ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р4 - 5580

Д.Н. Зубарев, В.П. Калашников

ЭКВИВАЛЕНТНОСТЬ НЕКОТОРЫХ МЕТОДОВ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ

1971

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Р4 - 5580

Д.Н. Зубарев, В.П. Калашников

ЭКВИВАЛЕНТНОСТЬ НЕКОТОРЫХ МЕТОДОВ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ

Направлено в журнал "Теоретическая
и математическая физика"

Введение

В последние годы различными авторами построен ряд новых схем теоретического описания необратимых процессов в неравновесных системах [1-5]. Эти методы основаны на гипотезе о сокращении числа параметров, необходимых для описания неравновесной системы в процессе ее эволюции. Именно, предполагается, что для моментов времени, больших некоторого характерного времени "забывания" исходных корреляций, состояние системы можно описать средними значениями $\langle P_m \rangle^t = Sp\,(P_m\,\rho(t,0))$ некоторого ограниченного набора операторов P_m (m -совокупность непрерывных или дискретных индексов), первый аргумент статистического оператора означает зависимость от t через макроскопические переменные, а второй аргумент $t_1 = 0$ указывает на возможную зависимость от времени через представление Гейзенберга. При этом неравновесный статистический оператор (НСО) $\rho\,(t,0)$ можно построить как функционал, зависящий только от операторов P_m и функций $\langle P_m \rangle^t$. Сами функции $\langle P_m \rangle^t$ определяются в результате решения замкнутой системы нелинейных интегродифференциальных уравнений, получаемых усреднением операторных уравнений движения для

P_m по $\rho(t,0)$. Теоретические схемы /1-5/ содержат различные рецепты построения НСО, соответствующего такому сокращенному описанию неравновесных систем.

В каждом из этих методов неравновесный статистический оператор тесно связан с квазиравновесным статистическим оператором $\rho_q(t,0)$

$$\begin{aligned}
\rho_q(t,0) &= \exp\{-S(t,0)\}, \\
S(t,0) &= \Phi(t) + \sum_m F_m(t) P_m, \\
\Phi(t) &= \ln Sp \exp\{-\sum_m F_m(t) P_m\},
\end{aligned} \tag{1.1}$$

причем истинные средние операторов P_m приравниваются к средним значениям этих операторов по распределению $\rho_q(t,0)$,

$$\langle P_m \rangle^t = Sp\,(P_m\,\rho(t,0)) = Sp\,(P_m \rho_q(t,0)), \tag{1.2}$$

что дает уравнения, определяющие $F_m(t)$.

Два набора функций, $F_n(t)$ и $\langle P_n \rangle^t$, являются сопряженными в смысле неравновесной термодинамики и представляют собой наборы обобщенных термодинамических сил и термодинамических координат, соответственно. Таким образом, в рамках каждой из схем /1-5/ существует одна и та же связь термодинамических сил с термодинамическими координатами

$$\langle P_m \rangle^t = -\frac{\delta\,\Phi(t)}{\delta\,F_m(t)}, \qquad F(t) = \frac{\delta\,S(t)}{\delta\,\langle P_m\rangle^t}, \tag{1.3}$$

где $S(t) = \Phi(t) + \sum_n F_n(t)\langle P_n\rangle^t = \langle S(t,0)\rangle^t$ - энтропия системы. Все эти схемы приводят к одинаковым по форме обобщенным кинетическим уравнениям, описывающим эволюцию во времени функций $\langle P_n \rangle^t$, $F_n(t)$ (см. /1a/)

$$-\sum_m \frac{\delta^2 \Phi(t)}{\delta F_n(t)\, \delta F_m(t)} \dot{F}_m(t) = \langle \dot{P}_n \rangle^t = Sp(\dot{P}_n\, \rho(t,0)), \tag{1.4}$$

$$\dot{F}_n(t) = \sum_m \frac{\delta^2 S(t)}{\delta \langle P_n \rangle^t\, \delta \langle P_m \rangle^t} \langle \dot{P}_m \rangle^t \tag{1.5}$$

(где

$$\dot{F}_n(t) = \frac{\partial F(t)}{\partial t}, \quad \dot{P}_n = \frac{1}{ih}[P_n, H]$$

H - гамильтониан системы, для простоты будем считать, что и H не зависит от времени),и к одинаковым по форме выражениям для производства энтропии

$$\dot{S}(t) = \frac{d}{dt}\langle S(t,0)\rangle^t = \langle \sum_n \{\dot{P}_n F_n(t) + (P_n - \langle P_n\rangle^t)\dot{F}_n(t)\}\rangle^t =$$

$$= \sum_n \langle \dot{P}_n \rangle^t F_n(t) = -\sum \frac{\delta^2 \Phi(t)}{\delta F_n(t)\delta F_m(t)} F_n(t)\, \dot{F}_m(t). \tag{1.6}$$

Формулы (1.4), (1.5) и (1.6) в различных методах отличаются только способом усреднения операторов $\dot{P}_n = \frac{1}{ih}[P_n, H]$, т.е. явными выражениями для средних потоков

$$\langle \dot{P}_n \rangle^t = Sp(\dot{P}_n\, \rho(t,0)),$$

которые зависят от явных выражений для $\rho(t, 0)$

В методе, предложенном одним из авторов /1/, НСО записывается в виде канонического распределения квазиинтегралов движения

$$\widetilde{P_n F_n}(t) \equiv \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} P_n(t') F_n(t + t') ,$$

$$P_n(t) = e^{\frac{itH}{h}} P_n e^{-\frac{itH}{h}} \qquad (1.7)$$

и может быть выражен через инвариантную часть оператора энтропии $S(t, 0)$ /1a/:

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

$$= \exp\{-\widetilde{S(t\ 0)}\} = \exp\{\widetilde{\ln \rho_q(t,0)}\} , \qquad (1.8)$$

причем $\epsilon \to +0$ после термодинамического предельного перехода при вычислении средних.

Этот метод построения НСО тесно связан с методом Мак-Леннана /2/, который вводит в уравнение Лиувилля член, описывающий влияние термостата. Отличие метода /1/ от метода Мак-Леннана /2/ состоит в том, что вместо источников, описывающих конечное влияние термостата, в уравнение Лиувилля вводятся бесконечно малые источники, отбирающие его запаздывающие решения /6/. После интегрирования по частям и отбрасывания поверхностных интегралов методы работ /1/ и /2/ приводят к одинаковым результатам, и в этом смысле они эквивалентны. Поэтому далее мы будем сравнивать с другими методами лишь метод /1/.

Другой способ построения НСО изложен в работе авторов /3/. При этом НСО выражается через инвариантную часть квазиравновесного распределения

$$\rho(t,0) = \widetilde{\rho_q(t,0)} = \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} \rho_q(t+t', t') = \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} e^{-S(t+t', t')} . \qquad (1.9)$$

НСО (1.8) и (1.9) удовлетворяют уравнению Лиувилля в смысле квазисредних [6] при $\epsilon \to 0$.

Близкое к формуле (1.9) выражение для $\rho(t,0)$ получено в работах Робертсона [4], который исходил из метода проекционных операторов Цванцига [7] для НСО, описывающего неравновесные системы в терминах огрубленных переменных $\langle P_n \rangle^t$ и $F_n(t)$. Проекционные операторы вводятся Робертсоном в выражении для $\partial \rho_q(t,0)/\partial t$. Его метод приводит к интегральному уравнению для $\rho_q(t,0)$, аналогичному основным кинетическим уравнениям Цванцига [7], и к замкнутому выражению для НСО в виде функционала от $\rho_q(t,0)$.

Пелетминским и Яценко [5] построена еще одна схема сокращенного описания неравновесных систем, основанная на интегральном уравнении для НСО. Близкое по форме интегральное уравнение для НСО [3] получено в работе авторов [8]. Отличие этих уравнений друг от друга обусловлено различием в граничных условиях, принятых при их выводе.

В настоящей работе мы покажем, что методы, изложенные авторами в работах [1-1а,3], эквивалентны между собой в том смысле, что приводят, при некоторых предположениях весьма общего характера, к одинаковым обобщенным кинетическим уравнениям для функций $\langle P_n \rangle^t$ и $F_n(t)$, связанным между собой одинаковыми термодинамическими равенствами (1.3).

Далее, сопоставляя метод Робертсона [4] с методом работы [3], мы покажем, что если явно учесть необратимые граничные условия для уравнения Лиувилля, определяющего НСО, и для обобщенных кинетических уравнений в методе Робертсона, то последний совпадает со схемой [3], основанной на НСО в форме $\rho(t,0) = \rho_q(t,0)$.

По-видимому, нет полной эквивалентности методов [1-3] с методом Пелетминского-Яценко в том его виде, в каком он изложен в работах этих авторов [5]. Если, однако, заменить в этом методе операцию "размешивания", описывающую эволюцию системы во времени при фиксированных значениях функций $F_n(t)$ и $\langle P_n \rangle^t$ (эта операция лежит в основе эргодических соотношений работ [5]), на операцию эволюции системы по ее фазовой траектории (в процессе такой эволюции меняются как динамические переменные, так и функции $F_n(t)$ и $\langle P_n \rangle^t$), то в таком видоизмененном виде этот метод полностью эквивалентен четырем другим методам [1-4], а интегральное уравнение для НСО [1] точно совпадает с интегральным уравнением для НСО [3].

