

01;03
©1995 г.

КИНЕТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ БРОУНОВСКОЙ ЧАСТИЦЫ

В.Я.Рудяк, И.В.Ершов

Новосибирская государственная академия строительства,
630008, Новосибирск, Россия
(Поступило в Редакцию 16 декабря 1994 г.)

Выводятся кинетические уравнения для изолированной броуновской частицы непосредственно из уравнения Лиувилля с помощью теории возмущения по малому параметру $\lambda = \sqrt{m/M}$, где M — масса броуновской частицы, m — масса молекулы несущей среды. Получены кинетические уравнения с точностью до членов второго порядка малости, причем несущая среда предполагается равновесной. В последней части обсуждается самосогласованная схема вывода кинетических уравнений для изолированной броуновской частицы и среды. Подробно исследован случай, когда несущая среда представляет собой разреженный газ.

Введение

Динамика броуновской частицы в среде наряду с ланжевеновским допускает полевое описание посредством некоторого кинетического уравнения. Вывод такого уравнения, исходя из уравнения Лиувилля, был впервые предложен в [1] и было показано, что в равновесии кинетика броуновской частицы описывается уравнением Фоккера–Планка. Позднее появилось и появляется до сих пор большое число публикаций с различными вариантами динамического вывода этого уравнения. Обычно при выводе этого уравнения предполагается, что ее взаимодействие со средой является слабым (см., например, [2] и цитируемую там литературу) или используют малость отношения масс молекулы несущей среды и частицы [1,3]. В связи с этим следует заметить, что взаимодействие частицы с молекулами нельзя считать слабым в обычном смысле (см. раздел 1).

В [4] для вывода кинетического уравнения броуновской частицы исходят из уравнения непрерывности для фазовой плотности в шестимерном фазовом пространстве. Этот подход, обеспечивая самый прямой и эффективный путь к цели, является, однако, по сути феноменологическим, поскольку требует задания уравнения движения броуновской частицы в форме Ланжевена.

Столь пристрастное внимание к классической проблеме объясняется тем, что многие ее аспекты остаются все еще не выясненными. Это относится к принципиальным вопросам — о границах применимости указанного уравнения и возможных его обобщениях. Особо стоит вопрос о выводе кинетического уравнения для броуновской частицы, движущейся в неравновесной среде. К настоящему времени, несмотря на обширную литературу, такой вывод все еще отсутствует. Исследования указанных вопросов и посвящается данная работа.

1. Динамическое описание бесструктурной броуновской частицы в среде

Рассмотрим классическую систему, состоящую из N бесструктурных молекул массы m и броуновской частицы, масса которой $M \gg m$. Динамика данной системы описывается $N+1$ -частичной функцией распределения F_{N+1} , которая удовлетворяет уравнению Лиувилля

$$\frac{\partial F_{N+1}}{\partial t} + L_{N+1} F_{N+1} = 0,$$

$$L_{N+1} = L_N + L_p + L_{Np}, \quad L_N = L_{N0} - \Theta_N,$$

$$L_{N0} = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i}, \quad L_p = \frac{\mathbf{P}}{M} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}},$$

$$\Theta_N = \sum_{j>i}^N \sum_{j>i} \frac{\partial \Phi_{ij}}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j} \right) = \sum_{j>i}^N \Theta_{ij},$$

$$L_{Np} = - \sum_{i=1}^N (\Pi_i + \Pi_i^*) = -\Pi - \Pi^* = \sum_{i=1}^N \mathbf{f}_i \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{P}} \right). \quad (1)$$

Здесь \mathbf{r}_i , \mathbf{p}_i и \mathbf{R} , \mathbf{P} — координаты и импульсы соответственно молекулы i и частицы; Φ_{ij} — потенциал взаимодействия молекул; \mathbf{f}_i — сила взаимодействия молекулы i с частицей.

В общем случае взаимодействие молекул среды с частицей может быть непотенциальным. Если же взаимодействие молекул с броуновской частицей описывается потенциалом $U_i(|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}|)$, то сила $\mathbf{f}_i = -\partial U_i / \partial \mathbf{r}_i = \partial U_i / \partial \mathbf{R}$.

