Богдан Богданович Марків
Ігор Петрович Омелян
Михайло Васильович Токарчук

Релаксація до стану молекулярної гідродинаміки. Рівняння переносу

Роботу отримано 29 грудня 2008 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом теорії нерівноважних процесів

Виготовлено при ІФКС НАН України

Національна академія наук України

ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

ICMP–08–18U

Б.Б.Марків, І.П.Омелян, М.В.Токарчук

РЕЛАКСАЦІЯ ДО СТАНУ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ГІДРОДИНАМІКИ. РІВНЯННЯ ПЕРЕНОСУ

ЛЬВІВ

УДК: 536.75; 536-12.01.

PACS: 05.20.Dd, 05.60.+w, 52.25.Fi, 71.45.G, 82.20.M

Релаксація до стану молекулярної гідродинаміки. Рівняння переносу

Б.Б.Марків, І.П.Омелян, М.В.Токарчук

Анотація. Наведено дослідження систем класичних взаємодіючих частинок, що перебувають в станах як близьких, так і далеких від рівноваги методом НСО Зубарєва. Розглянуто задачу про релаксацію нерівноважного стану системи до стану молекулярної гідродинаміки. Отримано нерівноважний статистичний оператор та відповідні рівняння переносу, що описують такий релаксаційний процес.

Relaxation to the state of molecular hydrodynamics. Transport equations

B.B.Markiv, I.P.Omelyan, M.V.Tokarchuk

Abstract. The investigations of the classical interacting particles systems as close as far from equilibrium using the Zubarev NSO method are presented. The problem of the relaxation of a nonequilibrium state of a system to the state of molecular hydrodynamics is considered. The nonequilibrium statistical operator and the appropriate transport equations which describe such a relaxation process are obtained.

Подається в Physica A
Submitted to Physica A

1. Вступ

Дослідженням нерівноважних процесів у класичних та квантових системах, далеких від рівноваги, нерівноважні стани яких мають власні часи життя (часи релаксації), є актуальними в сучасній теорії нерівноважних процесів [1–9]. У таких дослідженнях успішно застосовується метод нерівноважного статистичного оператора Зубарєва [10, 11] з певними модифікаціями [1, 2, 12]. Так, зокрема, в роботі [4] описується нова інтерпретація цього методу, згідно якої виділення інваріантної частини НСО трактується як усереднення квазірівноважного статистичного оператора з розподілом за часами життя системи

$$\varrho(t) = \int_{-\infty}^{t} p_q(t-t')\varrho_q(t')dt', \tag{1.1}$$

де $p_q(y)$ — функція розподілу за часами життя системи. Оскільки в методі НСО Зубарєва враховується вплив минулого системи на її теперішній стан, у [9] автор також зазначає, що при описі реальних станів у нерівноважних системах, зокрема кінетичного, гідродинамічного та інших, слід використовувати гамма-розподіл порядку k за часами життя:

$$p_q(y) = \frac{\varepsilon(\varepsilon y)^{k-1}}{\Gamma(k)} e^{-\varepsilon y}, \tag{1.2}$$

$\Gamma(k)$ — гамма-функція. Гамма розподіл застосовується до систем, еволюція яких відбувається в декілька етапів, і кількість цих етапів відповідає порядку гамма розподілу. При $k = 1$ отримуємо експоненційний розподіл за часами життя $p_q(y) = \varepsilon e^{-\varepsilon y}$, що був використаний Зубарєвим, і який справедливий для великих часів. Зазвичай нерівноважні процеси відбуваються у декілька етапів, кожний з яких характеризується своїм часовим масштабом. При розгляді релаксації системи до стану молекулярної гідродинаміки, еволюція дійсно відбувається у два етапи, тому, враховуючи сказане вище, функцію розподілу за часами життя (чи "вагову функцію"в термінології [3, 7, 8]) слід вибрати у формі

$$p_q(y) = \varepsilon^2 y e^{-\varepsilon y} \tag{1.3}$$

гамма розподілу при $k = 2$. У цьому випадку розподіл співпадає з розподілом Ерланга другого порядку.

2. Метод нерівноважного статистичного оператора в узагальненій гідродинаміці

В основі молекулярної гідродинаміки простих рідин [13–16] лежать лінійні рівняння переносу для середніх значень колективних гідродинамічних змінних густин числа частинок $\hat{n}(\vec{r})$, імпульсу $\hat{\vec{j}}(\vec{r})$ та повної енергії $\hat{\varepsilon}(\vec{r})$. Такі рівняння можуть бути отримані методом проекційних операторів Морі [13,17], або ж методом нерівноважного статистичного оператора Зубарєва [10,11].

У методі нерівноважного статистичного оператора рівняння переносу для середніх значень $\langle\hat{P}_n\rangle^t$ вибраного набору динамічних змінних скороченого опису $\hat{P}_n$ отримуються з допомогою нерівноважної функції розподілу $\varrho(x^N;t)$, яка знаходиться як розв'язок рівняння Ліувіля з граничною умовою, що відповідає ідеї скороченого опису нерівноважного стану системи. Тут $\langle\ldots\rangle^t = \int d\Gamma_N(\ldots)\varrho(x^N;t)$, $d\Gamma_N = \frac{(dx)^N}{N!}$, $x = \{\vec{p},\vec{r}\}$ — координати фазового простору частинок. $\varrho(x^N;t)$ — нормована:

$$\int d\Gamma_N \varrho(x^N;t) = 1. \tag{2.1}$$

Розв'язок рівняння Ліувіля для $\varrho(x^N;t)$ може бути записаний у вигляді [10]:

$$\varrho(x^N;t) = \varepsilon\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}e^{iL_N(t'-t)}\varrho_q(x^N;t')dt',$$

$$\varrho(x^N;t) = \varrho_q(x^N;t) - \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}e^{iL_N(t'-t)}\left(\frac{\partial}{\partial t'} + iL_N\right)\varrho_q(x^N;t')dt',$$

або з врахуванням проектування, яке виключає часові похідні від $\varrho_q(x^N;t)$:

$$\varrho(x^N;t) = \varrho_q(x^N;t) - \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}T_q(t,t')\left(1 - P_q(t')\right)iL_N\varrho_q(x^N;t')dt', \tag{2.2}$$