2. Эквивалентность методов НСО [1] и [3]

Покажем эквивалентность представлений НСО в двух формах:

$$\rho(t,0) = \exp\left\{ -\epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, S(t+t_1, t_1) \right\} \tag{2.1a}$$

и

$$\rho(t,0) = \epsilon \int_{-\infty}^{0} d\,_1\, e^{\epsilon t_1} \exp\left\{ -S(t+t_1, t_1) \right\} . \tag{2.1б}$$

Запишем инвариантную часть квазиравновесного распределения в виде

$$\rho(t,0) = \widetilde{\rho_q(t,0)} =$$

$$= \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, e^{-S(t+t_1,t_1)} = \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, e^{\widetilde{-S(t+t_1,t_1) - I(t+t_1,t_1)}} =$$

$$= \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, e^{\widetilde{-S(t+\,_1,t_1)}} + \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \int_0^1 d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \ldots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n\, I_{\tau_1}(t+t_1,t_1) \ldots \times \tag{2.2}$$

$$\times \ldots I_{\tau_n}(t+t_1,t_1)\, e^{\widetilde{-S(t+t_1,t_1)}} .$$

Здесь

$$\widetilde{S}(t,0) = S(t,0) - I(t,0),$$

$$I(t,0) = \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, \dot{S}(t+t_1,t_1), \quad I(t,t_1) = e^{\frac{it_1 H}{h}}\, I(t,0)\, e^{-\frac{it_1 H}{h}},$$

$$\dot{S}(t,0) = \frac{\partial S(t,0)}{\partial t} + \frac{1}{ih}[\dot{S}(t,0), H], \quad S(t,t_1) = e^{\frac{it_1 H}{h}}\dot{S}(t,0)\, e^{-\frac{it_1 H}{h}},$$

$$I_\tau(t+t_1,t_1) = e^{-\tau \widetilde{S}(t+t_1,t_1)}\, I(t+t_1,t_1)\, e^{\tau \widetilde{S}(t+t_1,t_1)}. \tag{2.3}$$

Интегрируя первый член в правой части формулы (2.2) по частям и учитывая, что

$$\frac{d\widetilde{S}(t,0)}{dt} = \frac{\partial \widetilde{S}(t,0)}{\partial t} + \frac{1}{ih}[\widetilde{S}(t,0), H] = \epsilon\, I(t,0), \tag{2.4}$$

получим

$$\epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, e^{-\widetilde{S}(t+t_1,t_1)} =$$

$$= e^{-\widetilde{S}(t,0)} + \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1} \int_0^1 d\tau_1\, I_{\tau_1}(t+t_1,t_1)\, e^{-\widetilde{S}(t+t_1,t_1)}. \tag{2.5}$$

Второе слагаемое правой части формулы (2.5) и первый член суммы (при $n = 1$) разложения (2.2) взаимно уничтожаются. Тогда разность между двумя рассматриваемыми формулами НСО принимает вид

$$\widetilde{e^{-S(t,0)}} - e^{-\widetilde{S}(t,0)} = \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1}\, B(t+t_1,t_1)\, e^{-\widetilde{S}(t+t_1,t_1)}, \tag{2.6}$$

$$B(t+t_1,t_1)=\sum_{n=2}^{\infty}(-1)^n\int_0^1 d\tau_1\ldots\int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n\, I_{\tau_1}(t+t_1,t_1)\ldots I_{\tau_n}(t+t_1,t_1). \quad (2.7)$$

Отметим, что, если можно было бы совершить предельный переход $\epsilon\to 0$ до термодинамического предела, то, воспользовавшись теоремой Абеля, мы имели бы

$$\lim_{t_1\to-\infty}\widetilde{S(t+t_1,t_1)}=\lim_{t_1\to-\infty}S(t+t_1,t_1)=S(-\infty,-\infty)\quad, \qquad (2.8)$$

$$\lim_{\epsilon\to 0}\widetilde{S(t,0)}=S(-\infty,-\infty), \qquad (2.9)$$

$$\lim_{t_1\to-\infty}I(t+t_1,t_1)=\lim_{t_1\to-\infty}I_\tau(t+t_1,t_1)=0\quad,$$

$$\lim_{t_1\to-\infty}B(t+t_1,t_1)=0. \qquad (2.10)$$

Поэтому при $\epsilon\to 0$ правая часть (2.6) стремится к нулю. Таким образом, предельные значения двух форм НСО (2.1а,б) равны между собой:

$$\lim_{\epsilon\to 0}\epsilon\int_{-\infty}^{0}dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, e^{-S(t+t_1,t_1)}=$$
$$=\lim_{\epsilon\to 0}\exp\left\{-\epsilon\int_{-\infty}^{0}dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, S(t+t_1,t_1)\right\}=e^{-S(-\infty,-\infty)}. \qquad (2.11)$$

Равенства (2.10) и (2.11) не означают еще, конечно, эквивалентности НСО (2.1а,б), поскольку предел $\epsilon\to 0$ следует вычислять только после вычисления средних и устремления объема системы к бесконечности. Можно сказать только, что разность (2.6) при малых ϵ может быть сделана как угодно малой, если предел (2.9) существует.

Обсудим теперь эквивалентность двух форм НСО (2.1а,б) с точки зрения вычисления средних значений операторов. Отметим прежде всего, что в силу сохранения нормировки НСО

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{Sp}\ \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1\ e^{\epsilon t_1}\ B\,(t+t_1\,,t_1)\ e^{-\widetilde{S(t+t_1,t_1)}} = \\
&= \mathrm{Sp}\ e^{-\widetilde{S(t,0)}} - \mathrm{Sp}\, e^{-\widetilde{S(t,0)}} = 0
\end{aligned}
\tag{2.12}
$$

при $\epsilon \to 0$ после взятия шпура. Следовательно,по теореме Абеля

$$
\begin{aligned}
&\lim_{\epsilon\to 0} \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1\ e^{\epsilon t_1}\ \mathrm{Sp}\ B\,(t+t_1\,,t_1)\ e^{-\widetilde{S(t+t_1,t_1)}} = \\
&= \lim_{t_1\to-\infty} \mathrm{Sp}\ B\,(t+t_1\,,t_1)\ e^{-\widetilde{S(t+t_1,t_1)}} = 0\ .
\end{aligned}
\tag{2.13}
$$

Умножим правую и левую части равенства (2.6) на произвольный оператор A и вычислим шпур:

$$
\begin{aligned}
&\lim_{\epsilon\to 0} \mathrm{Sp}\ A\,e^{-\widetilde{S(t,0)}} - \lim_{\epsilon\to 0} \mathrm{Sp}\,A\,e^{-\widetilde{S(t,0)}} = \\
&= \lim_{t_1\to-\infty} \mathrm{Sp}\ AB\,(t+t_1\,,t_1)\ e^{-\widetilde{S(t+t_1,t_1)}}\ .
\end{aligned}
\tag{2.14}
$$

Пусть теперь оператор A удовлетворяет принципу ослабления корреляций:

$$
\begin{aligned}
&\lim_{t_1\to-\infty} \mathrm{Sp}\ AB\,(t+t_1\,,t_1)\ e^{-\widetilde{S(t+t_1,t_1)}} = \\
&= \langle A\rangle \lim_{t_1\to-\infty} \mathrm{Sp}\ B\,(t+t_1\,,t_1)\ e^{-\widetilde{S(t+t_1,t_1)}}\ , \\
&\langle A\rangle = \lim_{t_1\to-\infty} \mathrm{Sp}\ A\,e^{-\widetilde{S(t+t_1,t_1)}}\ .
\end{aligned}
\tag{2.15}
$$

Тогда согласно соотношению (2.13) правая часть формулы (2.14) обращается в нуль, и мы получаем

$$\lim_{\epsilon\to 0} \operatorname{Sp} A\, e^{-\widetilde{S(t,0)}} = \lim_{\epsilon\to 0} \operatorname{Sp} A\, e^{-\widetilde{S(t,0)}} . \qquad (2.16)$$

Если оператор A равен $\dot{P}_n = \frac{1}{ih}[P_n, H]$, то из (2.16) следует равенство потоков, обобщенных кинетических уравнений и выражений для производства энтропии, вычисленных с помощью двух форм НСО (2.1а,б). Таким образом, два представления НСО [1] и [3] дают эквивалентные схемы описания необратимых процессов, если операторы $\dot{P}_n$ удовлетворяют принципу ослабления корреляций (2.15).

Отметим, что в тех же условиях для обеих форм НСО справедливо соотношение

$$\lim_{\epsilon\to 0} \frac{\partial}{\partial t} \operatorname{Sp} A\rho(t,0) = \lim_{\epsilon\to 0} \operatorname{Sp} \frac{1}{ih} [A,H]\rho(t,0) , \qquad (2.17)$$

т.е. производные по времени от средних равны средним от производных в смысле квазисредних [9,10], что можно рассматривать как другую формулировку теоремы Лиувилля. Уравнения движения НСО (2.2а,б) имеют вид [1а,3,6]:

$$\frac{\partial\rho(t,0)}{\partial t} + \frac{1}{ih}[\rho(t,0), H] = -R_i(t,0) \qquad (i = 1,2) , \qquad (2.18)$$

где для НСО (2.1а)

$$R_1(t,0) = \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1} \int_0^1 d\tau\, e^{-\tau\widetilde{S(t,0)}}\, \dot{S}(t+t_1, t_1)\, e^{(\tau-1)\widetilde{S(t,0)}} , \qquad (2.19)$$

а для НСО (2.1б)

$$R_2(t,0) = \epsilon \int_{-\infty}^{0} d_1\, e^{\epsilon t_1} \int_0^1 d\tau\, e^{-\tau S(t+t_1,t_1)}\, \dot{S}(t+t_1,t_1)\, e^{(\tau-1)S(t+t_1,t_1)} =$$
$$= \epsilon(\rho(t,0) - \rho_q(t,0)) . \qquad (2.20)$$

Условие сохранения нормировки НСО во времени означает, что при $\epsilon \to 0$ шпур от левой части (2.18) равен нулю. Иначе говоря,

$$\lim_{\epsilon\to 0} Sp\ R_1(t,0) = \lim_{\epsilon\to 0} \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, Sp\ \dot{S}(t+t_1, t_1)\, e^{-\widetilde{S(t,0)}} =$$

$$= \lim_{t_1\to-\infty} Sp\ \dot{S}(t+t_1, t_1)\, e^{-S(t+t_1, t_1)} = \lim_{\epsilon\to 0} Sp\, R_2(t,0) = 0\ . \tag{2.21}$$

Если оператор A удовлетворяет принципу ослабления корреляций, то

$$\lim_{\epsilon\to 0} Sp\ A\ R_1(t,0) = \lim_{t_1\to-\infty} Sp\, A \int_0^1 d\tau\, e^{-\tau \widetilde{S(t,0)}}\ \dot{S}(t+t_1, t_1)\, e^{(\tau-1)\widetilde{S(t,0)}} = \tag{2.22}$$

$$= \langle A \rangle \lim_{t_1\to-\infty} Sp\ \dot{S}(t+t_1, t_1)\, e^{-\widetilde{S(t,0)}} = 0\ ,$$

$$\lim_{\epsilon\to 0} Sp\, A\, R_2(t,0) = \lim_{t_1\to-\infty} Sp\, A \int_0^1 d\tau\, e^{-\tau S(t+t_1, t_1)}\ \dot{S}(\ +t_1, t_1)\, e^{(\tau-1) S(t+t_1, t_1)} = \tag{2.23}$$

$$= \langle A \rangle \lim_{t_1\to-\infty} Sp\ \dot{S}(t+t_1, t_1)\, e^{-S(t+t_1, t_1)}\ .$$

При этом, умножая уравнения движения (2.18) на A и вычисляя шпур, получаем уравнения (2.17). В частном случае, если $A = P_n$, а $\rho(t,0) = \widetilde{\rho_q(t,0)}$, то уравнения (2.17) выполняются при любом ϵ, если

$$\langle P_n \rangle^t = Sp\,(P_n\ \rho_q(t,0)) = \langle P_n \rangle_q^t\ . \tag{2.24}$$

Действительно, умножая (2.18) при $i = 2$ на P_n, с учетом (2.20) и (2.24) получим

$$\frac{\partial}{\partial t} Sp\ P_n\ \rho(t,0) = Sp\ \frac{1}{i\hbar}[P_n, H]\ \rho(t,0) \qquad (2.25)$$

при любом ϵ .

