

## МЕХАНИКА

УДК 536.75

Б.В. Алексеев

## НЕЛОКАЛЬНАЯ ФИЗИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА

В статье с методических позиций излагаются основные положения нелокальной физической кинетики. Теория представлена на качественном уровне, что позволяет использовать представленный материал для обучения студентов на младших курсах университетов.

**Ключевые слова:** основания теории процессов переноса, физическая кинетика, обобщенные гидродинамические уравнения, теория турбулентных течений, основания нелокальной физики.

В физической кинетике рассматриваются процессы переноса в открытых диссипативных системах. Поэтому кинетическое статистическое описание неизбежно связано с диагностикой системы. Таким элементом диагностики при теоретическом описании в физической кинетике является понятие физически бесконечно малого объема (ФБМО). Связь теоретического описания с диагностикой системы общеизвестна в физике. Достаточно вспомнить роль пробного заряда в электростатике или пробного контура в физике магнитных явлений.

Традиционное определение ФБМО содержит утверждение, что ФБМО  $V_\mu$  содержит достаточное число частиц для введения статистического описания, но вместе с тем ФБМО много меньше объема  $V$  рассматриваемой физической системы, что обеспечивает локальный подход при исследовании процессов переноса. Именно поэтому в классической гидродинамике предполагается, что устанавливается сначала локальное термодинамическое равновесие (ЛТР) в пределах ФБМО, и лишь затем наступает переход к глобальному термодинамическому равновесию, если оно вообще возможно для изучаемой системы. Тем самым неявно предполагается, что роль приграничных частиц в открытой термодинамической системе, каковой является ФБМО, ничтожна. Зачастую приходится сталкиваться с убеждением, что возможные поправки, связанные с граничными эффектами порядка диаметра частицы, и уточнение концепции ФБМО, например, в теории разреженных газов, не может приводить к эффектам, имеющим практическое значение. Покажем, что подобная трактовка классического определения ФБМО ошибочна.

Рассмотрим эту трактовку подробнее, поставив вопрос, как иногда говорят в физической кинетике, «о размере точки». Пусть имеются два соседних физически бесконечно малых объема  $V_{\mu,1}$  и  $V_{\mu,2}$  в неравновесной системе. Объему  $V_{\mu,1}$  отвечает одночастичная функция распределения (ФР)  $f_{\mu,1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}, t)$ , а объему  $V_{\mu,2}$  соответственно  $f_{\mu,2}$ . В первом приближении можно считать, что  $f_{\mu,1}$  не изменяется в пределах  $V_{\mu,1}$ , так же как  $f_{\mu,2}$  не изменяется в пределах соседнего объема  $V_{\mu,2}$ . Именно это предположение и содержится неявно в теории Больцмана. Однако

предположение является слишком грубым. Действительно, частица на границе двух объемов, испытавшая последнее столкновение в  $V_{\mu,1}$  и направляющаяся в сторону  $V_{\mu,2}$ , вносит информацию о ФР  $f_{\mu,1}$  в соседний объем  $V_{\mu,2}$ . Аналогично, частица на границе двух объемов, испытавшая последнее столкновение в  $V_{\mu,2}$  и направляющаяся в сторону  $V_{\mu,1}$ , вносит информацию о ФР  $f_{\mu,2}$  в соседний объем  $V_{\mu,1}$ . Релаксация по поступательным степеням свободы частиц одинаковых масс происходит за несколько столкновений. В результате на границе соседних физически бесконечно малых объемов образуются «кнудсеновские слои», характерный размер которых порядка длины пробега. Следовательно, в ФР в ФБМО должна быть введена поправка, пропорциональная среднему времени *между* столкновениями и субстанциональной производной от измеряемой ФР (строгий вывод в [1]).