де $\varepsilon \to +0$ після термодинамічного граничного переходу. Розподіл $\varepsilon e^{\varepsilon(t'-t)}$ описує рівномірне прямування розподілів $\varrho(x^N;t)$ з часом до стану системи з $\varrho_q(x^N;t)$, в якому немає часів релаксації. $\varrho(x^N;t)$ у вигляді (2.2) задовольняє рівняння Ліувіля з нескінченно малим джерелом

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + (1 - P_q(t))\,iL_N + \varepsilon\right)\Delta\varrho(x^N;t) = -(1 - P_q(t))iL_N\varrho_q(x^N;t), \tag{2.3}$$

що відбирає запізнюючі розв'язки, де $\Delta\varrho(x^N;t) = \varrho(x^N;t) - \varrho_q(x^N;t)$,

$$iL_N = \sum_{j=1}^{N}\frac{\vec{p}_j}{m}\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}_j} - \frac{1}{2}\sum_{l,j(l\neq j)}^{N}\frac{\partial}{\partial\vec{r}_l}\Phi(|\vec{r}_{lj}|)\left(\frac{\partial}{\partial\vec{p}_l} - \frac{\partial}{\partial\vec{p}_j}\right) \tag{2.4}$$

— оператор Ліувіля взаємодіючих атомів масою m з координатами $\vec{r}_j$, імпульсами $\vec{p}_j$ та парним потенціалом взаємодії $\Phi(|\vec{r}_{lj}|)$. $T_q(t,t')$ — оператор еволюції у часі з врахуванням проектування:

$$T_q(t,t') = exp_+\Big\{-\int_{t'}^{t}(1 - P_q(t''))iL_N dt''\Big\}, \tag{2.5}$$

$P_q(t)$ — проекційний оператор Кавасакі-Гантона, що входить у рівняння (2.3) і визначається структурою квазірівноважної функції розподілу $\varrho_q(x^N;t)$ та діє на функції розподілу за правилом:

$$P_q(t)\varrho' = \Big\{\varrho_q(x^N;t) - \sum_n\frac{\delta\varrho_q(x^N;t)}{\delta\langle\hat{P}_n\rangle^t}\langle\hat{P}_n\rangle^t\Big\}\int\varrho' d\Gamma_N$$
$$+\sum_n\frac{\delta\varrho_q(x^N;t)}{\delta\langle\hat{P}_n\rangle^t}\int\hat{P}_n\varrho' d\Gamma_N \tag{2.6}$$

і володіє наступними властивостями $P_q(t)\varrho(x^N;t) = \varrho_q(x^N;t)$, $P_q(t)\varrho_q(x^N;t) = \varrho_q(x^N;t)$, $P_q(t)P_q(t') = P_q(t)$. $\varrho_q(x^N;t)$ в методі НСО [10, 11] знаходиться за Гібсом з екстремуму функціоналу ентропії при фіксованих значеннях середніх $\langle\hat{P}_n\rangle^t$ та умові нормування $\int\varrho_q(x^N;t)d\Gamma_N = 1$. У цьому випадку квазірівноважна функція розподілу має наступний вигляд

$$\varrho_q(x^N;t) = exp\Big\{-\Phi(t) - \sum_n F_n(t)\hat{P}_n\Big\}, \tag{2.7}$$

$$\Phi(t) = ln\int exp\Big\{-\sum_n F_n(t)\hat{P}_n\Big\}d\Gamma_N \tag{2.8}$$

— функціонал Масьє-Планка, де $F_n(t)$ — множники Лагранжа, що визначаються з умов самоузгодження:

$$\langle\hat{P}_n\rangle^t = \langle\hat{P}_n\rangle_q^t, \tag{2.9}$$

$\langle\ldots\rangle_q^t = \int(\ldots)\varrho_q(x^N;t)d\Gamma_N$. Для опису гідродинамічного стану простої рідини як близького, так і далекого від стану рівноваги параметрами скороченого опису є середні значення густин числа частинок

$\langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^t$, імпульсу $\langle\hat{\vec{\jmath}}(\vec{r})\rangle^t$ та повної енергії $\langle\hat{\varepsilon}(\vec{r})\rangle^t$. При фіксованих значеннях цих параметрів і умові нормування $\varrho_q(x^N;t)$ із екстремуму функціоналу ентропії [10,11] отримаємо вираз для $\varrho_q(x^N;t)$ у вигляді:

$$\varrho_q(x^N;t) = exp\Big\{-\Phi(t) - \int d\vec{r}\beta(\vec{r};t)\left(\hat{\varepsilon}'(\vec{r}) - \mu(\vec{r};t)\hat{n}(\vec{r})\right)\Big\}, \qquad (2.10)$$

де

$$\Phi(t) = ln\int d\Gamma_N exp\Big\{-\int d\vec{r}\beta(\vec{r};t)\left(\hat{\varepsilon}'(\vec{r}) - \mu(\vec{r};t)\hat{n}(\vec{r})\right)\Big\}, \qquad (2.11)$$

множники Лагранжа $\beta(\vec{r};t)$ та $\mu(\vec{r};t)$ знаходяться з умов самоузгодження:

$$\langle\hat{\varepsilon}'(\vec{r})\rangle^t = \langle\hat{\varepsilon}'(\vec{r})\rangle^t_q, \qquad (2.12)$$

$$\langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^t = \langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^t_q, \qquad (2.13)$$

а їх фізичний зміст визначається з нерівноважних термодинамічних співвідношень [11]:

$$\frac{\delta S(t)}{\delta\langle\hat{\varepsilon}'(\vec{r})\rangle^t_q} = \beta(\vec{r};t), \qquad \frac{\delta S(t)}{\delta\langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^t_q} = -\beta(\vec{r};t)\mu(\vec{r};t), \qquad (2.14)$$

$$\frac{\delta\Phi(t)}{\delta\beta(\vec{r};t)} = \langle\hat{\varepsilon}'(\vec{r})\rangle^t_q, \qquad \frac{\delta\Phi(t)}{\delta\beta(\vec{r};t)\mu(\vec{r};t)} = -\langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^t_q. \qquad (2.15)$$

