

Н-731

**ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ**  
**ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ**

4 - 8228

**НОВИКОВ Михаил Юрьевич**

**ВЫВОД И ИССЛЕДОВАНИЕ ОБОБЩЕННЫХ  
И РЕНОРМАЛИЗОВАННЫХ КИНЕТИЧЕСКИХ  
УРАВНЕНИЙ**

**Специальность 01.04.02 - теоретическая  
и математическая физика**

**Автореферат диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук**

**(Диссертация написана на русском языке)**

Дубна 1974

Работа выполнена во Всесоюзном научно-исследовательском институте оптико-физических измерений, Москва.

Научный руководитель:

профессор

доктор физико-математических наук Д.Н. ЗУБАРЕВ.

Официальные оппоненты

доктор физико-математических наук В.П. КАЛАШНИКОВ,

кандидат физико-математических наук Ю.А. ЦЕРКОВНИКОВ.

Ведущее научно-исследовательское учреждение:

Московский Государственный университет им. М.В. Ломоносова.

Автореферат разослан " " \_\_\_\_\_ 1974 г.

Защита диссертации состоится " " \_\_\_\_\_ 1974 года  
на заседании Ученого Совета Лаборатории теоретической физики

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ, Дубна.

Ученый секретарь Совета

Р.А. АСАНОВ

4 - 8228

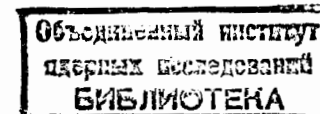
НОВИКОВ Михаил Юрьевич

ВЫВОД И ИССЛЕДОВАНИЕ ОБОБЩЕННЫХ  
И РЕНОРМАЛИЗОВАННЫХ КИНЕТИЧЕСКИХ  
УРАВНЕНИЙ

Специальность 01.04.02 - теоретическая  
и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

(Диссертация написана на русском языке)



Одна из важных проблем статистической физики состоит в разработке методов вывода кинетических уравнений из уравнения Лиувилля. Разнообразные способы решения этой задачи можно разбить на две большие группы. В основе первой группы методов<sup>/1-4/</sup> лежит фундаментальная работа Боголюбова<sup>/1/</sup> по расцеплению цепочки уравнений БГКИ. Если предположить, что: 1) все высшие функции распределения зависят от времени через одночастичную функцию; 2) функции распределения удовлетворяют граничному условию ослабления корреляций; 3) функции распределения аналитически зависят от малых параметров — например, от плотности, — то удастся установить связь парной корреляционной функции с одночастичной функцией в любом порядке теории возмущений. Для одночастичной функции распределения получается замкнутое кинетическое уравнение, в интеграле столкновений которого учитываются взаимодействия пар, троек и т.д. молекул.

Основная идея второй группы подходов<sup>/5-7/</sup> заключается в анализе уравнения Лиувилля с помощью диаграммных методов. При этом для некоторой выделенной части  $\mathcal{M}$ -частичной функции распределения (например, для функции распределения по импульсам) удастся вывести так называемое немарковское основное кинетическое уравнение<sup>/8/</sup>, которое применимо, в принципе, к описанию систем, в которых отсутствуют малые параметры. Это уравнение учитывает в явной форме вклад начальных корреляций. Если в системе имеются малые параметры, то можно показать, что на временах порядка времени взаимодействия молекул начальные корреляции забываются. Тогда при вычислении обобщенного интеграла столкновений можно использовать регулярную теорию возмущений и установить, что марковская форма основного кинетического уравнения<sup>/8/</sup> приводит к результатам теории<sup>/1/</sup>.

В последние годы был разработан более общий метод описания

необратимых процессов, пригодный для рассмотрения как кинетической, так и гидродинамической стадий эволюции неравновесных систем<sup>/9/</sup>. В основу этого метода положен определенный принцип отбора запаздывающих решений уравнения Лиувилля, зависящих (согласно<sup>/1/</sup>) от сокращенного набора переменных<sup>/10/</sup>. Последний определяется физическими особенностями конкретных систем и тесно связан с их термодинамикой.

