Доклады Академии наук СССР
1974. Том 215, № 4

УДК 536.750 **ФИЗИКА**

В. П. КАЛАШНИКОВ, М. И. АУСЛЕНДЕР

ПРОИЗВОДЯЩИЕ ФУНКЦИОНАЛЫ В КЛАССИЧЕСКОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ НЕИДЕАЛЬНОГО ГАЗА

(Представлено академиком Н. Н. Боголюбовым 30 VII 1973)

1. Н. Н. Боголюбовым [1] было показано, что очень удобная в математическом отношении схема теоретического описания системы частиц с парным взаимодействием может быть получена, если от уравнения Лиувилля для полной функции распределения N частиц $\rho_N(t, x^N)$ перейти к уравнению движения производящего функционала

$$F_N(t,u)=\int (dx)^N\rho_N(t,x^N)\prod_{1\leqslant i\leqslant N}(1+u(x_i)), \tag{1}$$

где $x^N=(x_1, x_2, \ldots, x_N)$, $(dx)^N=\prod\limits_{1\leqslant i\leqslant N} dx_i$, x_i — совокупность координат и импульсов i-частицы, $u(x)$ — произвольные регулярные функции, достаточно быстро стремящиеся к нулю при возрастании x. Уравнение в функциональных производных, которому удовлетворяет величина (1), можно решить, если известно значение $F_N(t_0, u)$ производящего функционала в некоторый заданный момент времени t_0.

Особый интерес представляет некоторый класс функционалов (1), которые зависят от времени только через посредство одночастичных функций распределения $f_1(t, x)$. Такие производящие функционалы соответствуют кинетическому этапу процесса эволюции распределения частиц на временных масштабах, больших длительности соударения. С их помощью можно построить как уравнения движения, так и явные выражения для произвольных s-частичных функций распределения

$$f_s(t,x^s)=V^s\int (dx)^{N-s}\rho_N(t,x^N)=\frac{V^s(N-s)!}{N!}\left(\frac{\delta^2F_N(t,u)}{\delta u(x_1)\ldots\delta u(x_s)}\right)_0 \tag{2}$$

каждая из которых в этом случае зависит от времени только через функции f_1. Индекс ноль в (2) показывает, что после функционального дифференцирования нужно положить $u=0$; V — объем системы.

2. Рассмотрим систему N частиц с гамильтонианом

$$H_N=H_N^{(0)}+H_N^{(1)},\quad H_N^{(0)}=\sum_{1\leqslant i\leqslant N}H(x_i),\quad H_N^{(1)}=\sum_{1\leqslant i<j\leqslant N}H(x_ix_j), \tag{3}$$

где $H(x_i)$ — гамильтониан i-й свободной частицы, а $H(x_ix_j)$ — гамильтониан взаимодействия частиц i и j. Введем соответствующий оператор Лиувилля

$$L_N=L_N^{(0)}+L_N^{(1)},\quad L_N^{(0)}=\sum_{1\leqslant i\leqslant N}L(x_i),\quad L_N^{1)}=\sum_{1\leqslant i<j\leqslant N}L(x_ix_j),$$

действующий согласно правилу $iL_NG=\{G, H_N\}$, где $\{..., ...\}$ есть скобка Пуассона. Для построения производящего функционала (1) на кинетическом этапе процесса эволюции системы воспользуемся граничным условием ослабления корреляций Н. Н. Боголюбова [1], согласно которому распределение $\rho_N(t, x^N)$ в бесконечно удаленном прошлом распадается на произведение одночастичных функций распределения

$$\lim_{t_1\to-\infty} e^{it_1L_N}\left\{\rho_N(t+t_1, x^N)-\prod_{1\leqslant i\leqslant N} V^{-1}f_1(t+t_1, x_i)\right\}=0. \tag{4}$$

Граничное условие (4) можно учесть автоматически, вводя бесконечно малый источник в уравнение Лиувилля [2]

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+iL_N\right)\rho_N(t, x^N)=-\varepsilon\left(\rho_N(t, x^N)-\prod_{1\leqslant i\leqslant N} V^{-1}f_1(t, x_i)\right), \quad \varepsilon\to+0. \tag{5}$$

