

Fizikinė kinetika

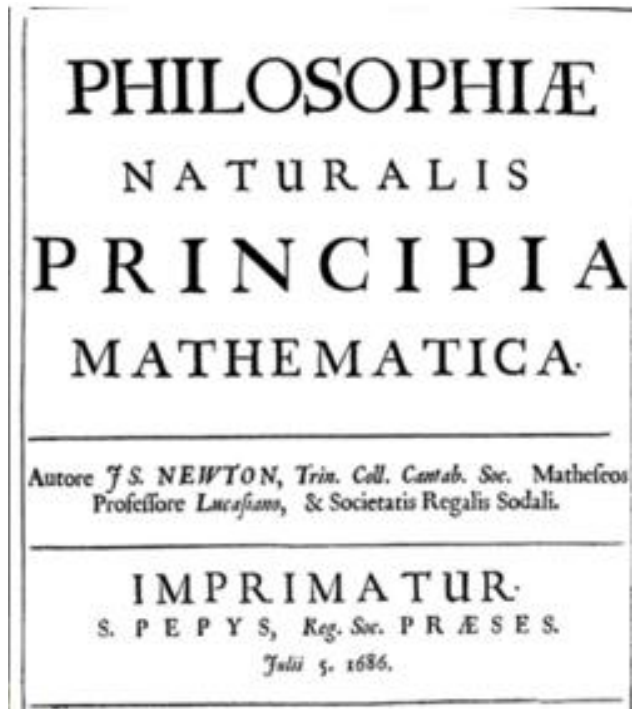
- Įvadas
- Tikimybių teorijos pagrindai
- Brauno judėjimas ir stochastiniai procesai
- Pernašos reiškiniai ir Boltzmano kinetinė lygtis
- Fizikinė kinetika ir chaoso teorija

Literatūra

- L. E. Reichl, „A modern course in statistical physics“, John Wiley & Sons, Ins., New York (1998).
- R. Kubo, M. Toda, N. Hashitsume, „Statistical physics II“, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg (1991).
- Kerson Huang, „Statistical mechanics“, John Wiley & Sons, Ins., New York (1987) [yra vertimas rusų kalba].
- J. R. Dorfman, „An introduction to chaos in nonequilibrium statistical mechanics“, Cambridge university press, Cambridge (1999).
- H. Risken, „The Foker-Plank equation“, Springer-Verlag, New York (1996).
- C. W. Gardiner, „Handbook of stochastic methods for physics, chemistry and natural science“, Springer-Verlag, New York (1985) [yra vertimas rusų kalba].
- Г. М. Заславский, Р. З. Сагдеев, „Введение в нелинейную физику от маятника до турбулентности и хаоса“, Наука Москва (1988).
- Г. Секей, „Парадоксы в теории вероятностей и математической статистике“, Наука Москва (1988).
- Joel Keizer, „Statistical thermodynamics of nonequilibrium processes“, Springer-Verlag, New York (1990) [yra vertimas rusų kalba].
- Ю. Б. Румер, М. Ш. Рывкин, „Термодика статистическая физика и кинетика“, Наука Москва (1977).

Įvadas

- Iki devyniolikto šimtmečio pabaigos teorinis mokslas pagrindinai rėmėsi **deterministiniais modeliais** aprašomais diferencialinėmis lygtimis. Toks požiūris įsigalėjo nuo **Niutono** laikų. 1686 m. Niutonas suformulavo **pagrindinius mechanikos dėsnius bei visuotinos traukos dėsnį**. Be to 1666 m. jis sukūrė **integralinį ir diferencialinį skaičiavimą** (kiek vėliau ir nepriklausomai tai padarė ir Leibnicias). Remdamasis savo mokslu, Niutonas paaikšino planetų judėjimo dėsningumus, kuriuos anksčiau eksperimentiškai nustatė Kepleris (**Keplerio dėsniai**).



