

## 15 Метод частичных функций распределения

Наряду с методом ансамблей Гиббса существует и другой – основанный на концепции частичных функций распределения. Этот метод имеет определенные преимущества при описании неидеальных равновесных систем, а также при анализе эволюции системы от неравновесного к равновесному состоянию.

### 15.1 Частичные функции распределения

Возвратимся к определению макроскопической величины  $B(\vec{r}, t)$ , соответствующей заданной микроскопической функции  $b(x_1, \dots, x_N; \vec{r})$ :

$$B(\vec{r}, t) = \langle b \rangle \equiv \int dx_1 \dots dx_N b(x_1, \dots, x_N) \varrho(x_1, \dots, x_N; t), \quad x_i \equiv (q_i, p_i). \quad (1)$$

Предполагаем, что реальные физические величины представляют такие  $b$ , которые симметричны относительно перестановок любых двух переменных  $b(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots) = b(\dots, x_j, \dots, x_i, \dots)$ . Любую функцию такого типа можно представить в виде разложения

$$b(x_1, \dots, x_N) = b_0 + \sum_{i=1}^N b_1(x_i) + \sum_{i_1=1}^N \sum_{i_2=1}^N b_2(x_{i_1} x_{i_2}) + \dots + b_N(x_1, \dots, x_N), \quad (2)$$

где  $b_k(x_{i_1}, \dots, x_{i_k})$  зависит только от фазовых переменных и несводимо к комбинации функций  $b_i$  с  $i < k$ , т. е. является неприводимой функцией. Определение (2) можно переписать в виде

$$b(x_1, \dots, x_N) = b_0 + \sum_i b_1(x_i) + \frac{1}{2} \sum_{i_1} \sum_{i_2 \neq i_1} b_2(x_{i_1} x_{i_2}) + \dots + b_N(x_1, \dots, x_N). \quad (3)$$

Реальный физический интерес представляют динамические функции, зависящие только от конечного числа неприводимых функций  $b_{k \leq s} \neq 0$ ,  $b_{k > s} \equiv 0$ . В качестве примера приведем две такие динамические функции:

1)  $n_1(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_N; \vec{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{q}_i - \vec{r})$  – плотность числа частиц; среднее значение плотности (макроскопическая плотность) –

$$\langle n_1 \rangle \equiv n_1(\vec{r}, t) = \int dX \sum_{i=1}^N \delta(\vec{q}_i - \vec{r}) \varrho(X, t), \quad X \equiv (x_1, \dots, x_N);$$

2)  $n_2(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_N; \vec{r}_1, \vec{r}_2) = (1/2) \sum_{i_1} \sum_{i_2 \neq i_1} \delta(\vec{q}_{i_1} - \vec{r}_1) \delta(\vec{q}_{i_2} - \vec{r}_2)$  – двухточечная плотность числа частиц; соответствующая макроскопическая величина –

$$\langle n_2 \rangle \equiv n_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \frac{1}{2} \int dX \sum_{i_1} \sum_{i_2 \neq i_1} \delta(\vec{q}_{i_1} - \vec{r}_1) \delta(\vec{q}_{i_2} - \vec{r}_2) \varrho(X, t).$$

В общем случае  $n_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \neq n_1(\vec{r}_1, t)n_1(\vec{r}_2, t)$ . Величину

$$g_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = n_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) - n_1(\vec{r}_1, t)n_1(\vec{r}_2, t)$$

называют двухчастичной корреляционной функцией;  $g_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \neq 0$  для систем с взаимодействием между частицами и  $g_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = 0$  для идеальных систем.