В общем случае, если параметры $F_m(t)$ (или $\langle P_m \rangle^t$) удовлетворяют обобщенным кинетическим уравнениям (1.4), т.е.

$$\frac{d}{dt}\langle P_m \rangle_q^t = \langle \dot{P}_m \rangle^t , \qquad (2.26)$$

достаточно задать равенство (2.24) при $t = -\infty$, чтобы оно выполнялось в любой момент времени.

3. Связь метода НСО [3] с методом Робертсона [4]

Согласно работам [3,6] НСО [3] $\rho(t,0) = \widetilde{\rho_q(t,0)}$ удовлетворяет уравнению Лиувилля с источниками

$$\frac{\partial \rho(t,0)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\rho(t,0), H] = -\epsilon\,(\rho(t,0) - \rho_q(t,0)) . \qquad (3.1)$$

Действительно, формальное решение (3.1) есть $\rho(t,0) = \widetilde{\rho_q(t,0)}$.
Запишем это уравнение в эквивалентной форме:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \epsilon + iL\right)\delta\rho(t,0) = -\left(\frac{\partial \rho_q(t,0)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\rho_q(t,0), H]\right), \qquad (3.2)$$

где $\delta\rho(t,0) = \rho(t,0) - \rho_q(t,0)$, а L –оператор Лиувилля

$$iLA = \frac{1}{i\hbar}[A, H] .$$

Член $\frac{\partial \rho_q(t,0)}{\partial t}$ в правой части уравнения (3.2) можно записать в одной из двух форм

$$\frac{\partial\rho_q(t,0)}{\partial t}=\sum_n \frac{\partial\rho_q(t,0)}{\delta<P_n>^t}\frac{\partial}{\partial t}\,Sp\,(P_n\ \rho_q(t,0))\ , \tag{3.3a}$$

или, с учетом (2.26):

$$\frac{\partial\rho_q(t,0)}{\partial t}=\sum_n \frac{\delta\rho_q(t,0)}{\delta<P_n>^t}\,Sp\ \dot{P}_n\ \rho\ (t,0)\ =\sum_n \frac{\delta\rho_q(t,0)}{\delta<P_n>^t}\times$$

$$\times Sp\ \{\dot{P}_n\ \rho_q(t,0)+\dot{P}_n\ \delta\ \rho\ (t,0)\}\ =-i\,\mathcal{P}(t)\ L\ \rho_q(t,0)-i\,\mathcal{P}(t)\,L\delta\rho\,(t,0), \tag{3.3б}$$

где $\mathcal{P}(t)$ –проекционный оператор, введенный Робертсоном [4].

$$\mathcal{P}(t)A\ =\sum_n \frac{\delta\rho_q(t,0)}{\delta<P_n>^t}\,Sp\,(P_n A\ )\ , \tag{3.4}$$

$$\mathcal{P}(t)\mathcal{P}(t')A\ =\mathcal{P}(t)A\ .$$

Оба выражения, (3.3а) и (3.3б), тождественно равны друг другу, так как в силу существования обобщенных кинетических уравнений

$$\frac{\partial}{\partial t}<P_n>^t\ =\frac{\partial}{\partial t}\,Sp\ P_n\ \rho_q\ (t,0)\ =-i\ Sp\ P_n\ L\ \rho_q(t,0)\ -$$
$$-i\ Sp\ \ P_n\ \ L\ \ \delta\rho(t,0)\ . \tag{3.5}$$

Если взять $\frac{\partial\rho_q(t,0)}{\partial t}$ в форме (3.3а), то в уравнении (3.2) вся правая часть зависит только от $\rho_q(t,0)$, но не содержит $\rho(t,0)$. В этом случае уравнение (3.2) сразу решается относительно $\rho(t,0)$ и решение имеет вид

$$\rho\ (t,0)\ =\epsilon\int_{-\infty}^{0} dt_1\ e^{\epsilon t_1}\ \ e^{it_1L}\ \ \rho_q\ \ (t+t_1,0)\ . \tag{3.6}$$

Если взять $\frac{\partial\rho_q(t,0)}{\partial t}$ в форме (3.3б), то после перенесения в левую часть уравнения (3.2) всех членов, содержащих $\delta\rho\ (t,0)$, получаем

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \epsilon + i\,(1-\mathcal{P}(t))\,L \right\} \delta\rho\,(t,0) = -i\,(1-\mathcal{P}(t))\,L\,\rho_q\,(t,0). \qquad (3.7)$$

Это уравнение можно решить аналогично тому, как это сделано в работах Робертсона [4]. Умножим обе части уравнения (3.7) слева на оператор $e^{\epsilon t'}\,T\,(t,t')$, где оператор $T\,(t,t')$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial}{\partial t'}\,T\,(t,t') = i\,T\,(t,t')\,(1-\mathcal{P}(t'))\,L \qquad (3.8)$$

с начальным условием $T\,(t,t) = 1$. Тогда (3.7) принимает вид

$$\frac{d}{dt'}\,e^{\epsilon t'}\,T\,(t,t')\,\delta\rho\,(t',0) = -i\,e^{\epsilon t'}\,T\,(t,t')\,(1-\mathcal{P}(t'))\,L\,\rho_q\,(t',0). \qquad (3.9)$$

Интегрируя это уравнение в пределах от $t' = -\infty$ до $t' = t$, получаем

$$\rho\,(t,0) = \rho_q\,(t,0) - \int_{-\infty}^{t} dt'\,e^{\epsilon(t'-t)}\,T\,(t,t')\,(1-\mathcal{P}(t'))\,L\,\rho_q\,(t',0), \qquad (3.10)$$

или

$$\rho\,(t,0) = \rho_q\,(t,0) - i\int_{-\infty}^{0} dt'\,e^{\epsilon t'}\,T\,(t,t+t')(1-\mathcal{P}(t+t'))\,L\,\rho_q\,(t+t',0) \qquad (3.10a)$$

(полагаем $\lim e^{\epsilon t'}\,T\,(t,t')\,\delta\rho\,(t',0) = 0$). Таким образом, формулы (3.6) и (3.10) представляют собой две равноценные формы записи решения уравнения Лиувилля с источниками (3.1). Соотношение типа (3.10) лежит в основе метода, развитого Робертсоном [4], а соотношение (3.6) – в основе нашего метода [3]. Отличие НСО (3.10) от соответствующего выражения Робертсона заключается в наличии множителя $e^{\epsilon(t'-t)}$ в интегральном члене формулы (3.10). Этот множитель связан с необратимым характером уравнения Лиувилля (3.1) с бесконечно малым источником. Если, как это делает Робертсон, исходить из точного уравнения Лиувилля без источников в правой части, то получится формула (3.10) без множителя $e^{\epsilon(t'-t)}$. Полученное решение, однако, будет обратимым во времени, как исходное уравнение Лиувилля, и с его помощью нельзя получить уравнения для необратимых процессов, не налагая дополнительных граничных условий. Это можно сделать выбором обхода полюсов в комплексной плоскости. Другое отличие НСО (3.10) от формулы Робертсона связано с выбором момента времени t_0, при котором $\rho(t_0, 0) = \rho_q(t_0, 0)$. В технике Робертсона принимается $t_0 = 0$, в то время как в формуле (3.10) $t_0 = -\infty$. Выбор $t_0 = -\infty$, по нашему мнению, более удобен, поскольку при этом исключаются нефизические переходные эффекты.

Отметим также, что обобщенные кинетические уравнения можно получить, усредняя по распределению (3.10) операторные уравнения движения

$$\dot{P}_n = i L P_n . \tag{3.11}$$

Таким образом, мы получаем уравнение вида

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle P_n \rangle^t = -i \mathrm{Sp}\, P_n L \rho_q(t,0) - \int_{-\infty}^{t} dt' e^{\epsilon(t'-t)} \mathrm{Sp}\{P_n L T(t,t')(1-\mathcal{P}(t')) L \rho_q(t',0)\} . \tag{3.12}$$

Другой эквивалентный подход заключается в использовании уравнения движения для $\rho_q(t,0)$. Последнее можно получить, подставив в формулу (3.3б) решение (3.10), что дает

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_q(t,0) = -i \mathcal{P}(t) L \rho_q(t,0) - i \mathcal{P}(t) L\, \delta\rho(t,0) = \tag{3.13}$$

$$= -i \mathcal{P}(t) L \rho_q(t,0) - \int_{-\infty}^{t} dt' e^{\epsilon(t'-t)} \mathcal{P}(t) L T(t,t')(1-\mathcal{P}(t')) L \rho_q(t',0) .$$

Теперь обобщенные кинетические уравнения получаются, если умножить уравнение (3.13) на операторы P_n и вычислить шпур. Поскольку

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{Sp}\, P_n \mathcal{P}(t) A = \mathrm{Sp}\, P_n \sum_m \frac{\delta \rho_q(t,0)}{\delta \langle P_m \rangle^t} \mathrm{Sp}(P_m A) = \\
&= \sum_m \frac{\delta \langle P_n \rangle^t}{\delta \langle P_m \rangle^t} \mathrm{Sp}(P_m A) = \mathrm{Sp}(P_n A), \\
&\mathrm{Sp}\, P_n \frac{\partial \rho_q(t,0)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \mathrm{Sp}\, P_n \rho_q(t,0) = \frac{\partial}{\partial t} \langle P_n \rangle^t,
\end{aligned}
\tag{3.14}
$$

то при таком подходе снова получаются уравнения (3.12). В методе Робертсона используется уравнение движения для $\rho_q(t,0)$ и макроскопические уравнения переноса, которые отличаются соответственно от уравнений (3.13) и (3.12) отсутствием множителя $e^{\epsilon(t'-t)}$ и нижним пределом $t_0 = 0$ интегрирования по времени. Можно сказать поэтому, что метод Робертсона /4/ будет полностью эквивалентен методу НСО /3/, если в методе Робертсона под $\rho(t,0)$ понимать решение уравнения Лиувилля с источниками (3.1), обеспечивающими необратимый характер эволюции во времени как самого статистического оператора, так и функций $\langle P_n \rangle^t$ и $F_n(t)$, являющихся решениями обобщенных кинетических уравнений, и заменить нижний предел интегрирования по времени $t_0 = 0$ на $t_0 = -\infty$.

