

ІНСТИТУТ  
ФІЗИКИ  
КОНДЕНСОВАНИХ  
СИСТЕМ

ICMP-96-23U

М.В.Токарчук, І.П.Омелян, О.Є.Кобрин

ДО ТЕОРІЇ КІНЕТИЧНИХ РІВНЯНЬ СИСТЕМ  
ВЗАЄМОДІЮЧИХ ЧАСТИНОК В МЕТОДІ  
НЕРІВНОВАЖНОГО СТАТИСТИЧНОГО ОПЕРАТОРА  
Д.М.ЗУБАРЄВА

УДК: 532; 533; 533.9:530.182; 536.75; 536-12.01.

PACS: 05.60.+w, 05.70.Ln, 05.20.Dd, 52.25.Dg, 52.25.Fi

До теорії кінетичних рівнянь систем взаємодіючих частинок в методі нерівноважного статистичного оператора Д.М.Зубарєва

М.В.Токарчук, І.П.Омелян, О.Є.Кобрин

**Анотація.** Розглядається розв'язки ланцюжка рівнянь БГКІ для нерівноважних функцій розподілу з модифікованими граничними умовами, які враховують як нерівноважність одночастинкової функції розподілу, так і локальні закони збереження. Запропоновані модифіковані групові розклади. В поляризаційному наближенні отримані узагальнене кінетичне рівняння для твердих сфер та узагальнене кінетичне рівняння Боголюбова-Ленарда-Балеску для густого електронного газу.

**On the theory of kinetic equations of systems of interacting particles using D.N.Zubarev's nonequilibrium statistical operator method**

M.V.Tokarchuk, I.P.Omelyan, A.E.Kobryn

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

Подається до Журнал фізичних досліджень  
Submitted to Journal of Statistical Physics

## 1. Вступ

У монографії М.М.Боголюбова [1] був розроблений послідовний метод побудови кінетичних рівнянь, оснований на ланцюжку рівнянь для  $s$ -частинкових функцій розподілу і граничній умові послаблення кореляцій. Хоч надалі з'явилось велике число зовнішньо відмінних між собою підходів [2–14] до виведення кінетичних рівнянь, всі ці підходи 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).

В кінетичній теорії класичних газів можна виділити дві принципові проблеми. Перша проблема пов'язана з неаналітичною залежністю інтегралу зіткнень від густини. Із-за цього навіть у випадку газу малої густини для розрахунку поправок до коефіцієнтів переносу потребується часткове пересумування ланцюжка ББГКІ [15,16]. Друга проблема – це побудова кінетичних рівнянь для газів великої густини. У цьому випадку в інтегралі зіткнень не можна обмежитись декількома членами розкладу за газовим параметром і аналіз ланцюжка ББГКІ 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 потенціалами взаємодії.

Першою теорією у цьому напрямку є напівфеноменологічна теорія густих газів Енскога SET (standard Enskog theory) [17,18]. В її основі лежать положення схожі до тих, що використовуються при виведенні кінетичного рівняння Больцмана. Не дивлячись на досить грубі припущення щодо інтегралу зіткнень у кінетичному рівнянні для одночастинкової функції розподілу твердих сфер, теорія Енскога дуже добре описує ряд властивостей реальних густих газів [19,20].

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

З точки зору 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 роботі [22] було вказано спосіб побудови функціоналу ентропії теорії Енскога. Намагаю-

чись подолати вказані недоліки, в роботі [23] була запропонована модифікація теорії Енскога і на основі діаграмного методу отримано кінетичне рівняння для одночастинкової функції розподілу – RET (revized Enskog theory). Суть цієї модифікації полягає в заміні постійного множника (значення бінарної рівноважної функції розподілу на контакті двох твердих сфер) в інтегралі зіткнення SET на бінарну квазірівноважну функцію розподілу, що є функціоналом від нерівноважної концентрації частинок  $n(\mathbf{r};t)$ . Для кінетичного рівняння RET П.Резибуа довів  $H$ -теорему [24,25]. На основі ревізованої теорії Енскога RET була запропонована також кінетична теорія КМФТ (kinetic mean field theory) [26,27] для системи класичних частинок, взаємодія яких описується сумою потенціалів твердих сфер і деякого далекосяжного потенціалу, що враховується в наближенні середнього поля. Основний висновок теорії КМФТ полягає в тому, що гладка частина потенціалу міжчастинкової взаємодії не дає явного вкладу в коефіцієнти переносу [26,28]. Цей результат, звичайно, зумовлений прийнятими в теорії наближеннями. Існує лише опосередкований вклад через парну квазірівноважну функцію розподілу, залежність якої від температури визначається гладкою частиною потенціалу. Необхідно додати, що в роботі [29] запропонована модифікація потенціалу прямокутної ями, яка полягає в тому, що потенціал між твердосферною та притягувальною стінками вважається не постійним, а рівним деякому “хвосту”. Для такого потенціалу отримано кінетичне рівняння, в якому гладка частина враховується в наближенні середнього поля.

У 1985 році була запропонована ревізована теорія DRS – RDRS [30], кінетичне рівняння якої задовільняє  $H$ -теорему.

На цьому етапі досліджень в кінетичній теорії густих газів та рідин фундаментально виявилась робота Д.М.Зубарева та В.Г.Морозова [31], у якій було подано формулювання нової граничної умови до ланцюжка рівнянь ББГКІ, 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 своєю структурою нагадує кінетичне рівняння Енскога. Схожі ідеї незалежно були висунуті авторами роботи [30] при отриманні кінетичного рівняння, коли взаємодія між частинками моделюється потенціалом прямокутної ями. Необхідно відзначити, що у роботах В.Я.Рудяка [32–34] була запропонована інша модифікація підходу М.М.Боголюбова [1], яка дозволяє отримати кінетичне рівняння типу Енскога, і зроблена спроба поширити його

на системи з “м’яким” потенціалом взаємодії між частинками.

Модифікація граничних умов послаблення кореляцій до ланцюжка рівнянь М.М.Боголюбова, що була запропонована в роботі Д.Н.Зубарева і В.Г.Морозова [31], набула дальшого розвитку в роботах [35–44]. Важливим досягненням розвинутого в цих роботах підходу є те, що сформульована модифікована гранична умова, яка враховує локальні закони збереження до ланцюжка ББГКІ, дала можливість вперше в роботах [38,39] послідовно вивести кінетичне рівняння ревізованої теорії Енскога [23–25] для системи твердих сфер. На основі даного результату було отримано кінетичне рівняння для системи з модельним багатосходинковим міжчастинковим потенціалом взаємодії [36,37,40] (зокрема, для цього рівняння доведено  $H$ -теорему в роботі [37]), а також кінетичне рівняння Енскога-Ландау [38,39,41] для системи заряджених твердих сфер. Для отриманих в такому підході нових кінетичних рівнянь для модельних систем були знайдені нормальні розв’язки методом Чепмена-Енскога, з допомогою яких проведені числові розрахунки коефіцієнтів переносу об’ємної, зсувної в’язкостей і теплопровідності для систем, які моделюють аргон [36,40], однократно іонізований аргон [42,44]. Важливо відзначити те, що кінетичне рівняння ревізованої теорії Енскога [23–25], кінетичне рівняння для модельної системи з багатосходинковим потенціалом взаємодії [36,37,40] та кінетичне рівняння Енскога-Ландау для системи заряджених твердих сфер [38,39,41] отримані з ланцюжка рівнянь ББГКІ з модифікованою граничною умовою в наближенні “парних” зіткнень. Очевидно, що дані рівняння мають свою область застосування і, зокрема, не можуть застосовуватись для опису систем, для яких характерні колективні ефекти, що зумовлені кулонівською, дипольною чи іншими далекосяжними силами взаємодії між частинками. Для опису колективних ефектів в системах частинок з далекосяжним характером взаємодії необхідні кінетичні рівняння у вищих наближеннях, ніж “парні” зіткнення. Прикладом такого рівняння є кінетичне рівняння Боголюбова-Ленарда-Балеску [45,46,14] для кулонівської плазми.

Для аналізу розв’язків ланцюжка рівнянь ББГКІ з модифікованою граничною умовою у вищих наближеннях за міжчастинковими кореляціями зручно застосувати концепцію групових розкладів [2–4,9,47]. Групові розклади застосовувались до ланцюжка рівнянь ББГКІ в багатьох роботах [2–4,8,9,11,13–16], зокрема, з граничною умовою, що відповідає умові послаблення кореляцій за М.М.Боголюбовим, в роботах Д.М.Зубарева і М.Ю.Новікова [9,47,48], в яких був розвинутий діаграмний метод побудови розв’яз-

ків ланцюжка рівнянь ББГКІ.

У другому розділі отримано ланцюжок рівнянь ББГКІ 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 ББГКІ, яке приводить до рівняння ревізованої теорії Енскога РЕТ [38,39], кінетичного рівняння для частинок з модельним багатосходинковим потенціалом взаємодії [37,40,55] та кінетичного рівняння Енскога-Ландау для системи заряджених твердих сфер [38,39,44], розглянуто у третьому розділі. У четвертому розділі запропоновані модифіковані групові розклади до ланцюжка рівнянь ББГКІ. В поляризаційному наближенні отримані узагальнене кінетичне рівняння для твердих сфер та узагальнене кінетичне рівняння Боголюбова-Ленарда-Балеску для густого електронного газу.

## 2. Рівняння Ліувіля та ланцюжок рівнянь ББГКІ з модифікованою граничною умовою

Розглянемо систему із  $N$  однакових класичних частинок, що знаходяться в об’ємі  $V$ , гамільтоніан якої має вигляд:

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

де  $\Phi(|\mathbf{r}_{lj}|)$  – енергія взаємодії двох частинок,  $\mathbf{p}_l$  – імпульс  $l$ -ої частинки,  $m$  – її маса,  $|\mathbf{r}_{lj}| = |\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j|$  – відстань між парою взаємодіючих частинок. Нерівноважний стан такої системи описується  $N$ -частинковою функцією розподілу  $\varrho(x_1, \dots, x_N; t) = \varrho(x^N; t)$ , що задовільняє рівняння Ліувіля:

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + iL_N \right) \varrho(x^N; t) = 0, \quad (2.2)$$

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

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

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

$$L(l, j) = i \frac{\partial}{\partial r_l} \Phi(|r_{lj}|) \left[ \frac{\partial}{\partial p_l} - \frac{\partial}{\partial p_j} \right].$$

Функція  $\varrho(x^N; t)$  є симетричною відносно перестановок  $x_l \rightleftharpoons x_j$  фазових змінних будь-якої пари частинок і задовільняє умову нормування:

$$\int d\Gamma_N \varrho(x^N; t) = 1, \quad (2.4)$$

$$d\Gamma_N = \frac{dx^N}{N!} = \frac{\{dx_1 \dots dx_N\}}{N!}, \quad dx_l = dr_l dp_l.$$

Для розв'язку рівняння Ліувіля (2.2) необхідно задати граничну умову. Гранична умова повинна бути такою, щоб розв'язок рівняння Ліувіля відповідав фізичному змісту розглядуваного стану системи. Використовуючи метод нерівноважного статистичного оператора Д.М.Зубарева [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 задовільняє початкову умову:

$$\varrho(x^N; t) \Big|_{t=t_0} = \varrho_q(x^N; t_0),$$

має вигляд:

$$\varrho(x^N; t) = e^{iL_N(t-t_0)} \varrho_q(x^N; t_0). \quad (2.5)$$

Будемо розглядати часи  $t > t_0$ , коли деталі початкового стану системи стають несуттєвими. Тоді, щоб позбутися залежності від  $t_0$ , усереднимо (2.5) по початкових моментах часу від  $t$  до  $t_0$  і виконаємо граничний перехід  $t_0 - t \rightarrow \infty$ , в результаті отримаємо [49,50]:

$$\varrho(x^N; t) = \varepsilon \int_{-\infty}^0 dt' e^{\varepsilon t'} e^{iL_N t'} \varrho_q(x^N; t+t'), \quad (2.6)$$

