ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 1, № 4 (1997) с. 490–512

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 1, No 4 (1997) p. 490–512

ПРО КІНЕТИЧНУ ТЕОРІЮ КЛАСИЧНИХ ЧАСТИНОК, ЩО ВЗАЄМОДІЮТЬ, У МЕТОДІ НЕРІВНОВАЖНОГО СТАТИСТИЧНОГО ОПЕРАТОРА

М. В. Токарчук, І. П. Омелян, О. Є. Кобрин
Інститут фізики конденсованих систем НАН України
Україна, UA–290011 Львів, вул. Свєнціцького, 1
(Отримано 18 листопада 1996)

Розглянуто розв'язки ланцюжка рівнянь ББҐКІ для нерівноважних функцій розподілу з модифікованими граничними умовами, які враховують як нерівноважність одночастинкової функції розподілу, так і локальні закони збереження. Запропоновані модифіковані ґрупові розклади. В поляризаційному наближенні отримано узагальнене кінетичне рівняння для твердих сфер та узагальнене кінетичне рівняння Боголюбова–Ленарда–Балеску для густого електронного газу.

Ключові слова: кінетичне рівняння, нерівноважна функція розподілу, кінетика, гідродинаміка.

PACS number(s): 05.60.+w, 05.70.Ln, 05.20.Dd, 52.25.Dg, 52.25.Fi

I. ВСТУП

М. М. Боголюбов [1] розробив послідовний метод побудови кінетичних рівнянь, що ґрунтується на ланцюжку рівнянь для s-частинкових функцій розподілу і граничній умові послаблення кореляцій. Хоч надалі з'явилось чимало зовнішньо відмінних між собою підходів [2–14] до виведення кінетичних рівнянь, усі вони використовували у тій чи іншій формі умову послаблення кореляцій і так само, як метод М. М. Боголюбова, вони найбільш ефективні, коли в задачі є малий параметр (взаємодія, густина тощо).

У кінетичній теорії класичних газів можна виділити дві принципові проблеми. Перша пов'язана з неаналітичною залежністю інтеґрала зіткнень від густини. Тому навіть у випадку газу малої густини для розрахунку поправок до коефіцієнтів переносу потрібне часткове пересумування ланцюжка ББҐКІ [15,16]. Друга проблема — це побудова кінетичних рівнянь для газів великої густини. У цьому випадку в інтеґралі зіткнень не можна обмежитись декількома членами розкладу за малим параметром і аналіз ланцюжка ББҐКІ стає дуже складним (взагалі кажучи, тут густина вже не є малим параметром). І тому важливого значення у досліджуваній проблемі набуває побудова кінетичних рівнянь для густих газів та рідин з модельними міжчастинковими потенціялами взаємодії.

Першою теорією у цьому напрямку є напівфеноменологічна теорія густих газів Енскоґа SET (standard Enskog theory) [17,18]. В її основі є положення, подібні до тих, які використовують для виведення кінетичного рівняння Больцмана. Незважаючи на досить грубі припущення щодо інтеґрала зіткнень у кінетичному рівнянні для одночастинкової функції розподілу твердих сфер, теорія Енскоґа дуже добре описує низку властивостей реальних густих газів [19,20].

Девіс та інші [21] запропонували кінетичну теорію DRS (Davis, Rice, Sengers) для системи класичних частинок з міжчастинковим потенціялом у формі прямокутної ями. В кінетичному рівнянні DRS притягувальна частина реального потенціялу взаємодії апроксимується притягувальною стінкою скінченної висоти.

З погляду статистичної теорії нерівноважних процесів теорії SET та DRS мають два спільні суттєві недоліки. По-перше, кінетичні рівняння цих теорій не виводяться у рамках якої-небудь послідовної схеми, подібної до схеми М. М. Боголюбова для розріджених газів [1]; по-друге, не доведено H-теореми, хоча у праці [22] було названо спосіб побудови функціонала ентропії теорії Енскоґа. Намагаючись подолати ці недоліки, в [23] була запропонована модифікація теорії Енскоґа і на підставі діяграмного методу отримано кінетичне рівняння для одночастинкової функції розподілу — RET (revized Enskog theory). Суть цієї модифікації полягає в заміні сталого множника (значення бінарної рівноважної функції розподілу на контакті двох твердих сфер) в інтеґралі зіткнення SET бінарною квазірівноважною функцією розподілу, що є функціоналом від нерівноважної концентрації частинок $n(\mathbf{r};t)$. Для кінетичного рівняння RET П. Резибуа довів H-теорему [24,25].

На підставі ревізованої теорії Енскоґа RET була запропонована також кінетична теорія KMFT (kinetic mean field theory) [26,27] для системи класичних частинок, взаємодію яких описує сума потенціялів твердих сфер і деякого далекосяжного потенціялу, що враховується в наближенні середнього поля. Основний висновок теорії KMFT полягає в тому, що гладка частина потенціялу міжчастинкової взаємодії не робить явного внеску в коефіцієнти переносу [26,28]. Цей результат, звичайно, зумовлений прийнятими в теорії наближеннями. Є лише опосередкований внесок через парну квазірівноважну функцію розподілу, залежність якої від температури визначається гладкою частиною потенціялу. Необхідно додати, що в [29] запропонована модифікація потенціялу прямокутної ями, яка полягає в тому, що потенціял між твердосферною та притягувальною стінками вважається не сталим, а таким, що дорівнює деякому "хвосту". Для такого потенціялу отримано кінетичне рівняння, в якому гладка частина враховується в наближенні середнього поля.

У 1985 р. запропонована ревізована теорія DRS — RDRS [30], кінетичне рівняння якої задовольняє H-теорему.

На цьому етапі досліджень у кінетичній теорії густих газів та рідин фундаментальною виявилась праця Д. М. Зубарєва та В. Г. Морозова [31], у якій наведено формулювання нової граничної умови до ланцюжка рівнянь ББҐКІ, що враховує кореляції, пов'язані з локальними законами збереження. У наближенні "парних" зіткнень ця модифікація умови послаблення кореляцій М. М. Боголюбова для системи твердих сфер привела до кінетичного рівняння, що за структурою нагадує кінетичне рівняння Енскоґа. Подібні ідеї незалежно висунули автори [30], отримуючи кінетичне рівняння, коли взаємодію між частинками моделює потенціял прямокутної ями. Необхідно зазначити, що у працях В. Я. Рудяка [32–34] була запропонована інша модифікація підходу М. М. Боголюбова [1], яка дає змогу отримати кінетичне рівняння типу Енскоґа, і зроблена спроба поширити його на системи з "м'яким" потенціялом взаємодії між частинками.

Модифікація граничних умов послаблення кореляцій до ланцюжка рівнянь М. М. Боголюбова, запропонована в праці Д. Н. Зубарєва і В. Г. Морозова [31], набула дальшого розвитку в [35–44]. Важливим досягненням розвинутого в цих працях підходу є те, що сформульована модифікована гранична умова, яка враховує локальні закони збереження до ланцюжка ББҐКІ, дала змогу вперше в [38,39] послідовно вивести кінетичне рівняння ревізованої теорії Енскоґа [23–25] для системи твердих сфер. На підставі цього результату було отримано кінетичне рівняння для системи з модельним багатосходинковим міжчастинковим потенціялом взаємодії [36,37,40] (зокрема, для цього рівняння доведено H-теорему в [37]), а також кінетичне рівняння Енскоґа–Ландау [38,39,41] для системи заряджених твердих сфер. Для отриманих методом Чепмена–Енскоґа за таким підходом нових кінетичних рівнянь для модельних систем були відшукані нормальні розв'язки, за допомогою яких виконані числові розрахунки коефіцієнтів переносу об'ємної, зсувної в'язкостей і теплопровідності для систем, які моделюють аргон [36,40], одноразово йонізований аргон [42,44]. Важливо зазначити, що кінетичне рівняння ревізованої теорії Енскоґа [23–25], кінетичне рівняння для модельної системи з багатосходинковим потенціялом взаємодії [36,37,40] та кінетичне рівняння Енскоґа–Ландау для системи заряджених твердих сфер [38,39,41] отримані з ланцюжка рівнянь ББҐКІ з модифікованою граничною умовою в наближенні "парних" зіткнень. Очевидно, що ці рівняння мають свою область застосування і, зокрема, їх не можна використовувати під час опису систем, для яких характерні колективні ефекти, що зумовлені кулонівською, дипольною чи іншими далекосяжними силами взаємодії між частинками. Для опису колективних ефектів у системах частинок з далекосяжним характером взаємодії необхідні кінетичні рівняння у вищих наближеннях, ніж "парні" зіткнення. Прикладом такого рівняння є кінетичне рівняння Боголюбова–Ленарда–Балеску [14,45,46] для кулонівської плазми.

Для аналізу розв'язків ланцюжка рівнянь ББҐКІ з модифікованою граничною умовою у вищих наближеннях за міжчастинковими кореляціями зручно застосувати концепцію ґрупових розкладів [2–4,9,47]. Ґрупові розклади використовували до ланцюжка рівнянь ББҐКІ в багатьох працях [2–4,8,9,11,13–16], зокрема, з граничною умовою, що відповідає умові послаблення кореляцій за М. М. Боголюбовим, у працях Д. М. Зубарєва і М. Ю. Новікова [9,47,48], в яких розвинутий діяграмний метод побудови розв'язків ланцюжка рівнянь ББҐКІ.

У другому розділі отримано ланцюжок рівнянь ББҐКІ для нерівноважних функцій розподілу з модифікованими граничними умовами, які враховують як нерівноважність одночастинкової функції розподілу, так і локальні закони збереження. Наближення "парних" зіткнень для ланцюжка рівнянь ББҐКІ, яке приводить до рівняння ревізованої теорії Енскоґа RET [38,39], кінетичного рівняння для частинок з модельним багатосходинковим потенціялом взаємодії [37,40,55] та кінетичного рівняння Енскоґа–Ландау для системи заряджених твердих сфер [38,39,44], розглянуто у третьому розділі. У четвертому запропоновані модифіковані ґрупові розклади до ланцюжка рівнянь ББҐКІ. В поляризаційному наближенні отримані узагальнене кінетичне рівняння для твердих сфер та узагальнене кінетичне рівняння Боголюбова–Ленарда–Балеску для густого електронного газу.

II. РІВНЯННЯ ЛІУВІЛЯ ТА ЛАНЦЮЖОК РІВНЯНЬ ББҐКІ З МОДИФІКОВАНОЮ ГРАНИЧНОЮ УМОВОЮ

Розглянемо систему з N однакових класичних частинок, що містяться в об'ємі V, гамільтоніян якої має вигляд

$$H = \sum_{l=1}^{N} \frac{p_l^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{l \neq j=1}^{N} \Phi(|\mathbf{r}_{lj}|), \tag{2.1}$$

де $\Phi(|\mathbf{r}_{lj}|)$ — енергія взаємодії двох частинок; $\mathbf{p}_l$ — імпульс l-ї частинки; m — її маса; $|\mathbf{r}_{lj}| = |\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j|$ — відстань між парою взаємодіючих частинок. Нерівноважний стан такої системи описує N-частинкова функція розподілу $\varrho(x_1, \dots, x_N; t) = \varrho\left(x^N; t\right)$, що задовольняє рівняння Ліувіля

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathrm{i}L_N\right)\varrho\left(x^N;t\right)=0, \tag{2.2}$$

де $x_j=\{\mathbf{r},\mathbf{p}\}$ — сукупність фазових змінних j-ї частинки; i — уявна одиниця; L_N — оператор Ліувіля:

$$L_N=\sum_{l=1}^{N}L(l)+\frac{1}{2}\sum_{l\neq j=1}^{N}L(l,j), \tag{2.3}$$

$$L(l)=-\mathrm{i}\frac{\mathbf{p}_l}{m}\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}_l},$$

$$L(l,j)=\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}_l}\varPhi(|\mathbf{r}_{lj}|)\left[\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}_l}-\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}_j}\right].$$

Функція $\varrho\left(x^N;t\right)$ є симетричною стосовно перестановок $x_l\leftrightarrow x_j$ фазових змінних будь-якої пари частинок і задовольняє умову нормування

$$\int \mathrm{d}\varGamma_N\ \varrho\left(x^N;t\right)=1, \tag{2.4}$$

$$\mathrm{d}\varGamma_N=\frac{\mathrm{d}x^N}{N!}=\frac{\{\mathrm{d}x_1\ldots\mathrm{d}x_N\}}{N!},\qquad \mathrm{d}x_l=\mathrm{d}\mathbf{r}_l\mathrm{d}\mathbf{p}_l.$$

Для розв'язування рівняння Ліувіля (2.2) необхідно задати граничну умову. Вона повинна бути такою, щоб розв'язок рівняння Ліувіля відповідав фізичному змісту стану системи, який розглядаємо. Використовуючи метод нерівноважного статистичного оператора Д. М. Зубарєва [49,50], будемо шукати такі розв'язки рівняння Ліувіля (2.2), які залежать від часу лише через значення деякого набору спостережуваних змінних, достатнього для опису нерівноважного стану системи, і не залежать від початкового моменту часу t_0. Розв'язок рівняння Ліувіля, що задовольняє початкову умову

$$\varrho\left(x^N;t\right)\Big|_{t=t_0}=\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t_0\right),$$

має вигляд

$$\varrho\left(x^N;t\right)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}L_N(t-t_0)}\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t_0\right). \tag{2.5}$$

Будемо розглядати часи $t>t_0$, коли деталі початкового стану системи стають несуттєвими. Тоді, щоб позбутися залежности від t_0, усереднимо (2.5) за початковими моментами часу від t_0 до t і виконаємо граничний перехід $t-t_0\to\infty$, у результаті отримаємо [49,50]

$$\varrho\left(x^N;t\right)=\varepsilon\int_{-\infty}^{0}\mathrm{d}t'\ \mathrm{e}^{\varepsilon t'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}L_N t'}\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t+t'\right), \tag{2.6}$$

де $\varepsilon\to+0$ після термодинамічного граничного переходу. Розв'язок (2.6), як можна показати безпосереднім диференціюванням його за t, задовольняє рівняння Ліувіля з нескінченно малим джерелом у правій частині:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathrm{i}L_N\right)\varrho\left(x^N;t\right)$$
$$=-\varepsilon\Big(\varrho\left(x^N;t\right)-\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right)\Big). \tag{2.7}$$

Джерело порушує симетрію рівняння Ліувіля стосовно інверсії часу і відбирає загаяні розв'язки, що відповідають скороченому описові нерівноважного стану системи. Допоміжна функція $\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right)$ є квазірівноважною функцією розподілу, що визначається з умови екстремуму інформаційної ентропії системи зі збереженням умови нормування та за додаткових умов, що середні значення змінних скороченого опису є фіксованими. Вибір функції $\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right)$ значною мірою залежить від нерівноважного стану системи, який розглядаємо. У випадку газів малої густини на інтервалах часу, значно більших від часу зіткнень, вищі функції розподілу частинок починають залежати від часу лише через одночастинкові функції розподілу [1,9]. Це означає, що можливий скорочений опис нерівноважного стану, при якому повна нерівноважна функція розподілу залежить від часу лише через $f_1(x;t)$, і в цьому випадку квазірівноважна функція розподілу $\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right)$ має вигляд [1,9]

$$\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right)=\prod_{j=1}^{N}\frac{f_1(x_j;t)}{\mathrm{e}}. \tag{2.8}$$