Первый круг задач, который возникает при применении метода<sup>/9, 10/</sup> к проблемам кинетической теории, сводится к установлению связи<sup>/9, 10/</sup> с уже известными результатами теорий<sup>/1, 5/</sup>. Поскольку теория<sup>/1/</sup> не учитывает эффектов памяти, встает задача о такой модификации метода функциональных разложений, которая позволяет получить так называемую псевдомарковскую (а не только марковскую) форму основного кинетического уравнения.

В методах<sup>/1, 5, 9/</sup> имеются общие трудности. В частности, в работах<sup>/11-13/</sup> было показано, что при использовании регулярных разложений по плотности в высших членах ряда теории возмущений появляются расходящиеся на больших временах вклады в двухчастичную функцию распределения. Физическая причина расходимостей заключается в том, что в регулярных методах движение выделенной группы молекул рассматривается изолированно от движения прочих молекул системы; тем самым допускаются длительные движения частиц с малыми относительными скоростями. В действительности, вследствие взаимодействия со "средой", длительность таких движений не может превосходить времени свободного пробега. Поэтому возникает проблема перестройки ряда теории возмущений с целью вывода ренормализованных кинетических уравнений, в интегралах столкновений которых учитывалось бы влияние "среды" на движение частиц. В работе<sup>/14/</sup> эта задача решалась с помощью дополнительного усреднения цепочки урав-

нений ББГКИ; в принципе возможен и другой подход, связанный с сохранением основных допущений теории<sup>/1/</sup>, за исключением предположения об аналитичности функций распределения. С указанной проблемой связана задача эффективного учета памяти; для квантовомеханической системы со слабым взаимодействием она была последовательно решена в работе<sup>/15/</sup>.

Весьма важным является вопрос о термодинамических функциях неравновесных систем. Известная формула Больцмана для энтропии, содержащая одночастичную функцию распределения, применима лишь к слабо неидеальным газам. В реальных системах необходимо учитывать парные (и высшие) корреляции. Трудность построения формулы для энтропии неидеального неравновесного газа заключается в том, что наряду с правильным описанием термодинамики энтропия должна обнаруживать необратимое поведение системы. Поэтому ее нельзя определить, например, как взятое с обратным знаком среднее значение логарифма точной функции распределения.

Настоящая диссертация посвящена построению и исследованию различных типов кинетических уравнений для систем классических частиц, взаимодействующих посредством парного потенциала, и частично решению перечисленных выше проблем. В основе работы лежит метод<sup>/9/</sup>.

Диссертация состоит из Введения, пяти глав и Заключения.

Во Введении дается исторический обзор развития методов кинетической теории и содержится постановка рассматриваемых далее задач.

В главе I строится решение уравнения Лиувилля, функционально зависящее от времени через одночастичную функцию распределения<sup>/16/</sup>. Граничное условие, накладываемое на  $\mathcal{N}$ -частичную функцию распределения  $\rho(x^{\mathcal{N}}; t)$ , имеет вид

$$\int_{-\infty}^t dt' e^{\epsilon t'} e^{it' \mathcal{L}(\omega)} \left[ \rho(x^{\omega}; t') - \prod_{j=1}^{\omega} e^{-1} f_1(x_j; t') \right] = 0, \quad (I)$$

