



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-19-03U

І.Р. Юхновський, М.В. Токарчук, П.А. Глушак

МЕТОД КОЛЕКТИВНИХ ЗМІННИХ В ТЕОРІЇ НЕЛІНІЙНИХ
ФЛУКТУАЦІЙ З ВРАХУВАННЯМ КІНЕТИЧНИХ ПРОЦЕСІВ

ЛЬВІВ

УДК: 536.75; 538.931

PACS: 05.20.Dd, 05.40.-a, 05.60.Cd

Метод колективних змінних в теорії нелінійних флуктуацій з врахуванням кінетичних процесів

І.Р. Юхновський, М.В. Токарчук, П.А. Глушак

Анотація. Для узгодженого опису кінетики та гідродинаміки систем взаємодіючих частинок оптимізовано набір параметрів скороченого опису згідно Боголюбову, який включає колективні змінні. При цьому розділені вклади від короткодійчих і далекодійчих взаємодій між частинками. Короткодійчі взаємодії описуються в координатно-імпульсному просторі, а далекодійчі — у просторі колективних змінних. Використовуючи метод нерівноважного статистичного оператора Зубарева отримано систему рівнянь переносу для нерівноважної одночастинкової функції розподілу, середнього значення енергії взаємодії частинок та функції розподілу колективних змінних. Розраховано вищих наближеннях ніж гаусове структурну функцію і гідродинамічні швидкості.

The collective variable method in the theory of nonlinear fluctuations taking into account kinetic processes

I.R. Yukhnovskii, M.V. Tokarchuk, P.A. Hlushak

Abstract. A set of parameters, which includes collective variables, for reduced description in a manner of Bogolyubov is optimized for a consistent description of kinetics and hydrodynamics of interacting particle systems. The contributions from short and long-range interactions were separated. The short-range interactions are described in the coordinate-momentum space, while the long-range ones are described in the space of collective variables. Next, using the Zubarev's non-equilibrium statistical operator method, a system of transport equations for a non-equilibrium one-particle distribution function, an average value of the particle interaction energy and a distribution function of collective variables were obtained. The structural function and the hydrodynamic velocities in approximations higher than Gaussian are calculated.

Подається в Український фізичний журнал

Submitted to Ukrainian Journal of Physics

© Інститут фізики конденсованих систем 2019
Institute for Condensed Matter Physics 2019

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Ігор Рафаїлович Юхновський
Михайло Васильович Токарчук
Петро Андрійович Глушак

МЕТОД КОЛЕКТИВНИХ ЗМІННИХ В ТЕОРІЇ НЕЛІНІЙНИХ
ФЛУКТУАЦІЙ З ВРАХУВАННЯМ КІНЕТИЧНИХ ПРОЦЕСІВ

Роботу отримано 27 листопада 2019 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом теорії м'якої речовини

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

1. Вступ

Дослідження нелінійних кінетичних та гідродинамічних флуктуацій у густих газах, плазмі та рідинах у явищах турбулентності, динаміці фазових переходів, хімічних реакціях, самоорганізаційних процесах залишаються актуальними як на кінетичному, так і гідродинамічному рівнях опису в статистичній теорії нерівноважних процесів [1–30]. Нерівноважні стани таких систем далекі від рівноваги і тому важливими є дослідження, з однієї сторони, процесів встановлення стаціонарних станів із характерними часами життя, з іншої – процесів релаксації до вже відомих нерівноважних станів, зокрема, які описуються в рамках молекулярної гідродинаміки [2, 31–33] у випадку рідин та густих газів. Важливо зазначити, що особливістю досліджень нерівноважних явищ у густих газах, рідинах, густій плазмі (пилова плазма) є узгоджений опис кінетичних та гідродинамічних процесів [34–38] та врахування характерних короткодійчих та далекодіючих взаємодій між частинками систем.

Побудова кінетичних рівнянь з врахуванням нелінійних гідродинамічних флуктуацій [39–42] є важливою проблемою в теорії процесів переносу в густих газах, рідинах. Зокрема, ця проблема виникає при описі низькочастотних аномалій у кінетичних рівняннях та пов'язаних з ними "довгих хвостів" кореляційних функцій [1, 43, 44]. У роботах [34, 45, 46] був запропонований узгоджений опис кінетичних та гідродинамічних процесів у густих газах і рідинах на основі методу нерівноважного статистичного оператора Зубарева [8, 9]. Зокрема, цей підхід був застосований для отримання з ланцюжка рівнянь ББГКІ кінетичного рівняння ревізованої теорії Енскога [46, 47] для системи твердих сфер та кінетичного рівняння Енскога-Ландау для однокомпонентної системи заряджених твердих сфер. У роботі [34] були отримані немарковські рівняння переносу для нерівноважної одночастинкової функції розподілу та нерівноважного значення середньої потенціальної енергії взаємодії частинок. Пізніше [35, 37] ці рівняння використовувались для досліджень часових кореляційних функцій та спектру колективних збуджень для слабо нерівноважних процесів у рідинах. Очевидно, підхід [34, 45, 46] може бути застосований для опису як слабо так і сильно нерівноважних систем.