- Po nepaprastai sėkmingų mokslo laimėjimų astronomijos srityje mokslininkai patikėjo, kad **viską** šiame pasaulyje (panašiai kaip klasikinėje mechanikoje) **galima aprašyti deterministiniais modeliais** grindžiamais diferencialinėmis lygtimis. Žinant lygčių **pradinės sąlygas** galima **vienareikšmiškai prognozuoti** tiriamos sistemos ateitį. Toks **mechanistinis požiūris** į visatą žinomas, kaip **Laplaso determinizmo principas**. Pagal šį principą visatos ateitį, galima būtų **vienareikšmiškai nusakyti**, jeigu būtų žinomos visų dalelių **pradinės sąlygos**.

- Tačiau šiandieną aišku, kad tokia mechanistinė pasaulėžiūra neteisinga mažiausiai dėl dviejų priežasčių.
- Pirmiausia, dvidešimto amžiaus pradžioje buvo sukurta **kvantinė mechanika**. Šis mokslas iš pagrindų **atsisakė nuo deterministinio aprašymo**. Kvantinė mechanika teigia kad mikropasaulio reiškinius galima aprašyti tik **statistiškai**. **Banginė funkcija** kvantinėje mechanikoje aprašo **tikimybę**, kad tirama dalelė bus tam tikroje vietoje su tam tikromis savybėmis.
- Kita vertus, dvidešimto amžiaus pabaigoje susiformavo **dinaminio chaoso mokslas**. Šis mokslas nagrinėja **paprastas dinamines sistemas**, aprašomas **nedideliu skaičiumi paprastų diferencialinių lygčių**. Buvo parodyta, kad netgi labai paprasti dinaminiai modeliai **gali elgtis labai sudėtingai (chaotiškai)**, praktiškai neprognozuojamai.
- Chaosas sąlygotas nepaprastu sistemų **jautrumu mažiems pradinų sąlygų pakeitimams**. Būtina chaoso sąlyga yra **netiesiškumas**, t.y. chaosas gali atsirasti tik tokiuose modeliuose, kurie aprašomi netiesinėmis diferencialinėmis lygtimis.
- Taigi pasirodė, kad **Laplaso determinizmas nepasiteisina netgi labai paprastoms dinaminėms sistemoms** ir jų aprašymui taip pat reikia taikyti statistinius metodus.

- Apsistosime šiek tiek detaliau ties dinaminio chaoso atsiradimo **istorija**. 1887 m. švedų karalius paskelbė konkursą moksliniam darbui, kuris turėjo atsakyti į klausimą **„ar mūsų saulės sistema yra stabili?“**

- Konkursą laimėjo prancūzų fizikas ir matematikas Puankarė (**Henri Poincare**).

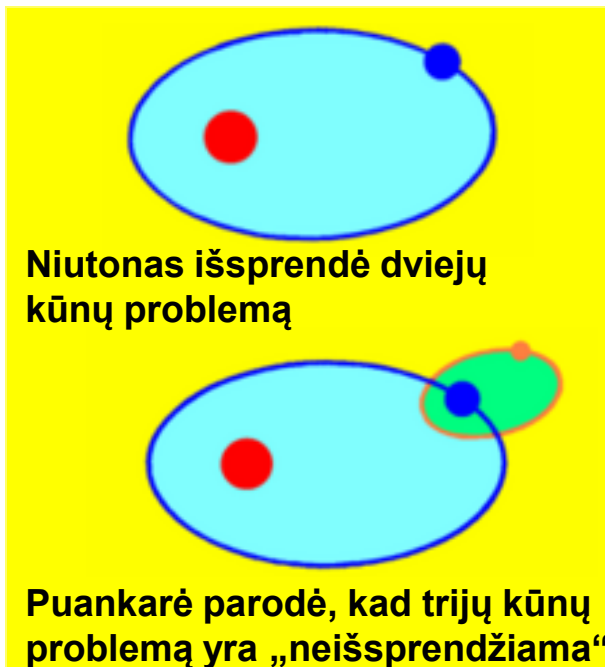
- Laimėjęs konkursą Puankarė pastebėjo, kad padarė klaidą ir beveik visus premijos pinigus panaudojo tam, kad pakeisti viso žurnalo leidinį, kuriame buvo atspausdinti klaidingi rezultatai.

