Ve druhém kroku Champman-Enskogově rozvoji provedeme následující rozvoj

$$f = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots . \quad (590)$$

Normalizujeme funkci  $f$  takovým způsobem, aby splňovala

$$\begin{aligned} n(\mathbf{x}, t) &= \int d^3 \mathbf{u} f , & n(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) &= \int d^3 \mathbf{u} \mathbf{u} f , \\ \frac{3}{2} n(\mathbf{x}, t) k_B T(\mathbf{x}, t) &= \int d^3 \mathbf{u} \frac{m}{2} (\mathbf{u} - \mathbf{v})^2 f . \end{aligned} \quad (591)$$

V Chapman-Eskogově rozvoji předpokládáme, že  $(n, \mathbf{v}, T)$  jsou veličiny 0(1) řádu v expansi podle parametru  $\epsilon$  a tedy jsou dány  $f^{(0)}$ , zatím co členy v

rozvoji vyšších řádu,  $f^{(i)}, i > 0$  odpovídají vyšším momentům v  $Q^i$  a v  $P^{ij}$

$$\begin{aligned}
n(\mathbf{x}, t) &= \int d^3\mathbf{u} f^{(0)}, \quad n(\mathbf{x}, t)\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \int d^3\mathbf{u}\mathbf{u} f^{(0)}, \\
\frac{3}{2}n(\mathbf{x}, t)k_B T(\mathbf{x}, t) &= \int d^3\mathbf{u} \frac{m}{2}(\mathbf{u} - \mathbf{v})^2 f^{(0)}, \\
&\int d^3\mathbf{u} f^{(i)} = \int d^3\mathbf{u} f^{(i)} \mathbf{c} = \int d^3\mathbf{u} f^{(i)} c^2 = 0, \\
Q_i &= \sum_l \epsilon^l Q_i^{(l)} = \frac{1}{2} \sum_l \epsilon^l \int d^3\mathbf{u} m(u - v)_i (\mathbf{u} - \mathbf{v})^2 f^{(i)}, \\
P_{ij} &= \sum_l \epsilon^l P_{ij}^{(l)} = \sum_l \epsilon^l \int d^3\mathbf{u} m(u - v)_i (u - v)_j f^{(l)}.
\end{aligned} \tag{592}$$

Jako další krok přistoupíme k rozvoji  $\mathcal{D}$  a kolizního integrálu  $\hat{J}$

$$\hat{\mathcal{D}}f = \hat{\mathcal{D}}f^{(0)} + \epsilon \hat{\mathcal{D}}f^{(1)} + \dots \tag{593}$$

a pro srážkový integrál

$$\hat{J}(f|f) = \hat{J}\left(\sum_{l=0}^{\infty} \epsilon^l f^{(l)} \middle| \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n f^{(n)}\right) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^{l+n} \hat{J}(f^{(l)}|f^{(n)}). \tag{594}$$

Ukazuje se, že je vhodné zavést tzv. uspořádaný operátor

$$\hat{J}^{(s)}(f^{(0)}, f^{(1)}, \dots, f^{(s)}) = \sum_n \sum_{l, n+l=s} \hat{J}(f^{(l)}|f^{(n)}). \tag{595}$$

Pomocí této veličiny můžeme přepsat (594) do tvaru

$$\begin{aligned}
\hat{J}(f, f) &= \hat{J}(f^{(0)}|f^{(0)}) + \epsilon \hat{J}^{(1)}(f^{(0)}|f^{(1)}) + \\
&+ \hat{J}^{(2)}(f^{(0)}, f^{(1)}, f^{(2)}) + \dots,
\end{aligned} \tag{596}$$

Například

$$\hat{J}^{(1)}(f^{(0)}, f^{(1)}) = \hat{J}(f^{(0)}|f^{(1)}) + \hat{J}(f^{(1)}|f^{(0)}). \tag{597}$$

### 3.11.2 Rozvoj časové derivace

Další krok v Chapman-Enskogově rozvoji se týká časové derivace, která vystupuje v Boltzmanově rovnici. Budeme předpokládat, že časová závislost rozdělovací funkce závisí pouze díky hydrodynamickým rovnic  $n(\mathbf{x}, t)$ ,  $\mathbf{v}(\mathbf{x}, T)$  a  $T(\mathbf{x}, t)$ , tak že

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (598)$$

Jako další krok provedeme časovou derivaci

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial_0}{\partial t} + \epsilon \frac{\partial_1}{\partial t} + \epsilon^2 \frac{\partial_2}{\partial t} + \dots, \quad (599)$$

kteřá má následující fyzikální význam. Vydeme z momentových rovnic

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v^i)}{\partial x^i} &= 0, \\ \frac{\partial v^i}{\partial t} + v^j \frac{\partial v^i}{\partial x^j} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P^{ij}}{\partial x^j} + \frac{F^i}{m}, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\epsilon) + \frac{\partial}{\partial x^i}(\epsilon v^i) + \frac{\partial Q^i}{\partial x^i} + P^{ij} \Lambda_{ij} &= 0. \end{aligned} \quad (600)$$