З врахуванням умов самоузгодження (2.12), (2.13) випливає, що $\beta(\vec{r};t)$ — обернена нерівноважна локальна температура, $\mu(\vec{r};t)$ — нерівноважний локальний хімічний потенціал атомів простої рідини. $S(t)$ — нерівноважна ентропія гідродинамічного стану системи визначена за Гібсом:

$$S(t) = -\langle\ln\varrho_q(x^N;t)\rangle^t_q$$

$$= \Phi(t) + \int d\vec{r}\beta(\vec{r};t)\langle\hat{\varepsilon}'(\vec{r})\rangle^t_q - \int d\vec{r}\beta(\vec{r};t)\mu(\vec{r};t)\langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^t_q,$$

або з врахуванням умов самоузгодження (2.12), (2.13):

$$S(t) = \Phi(t) + \int d\vec{r}\beta(\vec{r};t)\langle\hat{\varepsilon}'(\vec{r})\rangle^t - \int d\vec{r}\beta(\vec{r};t)\mu(\vec{r};t)\langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^t. \qquad (2.16)$$

$$\hat{\varepsilon}'(\vec{r}) = \hat{\varepsilon}(\vec{r}) - \vec{v}(\vec{r};t)\hat{\vec{\jmath}}(\vec{r}) + \frac{m}{2}v^2(\vec{r};t)\hat{n}(\vec{r}) \qquad (2.17)$$

— локальне значення густини повної енергії у супроводжуючій системі відліку, що рухається з середньою масовою швидкістю $\vec{v}(\vec{r};t)$ руху рідини.

Враховуючи явну структуру квазірівноважної функції розподілу $\varrho_q(x^N;t)$ (2.10), нерівноважну функцію розподілу згідно рівняння (2.2), після розкриття дії операторів iL_N, $(1-P_q(t))$ на $\varrho_q(x^N;t)$, представимо у вигляді:

$$\varrho(x^N;t) = \varrho_q(x^N;t) + \int d\vec{r}\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}T_q(t,t') \qquad (2.18)$$

$$\times\left(\hat{I}_\varepsilon(\vec{r};t')\beta(\vec{r};t') - \hat{\vec{I}}_j(\vec{r};t')\beta(\vec{r};t')\vec{v}(\vec{r};t')\right)\varrho_q(x^N;t')dt',$$

де

$$\hat{I}_\varepsilon(\vec{r};t') = (1-P(t))iL_N\hat{\varepsilon}(\vec{r}), \qquad (2.19)$$

$$\hat{\vec{I}}_j(\vec{r};t') = (1-P(t))iL_N\hat{\vec{\jmath}}(\vec{r}), \qquad (2.20)$$

— узагальнені потоки з врахуванням узагальненого проектування Морі $P(t)$. $P(t)$ діє на динамічні змінні за правилом:

$$P(t)\hat{A} = \langle\hat{A}\rangle^t_q + \int d\vec{r}\frac{\delta\langle\hat{A}\rangle^t_q}{\delta\langle\hat{\varepsilon}(\vec{r})\rangle^t_q}\left(\hat{\varepsilon}(\vec{r}) - \langle\hat{\varepsilon}(\vec{r})\rangle^t\right)$$

$$+\int d\vec{r}\frac{\delta\langle\hat{A}\rangle^t_q}{\delta\langle\hat{\vec{\jmath}}(\vec{r})\rangle^t_q}\left(\hat{\vec{\jmath}}(\vec{r}) - \langle\hat{\vec{\jmath}}(\vec{r})\rangle^t\right) + \int d\vec{r}\frac{\delta\langle\hat{A}\rangle^t_q}{\delta\langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^t_q}\left(\hat{n}(\vec{r}) - \langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^t\right) \qquad (2.21)$$

з властивостями:

$$P(t)\hat{n}(\vec{r}) = \hat{n}(\vec{r}), \qquad P(t)\hat{\vec{\jmath}}(\vec{r}) = \hat{\vec{\jmath}}(\vec{r}),$$

$$P(t)\hat{\varepsilon}(\vec{r}) = \hat{\varepsilon}(\vec{r}), \qquad (2.22)$$

$$P(t)P(t') = P(t), \qquad P(t)(1-P(t)) = 0.$$

У (2.17) враховано те, що $(1-P(t))iL_N\hat{n}(\vec{r}) = 0$. За структурою (2.18) нерівноважна функція розподілу є функціоналом вибраного набору динамічних змінних $\hat{n}(\vec{r})$, $\hat{\vec{\jmath}}(\vec{r})$, $\hat{\varepsilon}(\vec{r})$ та їх узагальнених потоків $\hat{I}_\varepsilon(\vec{r};t)$ (2.19), $\hat{\vec{I}}_j(\vec{r};t)$ (2.20), де $iL_N\hat{\varepsilon}(\vec{r}) = -\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\cdot\hat{\vec{\jmath}}_\varepsilon(\vec{r})$, $iL_N\hat{\vec{\jmath}}(\vec{r}) = -\frac{\partial}{\partial\vec{r}}:\overleftrightarrow{T}(\vec{r})$, $\hat{\vec{\jmath}}_\varepsilon(\vec{r})$ — густина потоку повної енергії, $\overleftrightarrow{T}(\vec{r})$ — густина тензора в'язких напружень для простої рідини.

За допомогою нерівноважної функції розподілу (2.18) для параметрів скороченого опису отримуються узагальнені рівняння гідродинаміки:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{n}(\vec{r})\rangle^t = \langle\dot{\hat{n}}(\vec{r})\rangle^t = -\frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\cdot\langle\hat{\vec{\jmath}}(\vec{r})\rangle^t, \qquad (2.23)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{\vec{\jmath}}(\vec{r})\rangle^t = \langle\dot{\hat{\vec{\jmath}}}(\vec{r})\rangle^t \qquad (2.24)$$

$$-\int d\vec{r}'\int_{-\infty}^{t}e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{jj}(\vec{r},\vec{r}';t,t')\beta(\vec{r}';t')\vec{v}(\vec{r}';t')dt'$$

$$+\int d\vec{r}'\int_{-\infty}^{t}e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{j\varepsilon}(\vec{r},\vec{r}';t,t')\beta(\vec{r}';t')dt',$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{\varepsilon}(\vec{r})\rangle^{t}=\langle\dot{\hat{\varepsilon}}(\vec{r})\rangle^{t} \quad (2.25)$$

$$-\int d\vec{r}'\int_{-\infty}^{t}e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{\varepsilon j}(\vec{r},\vec{r}';t,t')\beta(\vec{r}';t')\vec{v}(\vec{r}';t')dt'$$

$$+\int d\vec{r}'\int_{-\infty}^{t}e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{\varepsilon\varepsilon}(\vec{r},\vec{r}';t,t')\beta(\vec{r}';t')dt',$$