Другая, равноценная (3.13) форма уравнения движения для оператора $\rho_q(t,0)$ получается, если в формулу (3.3б) подставить решение (3.6):

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t} \rho_q(t,0) = - \mathcal{P}(t) L \rho(t,0) = \\
&= -i\epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1} \mathcal{P}(t) L e^{i t_1 L} \rho_q(t+t_1, 0).
\end{aligned}
\tag{3.15}
$$

Умножая уравнение (3.15) на P_n и вычисляя шпур, получим уравнение движения для макроскопических переменных $\langle P_n \rangle^t$ в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle P_n \rangle^t = -i\epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, Sp\, P_n\, L\, e^{it_1L} \rho_q(t+t_1, 0) \,. \tag{3.16}$$

В методе Робертсона [4] обобщенные уравнения переноса записываются в форме (3.12), а в методе НСО [3] – в эквивалентной форме (3.16). Отличие уравнений (3.12), (3.13) и (3.15), (3.16) друг от друга обусловлено различием способа записи явного выражения для НСО: в форме (3.10) или в форме (3,6). Следует отметить, что технически обобщенные кинетические уравнения (3.12), полученные по методу Робертсона, гораздо сложнее уравнений (3.16), хотя и полностью эквивалентны последним.

По структуре уравнение (3.13) совпадает с основным кинетическим уравнением Цванцига [7], но с другим определением оператора $\mathcal{P}$, подобно тому, как уравнение (3.15) может быть записано в более простой эквивалентной форме, содержащей только обычные операторы эволюции $\exp(itL)$. Этот вопрос будет рассмотрен в другой работе.

4. Операция взятия инвариантной части как проекционный оператор. Другие формулировки методов НСО [1] и НСО [3]

Покажем, что метод НСО [3] можно сформулировать в виде равенства

$$\widetilde{\rho(t,0)} = \widetilde{\rho_q(t,0)} \,, \tag{4.1}$$

или

$$\epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, e^{\frac{it_1H}{\hbar}} \rho(t+t_1, 0)\, e^{-\frac{it_1H}{\hbar}} =$$

$$= \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, e^{\frac{it_1H}{\hbar}} \rho_q(t+t_1, 0)\, e^{-\frac{it_1H}{\hbar}} \,. \tag{4.2}$$

Действительно, интегрируя левую часть уравнения (4.2) по частям, получим

$$\rho(t,0) - \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1} \frac{d}{dt_1} \rho(t + t_1, t_1) = \widetilde{\rho_q(t,0)}\,. \tag{4.3}$$

Поскольку в методе НСО /2/ $\rho(t,0)$ удовлетворяет уравнению Лиувилля с источниками

$$\frac{d}{dt_1} \rho(t + t_1, t_1) = -\epsilon\left(\rho(t + t_1, t_1) - \rho_q(t + t_1, t_1)\right), \tag{4.4}$$

то интегральный член в формуле (4.3) равен

$$\epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1} \left(\rho(t + t_1, t_1) - \rho_q(t + t_1, t_1)\right) = \widetilde{\rho(t,0)} - \widetilde{\rho_q(t,0)} = 0, \tag{4.5}$$

согласно соотношению (4.1). Тогда (4.3) принимает вид НСО /3/:

$$\rho(t,0) = \widetilde{\rho_q(t,0)}\,. \tag{4.6}$$

Следует отметить, что при формулировке метода НСО /3/ с помощью равенства (4.1) безразлично, является ли $\rho(t,0)$ решением уравнения Лиувилля с источниками (4.4) или решением точного уравнения Лиувилля

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

В последнем случае

$$\frac{d}{dt_1} \rho(t + t_1, t_1) = 0, \quad \rho(t + t_1, t_1) = \rho(t,0), \quad \widetilde{\rho(t,0)} = \rho(t,0)\,.$$

Поэтому интегральный член в формуле (4.3) равен нулю и (4.1) переходит в (4.6). Формулировки (4.1) и (4.6) тождественны лишь при $\epsilon \to 0$. При этом выполняется следующее соотношение:

$$\lim_{\epsilon\to 0} \operatorname{Sp} A \widetilde{\rho_q(t,0)} = \lim_{\epsilon\to 0} \operatorname{Sp} A \widetilde{\widetilde{\rho_q(t,0)}}\,, \tag{4.7}$$

где A -произвольный оператор. Это означает, что при $\epsilon \to 0$ операция взятия инвариантной части от $\rho_q(t,0)$ представляет собой некоторую операцию проектирования оператора $\rho_q(t,0)$ в подпространство, образованное интегралами уравнения Лиувилля с заданным гамильтонианом H.

Равенство (4.1) с помощью теоремы Абеля можно записать в виде эргодического соотношения

$$e^{\frac{it_1H}{\hbar}} \rho_q(t+t_1,0)\, e^{-\frac{it_1H}{\hbar}} \xrightarrow[t_1\to-\infty]{} e^{\frac{it_1H}{\hbar}} \rho(t+t_1\ 0)\, e^{-\frac{it_1H}{\hbar}}\,, \tag{4.8а}$$

или

$$e^{-\frac{it_1H}{\hbar}} \rho_q(t-t_1,0)\, e^{\frac{it_1H}{\hbar}} \xrightarrow[t_1\to\infty]{} e^{-\frac{it_1H}{\hbar}} \rho(t-t_1,0)\, e^{\frac{it_1H}{\hbar}}\,, \tag{4.8б}$$

где $\rho(t,0)$ есть решение уравнения Лиувилля, точного или с источниками.

Соотношения (4.8) выражают тот факт, что в результате эволюции неравновесной системы с гамильтонианом H некоторое исходное распределение $\rho_q(t,0)$ переходит в инвариантное распределение $\rho(t,0)$, являющееся интегралом уравнения Лиувилля. Для макроскопических систем соотношения (4.8) должны выполняться для любых начальных распределений $\rho_q(t,0)$. Поэтому можно, в частности, выбрать оператор $\rho_q(t,0)$ в виде произвольного квазиравновесного распределения (1.1), зависящего от набора функций $F_n(t)$ или $\langle P_n\rangle^t$. Тогда $\rho(t,0)$ будет зависеть от тех же функций $F_n(t)$ или $\langle P_n\rangle^t$. Совершенно аналогично можно показать, что метод НСО /1/ можно сформулировать в форме, аналогичной (4.1). Именно,

$$\widetilde{\ln \rho\ (t,0)} = \widetilde{\ln \rho_q\ (t,0)}\ , \tag{4.9}$$

или

$$\begin{aligned} &\epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, e^{\frac{it_1H}{\hbar}} \ln \rho\ (t+t_1,0)\, e^{-\frac{it_1H}{\hbar}} = \\ &= \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, e^{\frac{it_1H}{\hbar}} \ln \rho_q\ (t+t_1,0)\, e^{-\frac{it_1H}{\hbar}}\ . \end{aligned} \tag{4.10}$$

Действительно, полагая, что $\ln \rho\ (t,0)$ удовлетворяет уравнению Лиувилля (точному или с источниками /6/)

$$\frac{\partial}{\partial t} \ln\ \rho\ (t,0) + \frac{1}{i\hbar}\, [\ln \rho\ (t,0), H\ ] = -\ R\ (t,0)\ , \tag{4.11}$$

где $R\ (t,0)$ равно $\epsilon\ (\ln \rho\ (t,0) - \ln \rho_q\ (t,0))$ или 0, из (4.10) сразу получаем

$$\ln \rho\ (t,0) = \widetilde{\ln \rho_q}\ (t,0)\ , \tag{4.12}$$

то есть формулировку метода НСО /1/. При этом

$$\lim_{\epsilon \to 0} Sp\ A\ \widetilde{\ln \rho_q\ (t,0)} = \lim_{\epsilon \to 0} Sp\ A\ \widetilde{\widetilde{\ln \rho_q\ (t,0)}}\ . \tag{4.13}$$

Допустим, что гамильтониан системы имеет вид

$$H = H_0 + V\ , \tag{4.14}$$

где H_0 будем интерпретировать как гамильтониан основного состояния, а V -как некоторое возмущение. Пусть $\rho\ (t,0)$ есть НСО, удовлетворяющий уравнению Луивилля с гамильтонианом H. Если начиная с момента времени t эволюция системы во времени будет определяться гамильтонианом H_0, то по прошествии отрезка времени t_1 статистический оператор примет вид

$$e^{\frac{it_1H_0}{\hbar}} \rho\,(t+t_1,0)\, e^{-\frac{it_1H_0}{\hbar}} . \tag{4.15}$$

Если бы $\rho\,(t,0)$ удовлетворял уравнению Лиувилля не с H, а с H_0, то величина (4.15) не зависела бы от t_1.