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

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + iL_N \right) \varrho(x^N; t) = -\varepsilon \left( \varrho(x^N; t) - \varrho_q(x^N; t) \right). \quad (2.7)$$

Джерело порушує симетрію рівняння Ліувіля відносно інверсії часу і відбирає загальні розв'язки, що відповідають скороченому опису нерівноважного стану системи. Допоміжна функція  $\varrho_q(x^N; t)$  є квазірівноважною функцією розподілу, що визначається з умови екстремуму інформаційної ентропії системи при збереженні умови нормування та додаткових умовах, що середні значення змінних скороченого опису є фіксованими. Вибір функції  $\varrho_q(x^N; t)$  у значній мірі залежить від розглядуваного нерівноважного стану системи. У випадку газів малої густини на інтервалах часу значно більших 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 даному випадку квазірівноважна функція розподілу  $\varrho_q(x^N; t)$  має вигляд [1,9]:

$$\varrho_q(x^N; t) = \prod_{j=1}^N \frac{f_1(x_j; t)}{e}. \quad (2.8)$$

Тоді рівняння Ліувіля з джерелом (2.7) з врахуванням (2.8) відповідає скороченому опису еволюції системи на кінетичній стадії, коли вважається, що єдиною повільною змінною в часі є одночастинкова функція розподілу. Однак, у системі завжди є додаткові величини, які повільно змінюються в часі: це величини, що локально зберігаються. У випадку однокомпонентної системи до них відносяться густини маси  $\rho(r; t)$ , імпульсу  $j(r; t)$  та повної енергії  $\mathcal{E}(r; t)$ . Дані величини на великих часах задовільняють узагальнені рівняння гідродинаміки, з якими, взагалі кажучи, необхідно узгодити кінетичне рівняння для  $f_1(x; t)$ . Для газів малої густини таке узгодження може бути, в принципі, проведене з необхідною точністю у кожному порядку за густиною. Для газів великої густини та рідин, коли малий параметр відсутній, час встановлення 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 складають основу гідродинамічного опису еволюції системи [49,50]. Локальні закони збереження накладають на кінетичні процеси деякі обмеження, причому їх роль особливо важлива при великих густинах, коли не можна нехтувати взаємодією виділеної групи частинок з усіма іншими частинками системи. Це вказує на тісний взаємозв'язок кінетики і гідродинаміки для густих газів та рідин. Тому при

отриманні кінетичних рівнянь для таких систем природньо 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  $f_1(x;t)$  у 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 фазові функції:

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

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

$$\hat{\mathcal{E}}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{p} \frac{p^2}{2m} \hat{n}_1(x) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}' d\mathbf{p} d\mathbf{p}' \Phi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{n}_2(x, x'),$$

де

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

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

– одно та двочастинкові мікроскопічні фазові густини. З формул (2.9) видно особливу роль потенціальної енергії взаємодії, так як 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 потенціальна частина енергії  $\mathcal{E}_{int}(\mathbf{r};t) = \langle \hat{\mathcal{E}}_{int}(\mathbf{r}) \rangle^t$  розраховується за допомогою двочастинкової функції розподілу  $f_2(x, x';t) = \langle \hat{n}_2(x, x') \rangle^t$ . Тут

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

– густина потенціальної енергії взаємодії, а  $\langle \dots \rangle^t$  означає засереднення з функцією  $\varrho(x^N;t)$ :

$$\langle \dots \rangle^t = \int d\Gamma_N \dots \varrho(x^N;t).$$

Звідси випливає, що якщо  $f_1(x;t)$  – одночастинкова функція розподілу вибрана у якості одного із параметрів скороченого опису, то

додатковим незалежним параметром може бути густина енергії взаємодії (2.11). Тоді з умови екстремуму функціоналу інформаційної ентропії

$$S_{inf} = - \int d\Gamma_N \varrho(x^N;t) \ln \varrho(x^N;t)$$

при фіксованих середніх значеннях

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_1(x) \rangle^t &= f_1(x;t), \\ \langle \hat{\mathcal{E}}_{int}(\mathbf{r}) \rangle^t &= \mathcal{E}_{int}(\mathbf{r};t) \end{aligned} \quad (2.12)$$

і збереженні умови нормування (2.4), знайдемо квазірівноважну функцію розподілу  $\varrho_q(x^N;t)$  [31,35]. Це еквівалентне знаходженню безумовного екстремуму функціоналу

$$\begin{aligned} L(\varrho) = - \int d\Gamma_N \varrho(x^N;t) \left\{ \ln \varrho(x^N;t) + \Phi(t) - 1 + \right. \\ \left. \int d\mathbf{r} \beta(\mathbf{r};t) \hat{\mathcal{E}}_{int}(\mathbf{r}) + \int dx a(x;t) \hat{n}_1(x) \right\}, \end{aligned}$$

де  $\Phi(t)$ ,  $\beta(\mathbf{r};t)$ ,  $a(x;t)$  – лагранжеві множники. Беручи варіацію  $\frac{\delta}{\delta \varrho} L(\varrho)$ , після нескладних перетворень знайдемо квазірівноважну функцію розподілу у наступному вигляді:

$$\begin{aligned} \varrho_q(x^N;t) = \\ \exp \left\{ -\Phi(t) - \int d\mathbf{r} \beta(\mathbf{r};t) \hat{\mathcal{E}}_{int}(\mathbf{r}) - \int dx a(x;t) \hat{n}_1(x) \right\}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

де

$$\begin{aligned} \Phi(t) = \\ \ln \int d\Gamma_N \exp \left\{ - \int d\mathbf{r} \beta(\mathbf{r};t) \hat{\mathcal{E}}_{int}(\mathbf{r}) - \int dx a(x;t) \hat{n}_1(x) \right\} \end{aligned} \quad (2.14)$$

– функціонал Масьє-Планка, який знаходиться з умови нормування:

$$\int d\Gamma_N \varrho_q(x^N;t) = 1. \quad (2.15)$$

Квазірівноважна функція розподілу  $\varrho_q(x^N;t)$  у вигляді (2.13) була отримана в роботі [31]. Для вияснення фізичного змісту параметрів  $\beta(\mathbf{r};t)$ ,  $a(x;t)$  квазірівноважну функцію розподілу (2.13) перепишемо в іншому вигляді:

$$\begin{aligned} \varrho_q(x^N;t) = \\ \exp \left\{ -\Phi(t) - \int d\mathbf{r} \beta(\mathbf{r};t) \hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r}) - \int dx a'(x;t) \hat{n}_1(x) \right\}, \end{aligned} \quad (2.16)$$

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]:

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

$\hat{n}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{p} \hat{n}_1(x)$  – густина числа частинок. Параметри  $\beta(\mathbf{r}; t)$ ,  $a'(x; t)$  у (2.16) визначаються із умов самоузгодження: рівності квазі-середніх величин  $\langle \hat{n}_1(x) \rangle_q^t$ ,  $\langle \hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r}) \rangle_q^t$  їх істинним середнім значенням  $\langle \hat{n}_1(x) \rangle^t$ ,  $\langle \hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r}) \rangle^t$ :

$$\langle \hat{n}_1(x) \rangle_q^t = \langle \hat{n}_1(x) \rangle^t = f_1(x; t), \quad (2.18.a)$$

$$\langle \hat{\mathcal{E}}'_1(\mathbf{r}) \rangle_q^t = \langle \hat{\mathcal{E}}'_1(\mathbf{r}) \rangle^t, \quad (2.18.b)$$

$$\langle \dots \rangle_q^t = \int d\Gamma_N \dots \varrho_q(x^N; t).$$

При таких перетвореннях параметр  $a'(x; t)$  зв'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 функціоналу Масьє-Планка

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

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

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

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

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

$$S(t) = - \langle \ln \varrho_q(x^N; t) \rangle_q^t = \Phi(t) + \int d\mathbf{r} \beta(\mathbf{r}; t) \langle \hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r}) \rangle_q^t + \int dx a'(x; t) \langle \hat{n}_1(x) \rangle_q^t,$$

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

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

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, знайдемо термодинамічні співвідношення:

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

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

Із структури виразу для ентропії (2.20) слідують 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]:

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

і якому відповідає квазірівноважна функція розподілу [43, 50]:

$$\begin{aligned} \varrho_q(x^N; t) = & \exp \left\{ -\Phi(t) - \int d\mathbf{r} \beta(\mathbf{r}; t) \left( \hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r}) - \mu(\mathbf{r}; t) \hat{n}(\mathbf{r}) \right) \right\}, \\ \Phi(t) = \ln \int d\Gamma_N \exp & \left\{ \int d\mathbf{r} \beta(\mathbf{r}; t) \left( \hat{\mathcal{E}}'(\mathbf{r}) - \mu(\mathbf{r}; t) \hat{n}(\mathbf{r}) \right) \right\} \end{aligned} \quad (2.23)$$

з відповідними умовами самоузгодження для визначення термодинамічних параметрів  $\beta(\mathbf{r}; t)$ ,  $\mu(\mathbf{r}; t)$  (локальне значення хімічного потенціалу):

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

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

$$\begin{aligned} \varrho_q(x^N; t) = & \exp \left\{ -\Phi(t) - \int d\mathbf{r} \beta(\mathbf{r}; t) \hat{\mathcal{E}}'_{kin}(\mathbf{r}) - \int dx a'(x; t) \hat{n}_1(x) \right\}, \end{aligned}$$

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

$$\varrho_q(x^N; t) = \exp \left\{ -\Phi(t) - \int dx a(x; t) \hat{n}_1(x) \right\}, \quad (2.24)$$

$$\Phi(t) = \ln \int d\Gamma_N \exp \left\{ - \int dx a(x;t) \hat{n}_1(x) \right\},$$

де

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

$\hat{\mathcal{E}}_{kin}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{p} \frac{p^2}{2m} \hat{n}_1(x)$  - густина кінетичної енергії. Тепер, визначаючи у (2.24) параметр  $a(x;t)$  з допомогою умови самоузгодження  $\langle \hat{n}(x) \rangle_q^t = \langle \hat{n}(x) \rangle^t$ , можна показати [35,43], що (2.24) для  $\varrho_q(x^N;t)$  переходить в розподіл (2.8), коли вважається, що єдиним параметром скороченого опису нерівноважного стану системи є одностинкова функція розподілу. Квазірівноважній функції розподілу (2.24), як відомо [50], відповідає больцманівська ентропія для розрідженого газу:

$$S_B(t) = - \int dx f_1(x;t) \ln \frac{f_1(x;t)}{e}. \quad (2.25)$$

В загальному випадку, коли кінетичні та гідродинамічні процеси розглядаються одночасно, квазірівноважну функцію розподілу (2.16) або (2.13) можна записати в іншому вигляді, більш зручному для порівняння з  $\varrho_q(x^N;t)$  (2.8) у звичайній схемі отримання кінетичних рівнянь [1,9], коли параметром скороченого опису вибирається тільки  $f_1(x;t)$ . Насамперед відзначимо, 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) таким чином:

$$\varrho_q(x^N;t) = \exp \{ -U_N(\mathbf{r}^N;t) \} \prod_{l=1}^N \exp \{ -a(x_l;t) \},$$

де

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

В  $\varrho_q(x^N;t)$  параметр  $a(x;t)$  може бути виключений за допомогою умови самоузгодження  $\langle \hat{n}(x) \rangle_q^t = \langle \hat{n}(x) \rangle^t = f_1(x;t)$ , в результаті отримаємо:

$$\varrho_q(x^N;t) = \exp \{ -U_N(\mathbf{r}^N;t) \} \prod_{l=1}^N \frac{f_1(x_l;t)}{u(\mathbf{r}_l;t)}, \quad (2.26)$$

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

$$u(\mathbf{r}_l;t) = \int \frac{d\mathbf{r}^{N-1}}{(N-1)!} \exp \{ -U_N(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{N-1};t) \} \prod_{i=2}^N \frac{n(\mathbf{r}_i;t)}{u(\mathbf{r}_i;t)}, \quad (2.27)$$

також тут  $n(\mathbf{r};t) = \langle \hat{n}(\mathbf{r}) \rangle^t = \int d\mathbf{p} f_1(x;t)$  - нерівноважна середня густина числа 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 покласти  $U_N(\mathbf{r};t) = 0$  у (2.26) і (2.27). Тоді із (2.27) знайдемо, що  $u = e$  і вираз (2.26), як і повинно бути, переходить у квазірівноважний розподіл (2.8). В загальному випадку  $u(\mathbf{r};t)$  є функціоналом від нерівноважної густини числа частинок  $\langle \hat{n}(\mathbf{r}) \rangle^t$  та  $\beta(\mathbf{r};t)$ , що є аналогом оберненої локальної температури. До цієї аналогії необхідно відноситись 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) може бути перетворений у наступний вигляд:

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

де виділено “потенціальний” та “кінетичний” вклади. Причому у випадку розріджених газів, коли вкладом потенціальної енергії взаємодії можна знехтувати й  $u(\mathbf{r};t) = e$ , то (2.28) переходить у больцманівську ентропію (2.25).

