

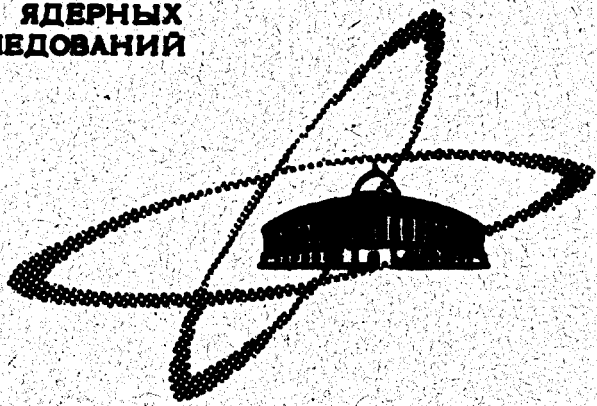
6/11-70

3-91

**ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ**

Дубна

P4 - 4920



ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Д.Н. Зубарев

**ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ
ДЛЯ СТАТИСТИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ
В ТЕОРИИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ
И КВАЗИСРЕДНИЕ**

1970

P4 - 4920

Д.Н. Зубарев

ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ
ДЛЯ СТАТИСТИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ
В ТЕОРИИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ
И КВАЗИСРЕДНИЕ

Направлено в журнал "Теоретическая
и математическая физика"

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

8254/2 48.

1. Введение

Проблема граничных условий в теории неравновесных процессов имеет много общего с уже хорошо изученной проблемой граничных условий для уравнений математической физики, особенно в квантовой теории столкновений. Поэтому в разделе 2 кратко упоминается принцип предельного поглощения для волнового уравнения. Затем в разделе 3 излагаются основные идеи выбора граничных условий в квантовой теории столкновений в такой форме, которая наиболее удобна для обобщения на теорию неравновесных процессов, чему посвящен раздел 4.

Формулировка граничных условий теории столкновений в квантовой механике и в теории неравновесных процессов в статистической механике связана с неустойчивостью решений уравнения Шредингера (или уравнения Лиувилля) относительно бесконечно малых возмущений, нарушающих их симметрию по отношению к преобразованию отражения времени. И та и другая задача, как будет показано далее, решается с помощью введения "квазисредних", которые хорошо известны в задачах равновесной статистической механики /1,2/.

Согласно идее Н.Н. Боголюбова о квазисредних, бесконечно малые возмущения могут оказывать существенное влияние на систему, если они нарушают какую-либо симметрию, снимая вырождение. Такие возмущения могут дать конечный эффект, если их устремлять к нулю после термодинамического предельного перехода. Идеи о квазисредних имеют глубокую связь с теоремой Голдстоуна о "нарушенной симметрии" /3/ и очень полезны в теории фазовых переходов, например, в теории сверхпроводимости, сверхтекучести, ферромагнетизма и антиферромагнетизма /1,2,4,5/.

В разделе 4 мы покажем, что неравновесные статистические операторы в двух различных формах (предложенные как в работах автора /6/, так и в работе В.П. Калашникова и автора /7/) могут быть очень просто получены, если сформулировать граничные условия к уравнению Лиувилля с помощью бесконечно малого источника, нарушающего симметрию уравнения Лиувилля относительно отражения времени. Точно такая же процедура проделывается и с уравнением Шредингера в квантовомеханической теории столкновений при формулировке граничных условий (см. раздел 3).

2. Принцип предельного поглощения

Зависимость решений дифференциальных уравнений в частных производных от бесконечно малых возмущений – хорошо известный факт из теории уравнений математической физики /8/.

