ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Р17 - 11948

Г.М.Гавриленко, В.К.Федянин

О ПОЛУЧЕНИИ УРАВНЕНИЯ ТИПА ФОККЕРА-ПЛАНКА ДЛЯ СИСТЕМЫ, СЛАБО ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩЕЙ С ТЕРМОСТАТОМ

1978

P17 - 11948

Г.М.Гавриленко, В.К.Федянин

О ПОЛУЧЕНИИ УРАВНЕНИЯ ТИПА ФОККЕРА-ПЛАНКА ДЛЯ СИСТЕМЫ, СЛАБО ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩЕЙ С ТЕРМОСТАТОМ

Направлено в *Physica A*

В работе[I] был предложен формализм для получения эволюционных уравнений типа Фоккера-Планка для малой подсистемы (например, одной частицы), находящейся в контакте с термостатом (большой системой). Как и в[I], малая система обозначается, как S-система, большая, - как Σ-система. При этом получающиеся уравнения зависят от вида начальных условий, накладываемых на функцию распределения всей системы в момент времени $t=0$. Целью настоящей работы является исследование эволюции малых подсистем, находящихся в контакте с термостатом для широкого класса начальных условий. Для этого мы воспользуемся формализмом проекционных операторов[2]. При таком подходе вид уравнений зависит от определения проекционного оператора.

I. Кратко изложим схему получения эволюционных уравнений при помощи формализма проекционных операторов.

Предполагается, что:

А. Динамика $(S+\Sigma)$-системы задается гамильтонианом вида

$$H = H_o + H_\Sigma + H_{int} ;$$

$$H_o = \frac{\vec{P}^2}{2M} ; \quad H_\Sigma = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} + \sum_{i<j}^{N} \varphi(|\vec{z}_i - \vec{z}_j|) ; \quad H_{int} = \sum_{i=1}^{N} U(|\vec{R} - \vec{z}_i|), \tag{I}$$

где $\vec{R}, \vec{P}, M$ - координата, импульс и масса частицы (S-система); $\vec{z}_i, \vec{p}_i, m$ - соответствующие величины частиц термостата (Σ-система); $\varphi(|\vec{z}|)$ - потенциальная функция взаимодействия частиц термостата между собой; $U(|\vec{R}-\vec{z}|)$ - потенциал взаимодействия частицы с термостатом (в дальнейшем его будем считать пропорциональным малой величине, а пока - произвольным; для общей схемы получения уравнений это неважно); N - число частиц термостата.

Б. $(S+\Sigma)$-система описывается функцией распределения $\mathcal{D}_t(S,\Sigma)$, эволюция во времени которой определяется уравнением Лиувилля:

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{D}_t(S,\Sigma) = \Lambda \mathcal{D}_t(S,\Sigma)\,; \tag{2}$$

где $S=(\vec{R},\vec{V})\,;\quad \Sigma = (\dots \vec{r}_i,\vec{v}_i\dots)\,;\quad i=1,2,\dots,N\,;$

$\Lambda = \Lambda_0 + \Lambda_\Sigma + \Lambda_{int}$ – оператор Лиувилля $(S+\Sigma)$-системы;

$$\Lambda_0 = -\vec{V}\frac{\vec{\partial}}{\partial R}\,;\quad \Lambda_\Sigma = -\sum_{i=1}^{N}\vec{v}_i\frac{\vec{\partial}}{\partial r_i} + \sum_{i<j}\frac{\vec{\partial}}{\partial r_i}\varphi(|\vec{r}_i-\vec{r}_j|)\frac{1}{m}\left(\frac{\vec{\partial}}{\partial r_i}-\frac{\vec{\partial}}{\partial r_j}\right);$$

$$\Lambda_{int} = \sum_{i=1}^{N}\frac{\vec{\partial}}{\partial R}U(|\vec{R}-\vec{r}_i|)\left(\frac{1}{M}\frac{\vec{\partial}}{\partial V}-\frac{1}{m}\frac{\vec{\partial}}{\partial v_i}\right).$$

Введем некоторую функцию $P_0(S,\Sigma)$ переменных S,Σ и определим следующие операторы:

$$\hat{P}_0 = \int d\Sigma\dots\quad ; \tag{3}$$

$$\hat{P} = P_0(S,\Sigma)\cdot\int d\Sigma\dots \tag{4}$$

При действии оператора $\hat{P}_0$ на $\mathcal{D}_t(S,\Sigma)$ получается функция, зависящая только от переменных S и t, которая и будет описывать состояние подсистемы в момент времени t. Получим замкнутое уравнение относительно $f_t(S)$, используя проекционные операторы (3), (4) и уравнение (2). Введем функцию $\Delta_t(S,\Sigma)$ согласно равенству

$$\Delta_t(S,\Sigma) = (1-\hat{P})\mathcal{D}_t(S,\Sigma)\quad . \tag{5}$$

Отметим некоторые свойства оператора $\hat{P}$.

