Г. О. Балабанян, Построение методом неравновесного статистического оператора для классических систем уравнений и макроскопических асимптотик для равновесных корреляционных и гриновских функций,

ТМФ, 1989, том 80, номер 1, 118–137

https://www.mathnet.ru/tmf5123

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ
И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА
Том 80, № 1
июль, 1989

ПОСТРОЕНИЕ МЕТОДОМ НЕРАВНОВЕСНОГО СТАТИСТИЧЕСКОГО ОПЕРАТОРА ДЛЯ КЛАССИЧЕСКИХ СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ И МАКРОСКОПИЧЕСКИХ АСИМПТОТИК ДЛЯ РАВНОВЕСНЫХ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ И ГРИНОВСКИХ ФУНКЦИЙ

Балабанян Г. О.

В рамках метода НСО для классических систем разработана общая теория вывода линеаризованных уравнений для макроскопических переменных, характеризующих неравновесное состояние системы, и уравнений для равновесных корреляционных и пуассоновских функций Грина. Обосновано утверждение о том, что затухание равновесных флуктуаций обусловлено линеаризованными уравнениями, описывающими эволюцию к равновесию соответствующих макроскопических переменных. Предложен простой общий метод построения макроскопических асимптотик для равновесных корреляционных и пуассоновских функций Грина.

1. Введение. В настоящей работе в рамках метода неравновесного статистического оператора (НСО) Зубарева [1–3] для классических систем выделены линеаризованные уравнения для макроскопических переменных, характеризующих неравновесное состояние системы, и уравнения для равновесных корреляционных и пуассоновских функций Грина [1–3]. На их основе разработан простой общий метод получения макроскопических асимптотик для равновесных корреляционных и пуассоновских функций Грина. Использование метода НСО позволило избежать искусственного объединения теории линейной реакции и теории неравновесных процессов, имевшегося в ранее развитых методах [4–12].

Полученные уравнения для равновесных корреляционных и пуассоновских функций Грина представляют самостоятельный интерес с точки зрения метода функций Грина [1, 3, 6, 7, 13–15]. В частности, структура этих цепочек уравнений удобна для разработки различных эффективных методов их обрыва и расцепления. Она близка к структуре уравнений для функций Грина, полученных Церковниковым [3, 16–18].

Ранее методом НСО некоторые приведенные далее результаты в частных случаях получены для классических систем в [19, 20], для квантовых – в [21, 22]. Перенос построенной здесь теории на квантовый случай требует отдельного рассмотрения.

2. Неравновесное состояние системы и описание ее эволюции методом НСО. Будем рассматривать для определенности классическую систему N частиц, находящихся в области Ω (объема $|\Omega|$), с не зависящим от времени t гамильтонианом $H=H(q,p)$, $(q,p)\equiv(\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_N,\ \mathbf{p}_1,\ldots,\mathbf{p}_N)$ – координаты и импульсы частиц $\mathbf{q}_i \in \Omega$, $-\infty < p_{i\alpha} < \infty$, $i=1, \ldots, N$, $\alpha = x, y, z$. Пусть ее равновесное состояние описывается N-частичной функцией распределения $\rho_0 = \rho_0(q, p)$, $\mathrm{Sp}\, \rho_0 = 1$ и

(1) $\quad iL\rho_0 = -\{H, \rho_0\} = 0,$

здесь

$$\mathrm{Sp} \ldots = \int dq\, dp \ldots = \int\limits_{\Omega} \ldots \int \int\limits_{-\infty}^{\infty} \ldots \int\limits_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^{N} d\mathbf{q}_i\, d\mathbf{p}_i \ldots,$$

$$\{A, B^+\} = \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial B^+}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B^+}{\partial q} = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial A}{\partial \mathbf{q}_i} \frac{\partial B^+}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial A}{\partial \mathbf{p}_i} \frac{\partial B^+}{\partial \mathbf{q}_i} \right)$$

— скобка Пуассона, $A = A(q, p)$, $B^+ = B^+(q, p)$ — произвольные динамические величины, iL — оператор Лиувилля, $iLA = -\{H, A\}$, обладающий свойствами

(2) $\quad iL(AA_1) = (iLA)A_1 + A(iLA_1),$

(3) $\quad \langle iLA \rangle = 0, \quad \langle (iLA)B^+ \rangle = -\langle A(iLB^+) \rangle, \quad \langle \ldots \rangle \equiv \mathrm{Sp}\, \rho_0 \ldots,$

(4) $\quad \langle A(t) B^+ \rangle = \langle AB^+(-t) \rangle, \quad A(t) = e^{iLt}A,$

$\quad \langle A(t) \rangle = \langle A(0) \rangle = \langle A \rangle,$

вытекающими из определения операции $\mathrm{Sp} \ldots$, скобки Пуассона и свойства ρ_0 (1). Под ρ_0 будем понимать каноническую или большую каноническую функцию распределения Гиббса (в последнем случае операция $\mathrm{Sp} \ldots$ должна включать в себя еще и суммирование по N от 0 до ∞) [1].

Пусть неравновесное состояние системы (вообще говоря, не сильно отличающееся от равновесного) описывается некоторым линейно независимым набором переменных $\langle \Delta P_j \rangle^t = \mathrm{Sp}\, \rho(t) \Delta P_j$, $\Delta P_j = P_j - \langle P_j \rangle$, $\langle P_j \rangle = \mathrm{Sp}\, \rho_0 P_j$, $\langle \ldots \rangle^t \equiv \mathrm{Sp}\, \rho(t) \ldots$, $P_j \equiv P_j(q, p)$ — некоторый набор динамических величин $j = 1, 2, \ldots, n$. N-частичная функция распределения $\rho(t) = \rho(t, q, p)$, описывающая это неравновесное состояние, удовлетворяет в соответствии с методом НСО [1—3] уравнению Лиувилля с бесконечно малым источником

(5) $\quad \left(\frac{\partial}{\partial t} + iL \right) \rho(t) = -\varepsilon (\rho(t) - \rho_q(t))$

и предельному граничному условию

(6) $\quad \lim\limits_{t \to -\infty} (\rho(t) - \rho_q(t)) = 0,$

$\varepsilon \to +0$, после предельного термодинамического перехода $N \to \infty$, $|\Omega| \to \infty$, $N/|\Omega| = \mathrm{const}$. $\rho_q(t) \equiv \rho_q(t, q, p)$ — локально-равновесная N-частичная функция распределения — удовлетворяет условиям согласования

(7) $\quad \langle \Delta P_j \rangle_q^t = \langle \Delta P_j \rangle^t, \quad j = 1, \ldots, n, \quad \langle \ldots \rangle_q^t = \mathrm{Sp}\, \rho_q(t) \ldots.$

Выберем $\rho_q(t)$ в виде

(8) $\quad \rho_q(t) = \rho_0 (1 + \Delta P^+ \langle \Delta P \Delta P^+ \rangle^{-1} \langle \Delta P \rangle^t)$

или

(9) $$\rho_q(t)=\rho_0(1+\langle\Delta P^+\rangle^t\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\Delta P).$$

Здесь и далее принята удобная «бескоординатная векторно-матричная» запись для наборов динамических величин и корреляционных функций [3, 16—18]. ΔP, $\langle\Delta P\rangle^t$, $\langle\Delta P\rangle_q{}^t$ и т. д.— вектор-столбцы с компонентами ΔP_j, $\langle\Delta P_j\rangle^t$, $\langle\Delta P_j\rangle_q{}^t$ $(j=1, 2, \ldots, n)$ и т. д., $\Delta P^+=P^+-\langle P^+\rangle$, $\langle\Delta P^+\rangle^t$, $\langle\Delta P^+\rangle_q{}^t$ и т. д.—(вообще говоря, эрмитово сопряженные) вектор-строки. $\langle\Delta P\Delta P^+\rangle$ — корреляционная матрица, полученная в результате усреднения с ρ_0 произведения вектор-столбца ΔP на вектор-строку ΔP^+, $\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}$ — матрица, обратная матрица $\langle\Delta P\Delta P^+\rangle$ (предполагается, что обратная матрица существует): $\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\Delta P\Delta P^+\rangle=\langle\Delta P\Delta P^+\rangle\times\times\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}=E$, E — единичная матрица, $\langle\Delta P\Delta P^+\rangle_{ij}\equiv\langle\Delta P_i\Delta P_j{}^*\rangle$ $(j==1, 2, \ldots)$ и т. д. Отметим, что операция умножения усредненных величин: векторов, матриц и т. д.— подразумевает суммирование по дискретным и интегрирование по непрерывным индексам динамических переменных ΔP и т. д. [3, 16—18].

Очевидно, что $\rho_q(t)$ (8) удовлетворяет условиям согласования (7) и $\mathrm{Sp}\,\rho_q(t)=1$, а представление (9) эквивалентно представлению (8).

В методе НСО [1—3] обычно локально-равновесная функция распределения $\rho_q(t)$ соответствует экстремуму информационной энтропии при дополнительных условиях (7) и $\mathrm{Sp}\,\rho_q(t)=1$. При этом $\rho_q(t)$ имеет экспоненциальный вид и появляются термодинамически сопряженные $\langle\Delta P\rangle^t$ переменные ΔF_j $(j=1, 2, \ldots, n)$ [1—3]. Локально-равновесную функцию распределения (8) можно интерпретировать как первый член разложения по ΔP этой экспоненциальной локально-равновесной функции распределения около ρ_0 и ввести термодинамически сопряженные параметры $\Delta F(t)$, $\Delta F^+(t)$:

(10) $$\Delta F(t)=-\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\Delta P\rangle^t,\ \Delta F^+(t)=-\langle\Delta P^+\rangle^t\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}.$$

С физической точки зрения выбор $\rho_q(t)$ в виде (8) означает, что рассматривается асимптотическая стадия эволюции системы к равновесию.

3. Построение методом НСО макроскопических уравнений для $\langle\Delta P\rangle^t$. Для построения макроскопических уравнений для $\langle\Delta P\rangle^t$ нужно, используя метод НСО [1—3], построить «нормальное» решение уравнения Лиувилля с источником (5), т. е. нужно найти такое его решение, которое является функционалом от макроскопических переменных $\langle\Delta P\rangle^t$ и обеспечивает выполнение условий согласования (7). Это решение будем искать в виде $\rho(t)=\rho_q(t)+\delta\rho(t)$, где $\delta\rho(t)$ в силу (6), (7) удовлетворяет условиям $\lim\limits_{t\to-\infty}\delta\rho(t)=0$, $\mathrm{Sp}\,\delta\rho(t)\Delta P=0$.