Пусть частица конечного радиуса характеризуется по-прежнему положением  $\mathbf{r}$  в момент времени  $t$  ее центра масс, движущегося со скоростью  $\mathbf{v}$ . Тогда возможна ситуация, когда в некоторый момент времени  $t$  частица располагается на границе раздела двух объемов. При этом возможен эффект опережения (скажем для  $V_{\mu,2}$ ), когда центр масс частицы, направляющейся в соседний объем  $V_{\mu,2}$ , еще находится в  $V_{\mu,1}$ . Но имеет место и эффект запаздывания, когда центр масс частицы, направляющейся в соседний объем (скажем  $V_{\mu,2}$ ), уже находится в  $V_{\mu,2}$ , но часть частицы еще принадлежит  $V_{\mu,1}$ .

*Весь этот комплекс эффектов определяет нелокальные эффекты в пространстве и времени при редуцированном описании статистических систем.*

Нелокальные эффекты могут быть продемонстрированы с помощью анимации движения частиц – твердых сфер в нейтральном газе. В Московской государственной академии тонкой химической технологии имени М.В. Ломоносова (МИТХТ) создан анимационный фильм (авторы Б.В. Алексеев, В.В. Михайлов), иллюстрирующий нелокальные эффекты. Обратимся к упомянутой анимационной картине. Пусть в некотором объеме содержится однокомпонентный разреженный газ, в котором в основном происходят парные столкновения. С помощью пространственной сетки разобьем неравновесную физическую систему на открытые подсистемы – набор физически бесконечно малых объемов. Выделим один из этих малых объемов. Для наблюдения эволюции частиц в выделенном объеме и соседних малых объемах окрасим частицы и проследим за их движением. В выделенном объеме частицы окрашены в синий цвет; их достаточно много, для того чтобы говорить о возможности локального статистического описания на уровне одночастичной функции распределения (ФР)  $f$ . В соседних прилегающих малых объемах частицы окрашены в другие цвета, отвечающие другим функциям распределения, отличным от  $f$ . Частицы соседних объемов являются носителями информации о других ФР и, проникнув в «синий» объем, подстраиваются под «синюю» ФР (если речь идет о релаксации по поступательным степеням свободы) после нескольких столкновений. Пусть, для простоты, процесс релаксации требует лишь одного столкновения.

Иначе говоря, частица, проникая в «синий» объем, меняет свой цвет на синий после первого же столкновения с «синей» частицей.

Воочию можно наблюдать, как в выделенном физически бесконечно малом объеме («синем» объеме) появляется приграничная «разноцветная» область, характерный размер которой порядка *средней длины пробега*. Ясно, что этот приграничный эффект будет существовать всегда при избранном методе диагностики независимо от способа разбиения системы набором физически бесконечно малых открытых подсистем.

Этот факт и отражает существование нелокальных эффектов, пропорциональных средней длине пробега, числу Кнудсена или среднему времени  $\tau$  между столкновениями частиц. Анимационный фильм может быть получен по запросу с кафедры физики МИТХТ; следует иметь в виду, что фильм занимает 34,8 Мбайта.

Уравнение Больцмана (УБ)

$$Df/Dt = J^B(f), \quad (1)$$

где  $D/Dt$  есть субстанциональная производная, полностью игнорирует нелокальные эффекты и содержит только локальный интеграл столкновений  $J^B$ . Но указанные нелокальные эффекты несущественны только в равновесных системах, где кинетический подход переходит в методы статистической механики. Отсюда и проистекают трудности классической больцмановской физической кинетики.

Слабым местом классической больцмановской кинетической теории является и трактовка динамических свойств взаимодействующих частиц. С одной стороны, как следует из так называемого «физического» вывода УБ, больцмановские частицы рассматриваются как материальные точки, с другой – интеграл столкновений в УБ приводит к появлению сечений столкновений.