i) Потребовав, чтобы $\hat{P}$ являлся проекционным оператором $\hat{P}^2 = P$, получаем из (3), (4)

$$\hat{P}_0 \hat{P}(S,\Sigma) = 1 .$$

Далее имеем очевидные равенства

ii) $(1-\hat{P})\hat{P} = 0;$

iii) $\hat{P}\Lambda_\Sigma = 0;$

iv) $\hat{P}\Delta_t(S,\Sigma) = 0.$

Начальные условия зададим следующим уравнением:

$$\Delta_t(S,\Sigma)\Big|_{t=0} = 0 , \tag{6}$$

что эквивалентно соотношению

$$\mathcal{D}_t(S,\Sigma)\Big|_{t=0} = P_0(S,\Sigma) f_t(S)\Big|_{t=0} . \tag{7}$$

Перейдем теперь к получению уравнения для функции $f_t(S)$. С этой целью подействуем на уравнение (2) оператором $\hat{P}_0$ слева. Учитывая определения $f_t(S)$ и Δ_t, получим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f_t(S) = \Lambda_0 f_t(S) + \int d\Sigma\, \Lambda_{int}\, \Delta_t(S\cdot\Sigma) + \\ + \int d\Sigma\, \Lambda_{int}\, P_0(S,\Sigma)\cdot f_t(S). \end{aligned} \tag{8}$$

Затем подействуем на (2) слева оператором $1-\hat{P}$. Это приводит к следующему уравнению для $\Delta_t(S,\Sigma)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\Delta_t(S,\Sigma) = (1-\hat{P})(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)\left[\Delta_t(S,\Sigma) + P_0(S,\Sigma)\, f_t(S)\right] \\ + (1-\hat{P})\Lambda_{int}\left[\Delta_t(S,\Sigma) + P_0(S,\Sigma)\, f_t(S)\right] . \end{aligned} \tag{9}$$

Формальное решение (9) можно записать в виде

$$\Delta_t = \int\limits_0^t e^{T\left[(1-P)(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma+\Lambda_{int})\right]} \cdot \Big\{(1-\hat{P})(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)\cdot P_0(S,\Sigma)\cdot f_z(S) + (1-\hat{P})\Lambda_{int} P_0(S,\Sigma)\, f_z(S)\Big\}\, dz\ ; \tag{IO}$$

$$T = t - z\ .$$

Подставляя (IO) в (8), получаем замкнутое уравнение относительно $f_t(S)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} f_t(S) = -\vec{v}\frac{\partial}{\partial \vec{R}} f_t(S) + \int d\Sigma\, \Lambda_{int} \int\limits_0^t e^{T\left[(1-\hat{P})\cdot(\Lambda_0+\Lambda_{int}+\Lambda_\Sigma)\right]} \cdot \Big\{(1-\hat{P})(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)\cdot P_0(S,\Sigma)\, f_z(S) + \tag{II}$$

$$(1-\hat{P})\Lambda_{int} P_0(S,\Sigma)\, f_z(S)\Big\}\, dz + \int d\Sigma\, \Lambda_{int} P_0(S,\Sigma)\, f_t(S)\ .$$

Оператор $\int d\Sigma\, \Lambda_{int} P_0(S,\Sigma)$ можно интерпретировать, как действие некоторого эффективного поля, а оставшуюся часть оператора в правой части уравнения (II) - как "интеграл столкновений". Задача выбора начальных условий при этом в данной схеме свелась к конкретизации $P_0(S,\Sigma)$. Давая различные определения функции $P_0(S,\Sigma)$, приходим к той или иной реализации (II) для различных начальных условий. В работе[I] были получены и исследованы уравнения для $f_t(S)$ при следующей конкретизации $P_0(S,\Sigma)$:

$$P_0(S,\Sigma) = \mathcal{D}_0(\Sigma),$$

где $\mathcal{D}_0(\Sigma)$ - равновесное распределение Гиббса для термостата и $\mathcal{P}_0(S,\Sigma) = \mathcal{D}_0(S,\Sigma)$ *) – равновесное распределение Гиббса для системы термостат и частица.

2. Будем считать теперь, что функция $U(|\vec{R}-\vec{z}_i|)$ пропорциональна некоторому малому параметру ε, и все вычисления будем вести с таким расчетом, чтобы в получившемся уравнении для $f_t(S)$ остались только члены порядка ε^2 и ниже. Остальными членами разложения мы пренебрегаем.

Введем следующие величины:

$$\mathcal{D}_0(S,\Sigma) = \frac{1}{Q}\cdot e^{-\beta H(S,\Sigma)}; \tag{I2}$$

$$Q = \int d\Sigma\, dS\, e^{-\beta H(S,\Sigma)}; \tag{I3}$$

$\beta = \frac{1}{\Theta} = \frac{1}{kT}$; k – постоянная Больцмана ;

$$f_0(S) = \int d\Sigma\, \mathcal{D}_0(S,\Sigma); \tag{I4}$$

$$Z_1 = V\cdot\int d\vec{v}\, e^{-\frac{M\vec{v}^2}{2\Theta}}; \quad Z_2 = \int d\Sigma\, e^{-\beta H_\Sigma}. \tag{I5}$$

Определим $\mathcal{P}_0(S,\Sigma)$ в виде

$$\mathcal{P}_0(S,\Sigma) = \frac{\mathcal{D}_0(S,\Sigma)}{f_0(S)}, \tag{I6}$$

---

*) Заметим, что оператор $\hat{P}$, соответствующий такому определению $\hat{P}_0(S,\Sigma)$, не является проекционным. В этом смысле схема получения уравнений, развитая в /I/ и предлагаемая здесь, не эквивалентны.