Использовав проекционный оператор Кавасаки — Гантона $\mathscr{P}_q$ [23, 2, 3] (в данном случае не зависящий от t в силу выбора $\rho_q(t)$ в виде (8))

(11) $$\mathscr{P}_q\ldots=\left[\rho_q(t)-\frac{\delta\rho_q(t)}{\delta\langle\Delta P\rangle^t}\langle\Delta P\rangle^t\right]\mathrm{Sp}\ldots+\frac{\delta\rho_q(t)}{\delta\langle\Delta P\rangle^t}\,\mathrm{Sp}\,\Delta P\ldots=$$
$$=\rho_0[\mathrm{Sp}\ldots+\Delta P^+\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\,\mathrm{Sp}\,\Delta P\ldots],$$

действующий на функции распределения, из (5) найдем, что $\delta\rho(t)\equiv$

$=(1-\mathcal{P}_q)\rho(t)$ удовлетворяет уравнению

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+(1-\mathcal{P}_q)iL+\varepsilon\right)\delta\rho(t)=-(1-\mathcal{P}_q)iL\rho_q(t). \tag{12}$$

Решая уравнение (12) с учетом предельных граничных условий (6), найдем

$$\delta\rho(t)=-\int_{-\infty}^{t}dt'\,e^{-(\varepsilon+(1-\mathcal{P}_q)iL)(t-t')}(1-\mathcal{P}_q)iL\rho_q(t'). \tag{13}$$

Очевидно, что $\delta\rho(t)$ (13) удовлетворяет условию $\mathrm{Sp}\,\delta\rho(t)\Delta P=0$.

«Нормальное» решение уравнения Лиувилля с источником (5), используя (13), (8), свойства (1), (2) и существование ρ_0^{-1}, можем записать в виде

$$\rho(t)=\rho_0\Big[1+\Delta P^+\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\Delta P\rangle^t- \tag{14}$$
$$-\int_0^{\infty}dt'\,e^{-\varepsilon t'}e^{-(1-\mathcal{P}^+)iLt'}(1-\mathcal{P}^+)iL\Delta P^+\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\Delta P\rangle^{t-t'}\Big].$$

Здесь введены проекционные операторы Мори [24] $\mathcal{P}$, $\mathcal{P}^+$ ($\mathcal{P}^+=\rho_0^{-1}\mathcal{P}_q\rho_0$), действующие соответственно на вектор-столбцы и вектор-строки динамических переменных

$$\mathcal{P}\ldots=\langle\ldots\rangle+\langle\ldots\Delta P^+\rangle\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\Delta P,\quad \mathcal{R}=1-\mathcal{P}, \tag{15}$$
$$\mathcal{P}\Delta P=\Delta P,\quad \mathcal{R}\Delta P=0,\quad \mathcal{P}^2=\mathcal{P},\quad \mathcal{P}\mathcal{R}=\mathcal{R}\mathcal{P}=0,$$

$$\mathcal{P}^+\ldots=\langle\ldots\rangle+\Delta P^+\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\Delta P\ldots\rangle,\ \mathcal{R}^+=1-\mathcal{P}^+, \tag{16}$$
$$\mathcal{P}^+\Delta P^+=\Delta P^+,\quad \mathcal{R}^+\Delta P^+=0,\quad \mathcal{P}^{+2}=\mathcal{P}^+,\quad \mathcal{P}^+\mathcal{R}^+=\mathcal{R}^+\mathcal{P}^+=0$$

и обладающие свойствами

$$\langle A(\mathcal{P}^+B^+)\rangle=\langle(\mathcal{P}A)B^+\rangle,\quad \langle A(\mathcal{R}^+B^+)\rangle=\langle(\mathcal{R}A)B^+\rangle, \tag{17}$$

$$\langle A(\mathcal{P}^+B^+)\rangle=\langle(\mathcal{P}A)(\mathcal{P}^+B^+)\rangle,\quad \langle A(\mathcal{R}^+B^+)\rangle=\langle(\mathcal{R}A)(\mathcal{R}^+B^+)\rangle, \tag{18}$$

$$\langle(\mathcal{P}A)(\mathcal{R}^+B^+)\rangle=0,\quad \langle(\mathcal{R}A)(\mathcal{P}^+B^+)\rangle=0, \tag{19}$$

справедливыми для произвольных динамических переменных A, B^+. Эти свойства $\mathcal{P}$, $\mathcal{P}^+$ вытекают из их определения и устанавливаются прямыми вычислениями.

Из свойств (15)—(19) проекционных операторов $\mathcal{P}$, $\mathcal{P}^+$ и оператора Лиувилля iL (3) следуют важные для дальнейшего соотношения (A, B^+ — произвольные динамические переменные)

$$\langle(\mathcal{P}iLA)B^+\rangle=\langle(\mathcal{P}iLA)(\mathcal{P}^+B^+)\rangle=\langle(iLA)(\mathcal{P}^+B^+)\rangle= \tag{20}$$
$$=-\langle A(iL\mathcal{P}^+B^+)\rangle,$$

$$\langle(\mathcal{R}iLA)B^+\rangle=\langle(\mathcal{R}iLA)(\mathcal{R}^+B^+)\rangle=-\langle A(iL\mathcal{R}^+B^+)\rangle, \tag{21}$$

$$\langle(\mathcal{P}iL\mathcal{P}A)B^+\rangle=\langle(\mathcal{P}iL\mathcal{P}A)(\mathcal{P}^+B^+)\rangle=-\langle(\mathcal{P}A)(\mathcal{P}^+iL\mathcal{P}^+B^+)\rangle, \tag{22}$$

$$\langle(\mathcal{P}iL\mathcal{R}A)B^+\rangle=-\langle A(\mathcal{R}^+iL\mathcal{P}^+B^+)\rangle, \tag{23}$$
$$\langle(\mathcal{R}iLA)B^+\rangle=-\langle A(\mathcal{P}^+iL\mathcal{R}^+B^+)\rangle,$$

$$\langle(\mathcal{R}iL\mathcal{R}A)B^+\rangle=\langle(\mathcal{R}iL\mathcal{R}A)(\mathcal{R}^+B^+)\rangle= \tag{24}$$
$$=-\langle(\mathcal{R}A)(\mathcal{R}^+iL\mathcal{R}^+B^+)\rangle=-\langle A(\mathcal{R}^+iL\mathcal{R}^+B^+)\rangle,$$

$$(25)\qquad \langle (e^{\mathcal{R}iLt}A)B^{+}\rangle=\langle A(e^{-iL\mathcal{R}^{+}t}B^{+})\rangle,$$
$$\langle (e^{\mathcal{R}iLt}\mathcal{P}A)B^{+}\rangle=\langle(\mathcal{P}A)(e^{-iL\mathcal{R}^{+}t}B^{+})\rangle,$$
$$(26)\qquad \langle (e^{\mathcal{R}iLt}\mathcal{R}A)B^{+}\rangle=\langle(\mathcal{R}A)(e^{-iL\mathcal{R}^{+}t}\mathcal{R}^{+}B^{+})\rangle=$$
$$=\langle(\mathcal{R}A)(e^{-\mathcal{R}^{+}iLt}\mathcal{R}^{+}B^{+})\rangle,$$
$$(27)\qquad \langle (e^{\mathcal{R}iLt}\mathcal{R}A)(\mathcal{P}^{+}B^{+})\rangle=0,$$
$$\langle (e^{\mathcal{R}iLt}\mathcal{R}A)(\mathcal{R}^{+}B^{+})\rangle=\langle(\mathcal{R}A)(e^{-\mathcal{R}^{+}iLt}\mathcal{R}^{+}B^{+})\rangle.$$

Соотношения (20)—(24) доказываются прямыми вычислениями, соотношения (25)—(27) — разложением экспонент в ряды и учетом свойств (20)—(24).

Воспользовавшись уравнением Лиувилля (5), его «нормальным» решением (14), свойствами оператора Лиувилля (1)—(3) и формулами (25)—(27), получим уравнение для $\langle\Delta Q\rangle^{t}$ (ΔQ — произвольная динамическая переменная)

$$(28)\qquad \frac{\partial\langle\Delta Q\rangle^{t}}{\partial t}=-\varepsilon(\langle\Delta Q\rangle^{t}-\langle\Delta Q\rangle_{q}^{t})+\langle iL\Delta Q\rangle_{q}^{t}+$$
$$+\operatorname{Sp}((1-\mathcal{P})iL\Delta Q)\delta\rho(t)=-\varepsilon\langle\Delta Q\rangle^{t}+$$
$$+\varepsilon\langle\Delta Q\Delta P^{+}\rangle\langle\Delta P\Delta P^{+}\rangle^{-1}\langle\Delta P\rangle^{t}+$$
$$+\langle J_{Q}\Delta P^{+}\rangle\langle\Delta P\Delta P^{+}\rangle^{-1}\langle\Delta P\rangle^{t}-$$
$$-\int_{0}^{\infty}dt'e^{-\varepsilon t'}\langle J_{Q}^{c}(t')J_{P}^{c+}\rangle^{c}\langle\Delta P\Delta P^{+}\rangle^{-1}\langle\Delta P\rangle^{t-t'},$$

а также выражение для

$$(29)\qquad \langle\Delta Q\rangle^{t}=\langle\Delta Q\rangle_{q}^{t}+\operatorname{Sp}\Delta Q\delta\rho(t)=\langle\Delta Q\rangle_{q}^{t}+$$
$$+\operatorname{Sp}((1-\mathcal{P})\Delta Q)\delta\rho(t)=\langle\Delta Q\Delta P^{+}\rangle\langle\Delta P\Delta P^{+}\rangle^{-1}\langle\Delta P\rangle^{t}-$$
$$-\int_{0}^{\infty}dt'\,e^{-\varepsilon t'}\langle J_{Q}^{c}(t)J_{P}^{c+}\rangle^{c}\langle\Delta P\Delta P^{+}\rangle^{-1}\langle\Delta P\rangle^{t-t'}.$$

Здесь и далее приняты следующие обозначения: $\Delta A^{c}=(1-\mathcal{P})\Delta A$, $\Delta A^{c+}=(1-\mathcal{P}^{+})\Delta A^{+}$, $J_{P}=iL\Delta P$, $J_{P}^{+}=iL\Delta P^{+}$, $J_{P}^{c}=(1-\mathcal{P})iL\Delta P^{+}$, $J_{A}^{c+}=(1-\mathcal{P}^{+})\times\times iL\Delta A^{+}$ и т. д., отсутствие индекса «c» у временной корреляционной функции $\langle\Delta A(t)\Delta B^{+}\rangle$, $\langle\Delta A\Delta B^{+}(t)\rangle$ означает, что временная эволюция определяется оператором Лиувилля (1), т. е. $\langle\Delta A(t)\Delta B^{+}\rangle\equiv\langle(e^{iLt}\Delta A)\Delta B^{+}\rangle$, $\langle\Delta A\Delta B^{+}(t)\rangle\equiv\langle\Delta A(e^{iLt}\Delta B^{+})\rangle$ и т. д.; наличие же индекса «c» означает, что временная эволюция определяется приведенным оператором Лиувилля $(1-\mathcal{P})iL$ или $(1-\mathcal{P}^{+})iL$, т. е. $\langle\Delta A(t)\Delta B^{+}\rangle^{c}\equiv\langle(e^{(1-\mathcal{P})iLt}\Delta A)\Delta B^{+}\rangle$, $\langle\Delta A\Delta B^{+}(t)\rangle^{c}\equiv\langle\Delta A(e^{(1-\mathcal{P}^{+})iLt}\Delta B^{+})\rangle$, $\langle J_{Q}^{c}(t)J_{P}^{c+}\rangle^{c}\equiv\langle(e^{(1-\mathcal{P})iLt}(1-\mathcal{P})\times\times iL\Delta Q)((1-\mathcal{P}^{+})iL\Delta P^{+})\rangle$ и т. д. При $\Delta Q\equiv\Delta P$ из (28) следует уравнение для $\langle\Delta P\rangle^{t}$, а выражение (29) вырождается в тождество.