где через  $\mathcal{L}(\omega)$  обозначен оператор Лиувилля для группы из  $\mathcal{N}$  молекул и через  $x^{\omega}$  - совокупность фазовых координат  $\{x_j\} = \{\vec{z}_j, \vec{p}_j\}$ . Величина  $\epsilon \rightarrow +0$  после выполнения термодинамического предельного перехода  $\mathcal{N} \rightarrow \infty; V \rightarrow \infty, n = \mathcal{N}/V = \text{const}$ . Такой порядок предельных переходов позволяет обойти трудность, связанную с теоремой Пуанкаре о возвратах. В § I гл. I показывается, что, в отличие от боголюбовского граничного условия, формула (I) приводит к немарковской зависимости  $\rho(x^{\omega}; t)$  от времени через  $f_1(x; t)$ . Затем граничное условие (I) вводится в уравнение Лиувилля с помощью бесконечно малого источника<sup>/9, 10/</sup>, снимающего вырождение этого уравнения относительно инверсии времени:

$$\frac{\partial \rho(x^{\omega}; t)}{\partial t} + i \mathcal{L}(\omega) \rho(x^{\omega}; t) = -\epsilon \left[ \rho(x^{\omega}; t) - \prod_{j=1}^{\omega} e^{-1} f_1(x_j; t) \right]. \quad (2)$$

В § 2 гл. I из уравнения (2) выводится цепочка уравнений для приведенных функций распределения

$$\frac{\partial f_s(x^s; t)}{\partial t} + i \mathcal{L}(s) f_s(x^s; t) + \int dx_{s+1} \sum_{j=1}^s i \mathcal{L}'_{j, s+1} f_{s+1}(x^{s+1}; t) = -\epsilon \left[ f_s(x^s; t) - \prod_{j=1}^s f_1(x_j; t) \right], \quad 1 \leq s < \infty,$$

$$\mathcal{L}(s) = \sum_{j=1}^s \mathcal{L}_j^0 + \sum_{j < k} \mathcal{L}'_{j, k}, \quad \mathcal{L}_j^0 = -i \frac{\vec{p}_j}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{z}_j},$$

$$\mathcal{L}'_{j, k} = i \frac{\partial \Phi(\vec{z}_j - \vec{z}_k)}{\partial \vec{z}_j} \cdot \left( \frac{\partial}{\partial \vec{p}_j} - \frac{\partial}{\partial \vec{p}_k} \right) \quad (3)$$

и показывается, что если ограничиться построением марковских решений цепочки (3) и предположить аналитическую зависимость функций  $f_s(x^s; t)$  от плотности, то граничное условие, включенное в (3), становится эквивалентным боголюбовскому граничному условию и приводит к его теории<sup>/1/</sup>.

Вторая глава посвящена дальнейшим исследованиям уравнений (2) и (3), позволяющим, с одной стороны, очень просто построить интеграл столкновений в любом порядке по плотности и, с другой стороны, установить связь между теорией<sup>/1/</sup> и методом основного кинетического уравнения<sup>/8/</sup>. В этой главе вводится групповое разложение функций распределения, на основе которого строится регулярная теория возмущений по малому параметру - плотности. Чрезвычайная простота этого подхода обусловлена тем, что вместо системы функциональных уравнений для корреляционных функций получается система алгебраических уравнений. В результате формального решения этой системы интеграл столкновений вычислен с точностью до третьего порядка по плотности.

В § 2 гл. II показано, что замкнутое кинетическое уравнение для одночастичной функции распределения можно получить и в тех случаях, когда в системе отсутствуют малые параметры<sup>/17/</sup>. В частности, для пространственно-однородной системы из уравнения (2) без дополнительных предположений выводится обобщенное кинетическое уравнение

$$\partial f_1(\vec{p}_1; t) / \partial t =$$

$$= \int_{-\infty}^0 dt e^{\varepsilon t} \int d\vec{p}_2 \dots d\vec{p}_r \int \frac{(d\vec{z})^r}{V^r} i k'(\omega) e^{i\tau k(\omega)} [i k'(\omega) + \frac{\partial}{\partial \tau}] \prod_{j=1}^r f_j(\vec{p}_j; t + \tau). \quad (4)$$