При больших t_1 (положительных или отрицательных) следует ожидать, что распределение (4.15) будет приближаться к интегралу уравнения Лиувилля, соответствующего гамильтониану H_0. Другими словами, при $t_1 \to \pm\infty$ выражение (4.15) должно быть инвариантным по отношению к эволюции системы с гамильтонианом H_0 (выбор $t_1 \to -\infty$ соответствует запаздывающим, а $t_1 \to +\infty$ опережающим решениям уравнения Лиувилля). Пусть нас интересует $\rho\,(t,0)$, зависящий от определенного набора функций $F_n(t)$ или $\langle P_n \rangle^t$. Нетрудно построить распределение $\rho^0\,(t,0)$, зависящее от того же набора функций и инвариантное по отношению к эволюции с гамильтонианом H_0. Действительно, распределение

$$\rho^0\,(t,0) = \epsilon \int\limits_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, e^{\frac{it_1H_0}{\hbar}} \rho\,(t+t_1,0)\, e^{-\frac{it_1H_0}{\hbar}} \tag{4.16}$$

удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial \rho^0\,(t,0)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}\,[\rho^0(t,0)\,,H_0] = -\epsilon\,(\rho^0(t,0) - \rho_q\,(t,0)\,) \tag{4.17}$$

и при $\epsilon \to +0$ является интегралом уравнения Лиувилля с гамильтонианом H_0 (выбор знака ϵ фиксирует запаздывающее решение). Применяя теорему Абеля к (4.16), получим из (4.15) и (4.16) эргодическое соотношение

$$e^{\frac{it_1H_0}{\hbar}} \rho(t+t_1,0) e^{-\frac{it_1H_0}{\hbar}} \xrightarrow[t_1\to-\infty]{} e^{\frac{it_1H_0}{\hbar}} \rho_q\,(t+t_1\,,0) e^{-\frac{it_1H_0}{\hbar}} , \tag{4.18a}$$

$$e^{-\frac{it_1H_0}{\hbar}}\rho(t-t_1,0)\,e^{\frac{it_1H_0}{\hbar}} \xrightarrow[t_1\to\infty]{} e^{-\frac{it_1H_0}{\hbar}}\rho_q(t-t_1,0)\,e^{\frac{it_1H_0}{\hbar}} . \qquad (4.18б)$$

Снова применяя теорему Абеля, получаем из (4.18а):

$$\epsilon\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\epsilon t_1}\,e^{\frac{it_1H_0}{\hbar}}\rho(t+t_1,0)\,e^{-\frac{it_1H_0}{\hbar}} =$$

$$= \epsilon\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\epsilon t_1}\,e^{-\frac{it_1H_0}{\hbar}}\rho_q(t+t_1,0)\,e^{-\frac{it_1H_0}{\hbar}} . \qquad (4.19)$$

$$\epsilon \to +0$$

Учитывая, что $\rho(t,0)$ удовлетворяет уравнению Лиувилля с гамильтонианом H, из (4.19) легко получить интегральное уравнение для $\rho(t,0)$. Ниже мы покажем, что оно полностью совпадает с интегральным уравнением для НСО /3/, полученным в работе /8/ исходя из определения НСО в виде $\rho(t,0)=\rho_q(t,0)$. Отметим, что в (4.19) слева стоит инвариантная часть НСО по отношению к эволюции с гамильтонианом H_0, а справа – такая же инвариантная часть от квазиравновесного распределения $\rho_q(t,0)$. Таким образом, отличие формулировки (4.19) от (4.1) заключается лишь в том, что в (4.19) приравниваются проекции операторов $\rho(t,0)$ и $\rho_q(t,0)$ в подпространстве интегралов движения с гамильтонианом H_0, в то время как в (4.1) приравниваются проекции тех же операторов в подпространство интегралов движения с полным гамильтонианом H.

Интегрируя левую часть (4.19) по частям, получаем

$$\rho(t,0)-\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\epsilon t_1}\,e^{\frac{it_1H_0}{\hbar}}\left\{\frac{\partial\rho(t+t_1,0)}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}[\rho(t+t_1,0),H_0]\right\}e^{-\frac{it_1H_0}{\hbar}} =$$

$$= \rho^0(t,0) . \qquad (4.20)$$

Если $\rho(t,0)$ есть решение точного уравнения Лиувилля, то интегральный член в левой части (4.20) равен

$$\int_{-\infty}^{0} dt_1 \; e^{\epsilon t_1} \; e^{\frac{it_1 H_0}{h}} \frac{1}{ih} [\rho(t+t_1,0), V] \, e^{-\frac{it_1 H_0}{h}} . \qquad (4.21)$$

Если же $\rho(t,0)$ удовлетворяет уравнению Лиувилля с источниками $-\epsilon(\rho(t,0) - \rho_q(t,0))$, то интегральный член имеет вид

$$\int_{-\infty}^{0} dt_1 \; e^{\epsilon t_1} \; e^{\frac{it_1 H_0}{h}} \left\{ \frac{1}{ih} [\rho(t+t_1,0), V] + \epsilon [\rho(t+t_1,0) - \rho_1(t+t_1,0)] \right\} e^{\frac{it_1 H_0}{h}} . \qquad (4.22)$$

Согласно соотношению (4.19) интеграл от членов в квадратной скобке в выражении (4.22) обращается в нуль, и (4.22) переходит в выражение (4.21). Таким образом, уравнение (4.19), как и (4.1), нечувствительно к замене точного решения уравнения Лиувилля с полным гамильтонианом H на инвариантную часть от $\rho_q(t,0)$ (4.6). Теперь уравнение (4.20) принимает вид

$$\rho(t,0) = \rho^0(t,0) - \int_{-\infty}^{0} dt_1 \, e^{\epsilon t_1} \; e^{\frac{it_1 H_0}{h}} \frac{1}{ih} [\rho(t+t_1,0), V] \, e^{-\frac{it_1 H_0}{h}} , \qquad (4.23а)$$

или

$$\rho(t,0) = \rho_q(t,0) -$$

$$- \int_{-\infty}^{0} dt_1 \; e^{\epsilon t_1} \; e^{\frac{it_1 H_0}{h}} \left\{ \frac{\partial \rho_q(t+t_1,0)}{\partial t} + \frac{1}{ih} [\rho_q(t+t_1,0), H_0] + \right. \qquad (4.23б)$$

$$\left. + \frac{1}{ih} [\rho(t+t_1,0) V] \right\} e^{-\frac{it_1 H_0}{h}} .$$

Интегральное уравнение (4.23) точно совпадает с интегральным уравнением для НСО $\rho(t,0) = \widetilde{\rho_q(t,0)}$ /8/. Это доказывает полную эквивалентность определений $\rho(t,0)$ с помощью соотношений (4.19), (4.6) и (4.1).

Аналогично определения НСО /1/ с помощью соотношений (4.9) и (4.12) эквивалентны определению

$$\epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1 \; e^{\epsilon t_1} \; e^{\frac{it_1 H_0}{\hbar}} \ln \rho\,(t+t_1,0)\, e^{-\frac{it_1 H_0}{\hbar}} =$$

$$= \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1 \; e^{\epsilon t_1} \; e^{\frac{it_1 H_0}{\hbar}} \ln \rho_q\,(t+t_1,0)\, e^{-\frac{it_1 H_0}{\hbar}} , \qquad (4.24)$$

где $\ln \rho\,(t,0)$ удовлетворяет уравнению Лиувилля с полным гамильтонианом H (точному или с источниками вида $-\epsilon\,(\ln \rho\,(t,0) - \ln \rho_q\,(t,0)\,)$. Легко показать, что (4.24) приводит к интегральному уравнению для $\ln \rho\,(t,0)$, точно совпадающему с интегральным уравнением для $\ln \rho\,(t,0)$, полученным в работе /8/ исходя из определения метода НСО /1/ в форме (4.12):

$$\ln \rho\,(t,0) = \ln \rho_q\,(t,0) -$$

$$- \int_{-\infty}^{0} dt_1 \; e^{\epsilon t_1} \; e^{\frac{it_1 H_0}{\hbar}} \Big\{ \frac{\partial}{\partial t_1} \ln \rho_q\,(t+t_1,0) + \frac{1}{i\hbar}\,[\ln \rho_q(t+t_1,0), H_0] + \qquad (4.25)$$

$$+ \frac{1}{i\hbar}\,[\ln \rho\,(t+t_1,0), V\,]\Big\}\, e^{-\frac{it_1 H_0}{\hbar}} .$$

Это доказывает эквивалентность определений НСО /1/ с помощью соотношений (4.9),(4.12) и (4.24).

Отметим, что при выводе уравнений (4.23) и (4.25) разбиение гамильтониана H на H_0 и V сделано совершенно произвольно. Весь вывод этих уравнений останется неизменным, если, например, операторы H_0 и V поменять местами.

Рассмотрим уравнение (4.23) в специальном частном случае, когда уравнения движения для операторов P_n имеют вид

$$\dot{P}_n = \frac{1}{i\hbar}[P_n, H_0 + V] = \sum ia_{nm} P_m + \dot{P}_n(v),$$

$$\dot{P}_{n(V)} = \frac{1}{i\hbar}[P_n, V]. \tag{4.26}$$

Удобно перейти к векторным величинам P, $<P>^t$, $F(t)$ с компонентами P_n, $<P_n>^t$, $F_n(t)$. Тогда уравнение (4.26) примет вид

$$\dot{P} = ia P + \dot{P}_{(V)}, \tag{4.27}$$

где a –матрица с элементами a_{mn}. Найдем теперь уравнения движения для макроскопических переменных $<P>$ и $F(t)$. Имеем

$$\frac{\partial F(t)}{\partial t} = \frac{\delta F(t)}{\delta <P>^t} <\dot{P}>^t = \frac{\delta F(t)}{\delta <P>^t} \{ia <P>^t + <\dot{P}_{(V)}>^t\}. \tag{4.28}$$

Далее,

$$\frac{1}{i\hbar} <[F(t)P, H_0]>^t_q = iF(t)a <P>^t \equiv 0, \tag{4.29}$$

т.к. $<P>^t_q = <P>^t$ и $F(t)P$ коммутирует с ρ_q,

$$\frac{\delta F(t)}{\delta <P>^t} a <P>^t = -F(t)a. \tag{4.30}$$

Таким образом, искомые уравнения записываются в виде

$$\frac{\partial F(t)}{\partial t} = -iF(t)a + \frac{\delta F(t)}{\delta <P>^t} <P_{(V)}>^t, \tag{4.31}$$

$$\frac{\partial\langle P\rangle^t}{\partial t} = ia\langle P\rangle^t + \langle\dot{P}_{(V)}\rangle^t \quad . \tag{4.32}$$

Последнее уравнение получается усреднением (4.27) по НСО . Уравнения (4.31) и (4.32) списывают "прецессию" величин $F(t)$ и $\langle P\rangle^t$ с постоянными частотами a_{nm} и противоположными фазами или свободную эволюцию и релаксацию за счет взаимодействия V .