Тоді рівняння Ліувіля з джерелом (2.7) з урахуванням (2.8) відповідає скороченому опису еволюції системи на кінетичній стадії, коли вважається, що єдиною повільною змінною з часом є одночастинкова функція розподілу. Однак у системі завжди є додаткові величини, які повільно змінюються з часом: це величини, що локально зберігаються. У випадку однокомпонентної системи до них належать густини маси $\rho(\mathbf{r};t)$, імпульсу $\mathbf{j}(\mathbf{r};t)$ та повної енергії $\mathcal{E}(\mathbf{r};t)$. Вони на великих часах задовольняють узагальнені рівняння гідродинаміки, з якими, взагалі кажучи, потрібно узгодити кінетичне рівняння для $f_1(x;t)$. Для газів малої густини таке узгодження можна, в принципі, виконати з необхідною точністю у кожному порядку за густиною. Для газів великої густини та рідин, коли малого параметра нема, час визначення кореляцій стає співмірним з часом, за який змінюється сама одночастинкова функція розподілу. Це означає, що у процесі "зіткнення" частинок не можна нехтувати багаточастинковими кореляціями, пов'язаними з локальними законами збереження маси, імпульсу та енергії, що є основою гідродинамічного опису еволюції системи [49,50]. Локальні закони збереження накладають на кінетичні процеси деякі обмеження, причому їхня роль особливо важлива у випадку великих густин, коли не можна нехтувати взаємодією виділеної ґрупи частинок з усіма іншими частинками системи. Це свідчить про тісний взаємозв'язок кінетики і гідродинаміки для густих газів та рідин. Тому, отримуючи кінетичні рівняння для таких систем, природно вибрати скорочений опис нерівноважних станів таким чином, щоб правильна динаміка величин, що зберігаються, враховувалась автоматично. Для цього можна з самого початку включити густини гідродинамічних змінних разом з одночастинковою функцією розподілу $f_1(x;t)$ в набір параметрів скороченого опису [31,35,39,43]. Густинам гідродинамічних величин $\rho(\mathbf{r};t)$, $\mathbf{j}(\mathbf{r};t)$ та $\mathcal{E}(\mathbf{r};t)$ відповідають такі фазові функції:

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \int \mathrm{d}\mathbf{p}\; m\hat{n}_1(x), \tag{2.9}$$

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = \int \mathrm{d}\mathbf{p}\; \mathbf{p}\hat{n}_1(x),$$

$$\hat{\mathcal{E}}(\mathbf{r}) = \int \mathrm{d}\mathbf{p}\; \frac{p^2}{2m}\hat{n}_1(x)$$

$$+\frac{1}{2}\int \mathrm{d}\mathbf{r}'\;\mathrm{d}\mathbf{p}\;\mathrm{d}\mathbf{p}'\;\mathit{\Phi}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)\hat{n}_2(x,x'),$$

де

$$\hat{n}_1(x) = \sum_{l=1}^{N}\delta(x-x_l) = \sum_{l=1}^{N}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_l)\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}_l), \tag{2.10.a}$$

$$\hat{n}_2(x,x') = \sum_{l\neq j=1}^{N}\delta(x-x_l)\delta(x'-x_j) \tag{2.10.b}$$

— одно- та двочастинкові мікроскопічні фазові густини. З формул (2.9) видно особливу роль потенціяльної енергії взаємодії, оскільки, на відміну від $\rho(\mathbf{r};t) = \langle\hat{\rho}(\mathbf{r})\rangle^t$, $\mathbf{j}(\mathbf{r};t) = \langle\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})\rangle^t$, нерівноважне середнє значення енергії $\mathcal{E}(\mathbf{r};t) = \langle\hat{\mathcal{E}}(\mathbf{r})\rangle^t$ не виражається тільки через одночастинкову функцію розподілу $f_1(x;t) = \langle\hat{n}_1(x)\rangle^t$, тому що потенціяльну частину енергії $\mathcal{E}_{int}(\mathbf{r};t) = \langle\hat{\mathcal{E}}_{int}(\mathbf{r})\rangle^t$ можна розрахувати за допомогою двочастинкової функції розподілу $f_2(x,x';t) = \langle\hat{n}_2(x,x')\rangle^t$. Тут

$$\hat{\mathcal{E}}_{int}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}\mathbf{r}'\;\mathrm{d}\mathbf{p}\;\mathrm{d}\mathbf{p}'\;\mathit{\Phi}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)\hat{n}_2(x,x') \tag{2.11}$$

— густина потенціяльної енергії взаємодії, а $\langle\ldots\rangle^t$ означає усереднення з функцією $\varrho\left(x^N;t\right)$:

$$\langle\ldots\rangle^t = \int \mathrm{d}\mathit{\Gamma}_N \ldots \varrho\left(x^N;t\right).$$

Звідси випливає таке: якщо $f_1(x;t)$ — одночастинкова функція розподілу, вибрана як один з параметрів скороченого опису, то додатковим незалежним параметром може бути густина енергії взаємодії (2.11). Тоді з умови екстремуму функціонала інформаційної ентропії

$$S_{inf} = -\int \mathrm{d}\mathit{\Gamma}_N\; \varrho\left(x^N;t\right)\ln\varrho\left(x^N;t\right)$$

при фіксованих середніх значеннях

$$\langle\hat{n}_1(x)^t\rangle = f_1(x;t), \tag{2.12}$$

$$\langle\hat{\mathcal{E}}_{int}(\mathbf{r})\rangle^t = \mathcal{E}_{int}(\mathbf{r};t)$$

і збереженні умови нормування (2.4) визначимо квазірівноважну функцію розподілу $\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right)$ [31,35]. Це еквівалентне відшуканню безумовного екстремуму функціонала

$$L(\varrho) = -\int \mathrm{d}\mathit{\Gamma}_N\; \varrho\left(x^N;t\right)\Big\{\ln\varrho\left(x^N;t\right) + \Phi(t) - 1$$

$$+\int \mathrm{d}\mathbf{r}\;\beta(\mathbf{r};t)\hat{\mathcal{E}}_{int}(\mathbf{r}) + \int \mathrm{d}x\; a(x;t)\hat{n}_1(x)\Big\},$$

де $\Phi(t)$, $\beta(\mathbf{r};t)$, $a(x;t)$ — лагранжеві множники. Беручи варіяцію $\dfrac{\delta}{\delta\varrho}L(\varrho)$, після нескладних перетворень визначимо квазірівноважну функцію розподілу у такому вигляді:

$$\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right) = \exp\left\{-\Phi(t) - \int \mathrm{d}\mathbf{r}\;\beta(\mathbf{r};t)\hat{\mathcal{E}}_{int}(\mathbf{r}) - \int \mathrm{d}x\; a(x;t)\hat{n}_1(x)\right\}, \tag{2.13}$$

де

$$\Phi(t) = \ln\int \mathrm{d}\mathit{\Gamma}_N\;\exp\left\{-\int \mathrm{d}\mathbf{r}\;\beta(\mathbf{r};t)\hat{\mathcal{E}}_{int}(\mathbf{r}) - \int \mathrm{d}x\; a(x;t)\hat{n}_1(x)\right\} \tag{2.14}$$

— функціонал Масьє–Планка, який визначають з умови нормування

$$\int \mathrm{d}\varGamma_N \ \varrho_\mathrm{q}\left(x^N;t\right) = 1. \tag{2.15}$$

Квазірівноважна функція розподілу $\varrho_\mathrm{q}\left(x^N;t\right)$ у вигляді (2.13) отримана в [31]. Для з'ясування фізичного змісту параметрів $\beta(\mathbf{r};t)$, $a(x;t)$ квазірівноважну функцію розподілу (2.13) перепишемо в іншому вигляді:

$$\varrho_\mathrm{q}\left(x^N;t\right) = \exp\left\{-\Phi(t) - \int \mathrm{d}\mathbf{r}\ \beta(\mathbf{r};t)\hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r}) - \int \mathrm{d}x\ a'(x;t)\hat{n}_1(x)\right\}, \tag{2.16}$$

де $\hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r})$ — густина повної енергії у системі відліку, що рухається разом з елементом системи з масовою швидкістю $\mathbf{V}(\mathbf{r};t)$ [35,43,49,50]:

$$\hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r}) = \hat{\mathcal{E}}(\mathbf{r}) - \mathbf{V}(\mathbf{r};t)\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) + \frac{m}{2}V^2(\mathbf{r};t)\hat{n}(\mathbf{r}), \tag{2.17}$$

$\hat{n}(\mathbf{r}) = \int \mathrm{d}\mathbf{p}\ \ \hat{n}_1(x)$ — густина кількості частинок. Параметри $\beta(\mathbf{r};t)$, $a'(x;t)$ у (2.16) визначаються з умов самоузгодження: рівности квазісередніх величин $\langle\hat{n}_1(x)\rangle^t_\mathrm{q}$, $\langle\hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r})\rangle^t_\mathrm{q}$ їхнім істинним середнім значенням $\langle\hat{n}_1(x)\rangle^t$, $\langle\hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r})\rangle^t$:

$$\langle\hat{n}_1(x)\rangle^t_\mathrm{q} = \langle\hat{n}_1(x)\rangle^t = f_1(x;t), \tag{2.18.a}$$

$$\langle\hat{\mathcal{E}}'_1(\mathbf{r})\rangle^t_\mathrm{q} = \langle\hat{\mathcal{E}}'_1(\mathbf{r})\rangle^t, \tag{2.18.b}$$

$$\langle\ldots\rangle^t_\mathrm{q} = \int \mathrm{d}\varGamma_N\ \ldots\varrho_\mathrm{q}\left(x^N;t\right).$$

Під час таких перетворень параметр $a'(x;t)$ пов'язаний з $a(x;t)$ співвідношенням

$$a'(x;t) = a(x;t) - \beta(\mathbf{r};t)\left\{\frac{p^2}{2m} - \mathbf{V}(\mathbf{r};t)\mathbf{p} + \frac{m}{2}V^2(\mathbf{r};t)\right\}.$$

Якщо умови самоузгодження (2.18.a), (2.18.b) виконуються, то, беручи варіаційні похідні від функціонала Масьє–Планка

$$\Phi(t) = \ln\int \mathrm{d}\varGamma_N\ \exp\left\{-\int \mathrm{d}\mathbf{r}\ \beta(\mathbf{r};t)\hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r}) - \int \mathrm{d}x\ a'(x;t)\hat{n}_1(x)\right\}$$

за параметрами $\beta(\mathbf{r};t)$, $a'(x;t)$, отримаємо співвідношення з урахуванням умов самоузгодження:

$$\frac{\delta\Phi(t)}{\delta\beta(\mathbf{r};t)} = -\langle\hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r})\rangle^t_\mathrm{q} = -\langle\hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r})\rangle^t, \tag{2.19.a}$$

$$\frac{\delta\Phi(t)}{\delta a(x;t)} = -\langle\hat{n}_1(x)\rangle^t_\mathrm{q} = -\langle\hat{n}_1(x)\rangle^t = -f_1(x;t). \tag{2.19.b}$$

Це означає, що $\beta(\mathbf{r};t)$ спряжене середній енергії в супроводжувальній системі координат, а $a'(x;t)$ спряжене $f_1(x;t)$ — нерівноважній функції розподілу. Для з'ясування фізичного змісту цих параметрів визначимо ентропію системи

$$S(t) = -\langle\ln\varrho_\mathrm{q}\left(x^N;t\right)\rangle^t_\mathrm{q} = \Phi(t) + \int \mathrm{d}\mathbf{r}\ \beta(\mathbf{r};t)\langle\hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r})\rangle^t_\mathrm{q} + \int \mathrm{d}x\ a'(x;t)\langle\hat{n}_1(x)\rangle^t_\mathrm{q},$$

або, враховуючи умови самоузгодження (2.18.a), (2.18.b), маємо

$$S(t) = \Phi(t) + \int \mathrm{d}\mathbf{r}\ \beta(\mathbf{r};t)\langle\hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r})\rangle^t + \int \mathrm{d}x\ a'(x;t)\langle\hat{n}_1(x)\rangle^t. \tag{2.20}$$

Звідси, беручи варіаційні похідні від ентропії (2.20) за середніми значеннями $\langle\hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r})\rangle^t$ та $\langle\hat{n}_1(x)\rangle^t$ при фіксованих відповідних значеннях середніх, визначимо термодинамічні співвідношення:

$$\frac{\delta S(t)}{\delta \langle \hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r})\rangle^t} = \beta(\mathbf{r};t), \qquad \frac{\delta S(t)}{\delta f_1(x;t)} = a'(x;t), \tag{2.21}$$

звідки $\beta(\mathbf{r};t)$ є аналогом оберненої локальної температури.

Зі структури виразу для ентропії (2.20) випливають два граничні випадки. При $a'(x;t) = -\beta(\mathbf{r};t)\mu(\mathbf{r};t)$ (2.20) переходить у вираз для ентропії, що відповідає гідродинамічному опису нерівноважного стану системи [43,50]:

$$S(t) = \Phi(t) + \int \mathrm{d}\mathbf{r}\ \beta(\mathbf{r};t)\left(\langle \hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r})\rangle^t - \mu(\mathbf{r};t)\langle \hat{n}(\mathbf{r})\rangle^t\right), \tag{2.22}$$

і якому відповідає квазірівноважна функція розподілу [43,50]

$$\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right) = \exp\left\{-\Phi(t) - \int \mathrm{d}\mathbf{r}\ \beta(\mathbf{r};t)\Big(\hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r}) - \mu(\mathbf{r};t)\hat{n}(\mathbf{r})\Big)\right\},$$

$$\Phi(t) = \ln\int \mathrm{d}\mathit{\Gamma}_N\ \exp\left\{\int \mathrm{d}\mathbf{r}\ \beta(\mathbf{r};t)\Big(\hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r}) - \mu(\mathbf{r};t)\hat{n}(\mathbf{r})\Big)\right\}$$

з відповідними умовами самоузгодження для визначення термодинамічних параметрів $\beta(\mathbf{r};t)$, $\mu(\mathbf{r};t)$ (локального значення хемічного потенціялу):

$$\langle \hat{n}(\mathbf{r})\rangle^t_{\mathrm{q}} = \langle \hat{n}(\mathbf{r})\rangle^t, \quad \langle \hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r})\rangle^t_{\mathrm{q}} = \langle \hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r})\rangle^t.$$

У випадку, коли внеском енергії взаємодії між частинками можна знехтувати (розріджений газ), квазірівноважна функція розподілу (2.16) має вигляд

$$\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right) = \exp\left\{-\Phi(t) - \int \mathrm{d}\mathbf{r}\ \beta(\mathbf{r};t)\hat{\mathcal{E}}'_{kin}(\mathbf{r}) - \int \mathrm{d}x\ a'(x;t)\hat{n}_1(x)\right\},$$

або, враховуючи (2.17) і зв'язок між $a'(x;t)$ та $a(x;t)$, отримаємо

$$\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right) = \exp\left\{-\Phi(t) - \int \mathrm{d}x\ a(x;t)\hat{n}_1(x)\right\}, \tag{2.23}$$

$$\Phi(t) = \ln\int \mathrm{d}\mathit{\Gamma}_N\ \exp\left\{-\int \mathrm{d}x\ a(x;t)\hat{n}_1(x)\right\},$$

де

$$\hat{\mathcal{E}}'_{kin}(\mathbf{r}) = \hat{\mathcal{E}}_{kin}(\mathbf{r}) - \mathbf{V}(\mathbf{r};t)\mathbf{j}(\mathbf{r}) + \frac{m}{2}V^2(\mathbf{r};t)\hat{n}(\mathbf{r}), \tag{2.24}$$

$\hat{\mathcal{E}}_{kin}(\mathbf{r}) = \int \mathrm{d}\mathbf{p}\ \frac{p^2}{2m}\hat{n}_1(x)$ — густина кінетичної енергії. Тепер, визначаючи у (2.23) параметр $a(x;t)$ за допомогою умови самоузгодження $\langle \hat{n}(x)\rangle^t_{\mathrm{q}} = \langle \hat{n}(x)\rangle^t$, можна показати [35,43], що (2.23) для $\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right)$ переходить у розподіл (2.8), коли вважається, що єдиним параметром скороченого опису нерівноважного стану системи є одночастинкова функція розподілу. Квазірівноважній функції розподілу (2.23), як відомо [50], відповідає больцманова ентропія для розрідженого газу:

$$S_{\mathrm{B}}(t) = -\int \mathrm{d}x\ f_1(x;t)\ln\frac{f_1(x;t)}{\mathrm{e}}. \tag{2.25}$$