- Puankarė nagrinėjo trijų kūnų problemą (tarkime Saulė, Žemė ir Mėnulis) ir parodė, kad judėjimas gali būti labai sudėtingas (pagal šiuolaikinę terminologiją chaotinis).

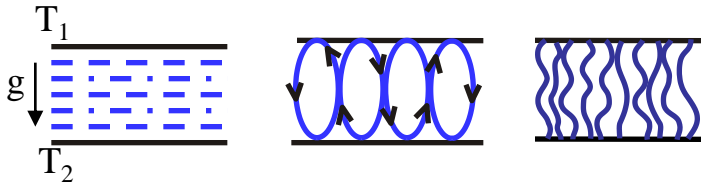
- Trijų kūnų judėjimo **animacija**



Henri Poincare (1854 - 1912)



- **Šiolaikinės chaoso teorijos** pradžia yra siejama su Amerikos meteorologu teoretiku **Lorenz**’u. 1963 m. jis nagrinėjo **Benard’o nestabilumą**.



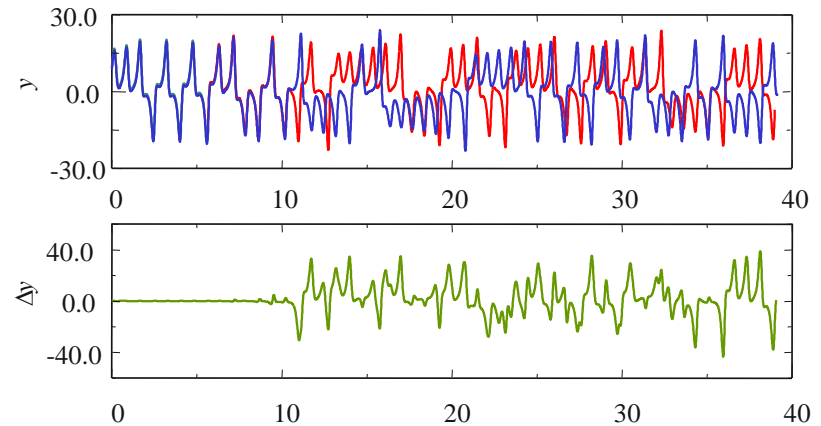
Skystis tarp dviejų plokštumų kaitinamas iš apačios. Didinant temperatūros gradientą iš pradžių atsiranda tvarkingas judėjimas cilindriniais sūkuriais, o po to – turbulencinis judėjimas.

- **Lorenz’o modelis** (1963 m.)

$$\begin{aligned}\dot{x} &= s(y - x) \\ \dot{y} &= rx - y - xz \\ \dot{z} &= xy - bz\end{aligned}$$



Drugelio efektas



- Sprendiniai **eksponentiškai greitai** prasiskiria fazinėje erdvėje. Čia pradinių sąlygų skirtumas sudaro tik 0.001%.
- Dėl nepaprasto jautrumo pradinėms sąlygoms **ilgalaikė oro prognozė neįmanoma**, netgi jeigu tiksliai žinomos orą aprašantis modelis. Drugelio sparnų mostelėjimo pakanka, kad sužlugdyti prognozę.
- Drugelio efekto **animacija** (matlab)

- Chaosas atsiranda daugelyje įvairios prigimties paprastų dinaminių sistemų. Pateiksiu dar keletą pavyzdžių.