Введем представление взаимодействия для операторов P :

$$\bar{P}_t = e^{-\frac{itH_0}{\hbar}} P e^{-\frac{tH_0}{\hbar}} = e^{-iat} P \,, \quad P = e^{iat}\bar{P}_t \quad . \tag{4.33}$$

Тогда $\langle\bar{P}_t\rangle^t = e^{-iat}\langle P\rangle^t$. Определим также функции $\bar{F}(t)$ с помощью соотношений

$$F(t) = \bar{F}(t)\, e^{-iat} \quad , \quad \bar{F}(t) = F(t)\, e^{iat} \quad . \tag{4.34}$$

Согласно (4.31), (4.32) функции $\langle\bar{P}_t\rangle^t$ и $\bar{F}(t)$ удовлетворяют уравнениям

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\bar{P}_t\rangle^t = e^{-iat}\langle\dot{P}_{(V)}\rangle^t = Sp\,\frac{1}{i\hbar}\,[\bar{P}_t\,, V\,]\,\rho(t,0)\,,$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\bar{F}(t) = \frac{\delta F(t)}{\delta\langle P\rangle^t}\cdot\langle\dot{P}_{(V)}\rangle^t e^{iat} = \frac{\delta\bar{F}(t)}{\delta\langle\bar{P}_t\rangle^t}\,Sp\,\frac{1}{i\hbar}\,[\bar{P}_t\,, V\,]\,\rho(t,0)\,. \tag{4.34a}$$

При малом V $\bar{F}(t)$ и $\langle\bar{P}_t\rangle^t$ – медленно меняющиеся функции времени. Отметим, что термодинамические потенциалы $\Phi(t)$ и $S(t)$ выражаются только через функции $\bar{F}(t)$ и $\langle\bar{P}_t\rangle^t$:

$$\Phi(t) = \ln \mathrm{Sp} \exp\{-F(t)P\} = \ln \mathrm{Sp}\, e^{-\frac{itH_0}{\hbar}} \exp\{-F(t)P\} e^{\frac{itH_0}{\hbar}} =$$

$$= \ln \mathrm{Sp} \exp\{-\bar{F}(t)\bar{P}\} \equiv \bar{\Phi}(t), \tag{4.35}$$

$$S(t) = \Phi(t) + F(t)\langle P\rangle^t = \bar{\Phi}(t) + \bar{F}(t)\langle \bar{P}_t\rangle^t \equiv \bar{S}(t).$$

Поэтому

$$\langle \bar{P}_t\rangle^t = -\frac{\delta\bar{\Phi}(t)}{\delta\bar{F}(t)}, \qquad \bar{F}(t) = \frac{\delta\bar{S}(t)}{\delta\langle\bar{P}_t\rangle^t}. \tag{4.36}$$

Кроме того,

$$\frac{\delta F(t)}{\delta\bar{F}(t)} = e^{-iat}, \quad \frac{\delta F(t)}{\delta\langle\bar{P}_t\rangle^t} = \frac{\delta\bar{F}(t)}{\delta\langle\bar{P}_t\rangle^t}e^{-iat}, \quad \frac{\delta\bar{F}(t)}{\delta\langle P\rangle^t} = \frac{\delta F(t)}{\delta\langle P\rangle^t}e^{iat} = \frac{\delta F(t)}{\delta\langle\bar{P}_t\rangle^t}e^{-iat},$$

$$\frac{\delta\langle P\rangle^t}{\delta\langle\bar{P}_t\rangle^t} = e^{iat}, \quad \frac{\delta\langle P\rangle^t}{\delta\bar{F}(t)} = e^{iat}\frac{\delta\langle\bar{P}_t\rangle^t}{\delta\bar{F}(t)}, \quad \frac{\delta\langle\bar{P}_t\rangle^t}{\delta F(t)} = e^{-iat}\frac{\delta\langle P\rangle^t}{\delta F(t)} = e^{-iat}\frac{\delta\langle\bar{P}_t\rangle^t}{\delta\bar{F}(t)},$$

$$\frac{\delta\langle P\rangle^t}{\delta F(t)} = e^{iat}\frac{\delta\langle\bar{P}_t\rangle^t}{\delta\bar{F}(t)}e^{iat}, \quad \frac{\delta F(t)}{\delta\langle P\rangle^t} = e^{-iat}\frac{\delta\bar{F}(t)}{\delta\langle\bar{P}_t\rangle^t}e^{-iat}. \tag{4.37}$$

Квазиравновесный статистический оператор принимает вид

$$\rho_q(t,0) = \exp\{-\Phi(t) - F(t)P\} = \exp\{-\Phi(t) - \bar{F}(t)\bar{P}_t\} = \rho_q\{F(t), 0\} =$$

$$= \rho_q\{\langle P\rangle^t, 0\} = \rho_q\{\bar{F}(t)e^{-iat}, 0\} = \rho_q\{e^{iat}\langle\bar{P}_t\rangle^t, 0\} = \tag{4.38}$$

$$= e^{-\frac{itH_0}{\hbar}}\rho_q\{\langle\bar{P}_t\rangle^t, 0\} e^{\frac{itH_0}{\hbar}}.$$

Поэтому

$$e^{-\frac{it_1H_0}{\hbar}}\rho_q(t,0)\,e^{\frac{it_1H_0}{\hbar}}=\rho_q\{F(t)e^{-iat_1},0\}=\rho_q\{e^{iat_1}<P>^t,0\}\ . \qquad (4.39)$$

Теперь легко записать НСО /3/ как функционал только от медленно меняющихся функций $<\bar{P}_t>^t$ или $\bar{F}(t)$:

$$\rho(t,0)=\epsilon\int_{-\infty}^{0}dt_1 e^{\epsilon t_1}\,e^{\frac{it_1H}{\hbar}}\,e^{-\frac{i(t+t_1)H_0}{\hbar}}\rho_q\{<\bar{P}_{t+t_1}>^{t+t_1},0\}\,e^{\frac{i(t+t_1)H_0}{\hbar}}\,e^{-\frac{it_1H}{\hbar}}=$$

$$=\epsilon\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\epsilon t_1}\,e^{\frac{it_1H}{\hbar}}\rho_q\{e^{ia(t+t_1)}<\bar{P}_{t+t_1}>^{t+t_1},0\}\,e^{-\frac{it_1H}{\hbar}}. \qquad (4.40)$$

В рассматриваемом случае эргодическое условие (4.18а) принимает вид

$$e^{\frac{it_1H_0}{\hbar}}\rho(t+t_1,0)\,e^{-\frac{it_1H_0}{\hbar}}\xrightarrow[t_1\to-\infty]{}\rho_q\{e^{iat}<\bar{\bar{P}}_{t+t_1}>^{t+t_1},0\}, \qquad (4.41)$$

а интегральное уравнение (4.32) записывается в форме /8/

$$\rho(t,0)=\rho_q(t,0)-\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\epsilon t_1}\,e^{\frac{it_1H_0}{\hbar}}\{\frac{1}{i\hbar}[\rho(t+t_1,0),V]+$$
$$+\frac{\delta\rho_q(t+t_1,0)}{\delta<P>^{t+t_1}}<\dot{P}_{(V)}>^{t+t_1}\}\,e^{-\frac{it_1H_0}{\hbar}}\ . \qquad (4.42)$$

Удобно ввести операторы эволюции для функций от медленно меняющихся переменных:

$$f\{<\bar{P}_{t+t_1}>^{t+t_1}\}=\bar{U}(t+t_1,t)\,f\{<\bar{P}_t>^t\}\,\bar{U}^+(t+t_1,t)\ , \qquad (4.43)$$

где

$$\bar{U}(t+t_1,t) = \exp\left(t_1, \frac{\partial}{\partial t}\right) = T\exp\left\{\int_t^{t+t_1} d\tau \left(\frac{\partial}{\partial \tau} <\bar{P}_\tau>^\tau\right)\frac{\partial}{\partial <P_\tau>^\tau}\right\} =$$

$$= T\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_t^{t+t_1} d\tau <[P, V]>^\tau \frac{\partial}{\partial <P>^\tau}\right\}. \tag{4.44}$$

Тогда уравнение (4.42) принимает вид

$$\rho(t,0) = \rho_q\{<P>^t, 0\} - \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, e^{\frac{it_1 H_0}{\hbar}}\left\{\frac{1}{i\hbar}[\rho(t+t_1,0), V] + \right.$$

$$+\bar{U}(t+t_1,t)\frac{\delta\rho_q\{e^{iat_1}<P>^t, 0\}}{\delta e^{iat_1}<P>^t}\bar{U}^+(t+t_1,t)\times \tag{4.45}$$

$$\left.\times Sp\, \dot{P}_{(V)}\,\rho(t+t_1,0)\right\} e^{-\frac{it_1 H_0}{\hbar}}.$$

Решение этого уравнения есть НСО вида

$$\rho(t,0) = \epsilon\int_{-\infty}^{0} dt_2\, e^{\epsilon t_2}\, e^{\frac{it_2 H}{\hbar}}\,\bar{U}(t+t_2,t)\times$$

$$\times\rho_q\{e^{iat_2}<P>^t, 0\}\,\bar{U}^+(t+t_2,t)\, e^{-\frac{it_2 H}{\hbar}}, \tag{4.46}$$

$$\rho(t+t_1,0) = \epsilon\int_{-\infty}^{0} dt_2\, e^{\epsilon t_2}\, e^{\frac{it_2 H}{\hbar}}\,\bar{U}(t+t_1+t_2, t+t_2)\,\bar{U}(t+t_2,t)\times \tag{4.47}$$

$$\rho_q\{e^{ia(t_1+t_2)}<P>^t, 0\}\,\bar{U}^+(t+t_2,t)\,\bar{U}^+(t+t_1+t_2, t+t_2)\, e^{-\frac{it_2 H}{\hbar}}.$$

Для стационарных процессов $<\bar{P}_t>^t = <\bar{P}> = const$, $\bar{U}(t,t_1) = 1$ и уравнение (4.45) сводится к уравнению

$$\rho\,(t,0) =$$

$$= \rho_q\,(t,0) - \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, e^{\frac{it_1 H_0}{\hbar}}\, \frac{1}{i\hbar}\,[\rho\,(t+t_1,0),V]\, e^{-\frac{it_1 H_0}{\hbar}}, \quad (4.48)$$

решение которого имеет вид

$$\rho\,(t,0) = \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_2\, e^{\epsilon t_2}\, e^{\frac{it_2 H}{\hbar}}\, \rho_q\,\{ e^{ia(t+t_2)} \langle \bar{P} \rangle\,, 0\,\}\, e^{-\frac{it_2 H}{\hbar}}. \quad (4.49)$$

В случае нестационарных процессов операторы $\bar{U}\,(t_1\,,t_2)$ содержат все эффекты запаздывания и памяти по медленно меняющимся переменным $\langle \bar{P}_t \rangle^t$.