Перейдем в уравнении (1) к безразмерным переменным

$$t' = \frac{t}{\tau}, \quad \mathbf{p}'_i = \frac{\mathbf{p}_i}{mc}, \quad \mathbf{r}'_i = \frac{\mathbf{r}_i}{L_f}, \quad \mathbf{R}'_i = \frac{\mathbf{R}_i}{L_p}, \quad m' = M' = 1, \quad \mathbf{P}' = \frac{\mathbf{P}}{MC},$$

$$\frac{\partial \Phi'_{ij}}{\partial \mathbf{r}'_i} = \frac{r_0}{kT} \frac{\partial \Phi_{ij}}{\partial \mathbf{r}_i}, \quad \mathbf{f}'_i = \frac{R_0}{kT} \mathbf{f}_i, \quad mc^2 \sim MC^2 \sim kT,$$

где τ — характерный масштаб изменения времени в системе, L_f — характерный линейный масштаб изменения пространственных переменных среды, r_0 и R_0 — соответственно эффективные радиусы молекулы и частицы, T — температура системы.

Тогда на масштабах $L_f \sim \tau/c \sim R_0$ уравнение (1) принимает вид

$$\frac{\partial F_{N+1}}{\partial t'} + L'_N F_{N+1} - \Pi' F_{N+1} + \lambda(L'_p - \Pi'^*) F_{N+1} = 0, \quad (2)$$

т.е. на указанных масштабах изменения параметров системы уравнение Лиувилля содержит малый параметр $\lambda = \sqrt{m/M}$.

Функция распределения броуновской частицы

$$F_p = V \int d\Gamma_N F_{N+1}, \quad d\Gamma_N = \prod_{i=1}^N d\mathbf{r}_i d\mathbf{p}_i = \prod_{i=1}^N dx_i$$

удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial F_p}{\partial t} + L_p F_p = V \int d\Gamma_N \Pi^* F_{N+1}, \quad (3)$$

которое получается из уравнения (1) интегрированием по фазовым переменным всех молекул. Здесь V — объем системы.

Эволюция частицы определяется ее взаимодействием с окружением и описывается правой частью уравнения (3). Чтобы получить замкнутое кинетическое уравнение, необходимо построить решение уравнения Лиувилля (1), которое было бы функционалом от F_p . С этой целью введем корреляционную функцию $G_{N+1} = F_{N+1} - F_p F_N V^{-N-1}$, где F_N — функция распределения среды

$$F_N = V_N \int dX F_{N+1}, \quad dX = d\mathbf{R}d\mathbf{P}.$$

Эта корреляционная функция удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial G_{N+1}}{\partial t} + L_{N+1} G_{N+1} = - \left(\frac{\partial}{\partial t} + L_{N+1} \right) F_N F_p V^{-N-1}. \quad (4)$$

Поскольку силы взаимодействия молекул с частицей предполагаются короткодействующими с характерным масштабом порядка R_0 , то правая часть уравнения (3) отлична от нуля лишь на этих масштабах. Это позволяет ограничиться вычислением функции F_{N+1} (и G_{N+1}) именно на таких масштабах и временах порядка $\tau_{fp} \sim R_0/c$. Но, согласно (2), уравнение Лиувилля на этих масштабах содержит малый параметр λ . Поэтому уравнение для корреляционной функции (4) на указанных масштабах содержит малый параметр λ

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial}{\partial t} + L_N - \Pi \right) G_{N+1} + \lambda(L_p - \Pi^*) G_{N+1} = \\ & = - \left(\frac{\partial}{\partial t} + L_N - \Pi \right) F_N F_p V^{-N-1} - \lambda(L_p - \Pi^*) F_N F_p V^{-N-1}. \end{aligned}$$

Здесь в дальнейшем мы пользуемся размерными переменными, поэтому в конечных результатах параметр λ следует положить равным единице.