Теперь, умножая каждый член уравнения (5) на $\prod\limits_{1\leqslant i\leqslant N}(1+u(x_i))$ и интегрируя по всему фазовому пространству, находим уравнение движения производящего функционала (1)

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+iL_N(u)\right)F_N(t, u)=-\varepsilon(F_N(t, u)-\bar{F}_N(t, u)), \quad \varepsilon\to+0, \tag{6}$$

$$L_N(u)=L_N^{(0)}(u)+L_N^{(1)}(u), \quad L_N^{(0)}(u)=\int dx\, u(x)L(x)\frac{\delta}{\delta u(x)}, \tag{7}$$

$$L_N^{(1)}(u)=\frac{1}{2}\int dx\, dy\{u(x)+u(y)+u(x)u(y)\}L(x, y)\frac{\delta^2}{\delta u(x)\delta u(y)}$$

— функциональный оператор Лиувилля, а

$$\bar{F}_N(t, u)=\int (dx)^N\prod_{1\leqslant i\leqslant N}(1+u(x_i))\prod_{1\leqslant j\leqslant N}V^{-1}f_1(t, x_j)=$$

$$=\left(1+\frac{1}{V}\int dx\, u(x)f_1(t, x)\right)^N \tag{8}$$

— квазиравновесный производящий функционал.

Дифференцируя уравнение (6) и применяя формулу (2), находим цепочку уравнений для функций f_s в форме, полученной в статье [3]:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+iL_s\right)f_s(t, x^s)+\frac{N-s}{V}\int dx_{s+1}\sum_{1\leqslant j\leqslant s} iL(x_jx_{s+1})f_{s+1}(t, x^{s+1})=$$

$$=-\varepsilon\left(f_s(t, x^s)-\prod_{1\leqslant i\leqslant s}f_1(t, x_i)\right), \quad s=1, 2, \ldots \tag{9}$$

3. Перейдем теперь к пределу $(N, V)\to\infty$, $N/V=n=\mathrm{const}$, предполагая существование этого предела; индекс N у предельных величин будем опускать. Имеем

$$F(t, u)=\lim_{(N,V)\to\infty}F_N(t, u)=1+\sum_{s=1}^{\infty}\frac{n^s}{s!}\int (dx)^s f_s(t, x^s)u(x_1)\ldots u(x_s), \tag{10}$$

$$\bar{F}(t, u)=\lim_{(N,V)\to\infty}\bar{F}_N(t, u)=\exp\left\{n\int dx\, u(x)f_1(t, x)\right\}. \tag{11}$$

Уравнение (6) легко решается; после вычисления термодинамического предельного перехода решение запишется в виде

$$F(t,u)=\varepsilon\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\varepsilon t_1}e^{it_1L(u)}\exp\left\{n\int dx\,u(x)f_1(t+t_1,x)\right\}=$$

$$=\overline{F}(t,u)-\int_{-\infty}^{t}dt_0\,e^{\varepsilon(t_0-t)}e^{i(t_0-t)L(u)}\left(\frac{\partial}{\partial t_0}+iL(u)\right)\overline{F}(t_0,u). \qquad (12)$$

Из формул (12), (11) видно, что, во-первых, мы действительно построили производящий функционал, зависящий от времени только через функции f_1, и, во-вторых, этот функционал удовлетворяет граничному условию вида

$$\lim_{t_1\to-\infty}e^{it_1L(u)}\left(F(t+t_1,u)-\exp\left\{n\int dx\,u(x)f_1(t+t_1,x)\right\}\right)=0, \qquad (13)$$

которое эквивалентно условию ослабления корреляций для функций распределения.