Na pravé straně těchto rovnic vystupují makroskopické proměnné, které jsou získány středováním přes distribuční funkci. Protože tato distribuční funkce je také dána rozvojem distribuční funkce, dostáváme obecné vstahy

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} &= \Phi_n(n, \mathbf{v}, T) = \sum_l \epsilon^l \Phi_n^{(l)}(n, \mathbf{v}, T), \\ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} &= \Phi_{\mathbf{v}}(n, \mathbf{v}, T) = \sum_l \epsilon^l \Phi_{\mathbf{v}}^{(l)}(n, \mathbf{v}, T), \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= \Phi_T(n, \mathbf{v}, T) = \sum_l \epsilon^l \Phi_T^{(l)}(n, \mathbf{v}, T). \end{aligned} \quad (601)$$

Pak dostáváme

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial t} &= \frac{\partial f}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} = \\
&= \frac{\partial f}{\partial n} \sum_l \epsilon^l \Phi_n^{(l)} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \cdot \sum_l \epsilon^l \Phi_{\mathbf{v}}^{(l)} + \frac{\partial f}{\partial T} \sum_l \epsilon^l \Phi_T^{(l)} \equiv \\
&\equiv \sum_l \epsilon^l \frac{\partial_l}{\partial t}, \quad \frac{\partial_l}{\partial t} \equiv \frac{\partial}{\partial n} \Phi_n^{(l)} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \Phi_{\mathbf{v}}^{(l)} + \frac{\partial}{\partial T} \Phi_T^{(l)}.
\end{aligned} \tag{602}$$

Jestliže použijeme tyto rozvoje pro  $f$ ,  $\frac{\partial f}{\partial t}$ ,  $\hat{\mathcal{D}}f$  a  $\hat{J}(f|f)$  do Boltzmanovy rovnice a dostaneme

$$\begin{aligned}
\left( \frac{\partial}{\partial t} + \hat{\mathcal{D}} \right) f &= \frac{1}{\epsilon} \hat{J}(f|f) \Rightarrow \\
\epsilon \left[ \left( \frac{\partial_0}{\partial t} + \epsilon \frac{\partial_1}{\partial t} + \dots \right) (f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \dots) + (\hat{\mathcal{D}}f^{(0)} + \epsilon \hat{\mathcal{D}}f^{(1)} + \dots) \right] &+ \\
+ \left[ \hat{J}^{(0)}(f^{(0)}|f^{(0)}) + \epsilon \hat{J}^{(1)}(f^{(0)}|f^{(1)}) + \dots \right] &
\end{aligned} \tag{603}$$

Porovnáním koeficientů stejného řádu parametru  $\epsilon$  dostáváme

$$\begin{aligned}
0 &= \hat{J}^{(0)}(f^{(0)}|f^{(0)}), \\
\left( \frac{\partial_0}{\partial t} + \hat{\mathcal{D}} \right) f^{(0)} &= \hat{J}^{(1)}(f^{(0)}, f^{(1)}), \\
\left( \frac{\partial_0}{\partial t} + \hat{\mathcal{D}} \right) f^{(1)} + \frac{\partial_1}{\partial t} f^{(0)} &= \hat{J}^{(2)}(f^{(0)}, f^{(1)}, f^{(2)}),
\end{aligned} \tag{604}$$

Vidíme, že rovnice nultého řádu má formu

$$\hat{J}(f^{(0)}|f^{(0)}) = 0. \tag{605}$$

Jak jsme již uvedli v předchozích kapitolách, řešením této rovnice je lokální Maxwellovské rozdělovací funkce, která může být definována pomocí následujících momentů

$$n = \int d^3 \mathbf{u} f^{(0)}, \quad \mathbf{v} = \frac{1}{n} \int d^3 \mathbf{u} \mathbf{u} f^{(0)}, \quad T = \frac{m}{3nk_B} \int d^3 \mathbf{u} c^2 f^{(0)}. \tag{606}$$

Explicitně, tato funkce má tvar

$$f^{(0)}(\mathbf{x}, t) = n(\mathbf{x}, t) \left( \frac{m}{2\pi k_B T(\mathbf{x}, t)} \right)^{3/2} \exp \left[ -\frac{m(\mathbf{u} - \mathbf{v}(\mathbf{x}, t))^2}{2k_B T(\mathbf{x}, t)} \right]. \quad (607)$$

Pomocí této rozdělovací funkce můžeme vypočítat teplotní kondukcí  $Q^i$  a tensor  $P^{ij}$ , které jsou definovány jako

$$\begin{aligned} Q^i &= \frac{m}{2} \int d^3\mathbf{u} c^2 c^i f, \\ P^{ij} &= m \int d^3\mathbf{u} c^i c^j f \end{aligned} \quad (608)$$

a tedy pro  $f^{(0)}$  dostaneme

$$\begin{aligned} (Q^{(0)})^i &= 0, \\ (P^{(0)})^{ij} &= nk_B T \delta^{ij} = p \delta^{ij}. \end{aligned} \quad (609)$$

Vložením těchto výrazů do momentových rovnic dostaneme Eulerovy rovnice

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} + \nabla(n\mathbf{u}) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla + \frac{1}{\rho} \nabla p &= \frac{1}{m} \mathbf{F}, \\ \left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) \left( \frac{p}{n^{5/3}} \right) &= 0 \end{aligned} \quad (610)$$

Řešením těchto rovnic dostaneme explicitní veličiny  $n = n(\mathbf{x}, t)$ ,  $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$  a  $T = T(\mathbf{x}, t)$  které, po vložení do (607) kompletně určují  $f^{(0)}$ .