де

$$\begin{aligned}\varphi_{jj}(\vec{r},\vec{r}';t,t')&=\langle\hat{\vec{I}}_{j}(\vec{r};t)T_{q}(t,t')\hat{\vec{I}}_{j}(\vec{r}';t')\rangle_{q}^{t},\\ \varphi_{j\varepsilon}(\vec{r},\vec{r}';t,t')&=\langle\hat{\vec{I}}_{j}(\vec{r};t)T_{q}(t,t')\hat{I}_{\varepsilon}(\vec{r}';t')\rangle_{q}^{t},\\ \varphi_{\varepsilon j}(\vec{r},\vec{r}';t,t')&=\langle\hat{I}_{\varepsilon}(\vec{r};t)T_{q}(t,t')\hat{\vec{I}}_{j}(\vec{r}';t')\rangle_{q}^{t},\\ \varphi_{\varepsilon\varepsilon}(\vec{r},\vec{r}';t,t')&=\langle\hat{I}_{\varepsilon}(\vec{r};t)T_{q}(t,t')\hat{I}_{\varepsilon}(\vec{r}';t')\rangle_{q}^{t}\end{aligned} \quad (2.26)$$

— узагальнені ядра переносу, що описують немарківські нерівноважні процеси переносу імпульсу та енергії і зв'язані з узагальненими коефіцієнтами переносу в'язкості, теплопровідності та перехресними коефіцієнтами переносу, зумовленими динамічними кореляціями між в'язкими та теплопровідними процесами. (2.23)-(2.25) — незамкнута система рівнянь нелінійної гідродинаміки, у якій нерівноважні значення термодинамічних параметрів $\beta(\vec{r};t)$, $\vec{v}(\vec{r};t)$, $\mu(\vec{r};t)$ визначаються за допомогою умов самоузгодження (2.12), (2.13). Для слабо нерівноважних гідродинамічних процесів система рівнянь (2.23)-(2.25) значно спрощується і стає замкнутою.

3. Узагальнені рівняння гідродинаміки для слабо нерівноважних процесів

У випадку слабо нерівноважних систем, коли значення нерівноважних термодинамічних параметрів $F_n(t)=\{\beta(\vec{r};t),\vec{v}(\vec{r};t),\mu(\vec{r};t)\}$ мало відрізняються від своїх рівноважних значень $F_n(0)=\{\beta,\mu\}$, в лінійному наближенні за $\delta F_n(t)=F_n(t)-F_n(0)$, виключаючи $\delta F_n(t)$

за допомогою умов самоузгодження (2.9) ((2.12), (2.13)), для квазірівноважної функції розподілу (2.7) будемо мати

$$\varrho_q(x^N;t)=\varrho_0(x^N)\left(1+\sum_{n,m}\delta\hat{P}_n\left(\hat{P}|\hat{P}\right)^{-1}_{nm}\langle\delta\hat{P}_m\rangle^t\right), \quad (3.1)$$

де $\varrho_0(x^N)=\exp\{-\Phi(0)-\sum_n F_n(0)\hat{P}_n\}$ — рівноважна функція розподілу з параметрами $F_n(0)$, $\Phi(0)=\ln\int d\Gamma_N\exp\{-\sum_n F_n(0)\hat{P}_n\}$. $(\hat{P}|\hat{P})^{-1}_{nm}$ — елементи матриці $(\hat{P}|\hat{P})^{-1}$, що є оберненою до матриці $(\hat{P}|\hat{P})$, елементами якої є статичні кореляційні функції:

$$\langle\delta\hat{P}_n\delta\hat{P}_m\rangle_0=\int d\Gamma_N\delta\hat{P}_n\delta\hat{P}_m\varrho_0(x^N). \quad (3.2)$$

У випадку гідродинамічних змінних (3.1) має наступний вигляд:

$$\begin{aligned}\varrho_q(x^N;t)=\varrho_0(x^N)\Big(1&+\sum_{\vec{k}}\langle\hat{n}_{\vec{k}}\rangle^t\langle\hat{n}_{\vec{k}}\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}\hat{n}_{-\vec{k}}\\ &+\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\rangle^t\langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}+\langle\hat{h}_{\vec{k}}\rangle^t\langle\hat{h}_{\vec{k}}\hat{h}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}\hat{h}_{-\vec{k}}\Big),\end{aligned} \quad (3.3)$$

де $\hat{n}_{\vec{k}}$, $\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}$ — Фур'є-компоненти відповідних гідродинамічних змінних $\hat{n}(\vec{r})$, $\hat{\vec{\jmath}}(\vec{r})$:

$$\hat{n}_{\vec{k}}=\sum_{j=1}^{N}e^{-i\vec{k}\vec{r}_j},\qquad \hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}=\sum_{j=1}^{N}\vec{p}_je^{-i\vec{k}\vec{r}_j}, \quad (3.4)$$

$\vec{k}$ — хвильовий вектор, $\hat{h}_{\vec{k}}$ — Фур'є-компонента густини узагальненої ентальпії

$$\hat{h}_{\vec{k}}=\hat{\varepsilon}_{\vec{k}}-\langle\hat{\varepsilon}_{\vec{k}}\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0\langle\hat{n}_{\vec{k}}\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}\hat{n}_{\vec{k}}, \quad (3.5)$$

Підставляючи (3.1) у (2.2), після розкриття дії операторів iL_N, $P_q(t)$ на $\varrho_q(x^N;t)$, для нерівноважної функції розподілу $\varrho(x^N;t)$ отримаємо:

$$\begin{aligned}\varrho(x^N;t)=\varrho_0(x^N)\Big(1&+\sum_{n,m}\delta\hat{P}_n(\hat{P}|\hat{P})^{-1}_{nm}\langle\delta\hat{P}_m\rangle^t\\ &-\sum_{n,m}\int_{-\infty}^{t}e^{\varepsilon(t'-t)}T_0^H(t,t')\hat{I}_n(\hat{P}|\hat{P})^{-1}_{nm}\langle\delta\hat{P}_m\rangle^{t'}\Big),\end{aligned} \quad (3.6)$$