5. Связь метода НСО [2] с методом Пелетминского-Яценко [5]

Эргодические соотношения (4.18) очень похожи на соотношения, лежащие в основе метода Пелетминского-Яценко [5]. Последние можно записать в виде

$$e^{\frac{it_1 H_0}{\hbar}}\,\rho\,(t,0)\, e^{-\frac{it_1 H_0}{\hbar}} \xrightarrow[t_1 \to -\infty]{} e^{\frac{it_1 H_0}{\hbar}}\,\rho_q\,(t,0)\, e^{-\frac{it_1 H_0}{\hbar}}\,, \quad (5.1а)$$

или

$$e^{-\frac{it_1 H_0}{\hbar}}\,\rho\,(t,0)\, e^{\frac{it_1 H_0}{\hbar}} \xrightarrow[t_1 \to \infty]{} e^{-\frac{it_1 H_0}{\hbar}}\,\rho_q(t,0)\, e^{\frac{it_1 H_0}{\hbar}}\,. \quad (5.1б)$$

Эти соотношения применялись в [5] к системам, обладающим свойством (4.27). Отличие соотношений (4.18) и (5.1) друг от друга заключается в том, что в (4.18) речь идет об эволюции по фазовой траектории неравновесной системы с гамильтонианом H_0, в то время как в (5.1) эволюция по траектории системы заменена операцией "размешивания" (по терминологии авторов работы [5]). При "размешивании" не учитывается изменение временного аргумента макроскопических переменных $< P >^t$ и $F(t)$, от которых зависят статистические операторы $\rho(t,0)$ и $\rho_q(t,0)$. В общем случае эти операции, очевидно, не равноценны и соотношения (5.1) нужно заменить соотношениями (4.18). В предельном случае квазистатических процессов, когда $<\bar{P}_t>^t$ и $\bar{F}(t)$ не зависят от времени, соотношения (4.18) и (5.1) должны давать близкие результаты. Этот предельный случай соответствует отсутствию эффектов памяти в системе. Схема получения неравновесного статистического оператора, очень близкая к схеме Пелетминского и Яценко, развивалась ранее Провоторовым [11] в применении к спиновым системам. В качестве параметров $F_m(t)$, описывающих неравновесную систему, выбирались обратные температуры слабо взаимодействующих между собой подсистем (спиновая температура зеемановской подсистемы, температура диполь-дипольного резервуара, температура решетки).

Рассмотрим, к каким изменениям в интегральном уравнении для НСО приводит замена граничных условий (4.18) на граничные условия (5.1). Имея в виду сопоставление результатов с работами [5], будем рассматривать только системы, обладающие свойством (4.27). Предположим далее, что полученное таким путем интегральное уравнение для НСО нечувствительно к замене решения точного уравнения Лиувилля на решение уравнения Лиувилля с источниками (3.1). Ниже будет дано доказательство этого предположения. Преимущество такой замены заключается в том, что мы получаем возможность записать явное выражение для решения интегрального уравнения.

Учитывая свойство (4.39), запишем (5.1) в виде

$$e^{\frac{it_1H_0}{\hbar}}\rho(t,0)\,e^{-\frac{it_1H_0}{\hbar}} \xrightarrow[t_1\to-\infty]{} \rho_q\{e^{-iat_1}<P>^t,0\}\ . \qquad (5.2)$$

Сравнивая (5.2) с (4.41), видим, что в эргодическом соотношении (4.41) осцилляции прєвой части во времени t_1 с частотами a_{mn} взаимно компенсируются. В то же время правая часть соотношения (5.2) осциллирует во времени t_1 с частотами a_{mn}. Эти осцилляции можно устранить, если в (5.1) $\rho\ (t,0)$ заменить на оператор $\rho\ (t,t_1,0)$, где $\rho(t,t_1,0)$ есть НСО, в котором все функции $<P>^{t'}$ при любых t' в интервале $-\infty \leq t' \leq t$ заменены на функции $e^{iat_1}<P>^{t'}$. Если под $\rho\ (t,0)$ понимать решение уравнения Лиувилля с источниками (4.40), то можно записать $\rho\ (t,t_1,0)$ в виде

$$\rho\ (t\ ,t_1,0) = \epsilon \int\limits_{-\infty}^{0} dt_2\, e^{\epsilon t_2}\ e^{\frac{it_2 H}{\hbar}}\ \rho_q\{e^{iat_1} <P>^{t+t_2},0\}\, e^{-\frac{it_2 H}{\hbar}} =$$

$$= \epsilon \int\limits_{-\infty}^{0} dt_2\, e^{\epsilon t_2}\ e^{\frac{it_2 H}{\hbar}}\ e^{-\frac{i}{\hbar}(t+t_1+t_2)H}\ \rho_q\{<\bar{P}_{t+t_2}>^{t+t_2},0\}\, e^{\frac{i}{\hbar}(t+t_1+t_2)H_0}\, e^{-\frac{it_2 H}{h}} =$$

$$= \epsilon \int\limits_{-\infty}^{0} dt_2\ e^{\epsilon t_2}\ e^{\frac{it_2 H}{\hbar}}\ \bar{U}(t+t_2,t)\, \rho_q\ \{e^{ia(t_1+t_2)}<P>^{t},0\}\, \bar{U}^{+}\ (t+t_2\ ,t\ )\, e^{-\frac{it_2 H}{\hbar}}. \tag{5.3}$$

Теперь вместо (5.2) получаем

$$e^{\frac{it_1 H_0}{\hbar}}\ \rho\ \ (t,t_1,0)\, e^{-\frac{it_1 H_0}{\hbar}} \xrightarrow[t_1\to-\infty]{} \rho_q\{<P>^{t},0\}\ , \tag{5.4}$$

или, применяя теорему Абеля к (5.4),

$$\epsilon \int\limits_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\ e^{\frac{it_1 H_0}{\hbar}}\ \rho(t,t_1,0)\, e^{-\frac{it_1 H_0}{\hbar}} \underset{\epsilon\ \longrightarrow\ +0}{=} \rho_q\{<P>^{t},0\}\ . \tag{5.5}$$

Интегрируя левую часть (5.5) по частям, получим

$$\rho(t,0)\ -\int\limits_{-\infty}^{0} dt_1\ e^{\epsilon t_1}\ e^{\frac{it_1 H_0}{\hbar}}\ \{\frac{\partial\rho(t,t_1,0)}{\partial t_1}\ + \tag{5.6}$$

$$+\ \frac{1}{i\hbar}\ [\rho\ \ (t\ ,t_1\ \ 0),H_0\ ]\ \}\, e^{-\frac{it_1 H_0}{h}} = \rho_q(t,0)\ .$$

Согласно выражению (5.3)

$$\frac{\partial \rho(t,t_1,0)}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}[\rho(t,t_1,0),H]=-\epsilon\left(\rho(t,t_1,0)-e^{-\frac{it_1H_0}{\hbar}}\rho_q(t,0)\,e^{\frac{it_1H_0}{\hbar}}\right). \tag{5.7}$$

Далее, поскольку оператор $\rho(t,t_1,0)$ несимметричен по t и t_1, то

$$\frac{\partial \rho(t,t_1,0)}{\partial t}=\frac{\partial \rho(t,t_1,0)}{\partial t_1}+D\rho(t,t_1,0), \tag{5.8}$$

$$D\rho(t,t_1,0)=\epsilon\int_{-\infty}^{0}dt_2\,e^{\epsilon t_2}\,e^{\frac{it_2H}{\hbar}}\,e^{-\frac{i}{\hbar}(t+t_1+t_2)H_0}\frac{\partial}{\partial t}\rho_q\{\langle P_{t+t_2}\rangle^{t+t_2},0\}\times$$

$$\times e^{\frac{i}{\hbar}(t+t_1+t_2)H}\,e^{-\frac{it_2H}{\hbar}}= \tag{5.9}$$

$$=\epsilon\int_{-\infty}^{0}dt_2\,e^{\epsilon t_2}\,e^{\frac{it_2H}{\hbar}}\,e^{-\frac{it_1H_0}{\hbar}}\,\frac{\delta\rho_q(t+t_2,0)}{\delta\langle P\rangle^{t+t_2}}\langle \dot{P}_{(V)}\rangle^{t+t_2}e^{\frac{it_1H_0}{\hbar}}\,e^{-\frac{it_2H}{\hbar}}.$$

Здесь мы использовали явное выражение (5,3) для $\rho(t,t_1,0)$. Учитывая формулы (5.7) и (5.8), приведем интегральный член в уравнении (5.6) к виду

$$\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\epsilon t_1}\,e^{\frac{it_1H_0}{\hbar}}\Big\{\frac{1}{i\hbar}[\rho(t,t_1,0),V]+D\rho(t,t_1,0)+$$

$$+\epsilon\Big[\rho(t,t_1,0)-e^{-\frac{it_1H_0}{\hbar}}\rho_q(t,0)\,e^{\frac{it_1H_0}{\hbar}}\Big]\Big\}\,e^{-\frac{it_1H_0}{\hbar}}. \tag{5.10}$$