Každá následující iterace v Chapman-Enskogově rozvoji vede k více podrobnější skupině hydrodynamických rovnic, které více a více započítávají prostorové fluktuace v tektutině. Iterace nultého řádu dávají Eulerovy rovnice. Rovnice, které vzniknou pomocí iterací prvního řádu, vedou k *Navier-Stokesovým rovnicím*. Iterace druhého řádu dávají *Burnettovy rovnice*.



### 3.11.3 Řešení prvního řádu

Toto řešení odpovídá druhé rovnici v (604)

$$\left(\frac{\partial_0}{\partial t} + \hat{\mathcal{D}}\right) f^{(0)} = \hat{J}^{(1)}(f^{(0)}, f^{(1)}) \quad (611)$$

Zavedeme funkci  $\Phi$  následujícím způsobem

$$f^{(1)} = \Phi f^{(0)} . \quad (612)$$

Pak dostáváme

$$\begin{aligned} \hat{J}^{(1)}(f^{(0)}, f^{(1)}) &= \hat{J}(f^{(0)}|f^{(1)}) + \hat{J}(f^{(1)}|f^{(0)}) = \\ &= \int d\mathbf{u}_1 \int d\Omega\sigma |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| (\Phi' f'^{(0)} f_1^{(0)} - f^{(0)} f_1^{(0)} \Phi) + \\ &+ \int d\mathbf{u}_1 \int d\Omega\sigma |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| (f'^{(0)} \Phi'_1 f'^{(0)} - \Phi f^{(0)} f_1^{(0)}) = \\ &= \int d\mathbf{u}_1 \int d\Omega\sigma |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1| f^{(0)} f_1^{(0)} (\Phi' + \Phi'_1 - \Phi_1 - \Phi) \end{aligned} \quad (613)$$

kde jsme použili  $f'^{(0)} f_1^{(0)} = f^{(0)} f_1^{(0)}$  jako důsledek statistické rovnováhy. Pak můžeme definovat operátor  $\hat{\square}$  jako

$$\begin{aligned} \hat{\square}\Phi &\equiv \frac{1}{f^{(0)}} \hat{J}^{(1)}(f^{(0)}, f^{(0)}\Phi) = \\ &= \int d\mathbf{u}_1 \int d\Omega\sigma |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| f^{(0)}(\mathbf{u}_1) [\Phi'_1 + \Phi' - \Phi_1 - \Phi] \end{aligned} \quad (614)$$

Poté rovnice (611) může být přepsána do tvaru

$$\frac{1}{f^{(0)}} \left(\frac{\partial_0}{\partial t} + \hat{\mathcal{D}}\right) f^{(0)} = \hat{\square}\Phi . \quad (615)$$

Vidíme, že  $\hat{\square}$  je lineární operátor, jak vyplývá z jeho definice. Dále díky explicitní formě lokálního Maxwellovského rozdělení dostáváme následující

výrazy, které vystupují na levé straně rovnice (615)

$$\begin{aligned}\frac{1}{f^{(0)}} \frac{\partial_0 f^{(0)}}{\partial t} &= \left[ \frac{1}{n} \frac{\partial_0 n}{\partial t} + 2\xi^i \frac{\partial v^i}{\partial t} + \left( \xi^2 - \frac{3}{2} \right) \frac{1}{T} \frac{\partial_0 T}{\partial t} \right], \\ \frac{1}{f^{(0)}} \mathbf{u} \cdot \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \mathbf{x}} &= \mathbf{u} \cdot \left[ \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{x}} + 2\xi^i \frac{\partial v^i}{\partial \mathbf{x}} + \left( \xi^2 - \frac{3}{2} \right) \frac{1}{t} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \right],\end{aligned}\quad (616)$$

kde

$$\xi^2 \equiv \frac{m(\mathbf{u} - \mathbf{v})^2}{2k_B T}. \quad (617)$$

Poté s použitím rovnic, které vyjadřují časové derivace  $n$  a  $T$  dostáváme následující rovnici pro  $\Phi$

$$\sqrt{\frac{2k_B T}{m}} \left( \xi^2 - \frac{5}{2} \right) \xi^i \partial_i \ln T + 2 \left( \xi^i \xi^j - \frac{1}{3} \xi^2 \delta^{ij} \right) \partial_i v_j = \hat{\square} \Phi \quad (618)$$

což je lineární nehomogenní integrální rovnice pro distribuci  $\Phi$ . Jestliže budeme tuto rovnici řešit vzhledem k  $\Phi$ , dostaneme

$$f = f^{(0)}(1 + \Phi). \quad (619)$$

Obecné řešení rovnice (618) je lineární kombinací homogenní  $\Phi_h$  a nehomogenního  $\Phi_i$  řešení, kde

$$\hat{\square} \Phi_h = 0 \quad (620)$$

a kde  $\Phi_i$  je partikulární řešení (618).