де

$$\hat{I}_n=(1-P)iL_N\hat{P}_n \quad (3.7)$$

— узагальнені потоки, P — проекційний оператор Морі [11,13,14,17], що побудований на змінних $\hat{P}_n = \{\hat{n}_{\vec{k}}, \hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}, \hat{h}_{\vec{k}}\}$ і має таку структуру:

$$P\ldots = \sum_{n,m} \langle \ldots \delta\hat{P}_n\rangle (\hat{P}|\hat{P})^{-1}_{nm} \delta\hat{P}_m \tag{3.8}$$

з властивостями $PP = P$, $P(1-P) = 0$, $P\hat{P}_m = \hat{P}_m$. Оператор еволюції у цьому наближенні має наступний вигляд:

$$T_0^H(t,t') = exp\{-(t-t')(1-P)iL_N\}. \tag{3.9}$$

За внутрішньою структурою нерівноважний статистичний оператор (3.6) є функцією динамічних змінних $\hat{P}_l$ та узагальнених потоків $\hat{I}_l = (1-P)iL_N\hat{P}_l$ і для набору основних гідродинамічних змінних $\hat{n}_{\vec{k}}, \hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}, \hat{h}_{\vec{k}}$ $\varrho(x^N;t)$ має вигляд

$$\begin{aligned} \varrho(x^N;t) = \varrho^H(x^N;t) = \varrho_0(x^N)\Big(1 + \sum_{\vec{k}} \langle\hat{n}_{\vec{k}}\rangle^t \langle\hat{n}_{\vec{k}}\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1} \hat{n}_{-\vec{k}} \\ + \langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\rangle^t \langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1} \hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}} + \langle\hat{h}_{\vec{k}}\rangle^t \langle\hat{h}_{\vec{k}}\hat{h}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1} \hat{h}_{-\vec{k}}\Big) \\ - \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} T_0^H(t,t') \\ \times\Big(\hat{\vec{I}}_j(-\vec{k}) \langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1} \langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\rangle^t + \hat{I}_h(-\vec{k}) \langle\hat{h}_{\vec{k}}\hat{h}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1} \langle\hat{h}_{\vec{k}}\rangle^t\Big), \end{aligned} \tag{3.10}$$

де

$$\hat{\vec{I}}_j = (1-P)iL_N\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}, \tag{3.11}$$

$$\hat{I}_h = (1-P)iL_N\hat{h}_{\vec{k}} \tag{3.12}$$

— узагальнені потоки густини імпульсу та густини ентальпії. У наближенні (3.10) рівняння узагальненої гідродинаміки (2.23)-(2.25) переходять у відому систему рівнянь молекулярної гідродинаміки [13, 18, 19], яку представимо у матричному вигляді:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\tilde{a}_{\vec{k}}\rangle^t - i\tilde{\Omega}^H(\vec{k})\langle\tilde{a}_{\vec{k}}\rangle^t + \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} \tilde{\varphi}^H(\vec{k},t,t')\langle\tilde{a}_{\vec{k}}\rangle^{t'} dt' = 0, \tag{3.13}$$

де

$$\tilde{a}_{\vec{k}} = col(\hat{n}_{\vec{k}}, \hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}, \hat{h}_{\vec{k}}) \tag{3.14}$$

— вектор стовпчик;

$$\begin{aligned} i\tilde{\Omega}^H(\vec{k}) &= \langle iL_N\tilde{a}_{\vec{k}} \cdot \tilde{a}^{(+)}_{-\vec{k}}\rangle_0 \langle\tilde{a}_{\vec{k}} \cdot \tilde{a}^{(+)}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & i\Omega_{nj}(\vec{k}) & 0 \\ i\Omega_{jn}(\vec{k}) & 0 & i\Omega_{jh}(\vec{k}) \\ 0 & i\Omega_{hj}(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{3.15}$$

— частотна матриця з елементами

$$i\Omega_{nj}(\vec{k}) = \langle iL_N\hat{n}_{\vec{k}}\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0 \langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}} \cdot \hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}, \tag{3.16}$$

$$i\Omega_{jn}(\vec{k}) = \langle iL_N\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0 \langle\hat{n}_{\vec{k}}\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}, \tag{3.17}$$

$$i\Omega_{hj}(\vec{k}) = \langle iL_N\hat{h}_{\vec{k}}\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0 \langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}} \cdot \hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}, \tag{3.18}$$

$$i\Omega_{jh}(\vec{k}) = \langle iL_N\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\hat{h}_{-\vec{k}}\rangle_0 \langle\hat{h}_{\vec{k}}\hat{h}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}, \tag{3.19}$$

$\tilde{a}^{(+)}_{\vec{k}} = (\hat{n}_{\vec{k}}, \hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}, \hat{h}_{\vec{k}})$ — вектор-рядок, $(\tilde{a}_{\vec{k}} \cdot \tilde{a}^{(+)}_{-\vec{k}})$ — скалярний добуток векторів;

$$\tilde{\varphi}^H(\vec{k};t,t') = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varphi^H_{jj} & \varphi^H_{jh} \\ 0 & \varphi^H_{hj} & \varphi^H_{hh} \end{pmatrix}_{(\vec{k};t,t')}, \tag{3.20}$$

— матриця функцій пам'яті:

$$\varphi^H_{jj}(\vec{k};t') = \langle(1-P^H)iL_N\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}T_0(t,t')(1-P^H)iL_N\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0 \langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}, \tag{3.21}$$

$$\varphi^H_{jh}(\vec{k};t') = \langle(1-P^H)iL_N\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}T_0(t,t')(1-P^H)iL_N\hat{h}_{-\vec{k}}\rangle_0 \langle\hat{h}_{\vec{k}}\hat{h}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}, \tag{3.22}$$

$$\varphi^H_{hj}(\vec{k};t') = \langle(1-P^H)iL_N\hat{h}_{\vec{k}}T_0(t,t')(1-P^H)iL_N\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0 \langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}, \tag{3.23}$$

$$\varphi^H_{hh}(\vec{k};t') = \langle(1-P^H)iL_N\hat{h}_{\vec{k}}T_0(t,t')(1-P^H)iL_N\hat{h}_{-\vec{k}}\rangle_0 \langle\hat{h}_{\vec{k}}\hat{h}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}, \tag{3.24}$$