Таким чином, визначивши квазірівноважну функцію розподілу  $\varrho_q(x^N;t)$  (2.26) та ентропію  $S(t)$  (2.28) системи, коли параметрами скороченого опису нерівноважного стану є як нерівноважна одностинкова функція розподілу, так і середні значення густин числа частинок, імпульсу та енергії, що локально зберігаються, рівняння Ліувіля з джерелом (2.7) представимо у вигляді:

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

Далі на основі цього рівняння отримаємо ланцюжок рівнянь ББГ-КІ 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 проінтегруємо за змінними  $x^{N-1} = \{x_2, \dots, x_N\}$  обидві частини (2.29). Враховуючи (2.10.a) і (2.18.a), отримаємо:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + iL(1)\right) f_1(x_1; t) + \int dx_2 iL(1, 2) f_2(x_1, x_2; t) = 0. \quad (2.30)$$

Інтегруючи тепер (2.29) за змінними  $x^{N-2} = \{x_3, \dots, x_N\}$ , після нескладних перетворень прийдемо до 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:

$$\begin{aligned} &\left(\frac{\partial}{\partial t} + iL_2\right) f_2(x_1, x_2; t) + \\ &\int dx_3 (iL(1, 3) + iL(2, 3)) f_3(x_1, x_2, x_3; t) = \\ &-\varepsilon (f_2(x_1, x_2; t) - g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) f_1(x_1; t) f_1(x_2; t)). \end{aligned} \quad (2.31)$$

В цьому рівнянні і 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:

$$f_2(x_1, x_2; t) = \langle \hat{n}_2(x_1, x_2; t) \rangle^t = \int d\Gamma_{N-2} \varrho(x_1, x_2, x^{N-2}; t).$$

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

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

маємо наступне рівняння:

$$\begin{aligned} &\left(\frac{\partial}{\partial t} + iL_s\right) f_s(x^s; t) + \\ &\int dx_{s+1} \sum_{j=1}^s iL(j, s+1) f_{s+1}(x^{s+1}; t) = \end{aligned} \quad (2.32)$$

$$-\varepsilon \left( f_s(x^s; t) - g_s(\mathbf{r}_s; t) \prod_{j=1}^s f_1(x_j; t) \right),$$

де

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

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

$$f_s(\mathbf{r}^s; t) = \langle \hat{n}_s(\mathbf{r}^s) \rangle_{\text{q}}^t, \quad (2.34)$$

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

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

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

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

Таким чином врахування “повільних” гідродинамічних змінних (у даному випадку густини енергії взаємодії, яка є незалежною від  $f_1(x; t)$ ), приводить до модифікації граничних умов 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  $g_s(\mathbf{r}^s; t)$  їх 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 групою частинок з іншими частинками системи. Очевидно, що вплив такої взаємодії росте із збільшенням густини.

Відзначимо, що до ланцюжка рівнянь (2.30) – (2.32) необхідно додати рівняння для координатних квазірівноважних функцій



розподілу  $g_s(\mathbf{r}^s; t)$ , які є функціоналами нерівноважної густини числа частинок  $n(\mathbf{r}; t)$  та  $\beta(\mathbf{r}; t)$  – оберненої “локальної температури”. Зокрема, в роботі [38] було показано, що парна квазірівноважна функція розподілу  $g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t)$  зв’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 задовільняє рівняння Орнштейна-Церніке:

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

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 ББГКІ наявністю джерел в правих частинах рівнянь, починаючи з другого, і враховує як одночастинкові, так і колективні “гідродинамічні” ефекти.

В наступній частині роботи аналізується ланцюжок рівнянь ББГКІ (2.30) – (2.32) з модифікованими граничними умовами в наближенні “парних” зіткнень.

### 3. Наближення “парних” зіткнень. Модельні кінетичні рівняння

Розглянемо розв’язки ланцюжка рівнянь (2.30) – (2.32) в наближенні “парних” зіткнень. Суть цього наближення в наступному. 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 прийдемо до рівняння:

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + iL_2 + \varepsilon \right) f_2(x_1, x_2; t) = \varepsilon g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) f_1(x_1; t) f_1(x_2; t), \quad (3.1)$$

формальний розв’язок якого:

$$f_2(x_1, x_2; t) = \varepsilon \int_{-\infty}^0 d\tau e^{(\varepsilon + iL_2)\tau} g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t + \tau) f_1(x_1; t + \tau) f_1(x_2; t + \tau). \quad (3.2)$$

За теоремою Абеля [50–52] цей розв’язок можна записати у формі:

$$f_2(x_1, x_2; t) = \quad (3.3)$$

$$\lim_{\tau \rightarrow -\infty} e^{iL_2\tau} g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t + \tau) f_1(x_1; t + \tau) f_1(x_2; t + \tau).$$

Підставляючи вираз (3.3) у рівняння (2.30), приходимо до кінетичного рівняння в наближенні “парних” зіткнень:

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + iL(1) \right) f_1(x_1; t) = I_{coll}(x_1; t), \quad (3.4)$$

де

$$I_{coll}(x_1; t) = \int dx_2 iL(1, 2) \lim_{\tau \rightarrow -\infty} e^{iL_2\tau} g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t + \tau) \times f_1(x_1; t + \tau) f_1(x_2; t + \tau) \quad (3.5)$$

– інтеграл 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. Інтеграл зіткнень в наших роботах був запропонований для трьох модельних систем.

#### 3.1. Модель твердих сфер. Кінетичне рівняння ревізованої теорії Енскога RET [23,38,39]

Насамперед необхідно відзначити, що границя  $\tau \rightarrow -\infty$  в інтегралі зіткнень (3.5) є математично формальною. На фізичному рівні опису ця границя передбачає щоб  $|\tau| \gg \tau_0$ , де  $\tau_0$  – деякий характерний масштаб часу. В залежності від вибору  $\tau_0$  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  $\tau_{hydr}$  – характерного часу зміни гідродинамічних змінних. Приведена тут ситуація можлива в силу того, що для розріджених газів кінетична і гідродинамічна стадії еволюції сильно розсунуті на осі часу, тобто  $\tau_{coll} \ll \tau_f \ll \tau_{hydr}$ , де  $\tau_f$  – час вільного пробігу.

У густих газах та рідинах з реальним потенціалом 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 і гідродинамічна стадії являються тісно зв’язаними. Однак для спеціальних типів потенціалів (наприклад, твердих сфер) приведена класифікація часів не втрачає свого значення і при великих густинах.

Для системи частинок, взаємодія яких моделюється потенціалом твердих сфер

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

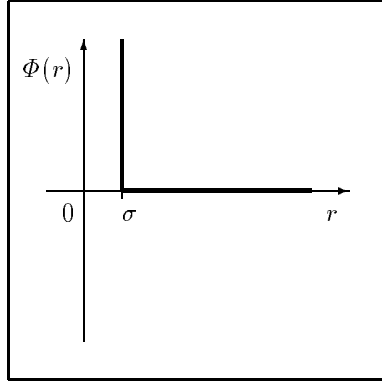


Рис. 1: Потенціал взаємодії твердих сфер.

( $\sigma$  – діаметр твердої сфери) область взаємодії  $\Delta r_0 \rightarrow +0$  (радіус взаємодії  $r_0 \rightarrow \sigma^+$ ) і час взаємодії  $\tau_0 \rightarrow +0$ , що зумовлено сингулярною природою потенціалу. На кінетичній стадії еволюції системи, яку ми розглядаємо, виконуються нерівності  $\tau_{coll} = \tau_0 \ll \Delta t \ll \tau_f \ll \tau_{hydr}$ , де  $\Delta t$  – “фізично нескінченно малий інтервал часу”. Тоді в силу того, що  $\tau_0 \rightarrow +0$ , границя  $\tau/\tau_0 \rightarrow -\infty$  в інтегралі зіткнень (3.5) зберігає свою форму навіть у випадку  $\tau \rightarrow -0$ , якщо тільки  $\tau_0$  – величина вищого порядку малості, ніж  $\tau$ :

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

У цьому випадку інтеграл зіткнень (3.5) для міжчастинкового потенціалу твердих сфер трансформується до вигляду

$$\begin{aligned} I^{hs}(x_1; t) &= - \lim_{\epsilon \rightarrow \infty} \int dx_2 iL^\epsilon(1, 2) \lim_{\tau \rightarrow -0} e^{iL_2^\epsilon \tau} \times \\ &g_2^\epsilon(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t + \tau) f_1(x_1; t + \tau) f_1(x_2; t + \tau), \end{aligned} \quad (3.7)$$

де

$$\begin{aligned} L_2^\epsilon &= L(1) + L(2) + L^\epsilon(1, 2), \\ L^\epsilon(1, 2) &= i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \Phi^\epsilon(|\mathbf{r}_{12}|) \left( \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} \right), \end{aligned}$$

$g_2^\epsilon(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t)$  – квазірівноважна парна функція розподілу частинок з потенціалом взаємодії  $\Phi^\epsilon(|\mathbf{r}_{12}|)$ . В роботах [38,39] строго математично, враховуючи специфіку системи твердих сфер ( $\Delta r_0 \rightarrow +0$ ,  $\tau_0 \rightarrow +0$ ), було показано перетворення  $I^{hs}(x_1; t)$  (3.7) до форми:

$$I^{hs}(x_1; t) = \int dx_2 \hat{T}(1, 2) g_2^{hs}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) f_1(x_1; t) f_1(x_2; t) \quad (3.8)$$

– інтегралу зіткнень ревізованої теорії Енскога [23–25], де

$$\begin{aligned} \hat{T}(1, 2) &= \sigma^2 \int d\hat{\mathbf{r}}_{12} \Theta(\hat{\mathbf{r}}_{12} \cdot \mathbf{g}) (\hat{\mathbf{r}}_{12} \cdot \mathbf{g}) \times \\ &\left\{ \delta(\mathbf{r}_{12} + \sigma^+ \hat{\mathbf{r}}_{12}) \hat{B}(\mathbf{r}_{12}) - \delta(\mathbf{r}_{12} - \sigma^+ \hat{\mathbf{r}}_{12}) \right\} \end{aligned} \quad (3.9)$$

– оператор зіткнення Енскога 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 швидкості,  $\mathbf{v}_i$  – вектор швидкості  $i$ -ої частинки,  $\Theta(x)$  – одинична функція Хевісайда,  $\hat{B}(\mathbf{r}_{12})$  – оператор зсуву швидкостей:  $\hat{B}(\mathbf{r}_{12}) \Psi(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = \Psi(\mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2)$ , причому

$$\begin{aligned} \mathbf{v}'_1 &= \mathbf{v}_1 + \hat{\mathbf{r}}_{12} (\hat{\mathbf{r}}_{12} \cdot \mathbf{v}), \\ \mathbf{v}'_2 &= \mathbf{v}_2 - \hat{\mathbf{r}}_{12} (\hat{\mathbf{r}}_{12} \cdot \mathbf{v}). \end{aligned}$$

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

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

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

$$u^{hs}(\mathbf{r}_l; t) = \int \frac{d\mathbf{r}^{N-1}}{(N-1)!} \prod_{j < k}^N \Theta_{jk} \prod_{l=2}^N \frac{n(\mathbf{r}_l; t)}{u^{hs}(\mathbf{r}_l; t)} = u^{hs}(\mathbf{r}_1 | n(\mathbf{r}; t)),$$

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

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

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

$$g_2^{hs}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) = g_2^{hs}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | n(\mathbf{r}; t)) = \Theta_{12} \left[ u^{hs}(\mathbf{r}_1; t) u^{hs}(\mathbf{r}_2; t) \right]^{-1} \int \frac{d\mathbf{r}^{N-2}}{(N-2)!} \prod_{j < k=3}^N \Theta_{jk} \prod_{l=3}^N \frac{n(\mathbf{r}_l; t)}{u^{hs}(\mathbf{r}_l; t)},$$

що входить в (3.8). В результаті інтеграл зіткнень (3.8) разом з (3.4) складають кінетичне рівняння теорії RET [23], для якого П.Резибуа довів  $H$ -теорему [24,25].