4. Производящий функционал (12) удовлетворяет также некоторому интегральному уравнению, которое мы сейчас выведем. Запишем предельную форму уравнения (6) в виде

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+iL^{(0)}(u)+\varepsilon\right)(F(t,u)-\overline{F}(t,u))=$$

$$=-\left(\frac{\partial}{\partial t}+iL^{(0)}(u)\right)\overline{F}(t,u)-iL^{(1)}(u)F(t,u) \qquad (14)$$

или

$$\frac{d}{dt}e^{t(iL^{(0)}(u)+\varepsilon)}(F(t,u)-\overline{F}(t,u))=$$

$$=-e^{\varepsilon t}\frac{d}{dt}e^{itL^{(0)}(u)}\overline{F}(t,u)-e^{t(iL^{(0)}(u)+\varepsilon)}iL^{(1)}(u)F(t,u). \qquad (15)$$

Интегрируя это уравнение, получаем

$$F(t,u)=F^0(t,u)-i\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\varepsilon t_1}e^{it_1L^{(0)}(u)}L^{(1)}(u)F(t+t_1,u),$$

$$F^0(t,u)=\varepsilon\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\varepsilon t_1}e^{it_1L^{(0)}(u)}\overline{F}(t+t_1,u)=$$

$$=\overline{F}(t,u)-\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\varepsilon t_1}e^{it_1L^{(0)}(u)}\left(\frac{\partial}{\partial t}+iL^{(0)}(u)\right)\overline{F}(t+t_1,u). \qquad (16)$$

Имеем, далее

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+iL^{(0)}(u)\right)\overline{F}(t,u)=n\overline{F}(t,u)\int dx\,u(x)\left(\frac{\partial}{\partial t}+iL(x)\right)f_1(t,x)=$$

$$=-F(t,u)\int dx\,u(x)\left(\frac{\delta}{\delta u(x)}iL^{(1)}(u)F(t,u)\right). \qquad (17)$$

Отметим, что выражение

$$P(t,u)=\bar{F}(t,u)\int dx\,u(x)\left(\frac{\delta}{\delta u(x)}\cdots\right)_0 \qquad (18)$$

имеет свойства проекционного оператора. Именно:

$$P(t_1,u)P(t_2,u)G(u)=P(t_1,u)G(u). \qquad (19)$$

Подставляя формулы (16) – (19) в уравнение (15), получаем окончательно интегральное уравнение для производящего функционала

$$F(t,u)=\bar{F}(t,u)-i\int\limits_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\varepsilon t_1}e^{it_1L^{(0)}(u)}(1-P(t+t_1,u))L^{(1)}(u)F(t+t_1,u). \qquad (20)$$

Аналогичное уравнение в обычном фазовом пространстве для полной функции распределения выведено Д. Н. Зубаревым и одним из авторов [4]. Вместо оператора $P(t,u)$ в этом случае возникает термодинамический проекционный оператор Робертсона [5].

Формулы (12) и (20) могут служить основой для приближенного вычисления производящего функционала в виде разложений по тому или иному малому параметру. В частности, разложение $F(t,u)$ по малому взаимодействию удобно получить, итерируя интегральное уравнение (20).

Разложение производящего функционала по степеням плотности легко получается из формулы (12). Действительно, разлагая функционал $\bar{F}(t,u)$ по степеням n, получаем

$$F(t,u)=\sum_{s=0}^{\infty}\frac{n^s}{s!}\varepsilon\int\limits_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\varepsilon t_1}e^{it_1L(u)}\left\{\int dx\,u(x)f_1(t+t_1,x)\right\}^s. \qquad (21)$$

Эти разложения для производящих функционалов индуцируют соответствующие разложения для функций распределения и интегралов столкновений.

Аналогичным образом можно построить производящие функционалы более общего типа, зависящие не только от одночастичной, но от нескольких функций распределения низшего порядка.

Авторы глубоко признательны проф. Д. Н. Зубареву за обсуждения работы.

Институт физики металлов
Уральского научного центра Академии наук СССР
Свердловск

Поступило
9 VII 1973

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] *Н. Н. Боголюбов,* Проблемы динамической теории в статистической физике, Избр. тр., т. 2, Киев, 1970. [2] *Д. Н. Зубарев,* Неравновесная статистическая термодинамика, «Наука», 1970. [3] *Д. Н. Зубарев, М. Ю. Новиков,* Теоретич. и матем. физ., т. 13, 411 (1972). [4] *Д. Н. Зубарев, В. П. Калашников,* Там же, т. 5, 406 (1970). [5] *B. Robertson,* Phys. Rev., v. 144, 151 (1966).