Будем искать функцию G_{N+1} в виде ряда по малому параметру λ

$$G_{N+1} = G_{N+1}^{(0)} + \lambda G_{N+1}^{(1)} + \lambda^2 G_{N+1}^{(2)} + \dots \quad (5)$$

Корреляционная функция нулевого приближения $G_{N+1}^{(0)}$ удовлетворяет уравнению

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + L_N - \Pi \right) G_{N+1}^{(0)} = - \left(\frac{\partial}{\partial t} + L_N - \Pi \right) F_N F_p V^{-N-1},$$

решение которого при однородных начальных условиях имеет вид

$$G_{N+1}^{(0)}(t) = - \int_{t_0}^t dt_1 S_{-(t-t_1)} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + L_N - \Pi \right) (F_N F_p)_{t_1} V^{-N-1},$$

$$S_{\pm t} = \exp[\pm(L_N - \Pi)t]. \quad (6)$$

Функции $G_{N+1}^{(1)}$ и $G_{N+1}^{(2)}$ определяются соответственно из уравнений

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + L_N - \Pi \right) G_{N+1}^{(1)} + (L_p - \Pi^*) G_{N+1}^{(0)} = -(L_p - \Pi^*) F_N F_p V^{-N-1},$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + L_N - \Pi \right) G_{N+1}^{(2)} + (L_p - \Pi^*) G_{N+1}^{(1)} = 0$$

и равны

$$G_{N+1}^{(1)}(t) = - \int_{t_0}^t dt_1 S_{-(t-t_1)} (L_p - \Pi^*) \times$$

$$\times \left[(F_N F_p)_{t_1} - \int_{t_0}^t dt_2 S_{-(t_1-t_2)} \left(\frac{\partial}{\partial t_2} + L_N - \Pi \right) (F_N F_p)_{t_2} \right] V^{-N-1}, \quad (7)$$

$$G_{N+1}^{(2)}(t) = \int_{t_0}^t dt_1 S_{-(t-t_1)} (L_p - \Pi^*) \int_{t_0}^t dt_2 S_{-(t_1-t_2)} (L_p - \Pi^*) \times$$

$$\times \left[(F_N F_p)_{t_2} - \int_{t_0}^t dt_3 S_{-(t_2-t_3)} \left(\frac{\partial}{\partial t_3} + L_N - \Pi \right) (F_N F_p)_{t_3} \right] V^{-N-1}. \quad (8)$$

Таким образом, с точностью до членов второго порядка по λ корреляционная функция определяется решениями (5)–(8) и в каждом приближении зависит лишь от функций F_p и F_N . Если функция F_N известна, то, подставив функцию $F_{N+1} = G_{N+1} + F_N F_p V^{-N-1}$ в уравнение (3), получим замкнутое кинетическое уравнение для броуновской частицы. В следующем разделе мы проанализируем характер получающихся кинетических уравнений броуновской частицы для равновесных состояний несущей среды.

2. Кинетические уравнения броуновской частицы

1) Р а в н о в е с н а я с р е д а. Будем считать состояние несущей среды равновесным, описываемым функцией распределения Гиббса

$$F_N = F_{N0} = Q^{-1} \exp(-H/kT), \quad (9)$$

где гамильтониан системы складывается из гамильтониана несущей жидкости (или газа) H_N и энергия взаимодействия ее молекул с броуновской частицей U : $H = H_N + U$, Q — нормировочный множитель.

В этом случае функция распределения рассматриваемой системы в нулевом приближении по λ равна $F_{N+1} = F_{N0} F_p V^{-N-1} + G_{N+1}^{(0)}$, где $G_{N+1}^{(0)}$ определяется формулой (6). Подставляя ее в уравнение (3), находим

$$\frac{\partial F_p}{\partial t} + L_p F_p = \frac{1}{V^N} \frac{\partial}{\partial \mathbf{P}} \int d\Gamma_N \mathbf{f} \times \times \left[F_{N0} F_p - \int_{t_0}^t dt_1 S_{-(t-t_1)} \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + L_N - \Pi \right) (F_{N0} F_p)_{t_1} \right], \quad (10)$$

$$\mathbf{f} = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial U_i}{\partial \mathbf{R}} = - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{R}} = - \sum_{i=1}^N \mathbf{f}_i. \quad (11)$$

Первый член в правой части этого выражения представляет собой среднюю силу, действующую на частицу. Для функции (9) эта сила равна нулю, поскольку подынтегральное выражение является нечетной функцией координат \mathbf{r}_i . Второй член также обращается в нуль. Чтобы установить это, следует учесть, что $(\partial/\partial t + L_N)F_{N0} = 0$, а ΠF_{N0} — нечетная функция импульсов \mathbf{p}_i . Кроме того, необходимо иметь в виду, что на рассматриваемых временах (порядка τ_{fp}) функция F_p не изменяется, так что $\partial F_p/\partial t = 0$.