Решение волнового уравнения

$$\Delta u + k^2 u + f(x) = 0, \quad k^2 > 0 \quad (1)$$

не единственно, если не наложить дополнительных условий поведения решения на бесконечности. Проще всего это сделать, добавляя в (1) бесконечно малый источник – положительное или отрицательное поглощение

$$\Delta u_{\epsilon} + (k^2 + i\epsilon) u_{\epsilon} + f(x) = 0. \quad (2)$$

Это уравнение уже имеет в классе обобщенных функций медленного роста /8/ единственное решение u_{ϵ} , которое при $\epsilon \rightarrow +0$ дает запаздывающие, а при $\epsilon \rightarrow -0$ опережающие решения уравнения (1), т.е. оба его фундаментальных решения:

$$u = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} u_{\epsilon}, \quad \bar{u} = \lim_{\epsilon \rightarrow -0} u_{\epsilon}. \quad (3)$$

Такой рецепт отбора решений волнового уравнения называется "принципом предельного поглощения" /8/.

3. Граничные условия квантовой теории рассеяния и квазисредние

В квантовомеханической теории столкновений отбираются такие решения уравнения Шредингера, которые при $t = -\infty$ представляют собой свободное движение частиц. Рассматривают

$$\frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} - \frac{1}{i\hbar} H \Psi(t) = 0, \quad (4)$$

где $H = H_0 + V$, H_0 – гамильтониан невозмущенного, свободного движения частиц, V – оператор взаимодействия, рассматриваемого как возмущение.

Легко найти формальное решение уравнения Шредингера (4)

$$\Psi(t) = U(t, t_0) \Psi(t_0), \quad (5)$$

где $\Psi(t_0)$ - волновая функция в начальный момент времени t_0 , $U(t, t_0)$ - оператор эволюции, удовлетворяющий уравнению

$$\frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} H U(t, t_0) \quad (6)$$

с начальным условием $U(t_0, t_0) = 1$. Однако подобное формальное решение, вообще говоря, не удовлетворяет необходимым граничным условиям теории столкновений.

Чтобы найти правильное решение задачи о столкновении, заметим, что уравнение Шредингера (4) инвариантно относительно преобразования отражения времени, т.е. относительно замены $t \rightarrow -t$, $i \rightarrow -i$ и обращения знака магнитного поля. Кроме того, решение уравнения (4) чувствительно к введению бесконечно малого источника, нарушающего эту симметрию.

Граничные условия, отбирающие запаздывающие решения уравнения Шредингера формальной теории рассеяния в варианте Гелл-Манна-Голдбергера /9/ можно получить, если ввести в (4) при $t \leq 0$ бесконечно малый источник, нарушающий симметрию уравнения Шредингера относительно отражения времени.

$$\frac{\partial \Psi_\epsilon(t)}{\partial t} - \frac{1}{i\hbar} H \Psi_\epsilon(t) = -\epsilon (\Psi_\epsilon(t) - \Phi(t)), \quad (7)$$

где $\epsilon \rightarrow +0$ после стремления объема системы к бесконечности, $\Phi(t)$ - волновая функция свободного движения частиц с гамильтонианом H_0 .

Бесконечно малый источник в (7) введен так, чтобы он был равен нулю при $\Psi(t) = \Phi(t)$, т.е. в отсутствие взаимодействия. Он действительно нарушает симметрию уравнения Шредингера относительно отражения времени, т.к. при этом преобразовании левая часть уравнения (7) меняет знак, а правая — остается неизменной. Знак ϵ выбран так, чтобы получить запаздывающие, а не опережающие решения.

Запишем уравнение (7) в виде

$$\frac{d}{dt} (e^{\epsilon t} \Psi_{\epsilon}(t, t)) = \epsilon e^{\epsilon t} \Phi(t, t), \quad (8)$$

где

$$\Psi_{\epsilon}(t, t) = e^{-\frac{Ht}{i\hbar}} \Psi_{\epsilon}(t), \quad (8a)$$

$$\Phi(t, t) = e^{-\frac{Ht}{i\hbar}} \Phi(t).$$

Интегрируя (8) в пределах от $-\infty$ до t , будем иметь

$$\begin{aligned} \Psi_{\epsilon}(t) &= \epsilon \int_{-\infty}^t e^{\epsilon(t_1-t)} e^{-\frac{H(t_1-t)}{i\hbar}} \Phi(t_1) dt_1 = \\ &= \epsilon \int_{-\infty}^0 e^{\epsilon t'} e^{-\frac{Ht'}{i\hbar}} \Phi(t+t') dt'. \end{aligned} \quad (9)$$