Определим преобразования Фурье и Лапласа (далее везде ω, ε — действительные числа, $\varepsilon>0$, E — комплексная переменная)

$$(30)\qquad f(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}dt\,e^{i\omega t}f(t),\qquad f(t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\,e^{-i\omega t}f(\omega),$$

$$(31)\qquad f(E)=\int_0^\infty dt\, e^{iEt}f(t),\quad \operatorname{Im}E>0,\quad f(E)=\int_{-\infty}^0 dt\, e^{iEt}f(t),\quad \operatorname{Im}E<0.$$

С помощью (28), использовав (30), получим ($\varepsilon\to+0$, $\langle\Delta P\rangle^\omega$ – фурье-образ $\langle\Delta P\rangle^t$)

$$(32)\qquad \{i\omega+[\langle J_P\Delta P^+\rangle-i\langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle\rangle^{c,r}_{E=\omega+i\varepsilon}]\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\}\langle\Delta P\rangle^\omega=0,$$

где $\langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle\rangle^{c,r}_{E=\omega+i\varepsilon}$ предельное значение (на действительной оси) регулярной в верхней полуплоскости комплексной плоскости функции

$$(33)\qquad \langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle\rangle^{c,r}_E=-i\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle_E{}^c=$$

$$=-i\int_0^\infty dt\, e^{iEt}\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle^c,\qquad \operatorname{Im}E>0.$$

Функция (33) есть аналитическое продолжение в верхнюю полуплоскость комплексной плоскости E фурье-преобразования запаздывающей (индекс «r») приведенной (равновесной) корреляционной функции Грина [1, 3, 6, 7, 13–15]

$$(34)\qquad \langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle\rangle^{c,r}=-i\theta(t)\langle J_P{}^c(t)J_P{}^c\rangle^c,$$

где $\theta(t)=1$ при $t>0$, $\theta(t)=0$ при $t<0$.

Естественно [1, 3, 6, 7, 13–15] ввести кусочно-аналитическую функцию, определенную в комплексной плоскости E с разрезом вдоль действительной оси ($\operatorname{Im}E\neq0$),

$$(35)\qquad \langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^c\rangle\rangle_E{}^c=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega'\,\frac{\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle^{c,\omega'}}{E-\omega'},$$

($\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle^{c,\omega}\equiv\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t}\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle^c$ – фурье-образ (спектральная интенсивность $\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle^c$), которая при $\operatorname{Im}E>0$ совпадает с аналитическим продолжением фурье-преобразования запаздывающей *приведенной* корреляционной функции Грина (34), а при $\operatorname{Im}E<0$ – с аналитическим продолжением фурье-преобразования опережающей (индекс «a») *приведенной* (равновесной) корреляционной функции Грина [1, 3, 6, 7, 13–15]

$$(36)\qquad \langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle\rangle^{c,a}\equiv i\theta(-t)\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle^c.$$

Легко установить, учтя (30), (31), (35), (36), что

$$(37)\qquad \langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle\rangle^{c,a}_E=i\int_{-\infty}^0 dt\, e^{iEt}\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle^c,\qquad \operatorname{Im}E<0.$$

Воспользовавшись формулой [25] $(x\pm i\varepsilon)^{-1}=Px^{-1}\mp i\pi\delta(x)$, ($\varepsilon\to+0$), P – символ главного значения, $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака, из (35) получим («r» – верхний, «a» – нижний знак)

$$(38)\qquad \langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle\rangle^{c,r,a}_{\omega\pm i\varepsilon}=\langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle\rangle^{c}_{\omega\pm i\varepsilon}=$$

$$=\frac{1}{2\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}d\omega'\,\frac{\langle J_P^c(t)J_P^{c+}\rangle^{c,\omega'}}{\omega-\omega'}\mp\frac{i}{2}\langle J_P^c(t)J_P^{c+}\rangle^{c,\omega}.$$

Очевидно, что ($\varepsilon\to+0$)

$$\langle J_P^c(t)J_P^{c+}\rangle^{c,\omega}=i\{\langle\langle J_P^c(t)J_P^{c+}\rangle\rangle^{c}_{\omega+i\varepsilon}-\langle\langle J_P^c(t)J_P^{c+}\rangle\rangle^{c}_{\omega-i\varepsilon}\}. \tag{39}$$

Зафиксируем обозначения и определения используемых далее различных *равновесных* функций Грина. Для их обозначения будем использовать символы $\langle\langle\ldots\rangle\rangle^{\#}$, $\langle\langle\ldots\rangle\rangle_E^{\#}$. Будем рассматривать *запаздывающие* (верхний индекс «r», $\operatorname{Im}E>0$), *опережающие* (верхний индекс «a», $\operatorname{Im}E<0$), *кусочно-аналитические* (без верхнего индекса «r» или «a», $\operatorname{Im}E\neq0$) функции Грина трех видов: *приведенные корреляционные функции Грина* (верхний индекс «c», $\langle\langle A(t)B^+\rangle\rangle^{c,\#}$, $\langle\langle A(t)B^+\rangle\rangle_E^{c,\#}$ $\langle\langle AB^+(t)\rangle\rangle^{c,\#}$, $\langle\langle AB^+(t)\rangle\rangle_E^{c,\#}$), *корреляционные функции Грина* (верхний индекс «c» отсутствует, $\langle\langle A(t)B^+\rangle\rangle^{\#}$, $\langle\langle A(t)B^+\rangle\rangle_E^{\#}$ и т. д.), *пуассоновские функции Грина* ($\langle\langle A(t)|B^+\rangle\rangle^{\#}$, $\langle\langle A(t)|B^+\rangle\rangle_E^{\#}$ и т. д.). Все эти функции Грина определяются в соответствии с формулами (33)–(37), обладают указанными выше свойствами, для них справедливы формулы (38), (39). Именно

$$\begin{aligned}&\langle\langle A(t)B^+\rangle\rangle^{c,r,a}=\mp i\theta(\pm t)\langle A(t)B^+\rangle^c,\\&\langle\langle AB^+(t)\rangle\rangle^{c,r,a}=\mp i\theta(\pm t)\langle AB^+(t)\rangle^c,\end{aligned}\tag{40}$$

$$\begin{aligned}&\langle\langle A(t)B^+\rangle\rangle^{r,a}=\mp i\theta(\pm t)\langle A(t)B^+\rangle,\\&\langle\langle AB^+(t)\rangle\rangle^{r,a}=\mp i\theta(\pm t)\langle AB^+(t)\rangle,\end{aligned}\tag{41}$$

$$\begin{aligned}&\langle\langle A(t)|B^+\rangle\rangle^{r,a}=\mp i\theta(\pm t)\langle\{A(t),B^+\}\rangle,\\&\langle\langle A|B^+(t)\rangle\rangle^{r,a}=\mp i\theta(\pm t)\langle\{A,B^+(t)\}\rangle,\end{aligned}\tag{42}$$

индексу «r» соответствует верхний знак, индексу «a» — нижний, A, B^+ — произвольные динамические переменные, $\{\,,\}$ — скобка Пуассона; наличие индекса «c» в соответствии с вышепринятым соглашением означает, что временная эволюция динамических переменных в (40) определяется приведенным оператором Лиувилля $(1-\mathscr{P})iL$ или $(1-\mathscr{P}^+)iL$, его отсутствие (см. (41), (42)),— что обычным оператором Лиувилля iL (1). E-представление функций Грина (40)–(42), их кусочно-аналитические функции определяются в соответствии с формулами (33), (37), (35). Отметим, что пуассоновские функции Грина (42) соответствуют квантовым коммутаторным функциям Грина [1, 3, 6, 7, 13–15] и широко используются в классической статистической механике [6, 7].

Легко установить, учтя (26), (27), (33)–(37), что справедливо тождество ($\varepsilon>0$)

$$\langle\langle A^c(t)B^{c+}\rangle\rangle^{c,r}_{-\omega+i\varepsilon}=-\langle\langle A^cB^{c+}(t)\rangle\rangle^{c,a}_{\omega-i\varepsilon},\tag{43}$$

где $A^c=(1-\mathscr{P})A$, $B^{c+}=(1-\mathscr{P}^+)B^+$, A, B^+ — произвольные динамические переменные. Аналогичное тождество справедливо также для корреляционных и пуассоновских функций Грина (41), (42).

Приняв во внимание (43), (37) и совершив в (32) замену $\omega\to-\omega$, получим ($\varepsilon\to+0$)

$$\{i\omega-[\langle J_P\Delta P^+\rangle+i\langle\langle J_P^cJ_P^{c+}(t)\rangle\rangle^{c,a}_{\omega-i\varepsilon}]\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\}\langle\Delta P\rangle^{-\omega}=0.\tag{44}$$

Легко выписать уравнения для термодинамически сопряженных $\langle\Delta P\rangle^t$ величин (10) $\Delta F(t)$. Например, в ω-представлении имеем ($\Delta F(\omega)$ — фурье-образ (30) $\Delta F(t)$) ($\varepsilon\to+0$)

$$\{i\omega+\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}[\langle J_P\Delta P^+\rangle-i\langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle\rangle^{c,r}_{\omega+i\varepsilon}]\}\Delta F(\omega)=0. \tag{45}$$

Выбрав $\rho_q(t)$ в виде (9), можно аналогичным образом получить «нормальное» решение, с помощью которого легко найти уравнения для $\langle\Delta P^+\rangle^t$, $\langle\Delta Q^+\rangle^t$ ($(1-\mathscr{P}^+)\Delta Q^+\neq0$) и явное выражение для $\langle Q^+\rangle^t$. Например, в ω-представлении имеем ($\varepsilon\to+0$)

$$\langle\Delta P^+\rangle^{-\omega}\{i\omega+\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}[\langle J_P\Delta P^+\rangle-i\langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle\rangle_{\omega-i\varepsilon}]\}=0. \tag{46}$$

Во временном представлении характерной чертой уравнений для $\langle\Delta P\rangle^t$, $\Delta F(t)$ и т. д. является их временная и, возможно, пространственная (скрытая принятыми обозначениями) нелокальность. Важно отметить общность структуры всех уравнений (32), (44), (45), (46) в ω-представлении. Существенно, что в них входит не сама приведенная корреляционная функция Грина $\langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle\rangle_E{}^c$ (или $\langle\langle J_P{}^cJ_P{}^{c+}(t)\rangle\rangle_E{}^c$), а ее предельное значение (38) на действительной оси. Эти обстоятельства важны для дальнейшего.