Строгий подход к выводу кинетического уравнения относительно одночастичной ФР  $f(KU_f)$  основан на использовании иерархии уравнений Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона (ББГКИ). Классическое уравнение Больцмана справедливо на двух масштабах, связанных, например, с гидродинамическим временем и средним временем между столкновениями частиц. Полученное уравнение  $KU_f$  превращается в УБ, если не учитывается изменение ФР на временах порядка времени столкновения (или, что то же самое, на длинах порядка радиуса взаимодействия частиц). Важно отметить, что учет этого третьего из упомянутых масштабов приводит до введения любых аппроксимаций, направленных на расцепление цепочки Боголюбова, к появлению дополнительных и, вообще говоря, однопорядковых членов в УБ [1 – 4].

Если  $KU_f$  выводится из ББГКИ методом корреляционных функций, то переход к УБ означает отказ от учета нелокальных эффектов. Структура  $KU_f$ , вообще говоря, выглядит следующим образом:

$$Df/Dt = J^B + J^{nl}, \quad (2)$$

где  $J^{nl}$  – нелокальный интегральный член.

*Поскольку нелокальные эффекты пропорциональны числу Кнудсена, то появляется возможность описать нелокальные эффекты в рамках двухмасштабной аппроксимации.*

По сути, в обобщенной больцмановской физической кинетике предлагается локальная аппроксимация для второго интеграла столкновений [1]:

$$J^{nl} = \frac{D}{Dt} \left( \tau \frac{Df}{Dt} \right), \quad (3)$$

где  $\tau$  есть среднее время между столкновениями частиц. Можно провести аналогию с аппроксимацией Бхатнагара – Гросса – Крука (БГК) для  $J^B$

$$J^B = (f^{(0)} - f)/\tau, \quad (4)$$

популярность которой для больцмановского интеграла столкновений объясняется тем колоссальным упрощением, которое достигается при ее использовании. Порядок величины отношения второго и первого членов правой части (2)

$$J^{\text{nl}}/J^{\text{B}} \approx O(Kn^2), \quad (5)$$

и при больших числах Кнудсена эти члены становятся однопорядковыми. Казалось бы, при малых числах Кнудсена, отвечающих гидродинамическому описанию, вкладом второго члена правой части (2) можно пренебречь.

Однако, это не так. При переходе к гидродинамическому приближению (после умножения кинетического уравнения на инварианты столкновений и последующего интегрирования по скоростям) больцмановская интегральная часть обращается в нуль, а второй член правой части (2) после указанного интегрирования не обращается в нуль и дает однопорядковый вклад при обобщенном навье-стоксовском описании. С математической точки зрения, пренебрежение членом, содержащим малый параметр при старшей производной, не допустимо. С физической точки зрения, возникающие дополнительные члены, пропорциональные вязкости, соответствуют колмогоровской мелкомасштабной турбулентности. Итак, оказывается, что интегральный член  $J^{\text{nl}}$  оказывается существенным в теории процессов переноса и при малых, и при больших числах Кнудсена.

Этот факт определяет революционную ситуацию в теории процессов переноса, поскольку дополнительные члены, введенные в уравнение Больцмана, не могут быть опущены даже в предельных случаях теории.

Тем самым уравнение Больцмана даже не соответствует классу минимальных моделей физики, являясь лишь правдоподобной моделью. Правдоподобные модели могут приводить к приемлемым результатам (зачастую после корректировки с помощью экспериментальных данных), но могут давать и «провальные» результаты (например, в теории турбулентности).

Отметим трактовку ОУБ с позиций теории флуктуаций:

$$Df^a/Dt = J^{\text{B}}(f), \quad (6)$$

$$f^a = f - \tau Df/Dt. \quad (7)$$

Уравнения (6), (7) имеют правильный свободномолекулярный предел. Таким образом,  $\tau Df/Dt$  есть флуктуация функции распределения, а запись в форме (6) без учета (7) делает УБ не замкнутым. С точки зрения теории флуктуаций Больцман использовал простейшую процедуру замыкания

$$f^a = f. \quad (8)$$

Итак, кинетическая теория с учетом нелокальных эффектов принципиально ведет к флуктуационным эффектам пропорциональным среднему времени между столкновениями. Этот факт имеет общетеоретическое значение и не связан с конкретной аппроксимацией (3). Флуктуационные эффекты имеют место в любой открытой системе, ограниченной прозрачной для частиц контрольной поверхностью. Интересно отметить, что ОУБ позволяет включить в рассмотрение и высшие производные от ФР, [1].