Když budeme blíže zkoumat strukturu operátoru  $\hat{\square}$  vidíme, že jeho řešením může být dáno jako lineární kombinací srážkových integrálů

$$\Phi_h = \alpha + \beta^i m(u^i - v^i) + \frac{1}{2} \gamma m(u^i - v^i)(u_i - v_i). \quad (621)$$

kde  $\alpha, \beta, \gamma$  jsou libovolné konstanty. Abychom našli partikulární řešení rovnice (618) uvažme, že její levá strana má tvar

$$X^i(\xi) \left( \frac{2k_B T}{m} \right)^{1/2} \partial_i \ln T + \mathbf{Y}^{ij}(\xi) \partial_i v_j. \quad (622)$$

Protože  $\hat{\square}$  je lineární operátor a  $\Phi$  je skalární funkce, předchozí výraz indukuje, že bychom měli hledat partikulární řešení ve formě

$$\Phi_i = \sqrt{\frac{2\pi k_B}{m}} T A^i \partial_i \ln T + 2B^{ij}(\xi) \partial_i v_j . \quad (623)$$

Jinými slovy, abychom našli nehomogenní řešení, musíme najít vektorovou funkci  $A^i$  a tensorovou funkci  $B^{ij}$ . Pak, vložením předpokládané řešení (623) a porovnáním různých koeficientů, které se vyskytují u  $\nabla \ln T$  a  $\partial_i v_j$  dostáváme následující rovnice pro  $A^i$  a pro  $B^{ij}$

$$\begin{aligned} \hat{\square} A^i &= \xi^i \left( \xi^2 - \frac{5}{2} \right) , \\ \hat{\square} B^{ij} &= \left( \xi^i \xi^j - \frac{1}{3} \xi^2 \delta^{ij} \right) . \end{aligned} \quad (624)$$

Víme, že jediné proměnné, které vystupují v  $A^i$  jsou  $\xi^i, n$  a  $T$ . Pak je jasné, že jediný vektor, který může být vytvořen z těchto proměnných, je samotný vektor  $\xi$ . Pak tedy budeme předpokládat, že

$$A^i = A(\xi^2) \xi^i . \quad (625)$$

Stejným způsobem můžeme argumentovat, že tensor  $B^{ij}$  má tvar

$$B^{ij} = B(\xi^2) \left( \xi^i \xi^j - \frac{1}{3} \delta^{ij} \xi^2 \right) \quad (626)$$

Pak jasně dostaneme, že tyto funkce splňují integrálně diferenciální rovnice

$$\begin{aligned} \hat{\square}(\xi^i A) &= \xi^i \left( \xi^2 - \frac{5}{2} \right) , \\ \hat{\square} \left( B(\xi^2) \left( \xi^i \xi^j - \frac{1}{3} \delta^{ij} \xi^2 \right) \right) &= \left( \xi^i \xi^j - \frac{1}{3} \xi^2 \delta^{ij} \right) . \end{aligned} \quad (627)$$

Když se nyní vrátíme k homogennímu řešení vidíme, že konstanty  $\alpha, \beta$  a  $\gamma$  jsou určeny podmínkami (592). Jinými slovy, jestliže vložíme

$$f^{(1)} = f^{(0)}(\Phi_h + \Phi_i) \quad (628)$$

do těchto podmínek, dostaneme

$$\begin{aligned} \int d^3\mathbf{u} f^{(0)}(\alpha + \gamma \frac{1}{2} mc^2) &= 0, \\ \int d^3\mathbf{u} f^{(0)}[A(\xi^2) \partial_i \ln T + m\beta^i] mc^2 &= 0, \\ \int d^3\mathbf{u} f^{(0)}(\alpha + \frac{1}{2} mc^2 \gamma) \frac{1}{2} mc^2 &= 0. \end{aligned} \tag{629}$$

Pak je zřejmé, že první rovnice v (629) dává

$$\alpha = \gamma = 0 \tag{630}$$

zatím co druhá rovnice říká, že  $\beta^i$  je úměrné  $\partial_i \ln T$  a tedy může být zahrnuto do členu  $\partial_i \ln T$ .

Pak je možné ukázat, že celkové řešení Boltzmanovy rovnice do prvního řádu má tvar

$$\begin{aligned} f &= f^{(0)}[1 + \sqrt{\frac{2k_B T}{m}} A^i \partial_i \ln T + 2B^{ij} \partial_i v_j] = \\ &= f^{(0)}[1 + \sqrt{\frac{2k_B T}{m}} A(\xi) \xi_i^\partial \ln T + 2B(\xi) \left( \xi^i \xi^j - \frac{1}{3} \xi^2 \delta^{ij} \right) \partial_i v_j]. \end{aligned} \tag{631}$$

kde  $A(\xi), B(\xi)$  jsou řešením rovnic (627).