Аналогичным образом в рамках метода НСО можно построить не только «запаздывающие нормальные» решения (см. (14)) уравнения Лиувилля, но и его «опережающие нормальные» решения. Для этого нужно воспользоваться уравнением Лиувилля (5) с бесконечно малым источником другого знака и принять граничное условие типа (6) при $t\to+\infty$. Тогда, например, выбрав $\rho_q(t)$ в виде (8), получим следующее «опережающее нормальное» решение ($\varepsilon\to+0$):

$$\rho(t)=\rho_0\Big[1+\Delta P^+\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\Delta P\rangle^t+ \tag{47}$$
$$+\int_0^\infty dt'\,e^{-\varepsilon t'}e^{(1-\mathscr{P}^+)iLt'}(1-\mathscr{P}^+)iL\Delta P^+\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\Delta P\rangle^{t+t'}\Big],$$

с помощью которого для $\langle\Delta P\rangle^t$ в ω-представлении получим уравнение ($\varepsilon\to+0$)

$$\{i\omega+[\langle J_P\Delta P^+\rangle-i\langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^+\rangle\rangle^{c,a}_{\omega-i\varepsilon}]\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\}\langle\Delta P\rangle^\omega=0. \tag{48}$$

Здесь для макроскопических переменных сохранены те же обозначения, что и ранее. Однако нужно понимать, что с помощью запаздывающего и опережающего нормальных решений (14), (47) уравнения Лиувилля находятся «временисопряженные» уравнения для макроскопических переменных $\langle\Delta P\rangle^t$ и т. д., т. е. в t-представлении уравнение (32) описывает эволюцию макроскопических переменных $\langle\Delta P\rangle^t$ к равновесию при $t\to+\infty$, а уравнение (48) — при $t\to-\infty$ [1, 2]. С точки зрения общей теории имеет смысл и опережающее и запаздывающее решения уравнения Лиувилля, с физической точки зрения — только последнее.

4. Построение методом НСО уравнений для равновесных корреляционных функций Грина. Построим теперь «формальное» решение уравнения Лиувилля с источником (5), т. е. без использования проекционных операторов. Будем искать такое решение в виде $\rho(t)=\rho_q(t)+\delta\rho(t)$, где $\delta\rho(t)$

удовлетворяет предельному граничному условию (6) $\lim\limits_{t\to-\infty}\delta\rho(t)=0$. Из (5) получаем уравнение для $\delta\rho(t)$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+iL+\varepsilon\right)\delta\rho(t)=-\left(\frac{\partial}{\partial t}+iL\right)\rho_q(t).$$

Интегрируя это уравнение с учетом условия $\lim\limits_{t\to-\infty}\delta\rho(t)=0$ и **используя** явный вид $\rho_q(t)$ (8) и свойства оператора Лиувилля (1)–(3), получим

$$\begin{aligned}(49)\qquad \rho(t)=\rho_0\Bigg[&1+\Delta P^+\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\Delta P\rangle^t-\\ &-\int\limits_{-\infty}^{0}dt'\,e^{(\varepsilon+iL)t'}\Bigg(\Delta P^+\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\frac{\partial(\Delta P)^{t+t'}}{\partial t'}+\\ &+(iL\Delta P^+)\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\Delta P\rangle^{t+t'}\Bigg)\Bigg].\end{aligned}$$

Выражение (49) представляет собой «формальное» решение (интегральное уравнение в силу того, что $\langle\Delta P\rangle^t=\mathrm{Sp}\,\Delta P\rho(t)$), которое будет «нормальным» решением, если потребовать выполнения условия $\mathrm{Sp}\,\Delta P\delta\rho(t)=0$, обеспечивающего справедливость условий согласования (8), т. е.

$$\begin{aligned}(50)\qquad \int\limits_{-\infty}^{0}dt'\,e^{\varepsilon t'}\Bigg[&\langle\Delta P(-t')\Delta P^+\rangle\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\frac{\partial\langle\Delta P\rangle^{t+t'}}{\partial t'}-\\ &-\langle(iL\Delta P(-t'))\Delta P^+\rangle\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\Delta P\rangle^{t+t'}\Bigg]=0.\end{aligned}$$

Воспользовавшись (49), можно выписать уравнения для $\langle\Delta P\rangle^t$, $\langle\Delta Q\rangle^t$. С помощью (49) выражение для $\langle\Delta Q\rangle^t$ можно записать, использовав (1)–(3), **в виде**

$$\begin{aligned}(51)\qquad \langle\Delta Q\rangle^t=&\langle\Delta Q\Delta P^+\rangle\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\Delta P\rangle^t-\int\limits_{-\infty}^{0}dt'\,e^{\varepsilon t'}\Bigg[\langle\Delta Q(-t')\Delta P^+\rangle\times\\ &\times\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\frac{\partial\langle\Delta P\rangle^{t+t'}}{\partial t'}-\langle J_Q(-t')\Delta P^+\rangle\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\Delta P\rangle^{t+t'}\Bigg].\end{aligned}$$

При $\Delta Q=\Delta P$ соотношение (51) переходит в (50).

Для квантового случая в [21] показано, как исходя из уравнения для $\langle\Delta P\rangle^t$, получаемого с помощью (49), и (50), можно получить уравнение для $\langle\Delta P\rangle^t$ вида (28) и уравнение для равновесной корреляционной функции Грина $\langle\langle\Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E$ вида (41). В [19, 20] для классического случая показано, как, используя уравнение для $\langle\Delta P\rangle^t$ вида (28) и (50), можно несколько иначе, чем в [21], получить уравнение для равновесной корреляционной функции Грина $\langle\langle\Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E$.

Здесь путем обобщения идеи [19, 20] предлагается рассматривать уравнения для $\langle\Delta P\rangle^t$, $\langle\Delta Q\rangle^t$ и соотношения (50), (51), получаемые с помощью «формального» решения (49), как уравнения для функций Грина $\langle\langle J_P(t)\Delta P^+\rangle\rangle^r$, $\langle\langle J_Q(t)\Delta P^+\rangle\rangle^r$, $\langle\langle\Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle^r$, $\langle\langle\Delta Q(t)\Delta P^+\rangle\rangle^r$, **считая, что входящие в них величины** $\partial\langle\Delta P\rangle^t/\partial t$, $\partial\langle\Delta Q\rangle^t/\partial t$, $\langle\Delta Q\rangle^t$ определяются уравнениями и выражениями (см. (28), (29)), получаемыми с помощью «нормального» решения (14). Процедуру получения уравнений для указанных корреляционных функций Грина проиллюстрируем на примере вывода уравнения для $\langle\langle \Delta Q(t) \Delta P^+ \rangle\rangle_E^r$ ($E=\omega+i\varepsilon$, $\varepsilon>0$). Уравнения для остальных корреляционных функций Грина, которые получаются аналогичным образом, можно будет получить из него при надлежащем выборе ΔQ, а именно при подстановке вместо ΔQ соответственно ΔP, $J_P=iL\Delta P$, $J_Q=iL\Delta Q$.

Исключив из (51) $\partial\langle \Delta P\rangle^{t+t'}/\partial t'$ с помощью уравнения (28) и приравняв затем правые части выражений (29) и (51), после сокращения подобных членов и совершения преобразования Фурье (30), получим ($\varepsilon>0$)

$$
\begin{aligned}
(52)\qquad &\{\langle \Delta Q^c(t) J_P^{c+}\rangle^c_{\omega+i\varepsilon}+\{\langle \Delta Q(t)\Delta P^+\rangle_{\omega+i\varepsilon}\langle \Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}[\langle J_P^c(t) J_P^{c+}\rangle^c_{\omega+i\varepsilon}-\\
&-\langle J_P\Delta P^+\rangle]+\langle (iL\Delta Q(t))\Delta P^+\rangle_{\omega+i\varepsilon}\}\}\langle \Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle \Delta P\rangle^{\omega}=0.
\end{aligned}
$$

Опустив в (52) множитель $\langle \Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle \Delta P\rangle^{\omega}$, преобразовав величину $\langle (iL\Delta Q(t))\Delta P^+\rangle_{\omega+i\varepsilon}$ в соответствии с тождеством $\langle (iLA(t))B^+\rangle_{\omega+i\varepsilon}=$ $=-\langle AB^+\rangle-i(\omega+i\varepsilon)\langle A(t)B^+\rangle_{\omega+i\varepsilon}$ и перейдя в соответствии с (33) к запаздывающим функциям Грина, получим уравнение для $\langle\langle \Delta Q(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E^r$ ($E=\omega+i\varepsilon$, $\varepsilon>0$)

$$
\begin{aligned}
(53)\qquad &\langle\langle \Delta Q(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E^r\{iE+\langle \Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}[\langle J_P\Delta P^+\rangle-i\langle\langle J_P^c(t) J_P^{c+}\rangle\rangle_E^{c,r}]\}=\\
&=i\langle \Delta Q\Delta P^+\rangle+\langle\langle \Delta Q^c(t) J_P^{c+}\rangle\rangle_E^{c,r}.
\end{aligned}
$$

Если воспользоваться представлением (9) для $\rho_q(t)$, то аналогичным образом можно получить уравнения для опережающих корреляционных функций Грина $\langle\langle \Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E^a$, $\langle\langle \Delta P(t)(iL\Delta Q^+)\rangle\rangle_E^a$ $(\equiv-\langle\langle (iL\Delta P(t))\times$ $\times Q^+\rangle\rangle_E^a)$, $\langle\langle \Delta P(t)\Delta Q^+\rangle\rangle_E^a$ ($\operatorname{Im} E<0$). Как и выше, приведем только уравнение для $\langle\langle \Delta P(t)\Delta Q^+\rangle\rangle_E^a$ ($E=\omega-i\varepsilon$, $\varepsilon>0$)

$$
\begin{aligned}
(54)\qquad &\{iE+[\langle J_P\Delta P^+\rangle-i\langle\langle J_P^c(t) J_P^{c+}\rangle\rangle_E^{c,a}]\langle \Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\}\langle\langle \Delta P(t)\Delta Q^+\rangle\rangle_E^a=\\
&=i\langle \Delta P\Delta Q^+\rangle-\langle\langle J_P^c(t)\Delta Q^{c+}\rangle\rangle_E^{c,a},
\end{aligned}
$$

т. к. остальные получаются из него при соответствующем выборе ΔQ.