Обобщенное уравнение Больцмана (ОУБ)

$$\frac{D}{Dt} \left( f - \tau \frac{Df}{Dt} \right) = J^{\text{B}}(f) \quad (9)$$

приводит к обобщенным гидродинамическим уравнениям (ОГУ). Например, уравнение неразрывности записывается так:

$$\frac{\partial \rho^a}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\rho \mathbf{v}_0)^a = 0, \quad (10)$$

где  $\rho^a$  – плотность газа,  $\mathbf{v}_0^a$  – гидродинамическая скорость движения потока,  $(\rho \mathbf{v}_0)^a$  – плотность потока импульса без учета флуктуаций. Для локально максвелловского распределения

$$\begin{aligned} (\rho - \rho^a) / \tau &= \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\rho \mathbf{v}_0), \\ (\rho \mathbf{v}_0 - (\rho \mathbf{v}_0)^a) / \tau &= \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{v}_0) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \rho \mathbf{v}_0 \mathbf{v}_0 + \tilde{\mathbf{I}} \cdot \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{r}} - \rho \mathbf{a}, \end{aligned} \quad (11)$$

где  $\tilde{\mathbf{I}}$  – единичный тензор,  $\mathbf{a}$  – ускорение, обусловленное действием массовых сил.

Структура записи уравнений (10), (11) весьма примечательна. Она может быть распространена на остальные обобщенные гидродинамические уравнения и напоминает уравнения двухжидкостной модели в теории сверхтекучести.

Известные уравнения Навье – Стокса приводят к весьма сложным проблемам существования и единственности решений. О.А. Ладыженской установлено, что даже при «мягких» начальных условиях для трехмерных течений единственное решение существует только на конечном временном интервале. Более того, О.А. Ладыженская даже предложила ввести в уравнения Навье – Стокса дополнительные члены с целью устранения этого недостатка классических гидродинамических уравнений (см. дискуссию в [5]). Обобщенные гидродинамические уравнения содержат вторые производные по времени и перекрестные производные «время – координаты» и лишены упомянутого недостатка.

Пусть теперь контрольный объем расположен в полости, ограниченной твердой стенкой. Запишем уравнения (11) в безразмерном виде, используя в качестве масштаба длины  $l$  расстояние от пробного контура до твердой стенки. Тогда вместо  $\tau$  появится число Кнудсена  $Kn_l = \lambda / l$ . При  $l \rightarrow 0$   $Kn_l \rightarrow \infty$ , контур занимает всю полость, ограниченную твердыми стенками. Уравнения (10), (11) переходят в классические уравнения неразрывности и движения, при этом флуктуации на стенке исчезают.

Отсутствие флуктуаций гидродинамических величин на твердой поверхности является источником дополнительных граничных условий для ОГУ.

Переход к классическим гидродинамическим уравнениям вблизи твердой поверхности соответствует ламинарному подслою в турбулентном течении, а флуктуации гидродинамических величин – колмогоровским мелкомасштабным флуктуациям, которые табулируются из первых принципов физики [1, 6 – 8].

*Это означает, что создана строгая теория турбулентности, не требующая привлечения эмпирических моделей для расчета турбулентных течений.*

Казалось бы, в механике сплошной среды можно было бы вообще отказаться от принципа дискретности материи, рассматривая среду как сплошную в буквальном смысле этого термина. Такой подход, конечно, возможен, и в гидродинамике он приводит к уравнениям Эйлера. Но если мы собираемся учесть эффекты вязкости и теплопроводности, то положение радикально меняется. Как известно, динамическая вязкость пропорциональна среднему времени  $\tau$  между столкновениями частиц и сплошная среда в эйлеровской модели при  $\tau = 0$  означает отсутствие вязкости и теплопроводности. В гидродинамическом приближении среднее время между столкновениями  $\tau$  связано с вязкостью  $\eta$ ,  $\tau \rho = \Pi \eta$ , где множитель  $\Pi$  определяется моделью столкновения частиц, для нейтрального газа твердых сфер  $\Pi \approx 0.8$  [9].