Таким чином, модифіковані граничні умови, сформульовані до ланцюжка рівнянь ББГКІ в наближенні “парних” зіткнень, без врахування запізнення в часі дають можливість послідовно отримати кінетичне рівняння ревізованої теорії Енскога для твердих сфер без додаткових феноменологічних припущень.

### 3.2. Кінетичне рівняння для системи частинок з модельним багатосходинковим потенціалом взаємодії

Ревізована теорія Енскога, що ґрунтується на кінетичному рівнянні (3.4) з (3.8), як і звичайна теорія Енскога (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 Енског запропонував замінити гідростатичний тиск системи твердих сфер термодинамічним тиском реальної системи. Беручи за основу дане припущення Ханлей та інші [18] розробили кінетичну теорію MET (Modified Enskog Theory), у якій діаметр твердих сфер визначається через другий віріальний коефіцієнт рівняння стану реальної системи і, таким чином, стає залежним від температури і густини. Використовуючи різні рівняння стану ВН [53], WCA [54] та інші отримуємо відповідні варіанти теорії MET.

В кінетичній теорії середнього поля КМФТ [26] поряд з потенціалом твердих сфер розглядається плавний притягувальний потенціал. В [27] вказується на необхідність заміни в цьому випадку

квазірівноважної парної функції розподілу твердих сфер на функцію розподілу з повним потенціалом взаємодії. Було показано [26,28], що плавна частина потенціалу взаємодії, що визначає температурну залежність, не дає явного вкладу в коефіцієнти переносу, а тільки опосередкований вклад через парну квазірівноважну функцію розподілу  $g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t)$ , і отже КМФТ не дає задовільного опису температурної залежності коефіцієнтів переносу. У цьому напрямку необхідно відзначити кінетичну теорію DRS (Davis, Rice, Sengers) для системи класичних частинок з міжчастинковим потенціалом у формі прямокутної ями та її нову версію, запропоновану в [30], кінетичне рівняння якої задовільняє  $H$ -теорему.

В роботах [36,37,55] із ланцюжка рівнянь ББГКІ з модифікованими граничними умовами в наближенні “парних” зіткнень (3.4), (3.5) було отримано кінетичне рівняння для системи частинок з потенціалом взаємодії у вигляді багатосходинкової функції, що складається з твердосферної частини, системи відштовхувальних та притягувальних стінок. Багатосходинкова модель потенціалу є узагальненням моделей потенціалу теорій SET (RET), також КМФТ, DRS (RDRS).

З метою вибору більш реалістичної системи розглянемо міжчастинковий потенціал взаємодії, що моделює деякий реальний потенціал у вигляді багатосходинкової функції:

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

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

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

де  $N^*$  – загальне число стінок, крім твердосферної. Для зручності виділимо окремо системи притягувальних і відштовхувальних стінок. Нехай є  $n^*$  відштовхувальних стінок, що знаходяться на відстанях  $\sigma_{l_i}$  й мають висоти  $\Delta \epsilon_{l_i}$ ,  $i = 1, \dots, n^*$ ; і  $m^*$  притягувальних стінок з параметрами  $\sigma_{r_j}$ ,  $\Delta \epsilon_{r_j}$  відповідно,  $j = 1, \dots, m^*$ ;  $\sigma_0$  – положення твердосферної стінки. Очевидно, що  $n^* + m^* = N^*$ ,

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

Таким чином, параметри  $\sigma_0$ ,  $n^*$ ,  $\sigma_{l_i}$ ,  $\Delta \epsilon_{l_i}$ ,  $m^*$ ,  $\sigma_{r_j}$ ,  $\Delta \epsilon_{r_j}$  повністю визначають багатосходинковий потенціал, область взаємодії  $\bar{\Omega}$  якого складається з сукупності підобластей

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

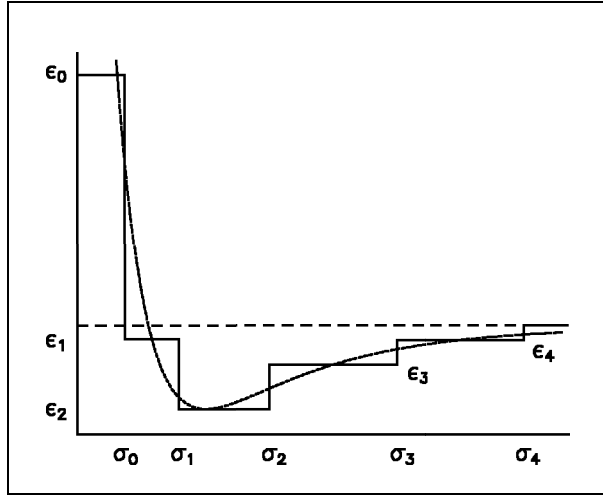


Рис. 2: Приклад моделювання якогось певного реалістичного потенціалу міжчастинкової взаємодії за допомогою потенціалу у вигляді багатосходиноквої функції.

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

В геометричній інтерпретації для області взаємодії маємо сукупність концентричних сфер з радіусами  $\sigma_k$ ,  $k = 0, 1, \dots, N^*$ . Вони характеризуються такими розмірами

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

яким відповідають характерні часи:  $\tau_0^* = \Delta r_0^* / |\mathbf{g}_0| \rightarrow +0$  – час взаємодії на стінці;  $\Delta \tau = \Delta \sigma / |\mathbf{g}_0|$  – час прольоту частинки між сусідніми стінками;  $\bar{\tau} = \sigma_{max} / |\mathbf{g}_0|$  – час прольоту всієї системи стінок багатосходиноквого потенціалу для виділеної пари частинок. Оскільки в потенціалі є горизонтальні ділянки, де сила міжчастинковою взаємодії дорівнює нулю, введемо також час  $\tau_f$  як середній час вільного пробігу частинки в системі. Цей час  $\tau_f$  зміною геометрії потенціалу і збільшенням густини можна зробити якомога достатньо малим, щоб мало місце співвідношення

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

Враховуючи структуру багатосходиноквого потенціалу, область взаємодії і характерні часи, специфіку взаємодії частинок на притягувальних та відштовхувальних стінках, в роботах [36,37,55] з інтегралу зіткнень (3.5) кінетичного рівняння (3.4) послідовно отримано інтеграл зіткнень для системи частинок, взаємодія яких описується багатосходиноквим потенціалом. Відповідне кінетичне рівняння може бути представлено у вигляді:

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + iL(1) \right) f_1(x_1; t) = \int dx_2 \hat{T}^{ms}(1, 2) g_2^{ms}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) f_1(x_1; t) f_1(x_2; t), \quad (3.11)$$

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 при наявності багатосходиноквого потенціалу;

$$\hat{T}_{hs}^a = \sigma_0^2 \int d\hat{\sigma} |\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g}| \Theta(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g}) \times \left\{ \delta(\mathbf{r}_{12} + \hat{\sigma} \sigma_0^+) \hat{B}^a(\hat{\sigma}) - \delta(\mathbf{r}_{12} - \hat{\sigma} \sigma_0^+) \right\} \quad (3.12)$$

– оператор зіткнення Енскога на  $\sigma_0$ ;

$$\hat{T}_{r_i}^p = \sigma_{r_i}^2 \int d\hat{\sigma} |\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g}| \Theta_{r_i}^p(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g}) \times \left\{ \delta(\mathbf{r}_{12} + \hat{\sigma} \sigma_{r_i}^{1,p}) \hat{B}_{r_i}^p(\hat{\sigma}) - \delta(\mathbf{r}_{12} - \hat{\sigma} \sigma_{r_i}^{2,p}) \right\} \quad (3.13)$$

– оператор зіткнення Енскога на  $r_i$  відштовхувальній стінці;

$$\hat{T}_{a_j}^p = \sigma_{a_j}^2 \int d\hat{\sigma} |\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g}| \Theta_{a_j}^p(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g}) \times \left\{ \delta(\mathbf{r}_{12} + \hat{\sigma} \sigma_{a_j}^{1,p}) \hat{B}_{a_j}^p(\hat{\sigma}) - \delta(\mathbf{r}_{12} - \hat{\sigma} \sigma_{a_j}^{2,p}) \right\} \quad (3.14)$$

– оператор зіткнення Енскога на  $a_j$  притягувальній стінці. В цих операторах зіткнення параметри означені відповідно до типу взає-

модії.

$$\begin{aligned}\Theta_{r_i}^b &= \Theta(-\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g}), & \Theta_{a_j}^b &= \Theta(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g}), \\ \Theta_{r_i}^c &= \Theta(-\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g} - \alpha_{r_i}), & \Theta_{a_j}^c &= \Theta(-\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g} - \alpha_{a_j}), \\ \Theta_{r_i}^d &= \Theta(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g})\Theta(\alpha_{r_i} - \hat{\sigma} \cdot \mathbf{g}), & \Theta_{a_j}^d &= \Theta(-\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g})\Theta(\alpha_{a_j} + \hat{\sigma} \cdot \mathbf{g}),\end{aligned}$$

– умови, необхідні для виникнення даного типу взаємодії, де  $\hat{\sigma} = \hat{r}_{12}$  – 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  $\sigma_0$  – діаметра 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”,  $\alpha_{r_i}^2 = 4 \Delta\epsilon_{r_i}/m$ ,  $\alpha_{a_j}^2 = 4 \Delta\epsilon_{a_j}/m$ ,

$$\begin{aligned}\sigma_{r_i}^{1,b} &= \sigma_{r_i}^+, & \sigma_{r_i}^{2,b} &= \sigma_{r_i}^-, & \sigma_{a_j}^{1,b} &= \sigma_{a_j}^-, & \sigma_{a_j}^{2,b} &= \sigma_{a_j}^+, \\ \sigma_{r_i}^{1,c} &= \sigma_{r_i}^-, & \sigma_{r_i}^{2,c} &= \sigma_{r_i}^+, & \sigma_{a_j}^{1,c} &= \sigma_{a_j}^+, & \sigma_{a_j}^{2,c} &= \sigma_{a_j}^-, \\ \sigma_{r_i}^{1,d} &= \sigma_{r_i}^+, & \sigma_{r_i}^{2,d} &= \sigma_{r_i}^+, & \sigma_{a_j}^{1,d} &= \sigma_{a_j}^-, & \sigma_{a_j}^{2,d} &= \sigma_{a_j}^-\end{aligned}$$

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

– оператори зсуву швидкостей згідно взаємодії певного типу на кожній зі стінок:

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

і

$$\begin{aligned}\mathbf{V}_{1(2)r_i}^b &= \mathbf{V}_{1(2)} \pm \frac{1}{2} \hat{\sigma} \left[ \hat{\sigma} \cdot \mathbf{g} + \sqrt{(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g})^2 + \alpha_{r_i}^2} \right], \\ \mathbf{V}_{1(2)r_i}^c &= \mathbf{V}_{1(2)} \pm \frac{1}{2} \hat{\sigma} \left[ \hat{\sigma} \cdot \mathbf{g} - \sqrt{(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g})^2 - \alpha_{r_i}^2} \right], \\ \mathbf{V}_{1(2)r_i}^d &= \mathbf{V}_{1(2)} \pm \hat{\sigma}(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g}),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{V}_{1(2)a_j}^b &= \mathbf{V}_{1(2)} \pm \frac{1}{2} \hat{\sigma} \left[ \hat{\sigma} \cdot \mathbf{g} - \sqrt{(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g})^2 + \alpha_{a_j}^2} \right], \\ \mathbf{V}_{1(2)a_j}^c &= \mathbf{V}_{1(2)} \pm \frac{1}{2} \hat{\sigma} \left[ \hat{\sigma} \cdot \mathbf{g} + \sqrt{(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g})^2 - \alpha_{a_j}^2} \right], \\ \mathbf{V}_{1(2)a_j}^d &= \mathbf{V}_{1(2)} \pm \hat{\sigma}(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{g}).\end{aligned}$$

В роботах [37,55] для кінетичного рівняння (3.11) була доведена  $H$ -теорема, а в [36,40] знайдені нормальні рів’язки методом Чепмена-Енскога і отримані аналітичні вирази для кінетичних коефіцієнтів переносу об’ємної і зсувної в’язкості та теплопровідності. На основі цих виразів проведений числовий розрахунок коефіцієнтів переносу для аргону в широкій області густин та температур. Проведено порівняння отриманих результатів 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 потенціалу дають більш близькі значення до експериментальних даних, ніж теорії RET, MET, RDRS.