Полагая в (9) $t = 0$, получим граничное условие теории рассеяния в форме Гелл-Манна-Голдбергера:

$$\Psi_{\epsilon}(0) = \epsilon \int_{-\infty}^0 e^{\epsilon t'} e^{-\frac{Ht'}{i\hbar}} \Phi(t') dt'. \quad (10)$$

Вероятность того, что система, описываемая волновой функцией $\Psi_{j\epsilon}(t)$, к моменту t находится в состоянии $\Phi_j(t)$, равна

$$w_{ij}^\epsilon(t) = |(\Phi_i^*(t), \Psi_{j\epsilon}(t))|^2 / (\Psi_{j\epsilon}^*(t), \Psi_{j\epsilon}(t)), \quad (11)$$

где согласно (9)

$$\Psi_{j\epsilon}(t) = e^{\frac{Ht}{i\hbar}} \epsilon \int_{-\infty}^0 e^{\epsilon t'} e^{-\frac{1}{i\hbar}(H-E_j)t'} \Phi_j dt', \quad (12)$$

$$H_0 \Phi_j = E_j \Phi_j.$$

Дифференциальное эффективное сечение σ_{ij} перехода $j \rightarrow i (i \neq j)$ равно скорости изменения вероятности перехода (11) в единицу времени, деленной на поток v/L^3 , где v - относительная скорость сталкивающихся систем, L^3 - объем системы

$$\sigma_{ij} = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{d w_{ij}^\epsilon(0)}{dt} \frac{L^3}{v}, \quad (13)$$

или с учетом (12)

$$\sigma_{ij} = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{2\epsilon}{\frac{1}{\hbar^2}(E_j - E_i)^2 + \epsilon^2} |(\Phi_i^* v \Psi_{j\epsilon}(0))|^2 \frac{L^3}{v} \quad (14)$$

(подробности см. в /9/).

При вычислении дифференциального эффективного сечения $\epsilon \rightarrow +0$, но после устремления объема системы к бесконечности, что типично для квазисредних, т.е. (13), (14) - квазисредние. Изложенный выше метод построения граничных условий приведен как пример введения квазисредних в квантовой механике. В следующем разделе он будет обобщен на случай неравновесной статистической механики.

4. Граничные условия для статистических операторов
в теории неравновесных процессов и метод квазисредних

В теории неравновесных процессов рассматриваются решения квантового уравнения Лиувилля для статистического оператора ρ

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\rho, H] = 0, \quad (15)$$

или классического уравнения Лиувилля для функции распределения

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\} = 0, \quad (16)$$

где $\{ \dots, \dots \}$ - классическая скобка Пуассона. Далее мы будем обсуждать граничные условия лишь для квантового случая, т.к. классический ему аналогичен.

Очень просто найти формальное решение уравнения Лиувилля (15):

$$\rho(t) = U(t, t_0) \rho(t_0) U^+(t, t_0), \quad (17)$$

где $\rho(t_0)$ - произвольный статистический оператор в начальный момент времени t_0 , $U(t, t_0)$ - оператор эволюции (6). Однако формальное решение (17) может быть полезно лишь в том случае, если хорошо выбран статистический оператор в начальный момент времени $\rho(t_0)$. Например, если состояние близко к статистически равновесному, то в теории Кубо^{10/} выбирают $t_0 = -\infty$ и $\rho(-\infty)$ в виде равновесного статистического оператора. В общем же случае формальное решение (17) так же мало пригодно для описания неравновесного процесса, как и (5) для описания процесса столкновения. Следовательно, основная проблема неравновесной статистической механики - не нахождение формальных точных решений уравнения Лиувилля, а выбор для него правильных гра-

нических условий и построение решений, в смысле квазисредних, как и в квантовой теории столкновений.