Член в квадратной скобке представляет собой источники в уравнении (5.7). Интеграл от этого члена согласно уравнению (5.5) обращается в нуль, что доказывает, как и в предыдущем параграфе, возможность замены решения точного уравнения Лиувилля на решение уравнения Лиувилля с источниками. Подставляя (5.10) в (5.6), получаем интегральное уравнение для НСО, учитывающее граничное условие (5.4):

$$\rho(t,0)=\rho_q(t,0)-\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\epsilon t_1}\,e^{\frac{it_1H_0}{\hbar}}\Big\{\frac{1}{i\hbar}[\rho(t,t_1,0),V]+ \tag{5.11}$$

$$+D\rho(t,t_1,0)\Big\}\,e^{-\frac{it_1H_0}{\hbar}}.$$

Используя выражение (5.9), запишем последний член уравнения (5.11) в виде

$$\int_{-\infty}^{0} dt_1 \; e^{\epsilon t_1} \; \langle \dot{P}_{(V)} \rangle^{t+t_1} \frac{\delta}{\delta \langle P \rangle^{t+t_1}} \times$$

$$\times \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_2 \; e^{\epsilon t_2} \; e^{\frac{it_2 H_0}{\hbar}} e^{\frac{it_1 H}{\hbar}} e^{-\frac{it_2 H_0}{\hbar}} \rho_q (t+t_1, 0) e^{\frac{it_2 H_0}{\hbar}} e^{-\frac{it_1 H}{\hbar}} e^{-\frac{it_2 H_0}{\hbar}}. \tag{5.12}$$

Определим операторы рассеяния T_{t_1} и $T^{+}_{t_1}$ соотношениями

$$e^{\frac{it_1 H}{\hbar}} = e^{\frac{it_1 H_0}{\hbar}} (1 + T_{t_1}); \quad e^{-\frac{it_1 H}{\hbar}} = (1 + T^{+}_{t_1}) \, e^{-\frac{it_1 H_0}{\hbar}} .$$

При этом

$$T_{t_1} + T^{+}_{t_1} + T^{+}_{t_1} \; T_{t_1} = 0 . \tag{5.13}$$

Тогда (5.12) принимает вид

$$\int_{-\infty}^{0} dt_1 \; e^{\epsilon t_1} \; \langle \dot{P}_{(V)} \rangle^{t+t_1} \frac{\delta}{\delta \langle P \rangle^{t+t_1}} \{ e^{\frac{it_1 H_0}{\hbar}} \rho_q (t+t_1, 0) \, e^{-\frac{it_1 H_0}{\hbar}} + C(t, t_1) \} ,$$

$$e^{-\frac{it_1 H_0}{\hbar}} \; C(t, t_1) \; e^{\frac{it_1 H_0}{\hbar}} = \tag{5.14}$$

$$= \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_2 \; e^{\epsilon t_2} \; \{ T_{t_1}(t_2) \rho_q (t+t_1, 0) + \rho_q (t+t_1, 0) \; T^{+}_{t_1}(t_2) +$$

$$+ T_{t_1}(t_2) \; \rho_q \; (t+t_1, 0) \; T^{+}_{t_1}(t_2) \} , \tag{5.15}$$

$$T_{t_1}(t_2) = e^{\frac{it_2 H_0}{\hbar}} \; T_{t_1} \; e^{-\frac{it_2 H_0}{\hbar}} .$$

Далее, для произвольного оператора A

$$\lim_{\epsilon \to 0} \operatorname{Sp} A\, C(t, t_1) =$$

$$= \lim_{t_2 \to -\infty} \{ \langle A(-t_1)\, T_{t_1}(t_2) \rangle_q^{t+t_1} + \langle T^{+}_{t_1}(t_2)\, A(-t_1) \rangle_q^{t+t_1} \cdot \langle T^{+}_{t_1}(t_2) A(-t_1)\, T_{t_1}(t_2) \rangle_q^{t+t_1}$$

$$= \langle A(-t_1) \rangle_q^{t+t_1} \lim_{t_2 \to -\infty} \langle e^{\frac{it_2 H_0}{h}} (T_{t_1} + T^{+}_{t_1} + T^{+}_{t_1} T_{t_1})\, e^{-\frac{it_2 H_0}{h}} \rangle_q^{t+t_1} = 0 \qquad (5.16)$$

в силу соотношения (5.13), вытекающего из унитарности операторов эволюции. Здесь

$$A(t_1) = e^{\frac{it_1 H_0}{h}} A\, e^{-\frac{it_1 H_0}{h}}$$

и мы воспользовались принципом ослабления корреляции. Таким образом, оператор $C(t, t_1)$ не влияет на результат вычисления шпуров операторов A с интегральным уравнением (5.11). Поэтому с точки зрения вычисления средних уравнение (5.11) эквивалентно уравнению

$$\rho(t, 0) = \rho_q(t, 0) - \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1} e^{\frac{it_1 H_0}{h}} \{ \frac{1}{ih} [\rho(t, t_1, 0), V] + \frac{\delta \rho_q(t+t_1)}{\delta \langle P \rangle^{t+t_1}} \langle \dot{P}_{(V)} \rangle^{t+t_1} \} e^{-\frac{it_1 H_0}{h}} \qquad (5.17)$$

Таким образом, замена граничных условий (4.18) на (5.1) приводит к замене интегрального уравнения (4.42) на (5.17). Отметим, что уравнение (5.17) отличается от (4.42) только заменой НСО $\rho(t+t_1, 0)$ в первом члене под интегралом на оператор $\rho(t, t_1, 0)$. Такая замена означает частичную потерю памяти по медленно меняющимся функциям $\langle \bar{P}_t \rangle^t$. Действительно, согласно выражениям (4.47) и (5.3), оператор $\rho(t, t_1, 0)$ получается из НСО $\rho(t+t_1, 0)$, если в явном выражении для последнего (4.47) положить $\bar{U}(t+t_1+t_2, t+t_2) = 1$. Для стационарных процессов уравнение (5.17) становится точным и совпадает с уравнением (4.48). В случае нестационарных процессов в разложениях интегральных уравнений (4.42) и (5.17) по степеням V совпадают только члены нулевого и первого порядков.

Уравнение (5.17) не совпадает с уравнением Пелетминского-Яценко [5], поскольку в последнем делается дополнительное предположение, заключающееся в том, что НСО $\rho(t,0)$ считается зависящим от функций $<P>^t$, взятых только в момент времени t. Принимая это предположение, имеем

$$\rho(t,0) = \rho\{<P>^t, 0\}, \quad \rho(t,t_1,0) = \rho\{e^{iat_1}<P>^t, 0\}, \tag{5.18}$$

$$D\rho(t,t_1,0) = D\rho\{e^{iat_1}<P>^t,0\} = \frac{\delta\rho\{e^{iat_1}<P>^t,0}{\delta e^{iat_1}<p>^t} Sp\, \dot{P}_{(V)}\rho\{e^{iat_1}<P>^t,0\}.$$

Тогда уравнение (5.11) принимает вид

$$\rho\{<P>^t,0\} = \rho_q\{<P>^t,0\} - \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, e^{\frac{it_1H_0}{h}}\{\frac{1}{ih}[\rho\{e^{iat}<P>^t,0\},V]+$$

$$+\frac{\delta\rho\{e^{iat_1}<P>^t,0\}}{\delta e^{iat_1}<P>^t} Sp\, \dot{P}_{(V)}\rho\{e^{iat_1}<P>^t,0\}\}\, e^{-\frac{iH_0t_1}{h}}, \tag{5.19}$$

что точно совпадает с уравнением Пелетминского-Яценко [5].

Используя принцип ослабления корреляций, как и при переходе от уравнения (5.11) к уравнению (5.17), легко показать, что с точки зрения вычисления средних уравнение (5.19) эквивалентно уравнению

$$\rho\{<P>^t,0\} = \rho_q\{<P>^t,0\} - \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, e^{\frac{it_1H_0}{h}}\{\frac{1}{ih}[\rho\{e^{iat_1}<P>^t,0\},V]+$$

$$+\frac{\delta\rho\{e^{iat_1}<P>^t,0\}}{\delta e^{iat_1}<P>^t} Sp\, \dot{P}_{(V)}\rho\{e^{iat_1}<P>^t,0\}\, e^{-\frac{it_1H_0}{h}}. \tag{5.20}$$

Сравнивая это уравнение с нашим уравнением (4.42), видим, что уравнение (5.20) получается из (4.42) при полном пренебрежении эффектами памяти по медленно меняющимся переменным $<\bar{P}_t>^t$, т.е. при замене всех операторов $\bar{U}(t_1,t_2)$ на единицу в формулах (4.46), (4.47) и уравнении (4.45). Однако согласно выражению (4.44) для операторов $\bar{U}(t_1,t_2)$; $\bar{U}(t_1,t_2) = T\exp\{-\frac{i}{\hbar}\int_t^{t_1+t_2}<[P,V]>^{\tau}\frac{\partial}{\partial<P>^{\tau}}$. Это означает пренебрежение высшими членами в разложении операторов $U(t_1,t_2)$ по степеням взаимодействия. Поэтому в нестационарных процессах уравнение (5.20) совпадает с (4.42) лишь в линейном приближении по V (что соответствует борновскому приближению в формулах для кинетических коэффициентов). В случае стационарных процессов, когда $<\bar{P}_t>^t = <\bar{P}> = \mathrm{const}$, в системе отсутствуют эффекты памяти и уравнение (5.20) становится точным и совпадает с уравнением (4.48).

Литература

1. Д.Н. Зубарев. ДАН, 140, 92 (1961); 164, 65 (1965); Проблемы теоретической физики, Наука, М., 1969; Fortschritte der Physik., 18, 125 (1970).

1а. Д.Н. Зубарев, В.П. Калашников. ТМФ, 1, 137 (1969). Physica., 46, 550 (1970).

2. J.A.Mc Lennan. Phys.Fluids., 4, 1319 (1961). Adv. in Chemical Physics, V, 260 (1963).

3. Д.Н. Зубарев, В.П. Калашников. ТМФ, 3, 126 (1970).

4. B. Robertson. Phys.Rev., 144, 151 (1966); 160, 175 (1967).

5. С.В. Пелетминский, А.А. Яценко. ЖЭТФ, 53, 1327 (1967).

6. Д.Н. Зубарев. ТМФ, 3, 276 (1970).

7. R. Zwanzig. Journ.. Chem.Phys., 33, 1338 (1960); Physica, 30, 1109 (1964).

8. Д.Н. Зубарев, В.П. Калашников. ТМФ, 5, 406 (1970).
9. Н.Н. Боголюбов. Квазисредние в задачах статистической механики. Препринт ОИЯИ, 788, Дубна, 1961.
10. Д.Н. Зубарев. Препринт ОИЯИ, Р4-4886, Дубна, 1970.
11. Б.Н. Провоторов. ЖЭТФ, 41, 1327 (1961).

Рукопись поступила в издательский отдел
25 января 1971 года.