Совершив в (53), (54) замену $\omega\to-\omega$ ($E=\omega\pm i\varepsilon$, $\varepsilon>0$) и воспользовавшись тождеством (43), после очевидных преобразований получим следующие уравнения:

$$
\begin{aligned}
(55)\qquad &\langle\langle \Delta Q\Delta P^+(t)\rangle\rangle_E^a\{iE-\langle \Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}[\langle J_P\Delta P^+\rangle+i\langle\langle J_P^c J_P^{c+}(t)\rangle\rangle_E^{c,a}]\}=\\
&=i\langle \Delta Q\Delta P^+\rangle-\langle\langle \Delta Q^c J_P^{c+}(t)\rangle\rangle_E^{c,a},\\
(56)\qquad &\{iE-[\langle J_P\Delta P^+\rangle+i\langle\langle J_P^c J_P^{c+}(t)\rangle\rangle_E^{c,r}]\langle \Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\}\langle\langle \Delta P\Delta Q^+(t)\rangle\rangle_E^r=\\
&=i\langle \Delta P\Delta Q^+\rangle+\langle\langle J_P^c\Delta Q^{c+}(t)\rangle\rangle_E^{c,r}.
\end{aligned}
$$

Уравнения для корреляционных функций Грина $\langle\langle Q(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E^a$, $\langle\langle \Delta P\Delta Q^+(t)\rangle\rangle_E^a$ ($\operatorname{Im} E<0$), $\langle\langle \Delta P(t)\Delta Q^+\rangle\rangle_E^r$, $\langle\langle \Delta Q\Delta P^+(t)\rangle\rangle_E^r$ ($\operatorname{Im} E>0$) можно построить в рамках метода НСО аналогичным образом, если воспользоваться «опережающими нормальными» и «формальными» решениями уравнения Лиувилля (см. конец раздела 3). Уравнения для этих функций Грина получаются из уравнений (53)–(56) заменами индексов $r\rightleftarrows a$, $E=\omega\pm i\varepsilon\rightleftarrows E=\omega\mp i\varepsilon$ $(\varepsilon>0)$.

Отметим, что в левые части уравнений (53)–(56) и уравнения (32), (44)–(46), (48) входят выражения, имеющие одинаковую структуру.

5. Альтернативный метод построения уравнений для равновесных корреляционных функций Грина. Не очевидно, как получить методом НСО (хотя и можно) уравнения для корреляционных функций Грина $\langle\langle\Delta A(t)\Delta B^+\rangle\rangle_E$ или $\langle\langle\Delta A\Delta B^+(t)\rangle\rangle_E$, где ΔA, ΔB^+ – произвольные динамические переменные, которые каким-либо образом были структурно связаны с теми же уравнениями (32), (44)–(46), (48). Поэтому приведем в некотором смысле альтернативный методу НСО прямой вывод такого типа уравнений для корреляционных функций Грина $\langle\langle A(t)\Delta B^+\rangle\rangle_E$, $\langle\langle\Delta A\Delta B^+(t)\rangle\rangle_E$, из которых при определенном выборе ΔA, ΔB^+ будут следовать уравнения (53)–(56).

Для вывода искомых уравнений используем легко доказываемые тождества

$$e^{(O_1+O_2)t}=e^{O_1t}+\int_0^t d\tau\, e^{(O_1+O_2)(t-\tau)}O_2e^{O_1\tau}, \tag{57}$$

$$e^{(O_1+O_2)t}=e^{O_1t}+\int_0^t d\tau\, e^{O_1(t-\tau)}O_2e^{(O_1+O_2)\tau}, \tag{58}$$

где O_1, O_2 — произвольные операторы.

С помощью (57) $(O_1+O_2=iL,\ O_1=(1-\mathscr{P})iL,\ O_2=\mathscr{P}iL)$ получим

$$\langle\Delta A(t)\Delta B^+\rangle=\langle(e^{iLt}\Delta A)\Delta B^+\rangle=\langle(e^{(1-\mathscr{P})iLt}\Delta A)\Delta B^+\rangle+ \\ +\int_0^t d\tau\langle(e^{iL(t-\tau)}\mathscr{P}iLe^{(1-\mathscr{P})iL\tau}\Delta A)\Delta B^+\rangle. \tag{59}$$

Далее, использовав очевидное тождество $e^{(1-\mathscr{P})iLt}=1+\int_0^t d\tau\, e^{(1-\mathscr{P})iL\tau}(1-\mathscr{P})iL$, явное выражение для проекционного оператора $\mathscr{P}$ (15) и свойства (3), (20)–(27), имеем

$$\langle(e^{(1-\mathscr{P})iLt}\Delta A)\Delta B^+\rangle=\langle\Delta A\Delta B^+\rangle+\int_0^t d\tau\langle J_A{}^c(\tau)\Delta B^{c+}\rangle^c, \tag{60}$$

$$\langle(e^{iL(t-\tau)}\mathscr{P}iLe^{(1-\mathscr{P})iL\tau}\Delta A)\Delta B^+\rangle= \\ =\langle(iLe^{(1-\mathscr{P})iL\tau}\Delta A)\Delta P^+\rangle\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle(e^{iL(t-\tau)}\Delta P)\Delta B^+\rangle= \\ =-\langle\Delta AJ_P{}^+\rangle\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\Delta P(t-\tau)\Delta B^+\rangle- \\ -\int_0^\tau d\tau_1\langle J_A{}^c(\tau_1)J_P{}^{c+}\rangle^c\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\Delta P(t-\tau)\Delta B^+\rangle.$$

Отсюда окончательно получим тождество

$$\langle\Delta A(t)\Delta B^+\rangle=\langle\Delta A\Delta B^+\rangle+\int_0^t d\tau\langle J_A{}^c(\tau)\Delta B^{c+}\rangle^c- \tag{61}$$

$$
-\int_0^t d\tau\langle\Delta A J_P^+\rangle\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\Delta P(t-\tau)\Delta B^+\rangle-
$$

$$
-\int_0^t d\tau\int_0^\tau d\tau_1\langle J_A^c(\tau_1)J_P^{c+}\rangle^c\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\Delta P(t-\tau)\Delta B^+\rangle.
$$

Аналогичным образом с помощью (57) можно получить еще одно тождество

$$
\langle\Delta A\,\Delta B^+(t)\rangle=\langle\Delta A\,\Delta B^+\rangle+\int_0^t d\tau\langle\Delta A^c J_B^{c+}(\tau)\rangle^c-
$$
$$
-\int_0^t d\tau\langle\Delta A\,\Delta P^+(t-\tau)\rangle\langle\Delta P\,\Delta P^+\rangle^{-1}\langle J_P\,\Delta P^+\rangle-
$$
$$
-\int_0^t d\tau\int_0^\tau d\tau_1\langle\Delta A\,\Delta P^+(t-\tau)\rangle\langle\Delta P\,\Delta P^+\rangle^{-1}\langle J_P^c J_P^{c+}(\tau_1)\rangle^c. \tag{62}
$$

С помощью (61), (62) в результате переноса операторов эволюции (с учетом свойств (4), (27) и замен $t\to-t$ и переменных интегрирования $\tau\to-\tau$, $\tau_1\to-\tau_1$) легко получить еще два тождества

$$
\langle\Delta A\,\Delta B^+(t)\rangle=\langle\Delta A\,\Delta B^+\rangle-\int_0^t d\tau\langle J_A^c\,\Delta B^{c+}(\tau)\rangle^c+
$$
$$
+\int_0^t d\tau\langle\Delta A J_P^+\rangle\langle\Delta P\,\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\Delta P\,\Delta B^+(t-\tau)\rangle-
$$
$$
-\int_0^t d\tau\int_0^\tau d\tau_1\langle J_A^c J_P^{c+}(\tau_1)\rangle^c\langle\Delta P\,\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\Delta P\,\Delta B^+(t-\tau)\rangle, \tag{63}
$$

$$
\langle\Delta A(t)\,\Delta B^+\rangle=\langle\Delta A\,\Delta B^+\rangle-\int_0^t d\tau\langle\Delta A^c(\tau)J_B^{c+}\rangle^c+
$$
$$
+\int_0^t d\tau\langle\Delta A(t-\tau)\Delta P^+\rangle\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle J_P\Delta B^+\rangle-
$$
$$
-\int_0^t d\tau\int_0^\tau d\tau_1\langle\Delta A(t-\tau)\Delta P^+\rangle\langle\Delta P\,\Delta P^+\rangle^{-1}\langle J_P^c(\tau_1)J_B^c\rangle^c. \tag{64}
$$

Если воспользоваться тождествами (61)–(64), совершить преобразование Лапласа (31) и перейти в соответствии с (33), (37) к корреляционным функциям Грина, то получим в E-представлении следующие уравнения ($\langle\Delta AJ_P^+\rangle=-\langle J_A\Delta P^+\rangle$ и т. д., $\operatorname{Im}E\neq0$):

$$
iE\langle\langle\Delta A(t)\Delta B^+\rangle\rangle_E=i\langle\Delta A\Delta B^+\rangle-\langle\langle J_A^c(t)\Delta B^{c+}\rangle\rangle_E^c+
$$
$$
+[\langle\Delta AJ_P^+\rangle+i\langle\langle J_A^c(t)J_P^{c+}\rangle\rangle_E^c]\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\langle\Delta P(t)\Delta B^+\rangle\rangle_E, \tag{65}
$$

$$
iE\langle\langle\Delta A\Delta B^+(t)\rangle\rangle_E=i\langle\Delta A\Delta B^+\rangle-\langle\langle\Delta A^c J_B^{c+}(t)\rangle\rangle_E^c+
$$
$$
+\langle\langle\Delta A\Delta P^+(t)\rangle\rangle_E\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}[\langle J_P\Delta B^+\rangle+i\langle\langle J_P^c J_B^{c+}(t)\rangle\rangle_E^c], \tag{66}
$$

(67) $$iE\langle\langle\Delta A\Delta B^+(t)\rangle\rangle_E=i\langle\Delta A\Delta B^+\rangle+\langle\langle J_A{}^c\Delta B^{c+}(t)\rangle\rangle_E{}^c-$$
$$-[\langle\Delta AJ_P{}^+\rangle-i\langle\langle J_A{}^cJ_P{}^{c+}(t)\rangle\rangle_E{}^c]\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\langle\Delta P\Delta B^+(t)\rangle\rangle_E,$$

(68) $$iE\langle\langle\Delta A(t)\Delta B^+\rangle\rangle_E=i\langle\Delta A\Delta B^+\rangle+\langle\langle\Delta A^c(t)J_B{}^{c+}\rangle\rangle_E{}^c-$$
$$-\langle\langle\Delta A(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}[\langle J_P\Delta B^+\rangle-i\langle\langle J_P{}^c(t)J_B{}^{c+}\rangle\rangle_E{}^c].$$

Здесь уравнения (65)—(68) выписаны для кусочно-аналитических корреляционных функций Грина. Из них при $\operatorname{Im}E>0$ следуют уравнения для запаздывающих, при $\operatorname{Im}E<0$ — для опережающих функций Грина. Очевидно, что если в (65)—(68) в качестве ΔA, ΔB^+ взять ΔP, ΔQ^+ или ΔQ, ΔP^+, то получим уравнения (53)—(56).