Заметим, что число параметров, необходимых для описания неравновесного состояния системы, зависит от интересующего нас масштаба времени. Чем больше этот масштаб времени, тем меньше число необходимых параметров. Например, гидродинамическая стадия неравновесного процесса характеризуется тем, что для ее описания достаточно задания средних плотностей энергии, импульса и числа частиц. Эта идея о сокращении в описании неравновесных процессов лежит в основе почти всех теорий неравновесных процессов. Она была положена Н.Н. Боголюбовым в основу его теории неравновесных процессов в газах средней плотности /11/.

Нас интересуют решения уравнения Лиувилля для не слишком малых масштабов времени, когда для описания неравновесного состояния достаточно набора операторов P_m , где m — индекс, который может принимать как дискретные, так и непрерывные значения.

Будем искать такие решения уравнения Лиувилля, которые зависят от времени лишь через средние значения этих операторов или от сопряженных им параметров $F_m(t)$, смысл которых будет выяснен ниже. В зависимости от выбора операторов P_m такой подход возможен как в гидродинамической, так и в кинетической стадии. Для описания гидродинамической стадии неравновесного процесса в качестве операторов P_m можно выбрать операторы плотности энергии, импульса и числа частиц $\Pi(x)$, $p(x)$, $n(x)$. Для описания кинетической стадии в качестве P_m можно выбрать числа заполнения одночастичных состояний.

Состояние с заданными средними значениями $\langle P_m \rangle$ можно описать квазиравновесным статистическим оператором

$$\rho_{\ell} = \exp \left\{ -\Phi - \sum_m P_m F_m(t) \right\} \equiv \exp \left\{ -S(t, 0) \right\}, \quad (18)$$

где

$$\Phi = \ln \text{Sp} \exp \left\{ - \sum_m P_m F_m(t) \right\} - \quad (19)$$

функция Масье-Планка, $F_m(t)$ - параметры, сопряженные средним значениям

$$\langle P_m \rangle_\ell^t = \text{Sp} (\rho_\ell P_m). \quad (20)$$

Оператор $S(t, 0)$ можно назвать "оператором энтропии", т.к. его среднее значение есть энтропия.

$$S = \langle S(t, 0) \rangle_\ell^t = - \text{Sp} (\rho_\ell \ln \rho_\ell) = \quad (21)$$

$$= \Phi + \sum_m \langle P_m \rangle_\ell^t F_m(t).$$

Квазиравновесный статистический оператор (18) соответствует экстремуму информационной энтропии

$$S_u = - \text{Sp} (\rho \ln \rho) \quad (22)$$

при заданных средних $\langle P_m \rangle$ и при сохранении нормировки. В частном случае гидродинамического режима имеем

$$F_0(x, t) = \beta(x, t), \quad P_0(x) = H(x),$$
$$F_1(x, t) = -\beta(x, t) \vec{v}(x, t), \quad P_1(x) = \vec{p}(x), \quad (23)$$

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

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

Квазиравновесный статистический оператор (18) обеспечивает удовлетворение термодинамических равенств для его параметров Φ , $F_m(t)$, S $x/$:

$$\frac{\delta \Phi}{\delta F_m(t)} = - \langle P_m \rangle_{\ell}^t, \quad \frac{\delta S}{\delta \langle P_m \rangle_{\ell}^t} = F_m(t), \quad (24)$$

т.е. параметры $F_m(t)$ и $\langle P_m \rangle_{\ell}^t$ действительно термодинамически сопряжены. Однако статистический оператор (18) не удовлетворяет уравнению Лиувилля и не описывает необратимых процессов. Но, как мы убедимся ниже, его можно использовать для формулировки граничных условий к уравнению Лиувилля (15), подобно тому, как волновая функция свободного движения частиц используется для формулировки граничных условий к уравнению Шредингера (4) в квантовой теории рассеяния (см. раздел 3).