Кінетичне рівняння (3.11) в залежності від значень параметрів багатосходинкового потенціалу допускає граничні випадки.

1.  $n^* = m^* = 0$ .

У цьому випадку модельний потенціал (3.10) перетворюється в потенціал твердих сфер (3.6), тоді  $\hat{T}^{ms} = \hat{T}_{hs}^a = \hat{T}(1, 2)$  (3.9) і кінетичне рівняння (3.11) переходить в кінетичне рівняння ревізованої теорії Енскога [23] (3.4), (3.8).

2.  $n^* = 0, m^* = 1, \Delta\epsilon_{a_1} \neq 0$ .

Тут вихідний багатосходинковий потенціал (3.10) переходить в потенціал прямокутної ями, тоді  $\hat{T}^{ms} = \hat{T}_{hs}^a + \hat{T}_{a_1}^p$  і кінетичне рівняння (3.11) переходить в кінетичне рівняння теорії RDRS [30] для потенціалу прямокутної ями.

### 3.3. Кінетичне рівняння Енскога-Ландау для системи заряджених твердих сфер

Важливою задачею є дослідження кінетичних рівнянь (3.4), (3.5) в наближенні “парних” зіткнень для систем класичних частинок з більш реалістичним потенціалом взаємодії. Насамперед для систем,

взаємодія частинок яких на малих відстаннях моделюється потенціалом твердих сфер  $\Phi^{hs}(|\mathbf{r}_{ij}|)$ , а на великих відстаннях – деяким плавним далекосяжним потенціалом  $\Phi^l(|\mathbf{r}_{ij}|)$ :

$$\Phi(|\mathbf{r}_{ij}|) = \Phi^{hs}(|\mathbf{r}_{ij}|) + \Phi^l(|\mathbf{r}_{ij}|),$$

де

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

$\sigma$  – діаметр твердої сфери. Яскравим прикладом такої моделі є

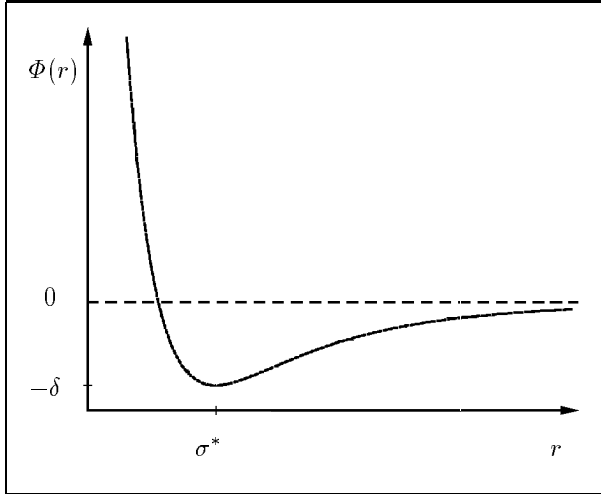


Рис. 3: Приклад розділення міжчастинкового потенціалу взаємодії на короткосяжну та далекосяжну частини.

система заряджених твердих сфер, у якій далекосяжною частиною потенціалу є кулонівський потенціал взаємодії. Необхідно відзначити, що розділення потенціалу взаємодії  $\Phi(|\mathbf{r}_{ij}|)$  на короткосяжну та далекосяжну частини – неоднозначне, тому виникає проблема оптимального їх розділення і означення відповідних параметрів інтенсивності. Такі питання в рівноважній статистичній механіці обговорювались неодноразово [56]. Подібні ідеї про розділення потенціалу взаємодії на короткосяжну та далекосяжну частини при отриманні кінетичних рівнянь використовувались в роботах [34,57,58].

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

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

де параметри означені на рисунку 3,  $\sigma^*$  – ефективний діаметр сфери. З врахуванням (3.15) інтеграл зіткнень (3.5) представимо у вигляді

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

де

$$I_1(x_1; t) = - \lim_{\epsilon \rightarrow +\infty} \int_0^{\sigma^*} dr_{12} r_{12}^2 \int d\hat{\sigma} \int d\mathbf{v}_2 iL^\epsilon(1, 2) \times \quad (3.16)$$

$$\lim_{\tau \rightarrow -0} e^{iL_2^\epsilon \tau} g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t + \tau) f_1(x_1; t + \tau) f_1(x_2; t + \tau),$$

$$I_2(x_1; t) = - \int_{\sigma^*}^{\infty} dr_{12} r_{12}^2 \int d\hat{\sigma} \int d\mathbf{v}_2 iL^l(1, 2) \times \quad (3.17)$$

$$\lim_{\tau \rightarrow -\infty} e^{(iL_2^0 + iL^l(1, 2))\tau} g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t + \tau) f_1(x_1; t + \tau) f_1(x_2; t + \tau),$$

де  $L_2^0 = L(1) + L(2)$ .

При цьому використана ідея просторового та часового розділення взаємодії, пов'язана з специфікою моделі твердих сфер: область взаємодії  $\Delta r_0^* \rightarrow 0$  і час взаємодії  $\tau_0 \rightarrow 0$ , а також зі скінченним часом  $\tau$  далекосяжної взаємодії, однак  $\lim_{\tau \rightarrow -\infty} \tau/\tau_l \rightarrow -\infty$ .  $L^l(1, 2)$  – далекосяжна частина двочастинкового оператора Ліувіля. В роботах [38,39] і відповідно підрозділу 3.1 було показано, що  $I_1(x_1; t)$  для моделі твердих сфер співпадає з інтегралом зіткнень ревізованої теорії Енскога

$$I_1^{hs}(x_1; t) = \int dx_2 \hat{T}^{hs}(1, 2) g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) f_1(x_1; t) f_1(x_2; t) \quad (3.18)$$

з тією лише різницею, що тут  $g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t)$  – парна квазірівноважна функція частинок в системі з повним міжчастинковим потенціалом взаємодії. У випадку, коли далекосяжна частина потенціалу взаємодії відсутня ( $\Phi^l(|\mathbf{r}_{ij}|) = 0$ ), перша частина  $I_1(x_1; t)$  повністю співпадає з інтегралом зіткнень (3.8) кінетичної теорії RET, тоді як друга частина  $I_2(x_1; t)$  при цьому тотожно рівна нулю. В іншому

граничному випадку, коли густина системи мала (розріджені газу,  $n = N/V \rightarrow 0$ ,  $g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) \rightarrow 1$ ) і  $\sigma \rightarrow +0$ ,  $I_1(x_1; t) = 0$ , друга частина інтегралу зіткнень  $I_2(x_1; t)$  співпадає з інтегралом зіткнень кінетичного рівняння Больцмана [18].

Розглянемо частинний випадок, коли далекосяжна частина потенціалу мала, і проведемо розклад в ряд операторного виразу  $\exp\left\{iL_2^0 + iL^l(1, 2)\right\}\tau$ , обмежуючись лінійним наближенням за доданком  $iL^l(1, 2)$ . Тоді  $I_2(x_1; t)$  буде мати вигляд

$$I_2(x_1; t) = I_2^{(0)}(x_1; t) + I_2^{(1)}(x_1; t),$$

$$I_2^{(0)}(x_1; t) = I_{mf}(x_1; t) = \quad (3.19)$$

$$- \int_{\sigma^*}^{\infty} dr_{12} r_{12}^2 \int d\hat{\sigma} d\mathbf{v}_2 iL^l(1, 2) \times$$

$$\lim_{\tau \rightarrow -\infty} e^{iL_2^0 \tau} g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t + \tau) f_1(x_1; t + \tau) f_1(x_2; t + \tau),$$

$$I_2^{(1)}(x_1; t) = - \int_{\sigma^*}^{\infty} dr_{12} r_{12}^2 \int d\hat{\sigma} d\mathbf{v}_2 iL^l(1, 2) \times \quad (3.20)$$

$$\lim_{\tau \rightarrow -\infty} e^{iL_2^0 \tau} \int_0^{\tau} d\tau' e^{-iL_2^{(0)} \tau'} iL^l(1, 2) e^{iL_2^{(0)} \tau'} \times$$

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

$I_2^{(0)}(x_1; t)$  – перший доданок є узагальненням середнього поля Власова в теорії КМФТ [26–28], а другий доданок  $I_2^{(1)}(x_1; t)$  є узагальненим інтегралом зіткнень з врахуванням запізнення в часі в наближенні другого порядку за взаємодією  $\Phi^l(|\mathbf{r}_{lj}|)$ . Нехтуючи просторовою неоднорідністю  $f_1(x; t)$  і часовим запізненням в (3.20) в роботах [38,39] було показано, що  $I_2^{(1)}(x_1; t)$  переходить в інтеграл зіткнень типу Ландау:

$$I_{coll}^l(x_1; t) = \quad (3.21)$$

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

де

$$J_{\alpha\beta}(\mathbf{g}) = \frac{1}{m} \int_{\sigma^*}^{\infty} dr_{12} r_{12}^2 \int d\hat{\sigma} g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_{12}; t) \times \quad (3.22)$$

$$\left[ \frac{\partial \Phi^l(|\mathbf{r}_{12}|)}{\partial r_{12,\alpha}} \right] \int_{-\infty}^t d\tau \left[ \frac{\partial \Phi^l(|\mathbf{r}_{12} + \mathbf{g}t|)}{\partial r_{12,\beta}} \right]$$

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

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

ми назвали [38,39,44] інтегралом зіткнень Енскога-Ландау для системи заряджених твердих сфер, коли  $\Phi^l(|\mathbf{r}_{12}|) = \frac{(Ze)^2}{\epsilon r}$  – кулонівський потенціал взаємодії. А відповідне кінетичне рівняння приймає назву кінетичного рівняння Енскога-Ландау для системи заряджених твердих сфер. На відміну від звичайного інтегралу зіткнень Ландау [59], інтеграл зіткнень (3.21), (3.22) не розходиться на малих відстанях. Однак на великих відстанях ( $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ ), як і звичайно, буде мати місце розбіжність в (3.22). Для послідовного усунення цієї розбіжності необхідно враховувати ефекти динамічного екранування [60].

Важливо відзначити, що в роботах [39,44] були знайдені нормальні розв'язки кінетичного рівняння Енскога-Ландау для системи заряджених твердих сфер методом Чепмена-Енскога. В результаті були отримані аналітичні вирази для коефіцієнтів переносу: об'ємної і зсувної в'язкості та теплопровідності з вкладом як твердосферної частини, так і кулонівської взаємодії. В [42,44] на основі цих виразів були проведені числові розрахунки й порівняння з експериментальними даними для однократно іонізованого аргону.

Підсумовуючи результати цього розділу необхідно відзначити, що ланцюжок рівнянь ББГКІ 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 потенціалами (3.6), (3.10), (3.15) дає можливість послідовно отримати відповідні кінетичні рівняння: теорії РЕТ [38,39] (3.4), (3.8), кінетичне рівняння для багатосходинкового потенціалу [36,37,40,55] та кінетичне рівняння Енскога-Ландау [39,44] (3.4), (3.23) для системи заряджених твердих сфер.