- Dvigubos svyruoklės animacija



- Teniso kamuoliukas ant periodiškai judančios rakėtės



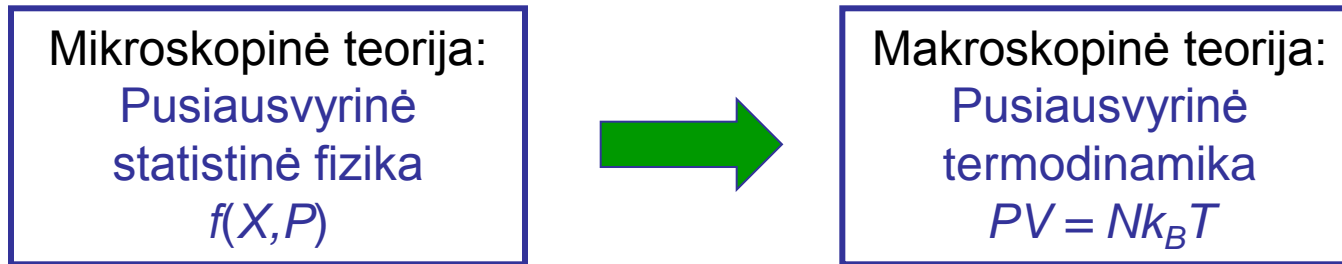
- Taigi šie pavyzdžiai rodo, kad **vienareikšmė ateities prognozė yra neįmanoma** kai kurioms **netgi labai paprastoms dinaminėms sistemoms**. Pažymėkime, kad visos pateiktos pavyzdžiuose sistemos turi **nedidelį laisvės laipsnių skaičių**.

- Natūralu manyti, kad tokių paprastų chaotinių sistemų aprašymui galima (reikia) taikyti **tikimybių teorijos (statistikos) metodus**.

- Istoriskai **statistikos metodus fizikoje** pradėjo taikyti nagrinėjant **sudėtingas sistemas**. Klasikinė **statistinės fizikos** sritis nagrinėja sistemas sudarytas iš **didelio dalelių skaičiaus** (pagal eilę 10^{23} dalelių).

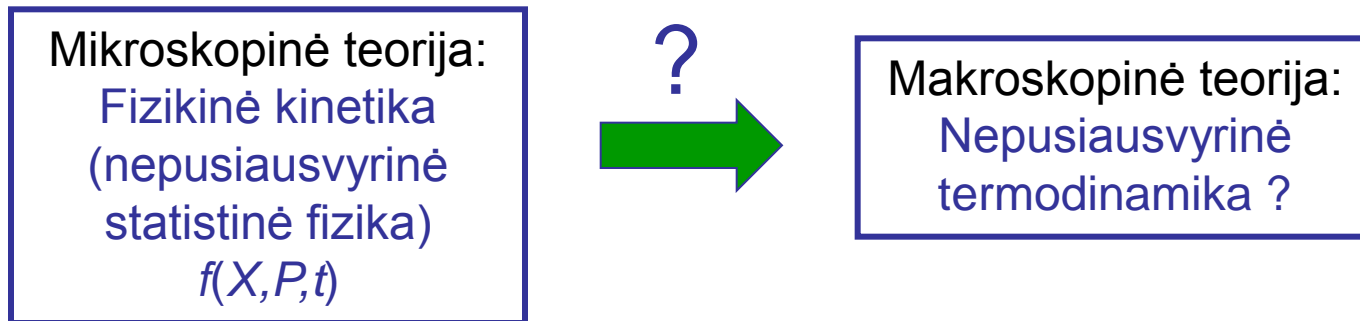
- Ypač įspūdingi rezultatai gauti **pusiausvyrinės statistinės fizikos** srityje. Pusiausvyrinė statistinė fizika – tai **mikroskopinė pusiausvyrinės termodinamikos teorija**. Šios mikroskopinės teorijos pagrindu pavyko gauti makroskopinius termodinamikos dėsnius. Ši **teorija yra labai universali** – ji nepriklauso nuo dalelių tarpusavio sąveikos dėsnių.