Квантовое уравнение Лиувилля (15), как и классическое (16), симметрично относительно преобразования отражения времени (в классическом случае это означает замену $t \rightarrow -t$, обращение импульсов всех частиц и направления магнитного поля). Однако решение уравнения Лиувилля неустойчиво относительно малых возмущений, нарушающих эту его симметрию.

Введем в уравнение Лиувилля бесконечно малый источник, удовлетворяющий следующим требованиям:

1) Источник нарушает симметрию уравнения Лиувилля относительно отражения времени, или, другими словами, полную изоляцию системы. Кроме того, он стремится к нулю при $\epsilon \rightarrow 0$, причём этот предель-

$x/$ Если индексы m принимают дискретный ряд значений, то вариационные производные в (24) переходят в обыкновенные частные производные.

ный переход совершается после термодинамического предельного перехода.

2) Источник отбирает запаздывающие решения уравнения Лиувилля. Это условие определяет знак ϵ , т.е., если ввести источник, как в (7), то $\epsilon > 0$ и $\epsilon \rightarrow +0$. Опережающие решения дали бы не возрастание, а убывание энтропии /8/.

3) Источник обращается в нуль при ρ , равном квазиравновесному статистическому оператору ρ_ℓ (18). В частном случае статистического равновесия источник должен отсутствовать.

Можно предложить два способа введения в уравнение Лиувилля бесконечно малого источника, удовлетворяющего этим требованиям.

Первый способ состоит в том, что бесконечно малый источник вводится в правую часть уравнения Лиувилля (15)

$$\frac{\partial \rho_\epsilon}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\rho_\epsilon, H] = -\epsilon (\rho_\epsilon - \rho_\ell), \quad (25)$$

где $\epsilon \rightarrow +0$ после термодинамического предельного перехода при вычислении средних. Уравнение (25) аналогично уравнению (7) квантовой теории столкновений. Это единственная форма, удовлетворяющая, кроме условий 1-3, требованию линейности источника по ρ_ϵ . Бесконечно малый источник в (25) действительно нарушает симметрию уравнения (15) относительно отражения времени, т.к. при этом преобразовании левая часть уравнения (25) меняет знак, а правая - остается неизменной.

Запишем уравнение (25) в виде

$$\frac{d}{dt} (e^{\epsilon t} \rho_\epsilon(t, t)) = \epsilon e^{\epsilon t} \rho_\ell(t, t), \quad (26)$$

где

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

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

(27)

$$U(t, 0) = \exp \left\{ \frac{Ht}{i\hbar} \right\},$$

(H не зависит от времени) и введены обозначения:

$$\rho_{\epsilon} = \rho_{\epsilon}(t, 0), \quad \rho_{\ell} = \rho_{\ell}(t, 0). \quad (28)$$

Интегрируя уравнение (26) в пределах от $-\infty$ до t и предполагая, что $\lim_{t \rightarrow -\infty} e^{\epsilon t} \rho(t, t) = 0$, получим

$$\begin{aligned} \rho_{\epsilon}(t, t) &= \epsilon \int_{-\infty}^t e^{\epsilon(t_1 - t)} \rho_{\ell}(t_1, t_1) dt_1 = \\ &= \epsilon \int_{-\infty}^0 e^{\epsilon t'} \rho_{\ell}(t+t', t+t') dt'. \end{aligned} \quad (29)$$

Следовательно, искомый неравновесный статистический оператор имеет вид

$$\rho_{\epsilon} = \rho_{\epsilon}(t, 0) = \overbrace{\rho_{\ell}(t, 0)}^{\text{wavy line}} = \epsilon \int_{-\infty}^0 e^{\epsilon t'} \rho_{\ell}(t+t', t') dt', \quad (30)$$