что задает проекционный оператор и определяет класс начальных условий. Нетрудно видеть, что все свойства $i)-iv)$ для (I6) выполнены. Далее необходимо получить выражение для проекционного оператора с точностью до ε^2.

Покажем справедливость следующих равенств:

$$Q = Z_1 \cdot Z_2 \left\{ 1 - \beta \int d\Sigma\, dS \sum_{i=1}^{N} U(|\vec{R} - \vec{z}_i|) \frac{e^{-\beta(H_0 + H_\Sigma)}}{Z_1 \cdot Z_2} \right\} + o(\varepsilon^2); \tag{I7}$$

$$\mathcal{D}_0(S,\Sigma) = \frac{e^{-\frac{M\vec{U}^2}{2\theta}} e^{-\beta H_\Sigma}}{Z_1 \cdot Z_2} \left\{ 1 - \beta \sum_{i=1}^{N} U(|\vec{R} - \vec{z}_i|) + \right. \tag{I8}$$

$$\left. + \beta \int d\Sigma\, dS \cdot \sum_{i=1}^{N} U(|\vec{R} - \vec{z}_i|) \frac{1}{Z_1 Z_2} e^{-\beta(H_0 + H_\Sigma)} \right\} + o(\varepsilon^2);$$

$$f_0(S) = \frac{1}{Z_1} e^{-\frac{M\vec{U}^2}{2\theta}} \left\{ 1 - \beta \langle U_{int} \rangle_\Sigma + \beta \langle U_{int} \rangle_{S+\Sigma} \right\} + o(\varepsilon^2); \tag{I9}$$

$$P_0(S,\Sigma) = \frac{1}{Z_2} e^{-\beta H_\Sigma} \left\{ 1 - \beta U_{int} + \beta \langle U_{int} \rangle_\Sigma \right\} + o(\varepsilon^2); \tag{20}$$

$$\hat{P}(\Lambda_0 + \Lambda_\Sigma) \Delta_t(S,\Sigma) = 0; \tag{21}$$

$$(1 - \hat{P})(\Lambda_0 + \Lambda_\Sigma) P_0(S,\Sigma) f_t(S) =$$

$$= \beta \frac{1}{Z_2} e^{-\beta H_\Sigma} (\Lambda_0, \langle U_{int} \rangle_\Sigma - U_{int}) f_t(S) + \beta \frac{1}{Z_2} e^{-\beta H_\Sigma} \cdot \tag{22}$$

$$\sum_{i=1}^{N} \vec{v}_i \frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{z}_i} U_{int} f_t(S) + o(\varepsilon^2);$$

$$(1 - \hat{P}) \Lambda_{int} \Delta_t(S,\Sigma) = o(\varepsilon^2); \tag{23}$$

$$(1-\hat{P})\Lambda_{int} P_0(S,\Sigma) f_t(S) = \Lambda_{int} \frac{e^{-\beta H_\Sigma}}{Z_2} f_t(S) - \frac{e^{-\beta H_\Sigma}}{Z_2} \cdot \langle \Lambda_{int} \rangle_\Sigma f_t(S) + o(\varepsilon^2). \tag{24}$$

Здесь использованы обозначения:

$$U_{int} = \sum_{i=1}^{N} U(|\vec{R}-\vec{z}_i|);$$

$$\langle \dots \rangle_\Sigma = \int d\Sigma \frac{e^{-\beta H_\Sigma}}{Z_2} \dots;$$

$$\langle \dots \rangle_{S+\Sigma} = \frac{1}{Z_1} \int dS \langle \dots \rangle_\Sigma .$$

Скобки в выражении (22) означают, что оператор Λ_0 действует только на функцию, стоящую в них.

Равенства (I7)-(I9) доказываются простым разложением соответствующих экспонент по малому параметру; (20) - следует из определения (I6) и (I7)-(I9); (2I) следует из свойства iii) оператора $\hat{P}$ и следующего равенства:

$$\hat{P}\Lambda_0 \Delta_t = P_0(S,\Sigma)\Lambda_0 P_0(S,\Sigma)^{-1} \cdot \hat{P}(1-\hat{P}) \mathcal{D}_t(S,\Sigma) = 0 .$$

(22) получаем из следующей цепочки равенств:

$$\begin{aligned}(1-\hat{P})(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma) P_0(S,\Sigma) f_t(S) &= (\Lambda_0+\Lambda_\Sigma) P_0(S,\Sigma) f_t(S) \\ - \hat{P}(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma) P_0(S,\Sigma) f_t(S) &= (\Lambda_0, P_0(S,\Sigma)) f_t(S) + \\ P_0(S,\Sigma)\Lambda_0 f_t(S) + \Big[-\sum_{i=1}^{N} \vec{v}_i \frac{\partial}{\partial \vec{z}_i} &+ \sum_{i<j}^{N} \frac{\partial}{\partial \vec{z}_i} \varphi(|\vec{z}_i-\vec{z}_j|) \cdot \\ \frac{1}{m}\Big(\frac{\partial}{\partial \vec{v}_i} - \frac{\partial}{\partial \vec{v}_j}\Big)\Big] \frac{e^{-\beta H_\Sigma}}{Z_2} &\big(1+\beta \langle U_{int} \rangle_\Sigma - \beta U_{int}\big) f_t(S) - \\ - P_0(S,\Sigma)\Lambda_0 f_t(S) &+ o(\varepsilon^2).\end{aligned} \tag{22'}$$