У загальному випадку, коли кінетичні та гідродинамічні процеси розглядають одночасно, квазірівноважну функцію розподілу (2.16) або (2.13) можна записати в іншому вигляді, більш зручному для порівняння з $\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right)$ (2.8) у звичайній схемі отримання кінетичних рівнянь [1,9], коли параметром скороченого опису вибирають тільки $f_1(x;t)$. Насамперед зазначимо, що у (2.13) параметр $\Phi(t)$ можна включити в параметр $a(x;t)$ як доданок, що не залежить від x. Тоді, використовуючи (2.11) і означення (2.10.a), (2.10.b), перепишемо (2.13) так:

$$\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right) = \exp\left\{-U_N(\mathbf{r}^N;t)\right\}\prod_{l=1}^{N}\exp\left\{-a(x_l;t)\right\},$$

де

$$U_N(\mathbf{r}^N;t) = U_N(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N;t)$$
$$= \frac{1}{2}\sum_{l\neq j=1}^{N} \varPhi(|\mathbf{r}_l-\mathbf{r}_j|)\beta(\mathbf{r}_j;t).$$

У $\varrho_{\rm q}\left(x^N;t\right)$ параметр $a(x;t)$ можна вилучити за допомогою умови самоузгодження $\langle\hat n(x)\rangle_{\rm q}^t = \langle\hat n(x)\rangle^t = f_1(x;t)$, у результаті отримаємо

$$\varrho_{\rm q}\left(x^N;t\right) = \exp\left\{-U_N(\mathbf{r}^N;t)\right\}\prod_{l=1}^{N}\frac{f_1(x_l;t)}{u(\mathbf{r}_l;t)}, \qquad (2.26)$$

де функції $u(\mathbf{r}_l;t)$ задовольняють рівняння

$$u(\mathbf{r}_l;t) = \int\frac{\mathrm{d}\mathbf{r}^{N-1}}{(N-1)!}$$
$$\times\exp\left\{-U_N(\mathbf{r},\mathbf{r}^{N-1};t)\right\}\prod_{l=2}^{N}\frac{n(\mathbf{r}_l;t)}{u(\mathbf{r}_l;t)}, \qquad (2.27)$$

тут також $n(\mathbf{r};t) = \langle\hat n(\mathbf{r})\rangle^t = \int\mathrm{d}\mathbf{p}\ f_1(x;t)$ — нерівноважна середня густина кількости частинок. У (2.26) $U_N(\mathbf{r};t)$ явно, а $u(\mathbf{r}_l;t)$ неявно залежать від параметрів $n(\mathbf{r};t)$, $\beta(\mathbf{r};t)$ (або $\langle\hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r})\rangle^t$). Для переходу до звичайної схеми М. М. Боголюбова [1,9] необхідно прийняти $U_N(\mathbf{r};t)=0$ у (2.26) і (2.27). Тоді із (2.27) визначимо, що $u=\mathrm{e}$ і вираз (2.26), як і повинно бути, переходить у квазірівноважний розподіл (2.8). У загальному випадку $u(\mathbf{r};t)$ є функціоналом від нерівноважної густини кількости частинок $\langle\hat n(\mathbf{r})\rangle^t$ та $\beta(\mathbf{r};t)$, що є аналогом оберненої локальної температури. До цієї аналогії необхідно ставитися з обережністю, оскільки означення (2.26) може описувати стани, далекі від локальної рівноваги. Зокрема, $f_1(x;t)$ може сильно відрізнятися від локально–максвелової функції розподілу.

Вираз для ентропії (2.20) відповідно до структури квазірівноважної функції розподілу (2.26) можна перетворити так:

$$S(t) = \int\mathrm{d}\mathbf{r}\ \beta(\mathbf{r};t)\langle\hat{\mathcal{E}}_{int}(\mathbf{r})\rangle^t$$
$$-\int\mathrm{d}x\ f_1(x;t)\ln\frac{f_1(x;t)}{u(\mathbf{r};t)}, \qquad (2.28)$$

де виділено “потенціяльний” та “кінетичний” внески. Причому у випадку розріджених газів, коли внеском потенціяльної енергії взаємодії можна знехтувати й $u(\mathbf{r};t)=\mathrm{e}$, (2.28) переходить у больцманову ентропію (2.25).

Отже, визначивши квазірівноважну функцію розподілу $\varrho_{\rm q}\left(x^N;t\right)$ (2.26) та ентропію $S(t)$ (2.28) системи, коли параметрами скороченого опису нерівноважного стану є як нерівноважна одночастинкова функція розподілу, так і середні значення густин кількости частинок, імпульсу та енергії, що локально зберігаються, рівняння Ліувіля з джерелом (2.7) запишемо у вигляді

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathrm{i}L_N\right)\varrho\left(x^N;t\right) \qquad (2.29)$$
$$= -\varepsilon\left(\varrho\left(x^N;t\right)-\exp\left\{-U_N(\mathbf{r}^N;t)\right\}\prod_{j=1}^{N}\frac{f_1(x_j;t)}{u(\mathbf{r}_j;t)}\right).$$

Далі на підставі цього рівняння отримаємо ланцюжок рівнянь ББҐКІ для нерівноважних функцій розподілу класичних частинок з модифікованими граничними умовами, що враховують як нерівноважність одночастинкової функції розподілу, так і локальні закони збереження. Для отримання першого рівняння ланцюжка проінтеґруємо за змінними $x^{N-1}=\left\{x_2,\ldots,x_N\right\}$ обидві частини (2.29). Враховуючи (2.10.а) і (2.18.а), отримаємо

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathrm{i}L(1)\right)f_1(x_1;t)$$
$$+\int\mathrm{d}x_2\ \mathrm{i}L(1,2)f_2(x_1,x_2;t) = 0. \qquad (2.30)$$

Інтеґруючи тепер (2.29) за змінними $x^{N-2}=\left\{x_3,\ldots,x_N\right\}$, після нескладних перетворень одержимо рівняння для $f_2(x_1,x_2;t)$ — двочастинкової нерівноважної функції розподілу, яке відрізняється від відповідного рівняння у ланцюжку М. М. Боголюбова [31,35,39] тільки джерелом у правій частині:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathrm{i}L_2\right)f_2(x_1,x_2;t) \qquad (2.31)$$
$$+\int\mathrm{d}x_3\Big(\mathrm{i}L(1,3)+\mathrm{i}L(2,3)\Big)f_3(x_1,x_2,x_3;t)$$
$$= -\varepsilon\Big(f_2(x_1,x_2;t)-g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t)f_1(x_1;t)f_1(x_2;t)\Big).$$

У цьому рівнянні й надалі $L_2=L(1)+L(1,2)$ — двочастинковий оператор Ліувіля, а $g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t)$ — парна координатна функція розподілу для квазірівноважного стану (2.26); $f_2(x_1,x_2;t)$ — нерівноважна двочастинкова функція розподілу:

$$f_2(x_1,x_2;t) = \langle\hat n_2(x_1,x_2;t)\rangle^t$$
$$= \int\mathrm{d}\varGamma_{N-2}\ \varrho(x_1,x_2,x^{N-2};t).$$

Подібним чином інтеґруючи рівняння (2.29) за фазовими змінними $x^{N-s}=\left\{x_{s+1},\ldots,x_N\right\}$, отримаємо такі рівняння ланцюжка з відповідними джерелами, які визначають граничні умови для наведених функцій розподілу. Для s-частинкової нерівноважної функції розподілу

$$f_s(x^s;t) = \langle \hat{n}_s(x^s) \rangle^t = \int \mathrm{d}\Gamma_{N-s}\ \varrho(x_1,\dots,x_s,x^{N-s};t)$$

маємо таке рівняння:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}L_s\right) f_s(x^s;t) + \int \mathrm{d}x_{s+1} \sum_{j=1}^{s} \mathrm{i}L(j,s+1) f_{s+1}(x^{s+1};t) = -\varepsilon\Big(f_s(x^s;t) - g_s(\mathbf{r}_s;t)\prod_{j=1}^{s} f_1(x_j;t)\Big), \tag{2.32}$$

де

$$L_s = \sum_{j=1}^{s} L(j) + \frac{1}{2}\sum_{j\neq l=1}^{s} L(l,j),$$

$$g_s(\mathbf{r}^s;t) = f_s(\mathbf{r}^s;t)\Big/\prod_{j=1}^{s} n(\mathbf{r}_j;t), \tag{2.33}$$

$$f_s(\mathbf{r}^s;t) = \langle \hat{n}_s(\mathbf{r}^s) \rangle^t_{\mathrm{q}}, \tag{2.34}$$

$$\hat{n}_s(\mathbf{r}^s) = \sum_{\substack{j_1=1 \\ j_1\neq j_2\neq \dots j_s}}^{s} \dots \sum_{j_s=1}^{s} \sum_{k=1}^{s} \delta(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}'_{j_k}).$$

Як звичайно, будемо припускати, що для квазірівноважного стану справедливий принцип послаблення просторових кореляцій. Тоді у термодинамічній границі координатні функції розподілу $f_s(\mathbf{r}^s;t)$, $g_s(\mathbf{r}^s;t)$ задовольняють граничні співвідношення

$$\lim_{(\min|\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_l|)\to\infty} f_s(\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_s;t) = \prod_{j=1}^{s} n(\mathbf{r}_j;t), \tag{2.35}$$

$$\lim_{(\min|\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_l|)\to\infty} g_s(\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_s;t) = 1. \tag{2.36}$$

Таким чином, урахування "повільних" гідродинамічних змінних (у нашому випадку густини енергії взаємодії, яка є незалежною від $f_1(x;t)$) дає змогу модифікувати граничні умови до ланцюжка рівнянь (2.30)–(2.32) для нерівноважних функцій розподілу. Для переходу до звичайних граничних умов послаблення кореляцій М. М. Боголюбова [1] необхідно замінити всі $g_s(\mathbf{r}^s;t)$ їхніми граничними значеннями (2.36). Така заміна справедлива у випадку малої густини, однак для густих газів нові граничні умови можуть стати зручними, оскільки вони автоматично враховують просторові кореляції, пов'язані з взаємодією між виділеною ґрупою частинок та іншими частинками системи. Очевидно, що вплив такої взаємодії збільшується зі збільшенням густини.

Зазначимо, що до ланцюжка рівнянь (2.30)–(2.32) потрібно додати рівняння для координатних квазірівноважних функцій розподілу $g_s(\mathbf{r}^s;t)$, які є функціоналами нерівноважної густини кількости частинок $n(\mathbf{r};t)$ та $\beta(\mathbf{r};t)$ — оберненої "локальної температури". Зокрема, в [38] було показано, що парна квазірівноважна функція розподілу $g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t)$ пов'язана з парною квазірівноважною кореляційною функцією розподілу $h_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t) = g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t) - 1$, яка задовольняє рівняння Орнштейна–Церніке:

$$h_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t) = c_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t) + \int \mathrm{d}\mathbf{r}_3\ c_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_3;t) h_2(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3;t) n(\mathbf{r}_3;t), \tag{2.37}$$

де $c_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t)$ — квазірівноважна пряма кореляційна функція.

Отже, ланцюжок рівнянь (2.30)–(2.32) відрізняється від звичайного ланцюжка ББҐКІ наявністю джерел у правих частинах рівнянь, починаючи з другого, і враховує як одночастинкові, так і колективні "гідродинамічні" ефекти.

Нижче проаналізовано ланцюжок рівнянь ББҐКІ (2.30)–(2.32) з модифікованими граничними умовами в наближенні "парних" зіткнень.

III. НАБЛИЖЕННЯ "ПАРНИХ" ЗІТКНЕНЬ. МОДЕЛЬНІ КІНЕТИЧНІ РІВНЯННЯ

Розглянемо розв'язки ланцюжка рівнянь (2.30)–(2.32) у наближенні "парних" зіткнень. Суть цього наближення така. Знехтуємо в рівнянні (2.31) для нерівноважної парної функції розподілу доданком з тричастинковою функцією розподілу, тобто врахуємо вплив "середовища" на еволюцію виділеної пари частинок тільки через кореляційні поправки в граничній умові. Тоді одержимо рівняння

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}L_2 + \varepsilon\right) f_2(x_1,x_2;t) = \varepsilon g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t) f_1(x_1;t) f_1(x_2;t), \tag{3.1}$$

формальний розв'язок якого

$$f_2(x_1, x_2; t) = \varepsilon \int_{-\infty}^{0} \mathrm{d}\tau\, \mathrm{e}^{(\varepsilon + \mathrm{i}L_2)\tau} g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t+\tau) f_1(x_1; t+\tau) f_1(x_2; t+\tau). \tag{3.2}$$

За теоремою Абеля [50–52] цей розв'язок можна записати у вигляді:

$$f_2(x_1, x_2; t) = \lim_{\tau \to -\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}L_2\tau} g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t+\tau) f_1(x_1; t+\tau) f_1(x_2; t+\tau). \tag{3.3}$$

Підставляючи вираз (3.3) у рівняння (2.30), одержуємо кінетичне рівняння в наближенні "парних" зіткнень:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}L(1)\right) f_1(x_1; t) = I_{coll}(x_1; t), \tag{3.4}$$

де

$$I_{coll}(x_1; t) = \int \mathrm{d}x_2\, \mathrm{i}L(1,2) \lim_{\tau \to -\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}L_2\tau} g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t+\tau) f_1(x_1; t+\tau) f_1(x_2; t+\tau) \tag{3.5}$$

— інтеґрал зіткнень.

Необхідно зазначити, що до кінетичного рівняння (3.4) треба додати рівняння, зокрема, (2.37) для парної квазірівноважної функції розподілу $g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t)$, що враховує значну частину багаточастинкових кореляцій. Інтеґрал зіткнень у наших працях був запропонований для трьох модельних систем.

А. Модель твердих сфер. Кінетичне рівняння ревізованої теорії Енскоґа RET [23,38,39]

Насамперед потрібно зазначити, що границя $\tau \to -\infty$ в інтеґралі зіткнень (3.5) є математично формальною. На фізичному рівні опису вона передбачає, щоб $|\tau| \gg \tau_0$, де τ_0 — деякий характерний масштаб часу. Залежно від вибору τ_0 отримуємо різні стадії еволюції системи (кінетичну або гідродинамічну). В теорії Больцмана [18] $|\tau| \gg \tau_{coll}$ — часу взаємодії (зіткнення), але з іншого боку, $|\tau|$ все ж набагато менше від τ_{hydr} — характерного часу зміни гідродинамічних змінних. Наведена тут ситуація можлива, оскільки для розріджених газів кінетична і гідродинамічна стадії еволюції сильно розсунуті на осі часу, тобто $\tau_{coll} \ll \tau_f \ll \tau_{hydr}$, де τ_f — час вільного пробігу.

У густих газах та рідинах з реальним потенціялом міжчастинкової взаємодії картина якісно інша. Крім того, такі поняття як довжина вільного пробігу і час вільного пробігу втрачають свій зміст, оскільки на двочастинкову динаміку взаємодії виділеної пари частинок суттєво впливають і всі інші частинки системи. В результаті кінетична й гідродинамічна стадії є тісно пов'язані. Однак для спеціяльних типів потенціялів (наприклад, твердих сфер) наведена класифікація часів не втрачає свого значення і при великих густинах.