где черта сверху означает операцию взятия квазиинвариантной части. Статистический оператор (30) был получен ранее из других соображений в работе В.П. Калашникова и автора ^{/7/}. Неравновесный статистический оператор (30) с помощью интегрирования по частям удобно записать в виде ^{/7/}

$$\rho_{\epsilon} = \rho_{\ell} + \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} \int_0^1 dr e^{-rS(t+t', t')} \dot{S}(t+t', t') e^{(r-1)S(t+t', t')} \quad (31)$$

где

$$\dot{S}(t, 0) = \frac{\partial S(t, 0)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [S(t, 0), H], \quad (32)$$

$$\dot{S}(t, t') = U^+(t', 0) \dot{S}(t, 0) U(t', 0)$$

- оператор производства энтропии.

Параметры $F_m(t)$, входящие в выражение для оператора энтропии, выбираем из условия, чтобы средние величины P_m , вычисленные с неравновесным статистическим оператором (30), совпадали с их средними по квазиравновесному статистическому оператору (18).

$$\langle P_m \rangle^t = \langle P_m \rangle_{\ell}^t, \quad (33)$$

где

$$\langle \dots \rangle^t = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \text{Sp}(\rho_{\epsilon} \dots). \quad (34)$$

Тогда $\langle P_m \rangle^t$ и $F_m(t)$ становятся сопряженными параметрами, т.к.

$$\frac{\delta \Phi}{\delta F_m(t)} = - \langle P_m \rangle_{\ell}^t = - \langle P_m \rangle^t. \quad (35)$$

С помощью неравновесного статистического оператора (30) можно вычислить среднее значение любого оператора A :

$$\langle A \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \text{Sp} (\rho_{\epsilon} A) = \langle A \rangle . \quad (36)$$

Такие средние, по терминологии Н.Н.Боголюбова, ^{/1,2/} называются "квазисредними". Если применить операцию усреднения (36) к операторам \dot{P}_m , то с учетом (33) получим уравнение переноса

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle P_m \rangle_{\ell}^t = \langle \dot{P}_m \rangle^t = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \text{Sp} (\rho_{\epsilon} \dot{P}_m) = \langle \dot{P}_m \rangle . \quad (37)$$

Следовательно, уравнения переноса есть уравнения для квазисредних.

Второй способ введения бесконечно малых источников основан на том, что логарифм статистического оператора, удовлетворяющего уравнению Лиувилля, также удовлетворяет уравнению Лиувилля

$$\frac{\partial \ln \rho}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\ln \rho, H] = 0, \quad (38)$$

что связано со свойствами скобок Пуассона как квантовых, так и классических. Следовательно, бесконечно малые источники можно вводить не только в (15), но и в (38).

Если потребовать, чтобы бесконечно малый источник удовлетворял условиям 1)- 3) и, кроме того, чтобы он был линеен относительно $\ln \rho$, получим:

$$\frac{\partial \ln \rho_{\epsilon}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\ln \rho_{\epsilon}, H] = -\epsilon (\ln \rho_{\epsilon} - \ln \rho_{\ell}), \quad (39)$$

где $\epsilon \rightarrow +0$ после термодинамического предельного перехода. Действительно, источник в (39) нарушает симметрию уравнения (38) относительно отражения времени и согласуется с другими условиями 1-3. Запишем уравнение (39) в виде

$$\frac{d}{dt} (e^{\epsilon t} \ln \rho_{\epsilon}(t, t)) = \epsilon e^{\epsilon t} \ln \rho_{\ell}(t, t). \quad (40)$$

Интегрируя (40) в пределах от $-\infty$ до t , получим:

$$\begin{aligned} \ln \rho_{\epsilon}(t, t) &= \epsilon \int_{-\infty}^t e^{\epsilon(t_1-t)} \ln \rho_{\ell}(t_1, t_1) dt_1 = \\ &= \epsilon \int_{-\infty}^0 e^{\epsilon t'} \ln \rho_{\ell}(t+t', t+t') dt' \end{aligned} \quad (41)$$

и, следовательно, искомый неравновесный статистический оператор имеет вид:

$$\begin{aligned} \rho_{\epsilon} = \rho_{\epsilon}(t, 0) &= \exp \left\{ \overbrace{\ln \rho_{\ell}(t, 0)} \right\} = \\ &= \exp \left\{ -\epsilon \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} \ln \rho_{\ell}(t+t', t') \right\}, \end{aligned} \quad (42)$$

где $\epsilon \rightarrow +0$ после термодинамического предельного перехода при вычислении средних.