В следующем приближении по λ к интегралу столкновений кинетического уравнения (10) следует добавить член

$$\frac{1}{V^N} \frac{\partial}{\partial \mathbf{P}} \int d\Gamma_N \mathbf{f} \int_{t_0}^t dt_1 S_{-(t-t_1)} (L_p - \Pi^*) \times \times \left[(F_N F_p)_{t_1} - \int_{t_0}^{t_1} dt_2 S_{-(t_1-t_2)} \left(\frac{\partial}{\partial t_2} + L_N - \Pi \right) (F_{N0} F_p)_{t_2} \right].$$

Простые вычисления показывают, что он сводится к нелокальному интегралу столкновений Фоккера-Планка

$$I_{F-p}^n = \frac{\partial}{\partial \mathbf{P}} \left[\int_{t_0}^t dt_1 \langle \mathbf{f} \cdot \mathbf{f}(t-t_1) \rangle_0 \left(\frac{\mathbf{P}}{MkT} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{P}} \right) F_p(t_1) \right], \quad (12)$$

который в локальном пределе переходит в обычный интеграл столкновений Фоккера-Планка

$$I_{F-p}^n = \frac{\partial}{\partial \mathbf{P}} \gamma \left(\mathbf{P} + MkT \frac{\partial}{\partial \mathbf{P}} \right) F_p \quad (13)$$

с тензорным коэффициентом трения

$$\gamma = \frac{1}{MkT} \int_{t_0}^t dt_1 \langle \mathbf{f} \mathbf{f}(t-t_1) \rangle_0, \quad (14)$$

$$\langle \dots \rangle_0 = \int d\Gamma_N(\dots) F_{N0}.$$

Для изотропной жидкости коэффициент (14) представляет собой единичный тензор второго ранга \mathbf{U} , умноженный на константу

$$\gamma = \gamma \mathbf{U}, \quad \gamma = \frac{1}{3MkT} \int_{t_0}^t dt_1 \langle \mathbf{f} \cdot \mathbf{f}(t-t_1) \rangle_0, \quad (15)$$

где $\mathbf{f}(t-t_1) = S_{-(t-t_1)} \mathbf{f}$.

В следующем приближении по параметру λ интеграл столкновений необходимо вычислять с учетом функции $G_{N+1}^{(2)}$ (8). Подставляя ее наряду с функциями $G_{N+1}^{(0)}$, $G_{N+1}^{(1)}$ в уравнение (2), получаем следующие поправочные члены к интегралу столкновений (12):

$$I_2^n = \frac{2}{M} \int_{t_0}^t dt_1 (t_1 - t_0) \langle \mathbf{f} \mathbf{f}(t-t_1) \rangle_0 : \frac{\partial^2 F_p(t_1)}{\partial \mathbf{P} \partial \mathbf{R}} +$$

$$+ \frac{\mathbf{P}}{M} \int_{t_0}^t dt_1 (t_1 - t_0) \langle \mathbf{f} \mathbf{f}(t-t_1) \rangle_0 : \frac{\partial^3 F_p}{\partial \mathbf{R} \partial \mathbf{P} \partial \mathbf{P}} \quad (16)$$

или в локальном пределе

$$I_2 = 2\chi : \frac{\partial^2 F_p}{\partial \mathbf{P} \partial \mathbf{R}} + \mathbf{P} \chi : \frac{\partial^3 F_p}{\partial \mathbf{R} \partial \mathbf{P} \partial \mathbf{P}}, \quad (17)$$

$$\chi = \frac{1}{M} \int_{t_0}^t dt_1 (t-t_1) \langle \mathbf{f} \mathbf{f}(t-t_1) \rangle_0. \quad (18)$$

Для изотропной жидкости коэффициент (18) сводится к следующему:

$$\chi = \chi \mathbf{U}, \quad \chi = \frac{1}{3M} \int_{t_0}^t dt_1 (t-t_1) \langle \mathbf{f} \cdot \mathbf{f}(t-t_1) \rangle_0. \quad (19)$$

Таким образом, если среда, несущая броуновскую частицу, находится в равновесии, то с точностью до членов порядка λ^2 кинетика броуновской частицы описывается уравнением

$$\frac{\partial F_p}{\partial t} + \frac{\mathbf{P}}{M} \frac{\partial F_p}{\partial \mathbf{R}} = I_{F-p}^n + I_2^n, \quad (20)$$

где интегралы столкновений I_{F-p}^n , I_2^n нелокальные и определяются формулами (12), (16).