Для системи частинок, взаємодію яких моделює потенціял твердих сфер

$$\begin{aligned} &\Phi(|\mathbf{r}_{lj}|) = \Phi^{hs}(|\mathbf{r}_{lj}|) = \lim_{\epsilon \to \infty} \Phi^{\epsilon}(|\mathbf{r}_{lj}|), \\ &\text{де} \\ &\Phi^{\epsilon}(|\mathbf{r}_{lj}|) = \begin{cases} \epsilon, & |\mathbf{r}_{lj}| < \sigma, \\ 0, & |\mathbf{r}_{lj}| \geq \sigma, \end{cases} \end{aligned} \tag{3.6}$$

(σ — діяметр твердої сфери) область взаємодії $\Delta r_0 \to +0$ (радіус взаємодії $r_0 \to \sigma^+$) і час взаємодії $\tau_0 \to +0$, що зумовлено сингулярною природою потенціялу. На кінетичній стадії еволюції системи, яку ми розглядаємо, виконуються нерівності $\tau_{coll} = \tau_0 \ll \Delta t \ll \tau_f \ll \tau_{hydr}$, де Δt — "фізично нескінченно малий інтервал часу". Тоді, оскільки $\tau_0 \to +0$, границя $\tau/\tau_0 \to -\infty$ в інтеґралі зіткнень (3.5) зберігає свою форму навіть у випадку $\tau \to -0$, якщо тільки τ_0 — величина вищого порядку малості, ніж τ:

$$\lim_{\tau \to -0} \left\{ \lim_{\tau_0 \to +0} \frac{\tau}{\tau_0} \right\} \to -\infty.$$

У цьому випадку інтеґрал зіткнень (3.5) для міжчастинкового потенціялу твердих сфер трансформується до вигляду

$$I^{hs}(x_1; t) = -\lim_{\epsilon \to \infty} \int \mathrm{d}x_2\, \mathrm{i}L^{\epsilon}(1,2) \lim_{\tau \to -0} \mathrm{e}^{\mathrm{i}L_2^{\epsilon}\tau} \tag{3.7}$$

$$\times g_2^{\epsilon}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t+\tau) f_1(x_1; t+\tau) f_1(x_2; t+\tau),$$

де

$$L_2^\epsilon = L(1) + L(2) + L^\epsilon(1,2),$$

$$L^\epsilon(1,2) = \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1}\Phi^\epsilon(|\mathbf{r}_{12}|)\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2}\right),$$

$g_2^\epsilon(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t)$ — квазірівноважна парна функція розподілу частинок з потенціялом взаємодії $\Phi^\epsilon(|\mathbf{r}_{12}|)$. У [38,39], враховуючи специфіку системи твердих сфер ($\Delta r_0 \to +0$, $\tau_0 \to +0$), здійснено перетворення $I^{hs}(x_1;t)$ (3.7) до вигляду

$$I^{hs}(x_1;t) = \int \mathrm{d}x_2\, \hat{T}(1,2) g_2^{hs}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) f_1(x_1;t) f_1(x_2;t) \tag{3.8}$$

— інтеґрала зіткнень ревізованої теорії Енскоґа [23–25], де

$$\hat{T}(1,2) = \sigma^2 \int \mathrm{d}\hat{\mathbf{r}}_{12}\, \Theta(\hat{\mathbf{r}}_{12}\cdot\mathbf{g})(\hat{\mathbf{r}}_{12}\cdot\mathbf{g}) \tag{3.9}$$

$$\times\left\{\delta(\mathbf{r}_{12} + \sigma^+\hat{\mathbf{r}}_{12})\hat{B}(\mathbf{r}_{12}) - \delta(\mathbf{r}_{12} - \sigma^+\hat{\mathbf{r}}_{12})\right\}$$

— оператор зіткнення Енскоґа для твердих сфер; $\hat{\mathbf{r}}_{12} = |\mathbf{r}_{12}|^{-1}\mathbf{r}_{12}$; $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$; $\mathbf{g} = \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1$ — вектор відносної швидкости; $\mathbf{v}_i$ — вектор швидкости i-ї частинки; $\Theta(x)$ — одинична функція Гевісайда; $\hat{B}(\mathbf{r}_{12})$ — оператор зсуву швидкостей: $\hat{B}(\mathbf{r}_{12})\Psi(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = \Psi(\mathbf{v}_1', \mathbf{v}_2')$, причому

$$\mathbf{v}_1' = \mathbf{v}_1 + \hat{\mathbf{r}}_{12}(\hat{\mathbf{r}}_{12}\cdot\mathbf{r}),$$

$$\mathbf{v}_2' = \mathbf{v}_2 - \hat{\mathbf{r}}_{12}(\hat{\mathbf{r}}_{12}\cdot\mathbf{r});$$

$g_2^{hs}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t)$ — квазірівноважна парна функція розподілу твердих сфер, що визначається через повну квазірівноважну функцію розподілу для твердих сфер $\varrho_{\mathrm{q}}\left(x^N;t\right)$ (враховуючи (3.6) і структуру (2.26))

$$\varrho_{\mathrm{q}}^{hs}\left(x^N;t\right) = \lim_{\epsilon\to\infty}\varrho_{\mathrm{q}}^{\epsilon}\left(x^N;t\right) = \prod_{j<k}^{N}\Theta_{jk}\prod_{l=1}^{N}\frac{f_1(x_l;t)}{u^{hs}(\mathbf{r}_l;t)},$$

де $u^{hs}(\mathbf{r}_l;t)$ згідно з (2.27) визначається через розв'язок інтеґрального рівняння

$$u^{hs}(\mathbf{r}_l;t) = \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{r}^{N-1}}{(N-1)!}\prod_{j<k}^{N}\Theta_{jk}\prod_{l=2}^{N}\frac{n(\mathbf{r}_l;t)}{u^{hs}(\mathbf{r}_l;t)}$$

$$= u^{hs}(\mathbf{r}_1|n(\mathbf{r};t)),$$

яке функціонально залежить лише від локальної густини $n(\mathbf{r};t)$,

$$\Theta_{jk} = \Theta(r_{jk} - \sigma) = \begin{cases} 1, & r_{jk} \ge \sigma, \\ 0, & r_{jk} < \sigma. \end{cases}$$

Тоді згідно з (2.33) отримуємо парну квазірівноважну функцію розподілу твердих сфер:

$$g_2^{hs}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) = g_2^{hs}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|n(\mathbf{r};t))$$

$$= \Theta_{12}\left[u^{hs}(\mathbf{r}_1;t)u^{hs}(\mathbf{r}_2;t)\right]^{-1}$$

$$\times\int\frac{\mathrm{d}\mathbf{r}^{N-2}}{(N-2)!}\prod_{j<k=3}^{N}\Theta_{jk}\prod_{l=3}^{N}\frac{n(\mathbf{r}_l;t)}{u^{hs}(\mathbf{r}_l;t)},$$

що входить у (3.8). У результаті інтеґрал зіткнень (3.8) разом з (3.4) утворюють кінетичне рівняння теорії RET [23], для якого П. Резибуа довів H-теорему [24,25].

Отже, модифіковані граничні умови, сформульовані до ланцюжка рівнянь ББҐКІ в наближенні "парних" зіткнень, без урахування запізнення в часі дають змогу послідовно отримати кінетичне рівняння ревізованої теорії Енскоґа для твердих сфер без будь-яких феноменологічних припущень.

B. Кінетичне рівняння для системи частинок з модельним багатосходинковим потенціялом взаємодії

Ревізована теорія Енскоґа, що ґрунтується на кінетичному рівнянні (3.4) з (3.8), як і звичайна теорія Енскоґа (SET) [18] для моделі твердих сфер, як відомо, добре пояснює залежність кінетичних коефіцієнтів переносу від густини [19] для газів і простих рідин. Однак температурна залежність коефіцієнтів переносу в цих теоріях погано узгоджується з даними експериментів [19,20].

З метою застосування результатів теорії SET до реальних систем Енскоґ запропонував замінити гідростатичний тиск системи твердих сфер термодинамічним тиском реальної системи. Беручи за основу це припущення, Генлі та інші [19] розробили кінетичну теорію MET (Modified Enskog Theory), у якій діяметр твердих сфер визначається через другий віріяльний коефіцієнт рівняння стану реальної системи і, отже, стає залежним від температури і густини. Використовуючи різні рівняння стану: BH [53], WCA [54] та інші, отримуємо відповідні варіянти теорії MET.

У кінетичній теорії середнього поля KMFT [26] поряд з потенціялом твердих сфер розглядають плавний притягувальний потенціял. У [27] зазначено про необхідність заміни в цьому випадку квазірівноважної парної функції розподілу твердих сфер функцією розподілу з повним потенціялом взаємодії. Було показано [26,28], що плавна частина потенціялу взаємодії, яка визначає температурну залежність, не робить явного внеску в коефіцієнти переносу, а тільки опосередкований через парну квазірівноважну функцію розподілу $g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t)$, і отже, KMFT не дає змоги задовільно описати температурну залежність коефіцієнтів переносу. У цьому напрямку необхідно виділити кінетичну теорію DRS (Davis, Rice, Sengers) для системи класичних частинок з міжчастинковим потенціялом у формі прямокутної ями та її нову версію, запропоновану в [30], кінетичне рівняння якої задовольняє H-теорему.

У працях [36,37,55] із ланцюжка рівнянь ББҐКІ з модифікованими граничними умовами в наближенні "парних" зіткнень (3.4), (3.5) отримано кінетичне рівняння для системи частинок з потенціялом взаємодії у вигляді багатосходинкової функції, що складається з твердосферної частини, системи відштовхувальних та притягувальних стінок. Багатосходинкова модель потенціялу є узагальненням моделей потенціялу теорій SET (RET), а також KMFT, DRS (RDRS).

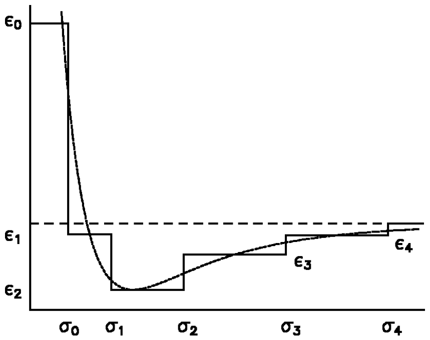

Рис. 1. Приклад моделювання конкретного реалістичного потенціялу міжчастинкової взаємодії за допомогою потенціялу у вигляді багатосходинкової функції.

З метою вибору більш реалістичної системи розглянемо міжчастинковий потенціял взаємодії, що моделює деякий реальний потенціял у вигляді багатосходинкової функції (рис. 1)

$$\Phi(|\mathbf{r}_{lj}|) = \Phi^{ms}(|\mathbf{r}_{lj}|) = \lim_{\epsilon_0\to\infty} \Phi^{\epsilon_0}(|\mathbf{r}_{lj}|), \qquad (3.10)$$

а потенціял $\Phi^{\epsilon_0}(|\mathbf{r}_{lj}|)$ є таким:

$$\Phi^{\epsilon_0}(|\mathbf{r}_{lj}|) = \begin{cases} \epsilon_0, & |\mathbf{r}_{lj}| < \sigma, \\ \epsilon_k, & \sigma_{k-1} \le |\mathbf{r}_{lj}| < \sigma_k, \quad k = 1, \ldots, N^* \\ 0, & \sigma_{N^*} \le |\mathbf{r}_{lj}|, \end{cases} ,$$

де N^* — загальна кількість стінок, крім твердосферної. Для зручности виділимо окремо системи притягувальних і відштовхувальних стінок. Нехай є n^* відштовхувальних стінок, що розміщені на відстанях σ_{l_i} й мають висоти $\Delta\epsilon_{l_i}$, $i = 1, \ldots, n^*$; і m^* притягувальних стінок з параметрами σ_{r_j}, $\Delta\epsilon_{r_j}$ відповідно, $j = 1, \ldots, m^*$; σ_0 — положення твердосферної стінки. Очевидно, що $n^* + m^* = N^*$,

$$\Delta\epsilon_{l_i} = \epsilon_{l_i} - \epsilon_{l_{i+1}}, \qquad \Delta\epsilon_{r_j} = \epsilon_{r_{j+1}} - \epsilon_{r_j}.$$

Отже, параметри σ_0, n^*, σ_{l_i}, $\Delta\epsilon_{l_i}$, m^*, σ_{r_j}, $\Delta\epsilon_{r_j}$ повністю визначають багатосходинковий потенціял, область взаємодії $\bar{\Omega}$ якого складається з сукупности підобластей

$$\bar{\Omega} = \lim_{\Delta\ r^{(k)}\to+0} \Big\{ W(\sigma_k; \Delta r^{(k)}) \equiv [\sigma_k - \Delta r^{(k)}; \sigma_k + \Delta r^{(k)}] \Big\},$$

$$k = 0, 1, \ldots, N^*.$$

У геометричній інтерпретації для області взаємодії маємо сукупність концентричних сфер з радіусами σ_k, $k = 0, 1, \ldots, N^*$. Вони характеризуються такими розмірами:

$$\begin{array}{rcll} \Delta r_k^* & = & \max\{\Delta r^{(k)}\} \to +0, & k = 0, \ldots, N^*, \\ \Delta\sigma & = & \min\{\sigma_k - \sigma_{k-1}\} > 0, & k = 1, \ldots, N^*, \\ \sigma_{max} & = & \max\{\sigma_k\} = \sigma_{a_m}^*, & k = 0, \ldots, N^*, \end{array}$$

яким відповідають характерні часи: $\tau_0^* = \Delta r_0^*/|\mathbf{g}_0| \to +0$ — час взаємодії на стінці; $\Delta\tau = \Delta\sigma/|\mathbf{g}_0|$ — час пролітання частинки між сусідніми стінками; $\bar{\tau} = \sigma_{max}/|\mathbf{g}_0|$ — час пролітання всієї системи стінок багатосходинкового потенціялу для виділеної пари частинок. Оскільки в потенціялі є горизонтальні ділянки, де сила міжчастинкової взаємодії дорівнює нулю, то введемо також час τ_f як середній час вільного пробігу частинки в системі. Цей час зміною геометрії потенціялу і збільшенням густини можна зробити якомога достатньо малим, щоб виконувалось співвідношення

$$\tau_0^* \ll \tau_f \ll \Delta\tau < \bar{\tau} - \tau_{hydr}.$$

Враховуючи структуру багатосходинкового потенціялу, область взаємодії і характерні часи, специфіку взаємодії частинок на притягувальних та відштовхувальних стінках, у [36,37,55] з інтеґрала зіткнень (3.5) кінетичного рівняння (3.4) послідовно отримано інтеґрал зіткнень для системи частинок, взаємодію яких описує багатосходинковий потенціял. Відповідне кінетичне рівняння можна записати у вигляді

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}L(1)\right) f_1(x_1; t) \qquad (3.11)$$

$$= \int \mathrm{d}x_2\, \hat{T}^{ms}(1,2) g_2^{ms}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) f_1(x_1; t) f_1(x_2; t),$$

де

$$\hat{T}^{ms}(1,2) = \hat{T}_{hs}^a + \sum_{i=1}^{n^*} \sum_{p=b,c,d} \hat{T}_{r_i}^p + \sum_{j=1}^{m^*} \sum_{p=b,c,d} \hat{T}_{a_j}^p$$

— оператор зіткнень, що описує взаємодію двох частинок, якщо наявний багатосходинковий потенціял;

$$\hat{T}^a_{hs} = \sigma_0^2 \int \mathrm{d}\hat{\sigma}\ |\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g}|\Theta(\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g}) \tag{3.12}$$

$$\times\Big\{\delta(\mathbf{r}_{12}+\hat{\sigma}\sigma_0^+)\hat{B}^a(\hat{\sigma}) - \delta(\mathbf{r}_{12}-\hat{\sigma}\sigma_0^+)\Big\}$$

— оператор зіткнення Енскоґа на σ_0;

$$\hat{T}^p_{r_i} = \sigma_{r_i}^2 \int \mathrm{d}\hat{\sigma}\ |\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g}|\Theta^p_{r_i}(\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g}) \tag{3.13}$$

$$\times\Big\{\delta(\mathbf{r}_{12}+\hat{\sigma}\sigma^{1,p}_{r_i})\hat{B}^p_{r_i}(\hat{\sigma}) - \delta(\mathbf{r}_{12}-\hat{\sigma}\sigma^{2,p}_{r_i})\Big\}$$

— оператор зіткнення Енскоґа на r_i відштовхувальній стінці;

$$\hat{T}^p_{r_i} = \sigma_{a_j}^2 \int \mathrm{d}\hat{\sigma}\ |\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g}|\Theta^p_{a_j}(\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g}) \tag{3.14}$$

$$\times\Big\{\delta(\mathbf{r}_{12}+\hat{\sigma}\sigma^{1,p}_{a_j})\hat{B}^p_{a_j}(\hat{\sigma}) - \delta(\mathbf{r}_{12}-\hat{\sigma}\sigma^{2,p}_{a_j})\Big\}$$