Учтем, что

$$\text{I)}\quad \Lambda_\Sigma e^{-\beta H_\Sigma} \Phi(S,\Sigma) = e^{-\beta H_\Sigma} \Lambda_\Sigma \Phi(S,\Sigma)$$

для любой $\Phi(S,\Sigma)$; (25)

2) $\langle \Lambda_{int} \rangle_\Sigma$ не зависит от переменных термостата;

3) $(\Lambda_0, P_0(S,\Sigma)) = \beta\left(\Lambda_0, \langle U_{int} \rangle_\Sigma - U_{int}\right) \cdot \dfrac{e^{-\beta H_\Sigma}}{Z_2} + o(\varepsilon^2)$;

4) $\langle U_{int} \rangle_\Sigma$, U_{int} не зависят от $\vec{v}_i$.

Если в (22') подставить (25), получим (22). Равенство (23) следует из того, что $\Delta_t(S,\Sigma) \sim \varepsilon$ (это видно из уравнения (10)). Соотношение (24) проверяется непосредственно:

$$(1-\hat{P})\Lambda_{int} P_0(S,\Sigma) f_t(S) = \Lambda_{int} \frac{e^{-\beta H_\Sigma}}{Z_2}(1+o(\varepsilon)) - \frac{e^{-\beta H_\Sigma}}{Z_2}(1+o(\varepsilon)) \int d\Sigma\, \Lambda_{int} \frac{e^{-\beta H_\Sigma}}{Z_2}(1+o(\varepsilon^2)).$$

Собирая (17)-(24) в (9), имеем:

$$\frac{\partial}{\partial t}\Delta_t(S,\Sigma) = (\Lambda_0 + \Lambda_\Sigma)\Delta_t(S,\Sigma) + \beta \frac{e^{-\beta H_\Sigma}}{Z_2}(\Lambda_0, \langle U_{int} \rangle_\Sigma - U_{int}) \cdot f_t(S) + \beta \frac{e^{-\beta H_\Sigma}}{Z_2} \sum_{i=1}^{N} \vec{v}_i \frac{\partial}{\partial \vec{z}_i} U_{int} f_t(S) + \Lambda_{int} \frac{e^{-\beta H_\Sigma}}{Z_2} \cdot f_t(S) - \frac{e^{-\beta H_\Sigma}}{Z_2} \langle \Lambda_{int} \rangle_\Sigma \cdot f_t(S) + o(\varepsilon^2). \tag{26}$$

Откуда

$$\Delta_t(S,\Sigma) = \int_0^t e^{\tau(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)} \Big\{ \beta \frac{e^{-\beta H_\Sigma}}{Z_2} (\Lambda_0, \langle U_{int}\rangle_\Sigma - U_{int}) f_z(S)$$

$$+ \beta \frac{e^{-\beta H_\Sigma}}{Z_2} \sum_{i=1}^N \vec{v}_i \frac{\vec{\partial}}{\partial z_i} U_{int} \cdot f_z(S) + \Lambda_{int} \frac{e^{-\beta H_\Sigma}}{Z_2} f_z(S) \tag{27}$$

$$- \frac{e^{-\beta H_\Sigma}}{Z_2} \langle \Lambda_{int} \rangle_\Sigma f_z(S) \Big\} dz \quad + \ o(\varepsilon).$$

Окончательно эволюционное уравнение в указанном приближении имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} f_t(S) = -\vec{v} \frac{\vec{\partial}}{\partial R} f_t(S) + \langle \Lambda_{int} \rangle_\Sigma f_t(S) +$$

$$+ \beta \Big\langle \big(\langle U_{int}\rangle_\Sigma - U_{int} \big) \Lambda_{int} \Big\rangle_\Sigma f_t(S) + \int_0^t \Big\{ \langle \Lambda_{int} \cdot \tag{28}$$

$$e^{\tau(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)} \Lambda_{int} \rangle_\Sigma - \langle \Lambda_{int} \rangle_\Sigma e^{-\tau\Lambda_0} \langle \Lambda_{int} \rangle_\Sigma \Big\} f_z(S) dz$$

$$+ \beta \int_0^t \langle \Lambda_{int} e^{\tau(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)} (\Lambda_0, \langle U_{int}\rangle_\Sigma - U_{int}) \rangle_\Sigma f_z(S) dz$$

$$+ \beta \int_0^t \langle \Lambda_{int} e^{\tau(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)} \Big(\sum_{i=1}^N \vec{v}_i \frac{\vec{\partial}}{\partial z_i}, U_{int} \Big) \rangle_\Sigma f_z(S) dz .$$