Неравновесный статистический оператор (42) был получен ранее в работах автора /6/ при использовании других соображений. Его удобно после интегрирования по частям записать в виде

$$\begin{aligned} \rho_{\epsilon} &= \exp \left\{ -\overbrace{S(t, 0)} \right\} = \\ &= \exp \left\{ -S(t, 0) + \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} \dot{S}(t+t', t') \right\}. \end{aligned} \quad (43)$$

Параметры $F_m(t)$, входящие в выражения для оператора энтропии $S(t, 0)$ и производства энтропии $\dot{S}(t, 0)$, определяются, как и ранее, из условий (33).

Неравновесный статистический оператор (42) соответствует экстремуму информационной энтропии (22) при дополнительных условиях, что фиксированы $\langle P_m(t_1) \rangle^t = \text{Sp}(\rho P_m(t_1))$ для любого прошлого момента времени $-\infty \leq t_1 \leq 0$ и при сохранении нормировки /12/.

Статистический оператор (42) имеет сходство со статистическим оператором Мак-Леннана /13/. Последний может быть получен из (42) при выборе операторов P_m в виде (23) после интегрирования по частям с учетом законов сохранения и отбрасывания интегралов по поверхности. Отличие метода /6/ от метода Мак-Леннана состоит в том, что в /6/ рассматриваются бесконечно малые возмущения уравнения Лиувилля для формулировки к нему граничных условий, а не конечные, реальные возмущения, вызываемые термостатом, как это делает Мак-Леннан. Можно сказать, что введение граничных условий к уравнению Лиувилля есть идеализированный, условный учет влияния термостата.

Неравновесный статистический оператор (42) применялся различными авторами для построения уравнений гидродинамики, релаксационных уравнений, кинетических уравнений и уравнений типа Фоккера-Планка /6,12,14-28/.

Легко показать, что в низших приближениях по малости взаимодействия или по малости термодинамических сил оба неравновесных статистических оператора, как (30), так и (42), приводят к одинаковым уравнениям переноса /7/. Однако вопрос о том, эквивалентны ли эти операторы, а если эквивалентны, то в каком смысле, еще не разрешен.

Изложенный метод выбора граничных условий к уравнению Лиувилля с помощью квазисредних может быть использован для сравнения различных методов построения неравновесных статистических операторов, например, описанных в /6,7,13,29-34/, и выяснения области их применимости.

Глубокая аналогия между теорией неравновесных процессов и квантовой теорией столкновений и их связь с методом квазисредних может

послужить основой для перенесения идей и методов квантовой теории столкновений в теорию неравновесных процессов. Это особенно важно потому, что квантовая теория столкновений — хорошо разработанный раздел теоретической физики, а общая теория неравновесных процессов еще только начинает развиваться.