— оператор зіткнення Енскоґа на a_j притягувальній стінці. В цих операторах зіткнення параметри означені відповідно до типу взаємодії. Вирази

$$\begin{array}{ll}
\Theta^b_{r_i} = \Theta(-\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g}), & \Theta^b_{a_j} = \Theta(\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g}),\\
\Theta^c_{r_i} = \Theta(-\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g}-\alpha_{r_i}), & \Theta^c_{a_j} = \Theta(-\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g}-\alpha_{a_j}),\\
\Theta^d_{r_i} = \Theta(\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g})\Theta(\alpha_{r_i}-\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g}), & \Theta^d_{a_j} = \Theta(-\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g})\Theta(\alpha_{a_j}+\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g})
\end{array}$$

— умови, необхідні для виникнення цього типу взаємодії, де $\hat{\sigma} = \hat{\mathbf{r}}_{12}$ — одиничний вектор у напрямі взаємодії двох частинок; $\mathbf{g}$ — відносна швидкість двох частинок; $p = a, b, c, d$ — індекси, що позначають типи можливих взаємодій: a — “reflection” — зіткнення на контакті σ_0 — діяметра твердої сфери; для притягувальних стінок a_j: b_a — “leaving”, c_a — “entering”, d_a — “reflection”; і відповідно для відштовхувальних стінок r_i: b_r — “leaving”, c_r — “entering”, d_r — “reflection”, $\alpha^2_{r_i} = 4\Delta\epsilon_{r_i}/m$, $\alpha^2_{a_j} = 4\Delta\epsilon_{a_j}/m$,

$$\sigma^{1,b}_{r_i} = \sigma^+_{r_i},\ \ \sigma^{2,b}_{r_i} = \sigma^-_{r_i},\ \ \sigma^{1,b}_{a_j} = \sigma^-_{a_j},\ \ \sigma^{2,b}_{a_j} = \sigma^+_{a_j},$$

$$\sigma^{1,c}_{r_i} = \sigma^-_{r_i},\ \ \sigma^{2,c}_{r_i} = \sigma^+_{r_i},\ \ \sigma^{1,c}_{a_j} = \sigma^+_{a_j},\ \ \sigma^{2,c}_{a_j} = \sigma^-_{a_j},$$

$$\sigma^{1,d}_{r_i} = \sigma^+_{r_i},\ \ \sigma^{2,d}_{r_i} = \sigma^+_{r_i},\ \ \sigma^{1,d}_{a_j} = \sigma^-_{a_j},\ \ \sigma^{2,d}_{a_j} = \sigma^-_{a_j},$$

$$\hat{B}^a \equiv \hat{B}^{hs}, \quad \hat{B}^p_{r_i}(\hat{\sigma}), \quad \hat{B}^p_{a_j}(\hat{\sigma})$$

— оператори зсуву швидкостей згідно з взаємодією певного типу на кожній зі стінок:

$$\hat{B}^p_{r_i(a_j)}\Psi(\mathbf{v}_1,\mathbf{v}_2) = \Psi(\mathbf{v}^p_{1,r_i(a_j)},\mathbf{v}^p_{2,r_i(a_j)}),$$

і

$$\begin{aligned}
\mathbf{V}^b_{1(2)r_i} &= \mathbf{V}_{1(2)} \pm \frac{1}{2}\hat{\sigma}\Big[\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g} + \sqrt{(\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g})^2+\alpha^2_{r_i}}\Big],\\
\mathbf{V}^c_{1(2)r_i} &= \mathbf{V}_{1(2)} \pm \frac{1}{2}\hat{\sigma}\Big[\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g} - \sqrt{(\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g})^2-\alpha^2_{r_i}}\Big],\\
\mathbf{V}^d_{1(2)r_i} &= \mathbf{V}_{1(2)} \pm \hat{\sigma}(\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g}),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{V}^b_{1(2)a_j} &= \mathbf{V}_{1(2)} \pm \frac{1}{2}\hat{\sigma}\Big[\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g} - \sqrt{(\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g})^2+\alpha^2_{a_j}}\Big],\\
\mathbf{V}^c_{1(2)a_j} &= \mathbf{V}_{1(2)} \pm \frac{1}{2}\hat{\sigma}\Big[\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g} + \sqrt{(\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g})^2-\alpha^2_{a_j}}\Big],\\
\mathbf{V}^d_{1(2)a_j} &= \mathbf{V}_{1(2)} \pm \hat{\sigma}(\hat{\sigma}\cdot\mathbf{g}).
\end{aligned}$$

У працях [37,55] для кінетичного рівняння (3.11) була доведена H-теорема, а в [36,40] визначені нормальні розв’язки методом Чепмена–Енскоґа й отримані аналітичні вирази для кінетичних коефіцієнтів переносу об’ємної і зсувної в’язкости та теплопровідности. На основі цих виразів виконаний числовий розрахунок коефіцієнтів переносу для аргону в широкій області густин та температур. Отримані результати порівняно з результатами інших теорій (RET, MET, RDRS), експериментом [18] і даними молекулярної динаміки. В результаті отримано, що кінетичні коефіцієнти на основі кінетичного рівняння (3.11) для багатосходинкового потенціялу дають більш близькі значення до експериментальних даних, ніж теорії RET, MET, RDRS.

Кінетичне рівняння (3.11) залежно від значень параметрів багатосходинкового потенціялу допускає граничні випадки.

1. $n^* = m^* = 0$.
У цьому випадку модельний потенціял (3.10) перетворюється в потенціял твердих сфер (3.6), тоді $\hat{T}^{ms} = \hat{T}^a_{hs} = \hat{T}(1,2)$ (3.9) і кінетичне рівняння (3.11) перетворюється в кінетичне рівняння ревізованої теорії Енскоґа [23] (3.4), (3.8).

2. $n^* = 0$, $m^* = 1$, $\Delta\epsilon_{a_1} \neq 0$.
Тут вихідний багатосходинковий потенціял (3.10) перетворюється в потенціял прямокутної ями, тоді $\hat{T}^{ms} = \hat{T}^a_{hs} + \hat{T}^p_{a_1}$ і кінетичне рівняння (3.11) перетворюється в кінетичне рівняння теорії RDRS [30] для потенціялу прямокутної ями.

C. Кінетичне рівняння Енскоґа–Ландау для системи заряджених твердих сфер

Важливим завданням є дослідження кінетичних рівнянь (3.4), (3.5) у наближенні "парних" зіткнень для систем класичних частинок з більш реалістичним потенціялом взаємодії насамперед для систем, взаємодію частинок яких на малих відстанях моделює потенціял твердих сфер $\Phi^{hs}(|\mathbf{r}_{lj}|)$, а на великих — деякий плавний далекосяжний потенціял $\Phi^l(|\mathbf{r}_{lj}|)$:

$$\Phi(|\mathbf{r}_{lj}|) = \Phi^{hs}(|\mathbf{r}_{lj}|) + \Phi^l(|\mathbf{r}_{lj}|),$$
де
$$\Phi^l(|\mathbf{r}_{lj}|) = \begin{cases} 0, & |\mathbf{r}_{lj}| \leq \sigma, \\ \Phi^l(|\mathbf{r}_{lj}|), & |\mathbf{r}_{lj}| > \sigma, \end{cases}$$

σ — діяметр твердої сфери. Наочним прикладом такої моделі є система заряджених твердих сфер, у якій далекосяжною частиною потенціялу є кулонівський потенціял взаємодії. Необхідно зазначити, що розділення потенціялу взаємодії $\Phi(|\mathbf{r}_{lj}|)$ на короткосяжну та далекосяжну частини неоднозначне, тому виникає проблема оптимального їх розділення й означення відповідних параметрів інтенсивности. Такі питання в рівноважній статистичній механіці обговорювали неоднoразово [56]. Подібні ідеї про розділення потенціялу взаємодії на короткосяжну та далекосяжну частини для отримання кінетичних рівнянь використовували в [34,57,58].

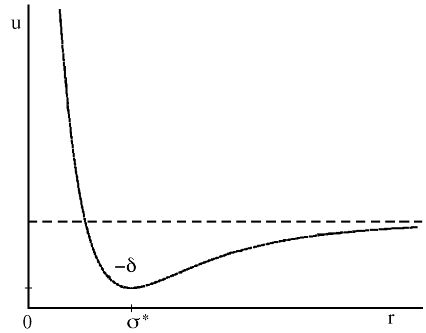

Рис. 2. Приклад розділення міжчастинкового потенціялу взаємодії на короткосяжну та далекосяжну частини.

Припустимо, що потенціял $\Phi(|\mathbf{r}_{lj}|)$ можна розділити таким способом:

$$\Phi(|\mathbf{r}_{lj}|) = \begin{cases} \infty, & |\mathbf{r}_{lj}| \leq \sigma, \\ -\delta, & \sigma < |\mathbf{r}_{lj}| \leq \sigma^*, \\ \Phi^l(|\mathbf{r}_{lj}|), & |\mathbf{r}_{lj}| > \sigma^*, \end{cases} \tag{3.15}$$

де параметри означені на рис. 2, σ^* — ефективний діяметр сфери. З урахуванням (3.15) інтеґрал зіткнень (3.5) запишемо у вигляді

$$I_{coll}(x_1;t) = I_1(x_1;t) + I_2(x_1;t),$$

де

$$I_1(x_1;t) = -\lim_{\epsilon\to+\infty} \int_0^{\sigma^*} \mathrm{d}r_{12}\, r_{12}^2 \int \mathrm{d}\hat{\sigma} \int \mathrm{d}\mathbf{v}_2\, \mathrm{i}L^\epsilon(1,2) \lim_{\tau\to-0} \mathrm{e}^{\mathrm{i}L_2^\epsilon\tau} g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t+\tau) f_1(x_1;t+\tau) f_1(x_2;t+\tau), \tag{3.16}$$

$$I_2(x_1;t) = -\int_{\sigma^*}^{\infty} \mathrm{d}r_{12}\, r_{12}^2 \int \mathrm{d}\hat{\sigma} \int \mathrm{d}\mathbf{v}_2\, \mathrm{i}L^l(1,2) \lim_{\tau\to-\infty} \mathrm{e}^{\left(\mathrm{i}L_2^0 + \mathrm{i}L^l(1,2)\right)\tau} g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t+\tau) f_1(x_1;t+\tau) f_1(x_2;t+\tau), \tag{3.17}$$

$L_2^0 = L(1) + L(2)$ — оператор Ліувіля вільної еволюції двох частинок.

У цьому випадку використана ідея просторового та часового розділення взаємодії, пов'язана зі специфікою моделі твердих сфер: область взаємодії $\Delta r_0^* \to 0$ і час взаємодії $\tau_0 \to 0$, а також зі скінченним часом τ_l далекосяжної взаємодії, однак $\lim\limits_{\tau\to-\infty} \tau/\tau_l \to -\infty$; $L^l(1,2)$ — далекосяжна частина двочастинкового оператора Ліувіля. У працях [38,39] і підрозділі 3.A цієї статті показано, що $I_1(x_1;t)$ для моделі твердих сфер збігається з інтеґралом зіткнень ревізованої теорії Енскоґа

$$I_1^{hs}(x_1;t) = \int \mathrm{d}x_2\; \hat{T}^{hs}(1,2) g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t) f_1(x_1;t) f_1(x_2;t) \tag{3.18}$$

з тією лише різницею, що тут $g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t)$ — парна квазірівноважна функція частинок у системі з повним міжчастинковим потенціялом взаємодії. У випадку, коли далекосяжної частини потенціялу взаємодії нема ($\Phi^l(|\mathbf{r}_{lj}|)=0$), перша частина $I_1(x_1;t)$ повністю співпадає з інтеґралом зіткнень (3.8) кінетичної теорії RET, тоді як друга частина $I_2(x_1;t)$ тотожно дорівнює нулю. В іншому граничному випадку, коли густина системи мала (розріджені гази, $n=N/V\to 0$, $g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t)\to 1$) і $\sigma\to+0$, $I_1(x_1;t)=0$, друга частина інтеґрала зіткнень $I_2(x_1;t)$ збігається з інтеґралом зіткнень кінетичного рівняння Больцмана [18].

Розглянемо частковий випадок, коли далекосяжна частина потенціялу мала, і розкладемо в ряд операторний вираз $\exp\left\{\left(\mathrm{i}L_2^0+\mathrm{i}L^l(1,2)\right)\tau\right\}$, обмежуючись лінійним наближенням за доданком $\mathrm{i}L^l(1,2)$. Тоді $I_2(x_1;t)$ буде мати вигляд

$$\begin{aligned}
&I_2(x_1;t) = I_2^{(0)}(x_1;t) + I_2^{(1)}(x_1;t),\\
&I_2^{(0)}(x_1;t) = I_{mf}(x_1;t) = -\int_{\sigma^*}^{\infty}\mathrm{d}r_{12}\; r_{12}^2 \int \mathrm{d}\hat{\sigma} \int \mathrm{d}\mathbf{v}_2\; \mathrm{i}L^l(1,2)\\
&\times \lim_{\tau\to-\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}L_2^0\tau} g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t+\tau) f_1(x_1;t+\tau) f_1(x_2;t+\tau),
\end{aligned} \tag{3.19}$$

$$\begin{aligned}
&I_2^{(1)}(x_1;t) = -\int_{\sigma^*}^{\infty}\mathrm{d}r_{12}\; r_{12}^2 \int \mathrm{d}\hat{\sigma} \int \mathrm{d}\mathbf{v}_2\; \mathrm{i}L^l(1,2) \lim_{\tau\to-\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}L_2^0\tau} \int_0^{\tau} \mathrm{d}\tau'\; \mathrm{e}^{-\mathrm{i}L_2^{(0)}\tau'}\; \mathrm{i}L^l(1,2)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}L_2^{(0)}\tau'}\\
&\times g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t+\tau) f_1(x_1;t+\tau) f_1(x_2;t+\tau).
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Перший доданок $I_2^{(0)}(x_1;t)$ є узагальненням середнього поля Власова в теорії KMFT [26–28], а другий доданок $I_2^{(1)}(x_1;t)$ є узагальненим інтеґралом зіткнень з урахуванням запізнення в часі в наближенні другого порядку за взаємодією $\Phi^l(|\mathbf{r}_{lj}|)$. Нехтуючи просторовою неоднорідністю $f_1(x;t)$ і часовим запізненням у (3.20) в працях [38,39] показано, що $I_2^{(1)}(x_1;t)$ перетворюється в інтеґрал зіткнень типу Ландау:

$$I_{coll}^l(x_1;t) = \frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial v_{1,\alpha}} \int \mathrm{d}\mathbf{g}\; J_{\alpha\beta}(\mathbf{g}) \left[\frac{\partial}{\partial v_{1,\beta}} - \frac{\partial}{\partial v_{2,\beta}}\right] f_1(x_1;t) f_1(\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_{12},\mathbf{v}_2;t), \tag{3.21}$$

де

$$J_{\alpha\beta}(\mathbf{g}) = \frac{1}{m}\int_{\sigma^*}^{\infty}\mathrm{d}r_{12}\; r_{12}^2 \int \mathrm{d}\hat{\sigma}\; g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_{12};t) \left[\frac{\partial\Phi^l(|\mathbf{r}_{12}|)}{\partial r_{12,\alpha}}\right] \int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}\tau\; \left[\frac{\partial\Phi^l(|\mathbf{r}_{12}+\mathbf{g}t|)}{\partial r_{12,\beta}}\right] \tag{3.22}$$

— автокореляційна функція сили. У випадку, коли формально прийняти $g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t)\equiv 1$, $\sigma^*\to 0$, а $\Phi^l(|\mathbf{r}_{12}|)$ — кулонівський потенціял взаємодії, то (3.21), (3.22) перетворюється в інтеґрал зіткнень Ландау [59] для кулонівської плазми. У нашому випадку повний інтеґрал зіткнень

$$I_{coll}(x_1;t) = I_{coll}^{hs}(x_1;t) + I_{coll}^{mf}(x_1;t) + I_{coll}^{l}(x_1;t) \tag{3.23}$$

ми назвали [38,39,44] інтеґралом зіткнень Енскоґа–Ландау для системи заряджених твердих сфер, коли $\Phi^l(|\mathbf{r}_{12}|)=\frac{(Ze)^2}{\varepsilon r}$ — кулонівський потенціял взаємодії. А відповідне кінетичне рівняння називається кінетичним рівнянням Енскоґа–Ландау для системи заряджених твердих сфер. На відміну від звичайного інтеґрала зіткнень Ландау [59], інтеґрал зіткнень (3.21), (3.22) не розходиться на малих відстанях. Однак на великих відстанях ($|\mathbf{r}| \to \infty$), як і звичайно, буде розбіжність у (3.22). Для послідовного усунення цієї розбіжности необхідно враховувати ефекти динамічного екранування [60].