Аналогичным образом, использовав тождество (58), положив в нем $O_1+O_2=iL$, $O_1=(1-\mathscr{P})iL$, $O_2=\mathscr{P}iL$, с помощью преобразований типа (59)—(60) получим для $\langle\Delta A(t)\Delta B^+\rangle$, $\langle\Delta A\Delta B^+(t)\rangle$ еще четыре тождества. С их помощью найдем еще одну группу уравнений ($\operatorname{Im}E\neq0$):

(69) $$iE\langle\langle\Delta A(t)\Delta B^+\rangle\rangle_E=i\langle\Delta A\Delta B^+\rangle-\langle\langle J_A{}^c(t)\Delta B^{c+}\rangle\rangle_E{}^c+$$
$$+\langle\langle\Delta A(t)J_P{}^+\rangle\rangle_E\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}[\langle\Delta P\Delta B^+\rangle+i\langle\langle J_P{}^c(t)\Delta B^{c+}\rangle\rangle_E{}^c],$$

(70) $$iE\langle\langle\Delta A\Delta B^+(t)\rangle\rangle_E=i\langle\Delta A\Delta B^+\rangle-\langle\langle\Delta A^cJ_B{}^{c+}(t)\rangle\rangle_E{}^c+$$
$$+[\langle\Delta A\Delta P^+\rangle+i\langle\langle\Delta A^cJ_P{}^{c+}(t)\rangle\rangle_E{}^c]\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\langle J_P\Delta B^+(t)\rangle\rangle_E,$$

(71) $$iE\langle\langle\Delta A\Delta B^+(t)\rangle\rangle_E=i\langle\Delta A\Delta B^+\rangle+\langle\langle J_A{}^c\Delta B^{c+}(t)\rangle\rangle_E{}^c-$$
$$-\langle\langle\Delta AJ_P{}^+(t)\rangle\rangle_E\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}[\langle\Delta P\Delta B^+\rangle-i\langle\langle J_P{}^c\Delta B^{c+}(t)\rangle\rangle_E{}^c],$$

(72) $$iE\langle\langle\Delta A(t)\Delta B^+\rangle\rangle_E=i\langle\Delta A\Delta B^+\rangle+\langle\langle\Delta A^c(t)J_B{}^{c+}\rangle\rangle_E{}^c-$$
$$-[\langle\Delta A\Delta P^+\rangle-i\langle\langle\Delta A^c(t)J_P{}^{c+}\rangle\rangle_E{}^c]\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\langle J_P(t)\Delta B^+\rangle\rangle_E.$$

Из сравнения уравнений (65)—(68) и (69)—(72) легко получить некоторую группу тождеств для различных корреляционных функций Грина.

Отметим, что с точки зрения теории равновесных функций Грина [1, 3, 13—15] метод НСО обеспечивает однозначную и физически естественную перестройку (обычных) бесконечных цепочек уравнений для различных равновесных корреляционных функций Грина. Метод НСО однозначным образом фиксирует (по ΔP) структуру проекционных операторов $\mathscr{P}$, $\mathscr{P}^+$, структуру уравнений для $\langle\Delta P\rangle^t$, структуру уравнений для различных равновесных корреляционных функций Грина, их иерархическую соподчиненность (см. раздел 8) и т. д. Очевидно, что полученные уравнения представляют собой только «первые» уравнения бесконечной цепочки. Альтернативный метод вывода позволяет в духе метода НСО построить уравнения для приведенных корреляционных функций Грина («вторые» уравнения бесконечной цепочки) с той же иерархией и структурой, что полученные (см. раздел 9).

6. Построение уравнений для равновесных пуассоновских функций Грина. Рассмотрим кратко получение в рамках построенной теории уравнений для равновесных пуассоновских функций Грина $\langle\langle\Delta A(t)|\Delta B^+\rangle\rangle_E$, $\langle\langle\Delta A|\Delta B^+(t)\rangle\rangle_E$, имеющих широкое применение в статистической механике [6—8].

Использовав явный вид равновесной функции распределения ρ_0, определение и свойства скобки Пуассона, операции Sp... и оператора

Лиувилля, легко получим тождество ($\beta=1/k_BT$, ΔA, ΔB^+ — произвольные динамические переменные)

$$\langle\{\Delta A,\ \Delta B^+\}\rangle=\mathrm{Sp}\,\rho_0\{\Delta A,\ \Delta B^+\}=\mathrm{Sp}\{\rho_0,\ \Delta A\}\Delta B^+= \\ =-\beta\,\mathrm{Sp}\,\rho_0\{H,\ \Delta A\}\Delta B^+=\beta\langle(iL\Delta A)\Delta B^+\rangle=-\beta\langle\Delta A(iL\Delta B^+)\rangle. \tag{73}$$

Из (73) следует, например, что

$$\langle\{\Delta A(t),\Delta B^+\}\rangle=\beta\frac{d}{dt}\langle\Delta A(t)\Delta B^+\rangle\equiv\beta\langle(iL\,\Delta A(t))\Delta B^+\rangle, \tag{74}$$

$$\langle\langle\Delta A(t)|\Delta B^+\rangle\rangle^{r,a}=\beta\langle\langle(iL\Delta A(t)\Delta B^+\rangle\rangle^{r,a}, \\ \langle\langle\Delta A(t)|\Delta B^+\rangle\rangle_E=\beta\langle\langle(iL\Delta A(t))\Delta B^+\rangle\rangle_E. \tag{75}$$

Отсюда понятно, как можно получить из уравнений (53)—(56), (65)—(72) уравнения для различных пуассоновских функций Грина вида $\langle\langle\Delta A(t)|\Delta B^+\rangle\rangle_E$, $\langle\langle\Delta A|\Delta B^+(t)\rangle\rangle_E$. Именно нужно с их помощью получить уравнение для корреляционной функции Грина $\langle\langle(iL\Delta A(t))\Delta B^+\rangle\rangle_E=$ $=-\langle\langle\Delta A(t)(iL\Delta B^+)\rangle\rangle_E$, а затем заменить ее в соответствии с (75) функцией Грина $\langle\langle\Delta A(t)|\Delta B^+\rangle\rangle_E$ и т. д. Например, таким образом с помощью уравнения (54) получим следующее уравнение для пуассоновской функции Грина:

$$\{iE+[\langle J_P\Delta P^+\rangle-i\langle\langle J_P^c(t)J_P^{c+}\rangle\rangle_E^c]\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\}\langle\langle\Delta P(t)|\Delta P^+\rangle\rangle_E= \\ =i\beta\{[\langle J_P\Delta P^+\rangle-i\langle\langle J_P^c(t)J_P^{c+}\rangle\rangle_E^c]\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\}\langle\Delta P\Delta P^+\rangle. \tag{76}$$

Очевидно, что структурно уравнение (76) тесно связано с уравнениями (32), (44)—(46), (48) для $\langle\Delta P\rangle^\omega$, $\Delta F(\omega)$ и т. д.

7. Марковское приближение для макроскопических уравнений и корреляционных функций Грина. Достаточно хорошим и широко используемым приближением в теории неравновесных процессов является марковское [1—3, 11, 21]. Обсудим его применение для получения уравнений для $\langle\Delta P\rangle^t$, $\Delta F(t)$ и т. д. и уравнений для различных функций Грина.

Марковское приближение с точки зрения неравновесной функции распределения $\rho(t)$ в методе НСО сводится к следующему. Берется «нормальное» решение уравнения Лиувилля с источником (14) и в нем пренебрегается временным запаздыванием через переменные $\langle\Delta P\rangle^t$, т. е. $\rho(t)$ берется в виде

$$\rho(t)=\rho_0\left\{1+\left[\Delta P^+-\int_0^\infty dt'e^{-\varepsilon t'}e^{-(1-\mathscr{P}^+)iLt'}(1-\mathscr{P}^+)iL\,\Delta P^+\right]\times\right. \\ \left.\times\langle\Delta P\,\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\Delta P\rangle^t\right\}. \tag{77}$$

Выражение (77) остается «нормальным» решением, т. к. удовлетворяет (7).

В обоснование марковского приближения можно привести различные аргументы [1—3, 11, 21]. Однако только получение с его помощью физически разумных результатов может служить некоторым его оправданием. Подчеркнем, что переход к марковскому приближению в «формальном» решении уравнения Лиувилля с источником (49) не является законным и приводит к существенным трудностям, которые, например, обсуждались в [21].

Воспользовавшись (77), (5), легко получим марковские уравнения для $\langle\Delta P\rangle^t$ во временном, а затем и в ω-представлении. Аналогичным образом можно получить марковские уравнения для $\Delta F(t)$, $\langle\Delta Q\rangle^t$, марковское выражение для $\langle\Delta Q\rangle^t$ в t-, ω-представлениях. Для получения уравнений для равновесных корреляционных функций Грина в марковском представлении в методе НСО поступаем, как и ранее (см. раздел 4), с тем отличием, что временные производные $\langle\Delta P\rangle^t$ в (51) исключаем с помощью марковского уравнения (для $\langle\Delta P\rangle^t$) и для $\langle\Delta Q\rangle^t$ при составлении тождества используем вместо (29) его марковское выражение. На основе результатов метода НСО можно сформулировать общее правило перехода в ω-, E-представлении к марковскому приближению в любых уравнениях и тождествах.

А именно для перехода к марковскому приближению нужно: *а) заменить во всех уравнениях и тождествах у приведенных корреляционных функций Грина аргумент E на $0\pm i\varepsilon$ и $\varepsilon\to+0$ («+» — для запаздывающих, «—» — для опережающих), в остальных выражениях аргумент E остается без изменений; б) считать, что все входящие в уравнения и тождества равновесные корреляционные (и пуассоновские) функции Грина находятся из уравнений марковского приближения.*

8. Построение макроскопических асимптотик корреляционных функций Грина $\langle\langle\Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E$, $\langle\langle\Delta P\Delta P^+(t)\rangle\rangle_E$. Воспользовавшись (54), выпишем уравнение для корреляционной функции Грина $\langle\langle\Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E$ $(\mathrm{Im}\,E\neq0)$

$$\{iE+[\langle J_P\Delta P^+\rangle-i\langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle\rangle_E{}^c]\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\}\langle\langle\Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E= =i\langle\Delta P\Delta P^+\rangle. \tag{78}$$

Обсудим теперь связь между уравнениями для макроскопических переменных $\langle\Delta P\rangle^t$, $\Delta F(t)$ и т. д. (в ω-представлении) и уравнениями для корреляционных функций Грина $\langle\langle\Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E$, $\langle\langle J_P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E$ $(\equiv\beta\langle\langle\Delta P(t)|\Delta P^+\rangle\rangle_E)$. Именно, зная только общий вид и структуру этих уравнений, легко показать, что справедливы следующие утверждения, поясняющие, в каком смысле они эквивалентны в рамках построенной здесь теории.

Утверждение 1. *Пусть известна структура уравнений для макроскопических переменных* $\langle\Delta P\rangle^\omega$ (32), $\langle\Delta P^+\rangle^{-\omega}$ (46), *для кусочно-аналитической корреляционной функции Грина* $\langle\langle\Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle$ (78). *Тогда: а) если известна временная равновесная корреляционная функция* $\langle\Delta P(t)\Delta P^+\rangle$, *то с помощью уравнения* (78) *можно получить уравнения* (32), (46); *б) если известна равновесная корреляционная функция* $\langle\Delta P\Delta P^+\rangle$, *то с помощью уравнений* (32), (46) *можно получить уравнение* (78) *и найти временную равновесную корреляционную функцию* $\langle\Delta P(t)\Delta P\rangle$.