у яких "гідродинамічний"проекційний оператор P^H проектує динамічні змінні на простір ортогональних гідродинамічних змінних $\hat{n}_{\vec{k}}, \hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}, \hat{h}_{\vec{k}}$ і має таку структуру:

$$\begin{aligned} P^H\ldots = \sum_{\vec{k}}\Big(\langle\ldots\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0 \langle\hat{n}_{\vec{k}}\hat{n}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}\hat{n}_{\vec{k}} \\ +\langle\ldots\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0 \langle\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}}\hat{\vec{\jmath}}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}\hat{\vec{\jmath}}_{\vec{k}} + \langle\ldots\hat{h}_{-\vec{k}}\rangle_0 \langle\hat{h}_{\vec{k}}\hat{h}_{-\vec{k}}\rangle_0^{-1}\hat{h}_{\vec{k}}\Big). \end{aligned} \tag{3.25}$$

P^H задовольняє властивостям $(1-P^H)P^H=0$, $P^H\hat{n}_{\vec{k}}=\hat{n}_{\vec{k}}$, $P^H\hat{\vec{j}}_{\vec{k}}=\hat{\vec{j}}_{\vec{k}}$, $P^H\hat{h}_{\vec{k}}=\hat{h}_{\vec{k}}$. Гідродинамічні змінні $\hat{n}_{\vec{k}},\hat{\vec{j}}_{\vec{k}},\hat{h}_{\vec{k}}$ є ортогональними у розумінні рівностей $\langle\hat{n}_{\vec{k}}\hat{\vec{j}}_{-\vec{k}}\rangle_0=\langle\hat{n}_{\vec{k}}\hat{h}_{-\vec{k}}\rangle_0=\langle\hat{\vec{j}}_{\vec{k}}\hat{h}_{-\vec{k}}\rangle_0=0$.

Функції пам'яті (3.21)-(3.24) визначають узагальнені коефіцієнти в'язкості, теплопровідності та перехресні коефіцієнти, що описують в'язко-теплові динамічні кореляції.

4. Релаксація до стану молекулярної гідродинаміки

Розгляд слабо нерівноважних процесів, які характеризуються малими відхиленнями нерівноважних термодинамічних параметрів від їх рівноважних значень, приводить до системи рівнянь переносу молекулярної гідродинаміки. Інтенсивні дослідження такої системи рівнянь дали можливість обчислити колективні моди, часові кореляційні функції, узагальнені коефіцієнти переносу для моделі Леннарда-Джонса простих рідин [15,16]. Зважаючи на той факт, що стану молекулярної гідродинаміки відповідає свій нерівноважний статистичний оператор (3.6) чи (3.10) в явному вигляді для набору гідродинамічних змінних, постає питання про вихід за межі молекулярної гідродинаміки. В даному розділі ми спробуємо дослідити його, розглянувши релаксацію нерівноважного стану системи і скориставшись методом НСО.

Для того, щоб отримати узагальнені релаксаційні рівняння такого процесу, необхідно отримати нерівноважний статистичний оператор як функціонал від середніх значень динамічних змінних. Модифіковане рівняння Ліувіля містить джерело, яке порушує симетрію рівняння відносно часу і здійснює відбір необхідних запізнюючих розв'язків

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+iL_N\right)\varrho(t)=-\varepsilon\left(\varrho(t)-\varrho^H(t)\right), \tag{4.1}$$

$\varepsilon^{-1}=\langle\Gamma\rangle$ пов'язане із часом життя системи у певному нерівноважному стані, який описується відповідним набором параметрів скороченого опису. Слідуючи звичній схемі методу НСО Зубарєва, статистичний оператор системи представимо у вигляді суми

$$\varrho(t)=\varrho^H(t)+\Delta\varrho(t). \tag{4.2}$$

Тоді підстановка (4.2) в (4.1) приводить до рівняння для $\Delta\varrho(t)$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+iL_N+\varepsilon\right)\Delta\varrho(t)=-\left(\frac{\partial}{\partial t}+iL_N\right)\varrho^H(t). \tag{4.3}$$

При виключенні з рівняння похідної за часом $\partial\varrho^H(t)/\partial t$ слід враховувати не тільки залежність $\varrho^H(t)$ від часу через середні значення динамічних змінних, але і її явну залежність від часу [20]

$$\frac{\partial\varrho^H(t)}{\partial t}=\sum_l\frac{\partial\varrho^H(t)}{\partial\langle\hat{a}_{l,\vec{k}}\rangle^t}\frac{d\langle\hat{a}_{l,\vec{k}}\rangle^t}{dt}+\left(\frac{\partial\varrho^H(t)}{\partial t}\right)_{expl}. \tag{4.4}$$

$$\frac{d\langle\hat{a}_{l,\vec{k}}\rangle^t}{dt}=Tr\Big\{\frac{d\hat{a}_{l,\vec{k}}}{dt}\varrho(t)\Big\}=-Tr\Big\{\hat{a}_{l,\vec{k}}iL_N\varrho(t)\Big\},$$

де $Tr\{\ldots\varrho(t)\}=\int\ldots\varrho(t)d\Gamma_N$.
Отримаємо

$$\frac{\partial\varrho^H(t)}{\partial t}=-P_R^H(t)iL_N\varrho(t)+\left(\frac{\partial\varrho^H(t)}{\partial t}\right)_{expl}, \tag{4.5}$$

де

$$P_R^H(t)\varrho'(t)=\sum_l\frac{\partial\varrho^H(t)}{\partial\langle\hat{a}_{l,\vec{k}}\rangle^t}Tr\Big\{\hat{a}_{l,\vec{k}}\varrho'(t)\Big\} \tag{4.6}$$

— проекційний оператор Робертсона,

$$P_R^H(t)\varrho'(t)=\varrho_0\sum_{\vec{k}}\sum_{l,m}\left(\hat{a}_{l,-\vec{k}}-\hat{I}_l(-\vec{k};t)\right)\Phi^{-1}_{l,m}(\vec{k})Tr\Big\{\hat{a}_{m,\vec{k}}\varrho'(t)\Big\}. \tag{4.7}$$