### 3.11.4 Termální konduktce a tensor napětí

S pomocí řešení Boltzmanovy rovnice do prvního řádu je možné určit odpovídající nenulové příspěvky ve vektoru teplotní konduktce  $Q^i$  a  $P^{ij}$ . Tyto příspěvky dostaneme, když vložíme řešení Boltzmanovy rovnice do jejich definice a uvážíme, že lokální Maxwellovo rozdělení dává nulový příspěvek

$$\begin{aligned} Q^i &= \frac{1}{2} m \sqrt{\frac{2k_B T}{m}} \int d^3\mathbf{u} c^2 c^i f = 0 + q^{i(1)}, \\ P^{ij} &= 2k_B T \int d^3\mathbf{u} \xi^i \xi^j f = \delta^{ij} p - P^{ij(1)}, \quad \xi^i = \frac{m}{2k_B T} (u - v)^i. \end{aligned} \tag{632}$$

S použitím řešení Boltzmanovy rovnice do prvního řádu dostáváme

$$Q^i = \left( \frac{2 k_B^2 T}{3 m} \int d^3 \mathbf{u} f^0 \xi^4 A^{\hat{\kappa}} A_i \right) \nabla T \quad (633)$$

a tedy dostáváme následující výsledek pro koeficient termální konduktivity

$$\kappa = -\frac{2 k_B^2 T}{3 m} \int d^3 \mathbf{u} f^0 \xi^4 A^{\hat{\kappa}} A_i . \quad (634)$$

Stejným způsobem postupujeme v případě tensoru napětí, kde dostáváme

$$P^{ij} = \frac{4 k_B}{5} \left( \Lambda^{ij} - \frac{1}{3} \delta^{ij} \partial_i v^i \right) \int d^3 \mathbf{u} f^{(0)} B^{ij} \hat{\square} B_{ij} . \quad (635)$$

Když tedy definujeme koeficient napětí následujícím způsobem

$$P^{ij} = -2\eta \left( \Lambda^{ij} - \frac{1}{3} \delta^{ij} \partial_i v^i \right) \quad (636)$$

pak porovnáním s (721) dostaneme

$$\eta = -\frac{2}{4} k_B T \int d^3 \mathbf{u} f^0 B^{i\hat{\kappa}} B_{ij} . \quad (637)$$

Vidíme, že transportní koeficienty závisejí na integrálech před vazebný operátor  $\hat{\square}$ . Tyto výpočty jsou ve své podstatě velmi komplikované a požadují další matematické znalosti. Například, pro částice, které nemají žádnou vnitřní strukturu, dostáváme

$$\kappa = -\frac{75 k_B^2 T n^2}{8 m A_{11}} , \quad (638)$$

kde  $A_{11}$  závisí na detailním popisu interakcí mezi částicemi. Na druhou stranu se ukazuje, že explicitní tvar tohoto parametru může být napsán ve formě integrace přes rozptylové parametry, kde pak dostáváme

$$A_{11} = -4n^2 \Omega^{2,2} \quad (639)$$

kde v případě jednodimenzionálního plynu

$$\Omega^{(l,q)} = \sqrt{\frac{4\pi k_B T}{m}} \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-y^2} y^{2q+3} (1 - \cos^l \theta) s ds dy . \quad (640)$$

Stejným způsobem budeme postupovat v případě koeficientu napětí a dostáváme

$$\eta = -\frac{5 k_B T n^2}{2 B_{11}} , \quad (641)$$

kde se dá ukázat, že

$$B_{11} = -4n^2 \Omega^{(2,2)} . \quad (642)$$

### 3.11.5 Srážkový integrál v prvním přiblížení-Alternativní postup

Začneme s následujícím zobecněním rozdělovací funkce

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = f^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) + g(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) , \quad (643)$$

kde  $g$  je malá porucha. Nyní uvažuje srážkový integrál

$$\mathcal{C}[f] = \int d^3\mathbf{u}_1 \int d\Omega |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| \sigma(\Omega) (f'_1 f'_1 - f f_1) . \quad (644)$$

Protože víme, že  $g$  je malá porucha, je přirozené předpokládat, že srážkový integrál závisí na této poruše pouze lineárně. Budeme tedy předpokládat, že distribuční funkce, přes které provádíme integraci  $(f', f'_1, f_1)$  mohou být reprezentovány lokálním Maxwellovským rozdělením  $f^{(0)'}, f_1^{(0)'}, f_1^{(0)}$ . Dále využijeme vlastnosti, že pro Maxwellovské rozdělení platí  $f^{(0)'}, f_1^{(0)'}$  která vyplývá z exponenciální formy Maxwellovské rozdělovací funkce a ze zákona zachování energie, který platí v dvou částicových srážkách. Pak dostáváme