Л и т е р а т у р а

1. Н.Н. Боголюбов. Квазисредние в задачах статистической механики. Препринт ОИЯИ, Р-788, Дубна, 1961. *Physikalische Abhandlungen aus der S.U.*, 6, 1, 118, 229 (1962).
2. Н.Н. Боголюбов. *Physica*, 26, 1 (1960).
3. J. Goldstone. *Nuovo Cim.*, 19, 154 (1961).
4. Н. Wagner. *Zs. Phys.*, 195, 275 (1966).
5. N.D. Mermin, Н. Wagner. *Phys. Rev. Lett.*, 17, 1133 (1966).
6. 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.
7. Д.Н. Зубарев, В.П. Калашников. Теоретическая и математическая физика, 3, №1, 1970.
8. В.С. Владимиров. Уравнения математической физики, Наука, М., 1967.
9. M. Gell-Mann, M.L. Goldberger. *Phys. Rev.*, 91, 398 (1953).
10. R. Kubo. *Journ. Phys. Soc. Japan*, 12, 570 (1957); *Lectures in theoretical Physics (Boulder)*, 1, 120 (1958).
11. Н.Н. Боголюбов. Проблемы динамической теории в статистической физике, ОГИЗ, М.-Л., 1946.
12. Д.Н. Зубарев, В.П. Калашников. Теоретическая и математическая физика, 1, 137 (1969).

13. J.A. McLennan. Phys.Fluids, 4, 1319 (1961); Adv. in Chem. Phys., 5, 261 (1963).
14. Л.Л. Буишвили, Д.Н. Зубарев. ФТТ, 7, 1871 (1965).
15. Л.Л. Буишвили. ЖЭТФ, 49, 1868 (1965); ФТТ, 7, 1871 (1965); 9, 2157 (1967).
16. Л.Л. Буишвили, М.Д. Звиададзе. ФТТ, 9, 1969 (1967); 10, 2397, 2553 (1967);
17. Л.Л. Буишвили, М.Д. Звиададзе, Г.Р. Хуцишвили. ЖЭТФ, 54, 876 (1968); 56, 290 (1969).
18. Л.Л. Буишвили, Н.П. Гиоргадзе. ФТТ, 10, 1181 (1968); ДАН, 189, 508 (1969).
19. Н.С. Бендиашвили, Л.Л. Буишвили, М.Д. Звиададзе. ФТТ, 8, 2919 (1966); 11, 727 (1969).
20. Н.С. Бендиашвили, Л.Л. Буишвили, Г.Р. Хуцишвили. ЖЭТФ, 57, 1231 (1969).
21. В.П. Калашников. ФММ, 22, 786 (1966); ФТТ, 9, 634 (1967); Phys.Stat.Sol., 21, 775 (1967); Phys.Lett., 26A, 433 (1968); ДАН, 186, 803 (1969); Физика и техника полупроводников, 1, 1281 (1967); Некоторые вопросы магнетизма и прочности твердых тел, вып. 27, ИФМ АН СССР, Свердловск, 1968.
22. Л.А. Покровский. ДАН, 177, 1054 (1967); 182, 317 (1968); 183, 806 (1968); Теоретическая и математическая физика, 2, 103 (1970).
23. В.Г. Грачев. УФЖ, 13, 633 (1968).
24. Д.Н. Зубарев, А.Г. Башкиров. Phys.Lett., 25A, 202 (1967); Physica, 39, 334 (1968).
25. А.Г. Башкиров, Д.Н. Зубарев. Теоретическая и математическая физика, 1, 407 (1969).
26. Т.Н. Khazanovich, V.A. Savchenko. Phys.Lett., 27A, 615 (1968).
27. Т.Н. Khazanovich. Molecular Physics., 17, 281 (1968); Phys. Lett., 29A, 601 (1969).

28. А.Д. Хонькин. ДАН, 183, 1285 (1968).
29. H.Mori. Phys.Rev., 112, 1829 (1958); Prog.Theor. Phys., 28, 763 (1962).
30. С.В. Пелетминский, А.А. Яценко. ЖЭТФ, 53, 1327 (1967).
31. Н.Н. Проворотов. ЖЭТФ, 41, 1522 (1961).
32. R.Zwanzig. Phys.Rev., 124, 983 (1961).
33. B.Robertson. Phys.Rev., 153, 391 (1967).
34. S.Nakajima. Prog.Theoret.Phys., 20, 948 (1958).

Рукопись поступила в издательский отдел
6 февраля 1970 года.