Справедливость утверждения «а» показывается следующим образом. Зная $\langle\Delta P(t)\Delta P^+\rangle$, положив $t=0$, находим $\langle\Delta P\Delta P^+\rangle$. С помощью фурье-преобразования (30) найдем спектральную интенсивность корреляционной функции Грина $\langle\langle \Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E$: $I(\omega)\equiv\langle\Delta P(t)\Delta P^+\rangle^\omega=\int\limits_{-\infty}^{\infty}dt\, e^{i\omega t}\langle\Delta P(t)\times$ $\times\Delta P^+\rangle$ (см. (35), (39)). По спектральной интенсивности $I(\omega)$ с помощью (35) находим кусочно-аналитическую корреляционную функцию Грина $\langle\langle\Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E$. Зная структуру уравнения (78), находим величину $\{iE+$ $+[\langle J_P\Delta P^+\rangle-i\langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle\rangle_E{}^c]\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\}\equiv i\langle\Delta P\Delta P^+\rangle\langle\langle\Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E{}^{-1}$ (или, что очевидно, величину $[\langle J_P\Delta P^+\rangle-i\langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle\rangle_E{}^c]$) при $\operatorname{Im}E\neq0$. Отсюда, используя (38) и зная структуру уравнений (32), (46), легко находим их (т. е. находим входящие в них величины; при желании находим и уравнения (45), (48)).

Справедливость утверждения «б» устанавливается следующим образом. Из уравнений (32), (46) в силу их линейности (опуская $\langle\Delta P\rangle^\omega$, $\langle\Delta P^+\rangle^{-\omega}$, $i\omega$), зная $\langle\Delta P\Delta P^+\rangle$, находим величины $[\langle J_P\Delta P^+\rangle-i\langle\langle J_P{}^c(t)\cdot$ $\cdot J_P{}^{c+}\rangle\rangle^{c,r,a}_{\omega\pm i0}]\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}$. Воспользовавшись формулами (39), (35), (38), находим соответственно спектральную интенсивность величины $i\langle\langle J_P{}^c(t)\cdot$ $\cdot J_P{}^{c+}\rangle\rangle_E{}^c\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}$, саму эту величину, ее предельные значения на действительной оси $i\langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle\rangle^{c,r,a}_{\omega\pm i0}$ $\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}$, а затем величину $\langle J_P\cdot$ $\cdot\Delta P^+\rangle\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}$. Теперь, зная величины $\langle\Delta P\Delta P^+\rangle$, $\langle J_P\Delta P^+\rangle\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}$, $i\langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle\rangle_E{}^c\langle\Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}$ и структуру уравнения (78), восстанавливаем его. С помощью (78) теперь найдем кусочно-аналитическую корреляционную функцию Грина $\langle\langle\Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E$. Зная $\langle\langle\Delta P(t)\Delta P\rangle\rangle_E$ и пользуясь формулой (39), можно найти спектральную интенсивность $I(\omega)$ временной корреляционной функции $\langle\Delta P(t)\Delta P\rangle$, а по ней с помощью обратного преобразования фурье (30) — и ее саму.

Замечание. Утверждение «б» можно обосновать, использовав вместо (46) «временисопряженное» (32) уравнение (48), полученное с помощью опережающего решения (47) уравнения Лиувилля (см. конец раздела 3).

Утверждение 1 физически означает, что затухание равновесных флуктуаций обусловлено линеаризованными уравнениями, описывающими эволюцию к равновесию соответствующих макроскопических переменных. Это утверждение естественно рассматривать как точную обобщенную формулировку и микроскопическое обоснование в рамках метода НСО известной гипотезы Онсагера [26, 11]. Аналогичное утверждение Онсагером [26, 11] высказывалось в рамках (марковской) феноменологической термодинамики.

Обсуждение связи между уравнениями для макроскопических переменных $\langle\Delta P\rangle^\omega$ (32) и $\langle\Delta P^+\rangle^{-\omega}$ (46) и уравнением для кусочно-аналитической функции Грина $\langle\langle J_P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E$ проведем на основе ей эквивалентной пуассоновской функции Грина $\langle\langle\Delta P(t)|\Delta P^+\rangle\rangle_E=\beta\langle\langle J_P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E$ и соответственно уравнения (76). Легко видеть, что знание структуры уравнений (32), (46), (76) позволяет восстановить по уравнениям (32), (46) уравнение (76) (см. обоснование утверждения «1б»)). Восстановить же по уравнению (76) уравнения (32), (46) без уравнения для корреляционной функции Грина $\langle\langle\Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E$ и знания его структуры нельзя. Поэтому корреляционная функция Грина $\langle\langle\Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E$ (и уравнение (78)) является более фундаментальным объектом теории, чем пуассоновская функция Грина $\langle\langle\Delta P(t)|\Delta P^+\rangle\rangle_E$ (и ее уравнение (76)).

Рассмотрим вопрос о построении на основе развитой теории «асимптотик» для равновесных корреляционных и пуассоновских функций Грина $\langle\langle \Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E$, $\langle\langle \Delta P(t)|\Delta P^+\rangle\rangle_E$ в смысле Каданова – Мартина [9–11], Боголюбова [4–8]. В этих теориях (отвлекаясь от деталей) под «асимптотическими» понимаются те выражения для этих функций Грина (обычно $\langle\langle \Delta P(t)|\Delta P^+\rangle\rangle_E$), которые получаются на основе использования феноменологических или полученных на основе микроскопической теории марковских уравнений для макроскопических переменных $\langle \Delta P\rangle^t$. В рамках построенной здесь теории очевиден и прост метод получения «асимптотик» для $\langle\langle \Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E$, $\langle\langle \Delta P(t)|\Delta P^+\rangle\rangle_E$ в таком понимании.

Пусть имеются некоторые марковские «феноменологические» уравнения для $\langle \Delta P\rangle^t$. Тогда их нужно линеаризовать, совершить преобразование Фурье, а затем, зная из построенной здесь микроскопической теории структуру уравнений для $\langle \Delta P\rangle^\omega$ и $\langle\langle \Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E$, $\langle\langle \Delta P(t)|\Delta P^+\rangle\rangle_E$ в марковском приближении (см. раздел 7), легко получить уравнения для этих функций Грина и их «асимптотические» выражения. Здесь, однако, требуется некоторая аккуратность. При получении таким образом «асимптотик» для запаздывающих функций Грина нужно использовать «феноменологические» уравнения для $\langle \Delta P\rangle^t$, описывающие эволюцию системы к равновесию при $t\to\infty$, а для опережающих – уравнения, описывающие эволюцию к равновесию при $t\to-\infty$ (см. замечание и конец раздела 3).

Если имеются некоторые немарковские «феноменологические» уравнения для $\langle \Delta P\rangle^t$, то на их основе в методе Каданова – Мартина [9–11], Боголюбова [4–8] получить асимптотические выражения для функций Грина $\langle\langle \Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E$, $\langle\langle \Delta P(t)|\Delta P^+\rangle\rangle_E$ нельзя. В рамках развитой теории это сделать возможно. Процедура получения асимптотики для этого случая описана при обосновании утверждения «1б».

9. Построение цепочек уравнений для равновесных приведенных корреляционных функций Грина. Для расчета $\langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^c\rangle\rangle_E{}^c$ можно использовать методику, разработанную Церковниковым [3, 16–18]. Действительно, учтя (3), уравнение обычной цепочки для $\langle\langle \Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E$ можно преобразовать к виду (78) (см. [3, с. 142]) и найти, что

$$\langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle\rangle_E{}^c=\langle\langle J_P(t)J_P{}^+\rangle\rangle_E-\\
-\langle\langle J_P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E\langle\langle \Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E{}^{-1}\langle\langle \Delta P(t)J_P{}^+\rangle\rangle_E. \tag{79}$$

Поэтому для $\langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^c\rangle\rangle_E{}^c$ легко построить цепочку уравнений определенной структуры [3, 16–18]. Однако использование для нее процедур расцепления и обрыва, предложенных в [3, 16–18] для квантового случая, возможно только после существенных модификаций.

Отметим, что с помощью уравнения (78) и уравнения для $\langle\langle J_P(t)\cdot\Delta P^+\rangle\rangle_E$ соотношение (79) можно преобразовать к виду

$$\langle\langle J_P(t)J_P{}^+\rangle\rangle_E=\langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^c\rangle\rangle_E{}^c-\\
-[\langle J_P\Delta P^+\rangle-i\langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^{c+}\rangle\rangle_E{}^c]\times\\
\times\langle \Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}\langle\langle \Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E\langle \Delta P\Delta P^+\rangle^{-1}[\langle J_P\Delta P^+\rangle-\\
-i\langle\langle J_P{}^c(t)J_P{}^c\rangle\rangle_E{}^c]. \tag{80}$$

Построение бесконечной цепочки уравнений (для приведенных корреляционных функций и т. д.) можно провести единообразно альтернативным методом. Действительно, вывод уравнений (65)–(72) был возможен в силу: а) свойства (1) и явного вида ρ_0; б) свойств (3), (4) оператора Лиувилля iL; в) существования набора динамических переменных ΔP (ΔP^+), позволяющих построить проекционные операторы $\mathscr{P}$, $\mathscr{P}^+$; г) явного вида (15), (16) и свойств (17)–(19) $\mathscr{P}$, $\mathscr{P}^+$; д) наличия соотношений (20)–(27), имеющих место в силу условий «а», «б», «г».

Заметим, что приведенные корреляционные функции Грина в (65)–(72) строятся на множестве не произвольных динамических переменных, а вида $\Delta A^c=(1-\mathscr{P})\Delta A$, $\Delta B^{c+}=(1-\mathscr{P}^+)\Delta B^+$ и что их временная эволюция определяется приведенными операторами Лиувилля $iL_1=(1-\mathscr{P})iL$, $iL_1{}^+=(1-\mathscr{P}^+)iL$ (iL_1 определяет эволюцию вектор-строк, $iL_1{}^+$ – вектор-столбцов). Выбрав на этом множестве некоторый набор динамических переменных ΔP_1 ($\Delta P_1{}^+$) и построив с их помощью проекционные операторы $\mathscr{P}_1$, $\mathscr{P}_1{}^+$ вида (15), (16), можно показать, что на нем для ρ_0, $\mathscr{P}_1$, $\mathscr{P}_1{}^+$, iL_1, $iL_1{}^+$ выполняются условия «а» – «г». Это означает, что для приведенных функций Грина $\langle\langle\Delta A^c(t)\Delta B^{c+}\rangle\rangle_E{}^c$, $\langle\langle\Delta A^c\Delta B^{c+}(t)\rangle\rangle_E{}^c$ альтернативным методом можно получить уравнения вида (65)–(72), где «старые» приведенные функции Грина будут стоять на месте корреляционных, на их месте – «новые» приведенные корреляционные функции Грина и т. д. Очевидно, что этот процесс можно продолжить и получить всю бесконечную цепочку уравнений.