$$\begin{aligned} \mathcal{C}[f] &\approx \int d^3\mathbf{u}_1 \int d\Omega |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| \sigma(\Omega) (f^{(0)} f_1^{(0)} - f f_1^{(0)}) = \\ &= (f^{(0)} - f) \int d^3\mathbf{u}_1 \int d\Omega |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| \sigma(\Omega) f_1^{(0)} = \\ &= -g(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \int d\Omega \sigma(\Omega) \int d^3\mathbf{u}_1 |\mathbf{u}_{rel}| f^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{u}_1, t) = \\ &= -\sigma_{tot} n \langle \mathbf{u}_{rel} \rangle g(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) , \end{aligned} \quad (645)$$

kde  $\langle \mathbf{u}_{rel} \rangle$  ( $|\mathbf{u}|, T$ ) je střední relativní rychlost mezi srážejícími se částicemi a tedy  $\langle |\mathbf{u}_{rel}| \rangle n \sigma_{tot}$  udává střední srážkovou změnu částic o rychlosti  $|\mathbf{u}|$ .

Výsledkem dostáváme

$$\mathcal{C}[f] = -\sigma_{tot} n \langle \mathbf{u}_{rel} \rangle (f - f^{(0)}) . \quad (646)$$

Tento výsledek vedl (Bhatnagara, Grosse a Krooka) v roce 1954 k formulování tzv. BGK rovnice, která popisuje systém, jenž není příliš daleko od lokální termodynamické rovnováhy reprezentované lokální Maxwellovskou rozdělovací funkcí  $f^{(0)}$  a srážky způsobují jeho návrat do této rovnováhy. Tato rovnice má tvar

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{u}} = -\frac{f - f^{(0)}}{\tau} , \quad (647)$$

kde  $\tau$  je tzv. relaxační doba. Abychom našli fyzikální význam  $f$ , uvažujme distribuční funkci  $f$ , která závisí pouze na čase. Pak (647) dává

$$\frac{df}{dt} = -\frac{f - f^{(0)}}{\tau} \quad (648)$$

Je jednoduché najít řešení této rovnice a dostáváme

$$f - f^{(0)} = Ke^{-\frac{t}{\tau}}, \quad (649)$$

kde  $K$  je integrační konstanta. Vidíme, že distribuční funkce se blíží Maxwellovské distribuční funkci v limitě  $t \rightarrow \infty$ . Z této rovnice je také jasný význam relaxační doby  $\tau$ , která může být interpretována jako parametr dané teorie.

Ukážeme, že transportní jevy mohou být kvalitativně popsány pomocí BKG rovnice, ale s omezením, že hodnoty transportních koeficientů nejsou exatní. Důvod, proč tomu tak je, je ten, že Boltzmannův srážkový integrál ve skutečnosti závisí na  $1/\tau \propto \langle |\mathbf{u}_{rel}| \rangle$ , což je funkcí  $\mathbf{u}$  a tudíž není konstantní. Na druhou stranu, i když hodnoty transportních koeficientů nejsou zcela přesné, tento model poskytuje jasné schéma a postup, jak mohou být tyto transportní koeficienty určeny.

### 3.11.6 Odklon od Maxwellovského rozdělení

Jako první krok určíme jak velký je odklon daného rozdělení od Maxwellovského. Pak KGB rovnice dává

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \nabla f &= -\frac{f - f^{(0)}}{\tau} \Rightarrow \frac{|\mathbf{u}|f^{(0)}}{L} \approx \frac{|g|}{\tau} \Rightarrow \\ |g| &\approx \frac{|\mathbf{u}|\tau}{L} f^{(0)} \approx \frac{\lambda}{L} f^{(0)}, \end{aligned} \quad (650)$$

kde  $L$  je charakteristická škála, na které se mění daný systém, a kde  $\lambda$  je střední dráha mezi srážkami. Vidíme, že modifikace Maxwellovského rozdělení bude malá za předpokladu, když střední volná dráha mezi srážkami je mnohem menší než škála změny daného systému. Když zavedeme parametr  $\alpha$  jako

$$\alpha = \frac{\lambda}{L} \quad (651)$$

můžeme psát rozdělovací funkci  $f$  ve formě Taylorovy řady podle parametru  $\alpha$

$$f = f^{(0)} + \alpha f^{(1)} + \alpha^2 f^{(2)} + \dots \quad (652)$$

kde  $f^{(i)}$  jsou veličiny, které nezávisí na parametru  $\alpha$  a tedy stejného řádu. Jestliže vložíme tento rozvoj do BKG rovnice dostaneme rekurzivní relaci pro každý příspěvek  $f^{(i)}$ . Například v prvním řádu dostáváme

$$g \equiv \alpha f^{(1)} = -\tau \left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \right) f^{(0)}. \quad (653)$$