3. Рассмотрим в качестве термостата среду, обладающую трансляционной инвариантностью. В этом случае из правил отбора на корреляционные функции следует $\langle \Lambda_{int} \rangle_\Sigma = 0$ и уравнение (28) упрощается:

$$\frac{\partial}{\partial t} f_t(S) = -\vec{v}\frac{\vec{\partial}}{\partial R} f_t(S) - \beta \langle \Lambda_{int} U_{int} \rangle_\Sigma f_t(S) + \int_0^t d\tau \Big\{ \langle \Lambda_{int} e^{\tau(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)} \Lambda_{int} \rangle_\Sigma - \beta \langle \Lambda_{int} e^{\tau(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)} (\Lambda_0, U_{int}) \rangle_\Sigma + \beta \langle \Lambda_{int} e^{\tau(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)} \Big(\sum_{i=1}^{N} \vec{v}_i \frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{r}_i} U_{int} \Big) \rangle_\Sigma \Big\} \cdot f_\tau(S). \tag{29}$$

В (29) входят неизвестные корреляционные функции вида

$$\langle U_{int} \Lambda_{int} \rangle_\Sigma ; \quad \langle \Lambda_{int} e^{\tau(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)} (\Lambda_0, U_{int}) \rangle_\Sigma ; \quad \langle \Lambda_{int} e^{\tau(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)} \Big(\sum_{i=1}^{N} \vec{v}_i \frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{r}_i} U_{int} \Big) \rangle_\Sigma . \tag{30}$$

Сведем их к вычислению функции $R_k(\tau)$,

$$R_k(\tau) = \langle e^{-i\vec{k}\vec{r}_1} e^{\Lambda_\Sigma \tau} \cdot \sum_{j=1}^{N} e^{i\vec{k}\vec{r}_j} \rangle_\Sigma ; \qquad U_k(\tau) = N R_k(\tau) = \langle \sum_{i=1}^{N} e^{-i\vec{k}\vec{r}_i} e^{\Lambda_\Sigma \tau} \sum_{j=1}^{N} e^{i\vec{k}\vec{r}_j} \rangle_\Sigma , \tag{31}$$

через которую выражаются средние вида

$$\langle \Lambda_{int} e^{\tau(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)} \Lambda_{int} \rangle_\Sigma$$

и способ вычисления которой развит в /1/.

Согласно[I]

$$\langle \Lambda_{int} e^{T(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)} \Lambda_{int} \rangle_\Sigma = \frac{1}{M}\frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{v}} \vec{Q}(T);$$

$$\vec{Q}(T) = \frac{1}{V^2}\sum_{k} \vec{k}\, \nu^2(k)\, e^{i\vec{k}\vec{R}} e^{T\Lambda_0} e^{-i\vec{k}\vec{R}} \cdot \tag{32}$$

$$\left\{ U_k(T)\frac{1}{M}\left(\vec{k}\cdot\frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{v}}\right) + \frac{i}{\theta}\frac{\partial}{\partial T} U_k(T) \right\} .$$

Удобно ввести фурье-преобразование функции U_{int} , тогда

$$U_{int} = \frac{1}{V}\sum_{k\,i} \nu(k)\, e^{i\vec{k}(\vec{R}-\vec{r}_i)};$$

$$\Lambda_{int} = \frac{1}{V}\sum_{k\,i} i\vec{k}\,\nu(k)\, e^{i\vec{k}(\vec{R}-\vec{r}_i)}\left(\frac{1}{M}\frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{v}} - \frac{1}{m}\frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{v}_i}\right) . \tag{33}$$

а) $$\langle \Lambda_{int} U_{int} \rangle_\Sigma = \frac{1}{V^2}\sum_{k,k'} i\nu(k)\nu(k')\vec{k}\,\frac{1}{M}\frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{v}} \langle \sum_{i=1}^{N} e^{-i\vec{k}\vec{r}_i} \cdot \tag{34}$$

$$\sum_{j=1}^{N} e^{i\vec{k}\vec{r}_j} \rangle_\Sigma = \frac{i}{MV^2}\sum_{k} \nu^2(k)\, U_k(0)\,\vec{k}\,\frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{v}} .$$

В (34) использован тот факт, что в силу трансляционной инвариантности системы $\vec{k} = -\vec{k}'$, а также то, что $\langle \frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{v}_i} (\ldots) \rangle_\Sigma = 0$.

Если перейти в (34) от суммирования к интегрированию по $\vec{k}$ и принять во внимание, что

$$U_k(0) = U_{-k}(0),$$

то легко заметить, что $\langle \Lambda_{int}\, U_{int} \rangle_\Sigma = 0$.