- Pagrindinis pusiausvyrinės statistinės fizikos bruožas yra tas, kad ji nagrinėja nepriklausomus nuo laiko statistinius ansamblius, t.y. situacijas, kai ***dalelių tikimybės tankio funkcija nepriklauso nuo laiko.***
- Pusiausvyrinės statistinės fizikos mokslą galima pavaizduoti tokia diagrama:



- ***Fizikinės kinetikos (nepusiausvyrinės statistinės fizikos) mokslas tiria sistemas nutolusiais nuo termodinaminės pusiausvyros.*** Čia domimasi tokiais klausimais:
 - Kaip nepusiausvyrinės sistemos artėja prie termodinaminės pusiausvyros ? Kokie charakteringi relaksacijos laikai ?
 - Kaip kinta fizikinių dydžių nuokrypiai nuo jų vidutinių verčių (fliuktuacijų teorija) ?
 - Koks yra sistemų atsakas į išorinius poveikius (laukus) ?
 - Kaip aprašyti sistemas su srautais (pernašos reiškinius) ?
 - Kaip iš grįžtamų laike mikroskopinių dėsnių gaunami negrįžtami termodinamikos dėsniai ?

- Pagrindinis fizikinės kinetikos (nepusiausvyrinės statistinės fizikos) bruožas yra tas, kad ji nagrinėja priklausomus nuo laiko statistinius ansamblius, t.y. situacijas, kai ***dalelių tikimybės tankio funkcija priklauso nuo laiko.***
- Matematikos sritis, tirianti sistemas su priklausančiomis nuo laiko pasiskirstymo funkcijomis, vadinama ***stochastinių procesų teorija.*** Tad fizikinė kinetika remiasi šia teorija.
- Fizikinės kinetikos (nepusiausvyrinės statistinės fizikos) mokslą norėtusi pavaizduoti panašia diagrama, kaip ir pusiausvyrinės statistinės fizikos mokslą:



- Tačiau šiame vaizdavime yra daug klausimų. Pirmiausia ***neegzistuoja universalios nepusiausvyrinės termodinamikos teorijos.*** Bendroju atveju rezultatai priklauso nuo tarpdalelinės sąveikos charakteristikų. Tam tikrus teorinius rezultatus pavyksta gauti tik ***išretintoms dujoms,*** kai vidutinis atstumas tarp molekulių yra didelis palyginus su tarpmolekulinių jėgų veikimo spinduliu. Paprastai nepusiausvyrinės statistinės fizikos teorijos galioja tik esant ***nedideliems nuokrypiams nuo termodinaminės pusiausvyros.***

- Šis kursas susideda iš keturių dalių.
- **Pirmoje dalyje** mes pakartosime tikimybių teorijos pagrindus. Dėmesys bus sukonzentruotas į tas teorijos dalis, kurios bus svarbios tolimesniam dėstymui. Pavyzdžiui mes panagrinėsime atsitiktinio klaidžiojimo uždavinį, kuris bus svarbus Brauno judėjimui suprasti.
- **Antroje dalyje** mes nagrinėsime Brauno judėjimo teoriją. Mes pradėsime nuo empirinės Brauno judėjimo teorijos, po to panagrinėsime Lanževeno bei Fokerio-Planko teorijas. Šios dalies dėstymą baigsime Markovo grandinėmis bei pagrindine kinetine lygtimi.
- **Trečioje dalyje** aptarsime pernašos reiškinius ir Boltzmano kinetinę lygtį. Pradžioje bus išdėstyta elementari pernašos teorija. Po to išvesime Boltzmano kinetinę lygtį ir remiantis šia lygtimi vėl panagrinėsime pernašos reiškinius.
- **Ketvirtoje dalyje** fizikinės kinetikos metodus pritaikysime chaotinėms sistemoms su nedideliu laisvės laipsnių skaičiumi. Paprastu pavyzdžiu pademonstruosime kaip iš grįžtamų laike mikroskopinių dinaminių lygčių gaunama negrįžtama makroskopinė lygtis.