Примем обозначения: $k=0, 1, 2, \ldots$, $\Delta A_{k+1}=(1-\mathscr{P}_k)\Delta A_k=\Delta A_k$, $\Delta B^+_{k+1}=(1-\mathscr{P}_k{}^+)\Delta B_k{}^+=\Delta B_k{}^{c+}$, $\Delta P_k\in\{\Delta A_k\}$, $\Delta P_k{}^+\in\{\Delta B_k\}$, $iL_{k+1}=(1-\mathscr{P}_k)iL_k$, $iL^+_{k+1}=(1-\mathscr{P}_k{}^+)iL_k{}^+$, $\mathscr{P}_k=\mathscr{P}(\Delta P_k)$, $\mathscr{P}_k{}^+=\mathscr{P}^+(\Delta P_k{}^+)$, $J_{A_k}=iL_k\Delta A_k$, $J_{B_k}{}^+=iL_k{}^+\Delta B_k{}^+$, $J_{A_k}{}^c=(1-\mathscr{P}_k)iL_k\Delta A_k=iL_{k+1}\Delta A_k$, $J^{c+}_{B_k}=(1-\mathscr{P}_k{}^+)iL_k{}^+\Delta B_k{}^+=iL^+_{k+1}\Delta B_k{}^+$, $\Delta A_k(t)=e^{iL_kt}\Delta A_k$, $\Delta B_k{}^+(t)=e^{iL_k{}^+t}\Delta B_k{}^+$, $k=0$, $\Delta A_0=\Delta A$, $\Delta B_0{}^+=\Delta B^+$, $\Delta P_0=\Delta P$, $\Delta P_0{}^+=\Delta P$, $iL_0=iL$, $iL_0{}^+=iL$; $\langle\langle\Delta A_{k+1}(t)\Delta B^+_{k+1}\rangle\rangle_E=\langle\langle\Delta A_k{}^c(t)\cdot\Delta B_k{}^{c+}\rangle\rangle_E{}^c$, $\langle\langle\Delta A_{k+1}\Delta B^+_{k+1}(t)\rangle\rangle_E=\langle\langle\Delta A_k{}^c\Delta B_k{}^{c+}(t)\rangle\rangle_E{}^c$, $k=0, 1, \ldots$. Здесь $\{\Delta A_k\}$ – множество динамических переменных (вектор-столбцов) вида ΔA_k, $\Delta P_k\in\{\Delta A_k\}$ – некоторый выделенный набор динамических переменных из множества $\{\Delta A_k\}$, $\mathscr{P}_k=\mathscr{P}(\Delta P_k)$ – проекционный оператор, построенный с помощью набора динамических переменных ΔP_k в соответствии с (15) и т. д. Символом «c» выделяются равновесные приведенные корреляционные функции Грина. Он также означает, что в них эволюция динамических переменных определяется приведенными операторами Лиувилля $(1-\mathscr{P}_k)iL_k$, $(1-\mathscr{P}_k{}^+)iL_k{}^+$. В этих обозначениях искомые бесконечные цепочки уравнений для различных корреляционных функций Грина следуют из (65)–(72), если ввести индекс k, $k=0, 1, 2, \ldots$. Например,

$$
\begin{aligned}
&iE\langle\langle\Delta A_k(t)\Delta B_k{}^+\rangle\rangle_E=i\langle\Delta A_k\,\Delta B_k{}^+\rangle+\langle\langle\Delta A_k{}^c(t)J_{B_k}^{c+}\rangle\rangle_E{}^c-\\
&-\langle\langle\Delta A_k(t)\Delta P_k{}^+\rangle\rangle_E\langle\langle\Delta P_k\Delta P_k{}^+\rangle\rangle_E[\langle J_{P_k}\Delta B_k{}^+\rangle-\\
&-i\langle\langle J_{P_k}^c(t)J_{B_k}^{c+}\rangle\rangle_E{}^c].
\end{aligned}
$$

Отсюда при $k=0$ следует уравнение (72) и т. д. Легко понять, что при каждом $k=0, 1, \ldots$ в принятых обозначениях справедливы все формулы разделов 5–9, т. е. развитая теория воспроизводится на каждом k-м шаге.

Метод НСО приводит к физически обоснованному выбору набора динамических переменных ΔP_k только при $k=0$. При $k=1, 2, \ldots$ выбор должен быть тесно связан с исходным набором $\Delta P_0=\Delta P$, определяться его спецификой и структурой гамильтониана, физическими особенностями рассматриваемой стадии эволюции неравновесной системы к равновесию и т. д.

Структура уравнений цепочек на каждом k-м шаге не только одна и та же, но является естественной и удобной для построения различных методов их обрыва и расцепления. В развитой теории наибольший интерес представляют корреляционные функции Грина $\langle\langle \Delta P_k(t)\Delta P_k^+\rangle\rangle_E$, $k=0, 1, \ldots$. Каждое уравнение цепочки для них имеет вид (78). Можно предложить простую, но достаточно эффективную процедуру обрыва этой цепочки: на k-м шаге нужно пренебречь возникающей приведенной корреляционной функцией Грина. Это приведет в зависимости от выбора набора ΔP_k к представлению $\langle\langle \Delta P(t)\Delta P^+\rangle\rangle_E$ $(k=0)$ либо в виде простой цепной дроби [3, 24, 27], либо в виде обобщенной [3] и т. д. При разработке процедур замыкания для построенных цепочек нужно проявлять осторожность, т. к. приведенные операторы Лиувилля не обладают свойством (2) и поэтому $e^{iL_kt}(\Delta A_k\Delta B_k)\neq(e^{iL_kt}\Delta A_k)(e^{iL_kt}\Delta B_k)$ при $k=1, 2, \ldots$. Ясно, что для этого построенные цепочки уравнений следует, пользуясь некоторыми тождествами, переписать через корреляционные функции Грина шага $k=0$, а затем в них проводить расцепления.

Отметим, что развитая теория имеет много общего с различными теориями [2, 3, 19, 24, 27, 28], использующими технику проекционных операторов.

Автор глубоко благодарен профессору Д. Н. Зубареву за ценные замечания и интерес к работе.

Литература

[1] *Зубарев Д. Н.* Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971.
[2] *Зубарев Д. Н.* Современные методы статистической теории неравновесных процессов // Итоги науки и техники. Современные проблемы математики. Т. 15. С. 131–226. М.: ВИНИТИ, 1980.
[3] *Зубарев Д. Н., Церковников Ю. А.* Метод двухвременных температурных функций Грина в равновесной и неравновесной статистической механике // Тр. МИАН СССР. им. В. А. Стеклова. Т. 175. Вып. 3. С. 134–177. М.: Наука, 1986.
[4] *Боголюбов Н. Н.* К вопросу о гидродинамике сверхтекучей жидкости: Препринт Р-1395. Дубна: ОИЯИ, 1963. Избранные труды. Т. 3. Киев: Наукова думка, 1971. С. 244–281.
[5] *Джепаров Ф. С., Красников В. А.* // ТМФ. 1973. Т. 14. № 1. С. 82–90.
[6] *Боголюбов Н. Н. (мл.), Садовников Б. И.* Некоторые вопросы статистической механики. М.: Высшая школа, 1975.
[7] *Адхамов А. А., Лебедев В. И.* Применение метода функций Грина в классической статистической механике. Душанбе: Дониш, 1975.
[8] *Боголюбов Н. Н. (мл.), Камаева В. В., Плечко В. Н.* // ТМФ. 1977. Т. 32. № 1. С. 59–69.
[9] *Kadanoff L. P., Martin P. S.* // Ann. Phys. 1963. V. 24. № 3. P. 419–469.
[10] *Martin P. S.* Non local transport coefficient and correlation function in statistical mechanics of equilibrium and nonequilibrium // Statistical Mechanics of equilibrium and nonequilibrium/Ed. J. Meixer. Amsterdam: North-Holland Publishing Co., 1965. P. 100–125.
[11] *Форстер Д.* Гидродинамические флуктуации, нарушенная симметрия и корреляционные функции. М.: Атомиздат, 1980.
[12] *Морозов В. Г.* // ТМФ. 1981. Т. 47. № 3. С. 407–418.
[13] *Зубарев Д. Н.* // УФН. 1960. Т. 71. Вып. 1. С. 71–116.
[14] *Тябликов С. В.* Методы квантовой теории магнетизма. М.: Наука, 1975.

[15] *Бонч-Бруевич В. Л., Тябликов С. В.* Метод функций Грина в статистической механике. М.: Физматгиз, 1961.
[16] *Церковников Ю. А.* // ТМФ. 1981. Т. 49. № 2. С. 219–233.
[17] *Церковников Ю. А.* // ТМФ. 1982. Т. 50. № 2. С. 261–271.
[18] *Церковников Ю. А.* // ТМФ. 1985. Т. 63. № 3. С. 440–457.
[19] *Зубарев Д. Н., Токарчук М. В.* Обобщенная гидродинамика ионных систем: Препринт ИТФ-86-40Р. Киев: ИТФ АН УССР, 1986.
[20] *Зубарев Д. Н., Токарчук М. В.* // ТМФ. 1987. Т. 70. № 2. С. 234–254.
[21] *Калашников В. П.* // ТМФ. 1978. Т. 34. № 3. С. 412–425.
[22] *Калашников В. П.* // ТМФ. 1978. Т. 35. № 1. С. 133–144.
[23] *Kawasaki K., Gunton J. D.* // Phys. Lett. A. 1972. V. 40A. № 1. P. 35–36; Phys. Rev. A. 1973. V. 8A. № 3. P. 2048–2064.
[24] *Mori H.* // Progr. Theor. Phys. 1965. V. 33. № 3. P. 423–455.
[25] *Владимиров В. С.* Уравнения математической физики. М.: Наука, 1981.
[26] *Onsager L.* // Phys. Rev. 1931. V. 37. № 2. P. 405–421; Phys. Rev. 1931. V. 38. № 12. P. 2265–2279.
[27] *Boon J. P., Yip S.* Molecular hydrodynamics. N.-Y.: Mc. Graw-Hill Inc., 1980.
[28] *Götze W., Lücke M.* // Phys. Rev. A. 1975. V. 11. № 6. P. 2173–2190.

Московский институт электронного машиностроения

Поступила в редакцию 31.III.1988 г.

CONSTRUCTION OF CLASSICAL SYSTEMS OF EQUATIONS AND MACROSCOPIC ASYMPTOTICS FOR THE EQUILIBRIUM CORRELATION AND GREEN FUNCTIONS BY MEANS OF THE NONEQUILIBRIUM STATISTICAL OPERATOR METHOD

Balabanyan G. O.

In the framework of the NSO method for classical systems a general scheme is suggested for deriving linearised equations for macroscopic variables describing nonequilibrium states and also equations for the equilibrium correlation and Poisson Green functions. Arguments are given showing that the damping of equilibrium fluctuations is due to the linearised equations describing the evolution to equilibrium of corresponding macroscopic variables. A simple and general method is suggested for constructing macroscopic asymptotics for the equilibrium correlation and Poisson Green functions.