Найдем теперь фазовые средние членов ряда (3):

$$\begin{aligned} \langle b_0 \rangle &= b_0, \\ \langle b_1 \rangle &= \int dx_1 \cdots dx_N \sum_{i=1}^N b_1(x_i) \varrho(X, t) = N \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N b_1(x_1) \varrho(X, t) = \\ &= \int dx_1 b_1(x_1) f_1(x_1, t), \quad \dots, \\ \langle b_l \rangle &= \frac{1}{l!} \int dx_1 \cdots dx_N \sum_{i_1=1}^N \cdots \sum_{i_l=1}^N b_l(x_{i_1}, \dots, x_{i_l}) \varrho(X, t) = \\ &= \frac{N!}{(N-l)!l!} \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N b_l(x_{i_1}, \dots, x_{i_l}) \varrho(X, t) = \\ &= \frac{1}{l!} \int dx_1 \cdots dx_l b_l(x_1, \dots, x_l) f_l(x_1, \dots, x_l, t), \end{aligned} \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} f_1(x_1, t) &\equiv N \int dx_2 \cdots dx_N \varrho(X, t), \\ f_2(x_1, x_2, t) &\equiv N(N-1) \int dx_3 \cdots dx_N \varrho(X, t), \quad \dots, \\ f_l(x_1, \dots, x_l, t) &\equiv \frac{N!}{(N-l)!} \int dx_{l+1} \cdots dx_N \varrho(X, t), \end{aligned} \quad (5)$$

одно-, двух-, ...,  $l$ -частичная функции распределения, удовлетворяющие условию нормировки

$$\int f_l(x_1, \dots, x_l, t) dx_1 \cdots dx_l = \frac{N!}{(N-l)!}.$$

Таким образом, среднее от динамической функции  $b$  можно определить через набор частичных функций распределения  $f_l$  :

$$\langle b \rangle = \sum_{l=0}^N \frac{1}{l!} \int dx_1 \cdots dx_l b_l(x_1, \dots, x_l) f_l(x_1, \dots, x_l, t). \quad (6)$$

Если ввести  $N$ -мерные векторы  $\vec{f} \equiv (f_0, f_1, \dots, f_N)$ ,  $\vec{b} \equiv (b_0, b_1, \dots, b_N)$ , то основной постулат статистической физики можно записать компактно

$$B \equiv \langle b \rangle = (\vec{b}, \vec{f}), \quad (7)$$

где скалярное произведение  $(\vec{b}, \vec{f})$  понимается в смысле (6). Компоненты вектора распределения не являются независимыми, поскольку связаны соотношениями

$$\begin{aligned} f_l(x_1, \dots, x_l, t) &= \frac{N!}{(N-l)!} \int dx_{l+1} \cdots dx_N \varrho(X, t) = \\ &= \frac{(N-k)!}{(N-l)!} \int dx_{l+1} \cdots dx_k f_k(x_1, \dots, x_k, t), \quad (l \leq k \leq N), \end{aligned}$$

т. е. младшие частичные функции выражаются через старшие, но не наоборот.

Введенное описание с помощью частичных функций распределения эквивалентно описанию с помощью статистической функции распределения  $\varrho(x_1, \dots, x_N, t)$ , но для описания систем с взаимодействием этот метод обладает определенным преимуществом, особенно в двух крайних случаях – когда взаимодействие между частицами мало и когда плотность мала, а взаимодействие произвольно, но не приводит к образованию связанных состояний. Сама эквивалентность упомянутых подходов имеет место, поскольку это касается точных результатов. В большинстве же нетривиальных реальных задач можно найти лишь приближенное выражение либо для  $Z_N$ , либо для  $f_l$ , и здесь результаты могут существенно зависеть от метода.

## 15.2 Вычисление термодинамических величин с помощью частичных функций распределения

Рассмотрим классическую систему с гамильтонианом

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \mathcal{U}, \quad \mathcal{U} = \sum_{i<j} \phi(\vec{r}_i, \vec{r}_j).$$

Из определения (5) получим

$$f_1(\vec{r}_1, \vec{p}_1) = n(\vec{r}_1) f_M(\vec{p}_1), \quad (8)$$

где  $f_M(\vec{p}_1) = 1/(2\pi mkT)^{3/2} \exp(-\vec{p}_1^2/2mkT)$  – распределение Максвелла, а  $n(\vec{r}_1)$  – плотность числа частиц:

$$n(\vec{r}_1) = \frac{N}{V^N} \frac{1}{Q_N} \int d^3r_2 \cdots d^3r_N \exp \left[ -\beta \sum_{i<k} \phi(\vec{r}_i, \vec{r}_k) \right], \quad (9)$$

где  $Q_N$  – конфигурационный интеграл (см.(14.2)).