Poznamenejme, že rozdělovací funkce  $f^{(0)}$  má tvar

$$f^{(0)} = n(\mathbf{x}, t) \left( \frac{m}{2\pi k_B T(\mathbf{x}, t)} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{m(\mathbf{u} - \mathbf{v})^2}{2k_B T(\mathbf{x}, t)} \right) \quad (654)$$

a tedy

$$\begin{aligned} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial t} &= \frac{\partial n}{\partial t} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial n} + \frac{\partial T}{\partial t} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T} + \frac{\partial v^i}{\partial t} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial v^i}, \\ u^i \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x^i} &= u^i \frac{\partial n}{\partial x^i} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial n} + u^i \frac{\partial T}{\partial x^i} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial T} + u^i \frac{\partial v^j}{\partial x^i} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial v^j} \end{aligned} \quad (655)$$

a s použitím (654) dostáváme

$$\begin{aligned} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial t} &= \left( \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial t} + \left( -\frac{3}{2}T + \frac{m}{2k_B T^2} c^2 \right) \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial v^i}{\partial t} \frac{m c_i}{k_B T} \right) f^{(0)}, \\ u^i \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x^i} &= \left( \frac{1}{n} u^i \frac{\partial n}{\partial x^i} + u^i \left( -\frac{3}{2}T + \frac{m}{2k_B T^2} c^2 \right) \frac{\partial T}{\partial x^i} + u^j \frac{\partial v^i}{\partial x^j} \frac{m c_i}{k_B T} \right) f^{(0)}. \end{aligned} \quad (656)$$

Dosadíme tyto pomocné výpočty do rovnice (653) dostaneme explicitní formu poruchy rozdělovací funkce ve tvaru

$$g = -\tau \left[ \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x^i} c^i \left( \frac{m}{2k_B T} c^2 - \frac{5}{2} \right) + \frac{m}{k_B T} \Lambda_{ij} \left( c^i c^j - \frac{1}{3} \delta^{ij} c^2 \right) \right] f^{(0)} \quad (657)$$

kde

$$c^i = u^i - v^i. \quad (658)$$



### 3.11.7 Teplotní tok

Naším cílem je vypočítat momenty pomocí funkce  $f = f^{(0)} + g$ , kde

$$n = \int d^3\mathbf{u}f, \quad n\mathbf{v} = \int d^3\mathbf{u}\mathbf{v}f, \quad 3nk_B T = m \int d^3\mathbf{u}u^2 f, \quad (659)$$

a také  $q^i, P_{ij}$ . V případě  $q^i$  dostáváme

$$\begin{aligned} q^i &= \frac{m}{2} \int d^3\mathbf{u}c^i c^2 g = \\ &= -\tau \frac{m}{2} \frac{\partial T}{\partial x^i} \int d^3\mathbf{u}c_i^2 c^2 \left( \frac{m}{2k_B T} c^2 - \frac{5}{2} \right) f^{(0)}. \end{aligned} \quad (660)$$

Protože tento integrál má stejnou hodnotu pro všechna  $i = 1, 2, 3$ , můžeme ho nahradit jednou třetinou sumy přes  $i$ . Pak dostaneme

$$q^i = -K \partial_i T, \quad (661)$$

kde

$$K = \frac{\tau m}{6T} \int d^3\mathbf{u}c^4 \left( \frac{m}{2k_B T} c^2 - \frac{5}{2} \right) f^{(0)}. \quad (662)$$

Tento integrál může být explicitně zintegrován a dostáváme

$$K = \frac{5}{2} \tau n \frac{k_B^2 T}{m}, \quad (663)$$

což je koeficient termální kondukce. Jinými slovy odvodili jsme pomocí mikroskopické fyziky Fourierův zákon teplotní kondukce.

### 3.11.8 P tensor

Uvažujme tensor  $P^{ij}$ , který je definován jako

$$P^{ij} = m \int d^3\mathbf{u}c^i c^j f = nk_B T \delta^{ij} + \pi^{ij}, \quad (664)$$

kde

$$\begin{aligned} \pi^{ij} &= m \int d^3\mathbf{u}c^i c^j g = \\ &= -\tau \frac{m^2}{k_B T} \Lambda^{kl} \int d^3\mathbf{u}c^i c^j (c_k c_l - \frac{1}{3} \delta_{kl} c^2) f^{(0)}. \end{aligned} \quad (665)$$

Vidíme, že  $\pi^{ii} = 0$ , jež vyplývá ze skutečnosti, že integrand je lichý pro  $i \neq j$ , zatím co pro  $k = j$  integrand výrazu v závorce je roven nule. Protože je tento tensor lineární funkcí  $\Lambda_{ij}$ , můžeme psát

$$\pi_{ij} = -2\mu(\Lambda_{ij} - \frac{1}{3}\text{Tr}\Lambda) = -2\mu \left( \Lambda_{ij} - \frac{1}{3} \frac{\partial v^i}{\partial x^i} \right). \quad (666)$$