Под интегралом будет стоять антисимметричная функция, которая интегрируется в "симметричных" пределах.

$$< \Lambda_{int} U_{int} >_\Sigma = 0 \; . \tag{35}$$

б) $$\langle \Lambda_{int} e^{T(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)} (\Lambda_0, U_{int}) \rangle_\Sigma = -\frac{1}{M}\frac{\vec\partial}{\partial \upsilon} \Big\{ \frac{1}{V^2} \sum_k{}' \vec k \cdot \nu^2(k) e^{i\vec k\vec R} e^{T\Lambda_0} e^{-i\vec k\vec R} U_k(T)(\vec\upsilon \vec k)\Big\}. \tag{36}$$

Действительно,

$$\langle \Lambda_{int} e^{T(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)} (\Lambda_0, U_{int}) \rangle_\Sigma = \Big\langle \frac{1}{V}\sum_{i,k}{}' i\vec k \nu(k) e^{i\vec k(\vec R-\vec r_i)} \Big(\frac{1}{M}\frac{\vec\partial}{\partial\upsilon} - \frac{1}{m}\frac{\vec\partial}{\partial\upsilon_i}\Big) e^{\Lambda_0 T} e^{\Lambda_\Sigma T} \Big(-\vec\upsilon\frac{\vec\partial}{\partial R}\Big) \frac{1}{V}\sum_{jk'}{}' \nu(k') \cdot$$

$$e^{i\vec k'(\vec R-\vec r_j)} \Big\rangle_\Sigma = \frac{1}{V^2}\sum_{k,k'} i\vec k \nu(k)\nu(k') e^{i\vec k\vec R} \frac{1}{M}\frac{\vec\partial}{\partial\upsilon} e^{T\Lambda_0} \cdot$$

$$e^{i\vec k'\vec R} \cdot \Big\langle \sum_{i=1}^{N}{}' e^{-i\vec k\vec r_i} e^{T\Lambda_\Sigma} \sum_{j=1}^{N}{}' e^{-ik'\vec r_j} \Big\rangle_\Sigma (-\vec\upsilon\cdot i\vec k'),$$

откуда и следует (36).

в)

Наконец, $$\langle \Lambda_{int} e^{T(\Lambda_0+\Lambda_\Sigma)} \Big(\sum_{i=1}^{N}{}' \vec\upsilon_i \frac{\vec\partial}{\partial r_i} U_{int}\Big) \rangle_\Sigma =$$

$$= -\frac{1}{M}\frac{\vec\partial}{\partial\upsilon}\Big\{ \frac{i}{V^2}\sum_k{}' \vec k \nu^2(k) e^{i\vec k\vec R} e^{T\Lambda_0} e^{-i\vec k\vec R} \frac{\partial}{\partial T} U_k(T)\Big\} \; . \tag{37}$$

Выражение (37) устанавливается с учетом того, что

$$e^{\Lambda_\Sigma T} f(\ldots \vec{z}_i \ldots) = f(\ldots \vec{z}_i(-T) \ldots), \quad -\vec{v} = \frac{\partial}{\partial T} \vec{z}(-T) \tag{38}$$

совершенно аналогичным образом.

Видно, что (37) взаимно уничтожается со вторым членом в выражении (32). Переходя везде в выражениях от суммирования по K к интегрированию и учитывая (32), (35), (36), (37), окончательно имеем для эволюционного уравнения:

$$\frac{\partial}{\partial t} f_t(S) = -\vec{v}\frac{\partial}{\partial \vec{R}} f_t(S) + \frac{1}{M}\frac{\partial}{\partial \vec{v}} \vec{J}(t, f(S));$$

$$\vec{J}(t, f(S)) = \int_0^t d\tau \frac{n}{(2\pi)^3 \Theta} \int d\vec{k}\, \vec{k}\, \nu^2(k)\, e^{i\vec{k}\vec{R}} e^{T\Lambda_0} \tag{39}$$

$$e^{-i\vec{k}\vec{R}} B_k(T) \cdot \left(\vec{k}, \vec{v} + \frac{\Theta}{M}\frac{\partial}{\partial \vec{v}}\right) f_\tau(S); \quad n = \frac{N}{V}.$$

Как и в /I/, мы приходим к немарковскому фоккер-планковскому уравнению. Непосредственно из структуры интеграла столкновений видно, что в пространственно-однородном случае $\Phi_0(v)$ функция распределения Максвелла является решением этого уравнения. В общем же случае она обращает в нуль интеграл столкновений.

При больших t уравнение (39) можно приближенно представить в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} f_t(S) = -\vec{v}\frac{\partial}{\partial \vec{R}} f_t(S) + \frac{n}{(2\pi)^3 M}\frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot$$

$$\int d\vec{k}\, \vec{k}\, \nu^2(k) \int_0^\infty B_k(T) e^{i\vec{k}\vec{v}T} dT \left(\vec{k}, \frac{\vec{v}}{\Theta} + \frac{1}{M}\frac{\partial}{\partial \vec{v}}\right) f_t(S). \tag{40}$$

Это уравнение марковского типа. Уравнение (40) получено в [I] в пределе систем, близких к пространственно-однородным и больших t, при выборе начальных условий в виде

$$\mathcal{D}_t(S,\Sigma)\Big|_{t=0} = f_t(S)\,\mathcal{D}_0(\Sigma)\Big|_{t=0}. \tag{4I}$$

Предложенная схема получения эволюционных уравнений при указанном выборе проекционного оператора приводит к уравнению, описывающему стохастический процесс, по своему характеру близкий к броуновскому блужданию частицы. Однако этот процесс не является марковским. Факт, что функция распределения Максвелла обращает в нуль интеграл столкновений в (39), хорошо согласуется с фактом малости возмущения со стороны термостата.