Продиференціювавши $\varrho^H(t)$ за часом

$$\left(\frac{\partial\varrho^H(t)}{\partial t}\right)_{expl}=-\varrho_0\sum_{\vec{k}}\sum_{l,m}\hat{I}_l(-\vec{k})\Phi^{-1}_{l,m}(\vec{k})\langle\hat{a}_{m,\vec{k}}\rangle^t$$

$$+\varepsilon\varrho_0\sum_{\vec{k}}\sum_{l,m}\int_{-\infty}^{t}e^{\varepsilon(t'-t)}T_0(t,t')\hat{I}_l(-\vec{k})\Phi^{-1}_{lm}(\vec{k})\langle\hat{a}_{m,\vec{k}}\rangle^{t'}dt' \tag{4.8}$$

$$+(1-P^H)iL_N\varrho_0\sum_{\vec{k}}\sum_{l,m}\int_{-\infty}^{t}e^{\varepsilon(t'-t)}T_0(t,t')\hat{I}_l(-\vec{k})\Phi^{-1}_{lm}(\vec{k})\langle\hat{a}_{m,\vec{k}}\rangle^{t'}dt',$$

бачимо, що, знехтувавши доданками у другому рядку формули (4.8), можемо отримати просте представлення

$$\left(\frac{\partial\varrho^H(t)}{\partial t}\right)_{expl}=-(1-P^H)iL_N\varrho^H(t). \tag{4.9}$$

У свою чергу, дію проекційного оператора Робертсона на $iL_N\varrho^H(t)$ можна представити у вигляді

$$P_R^H(t)iL_N\varrho^H(t) = \bar{P}^H(t)iL_N\varrho^H(t), \tag{4.10}$$

де $\bar{P}^H(t)$ — новий „проекційний“оператор, що складається з двох частин

$$\bar{P}^H(t)\ldots = \sum_{\vec{k}}\sum_{lm}\langle\ldots\hat{a}_{l,\vec{k}}\rangle_0\Phi_{lm}^{-1}(\vec{k})\left(\hat{a}_{m,-\vec{k}} - \hat{I}_m(-\vec{k};t)\right). \tag{4.11}$$

$$\bar{P}^H(t) = P^H - P'(t), \tag{4.12}$$

де $P'(t)\ldots = \sum_{\vec{k}}\sum_{lm}\langle\ldots\hat{a}_{l,\vec{k}}\rangle_0\Phi_{lm}^{-1}\hat{I}_m(-\vec{k};t)$, і діє на гідродинамічні змінні.

Підставивши отримані результати у (4.3) отримаємо остаточний вигляд рівняння для $\Delta\varrho(t)$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + [1 - P_R^H(t)]iL_N + \varepsilon\right)\Delta\varrho(t) = -P'(t)iL_N\varrho^H(t). \tag{4.13}$$

Проінтегрувавши його формально отримаємо розв'язок у вигляді

$$\Delta\varrho(t) = -\int_{-\infty}^{t} dt' e^{\varepsilon(t'-t)}T_R^H(t,t')P'(t')iL_N\varrho^H(t'), \tag{4.14}$$

де оператор еволюції з врахуванням проектування Робертсона задається виразом

$$T_R^H(t,t') = exp_+\left(-\int_{t'}^{t} d\tau[1 - P_R^H(\tau)]iL_N\right). \tag{4.15}$$

Тепер обчислимо дію оператора $P'(t')$ на $iL_N\varrho^H(t')$

$$P'(t')iL_N\varrho^H(t) = -\varrho_0\sum_{\vec{k}}\sum_{l,m,n}\hat{I}_l(-\vec{k};t')\Phi_{lm}^{-1}(\vec{k})\Big\{i\Omega_{mn}(\vec{k})\langle\hat{a}_{n,\vec{k}}\rangle^{t'}$$

$$-\int_{-\infty}^{t'} dt'' e^{\varepsilon(t''-t')}\varphi_{mn}^H(\vec{k};t',t'')\langle\hat{a}_{n,\vec{k}}\rangle^{t''}dt''\Big\}. \tag{4.16}$$

Отже, нерівноважний статистичний оператор (4.14), а отже і $\varrho(t)$, з врахуванням (4.16) є функціоналом від спостережуваних і може описувати релаксацію нерівноважного стану системи до стану молекулярної гідродинаміки. Використовуючи його, можемо побудувати

відповідні релаксаційні рівняння. Для цього скористаємося співвідношенням

$$\frac{d\langle\hat{a}_{m,\vec{k}}\rangle^t}{dt} = Tr\Big\{\frac{d\hat{a}_{m,\vec{k}}}{dt}\varrho(t)\Big\}. \tag{4.17}$$

І оскільки, доданок $Tr\Big\{(P_H d\hat{a}_{m,\vec{k}}/dt)\Delta\varrho(t)\Big\}$ вкладу у рівняння не дає, можемо записати

$$\frac{d\langle\hat{a}_{m,\vec{k}}\rangle^t}{dt} = \Big\langle\frac{d\hat{a}_{m,\vec{k}}}{dt}\Big\rangle_H^t + Tr\{\hat{I}_m(\vec{k};t)\Delta\varrho(t)\Big\}. \tag{4.18}$$

Тепер, використовуючи дане співвідношення, систему рівнянь переносу представимо у загальному вигляді

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{a}_{l,\vec{k}}\rangle^t = \langle\dot{\hat{a}}_{l,\vec{k}}\rangle_H^t + \sum_{m,n}\int_{-\infty}^{t} dt' e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{lm}^{RH}(\vec{k};t,t')$$

$$\times\Big\{i\Omega_{mn}(\vec{k})\langle\hat{a}_{n,\vec{k}}\rangle^{t'} - \int_{-\infty}^{t'} dt'' e^{\varepsilon(t''-t')}\varphi_{mn}^H(\vec{k};t',t'')\langle\hat{a}_{n,\vec{k}}\rangle^{t''}\Big\}. \tag{4.19}$$

У цих рівняннях вклад молекулярної гідродинаміки $\langle\dot{\hat{a}}_{l,\vec{k}}\rangle_H^t$ є добре відомим, тому:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{a}_{l,\vec{k}}\rangle^t = \sum_m i\Omega_{lm}(\vec{k})\langle\hat{a}_{m,\vec{k}}\rangle^t$$

$$-\sum_m\int_{-\infty}^{t} dt' e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{lm}^H(\vec{k};t,t')\langle\hat{a}_{m,\vec{k}}\rangle^{t'} + \sum_{m,n}\int_{-\infty}^{t} dt' e^{\varepsilon(t'-t)}\varphi_{lm}^{RH}(\vec{k};t,t')$$

$$\times\Big\{i\Omega_{mn}(\vec{k})\langle\hat{a}_{n,\vec{k}}\rangle^{t'} - \int_{-\infty}^{t'} dt'' e^{\varepsilon(t''-t')}\varphi_{mn}^H(\vec{k};t',t'')\langle\hat{a}_{n,\vec{k}}\rangle^{t''}\Big\}. \tag{4.20}$$