Важливо зазначити, що в [39,44] були визначені нормальні розв'язки кінетичного рівняння Енскога–Ландау для системи заряджених твердих сфер методом Чепмена–Енскоґа. В результаті отримано аналітичні вирази для коефіцієнтів переносу: об'ємної і зсувної в'язкости та теплопровідности з внесками як твердосферної частини, так і кулонівської взаємодії. В [42,44] на основі цих виразів виконано числові розрахунки й порівняння з експериментальними даними для одноразово йонізованого арґону.

Підсумовуючи результати цього розділу, необхідно зазначити, що ланцюжок рівнянь ББҐКІ з модифікованою граничною умовою, яка враховує як нерівноважність одночастинкової функції розподілу, так і локальні закони збереження в наближенні "парних" зіткнень, для систем частинок з модельними потенціялами (3.6), (3.10), (3.15) дає змогу послідовно отримати відповідні кінетичні рівняння: теорії RET [38,39] (3.4), (3.8), кінетичне рівняння для багатосходинкового потенціялу [36,37,40,55] та кінетичне рівняння Енскоґа–Ландау [39,44] (3.4), (3.23) для системи заряджених твердих сфер.

Очевидно, що такі результати в наближенні "парних" зіткнень для ланцюжка рівнянь ББҐКІ (2.30)–(2.32) є доброю основою для його аналізу у вищих наближеннях за міжчастинковими кореляціями.

У наступному розділі проаналізовано ланцюжок рівнянь (2.30)–(2.32) у вищих наближеннях за міжчастинковими кореляціями із застосуванням методу ґрупових розкладів [9,47].

IV. МОДИФІКОВАНІ ҐРУПОВІ РОЗКЛАДИ

Кінетичне рівняння ревізованої теорії Енскоґа [23,38,39] (3.4), (3.8) для системи твердих сфер та кінетичне рівняння Енскоґа–Ландау (3.4), (3.23) для системи заряджених твердих сфер отримано з ланцюжка рівнянь (2.30)–(2.32) в наближенні "парних" зіткнень, хоча значна частина просторових динамічних кореляцій уже врахована в парній квазірівноважній функції розподілу g_2. Для аналізу розв'язків ланцюжка рівнянь ББҐКІ (2.30)–(2.32) у вищих наближеннях за міжчастинковими кореляціями зручно використовувати концепцію ґрупових розкладів [2,9,61]. Ґрупові розклади застосовували до ланцюжка рівнянь ББҐКІ в багатьох працях [2–7,11–16,61], зокрема, з граничною умовою, що відповідає умові послаблення кореляцій за М. М. Боголюбовим [1], у працях Д. М. Зубарєва та М. Ю. Новікова [4,7,9,10,48], де розвинутий діяграмний метод побудови розв'язків ланцюжка рівнянь ББҐКІ.

У цьому розділі концепцію ґрупових розкладів застосуємо до ланцюжка рівняння ББҐКІ з модифікованими граничними умовами, які враховують як нерівноважність одночастинкової функції розподілу, так і локальні закони збереження. Для розв'язування ланцюжка рівнянь (2.30)–(2.32), подібно як і в праці Д. М. Зубарєва та М. Ю. Новікова [9,47,48], а ще раніше в працях M. Green [61], E. G. D. Cohen [2,3,61], перейдемо від нерівноважних функцій розподілу $f_s(x^s;t)$ до незвідних функцій розподілу $G_s(x^s;t)$, які вводяться рівностями [9,61], однак у нашому випадку з певною модифікацією:

$$
\begin{aligned}
&f_1(x_1;t) = G_1(x_1;t), \qquad (4.1)\\
&f_2(x_1,x_2;t) = G_2(x_1,x_2;t) + g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t)G_1(x_1;t)G_1(x_2;t),\\
&f_3(x_1,x_2,x_3;t) = G_3(x_1,x_2,x_3;t) + \sum_P G_2(x_1,x_2;t)G_1(x_3;t) + g_3(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3;t)G_1(x_1;t)G_1(x_2;t)G_1(x_3;t),\\
&\vdots
\end{aligned}
$$

в яких координатні квазірівноважні функції розподілу $g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t)$, $g_3(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3;t)$, $g_s(\mathbf{r}^s;t)$ визначаються співвідношеннями (2.33) та (2.34). Модифікація ґрупових розкладів (4.1) полягає в тому, що значну частину просторових кореляцій у часі враховують квазірівноважні функції $g_s(\mathbf{r}^s;t)$. При $g_s(\mathbf{r}^s;t) = 1$ для $s = 2,3,\ldots$ ці ґрупові розклади збігаються з ґруповими розкладами [9]. Оскільки кожен рядок рівностей (4.1) вводить одну нову функцію $G_s(\mathbf{r}^s;t)$, $s = 1,2,3,\ldots$, то ці рівняння можна розв'язати стосовно незвідних функцій розподілу і записати:

$$
\begin{aligned}
&G_1(x_1;t) = f_1(x_1;t), \qquad (4.2)\\
&G_2(x_1,x_2;t) = f_2(x_1,x_2;t) - g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t)f_1(x_1;t)f_1(x_2;t),
\end{aligned}
$$

$$G_3(x_1,x_2,x_3;t) = f_3(x_1,x_2,x_3;t) - \sum_P f_2(x_1,x_2;t) f_1(x_3;t) - h_3(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3;t) f_1(x_1;t) f_1(x_2;t) f_1(x_3;t),$$

$$\vdots$$

Тут і в (4.1) $\sum\limits_P$ позначає суму за всеможливими перестановками координат трьох і більше частинок,

$$h_3(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3;t) = g_3(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3;t) - g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t) - g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_3;t) - g_2(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3;t) \tag{4.3}$$

— тричастинкова квазірівноважна кореляційна функція. Тепер запишемо ланцюжок рівнянь ББҐКІ (2.30)–(2.32), зокрема два перші рівняння, для незвідних функцій розподілу $G_s(x^s;t)$. Перше рівняння ланцюжка має вигляд

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}L(1)\right) G_1(x_1;t) + \int \mathrm{d}x_2\ \mathrm{i}L(1,2) g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t) G_1(x_1;t) G_1(x_2;t) + \int \mathrm{d}x_2\ \mathrm{i}L(1,2) G_2(x_1,x_2;t) = 0. \tag{4.4}$$

Диференціюючи за часом вираз для $G_2(x_1,x_2;t)$ в (4.2) і використовуючи друге рівняння ланцюжка ББҐКІ (2.31) для функції $f_2(x_1,x_2;t)$, для $G_2(x_1,x_2;t)$ — незвідної парної функції розподілу — отримаємо рівняння

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}L_2 + \varepsilon\right) G_2(x_1,x_2;t) \qquad (4.5)\\
&= -\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}L_2\right) g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t) G_1(x_1;t) G_1(x_2;t)\\
&- \int \mathrm{d}x_3 \left\{\mathrm{i}L(1,3) + \mathrm{i}L(2,3)\right\} \Big\{ G_3(x_1,x_2,x_3;t)\\
&+ \sum_P G_2(x_1,x_2;t) G_1(x_3;t)\\
&+ g_3(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3;t) G_1(x_1;t) G_1(x_2;t) G_1(x_3;t) \Big\}.
\end{aligned}$$

Подібним способом можна отримати рівняння для тричастинкової незвідної функції $G_3(x_1,x_2,x_3;t)$ і вищих функцій $G_s(x^s;t)$ розподілу частинок. Пригадаймо, що поява квазірівноважних функцій розподілу $g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t)$, $g_3(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3;t)$, $g_s(\mathbf{r}^s;t)$ в ланцюжку рівнянь (2.30)–(2.32) пов'язана з тим, що гранична умова до розв'язку рівняння Ліувіля (2.29) враховує як нерівноважність одночастинкової функції розподілу, так і локальні закони збереження, що відповідає узгодженому опису кінетики та гідродинаміки системи [31,39]. Оскільки ми аналізуватимемо лише перші два рівняння (4.4), (4.5), то наступні рівняння ланцюжка виписувати не будемо. Необхідно зауважити таке: якщо прийняти формально $g_s(\mathbf{r}^s;t) \equiv 1$, $s = 2,3,\ldots$ в (4.4), (4.5), то отримаємо два перші рівняння ланцюжка рівнянь ББҐКІ для незвідних функцій розподілу $G_1(x_1;t)$, $G_2(x_1,x_2;t)$, одержаних у праці М. Д. Зубарєва і М. Ю. Новікова [9]. Характерною особливістю системи рівнянь (4.4), (4.5) є перший доданок у правій частині рівняння (4.5), тобто доданок з похідною за часом від парної квазірівноважної функції розподілу $g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t)$. Як ми вже зазначили, згідно з (2.16) або (2.26) парна квазірівноважна функція розподілу є функціоналом локальних значень температури $\beta(\mathbf{r};t)$ і середньої густини числа частинок $n(\mathbf{r};t)$. Тому похідні за часом від $g_2\big(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2|\beta(t),n(t)\big)$ будуть стосуватися похідних $\frac{\partial}{\partial t}\beta(\mathbf{r};t)$ та $\frac{\partial}{\partial t}n(\mathbf{r};t)$, які відповідно до умов самоузгодження (2.18.a), (2.18.b) будуть виражатися через середні значення енергії в супроводжуваній системі відліку $\langle\hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r})\rangle^t$ і $\langle\hat{n}(\mathbf{r})\rangle^t$, що є основою гідродинамічного опису нерівноважного стану системи.

Якщо у правій частині рівняння (4.5) знехтувати доданком, який враховує потрійні кореляції між частинками, то із (4.5) отримаємо рівняння у наближенні "парних" зіткнень:

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}L_2 + \varepsilon\right) G_2(x_1,x_2;t) \qquad (4.6)\\
&= -\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}L_2\right) g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t) G_1(x_1;t) G_1(x_2;t).
\end{aligned}$$

Формальний розв'язок цього рівняння є таким:

$$\begin{aligned}
&G_2(x_1,x_2;t) = -\int\limits_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t'\ \mathrm{e}^{(\varepsilon + \mathrm{i}L_2)(t-t')} \left[\frac{\partial}{\partial t'} + \mathrm{i}L_2\right]\\
&\times g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t') G_1(x_1;t') G_1(x_2;t'). \qquad (4.7)
\end{aligned}$$

Підставляючи цей розв'язок у перше рівняння (4.4), отримаємо кінетичне рівняння для одночастинкової функції розподілу $f_1(x_1;t) = G_1(x_1;t)$:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}L(1)\right) f_1(x_1;t) \tag{4.8}$$

$$= -\int \mathrm{d}x_2 \; \mathrm{i}L(1,2) g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t) f_1(x_1;t) f_1(x_2;t)$$

$$-\int \mathrm{d}x_2 \; \mathrm{i}L(1,2) \int\limits_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' \; \mathrm{e}^{(\varepsilon + \mathrm{i}L_2)(t-t')} \left[\frac{\partial}{\partial t'} + \mathrm{i}L_2\right]$$

$$\times g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t') f_1(x_1;t') f_1(x_2;t'),$$

де перший доданок у правій частині є узагальненням середнього поля Власова і відповідає KMFT [26,27]. Кінетичне рівняння (4.8) повністю еквівалентне кінетичному рівнянню (3.4), (3.5), яке отримують у наближенні “парних” зіткнень.

Тепер розглянемо систему рівнянь (4.4), (4.5) у наближенні, коли у другому рівнянні (4.5) не враховуються тричастинкові незвідні функції розподілу $G_3(x_1,x_2,x_3;t)$, $h_3(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3;t)$, що є аналогом поляризаційного наближення у випадку отримання кінетичного рівняння Боголюбова–Ленарда–Балеску [14] для кулонівської плазми в однорідному випадку. Враховуючи (4.3), а також те, що $G_3(x_1,x_2,x_3;t) \equiv 0$ і $h_3(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3;t) \equiv 0$, рівняння (4.5) запишемо у такому вигляді:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}L_2 + \varepsilon\right) G_2(x_1,x_2;t) = &-\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}L_2\right) g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t) G_1(x_1;t) G_1(x_2;t) \\
&-\int \mathrm{d}x_3 \; \mathrm{i}L(1,3) \Big\{ G_2(x_1,x_2;t) G_1(x_3;t) + G_2(x_2,x_3;t) G_1(x_1;t) \Big\} \\
&-\int \mathrm{d}x_3 \; \mathrm{i}L(2,3) \Big\{ G_2(x_1,x_2;t) G_1(x_3;t) + G_2(x_1,x_3;t) G_1(x_2;t) \Big\} \\
&-\int \mathrm{d}x_3 \Big\{ \mathrm{i}L(1,3) + \mathrm{i}L(2,3) \Big\} \Big\{ g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t) + g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_3;t) + g_2(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3;t) \Big\} G_1(x_1;t) G_1(x_2;t) G_1(x_3;t).
\end{aligned} \tag{4.9}$$

Далі введемо оператор, який можна отримати варіяцією інтеґрала зіткнень Власова біля нерівноважного розподілу $G_1(x_1;t)$,

$$\delta\left(\int \mathrm{d}x_3 \; \mathrm{i}L(1,3) G_1(x_3;t) G_1(x_1;t)\right) = \int \mathrm{d}x_3 \; \mathrm{i}L(1,3) G_1(x_3;t) \delta G_1(x_1;t) = \mathsf{L}(x_1;t) \delta G_1(x_1;t). \tag{4.10}$$

Тоді рівняння (4.9) за допомогою оператора $\mathsf{L}(x_1;t)$ запишемо у вигляді

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}L_2 + \mathsf{L}(x_1,x_2;t) + \varepsilon\right) G_2(x_1,x_2;t) = -\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}L_2 + \mathsf{L}(x_1,x_2;t)\right) g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t) G_1(x_1;t) G_1(x_2;t), \tag{4.11}$$

звідки визначимо формальний розв’язок для незвідної двочастинкової функції розподілу:

$$G_2(x_1,x_2;t) = -\int\limits_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' \; \mathrm{e}^{\varepsilon(t'-t)} U(t,t') \left(\frac{\partial}{\partial t'} + \mathrm{i}L_2 + \mathsf{L}(x_1,x_2;t')\right) g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,t') G_1(x_1;t') G_1(x_2;t'). \tag{4.12}$$

Тут $U(t,t')$ — оператор еволюції:

$$U(t,t') = \exp_+ \left\{ -\int\limits_{t'}^{t} \mathrm{d}t'' \; \left(\mathrm{i}L_2 + \mathsf{L}(x_1,x_2;t'')\right) \right\}, \tag{4.13}$$

$$\mathsf{L}(x_1,x_2;t) = \mathsf{L}(x_1;t) + \mathsf{L}(x_2;t).$$

У результаті ми отримали вираз для незвідної квазірівноважної двочастинкової функції розподілу $G_2(x_1,x_2;t)$ в узагальненому поляризаційному наближенні. Підставимо вираз (4.12) у перше рівняння ланцюжка (4.4), тоді отримаємо

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathrm{i}L(1)\right)G_1(x_1;t)+\int \mathrm{d}x_2\ \mathrm{i}L(1,2)g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t)G_1(x_1;t)G_1(x_2;t) \tag{4.14}$$

$$=\int \mathrm{d}x_2\int\limits_{-\infty}^{t}\mathrm{d}t'\ \mathrm{e}^{\varepsilon(t'-t)}\mathrm{i}L(1,2)U(t,t')\left(\frac{\partial}{\partial t'}+\mathrm{i}L_2+\mathsf{L}(x_1,x_2;t')\right)g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t')G_1(x_1;t')G_1(x_2;t')$$

— узагальнене кінетичне рівняння для нерівноважної одночастинкової функції розподілу з немарківським інтеґралом зіткнення в узагальненому поляризаційному наближенні. Необхідно зазначити, що наявність в інтеґралі зіткнень (4.14) оператора зіткнень Власова $\mathsf{L}(x_1,x_2;t)$ свідчить про врахування у ньому колективних ефектів. У загальному вигляді аналіз інтеґрала зіткнень в (4.14) є достатньо складною математичною задачею. Очевидно, що для кожної фізичної моделі системи частинок чи нерівноважного стану інтеґрал зіткнень у (4.14), чи вираз для $G_2(x_1,x_2;t)$ (4.12) можна суттєво спростити. Ми розглянемо два конкретні випадки: модель твердих сфер та кулонівську плазму.