С точки зрения теории флуктуаций появление флуктуационных членов в ОУБ (и, в виде следствия, в ОГУ) обусловлено введением контрольного объема как

элемента измерения в системе частиц конечного диаметра при сохранении ФР в виде, используемом для описания точечных бесструктурных частиц. Остается лишь отметить, что перечисленные эффекты всегда будут иметь место в кинетической теории при редуцированном одночастичном описании, в том числе в жидкости, электродинамике и теории гравитации «сплошных» сред, в плазме, где введение самосогласованных сил и обрезания радиуса их действия приводит к расширению возможностей ОУБ. В частности, в систему уравнений Максвелла должны быть введены флуктуации плотности заряда и плотности тока [5].

В общем случае параметр  $\tau$  есть параметр нелокальности, и в квантовой гидродинамике его величина связана соотношением неопределенности «время – энергия». В результате на квантовом уровне обобщенные гидродинамические уравнения переходят в уравнения квантовой гидродинамики, а уравнение Шредингера оказывается глубоким частным случаем обобщенных гидродинамических уравнений [10].

*Это означает, что создана новая квантовая механика диссипативных процессов.*

Отметим, что уравнение Шредингера и его эквивалентная гидродинамическая форма Маделунга не описывает диссипативные процессы и, следовательно, не может эффективно использоваться в нанотехнологии. Уравнение Больцмана принципиально «не работает» на расстояниях порядка радиуса взаимодействия частиц и, следовательно, также не может эффективно использоваться при теоретическом исследовании проблем нанотехнологии даже в рамках «правдоподобных» моделей.

Для локальных статистических теорий установлено нарушение неравенств Белла и переход к нелокальному описанию неизбежен [11, 12].

Физика двадцать первого века – это нелокальная физика.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Alexeev B.V. Generalized Boltzmann Physical Kinetics. Elsevier, 2004.
2. Алексеев Б.В. Математическая кинетика реагирующих газов. М.: Наука, 1982.
3. Alexeev B.V. The generalized Boltzmann equation, generalized hydrodynamic equations and their applications // Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. 1994. V. 349. P. 417 – 443.
4. Alexeev B.V. The generalized Boltzmann equation // Physica A. 1995. V. 216. P. 459 – 468.
5. Климонтович Ю.Л. О возможности и необходимости объединенного описания гидродинамических процессов // ТМФ. 1992. Т. 92. № 2. С. 312
6. Алексеев Б.В. Обобщенная больцмановская физическая кинетика: Обзор // ТВТ. 1997. Т. 35. № 1. С. 129 – 146.
7. Алексеев Б.В. Физические основы обобщенной больцмановской кинетической теории газов. Обзор // УФН. 2000. Т. 170. № 6. С. 649.
8. Алексеев Б.В. Физические принципы обобщенной больцмановской кинетической теории ионизованных газов: Обзор // УФН. 2003. Т. 173. № 2. С. 139.
9. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. М.: ИЛ, 1960.
10. Alexeev B.V. Generalized quantum hydrodynamics and principles of non-local physics // J. Nanoelectronics and Optoelectronics. 2008. V. 3. P. 143 – 158.
11. Bell J.S. On the Einstein Podolsky Rosen paradox // Physics. 1964. V. 1. P. 195.
12. Aspect A., Dalibard J., Roger G. Experimental test of Bell's inequalities using time-varying analysers // Phys. Rev. Lett. 1982. V. 49. P. 1804.

Статья принята в печать 16.10.2008 г.