4.Интеграл столкновений (39) в случае трансляционно-инвариантной среды можно выразить через коррелятивные функции Ван-Хова[3]:

$$\vec{J}(t,f(S)) = \frac{n}{(2\pi)^3\Theta}\int_0^t d\tau \int d\vec{k}\,\vec{k}\,\nu^2(k)\, e^{i\vec{k}\vec{v}\tau} R_k(\tau)\cdot$$

$$e^{\tau\Lambda_0}\left(\vec{k},\vec{v}+\frac{\Theta}{M}\frac{\partial}{\partial\vec{v}}\right) f_\tau(S).$$

С этой целью удобно ввести фурье- трансформанту $\vec{J}^{(e)}$ оператор-функции, описывающей интеграл столкновений. По определению $\vec{J}^{(e)}$ действует только на $f_t^{(e)}$ - фурье-компоненту функции $f_t(S)$.

$$\vec{J}^{(e)}(t) = \frac{n}{(2\pi)^3\Theta}\int_0^t d\tau \int d\vec{k}\cdot\vec{k}\cdot\nu^2(k); \tag{42}$$

$$e^{i\vec{v}(\vec{k}+\vec{e})T} R_k(T)\left(\vec{k},\vec{v}+\frac{\theta}{M}\frac{\partial}{\partial \vec{v}}\right).$$

Перепишем (42) в тензорных обозначениях:

$$J_i^{(e)}(t)=\frac{n}{(2\pi)^3\theta}\int_0^t d\tau\int d\vec{k}\, k_i \nu^2(k)\, k_j\, e^{i(\vec{v},\vec{k}+\vec{e})T}\cdot \tag{43}$$

$$R_k(T)\left(v_j+\frac{\theta}{M}\frac{\partial}{\partial v_j}\right); \qquad R_k(T)=\frac{1}{N}\left\langle\sum_{i=1}^{N} e^{-i\vec{k}\vec{r}_i}\cdot\right.$$

$$\left.\sum_{j=1}^{N} e^{i\vec{k}\vec{r}(-T)}\right\rangle_\Sigma = \frac{1}{N}\left\langle\sum_{i=1}^{N} e^{-i\vec{k}\vec{r}_i}\cdot\right.$$

$$\left.\sum_{j=1}^{N} e^{i\vec{k}\vec{r}_j(T)}\right\rangle_\Sigma^* = \Gamma_k(T)+\mathcal{D}_k(T).$$

Как обычно, по повторяющимся индексам предполагается суммирование от I до 3. В (43) использованы следующие обозначения:

$$\Gamma_k(T)=\frac{1}{N}\left\langle\sum_{i=1}^{N} e^{-i\vec{k}\vec{r}_i}\, e^{i\vec{k}\vec{r}_i(-T)}\right\rangle_\Sigma -$$

– функция, комплексно-сопряженная фурье-трансформанте автокоррелятивной функции Ван-Хова;

$$\mathcal{D}_k(T)=\left\langle\frac{1}{N}\sum_{i\neq j} e^{-i\vec{k}\vec{r}_i}\, e^{i\vec{k}\vec{r}_j(-T)}\right\rangle_\Sigma -$$

– функция, комплексно-сопряженная парной коррелятивной функции Ван-Хова.

В приближении Виньярда[4]

$$\mathcal{D}_k(T)=\tilde{g}(k)\Gamma(k)+\delta(k)g_0. \tag{44}$$

Здесь g_0 есть $\lim\limits_{r\to\infty} g(r)$; $g(r)$ - обычная радиальная функция распределения, описывающая распределение частицы около некоторой выделенной частицы, помещенной в начале системы координат;

$$\tilde{g}(k) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\vec{r}\,[g(r) - g_0]\, e^{i\vec{k}\vec{r}} -$$

- фурье-трансформанта "корреляционной части" радиальной функции распределения. Для функции $\Gamma_k(T)$ существует хорошо известное представление в виде[5]

$$\Gamma_k(T) = e^{-k^2\gamma(T)}, \tag{45}$$

где $\gamma(T)$ - ширинная функция, выражающаяся через корреляторы типа $\langle v_{i_1}(t)\cdots v_{i_m}(t_{i_m})\rangle$, i_m =2,3,.. Расчет данной функции обсуждается в работе[5]. Заметим, что в обозначениях работы[5] в классическом пределе $\gamma(T) = \rho(T)$.

Используя представления (43), (44), имеем для $J_i^{(e)}(t)$:

$$J_i^{(e)}(t) = \frac{n}{(2\pi)^3\theta}\int_0^t d\tau \int d\vec{k}\, k_i k_j\, \nu^2(k)\, e^{i(\vec{v},\vec{e}+\vec{k})T}\cdot$$
$$\Gamma_k(T)(1+\tilde{g}(k))\Big(v_j + \frac{\theta}{M}\frac{\partial}{\partial v_j}\Big) + \frac{n}{(2\pi)^3\theta}\int_0^t d\tau\int d\vec{k}\cdot \tag{46}$$
$$k_j k_i\, \nu^2(k)\, g_0\,\delta(\vec{k})\, e^{i(\vec{v},\vec{k}+\vec{e})T}\Big(v_j + \frac{\theta}{M}\frac{\partial}{\partial v_j}\Big).$$