A. Модель твердих сфер у поляризаційному наближенні

Дослідження кінетичних процесів для моделі твердих сфер у наближеннях вищих, ніж "парні" зіткнення, враховуючи специфіку параметрів моделі і результати третього розділу та праць [13,14,62], зручно виконувати на основі ланцюжка рівнянь (4.4), (4.5) при формальній заміні потенціяльної частини оператора Ліувіля $\mathrm{i}L(1,2)$ оператором зіткнення Енскоґа $\hat{T}(1,2)$ (3.9). У цьому випадку рівняння (4.4), (4.5) мають такий вигляд:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathrm{i}L(1)\right)G_1(x_1;t)+\int \mathrm{d}x_2\ \hat{T}(1,2)g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t)G_1(x_1;t)G_1(x_2;t)++\int \mathrm{d}x_2\ \hat{T}(1,2)G_2(x_1,x_2;t)=0, \tag{4.15}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathrm{i}L_2^0+\hat{T}(1,2)+\varepsilon\right)G_2(x_1,x_2;t)=-\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathrm{i}L_2^0+\hat{T}(1,2)\right)g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t)G_1(x_1;t)G_1(x_2;t) \tag{4.16}$$

$$-\int \mathrm{d}x_3\left\{\hat{T}(1,3)+\hat{T}(2,3)\right\}\left\{G_3(x_1,x_2,x_3;t)+\sum_P G_2(x_1,x_2;t)G_1(x_3;t)\right.$$

$$\left.+g_3(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3;t)G_1(x_1;t)G_1(x_2;t)G_1(x_3;t)\right\}.$$

Далі будемо розглядати стосовно рівняння (4.16) ті ж наближення, при яких $G_3(x_1,x_2,x_3;t)$ та $h_3(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3;t)$ приймають рівними нулю. Тоді, якщо, подібно до (4.10) ввести больцман–енскоґівський оператор зіткнень $C(x_1;t)$, то рівняння (4.16) можна записати у такому вигляді:

$$\delta\int \mathrm{d}x_3\ \hat{T}(1,3)G_1(x_1;t)G_1(x_3;t)=C(x_1;t)\delta G_1(x_1;t), \tag{4.17}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathrm{i}L_2^0+\hat{T}(1,2)+C(x_1,x_2;t)+\varepsilon\right)G_2(x_1,x_2;t) \tag{4.18}$$

$$=-\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathrm{i}L_2^0+\hat{T}(1,2)+C(x_1,x_2;t)\right)g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t)G_1(x_1;t)G_1(x_2;t),$$

звідки визначимо формальний розв'язок для $G_2(x_1,x_2;t)$:

$$G_2(x_1,x_2;t) = -\int\limits_{-\infty}^{0} \mathrm{d}t'\ \mathrm{e}^{\varepsilon(t'-t)} U_{hs}(t,t') \tag{4.19}$$

$$\times \left\{ \frac{\partial}{\partial t'} + \mathrm{i}L_2^0 + \hat{T}(1,2) + C(x_1,x_2;t') \right\} g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t') G_1(x_1;t') G_1(x_2;t').$$

Тут $U_{hs}(t,t')$ — оператор еволюції для системи твердих сфер:

$$U_{hs}(t,t') = \exp_+ \left\{ -\int\limits_{t'}^{t} \mathrm{d}t''\ \left[\mathrm{i}L_2^0 + \hat{T}(1,2) + C(x_1,x_2;t'') \right] \right\}, \tag{4.20}$$

$$C(x_1,x_2;t) = C(x_1;t) + C(x_2;t).$$

Тепер підставимо (4.19) у перше рівняння (4.15). У результаті отримаємо

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}L(1) \right) G_1(x_1;t) \tag{4.21}$$

$$= \int \mathrm{d}x_2\ \hat{T}(1,2) g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t) G_1(x_1;t) G_1(x_2;t)$$

$$- \int \mathrm{d}x_2\ \hat{T}(1,2) \int\limits_{-\infty}^{0} \mathrm{d}t'\ \mathrm{e}^{\varepsilon(t'-t)} U_{hs}(t,t')$$

$$\times \left\{ \frac{\partial}{\partial t'} + \mathrm{i}L_2^0 + \hat{T}(1,2) + C(x_1,x_2;t') \right\}$$

$$\times g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t') G_1(x_1;t') G_1(x_2;t')$$

— узагальнене кінетичне рівняння для нерівноважної одночастинкової функції розподілу твердих сфер з немарківським інтеґралом зіткнень в узагальненому поляризаційному наближенні. Перший доданок у правій частині цього рівняння є інтеґралом зіткнень ревізованої теорії Енскоґа RET (3.8). Другий доданок, нехтуючи ефектами запізнення в часі й припускаючи, що оператор $C(x_1,x_2;t)$ не залежить від часу, коли:

$$G_1(x_1;t) = f_0(\mathbf{p}) = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp\left\{ -\frac{p^2}{2mkT} \right\}$$

— рівноважна максвелова функція розподілу, можна записати в спрощеному вигляді

$$I_{\mathrm{R}}(x_1;t) = -\int\limits_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t'\ \mathrm{e}^{\varepsilon(t'-t)} R_0(x_1;t,t') G_1(x_1;t') \tag{4.22}$$

$$- \int\limits_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t'\ \mathrm{e}^{\varepsilon(t'-t)} R_1(x_1;t,t') G_1(x_1;t'),$$

де

$$R_0(x_1;t,t') = \int \mathrm{d}x_2\ \hat{T}(1,2)$$

$$\times \mathrm{e}^{\left\{ (t'-t)\left(\mathrm{i}L_2^0 + \hat{T}(1,2) + C(x_1,x_2) \right) \right\}} \tag{4.23}$$

$$\times \left(\mathrm{i}L_2^0 + C(x_1,x_2) \right) g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t') G_1(x_2;t'),$$

$$R_1(x_1;t,t') = \int \mathrm{d}x_2\ \hat{T}(1,2)$$

$$\times \mathrm{e}^{\left\{ (t'-t)\left(\mathrm{i}L_2^0 + \hat{T}(1,2) + C(x_1,x_2) \right) \right\}} \tag{4.24}$$

$$\times \hat{T}(1,2) g_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2;t') G_1(x_2;t')$$

— узагальнений кільцевий оператор. Кінетичне рівняння (4.21) з урахуванням (4.23), (4.24) є узагальненням кінетичного рівняння для системи твердих сфер, отриманого М. М. Боголюбовим [14,62] і співпадає з ним, коли формально квазірівноважну парну функцію розподілу твердих сфер прийняти такою, що дорівнює одиниці. Для такого випадку М. Ернст і Дж. Дорфман [63] дослідили колективні моди в неоднорідному газі й показали, що розв'язок дисперсійного рівняння для гідродинамічних мод приводить до неаналітичної залежности частоти від хвильового вектора. Це пов'язане з тим, що кільцевий оператор для неоднорідних систем при малих хвильових числах містить внесок, пропорційний до $\sqrt{k}$. Подібні дослідження колективних мод та часових кореляційних функцій у гідродинамічній області виконав М. М. Боголюбов [14,62,64]. Важливо аналогічно дослідити гідродинамічні колективні моди та часові кореляційні функції на основі кінетичного рівняння (4.21) з урахуванням (4.22)–(4.24), в якому частина просторових кореляцій врахована в парній квазірівноважній функції $g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t)$. Очевидно, що такі результати можуть виявитись добрими для дуже густих газів, що описуються моделлю твердих сфер.

B. Кулонівська плазма в поляризаційному наближенні

Будемо досліджувати електронний газ, що міститься в компенсаційному полі просторово однорідного додатньо зарядженого фону, що створюється важкими нерухомими йонами. Тоді електрони взаємодіють за законом Кулона:

$$\Phi(|\mathbf{r}_{12}|) = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_{12}|},$$

для якого існує Фур'є–зображення $\Phi(|\mathbf{k}|)$ — дійсна функція:

$$\frac{e^2}{r_{12}} = \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2}{k^2} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{12}}, \quad \Phi(k) = \frac{4\pi e^2}{k^2}, \tag{4.25}$$

де $\mathbf{k}$ — хвильовий вектор; e — заряд електрона. Розглянемо ланцюжок рівнянь (4.4), (4.9) у просторово однорідному випадку, тобто коли $G_1(x_1; t) = G_1(\mathbf{p}_1; t)$, а парні функції розподілу $G_2(x_1, x_2; t) = G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; t) = G_2(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; t)$, $g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) = g_2(\mathbf{r}_{12}; t)$ залежать від $|\mathbf{r}_{12}|$. За методом М. М. Боголюбова [1,14] будемо вважати, що одночастинкові функції розподілу $G_1(\mathbf{p}_1; t)$ є "нульового" порядку за константою взаємодії q, парні функції розподілу $G_2(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; t)$ і $g_2(\mathbf{r}_{12}; t)$ — першого порядку q, а $G_3(x_1, x_2, x_3; t)$, $g_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3; t) \sim q^2$, де $q = \frac{e^2}{r_\mathrm{d}}\Theta$, $r_\mathrm{d} = \sqrt{\Theta/4\pi e^2 n}$ — радіус Дебая; $n = N/V$, $\Theta = k_\text{Б} T$, $k_\text{Б}$ — стала Больцмана; T — температура. Тому для того, щоб отримати рівняння для $G_2(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; t)$ в першому наближенні за константою взаємодії q без урахування ефектів запізнення у часі, в рівнянні (4.9) необхідно залишити всі інтеґральні доданки, а інші не враховувати. У цьому випадку, використовуючи Фур'є–перетворення, за просторовими координатами у просторово–однорідному випадку для кулонівського електронного газу система рівнянь (4.4), (4.9) набуває такого вигляду:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t} G_1(\mathbf{p}_1; t) \\
&= -\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \int \mathrm{d}\mathbf{k}\mathrm{d}\mathbf{p}_2\, \mathrm{i}\Phi(|\mathbf{k}|) g_2(\mathbf{k}; t) G_1(\mathbf{p}_1; t) G_1(\mathbf{p}_2; t) \\
&- \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \int \mathrm{d}\mathbf{k}\mathrm{d}\mathbf{p}_2\, \mathrm{i}\Phi(|\mathbf{k}|) G_2(\mathbf{k}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; t),
\end{aligned}$$

або

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t} G_1(\mathbf{p}_1; t) \\
&= \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} G_1(\mathbf{p}_1; t) \int \mathrm{d}\mathbf{k}\, \mathbf{k}\Phi(|\mathbf{k}|) \Im g_2(\mathbf{k}; t) \\
&+ \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \int \mathrm{d}\mathbf{k}\, \mathbf{k}\Phi(|\mathbf{k}|) \Im G_2(\mathbf{k}, \mathbf{p}_1; t)
\end{aligned} \tag{4.26}$$

і рівняння для $G_2(\mathbf{k}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; t)$

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}\mathbf{k}\frac{\mathbf{p}_{12}}{m} + \varepsilon\right) G_2(\mathbf{k}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; t) \\
&\mathrm{i}\mathbf{k}\Phi(|\mathbf{k}|) \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} G_1(\mathbf{p}_1; t) \int \mathrm{d}\mathbf{p}_3\, G_2(\mathbf{k}, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3; t) \right. \\
&\left. - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} G_1(\mathbf{p}_2; t) \int \mathrm{d}\mathbf{p}_3\, G_2(\mathbf{k}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_3; t) \right\} \\
&+ \mathrm{i}\mathbf{k}\Phi(|\mathbf{k}|) \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} G_1(\mathbf{p}_1; t) g_2(-\mathbf{k}; t) G_1(\mathbf{p}_2; t) \right. \\
&\left. - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} G_1(\mathbf{p}_2; t) g_2(\mathbf{k}; t) G_1(\mathbf{p}_1; t) \right\},
\end{aligned} \tag{4.27}$$

$$\varepsilon \to +0,$$

де

$$G_2(\mathbf{k}, \mathbf{p}_1; t) = \int \mathrm{d}\mathbf{p}_2\, G_2(\mathbf{k}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; t),$$

$\Im g_2(\mathbf{k}; t)$ і $\Im G_2(x_1, x_2; t)$ — уявні частини відповідних парних функцій розподілу. Необхідно зазначити такі властивості:

$$G_2(-\mathbf{k}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; t) = G_2^*(\mathbf{k}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; t),$$
$$g_2(-\mathbf{k}; t) = g_2^*(\mathbf{k}; t).$$

Розв'язок рівняння (4.27) без урахування ефектів запізнення у часі має такий вигляд:

$$\begin{aligned}
&G_2(\mathbf{k}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; t) = \frac{\mathbf{k}\Phi(|\mathbf{k}|)}{\mathbf{k}\cdot\frac{\mathbf{p}_{12}}{m} - \mathrm{i}0} \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} G_1(\mathbf{p}_1; t) G_2(-\mathbf{k}, \mathbf{p}_2; t) \right. \\
&\left. - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} G_1(\mathbf{p}_2; t) G_2(\mathbf{k}, \mathbf{p}_1; t) \right\} \\
&+ \frac{\mathbf{k}\Phi(|\mathbf{k}|)}{\mathbf{k}\cdot\frac{\mathbf{p}_{12}}{m} - \mathrm{i}0} \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} G_1(\mathbf{p}_1; t) g_2(-\mathbf{k}; t) G_1(\mathbf{p}_2; t) \right. \\
&\left. - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} G_1(\mathbf{p}_2; t) g_2(\mathbf{k}; t) G_1(\mathbf{p}_1; t) \right\}.
\end{aligned} \tag{4.28}$$

Зауважимо, що у рівняння (4.26) входить уявна частина парної незвідної нерівноважної функції розподілу, проінтеґрованої за значеннями імпульсу другої частинки. Проінтеґруємо тепер рівняння (4.28) за значеннями $\mathbf{p}_2$ і визначимо функцію $G_2(\mathbf{k},\mathbf{p}_1;t)$:

$$\left(1+\int \mathrm{d}\mathbf{p}_2\ \frac{\mathbf{k}\Phi(|\mathbf{k}|)}{\mathbf{k}\cdot\dfrac{\mathbf{p}_{12}}{m}-\mathrm{i}0}\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2}G_1(\mathbf{p}_2;t)\right)G_2(\mathbf{k},\mathbf{p}_1;t)$$
$$=\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1}G_1(\mathbf{p}_1;t)\int \mathrm{d}\mathbf{p}_2\ \frac{\mathbf{k}\Phi(|\mathbf{k}|)}{\mathbf{k}\cdot\dfrac{\mathbf{p}_{12}}{m}-\mathrm{i}0}G_2(-\mathbf{k},\mathbf{p}_2;t) \quad (4.29)$$
$$+\int \mathrm{d}\mathbf{p}_2\ \frac{\mathbf{k}\Phi(|\mathbf{k}|)}{\mathbf{k}\cdot\dfrac{\mathbf{p}_{12}}{m}-\mathrm{i}0}\left\{\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1}G_1(\mathbf{p}_1;t)g_2(-\mathbf{k};t)G_1(\mathbf{p}_2;t)\right.$$
$$\left.-\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2}G_1(\mathbf{p}_2;t)g_2(\mathbf{k};t)G_1(\mathbf{p}_1;t)\right\}.$$