Отримана система рівнянь є складною за своєю структурою, оскільки містить другий порядок за функціями пам'яті. Цікавим також є те, що еволюція параметрів скороченого опису, окрім іншого, визначається вкладами молекулярної гідродинаміки як у реальний момент часу, так і в попередні моменти часу з історії системи. В цих рівняннях ядра переносу $\varphi_{lm}^H(\vec{k};t,t')$ визначаються виразами (3.21)-(3.24), а нові ядра переносу $\varphi_{lm}^{RH}(\vec{k};t,t')$ мають подібну структуру

$$\varphi_{lm}^{RH}(\vec{k};t,t') = \langle\hat{I}_l(\vec{k})T_R^H(t,t')\hat{I}_m(-\vec{k};t')\rangle_0\Phi_{mm}^{-1}(\vec{k}), \tag{4.21}$$

але у них еволюція задається оператором $T_R^H(t,t')$ (4.15) з врахуванням проектування Робертсона (4.7):

$$\varphi_{lm}^{RH}(\vec{k};t,t') = \langle(1 - P^H)iL_N\hat{a}_{l,\vec{k}}exp_+\Big\{-\int_{t'}^{t}(1 - P_R^H(\tau))iL_N d\tau\Big\}$$

$$\times \int_{-\infty}^{t'} e^{\varepsilon(t''-t')} T_0^H(t',t'')(1-P^H) iL_N \hat{a}_{m,-\vec{k}} dt'' \rangle_0 \Phi^{-1}_{mm}(\vec{k}). \qquad (4.22)$$

Оскільки функції пам'яті (4.22) мають складну структуру, важливо правильно виконати граничний перехід $t \to \infty$, $k \to 0$. Тоді систему рівнянь (4.20) можна буде використати для дослідження колективних збуджень та часових кореляційних функцій системи, нерівноважний стан якої релаксує до стану молекулярної гідродинаміки, що буде зроблено у наступних роботах.

Література

1. Luzzi R., Vasconcellos A.R. and Ramos J.G. *Statistical foundations of irreversible thermodynamics.* Teubner-Bertelsmann Springer, Stutgart, 2000.
2. Ryazanov V.V. *Nonequilibrium statistical operator for systems with finite lifetime.* // Low Temp. Phys., V.33, 2007, 1049.
3. Luzzi R., Vasconcellos A.R. and Ramos J.G. *A nonequilibrium statistical ensemble formalism. MaxEnt-NESOM: basic concepts, construction, application, open questions and criticisms.* // Intern. J. Modern Phys. B, V.14, N28, 2000, 3189.
4. Ryazanov V.V. *Lifetime of system and nonequilibrium statistical operator method.* // Fortschr. Phys., V.49, N8-9, 2001, 885.
5. Petrosky T., Ordones G. and Prigogine I. *Space-time formulation of quantum transitions.* // Phys. Rev. A, V.64, 2001, 062101.
6. Ordones G., Petrosky T. and Prigogine I. *Quantum transitions and and dressed unstable states.* // Phys. Rev. A, V.63, 2001, 052106.
7. Luzzi R., Vasconcellos A.R. *On the nonequilibrium statistical operator method.* // Fortschr. Phys., V.38, N11, 1990, 887.
8. Ramos J.G., Vasconcellos A.R. and Luzzi R. *On the thermodynamics of far-from-equilibrium dissipative systems.* // Fortschr. Phys., V.47, N9-10, 1999, 937.
9. V.V. Ryazanov. *Family of nonequilibrium statistical operators and influence of the past on the present.* // Preprint arXiv: 0803.4111v1, 2008.
10. Зубарев Д.Н. *Современные методы статистической теории неравновесных процессов. Итоги науки и техники. Современные проблемы математики.* Т.157, ВИНИТИ, Москва, 1980, 131.
11. Зубарев Д.Н., Морозов В.Г., Рёпке Г., *Статистическая механика неравновесных процессов.* Т. 1, Физматлит, Москва, 2002.
12. Alvarez-Romero J.T., Garsia-Colin L.S. *The foundations of informational sattistical thermodynamics revisited.* // Phys. A 232, 1996, 207.

13. Boon J., Yip S. *Molecular Hydrodynamics.* N.-Y., McGraw-Hill Inc., 1980.
14. Мриглод І.М., Токарчук М.В. *До статистичної гідродинаміки простих рідин. Узагальнені коефіцієнти переносу.* Препринт/АН УРСР, ІФКС-91-6У, Київ, 1991.
15. de Schepper I.M., Cohen E.G.D., Bruin C., van Rijs J.C., Montrooij W., de Graaf L.A. *Hydrodynamic time correlation functions for a Lennard-Jones fluids.* // Phys. Rev. A, V.38, N1, 1988, 271.
16. Mryglod I.M., Omelyan I.P., Tokarchuk M.V. *Generalized collective modes for the Lennard-Jones fluid.* // Mol. Phys., V.84, N2, 1995, 235.
17. Mori H. *Transport, collective motion and brownian motion.* // Progr. Theor. Phys., V.33, N3, 1965, 423.
18. Сергеев М.В.*Обобщенные уравнения переноса в теории необратимых процессов.* // ТМФ, Т.21, N3, 1974, 402.
19. Тищенко С.В.*Построение обобщенной гидродинамики методом статистического оператора.* // ТМФ, Т.26, N1, 1976, 96.
20. Морозов В.Г., *Статистическая механика релаксационных процессов в переменных полях.* // ТМФ, Т.154, N1, 2008, 102.

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN:

- Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences
- ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alrting Services
- INSPEC
- Elsevier Bibliographic Databases (EMBASE, EMNursing, Compendex, GEOBASE, Scopus)
- “Referativnyi Zhurnal”
- “Dzherelo”

CONTACT INFORMATION:
Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +38(032)2760908; Fax: +38(032)2761978
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua   http://www.icmp.lviv.ua