Очевидно, що такі результати в наближенні “парних” зіткнень для ланцюжка рівнянь ББГКІ (2.30) – (2.32) є доброю основою для

його аналізу у вищих наближення за міжчастинковими кореляціями.

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

#### 4. Модифіковані групові розклади

Кінетичне рівняння ревізованої теорії Енскога [23,38,39] (3.4), (3.8) для системи твердих сфер та кінетичне рівняння Енскога-Ландау (3.4), (3.23) для системи заряджених твердих сфер отримані із ланцюжка рівнянь (2.30) – (2.32) в наближенні “парних” зіткнень, хоча значна частина просторових динамічних кореляцій вже врахована в парній квазірівноважній функції розподілу  $g_2$ . Для аналізу розв’язків ланцюжка рівнянь ББГКІ (2.30) – (2.32) у вищих наближеннях за міжчастинковими кореляціями зручно застосувати концепцію групових розкладів [2,9,61]. Групові розклади застосовувались до ланцюжка рівнянь ББГКІ в багатьох роботах [2–7,11–16,61], зокрема з граничною умовою, що відповідає умові послаблення кореляцій за М.М.Боголюбовим [1], в роботах Д.М.Зубарева та М.Ю.Новікова [4,7,9,10,48], в яких був розвинутий діаграмний метод побудови розв’язків ланцюжка рівнянь ББГКІ.

У цьому розділі концепція групових розкладів буде застосована до ланцюжка рівняння ББГКІ з модифікованими граничними умовами, які враховують як нерівноважність одночастинкової функції розподілу, так і локальні закони збереження. Для розв’язку ланцюжка рівнянь (2.30) – (2.32) подібно як і в роботі Д.М.Зубарева та М.Ю.Новікова [9,47,48], а ще раніше в роботах М.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:

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

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 групових розкладів (4.1) полягає в тому, що значну частину просторових кореляцій в часі враховують квазірівноважні функції  $g_s(\mathbf{r}^s; t)$ . При  $g_s(\mathbf{r}^s; t) = 1$  для  $s = 2, 3, \dots$  дані групові розклади співпадають з груповими розкладами [9]. Так як кожна стрічка рівностей (4.1) вводить рівно одну нову функцію  $G_s(\mathbf{r}^s; t)$ ,  $s = 1, 2, 3, \dots$ , то дані рівняння можна розв’язати відносно незвідних функцій розподілу і записати:

$$\begin{aligned} G_1(x_1; t) &= f_1(x_1; t), & (4.2) \\ G_2(x_1, x_2; t) &= f_2(x_1, x_2; t) - g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t)f_1(x_1; t)f_1(x_2; t), \\ G_3(x_1, x_2, x_3; t) &= f_3(x_1, x_2, x_3; t) - \sum_P f_2(x_1, x_2; t)f_1(x_3; t) - \\ &h_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3; t)f_1(x_1; t)f_1(x_2; t)f_1(x_3; t). \\ &\vdots \end{aligned}$$

Тут і в (4.1)  $\sum_P$  позначає суму всіх різних перестановок координат трьох і більше частинок,

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

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

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial}{\partial t} + iL(1) \right) G_1(x_1; t) &+ & (4.4) \\ &\int dx_2 iL(1, 2)g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t)G_1(x_1; t)G_1(x_2; t) + \\ &\int dx_2 iL(1, 2)G_2(x_1, x_2; t) = 0. \end{aligned}$$

Диференціюючи за часом вираз для  $G_2(x_1, x_2; t)$  в (4.2) і використовуючи друге рівняння ланцюжка ББГКІ (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:

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + iL_2 + \varepsilon \right) G_2(x_1, x_2; t) = & (4.5)$$



$$\begin{aligned}
& - \left( \frac{\partial}{\partial t} + iL_2 \right) g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) G_1(x_1; t) G_1(x_2; t) - \\
& \int dx_3 \left\{ iL(1, 3) + iL(2, 3) \right\} \left\{ G_3(x_1, x_2, x_3; t) + \right. \\
& \left. \sum_P G_2(x_1, x_2; t) G_1(x_3; t) + \right. \\
& \left. g_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3; t) G_1(x_1; t) G_1(x_2; t) G_1(x_3; t) \right\}.
\end{aligned}$$

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. Пригадаємо, що поява квазірівноважних функцій розподілу  $g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t)$ ,  $g_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3; t)$  і  $g_s(\mathbf{r}^s; t)$  в ланцюжку рівнянь (2.30) – (2.32) зв'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 в даній роботі ми аналізуватимемо лише перші два рівняння (4.4), (4.5), то наступні рівняння ланцюжка виписувати не будемо. Необхідно зауважити, що якщо покласти формально  $g_s(\mathbf{r}^s; t) \equiv 1$ ,  $s = 2, 3, \dots$  в (4.4), (4.5), то отримаємо два перші рівняння ланцюжка рівнянь ББГКІ для незвідних функцій розподілу  $G_1(x_1; t)$ ,  $G_2(x_1, x_2; t)$ , отриманих в роботі М.Д.Зубарева 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 відзначили, згідно (2.16) або (2.26), парна квазірівноважна функція розподілу є функціоналом локальних значень температури  $\beta(\mathbf{r}; t)$  і середньої густини частинок  $n(\mathbf{r}; t)$ . Тому похідні за часом від  $g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t)$  будуть стосуватись похідних  $\frac{\partial}{\partial t} \beta(\mathbf{r}; t)$  та  $\frac{\partial}{\partial t} n(\mathbf{r}; t)$ , які в свою чергу згідно умов самоузгодження (2.18.a), (2.18.b) будуть виражатись через середні значення енергії в супроводжуваній системі відліку  $\langle \mathcal{E}^t(\mathbf{r}) \rangle^t$  і  $\langle \hat{n}(\mathbf{r}) \rangle^t$ , що складають основу гідродинамічного опису нерівноважного стану системи.

Якщо знехтувати в рівнянні (4.5) у правій частині доданком, який враховує потрібні кореляції між частинками, то із (4.5) отримаємо рівняння у наближенні “парних” зіткнень наступного вигляду:

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + iL_2 + \varepsilon \right) G_2(x_1, x_2; t) = \quad (4.6)$$

$$- \left( \frac{\partial}{\partial t} + iL_2 \right) g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) G_1(x_1; t) G_1(x_2; t).$$

Формальний розв'язок цього рівняння є таким:

$$\begin{aligned}
G_2(x_1, x_2; t) = & - \int_{-\infty}^t dt' e^{(\varepsilon + iL_2)(t-t')} \left[ \frac{\partial}{\partial t'} + iL_2 \right] \times \quad (4.7) \\
& g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t') G_1(x_1; t') G_1(x_2; t').
\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
\left( \frac{\partial}{\partial t} + iL(1) \right) f_1(x_1; t) = & \quad (4.8) \\
& - \int dx_2 iL(1, 2) g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) f_1(x_1; t) f_1(x_2; t) \\
& - \int dx_2 iL(1, 2) \int_{-\infty}^t dt' e^{(\varepsilon + iL_2)(t-t')} \left[ \frac{\partial}{\partial t'} + iL_2 \right] \times \\
& g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t') f_1(x_1; t') f_1(x_2; t'),
\end{aligned}$$

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

Тепер розглянемо систему рівнянь (4.4), (4.5) в 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 також  $h_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3; t) \equiv 0$ , рівняння (4.5) запишемо у такому вигляді:

$$\begin{aligned}
\left( \frac{\partial}{\partial t} + iL_2 + \varepsilon \right) G_2(x_1, x_2; t) = & \quad (4.9) \\
& - \left( \frac{\partial}{\partial t} + iL_2 \right) g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) G_1(x_1; t) G_1(x_2; t) \\
& - \int dx_3 iL(1, 3) \left\{ G_2(x_1, x_2; t) G_1(x_3; t) + G_2(x_2, x_3; t) G_1(x_1; t) \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \int dx_3 iL(2,3) \left\{ G_2(x_1, x_2; t) G_1(x_3; t) + G_2(x_1, x_3; t) G_1(x_2; t) \right\} \\
& - \int dx_3 \left\{ iL(1,3) + iL(2,3) \right\} \\
& \times \left\{ g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) + g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3; t) + g_2(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3; t) \right\} \\
& \times G_1(x_1; t) G_1(x_2; t) G_1(x_3; t).
\end{aligned}$$

Далі введемо оператор, що може бути отриманий варіацією інтегралу зіткнень Власова біля нерівноважного розподілу  $G_1(x_1; t)$

$$\begin{aligned}
\delta \left( \int dx_3 iL(1,3) G_1(x_3; t) G_1(x_1; t) \right) &= \quad (4.10) \\
\int dx_3 iL(1,3) G_1(x_3; t) \delta G_1(x_1; t) &= \mathcal{L}(x_1; t) \delta G_1(x_1; t).
\end{aligned}$$

Тоді рівняння (4.9) за допомогою оператора  $\mathcal{L}(x_1; t)$  представимо у вигляді:

$$\begin{aligned}
\left( \frac{\partial}{\partial t} + iL_2 + \mathcal{L}(x_1, x_2; t) + \varepsilon \right) G_2(x_1, x_2; t) &= \quad (4.11) \\
- \left( \frac{\partial}{\partial t} + iL_2 + \mathcal{L}(x_1, x_2; t) \right) g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) G_1(x_1; t) G_1(x_2; t),
\end{aligned}$$

звідки знайдемо формальний розв'язок для незвідної двочастинкової функції розподілу:

$$\begin{aligned}
G_2(x_1, x_2; t) &= - \int_{-\infty}^t dt' e^{\varepsilon(t'-t)} U(t, t') \times \quad (4.12) \\
\left( \frac{\partial}{\partial t'} + iL_2 + \mathcal{L}(x_1, x_2; t') \right) g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t') G_1(x_1; t') G_1(x_2; t'),
\end{aligned}$$

де  $U(t, t')$  – оператор еволюції:

$$U(t, t') = \exp_+ \left\{ - \int_{t'}^t dt'' (iL_2 + \mathcal{L}(x_1, x_2; t'')) \right\}, \quad (4.13)$$

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

У результаті ми отримали вираз для незвідної квазірівноважної двочастинкової функції розподілу  $G_2(x_1, x_2; t)$  в узагальненому поляри-

заційному наближенні. Підставимо цей вираз (4.12) у перше рівняння ланцюжка (4.4), тоді отримаємо:

$$\begin{aligned}
\left( \frac{\partial}{\partial t} + iL(1) \right) G_1(x_1; t) &+ \quad (4.14) \\
\int dx_2 iL(1,2) g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) G_1(x_1; t) G_1(x_2; t) &= \\
\int dx_2 \int_{-\infty}^t dt' e^{\varepsilon(t'-t)} iL(1,2) U(t, t') \times \\
\left( \frac{\partial}{\partial t'} + iL_2 + \mathcal{L}(x_1, x_2; t') \right) g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t') G_1(x_1; t') G_1(x_2; t')
\end{aligned}$$

– узагальнене кінетичне рівняння для нерівноважної одностинкової функції розподілу з немарківським інтегралом зіткнення в узагальненому поляризаційному наближенні. Необхідно зазначити, що наявність в інтегралі зіткнень (4.14) оператора  $\mathcal{L}(x_1, x_2; t)$  зіткнень Власова вказує на врахування у ньому колективних ефектів. В загальному вигляді аналіз інтегралу зіткнень в (4.14) є достатньо складною математичною задачею. Очевидно, що для кожної фізичної моделі системи частинок, чи нерівноважного стану інтеграл зіткнень в (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.