Vidíme, že tedy platí  $\pi_{ij}\delta^{ji} = -2\mu(\Lambda_{ij}\delta^{ji} - \Lambda_{ij}\delta^{ji}) = 0$ . Koeficient  $-2\mu$  můžeme vypočítat například z tohoto výrazu

$$\begin{aligned} \pi_{12} &= -2\mu\Lambda_{12} = -\frac{\tau m^2}{\kappa_B T} \Lambda^{kl} \int d^3\mathbf{u} c_1 c_2 \left( c_k c_l - \frac{1}{3} \delta_{kl} c^2 \right) f^{(0)} = \\ &= -\frac{\tau m^2}{\kappa_B T} (\Lambda_{12} + \Lambda_{21}) \int d^3\mathbf{u} c_1^2 c_2^2 f^{(0)} = -2\Lambda_{12} \tau n \kappa_B T \end{aligned} \quad (667)$$

což dává

$$\mu = \tau n \kappa_B T. \quad (668)$$

### 3.11.9 Momemtové rovnice prvního řádu

Když nyní vyjádříme  $P_{ij}$  a  $q^i$  jako funkce  $n, T$  and  $v$  můžeme napsat momentové rovnice, které zahrnují transportní jevy. Jestliže vezmeme  $\mu$  jako konstantu, dostáváme

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_{ij}}{\partial x^i} &= \frac{\partial p}{\partial x^j} - 2\mu \frac{\partial}{\partial x^i} \left( \Lambda_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \partial_i v^i \right) = \\ &= \frac{\partial p}{\partial x^j} - \mu \frac{\partial}{\partial x^i} \left( \frac{\partial v^j}{\partial x^i} + \frac{\partial v^i}{\partial x^j} \right) + \frac{2\mu}{3} \frac{\partial}{\partial x^j} \frac{\partial v^k}{\partial x^k} = \\ &= \frac{\partial p}{\partial x^j} - \mu \left( \frac{\partial^2 v^j}{\partial x^i \partial x_i} + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x^j} \partial_k v^k \right) \end{aligned} \quad (669)$$

a tedy dostáváme pohybovou rovnici

$$\rho \left( \frac{\partial v^i}{\partial t} + v^j \partial_j v^i \right) = -\partial_i p + \mu \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^k \partial x_k} v^i + \frac{1}{2} \partial_i (\partial_k v^k) \right] + \frac{\rho F^i}{m}. \quad (670)$$

Podobným způsobem dostaneme

$$P_{ij}\Lambda_{ij} = p\delta_{ij}\Lambda_{ij} + \pi_{ij}\Lambda_{ij} = p\partial_i v^i - 2\mu\Lambda_{ij}\Lambda_{ij} + \frac{\mu}{3}(\partial_i v^i)^2 \quad (671)$$

a tedy následující pohybovou rovnicí

$$\rho \left( \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + v^i \partial_i \epsilon \right) = -p \partial_i v^i + \partial_i (K \partial_i T) + 2\mu [\Lambda_{ij} \Lambda_{ij} - \frac{1}{3} (\partial_i v^i)^2] \quad (672)$$

spolu s rovnicí zachování

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \partial_i (\rho v^i) = 0 . \quad (673)$$

Rovnice (670) a (672) tvoří uzavřený systém rovnic a tudíž nám definují dynamickou teorii tekutin.

### 3.11.10 Hydrodynamické rovnice

Předchozí momentové rovnice jsou parciálními diferenciálními rovnicemi, které mají složitou strukturu. Proto typicky uvažujeme jejich zjednodušení, které mají následující formu

- Zanedbáme prostorové variace  $\mu$ , což už jsme samozřejmě implicitně provedli, když jsme odvozovali rovnici (670).
- Zanedbáme efekt stlačitelnosti ( $\partial_i v^i$ ) ve viskozní síly v rovnici (670).
- Zanedbáme efekt viskozní produkce tepla v rovnici vyjadřující zákon zachování energie (672).
- Konečně, budeme psát  $F^i \rightarrow F^i/m$ . Jinými slovy budeme psát intenzity pole místo síly pole.

Poté dostáváme následující **hydrodynamické rovnice**

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \partial_i (\rho v^i) &= 0 , \\ \frac{\partial v^i}{\partial t} + v^j \partial_j v^i &= -\frac{1}{\rho} \partial_i p + F^i + \frac{\mu}{\rho} \partial^j \partial_j v^i , \\ \rho \left( \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + v^i \partial_i \epsilon \right) &= -p \partial_i v^i + \partial_i (K \partial^i T) \end{aligned} \quad (674)$$

kde druhá rovnice je slavná **Navier-Stokesova rovnice**.

Závěrem shrneme postup, jakým způsobem jsme odvodili tyto rovnice. Naším základním předpokladem bylo to, že distribuční funkce má být chápána jako malá porucha od Maxwellovského rozdělení. Jinými slovy předpokládali jsme malý odklod od lokální statistické rovnováhy, kde je možné použít BGK rovnici. Ukázali jsme, že tento předpoklad platí, jestliže střední volná dráha je mnohem menší než škála, na které se mění makroskopické vlastnosti systému. Pak je také jasné, že hydrodynamické rovnice přestanou platit v okamžiku, kdy tato podmínka nebude splněna. Samozřejmě, že je možné psát dále momentové rovnice, když budeme vycházet z obecného Chapman-Enskogova rozvoje, ale obecně všechny členy v daném rozvoji budou stejného řádu a tudíž není možné provést zanedbání členů vyšších řádů.