В локальном пределе для изотропной среды это уравнение упрощается

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_p}{\partial t} + \frac{\mathbf{P}}{M} \frac{\partial F_p}{\partial \mathbf{R}} = \gamma \frac{\partial}{\partial \mathbf{P}} \left(\mathbf{P} F_p + M k T \frac{\partial F_p}{\partial \mathbf{P}} \right) + \\ + 2\chi U : \frac{\partial^2 F_p}{\partial \mathbf{P} \partial \mathbf{R}} + \mathbf{P} \chi \frac{\partial^3 F_p}{\partial \mathbf{R} \partial \mathbf{P}^2}. \end{aligned} \quad (21)$$

3. Основное кинетическое уравнение

В предыдущем разделе показано, каким будет кинетическое уравнение броуновской частицы, если несущая среда описывается равновесной функцией Гиббса (9). Если же среда неравновесная, то необходимо самосогласованно исследовать динамику и частицы, и несущей среды. Покажем, как это можно сделать в случае, когда несущая среда представляет собой разреженный газ.

Выше отмечалось, что для вывода кинетического уравнения броуновской частицы необходимо вычислить функцию F_{N+1} на линейных масштабах порядка R_0 и на временах порядка τ_{fp} . Для разреженного газа пространственно-временные масштабы порядка эффективного радиуса молекул r_0 и времени их соударения $\tau_0 \sim r_0/c$ неразличимы. Поэтому, чтобы перейти к разреженному газу, необходимо прежде всего "огрубить" функцию распределения F_{N+1} . Это достигается таким ее усреднением по масштабам r' и τ' , что $r_0 \ll r' \ll l$, $\tau_0 \ll \tau' \ll \tau_l$, где l — длина свободного пробега молекул, τ_l — соответствующее время [5,6]. Математически это можно сделать, вводя оператор усреднения P_{N-k} , такой что $P_{N-k} F_{N+1} = f_{N+1}^{(k)}$, где функция $f_{N+1}^{(k)}$ представляет собой функцию F_{N+1} , усредненную с указанными масштабами по времени и по пространственным фазам $(N-k)$ молекул [5,6].

Действуя оператором P_N на уравнение (2), получим ($V' = (4/3)\pi r'^3$)

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{N+1}}{\partial t} + (L_{N0} - \Pi) f_{N+1} + \lambda(L_p - \Pi^*) f_{N+1} = \\ = \frac{1}{V'} \sum \sum_{j>i}^N d\mathbf{r}_{ij} \Theta_{ij} f_{N+1}^{(1)}(\mathbf{r}_{ij}), \end{aligned} \quad (22)$$

где функции $f_{N+1}^{(1)}$ для разреженного газа являются решением уравнения

$$\frac{\partial f_{N+1}^{(1)}}{\partial t} + (L_{N0} - \Theta_{ij} - \Pi) f_{N+1}^{(1)} + \lambda(L_p - \Pi^*) f_{N+1}^{(1)} = 0.$$

Решение последнего снова будем искать в виде ряда по λ

$$f_{N+1}^{(1)} = f_{N+1}^{(1)(0)} + \lambda f_{N+1}^{(1)(1)} + \dots \quad (23)$$

Тогда легко установить, что функция распределения нулевого приближения равна

$$f_{N+1}^{(1)(0)}(t) = \omega_{-(t-t_0)} S_{-(t-t_0)}^{(N-2)} S_{-(t-t_0)}^{(ij)} f_{N+1}^{(1)}(t_0),$$

$$S_t^{(m)} = \exp(L_{m0}t), \quad S_t^{(ij)} = \exp[(L_{20} - \Theta_{ij})t], \quad \omega_t = \exp(-\Pi t).$$