Далі із (4.29) необхідно вилучити доданок із $G_2(-\mathbf{k},\mathbf{p}_2;t)$. Ми вчинимо так, як це зробив Ленард [45,64]: проінтеґруємо рівняння (4.29) за компонентою імпульсу $\mathbf{p}_{1\perp}$, перпендикулярною до хвильового вектора $\mathbf{k}$. В результаті отримаємо рівняння

$$[1+\Phi(|\mathbf{k}|)\chi(\mathbf{k},p_1;t)]\,G_2(\mathbf{k},p_1;t)$$
$$=\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1}G_1(p_1;t)\int \mathrm{d}\mathbf{p}_2\ \frac{\mathbf{k}\Phi(|\mathbf{k}|)}{k\cdot\dfrac{p_{12}}{m}-\mathrm{i}0}G_2(-\mathbf{k},\mathbf{p}_2;t) \quad (4.30)$$
$$+\int \mathrm{d}\mathbf{p}_2\ \frac{\mathbf{k}\Phi(|\mathbf{k}|)}{k\cdot\dfrac{p_{12}}{m}-\mathrm{i}0}\left\{\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1}G_1(p_1;t)g_2(-\mathbf{k};t)G_1(\mathbf{p}_2;t)\right.$$
$$\left.-\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2}G_1(\mathbf{p}_2;t)g_2(\mathbf{k};t)G_1(p_1;t)\right\},$$

де введено такі позначення:

$$\chi(\mathbf{k},p_1;t)=\int \mathrm{d}\mathbf{p}_2\ \frac{\mathbf{k}}{k\cdot\dfrac{p_{12}}{m}-\mathrm{i}0}\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2}G_1(\mathbf{p}_2;t), \quad (4.31)$$
$$p_1=\frac{\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{k}}{k},\quad p_2=\frac{\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{k}}{k},\quad k=|\mathbf{k}|,$$
$$G_1(p_1;t)=\int \mathrm{d}\mathbf{p}_{1\perp}G_1(\mathbf{p}_1;t),$$
$$G_2(\mathbf{k},p_1;t)=\int \mathrm{d}\mathbf{p}_{1\perp}\ G_2(\mathbf{k},\mathbf{p}_1;t).$$

Тепер рівняння (4.29) домножуємо на $\frac{\partial}{\partial p_1}G_1(p_1;t)$, а (4.30) — на $\frac{\partial}{\partial p_1}G_1(\mathbf{p}_1;t)$ і віднімаємо одне від одного. Отримаємо

$$\Big(1+\Phi(|\mathbf{k}|)\chi(\mathbf{k},p_1;t)\Big)\times \quad (4.32)$$
$$\left[G_2(\mathbf{k},\mathbf{p}_1;t)\frac{\partial}{\partial p_1}G_1(p_1;t)-G_2(\mathbf{k},p_1;t)\frac{\partial}{\partial p_1}G_1(\mathbf{p}_1;t)\right]$$
$$=\Phi(|\mathbf{k}|)\chi(\mathbf{k},p_1;t)g_2(\mathbf{k};t)\times$$
$$\left[G_1(p_1;t)\frac{\partial}{\partial p_1}G_1(\mathbf{p}_1;t)-G_1(\mathbf{p}_1;t)\frac{\partial}{\partial p_1}G_1(p_1;t)\right].$$

Якщо взяти уявну частину від цього рівняння, то знайдемо шукану величину $\Im G_2(\mathbf{k},\mathbf{p}_1;t)$ за умови, що $\Im G_2(\mathbf{k},p_1;t)=0$ [45]:

$$\frac{\partial}{\partial p_1}G_1(p_1;t)\Im G_2(\mathbf{k},\mathbf{p}_1;t)=\frac{\Phi(|\mathbf{k}|)\Im\left[\chi(\mathbf{k},p_1;t)g_2(\mathbf{k};t)\right]}{|1+\Phi(|\mathbf{k}|)\chi(\mathbf{k},p_1;t)|^2}\left[G_1(p_1;t)\frac{\partial}{\partial p_1}G_1(\mathbf{p}_1;t)-G_1(\mathbf{p}_1;t)\frac{\partial}{\partial p_1}G_1(p_1;t)\right]. \quad (4.33)$$

Оскільки $\Im\chi(\mathbf{k},p_1;t)=-\pi\frac{\partial}{\partial p_1}G_1(p_1;t)$ [45,46], то, підставивши значення $\Im G_2(\mathbf{k},\mathbf{p}_1;t)$ в рівняння (4.26), отримаємо

$$\frac{\partial}{\partial t}G_1(\mathbf{p}_1;t)=\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1}G_1(\mathbf{p}_1;t)\int \mathrm{d}\mathbf{k}\ \mathbf{k}\Phi(|\mathbf{k}|)\Im g_2(\mathbf{k};t)+\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1}\int \mathrm{d}\mathbf{p}_2\ Q(\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2;t)\left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1}-\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2}\right]G_1(\mathbf{p}_1;t)G_1(\mathbf{p}_2;t) \quad (4.34)$$

— узагальнене кінетичне рівняння Боголюбова–Ленарда–Балеску для електронного газу в компенсаційному полі, де $Q(\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2;t)$ — тензор другого рангу

$$Q(\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2;t)=-\pi\int \mathrm{d}\mathbf{k}\ \frac{|\Phi(|\mathbf{k}|)|^2\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{k}}{|1+\Phi(|\mathbf{k}|)\chi(\mathbf{k},p_1;t)|^2}\Im g_2(\mathbf{k};t)\delta\big(\mathbf{k}\cdot(\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2)\big), \quad (4.35)$$

який співпадає з $Q(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$ [64] при $\Im g_2(\mathbf{k};t) = 1$. У цьому випадку кінетичне рівняння (4.34) перетворюється у звичайне рівняння Ленарда–Балеску [45,64]. Очевидно, узагальнене кінетичне рівняння Боголюбова–Ленарда–Балеску (4.34) претендує на опис густого електронного газу, оскільки як і в узагальненому середньому полі, так і в узагальненому інтеґралі зіткнень Боголюбова–Ленарда–Балеску багаточастинкові кореляції враховує уявна частина $g_2(\mathbf{k};t)$. Однак проблема розбіжности в інтеґралі зіткнень рівняння (4.34) на малих відстанях ($k \to \infty$) є нерозв'язаною. Її можна вирішити в рамках моделі заряджених твердих сфер, об'єднавши результати параграфів 4.A та 4.B, хоча це становить складну математичну задачу і потребує окремого розгляду.

Ланцюжок рівнянь ББҐКІ (4.4), (4.5) з модифікованими граничними умовами та модифікованими ґруповими розкладами є перспективними з погляду досліджень густих систем, де врахування просторових міжчастинкових кореляцій важливе. Кінетичне рівняння (4.21)–(4.24) є узагальненням кінетичного рівняння Боголюбова [14,62] для системи твердих сфер. Важливим фактором є те, що в кінетичному рівнянні (4.21)–(4.24) та в узагальненому кінетичному рівнянні Боголюбова–Ленарда–Балеску (4.34) колективні ефекти враховуються як через середнє поле Власова, так і через парну квазірівноважну кореляційну функцію, що є функціоналом нерівноважних значень температури та хемічного потенціялу. Очевидно, важливими є дослідження отриманих кінетичних рівнянь з погляду їхніх розв'язків та вивчення на їхній основі коефіцієнтів переносу, часових кореляційних функцій для модельних систем.

---

[1] Н. Н. Боголюбов, *Проблемы динамической теории в статистической физике* (Гостехиздат, Москва, Ленинград, 1946).

[2] E. G. D. Cohen, Physica **28**, 1045 (1962).

[3] E. G. D. Cohen, J. Math. Phys. **4**, 183 (1963).

[4] J. Weinstock, Phys. Rev. **132**, 454 (1963).

[5] Дж. Уленбек, Дж. Форд, *Лекции по статистической механике* (Мир, Москва, 1965).

[6] К. П. Гуров, *Основания кинетической теории* (Наука, Москва, 1966).

[7] J. Dorfman, E. G. D. Cohen, J. Math. Phys. **8**, 282 (1967).

[8] В. П. Силин, *Введение в кинетическую теорию газов* (Наука, Москва, 1971).

[9] Д. Н. Зубарев, М. Ю. Новиков, Теор. мат. физ. **13**, 406 (1972).

[10] D. N. Zubarev, M. Ju. Novikov, Fortschr. Phys. **21**, 703 (1973).

[11] Р. Либов, *Введение в теорию кинетических уравнений* (Мир, Москва, 1974).

[12] Ю. Л. Климонтович, *Кинетическая теория неидеального газа и неидеальной плазмы* (Наука, Москва, 1975).

[13] П. Резибуа, М. де Ленер, *Классическая кинетическая теория жидкостей и газов* (Мир, Москва, 1980).

[14] А. В. Шелест, *Метод Боголюбова в динамической теории кинетических уравнений* (Наука, Москва, 1990).

[15] K. Kawasaki, J. Oppenheim, Phys. Rev. **139**, 1763 (1965).

[16] J. Weinstock, Phys. Rev. **140**, 460 (1971).

[17] D. Enskog, *Kinetische Theorie der Warmeleitung Reibung und Selbstdiffusion in gevissen verdichteten Gasen und Flussigkeiten* (Svenska Vetenskapsaked. Handl., 1922, vol. 63, p. 4).

[18] С. Чепмен, Т. Каулинг, *Математическая теория неоднородных газов* (ИЛ, Москва, 1960).

[19] H. Hanley, R. McCarthy, F. Cohen, Physica **60**, 322 (1972).

[20] Дж. Ферцигер, Г. Капер, *Математическая теория процессов переноса в газах* (Мир, Москва, 1976).

[21] H. T. Davis, S. A. Rise, J. V. Sengers, J. Chem. Phys. **35**, 2210 (1961).

[22] M. Grmela, R. Rosen, L. S. Garcia–Colin, J. Chem. Phys. **75**, 5474 (1981).

[23] M. H. Ernst, H. van Beijeren, Physica **68**, 437 (1973).

[24] P. Resibois, Phys. Rev. Lett. **40**, 1409 (1978).

[25] P. Resibois, J. Stat. Phys. **19**, 593 (1978).

[26] J. Karkhek, G. Stell, J. Chem. Phys. **75**, 1475 (1981).

[27] G. Stell, J. Karkheck, H. van Beijeren, J. Chem. Phys. **79**, 3166 (1983).

[28] М. В. Токарчук, И. П. Омелян, *Нормальные решения обобщенного уравнения Энскога–Власова методом граничных условий: Тр. Всесоюз. конф. "Совр. пробл. стат. физики" (Львов, 1987)* (Наукова думка, Київ, 1989).

[29] J. A. Leegwater, H. van Beijeren, J. P. J. Michels, J. Phys.: Cond. Matt. **1**, 237 (1989).

[30] J. Karkheck, H. van Beijeren, I. M. de Schepper, Phys. Rev. A **32**, 2517 (1985).

[31] Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, Теор. мат. физ. **60**, 270 (1984).

[32] В. Я. Рудяк, Журн. тех. физ. **54**, 406 (1984).

[33] В. Я. Рудяк, Теплофиз. выс. темп. **23**, 268 (1985).

[34] В. Я. Рудяк, *Статистическая теория диссипативных процессов в газах и жидкостях* (Наука, Новосибирск, 1987).

[35] Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, И. П. Омелян, М. В. Токарчук, Препринт АН Украины, ИТФ–88–102Р, Киев, 1988.

[36] Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, И. П. Омелян, М. В. Токарчук, *Объединение кинетики и гидродинамики в теории явлений переноса. Сб. науч. тр. ИТПМ СО АН СССР. Модели механики сплошных сред* (Новосибирск, 1989).

[37] М. В. Токарчук, И. П. Омелян, Препринт АН Украины, ИТФ–89–49Р, Киев, 1989.

[38] Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, И. П. Омелян, М. В. Токарчук, Препринт АН Украины, ИТФ–90–11Р, Киев, 1990.

[39] Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, И. П. Омелян, М. В. То-

карчук, Теор. мат. физ. **87**, 113 (1991).
[40] М. В. Токарчук, І. П. Омелян, Укр. фіз. журн. **35**, 970 (1990).
[41] Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, И. П. Омелян, М. В. Токарчук, Вопр. ат. науки и техн. Сер.: Яд.–физ. иссл. (теория и эксперимент). Харьков, ХФТИ, 1992, вып. 3(24), с. 60–65.
[42] М. В. Токарчук, І. П. Омелян, О. Є. Кобрин, Препринт АН України, ІФКС–1992–22У, Львів, 1992.
[43] Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, И. П. Омелян, М. В. Токарчук, Теор. мат. физ. **96**, 325 (1993).
[44] A. E. Kobryn, V. G. Morozov, I. P. Omelyan, M. V. Tokarchuk, Physica A **230**, 189 (1996).
[45] A. Lenard, Ann. Phys. **3**, 390, (1960).
[46] R. Balescu, Phys. Fluids **3**, 52 (1960).
[47] Д. Н. Зубарев, М. Ю. Новиков, Теор. мат. физ. **18**, 78 (1974).
[48] Д. Н. Зубарев, М. Ю. Новиков, Теор. мат. физ. **19**, 237 (1974).
[49] Д. Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика* (Наука, Москва, 1971).
[50] Д. Н. Зубарев, *Современные методы статистической теории неравновесных процессов. В кн.: Итоги науки и техники. Современные проблемы математики* (ВИНИТИ, Москва, 1980).
[51] Н. Винер, *Интеграл Фурье и некоторые его приложения* (Физматгиз, Москва, 1963).
[52] В. А. Диткин, П. И. Кузнецов, *Справочник по операционному исчислению* (Гостехиздат, Москва, Ленинград, 1951).
[53] J. A. Barker, D. Henderson, J. Chem. Phys. **47**, 4714 (1967).
[54] J. D. Weeks, D. Chandler, H. C. Andersen, J. Chem. Phys. **54**, 5237 (1971).
[55] I. P. Omelyan, M. V. Tokarchuk, Physica A **234**, 89 (1996).
[56] И. Р. Юхновский, М. Ф. Головко, *Статистическая теория классических равновесных систем* (Наукова думка, Київ, 1980).
[57] В. Я. Рудяк, Н. Н. Яненко, Теор. мат. физ. **23**, 268 (1985).
[58] В. Я. Рудяк, Журн. тех. физ. **87**, 1466 (1987).
[59] Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Физическая кинетика* (Наука, Москва, 1979).
[60] Р. Балеску, *Статистическая механика заряженых частиц* (Мир, Москва, 1967).
[61] H. S. Green, *The molecular theory of gases* (North–Holland, Amsterdam, 1952).
[62] Н. Н. Боголюбов, Физика ЭЧАЯ **9**, 501 (1978); N. N. Bogolubov, Preprint JINR–E17–10514, Dubna, 1977.
[63] M. H. Ernst, J. R. Dorfman, Physica **61**, 157 (1972).
[64] Г. Эккер, *Теория полностью ионизованной плазмы* (Мир, Москва, 1974).

ON THE KINETIC THEORY OF CLASSICAL INTERACTING PARTICLES BY MEANS OF NONEQUILIBRIUM STATISTICAL OPERATOR METHOD

M. V. Tokarchuk, I. P. Omelyan, A. E. Kobryn
Institute for Condensed Matter Physics of the Ukrainian Acad. Sci.
1 Svientsitskii Str., Lviv, UA–290011, Ukraine

The solution to the BBGKY hierarhy for the nonequilibrium distribution function with modified boundary conditions with the allowance for both of nonequilibriumness of a one-particle distribution function and local conservation laws is considered. Modified group expansions are proposed. A generalized kinetic equation for hard spheres and a generalized Bogolubov–Lenard–Balescu kinetic equation for a dense electron gas are obtained in polarization approximation.