#### 4.1. Модель твердих сфер в поляризаційному наближенні

Дослідження кінетичних процесів для моделі твердих сфер в наближеннях вищих, ніж “парних” зіткнень, враховуючи специфіку параметрів моделі і результати розділу 3 цієї роботи та робіт [13,14,62], зручно проводити на основі ланцюжка рівнянь (4.4), (4.5) при формальній заміні потенціальної частини оператора Ліувіля  $iL(1,2)$  на оператор зіткнення Енскога  $\hat{T}(1,2)$  (3.9). У цьому випадку рівняння (4.4), (4.5) мають такий вигляд:

$$\begin{aligned}
\left( \frac{\partial}{\partial t} + iL(1) \right) G_1(x_1; t) &+ \quad (4.15) \\
\int dx_2 \hat{T}(1,2) g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) G_1(x_1; t) G_1(x_2; t) &+ \\
\int dx_2 \hat{T}(1,2) G_2(x_1, x_2; t) &= 0,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left( \frac{\partial}{\partial t} + iL_2^0 + \hat{T}(1, 2) + \varepsilon \right) G_2(x_1, x_2; t) = \\
& - \left( \frac{\partial}{\partial t} + iL_2^0 + \hat{T}(1, 2) \right) g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) G_1(x_1; t) G_1(x_2; t) - \\
& \int dx_3 \left\{ \hat{T}(1, 3) + \hat{T}(2, 3) \right\} \left\{ G_3(x_1, x_2, x_3; t) + \right. \\
& \sum_P G_2(x_1, x_2; t) G_1(x_3; t) + \\
& \left. g_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3; t) G_1(x_1; t) G_1(x_2; t) G_1(x_3; t) \right\}.
\end{aligned} \tag{4.16}$$

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

$$\delta \int dx_3 \hat{T}(1, 3) G_1(x_1; t) G_1(x_3; t) = C(x_1; t) \delta G_1(x_1; t), \tag{4.17}$$

$$\begin{aligned}
& \left( \frac{\partial}{\partial t} + iL_2^0 + \hat{T}(1, 2) + C(x_1, x_2; t) + \varepsilon \right) G_2(x_1, x_2; t) = \\
& - \left( \frac{\partial}{\partial t} + iL_2^0 + \hat{T}(1, 2) + C(x_1, x_2; t) \right) \times \\
& g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) G_1(x_1; t) G_1(x_2; t),
\end{aligned} \tag{4.18}$$

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

$$\begin{aligned}
G_2(x_1, x_2; t) = & - \int_{-\infty}^0 dt' e^{\varepsilon(t'-t)} U_{hs}(t, t') \times \\
& \left\{ \frac{\partial}{\partial t'} + iL_2^0 + \hat{T}(1, 2) + C(x_1, x_2; t') \right\} \times \\
& g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t') G_1(x_1; t') G_1(x_2; t'),
\end{aligned} \tag{4.19}$$

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

$$U_{hs}(t, t') = \exp_+ \left\{ - \int_{t'}^t dt'' \left[ iL_2^0 + \hat{T}(1, 2) + C(x_1, x_2; t'') \right] \right\}, \tag{4.20}$$

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

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

$$\begin{aligned}
& \left( \frac{\partial}{\partial t} + iL(1) \right) G_1(x_1; t) = \\
& \int dx_2 \hat{T}(1, 2) g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) G_1(x_1; t) G_1(x_2; t) - \\
& \int dx_2 \hat{T}(1, 2) \int_{-\infty}^0 dt' e^{\varepsilon(t'-t)} U_{hs}(t, t') \times \\
& \left\{ \frac{\partial}{\partial t'} + iL_2^0 + \hat{T}(1, 2) + C(x_1, x_2; t') \right\} \times \\
& g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t') G_1(x_1; t') G_1(x_2; t')
\end{aligned} \tag{4.21}$$

– узагальнене кінетичне рівняння для нерівноважної одночастинкової функції розподілу твердих сфер з немарківським інтегралом зіткнень в узагальненому поляризаційному наближенні. Перший доданок у правій частині цього рівняння є інтегралом зіткнень ревізованої теорії Енскога (3.8). Другий доданок, нехтуючи ефектами запізнення в часі й припускаючи, що не залежить від часу оператор  $C(x_1, x_2; t)$ , 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 максвелівська функція розподілу, можна записати в спрощеному вигляді:

$$\begin{aligned}
I_R(x_1; t) = & - \int_{-\infty}^t dt' e^{\varepsilon(t'-t)} R_0(x_1; t, t') G_1(x_1; t') \\
& - \int_{-\infty}^t dt' e^{\varepsilon(t'-t)} R_1(x_1; t, t') G_1(x_1; t'),
\end{aligned} \tag{4.22}$$

де

$$\begin{aligned}
R_0(x_1; t, t') = & \int dx_2 \hat{T}(1, 2) e^{\left\{ (t' - t) \left( iL_2^0 + \hat{T}(1, 2) + C(x_1, x_2) \right) \right\}} \\
& \times \left( iL_2^0 + C(x_1, x_2) \right) g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t') G_1(x_2; t'),
\end{aligned} \tag{4.23}$$

$$R_1(x_1; t, t') = \int dx_2 \hat{T}(1, 2) e^{\left\{ (t' - t) \left( iL_2^0 + \hat{T}(1, 2) + C(x_1, x_2) \right) \right\}}$$

$$\times \hat{T}(1, 2)g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t')G_1(x_2; t'), \quad (4.24)$$

– узагальнений кільцевий оператор. Кінетичне рівняння (4.21) з врахуванням (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 покласти рівною 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 залежності частоти від хвильового вектора. Це пов'язане з тим, що кільцевий оператор для неоднорідних систем при малих хвильових числах містить вклад пропорційний до  $\sqrt{k}$ . Подібні дослідження колективних мод, часових кореляційних функцій в гідродинамічній області були проведені М.М.Боголюбовим [14,62,64]. Важливо провести аналогічні дослідження гідродинамічних колективних мод, часових кореляційних функцій на основі кінетичного рівняння (4.21) з врахуванням (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.

#### 4.2. Кулонівська плазма в поляризаційному наближенні

Будемо досліджувати електронний газ, що знаходиться в компенсуючому полі просторово однорідного додатньо зарядженого фону, що створюється важкими нерухомими іонами. 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-образ  $\Phi(|\mathbf{k}|)$  – дійсна функція:

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

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  $|\mathbf{r}_{12}|$ . Згідно методу 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  $q = \frac{e^2}{r_d} \Theta$ ,  $r_d = \sqrt{\Theta/4\pi e^2 n}$  – радіус Дебая,  $n = N/V$ ,  $\Theta = k_B T$ ,  $k_B$  – 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 врахування ефектів запізнення у часі в рівнянні (4.9) необхідно залишити всі інтегральні доданки, а всі 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 виду:

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

або

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

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

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

$\varepsilon \rightarrow +0$ , де

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

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

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

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

$$G_2(\mathbf{k}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; t) = \frac{\mathbf{k}\Phi(|\mathbf{k}|)}{\mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{p}_{12}}{m} - i0} \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} G_1(\mathbf{p}_1; t) G_2(-\mathbf{k}, \mathbf{p}_2; t) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} G_1(\mathbf{p}_2; t) G_2(\mathbf{k}, \mathbf{p}_1; t) \right\} + \quad (4.28)$$

$$\frac{\mathbf{k}\Phi(|\mathbf{k}|)}{\mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{p}_{12}}{m} - i0} \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} G_1(\mathbf{p}_1; t) g_2(-\mathbf{k}; t) G_1(\mathbf{p}_2; t) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} G_1(\mathbf{p}_2; t) g_2(\mathbf{k}; t) G_1(\mathbf{p}_1; t) \right\}.$$

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

$$\left( 1 + \int d\mathbf{p}_2 \frac{\mathbf{k}\Phi(|\mathbf{k}|)}{\mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{p}_{12}}{m} - i0} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} G_1(\mathbf{p}_2; t) \right) G_2(\mathbf{k}, \mathbf{p}_1; t) = \quad (4.29)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} G_1(\mathbf{p}_1; t) \int d\mathbf{p}_2 \frac{\mathbf{k}\Phi(|\mathbf{k}|)}{\mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{p}_{12}}{m} - i0} G_2(-\mathbf{k}, \mathbf{p}_2; t) +$$

$$\int d\mathbf{p}_2 \frac{\mathbf{k}\Phi(|\mathbf{k}|)}{\mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{p}_{12}}{m} - i0} \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} G_1(\mathbf{p}_1; t) g_2(-\mathbf{k}; t) G_1(\mathbf{p}_2; t) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} G_1(\mathbf{p}_2; t) g_2(\mathbf{k}; t) G_1(\mathbf{p}_1; t) \right\}.$$

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

$$[1 + \Phi(|\mathbf{k}|)\chi(\mathbf{k}, p_1; t)] G_2(\mathbf{k}, p_1; t) = \quad (4.30)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} G_1(p_1; t) \int d\mathbf{p}_2 \frac{\mathbf{k}\Phi(|\mathbf{k}|)}{\mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{p}_{12}}{m} - i0} G_2(-\mathbf{k}, \mathbf{p}_2; t)$$

$$+ \int d\mathbf{p}_2 \frac{\mathbf{k}\Phi(|\mathbf{k}|)}{\mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{p}_{12}}{m} - i0} \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} G_1(p_1; t) g_2(-\mathbf{k}; t) G_1(\mathbf{p}_2; t) \right.$$

$$- \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} G_1(\mathbf{p}_2; t) g_2(\mathbf{k}; t) G_1(p_1; t) \left. \right\},$$

де введено такі позначення:

$$\chi(\mathbf{k}, p_1; t) = \int d\mathbf{p}_2 \frac{\mathbf{k}}{\mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{p}_{12}}{m} - i0} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} G_1(\mathbf{p}_2; t), \quad (4.31)$$

$$p_1 = \frac{\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{k}}{k}, \quad p_2 = \frac{\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{k}}{k}, \quad k = |\mathbf{k}|,$$

$$G_1(p_1; t) = \int d\mathbf{p}_{1\perp} G_1(\mathbf{p}_1; t),$$

$$G_2(\mathbf{k}, p_1; t) = \int d\mathbf{p}_{1\perp} G_2(\mathbf{k}, \mathbf{p}_1; t).$$

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

$$\left( 1 + \Phi(|\mathbf{k}|)\chi(\mathbf{k}, p_1; t) \right) \times \quad (4.32)$$

$$\left[ G_2(\mathbf{k}, \mathbf{p}_1; t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} G_1(p_1; t) - G_2(\mathbf{k}, p_1; t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} G_1(\mathbf{p}_1; t) \right] =$$

$$\Phi(|\mathbf{k}|)\chi(\mathbf{k}, p_1; t) g_2(\mathbf{k}; t) \times$$

$$\left[ G_1(p_1; t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} G_1(\mathbf{p}_1; t) - G_1(\mathbf{p}_1; t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} G_1(p_1; t) \right].$$

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

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

$$\times \left[ G_1(p_1; t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} G_1(\mathbf{p}_1; t) - G_1(\mathbf{p}_1; t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} G_1(p_1; t) \right]. \quad (4.33)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t} G_1(\mathbf{p}_1; t) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} G_1(\mathbf{p}_1; t) \int d\mathbf{k} \mathbf{k}\Phi(|\mathbf{k}|) \Im m g_2(\mathbf{k}; t) + \quad (4.34)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \int d\mathbf{p}_2 Q(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; t) \left[ \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} \right] G_1(\mathbf{p}_1; t) G_1(\mathbf{p}_2; t)$$

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

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

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) переходить у звичайне рівняння Боголюбова-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 інтегралі зіткнень Боголюбова-Ленарда-Балеску багаточастинкові кореляції враховуються уявною частиною  $g_2(\mathbf{k}; t)$ . Однак проблема розбіжності в інтегралі зіткнень рівняння (4.34) на малих відстанях ( $k \rightarrow \infty$ ) залишається не розв'язаною. Цю проблему можна розв'язати в рамках моделі заряджених твердих сфер, об'єднавши результати підрозділів 4.1 та 4.2, хоча це становить складну математичну задачу і потребує окремого розгляду.

Ланцюжок рівнянь ББГКІ (4.4), (4.5) з модифікованими граничними умовами та модифікованими груповими розкладами мають перспективу з точки зору досліджень густих систем, де врахування просторових міжчастинкових кореляцій є важливим. 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 колективні ефекти враховуються як через середнє поле Власова, так і через парну квазірівноважну кореляційну функцію, що є функціоналом нерівноважних значень температури та хімічного потенціалу. Очевидно, важливими є дослідження отриманих кінетичних рівнянь з точки зору їх розв'язків та вивчення на їх основі коефіцієнтів переносу, часових кореляційних функцій для модельних систем.