В пространственно однородной системе одночастичная функция распределения не зависит от  $\vec{r}$ , так как имеет место трансляционная инвариантность (инвариантность относительно сдвига на произвольный вектор  $\vec{a}$ ):  $f_1(\vec{r}_1, \vec{p}_1) = f_1(\vec{r}'_1, \vec{p}_1)$ , где  $\vec{r}'_1 = \vec{r}_1 + \vec{a}$ . Выбирая  $\vec{a} = -\vec{r}_1$ , получим  $n_1(\vec{r}_1) = n = \text{const}$ .

Найдем теперь двухчастичную функцию распределения

$$f_2(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_2) = \tilde{n}_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) f_M(\vec{p}_1) f_M(\vec{p}_2), \quad (10)$$

где

$$\tilde{n}_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{N(N-1)}{V^N Q_N} \int d^3r_3 \cdots d^3r_N \exp \left( -\beta \sum_{i<k} \phi(\vec{r}_i, \vec{r}_k) \right). \quad (11)$$

Для однородной системы удобно ввести функцию парного распределения  $n_2(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = n_2(r)$  соотношением

$$n_2(r) = \frac{\tilde{n}_2(r)}{n^2}, \quad (12)$$

а также парную корреляционную функцию  $g_2(r) = n_2(r) - 1$ . Точно так же введем  $k$ -частичную корреляционную функцию  $n_k(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_k) = \tilde{n}_k(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_k)/n^k$ :

$$f_k(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \dots, \vec{r}_k, \vec{p}_k) = \tilde{n}_k(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_k) f_M(\vec{p}_1) \cdots f_M(\vec{p}_k),$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{n}_k(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_k) &= \frac{N!}{(N-k)! V^N Q_N} \int d^3 r_{k+1} \cdots d^3 r_N \exp \left( -\beta \sum_{i < j} \phi(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \right) = \\ &= n^k n_k(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_k). \end{aligned} \quad (13)$$

Вычислим внутреннюю энергию этого газа. В соответствии с определением (2) имеем  $b_0 = 0$ ,  $b_1 = \bar{p}_1^2/2m$ ,  $b_2 = \phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ ,  $b_{k>2} \equiv 0$ , поэтому, используя (6), (8) (10)–(12), найдем

$$\begin{aligned} U &= \int d^3 r_1 d^3 p_1 \left( \frac{\bar{p}_1^2}{2m} \right) f_1(\vec{r}_1, \vec{p}_1) + \frac{1}{2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 d^3 p_1 d^3 p_2 \phi(r) f_2(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_2) = \\ &= nV \int d^3 p_1 \left( \frac{\bar{p}_1^2}{2m} \right) f_M(\vec{p}_1) + \frac{1}{2} \int d^3 p_1 d^3 p_2 f_M(\vec{p}_1) f_M(\vec{p}_2) \times \\ &\times \int d^3 r_1 d^3 r_2 \phi(r) \tilde{n}_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{3}{2} NkT + \frac{n^2}{2} V \int d^3 r \phi(r) n_2(r). \end{aligned}$$

Чтобы получить выражение для давления, воспользуемся методом Боголюбова. Пусть

$$G(V) = \int d^3 r_1 \cdots d^3 r_N g(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N).$$

Выполним масштабное преобразование  $\vec{r}_i \rightarrow \lambda \vec{r}_i$ , ( $i = \overline{1, N}$ ):

$$G(\lambda^3 V) = \int \lambda^3 d^3 r_1 \cdots \lambda^3 d^3 r_N g(\lambda \vec{r}_1, \dots, \lambda \vec{r}_N).$$

Обозначив  $y = \lambda^3 V$ , найдем

$$\frac{\partial G(\lambda^3 V)}{\partial V} = \frac{\partial G(y)}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial V} = \lambda^3 \frac{\partial G(y)}{\partial y}, \quad \frac{\partial G(\lambda^3 V)}{\partial \lambda} = \frac{\partial G(y)}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \lambda} = 3\lambda^2 V \frac{\partial G(y)}{\partial y};$$

$$\frac{\partial G(\lambda^3 V)}{\partial V} = \frac{\lambda}{3V} \frac{\partial G(\lambda^3 V)}{\partial \lambda},$$

и при  $\lambda \rightarrow 1$

$$\frac{\partial G(V)}{\partial V} = \frac{1}{3V} \frac{\partial G(\lambda^3 V)}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=1}. \quad (14)$$

Применим последнее для вычисления давления, используя (11) и (12):

$$P = kT(\partial/\partial V) \ln Z_N = (kT/Z_N)\partial Z_N/\partial V = nkT + (kT/Q_N)\partial Q_N/\partial V;$$

$$Q_N(T, \lambda^3 V) = \frac{\lambda^{3N}}{(\lambda^3 V)^N} \int d^3 r_1 \cdots d^3 r_N \exp \left[ -\frac{1}{kT} \sum_{i < j} \phi(\lambda |\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \right],$$

$$\frac{\partial Q_N}{\partial \lambda} = -\frac{Q_N n^2 V}{2kT} \int d^3 r \frac{d\phi(\lambda r)}{d(\lambda r)} r n_2(\lambda r).$$

Подставляя (14) (см. также (14.8)), найдем:

$$P = nkT - \frac{2\pi n^2}{3} \int_0^\infty dr \frac{d\phi(r)}{dr} r^3 n_2(r).$$

Для системы невзаимодействующих частиц  $\phi(r) \equiv 0$ ,  $n_2(r) = 1$ , и мы получим уравнение состояния идеального газа. Каноническое распределение в этом случае есть произведение одночастичных функций

$$\varrho_N = \frac{1}{N^N} \prod_{i=1}^N f_1(\vec{r}_i, \vec{p}_i),$$

и при  $N \gg 1$ ,  $N! \simeq N^N$ , имеем поэтому:

$$f_2(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_2) = n^2 f_M(\vec{p}_1) f_M(\vec{p}_2) = f_1(\vec{r}_1, \vec{p}_1) f_1(\vec{r}_2, \vec{p}_2),$$

$$f_l(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \dots, \vec{r}_l, \vec{p}_l) = \prod_{i=1}^l f_1(\vec{r}_i, \vec{p}_i), \quad (15)$$

что означает отсутствие корреляций частиц в идеальных газах.

Найдем выражение для энтропии идеальной системы исходя из определения

$$S = -k \int dX \varrho_N(X) \ln \varrho_N(X) :$$

$$S = -k \int dX \varrho_N(X) \left[ \sum_{i=1}^N \ln f_1(\vec{r}_i, \vec{p}_i) - N \ln N \right] =$$

$$= -k \int d^3 r d^3 p f_1(\vec{r}, \vec{p}) \ln f_1(\vec{r}, \vec{p}) + kN \ln N, \quad (16)$$

где мы воспользовались первым соотношением из (4), положив  $b_1 = \ln f_1$ . Выражение (16) с точностью до постоянной  $S_0 = kN \ln N$  совпадает с формулой для энтропии, впервые полученной Л. Больцманом (1872):

$$S = -k \int d^3r d^3p f_1(\vec{r}, \vec{p}) \ln f_1(\vec{r}, \vec{p}). \quad (17)$$

### 15.3 Цепочка уравнений ББГКИ

Рассмотрим классическую систему из  $N$  точечных частиц с попарным взаимодействием  $\phi_{ik} \equiv \phi(\vec{r}_i, \vec{r}_k)$ , находящуюся в объеме  $V$  под действием внешнего поля  $U^{\text{BH}} = \sum_i u_i^{\text{BH}}$ . Функция Гамильтона такой системы есть

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_k \sum_{i < k} \phi_{ik} + \sum_{i=1}^N u_i^{\text{BH}}. \quad (18)$$

Эволюция такой системы описывается уравнением Лиувилля

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} = \hat{L} \varrho, \quad (19)$$

где  $\hat{L}$  – оператор Лиувилля:

$$\hat{L} = \sum_i \left[ (\vec{\nabla}_i H) \vec{\partial}_i - (\vec{\partial}_i H) \vec{\nabla}_i \right] = \sum_i \hat{L}_i^0 + \sum_i \sum_{k > i} \hat{L}_{ik} + \sum_i \hat{L}_i^{\text{BH}}. \quad (20)$$

В (20) введены обозначения:

$$\vec{\nabla}_i \equiv \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i}, \quad \vec{\partial}_i \equiv \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i}, \quad \partial_t \equiv \frac{\partial}{\partial t};$$

и

$$\begin{aligned} \hat{L}_i^0 &= -\frac{\vec{p}_i}{m} \vec{\nabla}_i, \quad \hat{L}_{ik} = \vec{\nabla}_i \phi_{ik} (\vec{\partial}_i - \vec{\partial}_k) = \vec{\nabla}_i \phi_{ik} \vec{\partial}_{ik}, \\ \hat{L}_i^{\text{BH}} &= \vec{\nabla}_i u_i^{\text{BH}} \vec{\partial}_i - \vec{\partial}_i u_i^{\text{BH}} \vec{\nabla}_i. \end{aligned} \quad (21)$$

(В (21) учтена симметрия  $\phi_{ik} = \phi_{ki}$ ,  $\vec{\nabla}_i \phi_{ik} = -\vec{\nabla}_k \phi_{ik}$ .) В этих обозначениях уравнение Лиувилля имеет вид

$$\partial_t \varrho = \sum_i (\hat{L}_i^0 + \hat{L}_i^{\text{BH}}) \varrho + \sum_i \sum_{k > i} \hat{L}_{ik} \varrho. \quad (22)$$

Проинтегрировав (22) по  $d^3r_{l+1}d^3p_{l+1}\cdots d^3r_Nd^3p_N$ , получим:

$$\partial_t f_l = \frac{N!}{(N-l)!} \int d^3r_{l+1}d^3p_{l+1}\cdots d^3r_Nd^3p_N \left[ \sum_i (\hat{L}_i^0 + \hat{L}_i^{\text{BH}}) \varrho + \sum_i \sum_{k>i} \hat{L}_{ik} \varrho \right]. \quad (23)$$

Из  $\int dX \varrho(X, t) = 1$  следует  $\partial_t \int dX \varrho(X, t) = 0$ , поэтому

$$\int dx_1 \cdots dx_N \left[ \sum_i (\hat{L}_i^0 + \hat{L}_i^{\text{BH}}) + \sum_i \sum_{k>i} \hat{L}_{ik} \right] \varrho = 0,$$

т. е.

$$\int d^3r_i d^3p_i \hat{L}_i^0 \varrho = \int d^3r_i d^3p_i \hat{L}_i^{\text{BH}} \varrho = \int d^3r_i d^3p_i d^3r_k d^3p_k \hat{L}_{ik} \varrho = 0. \quad (24)$$

(Последнее можно проверить непосредственным вычислением:

$$\int d^3r_i \nabla_i \varrho = 0, \quad \int d^3p_i \vec{\partial}_i \varrho = 0,$$

так как на границах области фазового пространства  $\varrho$  вместе с производными обращается в нуль.)

Рассмотрим 1-й член в квадратных скобках равенства (23)

$$\sum_i (\hat{L}_i^0 + \hat{L}_i^{\text{BH}}) \varrho = \sum_{i=1}^l (\hat{L}_i^0 + \hat{L}_i^{\text{BH}}) \varrho + \sum_{i=l}^N (\hat{L}_i^0 + \hat{L}_i^{\text{BH}}) \varrho :$$

Первое слагаемое здесь не затрагивается интегрированием, поэтому дифференциальный оператор можно написать перед интегралом; второе же слагаемое в силу (24) дает нуль. Поэтому

$$\frac{N!}{(N-l)!} \int dx_{l+1} \cdots dx_N \sum_{i=1}^N (\hat{L}_i^0 + \hat{L}_i^{\text{BH}}) \varrho = \sum_{i=1}^l (\hat{L}_i^0 + \hat{L}_i^{\text{BH}}) f_l(x_1, \cdots, x_l, t). \quad (25)$$

Для последнего члена в (23) имеется три возможности:

1)  $i \in (1, \dots, l)$ ,  $k \in (1, \dots, l)$ , тогда оператор  $\hat{L}_{ik}$  выносится из-под интеграла;

2)  $i \in (l+1, \dots, N)$ ,  $k \in (l+1, \dots, N)$ , и интеграл в силу (24) обращается в нуль;



3)  $i \in (1, \dots, l)$ ,  $k \in (l+1, \dots, N)$ , тогда

$$\begin{aligned}
\frac{N!}{(N-l)!} \int dx_{l+1} \cdots dx_N \sum_{i=1}^l \sum_{k=l+1}^N \hat{L}_{ik} \varrho &= \frac{N!(N-l)}{(N-l)!} \sum_{i=1}^l \int dx_{l+1} \cdots dx_N \hat{L}_{il+1} \varrho = \\
&= \sum_{i=1}^l \int dx_{l+1} \hat{L}_{il+1} \frac{N!}{(N-l-1)!} \int dx_{l+2} \cdots dx_N \varrho = \\
&= \sum_{i=1}^l \int dx_{l+1} \hat{L}_{il+1} f_{l+1}(x_1, \dots, x_{l+1}, t). \tag{26}
\end{aligned}$$

Подставляя (25) и (26) в (23), получим систему зацепляющихся уравнений для частичных функций распределения ( $l = \overline{1, N-1}$ )

$$\partial_t f_l - \sum_{i=1}^l (\hat{L}_i^0 + \hat{L}_i^{\text{BH}}) f_l - \sum_i \sum_{k>i} \hat{L}_{ik} f_l = \sum_{i=1}^l \int dx_{l+1} \hat{L}_{il+1} f_{l+1}(x_1, \dots, x_{l+1}, t), \tag{27}$$

Система уравнений (27) носит название цепочки Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона (ББГКИ). Предполагается, что (27) имеет место и в термодинамическом пределе ( $N \rightarrow \infty$ ,  $V \rightarrow \infty$ ,  $N/V = n < \infty$ ), когда цепочка становится бесконечной. Первое уравнение цепочки ( $k = 1$ ) имеет вид

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{\vec{p}_1}{m} \vec{\nabla}_1 f_1 - \vec{\nabla}_1 u_1^{\text{BH}} \frac{\partial f_1}{\partial \vec{p}_1} = \int d^3 r_2 d^3 p_2 \vec{\nabla}_1 \phi_{12}(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|) \frac{\partial f_2}{\partial \vec{p}_1}. \tag{28}$$

Цепочка ББГКИ сама по себе эквивалентна уравнению Лиувилля, но в отличии от последнего в (27) при наличии тех или иных малых параметров имеется возможность оборвать цепочку и свести задачу к решению замкнутой системы уравнений для нескольких первых функций распределения. В основу обрыва цепочки ББГКИ можно положить принцип ослабления корреляции Боголюбова, отражающий то обстоятельство, что корреляции различных групп частиц убывают с увеличением расстояния между этими группами:

$$f_l(x_1, \dots, x_l, t) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} f_k(x_1, \dots, x_k, t) f_s(x_{k+1}, \dots, x_l, t), \quad k + s = l.$$

В частности, условие для двухчастичной функции распределения

$$f_2(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_2, t) \xrightarrow{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1| \rightarrow \infty} f_1(\vec{r}_1, \vec{p}_1, t) f_1(\vec{r}_2, \vec{p}_2, t)$$

позволяет получить замкнутое уравнение (но уже нелинейное !) для  $f_1$  с интегралом столкновения в правой части – кинетическое уравнение Больцмана.