В рассматриваемом приближении разреженного несущего газа здесь следует пренебречь нелокальностью взаимодействия молекул, эффектами запаздывания на временах порядка τ_0 и заменить оператор $S_{-(t-t_0)}^{(ij)}$ предельным оператором $\Omega_- = \lim_{\tau \gg \tau_0} S_{-\tau}^{(ij)} S_{\tau}^{(i)} S_{\tau}^{(j)}$

$$f_{N+1}^{(1)(0)}(t) = \omega_{-(t-t_0)} S_{-(t-t_0)}^{(N-2)} \Omega_- f_{N+1}^{(1)}(t_0). \quad (24)$$

Полученное решение зависит от начальных значений функции $f_{N+1}^{(1)}$. Будем в дальнейшем считать, что в "удаленном прошлом" частица не взаимодействовала со средой. Тогда в качестве начальных условий для функций $f_{N+1}^{(1)}$ и f_{N+1} можно использовать условия ослабления корреляции

$$\omega_- S_-^{(N-2)} \Omega_- f_{N+1}^{(1)}(t_0) = \omega_- S_-^{(N-2)} \Omega_- f_N^{(1)}(t_0) F_p(t) V^{-N-1},$$

$$\omega_- S_-^{(N)} f_{N+1}(t_0) = \omega_- S_-^{(N)} f_N(t_0) F_p(t) V^{-N-1},$$

$$\omega_- = \lim_{\tau \gg \tau_{fp}} \omega_{-\tau}, \quad S_-^{(N-2)} = \lim_{\tau \gg \tau_{fp}} S_-^{(N-2)}. \quad (25)$$

При таком начальном условии решение (24) зависит лишь от функции F_p и f_N

$$f_{N+1}^{(1)(0)}(t) = \omega_- S_-^{(N-2)} \Omega_- f_N(t_0) F_p(t) V^{-N-1}. \quad (26)$$

Функция распределения следующего приближения $f_{N+1}^{(1)(1)}$ вычисляется аналогично. Учитывая затем разложение (23) и явный вид функции $f_{N+1}^{(1)(0)}$ (26), находим, что с точностью до членов порядка λ функция $f_{N+1}^{(1)}$ равна

$$f_{N+1}^{(1)}(t) = \omega_- S_-^{(N-2)} \Omega_- f_N F_p(t) V^{-N-1} - \lambda \int_{t_0}^t dt_1 \omega_{-(t-t_1)} S_{-(t-t_1)}^{(N-2)} \times \\ \times S_{-(t-t_1)}^{(ij)} (L_p - \Pi^*) \omega_- S_-^{(N-2)} \Omega_- f_N(t_0) F_p(t) V^{-N-1}. \quad (27)$$

Кинетическое уравнение для функции f_{N+1} получается после подстановки функции (27) в уравнение (22)

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{N+1}}{\partial t} + (L_{N0} - \Pi)f_{N+1} + \lambda(L_p - \Pi^*)f_{N+1} = \frac{1}{V'} \sum_{j>i}^N \int d\mathbf{r}'_{ij} \Theta_{ij} \times \\ \times \left[\omega_- S_-^{(N-2)} \Omega_- f_N(t_0) F_p(t) - \lambda \int_{t_0}^t dt_1 \omega_{-(t-t_1)} S_{-(t-t_1)}^{(N-2)} S_{-(t-t_1)}^{(ij)} \times \right. \\ \left. \times (L_p - \Pi^*) \omega_- S_-^{(N-2)} \Omega_- f_N(t_0) F_p(t_1) \right] V^{-N-1}. \end{aligned} \quad (28)$$

Операторы ω_- и $S_-^{(N-2)}$ действуют на масштабах, много больших эффективного радиуса молекулы r_0 , по которому проводится интегрирование в правой части уравнения (28), и их поэтому можно вынести за знак интеграла. Выполняя затем такие же преобразования, как и использовавшиеся нами при выводе основного кинетического уравнения разреженного газа [5], первый член в правой части уравнения (28) приводится к виду $\omega_{-(t-t_0)} S_{-(t-t_0)}^{(N-2)} I_N f_N(t_0) F_p(t)$, где

$$I_N f_N(t_0) = \frac{1}{V^{N+2}} \sum_{j>i}^N \int d\Omega v_{ij} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \times$$

$$\times \left[f_N(x_1, \dots, \mathbf{r}_i, \mathbf{p}'_i, \dots, \mathbf{r}_j, \mathbf{p}'_j, \dots, x_N, t_0) - f_N(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N, t_0) \right], \quad (29)$$

а все уравнение можно затем представить в форме

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{N+1}}{\partial t} + (L_{N0} - \Pi)f_{N+1} = \omega_{-(t-t_0)} S_{-(t-t_0)}^{(N-2)} I_N f_N(t_0) F_p(t) - \\ - \lambda(L_p - \Pi^*)f_{N+1} + \lambda I_{Np} f_N(t_0) F_p(t), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I_{Np} f_N(t_0) F_p(t) = -\frac{1}{V'} \sum_{j>i}^N \int d\mathbf{r}'_{ij} \Theta_{ij} \int_{t_0}^t dt_1 \omega_{-(t-t_1)} S_{-(t-t_1)}^{(ij)} S_{-(t-t_1)}^{(N-2)} \times \\ \times (L_p - \Pi^*) \omega_{-(t-t_0)} \Omega_- f_N(t_0) F_p(t_1) V^{-N-1}. \end{aligned} \quad (30)$$

В формуле (29) \mathbf{p}'_i и \mathbf{p}'_j — импульсы молекул i и j после их столкновения, если до столкновения они были \mathbf{p}_i и \mathbf{p}_j .

В отсутствие броуновской частицы уравнение (30) сводится к основному кинетическому уравнению разреженного газа [5,6].

4. Кинетическое уравнение броуновской частицы

2) Н е р а в н о в е с н а я с р е д а. Кинетическое уравнение для броуновской частицы будет выведено, если разрешить уравнение (30) относительно функции f_{N+1} и подставить ее в (3). Решение указанного уравнения снова будем искать методом возмущений

$$f_{N+1} = f_{N+1}^{(0)} + \lambda f_{N+1}^{(1)} + \dots \quad (31)$$

Уравнения для функций $f_{N+1}^{(0)}$ и $f_{N+1}^{(1)}$ получаются из (30) очевидным образом, не приводя их явного вида, запишем сразу решение в линейном приближении по λ

$$f_{N+1}(t) = \varphi(t) - \lambda \int_{t_0}^t dt_1 \omega_{-(t-t_1)} S_{-(t-t_1)}^{(N)} \left[(L_p - \Pi^*) \varphi(t_1) - I_{Np} f_N(t_0) F_p(t_1) \right],$$

$$\varphi(t) = \omega_- S_-^{(N)} f_N(t_0) F_p(t) + \int_{t_0}^t dt_1 \omega_{-(t-t_0)} S_{-(t-t_0)}^{(N-2)} S_{-(t-t_0)}^{(2)} I_N f_N(t_0) F_p(t_1). \quad (32)$$

Подставляя эту функцию в уравнение (3), приходим к кинетическому уравнению уединенной броуновской частицы в разреженном газе

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_p}{\partial t} + L_p F_p = V \int d\Gamma_N \Pi^* \left\{ \varphi(t) - \lambda \int_{t_0}^t dt_1 \omega_{-(t-t_1)} S_{-(t-t_1)}^{(N)} \times \right. \\ \left. \times \left[(L_p - \Pi^*) \varphi(t_1) - I_{Np} f_N(t_0) F_p(t_1) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (33)$$

Это кинетическое уравнение содержит N -частичную функцию распределения молекул несущего газа f_N и, для того чтобы кинетическое описание рассматриваемой системы сделать замкнутым, необходимо вывести еще уравнение для этой функции. Напомним, что функция f_N получается огрублением (применением оператора P_N) функции F_N . Последняя удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial F_N}{\partial t} + L_N F_N = V^N \int dX \Pi F_{N+1}, \quad (34)$$

которое получается из (1) интегрированием по dX . Действуя на уравнение (34) оператором P_N и интегрируя затем по координатам центра масс молекул i и j , находим [5,6]

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} + L_{N0} f_N = \frac{1}{V^i} \sum_{j>i}^N \sum_{i'>i} dr'_{ij} \Theta_{ij} f_N^{(1)}(\mathbf{r}_{ij}) + V^N \int dX \Pi f_{N+1}. \quad (35)$$

Нетрудно убедиться, что отношение двух интегральных членов в правой части (35) порядка $1/N$. Физически это означает, что наличие уединенной частицы практически не оказывает влияния на эволюцию несущего газа и уравнение можно заменить следующим:

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} + L_{N0} f_N = \frac{1}{V^i} \sum \sum_{j>i}^N \int dr'_{ij} \Theta_{ij} f_N^{(1)}(\mathbf{r}_{ij}). \quad (36)$$

В термодинамическом пределе переход от уравнения (35) к уравнению (36) является строгим. Дальше так же, как и в [5,6], можно показать, что для разреженного газа уравнение (36) приводится к основному кинетическому уравнению разреженного газа

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} + L_{N0} f_N = I_N f_N. \quad (37)$$

5. Обсуждение результатов

Как показывает проведенный анализ, трудности, возникающие при выводе кинетических уравнений для броуновской частицы, имеют принципиальный характер: эволюция броуновской частицы определяется ее взаимодействием со средой, которое всегда является коллективным. По этой причине данная задача легче решается в случае, когда несущая среда является жидкостью, а не газом. Это связано с тем, что кинетический этап эволюции в жидкости по сути отсутствует и можно считать, что в том или ином смысле среда находится в равновесии. Если это так, то, как показано в разделе 1, кинетическое уравнение выводится достаточно легко. В общем случае получающееся кинетическое уравнение (20) оказывается нелокальным. В локальном пределе, когда функция F_p слабо меняется на временах корреляции силы \mathbf{f} (8), получается локальное уравнение (21). Поскольку время корреляции силы \mathbf{f} порядка времени взаимодействия молекул газа с частицей τ_{fp} , на котором функция F_p практически не меняется, то для описания эволюции броуновской частицы следует исходить именно из локального кинетического уравнения (21). В первом приближении по параметру λ оно сводится к обычному уравнению Фоккера-Планка. Коэффициент сопротивления γ в этом уравнении выражается через автокорреляционную функцию силы (21), действующую на частицы со стороны среды. Учет следующего приближения приводит к изменению и этого коэффициента, и коэффициента диффузии. Кинетическое уравнение броуновской частицы с точностью до членов порядка λ^2 выводилось ранее в [3]. Однако там были допущены неточности: в интеграле столкновений (21) отсутствует последний член, а в предпоследнем — коэффициент 2.

В отличие от жидкости в газе, где необходимо учитывать происходящие в нем кинетические процессы, описание броуновского движения существенно усложняется. В разреженном газе кинетика рассматриваемой системы описывается двумя связанными уравнениями (33) и (37). Последнее в термодинамическом пределе для некоррелированных начальных состояний описывает динамику бальцамановского газа

[5,6]. В этом случае можно говорить, что уравнение (33) описывает движение броуновской частицы в больцмановском газе. В равновесии это уравнение снова сводится к уравнению Фоккера–Планка. В общем же случае мы приходим к весьма сложному кинетическому уравнению.

Физически чрезвычайная сложность исследования кинетики броуновского движения объясняется нелокальностью взаимодействия молекул с частицей. Поскольку характерный размер последней больше или порядка длины свободного пробега молекул несущего газа, то можно сказать, что их взаимодействие является дальнедействующим (для молекул) и сильным. Реального продвижения в изучении кинетики броуновского движения в неравновесной газовой среде можно ожидать поэтому лишь на пути создания модельных кинетических уравнений. Для разреженного газа такое уравнение можно получить на основе уравнения (33).

Список литературы

- [1] *Lebowitz J.L., Rubin E.* // Phys. Rev. 1963. Vol. 131. N 6. P. 2381–2396.
- [2] *Fedyanin V.K., Gavrilenko G.M.* // Physica. 1979. Vol. 99A. N 1. P. 34–46.
- [3] *Соколовский А.И., Цейтлин М.Ю.* // ТМФ. 1977. Т. 33. № 3. С. 409–418.
- [4] *Климонтович Ю.Л.* // Кинетическая теория электромагнитных процессов. М.: Наука, 1980. 373 с.
- [5] *Рудяк В.Я.* // Изв. РАН. МЖГ. 1989. № 6. С. 154–160.
- [6] *Rudyak V.Ya.* Preprint NSACE № 1 (3)-94. Novosibirsk, 1994. 24 p.