## Література

- [1] Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М.-Л., Гостехиздат, 1946, 120 с.

- [2] Cohen E.G.D. Cluster expansion and hierarchy. // Physica, 1962, vol. 28, No 10, p. 1045-1059.
- [3] Cohen E.G.D. On the kinetic theory of dense gases. // J. Math. Phys., 1963, vol. 4, No 2, p. 183-189.
- [4] Weinstock J. Cluster formulation of the exact equation for the evolution of a classical many-body system. // Phys. Rev., 1963, vol. 132, No 1, p. 454-469.
- [5] Уленбек Дж., Форд Дж. Лекции по статистической механике. М., 1965, 308 с.
- [6] Гуров К.П. Основания кинетической теории. М., Наука, 1966, 352 с.
- [7] Dorfman J., Cohen E.G.D. Difficulties in the kinetic theory of dense gases. // J. Math. Phys., 1967, vol. 8, No 2, p. 282-305.
- [8] Силин В.П. Введение в кинетическую теорию газов. М., Наука, 1971, 332 с.
- [9] Зубарев Д.Н., Новиков М.Ю. Обобщенная формулировка граничного условия к уравнению Лиувилля и цепочке Б-Б-Г-К-И. // ТМФ, 1972, том 13, No 7, с. 406-420.
- [10] Zubarev D.N., Novikov M.Ju. Die Boltzmann-Gleichung und mögliche Wege zur Entwicklung dynamischer Methoden in der Kinetische Theorie. // Fortschritt für Physik, 1973, vol. 21, No 12, p. 703-734.
- [11] Либов Р. Введение в теорию кинетических уравнений. М., Мир, 1974, 376 с.
- [12] Климонтович Ю.Л. Кинетическая теория неидеального газа и неидеальной плазмы. М., Наука, 1975, 352 с.
- [13] Резибуа П., Де Ленер М. Классическая кинетическая теория жидкостей и газов. М., Мир, 1980, 417 с.
- [14] Шелест А.В. Метод Боголюбова в динамической теории кинетических уравнений. М., Наука, 1990, 158 с.
- [15] Kawasaki K., Oppenheim J. Logarithmic term in the density expansion of transport coefficients. // Phys. Rev., 1965, vol. 139, No 6, p. 1763-1768.
- [16] Weinstock J. Nonanalyticity of transport coefficients and the complete density expansion of momentum correlation function. // Phys. Rev., 1971, vol. 140, No 2, p. 460-465.
- [17] Enskog D. Kinetische Theorie der Wärmeleitung Reibung und Selbstdiffusion in gewissen verdichteten Gasen und Flüssigkeiten. // Kungl. Svenska Vet. Ak., Handt, 1992.
- [18] Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. М., ИЛ, 1960, 510 с.
- [19] Hanley H., McCarthy R., Cohen F. Analysis of the transport coefficients for simple dense fluids: application of the modified Enskog theory. // Physica, 1972, vol. 60, p. 322-356.
- [20] Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. М., Мир, 1976, 556 с.
- [21] Davis H.T., Rise S.A., Sengers J.V. On the kinetic theory of dense fluids. The fluid of rigid spheres with a square-well attraction. // J. Chem. Phys.,

- 1961, vol. 35, No 6, p. 2210-2233.
- [22] Grmela M., Rosen R., Garcia-Colin L.S. Compatibility of the Enskog theory with hydrodynamics. // *J. Chem. Phys.*, 1981, vol. 75, No 11, p. 5474-5484.
- [23] Ernst M.H., van Beijeren H. The modified Enskog equation. // *Physica*, 1973, vol. 68, No 3, p. 437-456.
- [24] Resibois P. *H*-theorem for the (modified) nonlinear Enskog equation. // *Phys. Rev. Lett.*, 1978, vol. 40, No 2, p. 1409-1411.
- [25] Resibois P. *H*-theorem for the (modified) nonlinear Enskog equation. // *J. Stat. Phys.*, 1978, vol. 19, No 6, p. 593-603.
- [26] Karkheck J., Stell G. Kinetic mean-field theories. // *J. Chem. Phys.*, 1981, vol. 75, No 3, p. 1475-1487.
- [27] Stell G., Karkheck J., van Beijeren H. Kinetic mean-field theories: Results of energy constraint in maximizing entropy. // *J. Chem. Phys.*, 1983, vol. 79, No 6, p. 3166-3167.
- [28] Токарчук М.В., Омелян І.П. Нормальные решения обобщенного уравнения Энского-Власова методом граничных условий. Труды Всесоюзной конференции "Современные проблемы статистической физики" (Львов, 1987). Киев, Наукова Думка, 1989, том 1, с. 245-252.
- [29] Leegwater J.A., van Beijeren H., Michels J.P.J. Linear kinetic theory of the square-well fluid. // *J. Phys.: Cond. Matter*, 1989, vol. 1, p. 237-255.
- [30] Karkheck J., van Beijeren H., de Schepper I.M. Kinetic theory and *H*-theorem for a dense square-well fluid. // *Phys. Rev. A*, 1985, vol. 32, No 4, p. 2517-2520.
- [31] Зубарев Д.Н., Морозов В.Г. Формулировка граничных условий к цепочке Боголюбова с учетом локальных законов сохранения. // *ТМФ*, 1984, том 60, No 2, с. 270-279.
- [32] Рудяк В.Я. К теории кинетических уравнений плотного газа. // *ЖТФ*, 1984, том 54, No 7, с. 406-420.
- [33] Рудяк В.Я. О выводе кинетического уравнения типа Энского для плотного газа. // *ТВТ*, 1985, том 23, No 2, с. 268-272.
- [34] Рудяк В.Я. Статистическая теория диссипативных процессов в газах и жидкостях. Новосибирск, Наука, 1987, 270 с.
- [35] Зубарев Д.Н., Морозов В.Г., Омелян І.П., Токарчук М.В. Объединение кинетического и гидродинамического подходов в теории плотных газов и жидкостей. Киев, 1988. / Препринт АН Украины, ИТФ-88-102Р, 25 с.
- [36] Зубарев Д.Н., Морозов В.Г., Омелян І.П., Токарчук М.В. Объединение кинетики и гидродинамики в теории явлений переноса. Сборн. научн. труд. ИТПМ СО АН СССР. Модели механики сплошных сред. Новосибирск, 1989, с. 34-51.
- [37] Токарчук М.В., Омелян І.П. Кинетическое уравнение для плотных систем с многоступенчатым межчастичным потенциалом. Н-теорема. Киев, 1989. / Препринт АН Украины, ИТФ-89-49Р, 40 с.
- [38] Зубарев Д.Н., Морозов В.Г., Омелян І.П., Токарчук М.В. Вывод ки-

- нетических уравнений для системы твердых шаров методом неравновесного статистического оператора. Киев, 1990. / Препринт АН Украины, ИТФ-90-11Р, 27 с.
- [39] Зубарев Д.Н., Морозов В.Г., Омелян І.П., Токарчук М.В. О кинетических уравнениях для плотных газов и жидкостей // *ТМФ*, 1991, том 87, No 1, с. 113-129.
- [40] Токарчук М.В., Омелян І.П. Модельні кінетичні рівняння для густих газів і рідин. // *УФЖ*, 1990, том 35, No 8, с. 970-975.
- [41] Зубарев Д.Н., Морозов В.Г., Омелян І.П., Токарчук М.В. Кинетическое уравнение Энского-Ландау для системы твердых заряженных шаров. // *Вопросы Атомной науки и техники. Серия: Ядерно-физические исследования (теория и эксперимент)*. Харьков, ХФТИ, 1992, вып. 3(24), с. 60-65.
- [42] Токарчук М.В., Омелян І.П., Кобрин О.Є. Кінетичне рівняння Енскаго-Ландау. Обчислення коефіцієнтів переносу для моделі заряджених твердих кульок. Львів, 1992. / Препринт АН України, ІФКС-1992-22У, 36 с.
- [43] Зубарев Д.Н., Морозов В.Г., Омелян І.П., Токарчук М.В. Объединение кинетического и гидродинамического подходов в теории плотных газов и жидкостей. // *ТМФ*, 1993, том 96, No 3, с. 325-350.
- [44] Kobryn A.E., Morozov V.G., Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. Enskog-Landau kinetic equation. Calculation of the transport coefficients for charged hard spheres. // *Physica A*, 1996, vol. 230, No 1&2, p. 189-201.
- [45] Lenard A. On Bogolubov's kinetic equation for a spatially homogeneous plasma. // *Ann. Phys.*, 1960, vol. 3, p. 390-401.
- [46] Balescu R. Irreversible processes in ionized gases. // *Phys. Fluids*, 1960, vol. 3, p. 52-71.
- [47] Зубарев Д.Н., Новиков М.Ю. Диаграмный метод построения решений цепочки уравнений Боголюбова. // *ТМФ*, 1974, том 18, No 1, с. 78-89.
- [48] Зубарев Д.Н., Новиков М.Ю. Ренормализованные кинетические уравнения для системы со слабым взаимодействием и для газа малой плотности. // *ТМФ*, 1974, том 19, No 2, с. 237-247.
- [49] Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. М., Наука, 1971, 415 с.
- [50] Зубарев Д.Н. Современные методы статистической теории неравновесных процессов. В кн.: *Итоги науки и техники. Современные проблемы математики*. М., ВИНТИ, 1980, том 15, с. 131-220.
- [51] Винер Н. Интеграл Фурье и некоторые его приложения. М., Физматгиз, 1963.
- [52] Диткин В.А., Кузнецов П.И. Справочник по операционному исчислению. М.-Л., Гостехиздат, 1951.
- [53] Barker J.A., Henderson D. Perturbation theory and equation of state for fluids. // *J. Chem. Phys.*, 1967, vol. 47, No 11, p. 4714-4721.
- [54] Weeks J.D., Chandler D., Andersen H.C. Role of repulsive forces in de-

- termining the equilibrium. // J. Chem. Phys., 1971, vol. 54, No 12, p. 5237-5246.
- [55] Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. Kinetic equation for liquids with a multi-step potential of interaction. *H*-theorem. // Physica A, 1996, to be published.
- [56] Юхновский И.Р., Головкин М.Ф. Статистическая теория классических равновесных систем. Киев, Наукова думка, 1980, 371 с.
- [57] Рудяк В.Я., Яненко Н.Н. Об учете молекулярных сил притяжения при выводе кинетических уравнений. // ТМФ, 1985, том 23, No 2, с. 268-272.
- [58] Рудяк В.Я. Кинетические уравнения неидеального газа с реальным потенциалом взаимодействия. // ЖТФ, 1987, том 87, No 8, с. 1466-1475.
- [59] Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика. М., Наука, 1979, 525 с.
- [60] Балеску Р. Статистическая механика заряженных частиц. М., Мир, 1967, 514 с.
- [61] Green H.S. The molecular theory of gases. Amsterdam, North-Holland, 1952, 264 p.
- [62] Боголюбов Н.Н. О стохастических процессах в динамических системах. // Физика ЭЧАЯ, 1978, том 9, No 4, с. 501-579. Bogolubov N.N. On the stochastic processes in the dynamical systems. / Preprint JINR-E17-10514, Dubna, 1977.
- [63] Ernst M.H., Dorfman J.R. // Physica, 1972, vol. 61, p. 157.
- [64] Эккер Г. Теория полностью ионизованной плазмы. М., Мир, 1974, 432 с.
-



Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Михайло Васильович Токарчук  
Ігор Петрович Омелян  
Олександр Євгенійович Кобрин

До ТЕОРІЇ КІНЕТИЧНИХ РІВНЯНЬ СИСТЕМ ВЗАЄМОДІЮЧИХ  
ЧАСТИНОК В МЕТОДІ НСО

Роботу отримано 11 жовтня 1996р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділом теорії нерівноважних процесів

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені