16/II-70.

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р4 - 4886

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Д.Н. Зубарев

НЕРАВНОВЕСНЫЕ СТАТИСТИЧЕСКИЕ ОПЕРАТОРЫ И КВАЗИСРЕДНИЕ В ТЕОРИИ НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ

1970

8198/2 пр

Р4 - 4886

Д.Н. Зубарев

НЕРАВНОВЕСНЫЕ СТАТИСТИЧЕСКИЕ ОПЕРАТОРЫ И КВАЗИСРЕДНИЕ В ТЕОРИИ НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ

Направлено в сборник "Статистическая механика и квантовая теория поля"
(Изд. "Наука")

1. Введение

В равновесной статистической механике очень большое значение имеет идея Н.Н.Боголюбова о "квазисредних"[1,2]. Согласно этой идее бесконечно малые возмущения могут оказывать существенное влияние на систему, если они нарушают какую-либо симметрию, снимая вырождение (или квазивырождение). Они могут дать конечные эффекты при условии их стремления к нулю после термодинамического предела. Представление о квазисредних оказывается очень полезным в теории сверхпроводимости[2], сверхтекучести, ферромагнетизма и антиферомагнетизма[3,4] и вообще в теории фазовых переходов[5]. Оно тесно связано с идеями Голдстоуна о "нарушенной симметрии"[6].

В этой работе мы покажем, что нарушающие симметрию возмущения и идея квазисредних очень важны и для теории необратимых процессов. Метод построения неравновесного статистического оператора, предложенный в работах[7,8], можно сделать гораздо более ясным, если воспользоваться представлением о квазисредних. Для построения неравновесного статистического оператора будут рассматриваться бесконечно малые возмущения, нарушающие симметрию уравнения Лиувилля относительно обращения времени, которые будут стремиться к нулю после термодинамического предела. Другая идея, которая будет использована при построении неравновесного статистического оператора - идея Н.Н.Боголюбова об иерархии времен релаксации и о сокращении в описании неравновесного процесса в зависимости от интересующих нас масштабов времени с их ростом[9].

В неравновесных процессах можно рассматривать в зависимости от интересующих нас масштабов времени различные стадии, которые требуют различного описания. Существование этих стадий проще всего пояснить на примере газа средней плотности. В этом случае время межмолекулярного взаимодействия (или время столкновения) значительно меньше времени свободного пробега (или промежутка между столкновениями), которое, в свою очередь, значительно меньше времени макроскопической релаксации во всем объеме системы. На существовании этих различных масштабов времени основана вся теория неравновесных процессов в газах, разработанная Н.Н.Боголюбовым[9] (обсуждение идей Н.Н.Боголюбова см. в приложении Уленбека к книге[10]).

Можно различить три стадии неравновесного процесса в газе.

В начальной стадии, если мы интересуемся состоянием системы для масштабов времени, меньших времени столкновения, состояние газа существенно зависит от начального, и для описания неравновесного процесса нужно задать большое число функций распределения.

Для масштабов времени, больших времени столкновения, имеет место кинетическая стадия, когда начальное состояние оказывается несущественным, система о нем "забывает" и происходит сокращение в ее описании. Для описания ее состояния уже достаточно одночастичной функции распределения, а остальные функции распределения высших порядков зависят от времени лишь через одночастичную. Процесс установления такого состояния называется, по терминологии Н.Н.Боголюбова, "синхронизацией" функций распределения. Для кинетической стадии возможно построение кинетического уравнения Больцмана для одночастичной функции распределения[9].

Для масштабов времени, больших времени свободного пробега, наступает гидродинамическая стадия неравновесного процесса, на которой происходит дальнейшее сокращение в описании состояния системы. Для описания состояния в этой стадии достаточно набора простых гидродинамических параметров: температуры, химического потенциала и массовой скорости, или средних плотностей энергии, числа частиц и импульса. Для гидродинамической стадии возможно построение уравнений гидродинамики, т.е. уравнений теплопроводимости, диффузии и уравнений Навье-Стокса для переноса импульса.

Для жидкости ситуация значительно более сложная и вообще теряет смысл концепция парных соударений, а следовательно, и понятия времени столкновения и времени свободного пробега. Вместо этих величин выступают времена корреляции между динамическими переменными, описывающими состояние системы. Для неравновесных процессов в жидкости можно различить начальную стадию, требующую для описания большого числа функций распределения, и гидродинамическую стадию, для описания которой достаточно набора гидродинамических параметров (температуры, химического потенциала и массовой скорости). Последняя наступает в том случае, если характерные времена изменения гидродинамических параметров значительно больше времени корреляции между динамическими переменными, описывающими состояние системы. Для гидродинамической стадии неравновесного процесса в жидкости возможно построение уравнений гидродинамики.

Метод неравновесного статистического оператора (НСО)[7,8] был применен многими авторами к различным задачам теории необратимых процессов как для гидродинамической, так и для кинетической стадии в твердых телах, жидкостях и газах [11-28]. В работе В.П.Калашникова и автора [29] предложен еще один очень простой вариант метода НСО. Основная идея метода НСО состоит в том, что для не слишком малых масштабов времени для описания неравновесного состояния системы достаточно некоторого набора параметров $F_m(t)$ и можно найти такое частное решение уравнения Лиувилля

$$\frac{\partial \rho(t,0)}{dt} + \frac{1}{ih}[\rho(t,0),H] = 0, \tag{1}$$

которое зависит от времени лишь через $F_m(t)$. Первый аргумент $\rho(t,0)$ указывает на неявную зависимость от времени. Далее в разделе 3 будет пояснено, в каком смысле мы будем понимать решения уравнения (1).

Уравнение Лиувилля (1) можно записать в виде

$$\frac{d\rho(t,t)}{dt} = 0, \tag{1a}$$

где

$$\rho(t,t) = e^{-\frac{Ht}{ih}} \rho(t,0) e^{\frac{Ht}{ih}}, \tag{1б}$$

гамильтониан H не зависит от времени.

Если H зависит от времени, то

$$\rho(t,t) = U^{+}(t,0)\rho(t,0)U(t,0),$$

где $U(t,0)$ – оператор эволюции, удовлетворяющий уравнению

$$ih\frac{\partial U(t,0)}{dt} = HU(t,0), \; U(0,0) = 1.$$

Покажем, что если статистический оператор $\rho(t,0)$ удовлетворяет уравнению Лиувилля, то он совпадает с

$$\widetilde{\rho(t,0)} = \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt' \, e^{\epsilon t'} \rho(t+t', t') \tag{2}$$

при любом $\epsilon > 0$ x/.

Действительно, интегрируя (2) по частям, получим

$$\widetilde{\rho(t,0)} = \rho(t,0) - \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} \frac{d\rho(t+t', t')}{dt'},$$

(2а)

$$\widetilde{\rho(t,t)} = \rho(t,t) - \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} \frac{d\rho(t+t', t+t')}{dt'},$$

откуда следует, что если ρ удовлетворяет (1а), то

$$\widetilde{\rho(t,0)} = \rho(t,0), \tag{2б}$$

т.е. операция (2) оставляет инвариантным решение уравнения Лиувилля /29/

Справедливо и обратное утверждение: если оператор $\rho(t,0)$ удовлетворяет (2б), то он удовлетворяет и уравнению Лиувилля, следовательно, (2б) есть интегральная форма уравнения Лиувилля. Операция

---

x/ Операция (2) есть хорошо известное преобразование Лапласа-Карсона от $\rho(t-t', -t')$, рассматриваемого как функция t'.

$$\epsilon \int_{0}^{\infty} dt' e^{-\epsilon t'} \rho(t+t', t') \qquad (3)$$

также оставляет инвариантным решение уравнения Лиувилля, но, как мы убедимся далее, оно менее удобно, чем (2).

Логарифм статистического оператора, удовлетворяющего уравнению Лиувилля $\rho(t,0)$, также удовлетворяет уравнению Лиувилля, следовательно,

$$\ln \rho(t,0) = \widetilde{\ln \rho(t,0)} = \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} \ln \rho(t+t', t'). \qquad (4)$$

Если операцию (2) над произвольным $\rho(t,0)$ применить n раз, а затем устремить n к бесконечности, то в пределе получим точное решение уравнения Лиувилля [29]. Действительно, обозначая n -кратную операцию (2) индексом n над волнистой чертой, получим

$$\lim_{n\to\infty} \frac{d}{dt} \overset{n}{\widetilde{\rho(t,0)}} = \lim_{n\to\infty} \epsilon\left(\overset{n-1}{\widetilde{\rho(t,0)}} - \overset{n}{\widetilde{\rho(t,0)}} \right) = 0$$

при любом ϵ, если существует $\lim_{n\to\infty} \overset{n}{\widetilde{\rho(t,0)}}$. Полная производная по времени означает операцию (1a), которая использована при записи уравнения Лиувилля, при втором аргументе, равном нулю.

Операция (2) при $\epsilon \to 0$ означает взятие инвариантной части относительно эволюции с гамильтонианом H и будет далее использована при построении НСО, однако мы будем устремлять ϵ к нулю лишь после термодинамического предельного перехода, поэтому операцию (2) при таком стремлении ϵ к нулю лучше называть "операцией взятия квазиинвариантной части".

Пусть сокращенный набор переменных, от которых может зависеть $\rho(t,0)$, представляет собой совокупность средних значений некоторых операторов P_m, где m – индекс, который может принимать как непрерывные, так и дискретные значения. В зависимости от выбора параметров P_m такой подход возможен как в гидродинамической, так и в кинетической стадии. Для описания гидродинамической стадии неравновесного процесса в качестве операторов P_m нужно выбрать плотности энергии, импульса и числа частиц $H(x)$, $\vec{p}(x)$, $n(x)$. Для описания кинетической стадии в качестве P_m можно выбрать числа заполнения одночастичных состояний.

2. Квазиравновесное или локально равновесное распределение

Квазиравновесный (или локально равновесный) статистический оператор соответствует экстремальному значению информационной энтропии

$$S = - Sp(\rho \ln \rho) \tag{5}$$

при дополнительных условиях постоянства

$$Sp(\rho P_m) = \langle P_m \rangle^t \tag{5а}$$

и при сохранении нормировки

$$Sp\,\rho = 1. \tag{5б}$$

Условный экстремум функционала (5) соответствует безусловному экстремуму функционала

$$\mathfrak{L}(\rho) = -\operatorname{Sp}(\rho \ln \rho) - \sum_m F_m \operatorname{Sp}(\rho P_m) - (\Phi - 1)\operatorname{Sp}\rho, \qquad (6)$$

где F_m, $(\Phi-1)$ – лагранжевы множители.

Из условия $\delta \mathfrak{L}(\rho) = 0$ найдем квазиравновесный (или локально равновесный) статистический оператор

$$\rho_\ell = \exp\{-\Phi - \sum_m P_m F_m(t)\} \equiv \exp\{-S(t,0)\},$$

$$\Phi = \ln \operatorname{Sp}\exp\{-\sum_m P_m F_m(t)\}, \qquad (7)$$

где $S(t,0)$ можно назвать "оператором энтропии", т.к. $\langle S(t,0)\rangle = S$ есть энтропия.

В частном случае гидродинамического режима

$$F_0(x,t) = \beta(x,t), \qquad P_0(x) = H(x),$$

$$F_1(x,t) = -\beta(x,t)\vec{v}(x,t), \qquad P_1(x) = \vec{p}(x), \qquad (8)$$

$$F_2(x,t) = -\beta(x,t)\left(\mu(x,t) - \frac{m}{2}v^2(x,t)\right), \quad P_2(x) = n(x),$$

где $\beta^{-1}(x,t)$ – температура, $\mu(x,t)$ – химический потенциал, $\vec{v}(x,t)$ – массовая скорость.

Квазиравновесный статистический оператор обеспечивает удовлетворение термодинамических равенств

$$\frac{\delta \Phi}{\delta F_m(t)} = -\langle P_m \rangle_\ell^t \ ,$$
$$\frac{\delta S}{\delta \langle P_m \rangle_\ell^t} = F_m(t), \qquad (9)$$

где $\langle \ldots \rangle_\ell^t = \mathrm{Sp}(\rho_\ell \ldots)$, но не удовлетворяет уравнению Лиувилля и не описывает неравновесных процессов. Несмотря на это, методы теории информации оказываются очень полезными в статистической механике[30-32].

3. Неравновесный статистический оператор[7,8]

Неравновесный статистический оператор получим из квазиравновесного (7), применив к его логарифму операцию взятия квазиинвариантной части (2), которая обсуждалась во введении (см.[9],[10])

$$\rho = \exp\{\widetilde{\ell n\, \rho_\ell(t,0)}\} = \exp\{\epsilon \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} e^{-\frac{t'H}{ih}} \ell n\, \rho_\ell(t+t',0)\, e^{\frac{t'H}{ih}}\} =$$

$$= \exp\{-\widetilde{S(t,0)}\} = \exp\{-\epsilon \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} S(t+t',t')\} = \qquad (10)$$

$$= \exp\{-S(t,0) + \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} \dot{S}(t+t',t')\},$$

где

$$S(t,0) = \Phi + \sum_m P_m(0)\, F_m(t),$$

$$\dot{S}(t,0) = \frac{\partial S(t,0)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[S(t,0), H],$$ (11)

$$\dot{S}(t,t') = e^{-\frac{t'H}{i\hbar}}\, \dot{S}(t,0)\, e^{\frac{t'H}{i\hbar}},$$

$\epsilon \to +0$ после термодинамического предела. Оператор (11) можно назвать "оператором производства энтропии", т.к. его среднее значение дает производство энтропии.

Параметры $F_m(t)$ выбираем из условия, чтобы средние величины P_m, вычисленные с НСО (10), совпадали с их средними по квазиравновесному распределению (7)

$$\langle P_m \rangle^t = \langle P_m \rangle_\ell^t,$$ (12)

где $\langle \ldots \rangle^t = Sp(\rho \ldots)$. Тогда $\langle P_m \rangle^t$ и $F_m(t)$ становятся сопряженными параметрами, т.к.

$$\frac{\delta \Phi}{\delta F_m(t)} = -\langle P_m \rangle_\ell^t = -\langle P_m \rangle^t.$$ (13)

Условие (13) гарантирует также нормировку НСО (10), если квазиравновесный статистический оператор (7) нормирован /8/.

Для сохранения нормировки после операции (2) необходимо, чтобы

$$\tilde{\tilde{\Phi}} = \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt' \, e^{\epsilon t'} \, \Phi(t + t'), \tag{14}$$

где

$$e^{\tilde{\tilde{\Phi}}} = \mathrm{Sp} \exp\{ -\sum_m P_m F_m(t) \} \tag{14a}$$

– нормирующий множитель НСО (10). Вычисляя вариацию левой и правой частей (14), получим соответственно выражения

$$\delta\tilde{\tilde{\Phi}} = -\epsilon \int_{-\infty}^{0} dt' \, e^{\epsilon t'} \sum_m \langle P_m(t') \rangle^{t} \, \delta F_m(t + t'),$$

$$\epsilon\delta \int_{-\infty}^{0} dt' \, e^{\epsilon t'} \, \Phi(t + t') = -\epsilon \int_{-\infty}^{0} dt' \, e^{\epsilon t'} \sum_m \langle P_m \rangle^{t+t'} \, \delta F_m(t + t'),$$

которые совпадают в силу (12). НСО (10) в некотором смысле удовлетворяет уравнению Лиувилля при $\epsilon \to 0$. В самом деле,

$$\frac{\partial \ln\rho}{\partial t} + \frac{1}{ih}[\ln\rho, H] = -\epsilon \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} \dot{S}(t + t', t') = -\epsilon(\ln\rho - \ln\rho_\ell), \tag{15}$$

причем правая часть (15) такая же, как и второй член в экспоненте НСО (10), но с дополнительным множителем ϵ.

Чтобы уточнить, в каком смысле ρ удовлетворяет уравнению Лиувилля при $\epsilon \to 0$, вычислим

$$\frac{d\rho(t,t)}{dt} = \frac{d}{dt}\exp\{-\epsilon\int\limits_{-\infty}^{0} dt'e^{\epsilon t'} S(t+t',t+t')\} =$$

$$= -\epsilon\int\limits_{-\infty}^{0} dt'e^{\epsilon t'}\int\limits_{0}^{1} d\tau\, e^{-\tau \widetilde{S(t,t)}}\dot{S}(t+t',t+t')e^{(\tau-1)\widetilde{S(t,t)}}, \qquad (16)$$

т.к. для произвольного оператора $A(t)$

$$\frac{d}{dt}e^{A(t)} = \int\limits_{0}^{1} d\tau\, e^{\tau A(t)}\frac{dA(t)}{dt}e^{-(\tau-1)A(t)}, \qquad (17)$$

что легко доказать, разлагая экспоненту в ряд по малому приращению до линейных членов с учетом некоммутативности $A(t)$ и его приращения.

Правая часть уравнения (16) стремится к нулю при $\epsilon\to 0$, если $\dot{S}(-\infty,-\infty)=0$, что видно из теоремы Абеля x/, которая справедлива, если существует предел подинтегрального выражения в (16) при $t'\to-\infty$. Это рассуждение не является строгим, т.к. ϵ можно устремить к нулю лишь после термодинамического предельного перехода. Приведем более строгое доказательство, показывающее, в каком смысле $\rho(t,0)$ удовлетворяет уравнению Лиувилля при $\epsilon\to 0$. С учетом (15) уравнение (16) запишем в виде

$$\frac{\partial\rho(t,0)}{\partial t} + \frac{1}{ih}[\rho(t,0),H] =$$

$$= -\epsilon\int\limits_{-\infty}^{0} dt'e^{\epsilon t'}\int\limits_{0}^{1} d\tau\, e^{-\tau\widetilde{S(t,0)}}\dot{S}(t+t',t')e^{(\tau-1)\widetilde{S(t,0)}}. \qquad (16a)$$

---

x/ Теорема Абеля состоит в том, что

$$\lim_{\epsilon\to 0}\epsilon\int\limits_{-\infty}^{0} e^{\epsilon t} f(t)dt = \lim_{t\to-\infty} f(t),$$

если этот предел существует.

Вычисляя шпур от левой и правой частей этого уравнения, получим

$$\frac{\partial}{\partial t} Sp\,\rho(t,0) = -\epsilon \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} < \dot{S}(t+t', t') > = -\lim_{t' \to -\infty} < \dot{S}(t+t',t') >,$$

$$<\ldots> = Sp(\rho(t,0)\,,\ldots,), \quad \rho(t,0) = e^{-\widetilde{S(t,0)}}, \tag{17}$$

где воспользовались теоремой Абеля и циклической перестановкой операторов под знаком шпура. Для того, чтобы нормировка $\rho(t,0)$ сохранялась со временем, нужно положить

$$\lim_{t' \to -\infty} < \dot{S}(t+t', t') > = 0. \tag{18}$$

Условие (18) означает отсутствие производства энтропии, т.е. стационарность системы при $t' = -\infty$. В стационарном случае возможно лишь локальное производство энтропии, которая отводится через поверхность. Если при $t' = -\infty$ система статистически равновесна, то (18) тем более выполнено.

Покажем, что при выполнении условия (18) $\rho(t,0)$ будет удовлетворять уравнению Лиувилля при $\epsilon \to 0$ в смысле квазисредних.

Для произвольного не зависящего от времени оператора A (последнее ограничение не существенно) имеем

$$\lim_{\epsilon \to 0} \frac{\partial}{\partial t} < A > = \lim_{\epsilon \to 0} < \dot{A} > -$$

$$- \lim_{\epsilon \to 0} \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} \int_{0}^{1} d\tau < A\, e^{-\tau \widetilde{S(t,0)}} \dot{S}(t+t',t') e^{\tau \widetilde{S(t,0)}} >,$$

$$\dot{A} = \frac{1}{i\hbar} [A, H]. \tag{19}$$

Воспользовавшись принципом ослабления корреляции /1/ и условием (18), будем иметь

$$\lim_{t'\to-\infty} < A\, e^{-\tau \widetilde{S(t,0)}}\, \dot{S}(t+t',t')\, e^{\tau \widetilde{S(t,0)}} > = < A > \lim_{t'\to-\infty} < \dot{S}(t+t',t') > = 0. \qquad (20)$$

Следовательно, для любого оператора A, не зависящего явно от времени,

$$\lim_{\epsilon\to 0} \frac{\partial}{\partial t} Sp(\rho(t\ \ 0)A) = \lim_{\epsilon\to 0} Sp(\rho(t\ ,0)\dot{A}), \qquad (21)$$

что и означает, что $\rho(t,0)$ удовлетворяет уравнению Лиувилля при $\epsilon \to 0$ в смысле квазисредних.

Таким образом, $\rho(t,0)$ удовлетворяет уравнению Лиувилля, но с бесконечно малым источником в правой части, пропорциональным ϵ, которое устремляется к нулю после термодинамического предельного перехода. Появление эффекта необратимости тесно связано с идеей квазисредних в статистической механике /1,2/. Бесконечно малое возмущение в правой части уравнения (16а) оказывает существенное влияние на систему, т.к. нарушает инвариантность уравнения Лиувилля относительно отражения времени, т.е. замены $t \to -t$, $i \to -i$ и обращения магнитного поля. Бесконечно малое возмущение стремится к нулю лишь после термодинамического предельного перехода, как видно из (21), т.е. рассматриваемые средние действительно являются "квазисредними". В нашем случае бесконечно малые возмущения нарушают, кроме того, изоляцию системы от внешнего окружения, таким образом, правая часть уравнения (16а) действует, как "термостат". Другой возможный подход к построению НСО - явный учет влияния термостата через непотенциальные силы - развивался Мак Леннаном /33/ и приводит к таким же результатам, как и излагаемый выше метод, где неполная изоляция учитывается в качестве граничного условия.

Применение операции (2) эквивалентно отбору запаздывающих решений уравнения Лиувилля, а операции (3) – опережающих, в чем можно убедиться из сравнения с формальной теорией рассеяния Гелманна и Гольдбергера /34/. Отбор запаздывающих и опережающих решений с помощью введения бесконечно малых источников хорошо известен в теории уравнений математической физики и называется "принципом предельного поглощения" (см. /35/, §27).

Наш метод построения НСО можно по аналогии назвать "принципом предельной изоляции": неравновесная система рассматривается как предельный случай неизолированной, когда нарушение изоляции стремится к нулю после термодинамического предельного перехода. При построении НСО (10) мы применяли операцию (2) к квазиравновесному статистическому оператору, что соответствует отбору запаздывающих решений уравнения Лиувилля. При этом НСО дает возрастание энтропии. Если применять операцию (3), соответствующую отбору опережающих решений, то мы получили бы не возрастание, а убывание энтропии /7/.

4. Вывод неравновесного статистического оператора из экстремума информационной энтропии /8/

Покажем, что НСО (10) можно получить из условия экстремума информационной энтропии (5) при дополнительных условиях, что задана величина

$$Sp(\rho P_m(t')) = \langle P_m \rangle^{t+t'} \qquad (22)$$

в интервале $-\infty \le t' \le 0$, т.е. не только для данного момента, но и для всех прошлых моментов времени

$$\mathrm{Sp}\,\rho = 1\,. \tag{23}$$

Этот условный экстремум с эффектом "памяти" соответствует безусловному экстремуму функционала

$$\mathcal{L}(\rho) = -\mathrm{Sp}(\rho\,\ln\,\rho) - (\tilde{\tilde{\Phi}} - 1)\,\mathrm{Sp}\,\rho - \\ -\int_{-\infty}^{0} dt' \sum_m G_m(t,t')\,\mathrm{Sp}(\rho P_m(t')), \tag{24}$$

где $\tilde{\tilde{\Phi}} - 1$ и $G(t,t')$ – лагранжевы множители, соответствующие условиям (22), (23).

Из условия экстремума функционала (17) следует, что

$$\delta\mathcal{L}(\rho) = -\mathrm{Sp}\,\{[\ln\,\rho + \tilde{\tilde{\Phi}} + \sum_m \int_{-\infty}^{0} dt' G_m(t,t') P_m(t')]\,\delta\rho\} = 0, \tag{25}$$

откуда

$$\rho = \exp\{-\tilde{\tilde{\Phi}} - \int_{-\infty}^{0} dt' \sum_m G_m(t,t') P_m(t')\}. \tag{26}$$

Лагранжевы множители определяются из условия (22) и нормировки (23). Из (23) получим

$$\tilde{\tilde{\Phi}} = \ln\,\mathrm{Sp}\,\exp\{-\int_{-\infty}^{0} dt' \sum_m G_m(t,t') P_m(t')\}. \tag{27}$$

Варьируя (27) и используя (22), будем иметь

$$\frac{\delta\tilde{\tilde{\Phi}}}{\delta G_m(t,t')} = -\langle P_m(t')\rangle^t = -\langle P_m\rangle^{t+t'} . \qquad (28)$$

Если P_m – интегралы движения, т.е. $P_m(t') = P_m$, то НСО (26) должен переходить в распределение Гиббса

$$\rho_0 = \exp\{-\Phi_0 - \sum_m F_m^0 P_m\}, \qquad (29)$$

т.е. интеграл $\int_{-\infty}^{0} G_m(t,t')dt'$ должен быть равен F_m^0. Этого можно достичь, положив $G_m(t,t') = \epsilon e^{\epsilon t'} F_m^0$. С учетом этого свойства и соотношения (28) удобно выбрать лагранжевы множители в виде

$$G_m(t,t') = e^{\epsilon t'} \epsilon F_m(t+t'). \qquad (30)$$

Тогда получим статистический оператор в форме (10) :

$$\rho = \exp\{-\tilde{\tilde{\Phi}} - \epsilon\int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} \sum_m F_m(t+t') P_m(t')\}, \qquad (31)$$

удовлетворяющий уравнению Лиувилля в смысле квазисредних.

Таким образом, показано, что неравновесный статистический оператор (10), (31) может быть получен из условия экстремума информационной энтропии при заданных средних $\langle P_m\rangle^{t_1}$ в любой момент прошлого $-\infty \le t_1 \le t$.

5. Другой метод построения неравновесного статистического оператора /29/

Другую форму неравновесного статистического оператора получим, если применим операцию взятия квазиинвариантной части (2) не к логарифму квазиравновесного статистического оператора, а к нему самому /29/ x/:

$$\rho = \widetilde{\rho_{\ell}} = \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} e^{\frac{Ht'}{ih}} \rho_{\ell}(t+t', 0) e^{-\frac{Ht'}{ih}} =$$

$$= \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} e^{S(t+t', t')} = e^{-S(t,0)} + \tag{32}$$

$$+ \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} \int_{0}^{1} d\tau\, e^{-\tau S(t+t', t')} \cdot \dot{S}(t+t', t') e^{(\tau-1) S(t+t', t')},$$

где выполнили интегрирование по частям с учетом (12б). НСО (24) удовлетворяет уравнению Лиувилля при $\epsilon \to 0$ в том же смысле, как и (10), (26). Действительно,

$$\frac{d}{dt} \rho(t,t) = \frac{d}{dt} \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} e^{-S(t+t', t+t')} =$$

$$= -\epsilon \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} \int_{0}^{1} d\tau\, e^{-\tau S(t+t', t+t')} \dot{S}(t+t', t+t') e^{(\tau-1) S(t+t', t+t')} =$$

$$= -\epsilon(\rho(t,t) - \rho_{\ell}(t,t)). \tag{33}$$

---

x/ Граничное условие (32) соответствует граничному условию формальной теории рассеяния Гелманна и Гольдбергера для волновой функции $\Psi^{(\epsilon)}(t)$

$$\Psi^{(\epsilon)}(t) = \epsilon \int_{-\infty}^{0} d\tau\, e^{\epsilon\tau} e^{\frac{H(t-\tau)}{ih}} \Phi(\tau) d\tau,$$

где $\epsilon \to +0$ в конце вычислений, после устремления к бесконечности объема, в котором нормируются волновые функции, $\Phi(\tau)$ – волновая функция свободного состояния, H – гамильтониан системы. НСО (32) имеет сходство с НСО, полученным по методу Робертсона /43/, однако он использует граничное условие совпадения статистического оператора с квазиравновесным при $t = 0$, а мы используем граничные условия формальной теории рассеяния и получаем явное выражение для НСО.

Заметим, что правая часть (33) такова же, как и второй член в (32), но с дополнительным множителем ϵ . Правая часть уравнения Лиувилля (33) содержит бесконечно малые источники, которые стремятся к нулю при $\epsilon \to 0$ после термодинамического предела. Следовательно, НСО (32) удовлетворяет уравнению Лиувилля в смысле квазисредних, как и НСО (10). Из (33) получим соотношение

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathrm{Sp}\, \rho(t,0) = -\epsilon \left(\mathrm{Sp}\, \rho(t,0) - \mathrm{Sp}\, \rho_{\ell}(t,0) \right) = 0,$$

$$\lim_{\epsilon \to 0} \frac{\partial}{\partial t} \langle A \rangle - \lim_{\epsilon \to 0} \langle \dot{A} \rangle = \lim_{\epsilon \to 0} \epsilon \left(\langle A \rangle - \langle A \rangle_{\ell} \right) = 0, \qquad (34)$$

где A -произвольный оператор, т.е. нормировка НСО (32) сохраняется и он действительно удовлетворяет уравнению Лиувилля в смысле квазисредних.

НСО (32) не удовлетворяет условию экстремума информационной энтропии с запаздыванием, рассмотренному в разделе 4, а удовлетворяет некоторому другому экстремальному условию. НСО (32) может быть также применен для построения уравнений переноса, как и НСО (10), что показано в [29].

В теории уравнений математической физики принцип предельного поглощения эквивалентен принципу предельной амплитуды (см. [36], § 27). Сформулированный выше рецепт построения неравновесного статистического оператора (10) можно представить в форме, аналогичной принципу предельной амплитуды теории уравнений математической физики:

Неравновесный статистический оператор состояния, которое описывается набором параметров $F_m(t)$, равен

$$\rho(t,0)=e^{-\frac{H\tau}{ih}}\rho_l(t+\tau,0)e^{\frac{H\tau}{ih}}=\rho_\ell(t+\tau,\tau), \qquad (35)$$

где $\tau\to-\infty$ после термодинамического предельного перехода.

Покажем, что неравеновесный статистический оператор (35) эквивалентен (32).

Соотношение (35) означает, что для произвольного оператора A

$$\lim_{\tau\to-\infty}Sp(\rho(t,0)A)=\lim_{\tau\to-\infty}Sp(e^{-\frac{H\tau}{ih}}\rho_\ell(t+\tau,0)e^{\frac{H\tau}{ih}}A). \qquad (35a)$$

Условия (35a) запишем в виде

$$\lim_{\tau\to-\infty}Sp(\rho(t,0)A)=\lim_{\tau\to-\infty}Sp(\rho_\ell(t+\tau,\tau)A)=$$
$$=\lim_{\epsilon\to0}\epsilon\int_{-\infty}^{0}d\tau\, e^{\epsilon\tau}Sp(\rho_\ell(t+\tau,\tau)A), \qquad (36)$$

где воспользовались теоремой Абеля. Соотношение (36) показывает, что НСО (35) эквивалентен НСО (32) в смысле совпадения квазисредних, что и требовалось доказать.

Статистический оператор (35) может быть получен из условия экстремума информационной энтропии (5) при дополнительных условиях, что заданы $\langle P_m(\tau)\rangle^{t+\tau}$ при фиксированном $\tau<0$, которое затем устремляется к $-\infty$ после термодинамического предела.

6. Заключение

Таким образом, можно построить два неравновесных статистических оператора, являющихся решением уравнения Лиувилля в смысле квазисредних (10),(32). Известны и другие методы получения неравновесных статистических операторов /36,37/. Поэтому возникает проблема доказательства эквивалентности (или неэквивалентности) различных форм НСО. Легко видеть, что в низших приближениях различные НСО приводят к одинаковым уравнениям переноса.

Метод неравновесного статистического оператора в любом из его вариантов позволяет очень просто строить уравнения переноса для различных систем и получать выражения для кинетических коэффициентов через квантовые корреляционные функции, их можно выразить также через запаздывающие двухвременные функции Грина-Боголюбова-Тябликова /38-40/. Для раскрытия полученных общих выражений оказывается очень полезным метод функций Грина, получивший широкое применение в статистической механике /38-42/. Метод неравновесного статистического оператора не является его заменой, - эти методы скорее дополняют друг друга.

Пользуюсь случаем выразить благодарность В.П. Калашникову, в сотрудничестве с которым разработан метод НСО, обсуждаемый в разделе 5, А.Л. Куземскому и Ф.С. Джапарову за полезное обсуждение.

Литература

1. Н.Н. Боголюбов. Квазисредние в задачах статистической механики. Препринт ОИЯИ, Р-788, Дубна, 1961;
   Physicalische Abhandlunden aus der S.U. 6, [illegible], 118 ,229(1962).
2. Н.Н. Боголюбов. Physica, 26, 1 (1960).
3. H.Wagner. Zs. Phys., 195, 273 (1966).

4. N.D. Mermin, H. Wagner. Phys.Rev.Lett., 17, 1133 (1966).

5. Р. Браут. Фазовые переходы, Мир, 1967.

6. J. Goldstone. Nuovo Cim., 19, 154 (1961).

7. Д.Н. Зубарев. ДАН, 140, 92 (1961); 162, 532, 794 (1965); 164, 65 (1965); Проблемы теоретической физики, "Наука", М., 1969; Препринт ИТФ-69-6, Киев, 1969.

8. Д.Н. Зубарев, В.П. Калашников. Теоретическая и математическая физика, 1, 137 (1969).

9. Н.Н. Боголюбов. Проблемы динамической теории в статистической физике, ОГИЗ, М.-Л., 1946.

10. М. Кац. Вероятность и смежные вопросы в физике, Мир, М.,1965.

11. Л.Л. Буишвили, Д.Н. Зубарев. ФТТ, 7, 722 (1965).

12. Л.Л. Буишвили. ЖЭТФ, 49, 1868 (1965); ФТТ, 7, 1871 (1965); 9, 2157 (1967); Сообщения АН Грузинской ССР, 47, 279 (1967).

13. Л.Л. Буишвили, М.Д. Звиададзе. ФТТ, 9, 1969 (1967); 10, 2397, 2553 (1968); Phys.Lett., 24A, 634,661(1967); 25A, 86 (1967).

14. Л.Л. Буишвили, М.Д. Звиададзе, Г.Р. Хуцишвили. ЖЭТФ, 54, 876 (1968); 56, 290 (1969).

15. Н.С. Бендиашвили, Л.Л. Буишвили, М.Д. Звиададзе. ФТТ, 8, 2919, (1966); 10, 1224 (1968); 11, 727 (1969); Препринт ИТФ-68-70, Киев, 1968.

16. Л.Л. Буишвили, Н.П. Гиоргадзе. ФТТ, 10, 1181 (1968).

17. Н.С. Бендиашвили, Л.Л. Буишвили. Релаксационные явления в твердых телах, "Металлургия", 1968.

18. Н.С. Бендиашвили, Л.Л. Буишвили, Г.Р. Хуцишвили. ЖЭТФ, 57, 1231 (1969).

19. Н.С. Бендиашвили, Л.Л. Буишвили, М.Д. Звиададзе. Препринт ИТФ-68-70. Киев, 1968.

20. В.П. Калашников. ФММ, 22, 786 (1966); ФТТ, 9, 634 (1967); Phys. Stat. sol., 21, 775 (1967); Phys.Lett., 26A, 433 (1968); Физика и техника полупроводников, 1, 1281,(1967); Некоторые вопросы магнетизма и прочности твердых тел, вып. 27, Изд. ИФМ АН СССР, Свердловск, 1968; Препринт ИТФ-68-79, Киев, 1968.

21. Л.А. Покровский. ДАН, 177, 1054 (1967); 182, 317 (1968); 183, 806 (1968). Теоретическая и математическая физика, 2, 1 (1970).

22. В.Г. Грачев. УФЖ, 13, 633 (1968).

23. Д.Н. Зубарев, А.Г. Башкиров. Phys.Lett., 25A, 202 (1967); Physica, 39, 334 (1968).

24. А.Г. Башкиров, Д.Н. Зубарев. Теоретическая и математическая физика, 1, №3 (1969).

25. А.Г. Башкиров. Теоретическая и математическая физика, 3, №2(1970).

26. T. N. Khazanovich, V.A. Savchenko. Phys.Lett. 27A, 615 (1968).

27. T.N. Khazanovich. Molecular Physics, 17, 281 (1968); Phys.Lett., 19A, 601 (1969).

28. А.Д. Хонькин. ДАН, 183, 1285 (1968).

29. Д.Н. Зубарев, В.П. Калашников. Теоретическая и математическая физика, 3, №1 (1970).

30. E. Janes. Phys.Rev., 106, 620 (1957); 108, 171 (1957).

31. R.S. Ingarden. Fortschr. Phys., 13, 755 (1965).

32. V. Bahr, P.Quaas, K.Voss. Z.Naturforsch., 23a, 633,644(1968).

33. J.A.Mc Lennan. Phys. Fluids, 4, 1319 (1961); Advin Chem.Phys., 5, 261 (1963).

34. M. Gell-Mann, M.L. Goldberger. Phys.Rev., 91, 398 (1953).
35. В.С. Владимиров. Уравнения математической физики, Наука, 1967.
36. Б.Н. Провоторов. ЖЭТФ, 41, 1522 (1961).
37. С.В. Пелетминский, А.А. Яценко. ЖЭТФ, 53, 1327 (1967).
38. В.Л. Бонч-Бруевич, С.В. Тябликов. Метод функций Грина в статистической механике, Физматгиз, М., 1961.
39. С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма, Наука, М., 1965.
40. Д.Н. Зубарев. УФН, 71, 71 (1960).
41. А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике, Физматгиз, М., 1962.
42. Д.А. Киржниц. Полевые методы теории многих частиц. Атомиздат, 1963.
43. B. Robertson. Phys.Rev., 144, 151 (1966); 160, 175 (1967).

Рукопись поступила в издательский отдел
8 января 1970 года.