Упрощение описания связано с различным характером зависимости от времени многочастичных и одночастичной функций распределения. Именно на начальном этапе эволюции системы, когда  $t$  мало по сравнению с некоторым характерным временем хаотизации  $\tau_0$ ,  $f_l$  претерпевает очень быстрые изменения, тогда как одночастичная функция при этом практически не изменяется:  $f_1$  существенно изменяется только за время, сравнимое со средним временем между столкновениями частиц  $\tau_c$  ( $\tau_0 \ll \tau_c$ ). На этой стадии, которую называют кинетической ( $\tau_0 \ll t \ll \tau_c$ ), быстро изменяющаяся функция  $f_l$  успевает ”подстроиться” к каждому мгновенному значению  $f_1$ , т. е.  $f_l$  становится функционалом одночастичной функции:

$$f_l(x_1, \dots, x_l, t) \xrightarrow{\tau_0 \ll t \ll \tau_c} f_l(x_1, \dots, x_l | f_1(x_1, t)) \equiv \Phi,$$

и зависимость  $f_l$  от времени определяется только зависимостью  $f_1$  от  $t$ . Функционал  $\Phi$  является универсальным и не зависит от начальных условий для  $f_l$ .

При нормальных условиях для систем с малой плотностью время столкновения  $\tau_0 \simeq 10^{-12}$  с, между столкновениями –  $\tau_c \simeq 10^{-9} \div 10^{-10}$  с, и на кинетической стадии мы имеем два малых параметра:  $\tau_0/\Delta t \ll 1$  и  $\Delta t/\tau_c \ll 1$ . Соответствующие  $\tau_0$  и  $\tau_c$  пространственные масштабы есть радиус корреляции  $r_0$  и длина свободного пробега  $\ell_c$ , и при  $r_0 \ll \Delta r \ll \ell_c$  имеем еще два малых параметра:  $r_0/\Delta r \ll 1$  и  $\Delta r/\ell_c \ll 1$ . Пара малых параметров  $\tau_0/\Delta t$ ,  $r_0/\Delta r$  допускает возможность сглаживания быстрых и мелкомасштабных движений на интервалах  $\Delta t$  и  $\Delta r$ . Таким образом, на кинетической стадии мы имеем дело не с ”точной”  $f_1$ , а с ”огрубленной” (сглаженной) одночастичной функцией распределения.

Для разреженного газа выберем в качестве независимых параметров  $r_0$  и  $\bar{r} \sim n^{-1/3}$  – среднее расстояние между частицами. Условие  $r_0 \ll \bar{r}$  дает безразмерный малый параметр  $\xi = nr_0^3 \ll 1$ . Например, воздух при нормальных условиях является разреженным газом:  $\xi \sim 10^{-4}$ .

Если выполняется еще одно условие:  $\ell_c \ll L$  ( $L$  – размер системы)

и  $\tau_c \ll t_L$  ( $t_L$  – время прохождения частицей всего сосуда), то возможно дальнейшее упрощение описания благодаря наличию еще одного малого параметра  $\alpha = \ell_c/L \ll 1$  – газодинамического или параметра Кнудсена. Такую стадию эволюции системы называют гидродинамической (газодинамической): для описания состояния системы не нужна даже сама одночастичная функция, а достаточно знать локальные плотность числа частиц  $n(\vec{r}, t)$ , скорость газа  $v(\vec{r}, t)$  и температуру  $\theta(\vec{r}, t)$ .

Итак, мы подошли к задачам неравновесной статистической физики или кинетической теории. К ним относят

- нахождение уравнений, определяющих изменение частичных функций распределения в пространстве и во времени;
- установление связей между функциями распределения и макроскопическими величинами (потоками);
- описание процессов переноса в макроскопических системах;
- получение равновесных решений.