Для взаимодействий, убывающих на бесконечности достаточно быстро и регулярных в нуле, так что $\nu(0)\neq\infty$, второй член оператор-функции в интеграл столкновений вклада не даст. В рамках этого предположения имеем:

$$J_i^{(e)}(t) = \frac{n}{(2\pi)^3\theta} \int_0^t d\tau \int d\vec{k}\, k_i k_j \nu(k)^2 e^{i(\vec{v},\vec{k}+\vec{e})T} \tag{47}$$

$$e^{(-\vec{k}^2\gamma(T))} \cdot [1+\tilde{g}(k)]\left(v_j + \frac{\theta}{M}\frac{\partial}{\partial v_j}\right).$$

Рассмотрим марковский предел интеграла столкновений, отвечающий поведению $t \to \infty$. Для этого сделаем в (47) замену переменных $t-\tau = T$; $t = t$ и учтем, что $\gamma(t)$ для системы типа жидкости или газа при $t \to \infty$ - быстро растущая, положительно определенная функция. Так что интеграл в (47) можно брать от 0 до ∞, а функция $f_{t-\tau}^{(e)}(v)$ при этом может быть представлена в виде

$$f_{t-\tau}^{(e)}(v) = f_t^{(e)}(v) + o(\tau).$$

Ограничимся здесь нулевым членом данного разложения. Окончательно в марковском приближении уравнение эволюции для фурье-компоненты функции имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} f_t^{(e)}(v) = -i(\vec{v}\vec{e}) f_t^{(e)}(v) + \frac{1}{(2\pi)^3 M\theta}\frac{\partial}{\partial v_i}\int d\vec{k} \cdot \tag{48}$$

$$k_j k_i \nu(k)(1+\tilde{g}(k)) \int_0^\infty dT\, e^{-\vec{k}^2\gamma(T) + i(\vec{v},\vec{k}+\vec{e})T} \cdot \left(v_j + \frac{\theta}{M}\frac{\partial}{\partial v_j}\right) \cdot f_t^{(e)}(v).$$

В случае диффузионной модели [6]

$$\gamma(T) = C + 2\mathcal{D}T, \tag{49}$$

где $\mathcal{D}$ - коэффициент самодиффузии вещества термостата. C - некоторая константа, определяемая особенностями механизма диффузии. В этом случае интегрирование по T легко выполнить и интеграл столкновений можно представить в виде

$$J_i^e(t)=\frac{n}{(2\pi)^3\theta}\int d\vec{k}\,k_i k_j\,\nu(k)(1+\tilde{g}(k))\,e^{-\vec{k}^2 C}\cdot \tag{50}$$

$$\frac{1}{2D\vec{k}^2-i(\vec{k}+\vec{e},\vec{v})}\left(v_j+\frac{\theta}{M}\frac{\partial}{\partial v_j}\right).$$

Введем тензор $\xi_{ij}=d(v)\Delta_{ij}+C_{ij}(v)$; $Sp\,C_{ij}=0$;

$$d(v)=\frac{n}{(2\pi)^3\theta\,3}\int d\vec{k}\,\vec{k}^2\nu^2(k)(1+\tilde{g}(k))\,e^{-\vec{k}^2 C}\frac{1}{2D\vec{k}^2-i(\vec{k}+\vec{e},\vec{v})}; \tag{51}$$

$$C_{ij}(v)=\frac{n}{(2\pi)^3\theta}\int d\vec{k}\left(k_i k_j-\frac{1}{3}\Delta_{ij}k^2\right)(1+\tilde{g}(k))\,e^{-\vec{k}^2 C}\frac{\nu^2(k)}{2D\vec{k}^2-i(\vec{k}+\vec{e},\vec{v})}.$$

Уравнение эволюции одночастичной подсистемы в среде, описываемой в диффузионном приближении, в марковском пределе имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t}f_t^{(e)}(v)=-i(\vec{v}\vec{e})f_t^{(e)}(v)+\frac{1}{M}\frac{\partial}{\partial\vec{v}}\left[d(v)\left(\vec{v}+\frac{\theta}{M}\frac{\partial}{\partial\vec{v}}\right)\right]\cdot$$

$$f_t^{e}(v)+\frac{1}{M}\frac{\partial}{\partial v_i}\left[C_{ij}(v)\left(v_j+\frac{\theta}{M}\frac{\partial}{\partial v_j}\right)\right]f_t^{(e)}(v).$$

Мы признательны академику Н.Н.Боголюбову за обсуждение деталей работы, ценные советы и замечания.

Литература

1. N.N.Bogolubov. Preprint JINR E17-10514, Dubna (1977).
2. J.Lebowitz, P.Resibois. Phys.Rev., 139A, 1101 (1965).
3. Van Hove L. Phys.Rev., v.95, p. 249 (1954).
   Physica, v.24, 404 (1958).
4. C.H.Vineyard. J.Phys.Chem.Solids., v.3, 121 (1957).
5. A.Rahman, K.Singwi, A.Sjölander. Phys.Rev., v.126, 986 (1962).
6. G.Vinegard. Phys.Rev., 110, 999 (1958).

Рукопись поступила в издательский отдел
II октября 1978 года.