Это уравнение исследуется с помощью диаграммного метода<sup>/5/</sup>. Развивается процедура исключения производной по времени из правой части (4) и выводится обобщенное кинетическое уравнение с регуляризованным ядром<sup>/18, 19/</sup>

$$\frac{\partial f_1(\vec{p}_1; t)}{\partial t} = \int_{-\infty}^0 dt e^{\varepsilon \tau} \int d\vec{p}_2 \dots d\vec{p}_r \langle \langle 0^w | i k'(\omega) e^{i\tau k(\omega)} i k'(\omega) | 0^w \rangle \rangle \prod_{j=1}^r f_j(\vec{p}_j; t + \tau). \quad (5)$$

Здесь

$$\langle 0^w | (\dots) | 0^w \rangle = \int (\dots) (d\vec{z})^w / V^w,$$

а вторая пара угловых скобок означает, что при разложении оператора эволюции в ряд теории возмущений следует учитывать лишь неприводимые диаграммы. В § 3 исследуется связь диаграммного метода с методом проекционных операторов<sup>/20, 21/</sup> и доказывается важное соотношение

$$\langle 0^w | i k'(\omega) \exp\{i\tau [L^0(\omega) + (1 - P_w)L'(\omega)]\} i k'(\omega) | 0^w \rangle = \langle \langle 0^w | i k'(\omega) \exp\{i\tau L(\omega)\} i k'(\omega) | 0^w \rangle \rangle,$$

позволяющее дать интерпретацию так называемого неприводимого оператора эволюции, содержащего в экспоненте оператор проектирования  $P_w(\dots) = \int (\dots) (d\vec{z})^w / V^w$ . В § 4 гл. II содержится такая модификация метода функциональных разложений<sup>/1/</sup>, которая позволяет легко получить псевдомарковскую форму основного кинетического уравнения. Отсюда следует важный вывод: если интересоваться только

псевдомарковскими решениями уравнения Лиувилля (т.е. разложениями немарковских решений по запаздыванию), то метод<sup>/1/</sup> в интерпретации<sup>/22/</sup> и метод основного кинетического уравнения<sup>/5-8/</sup> будут взаимно эквивалентны.

В гл. III развивается простой диаграммный метод построения решений цепочки уравнений (3). Его достоинством является использование всего лишь двух типов вершин, наглядное определение сильной связности (неприводимости) и пригодность для описания пространственно-неоднородных систем, находящихся во внешних полях. В § 2 выводится обобщенное кинетическое уравнение

$$\frac{df_1(x_1; t)}{dt} + i k_1^0 f_1(x_1; t) + \int dx_2 i k_{12}' f_1(x_1; t) f_1(x_2; t) = J(x_1; t), \quad (6)$$

интеграл столкновений которого имеет вид<sup>/23/</sup>

$$J(x_1; t) = \sum_{s=2}^{\infty} \int_{-\infty}^0 dt e^{\varepsilon \tau} \langle \langle 1; i k' e^{i\tau L} i k' \prod_{j=1}^s f_j(x_j; t + \tau) \rangle \rangle. \quad (7)$$

В интеграле столкновений ведется суммирование по числу частиц, участвующих в процессах рассеяния, и  $s$ -й член интеграла столкновений содержит все сильно связанные  $s$ -частичные диаграммы, имеющие слева одну свободную линию. Вклад  $s$ -го члена пропорционален  $n^{s-1}$ . В качестве простого приложения диаграммного метода в § 3 рассматривается вывод немарковских кинетических уравнений Фоккера-Планка, Больцмана и Чо-Уленбека для пространственно-неоднородных систем.

Гл. IV посвящена выводу ренормализованных кинетических уравнений, интегралы столкновений которых учитывают влияние "среды" на движение выделенной пары молекул<sup>/24/</sup>. Перенормировка осуществляется на основе диаграммной техники, развитой в гл. III. Сущест-

венным моментом является выбор класса тех диаграмм, которые следует отсуммировать. Интуитивно ясно, что если речь идет, например, о перенормировке фоккер-планковского интеграла столкновений, то следует учитывать взаимодействие выделенных частиц с молекулами "среды" именно в приближении Фоккера-Планка. Другими словами, перенормировка должна строиться так, чтобы фоккер-планковский (или больцмановский) оператор столкновений перенормировал сам себя. Другой принцип состоит в том, что ренормализованные парные корреляционные функции в состоянии статистического равновесия должны совпадать с корреляционными функциями обычных уравнений Фоккера-Планка или Больцмана. Это условие означает, что при перенормировке учитываются только неравновесные эффекты "трения" о "среду" и что вклад всех дополнительно суммируемых диаграмм в состоянии равновесия должен обращаться в нуль. При этих ограничениях в §§ 2-4 гл. IV выводится кинетическое уравнение

$$\frac{\partial f_1(\vec{p}_1; t)}{\partial t} = \int_{-\infty}^0 d\tau e^{c\tau} \int dx_2 iL'_{12} U_{t+\tau}(x_1, x_2; \tau) iL'_{12} \prod_{j=1}^2 f_j(\vec{p}_j; t+\tau), \quad (8)$$

где  $U_{\xi}(x_1, x_2; \tau)$  - ренормализованный оператор эволюции. Для системы слабо взаимодействующих частиц он имеет вид

$$U_{\xi}(x_1, x_2; \tau) = \exp\{\tau [iL'_{12} - \mathcal{D}_{\xi}(\vec{p}_1, \vec{p}_2)]\}, \quad (9)$$

где

$$\mathcal{D}_{\xi}(\vec{p}_1, \vec{p}_2) = \int dx_3 \delta_{12} iL'_{13} [\eta + iL'_{13}]^{-1} iL'_{13} \delta_{13} f_1(\vec{p}_3; t),$$

$$\eta \rightarrow +0, \quad \delta_{ab} \psi(x_a, x_b) = \psi(x_a, x_b) + \psi(x_b, x_a) \quad (10)$$

- динамический массовый оператор, учитывающий взаимодействие со "средой" в приближении Фоккера-Планка. Для разреженного газа в

формулу (9) вместо  $\mathcal{D}_{\xi}(\vec{p}_1, \vec{p}_2)$  следует подставить динамический массовый оператор

$$\mathcal{M}_{\xi}(\vec{p}_1, \vec{p}_2) = \int dx_3 \delta_{12} iL'_{13} [\eta + iL'_{13}]^{-1} iL'_{13} \delta_{13} f_1(\vec{p}_3; t), \quad (II)$$

учитывающий взаимодействие молекул 1 и 2 со "средой" в приближении Больцмана.

В гл. IV дается обобщение формул (9) и (II) на случай пространственно-неоднородных газов. Доказывается, что максвелловское (или квазимакселловское) распределение обращает ренормализованные интегралы столкновений в нуль. Оператор эволюции (9) исследуется вблизи состояния равновесия и показывается, что учет эффектов динамического трения существенно улучшает сходимость интеграла по времени в (8). Строятся ренормализованные парные корреляционные функции и осуществляется самосогласованная перенормировка, при которой "одеванию" подвергаются все частицы "среды". Результаты гл. IV позволяют преодолеть часть трудностей, обнаруженных в теориях /I,5/ работами /II-13/.

Гл. V посвящена построению квазиравновесных ансамблей для неравновесных систем /19/. На основе методов неравновесной статистической термодинамики /9/ в этой главе показывается, что если состояние газа определяется только одночастичной функцией распределения, то для энтропии получается известная формула Больцмана. В § 2 исследуется связь антипричинной формулировки граничного условия ослабления корреляций с производством энтропии и на примере разреженного газа показывается, что отбор опережающих решений уравнения Лиувилля приводит к убыванию энтропии со временем. В § 3 строится квазиравновесный ансамбль для неидеального газа и

выводится формула для энтропии с учетом парных корреляций<sup>/19/</sup>

$$S_{\text{корр}} = - (1/2) \int dx_1 dx_2 f_2(x_1 x_2; t) \ln \left[ \frac{f_2(x_1 x_2; t)}{f_1(x_1; t) f_1(x_2; t)} \right].$$

(На основе иных соображений эта формула была получена также в работе<sup>/25/</sup>). В § 4 квазиравновесное распределение используется для формулировки граничного условия к цепочке уравнений ББГКИ. Для трехчастичной квазиравновесной функции распределения получается обобщенное суперпозиционное приближение

$$f_3^{(q)}(x_1 x_2 x_3; t) = \prod_{j < k}^3 f_2(x_j x_k; t) / \prod_{\ell=1}^3 f_1(x_\ell; t),$$

на основе которого можно построить кинетическое уравнение для парной функции распределения, пригодное для описания достаточно плотных газов.

В Заключении перечислены результаты, полученные в диссертации. Основные из них состоят в следующем: дано обобщение метода функциональных разложений<sup>/1/</sup>, позволяющее построить псевдомарковскую форму основного кинетического уравнения; разработан простой диаграммный метод решения цепочки уравнений ББГКИ; последовательно получены ренормализованные кинетические уравнения; найден вид энтропии неравновесного неидеального газа.

Отдельные результаты диссертации докладывались на III и IV Рабочих совещаниях по статистической физике (Киев, 1971; Львов, 1972) и на Международной конференции по математическим проблемам квантовой теории поля и квантовой статистики (Москва, 1972). Основные результаты диссертации опубликованы в статьях<sup>/16-19, 22-24/</sup>.

Литература:

1. Н.И. Боголюбов. Проблемы динамической теории в статистической физике, М. - Л., Гостехиздат, 1946.
2. К.П. Гуров. Основания кинетической теории, М., Наука, 1966.
3. Ю.Л. Климонтович. Статистическая теория неравновесных процессов в плазме, М., изд-во МГУ, 1964.
4. С.В. Пелетминский, А.А. Яценко. ЖЭТФ, 53, 1327 (1967).
5. И.Пригожин. Неравновесная статистическая механика, М., Мир, 1964.
6. Балеску Р. Статистическая механика заряженных частиц, М., Мир, 1967.
7. С.Фудзита. Введение в неравновесную квантовую статистическую механику, М., Мир, 1969.
8. I. Prigogine, P. Resibois. *Physica*, 27, 629 (1961).
9. Д.Н. Зубарев. Неравновесная статистическая термодинамика, М., Наука, 1971.
10. Д.Н. Зубарев, В.П. Калашников. ТМФ, 3, 126 (1970).
11. J. Weinstock. *Phys. Rev.*, 132, 454 (1963); A140, 460 (1963).
12. J.R. Dorfman, E.G.D. Cohen. *J. Math. Phys.*, 8, 282 (1967).
13. R. Goldman, E.A. Frieman. *J. Math. Phys.*, 8, 1410 (1967).
14. Ю.Л. Климонтович. ТМФ, 9, 109 (1971).
15. Ю.А. Церковников. ТМФ, 8, 272 (1971).
16. Д.Н. Зубарев, М.Ю. Новиков. ТМФ, 13, 406 (1972).
17. Д.Н. Зубарев, М.Ю. Новиков. *Phys. Lett.*, A36, 343 (1971).
18. М.Ю. Новиков. Материалы III Рабочего совещания по статистической физике, часть II, Киев, Наукова думка, 1972.
19. Д.Н. Зубарев, М.Ю. Новиков. *Fortschritte der Physik*, 21, 703 (1973).



20. R.Zwanzig. J. Chem. Phys., 33, 1338 (1960).
21. Д.Н. Зубарев, В.П. Калашников. Physica, 56, 345 (1971).
22. М.Ю. Новиков. ТМФ, 16, 394 (1973).
23. Д.Н. Зубарев, М.Ю. Новиков. ТМФ, 18, 78 (1974).
24. Д.Н. Зубарев, М.Ю. Новиков. ТМФ, 19, 237 (1974).
25. Ю.Л. Климонтович. ЖЭТФ, 63, 150 (1972).

Рукопись поступила в издательский отдел  
27 августа 1974 г.