У той же час для узгодженого опису кінетичних процесів та нелінійних гідродинамічних флуктуацій зручно переформулювати теорію таким чином, щоб отримати набір рівнянь для нерівноважної одночастинкової функції розподілу та функціоналу розподілу гідродинамічних змінних: густин числа частинок, їх імпульсу та енергії.

Ідея такого підходу була сформульована у роботах [48, 49]. Ми розвинули у [50, 51] даний підхід з використанням методу колективних змінних [52] з метою узгодженого опису кінетичних та гідродинамічних процесів, які характеризуються нелінійними флуктуаціями густин числа частинок, їх імпульсів та повної енергії.

У даній роботі на відміну від робіт [50, 51], для опису колективних динамічних процесів у системі як колективні змінні ми вводимо тільки фур'є-компоненту густини числа частинок, оскільки вона зв'язана із густиною імпульсу рівнянням неперервності, а також через неї виражається далекодіюча частина потенціальної енергії взаємодії частинок. При цьому густини кінетичної енергії та короткодіючої частини потенціалу взаємодії частинок описуються в координатно-імпульсному просторі.

У другому розділі отримаємо нерівноважний статистичний оператор нерівноважного стану системи, коли параметрами скороченого опису є нерівноважна одночастинкова функція розподілу частинок, нерівноважне середнє значення густини потенціальної енергії взаємодії і нерівноважна функція розподілу колективних змінних густини числа частинок.

У третьому розділі розглянемо один із способів розрахунку структурної функції розподілу колективних змінних густини числа частинок та їх гідродинамічних швидкостей (вище гаусового наближення), що входять в узагальнене рівняння Фоккера-Планка для нерівноважної функції розподілу колективних змінних. При цьому будуть розділені вклади від короткодіючих і далекодіючих взаємодій між частинками. Це приведе до того, що короткодіючі взаємодії (наприклад, модель твердих сфер) описуватимуться в координатно-імпульсному просторі, а далекодіючі – у просторі колективних змінних. Більше того, короткодіюча складова розглядається як базисна, якій відповідає ланцюжок рівнянь ББГКІ для нерівноважних функцій розподілу, зокрема, у випадку для моделі твердих сфер [36].

2. Нерівноважна функція розподілу в методі нерівноважного статистичного оператора Зубарєва

Для узгодженого опису кінетичних та гідродинамічних флуктуацій у класичних густих газах та рідинах необхідний відбір параметрів скороченого опису одночастинкових і колективних процесів. У якості таких параметрів на відміну від [50, 51] ми виберемо нерівноважну одночастинкову функцію розподілу $f_1(x; t) = \langle \hat{n}_1(x) \rangle^t$, нерівноважне середнє значення енергії взаємодії частинок $H^{int}(\mathbf{r}, t) = \langle \hat{H}^{int}(\mathbf{r}) \rangle^t$

та нерівноважну функцію розподілу колективних змінних $f(\rho; t) = \langle \delta(\hat{\rho} - \rho) \rangle^t$, що відповідають густині числа частинок. Мікроскопічна фазова густина числа частинок та мікроскопічна густина потенціальної енергії взаємодії частинок системи задаються виразами:

$$\hat{n}_1(x) = \sum_{j=1}^N \delta(x - x_j) = \sum_{j=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_j), \quad (2.1)$$

$$\hat{H}^{int}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{j \neq l=1}^N \Phi(|\mathbf{r}_{lj}|) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (2.2)$$

де $x_j = (\mathbf{r}_j, \mathbf{p}_j)$ – координати та імпульси частинок фазового простору, N – повне число частинок системи в об'ємі V . Мікроскопічний фазовий розподіл колективних змінних ρ записується наступним чином:

$$\hat{f}(\rho) = \delta(\hat{\rho} - \rho) = \prod_{\mathbf{k}} \delta(\hat{\rho}_{\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}}), \quad (2.3)$$

де

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}} = \sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} \quad (2.4)$$

– фур'є-компонента густини числа частинок і $\rho_{\mathbf{k}}$ – відповідна колективна змінна. У парному потенціалі взаємодії між частинками $\Phi(|\mathbf{r}_{lj}|) = \Phi(|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j|)$ виділимо короткодіючу $\Phi^{sh}(|\mathbf{r}_{lj}|)$ і далекодіючу $\Phi^{long}(|\mathbf{r}_{lj}|)$ частини:

$$\Phi(|\mathbf{r}_{lj}|) = \Phi^{sh}(|\mathbf{r}_{lj}|) + \Phi^{long}(|\mathbf{r}_{lj}|).$$

Відповідно нерівноважне значення потенціальної енергії взаємодіючих частинок матиме вигляд:

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}^{int}(\mathbf{r}) \rangle^t &= \langle \hat{H}^{sh}(\mathbf{r}) \rangle^t + \frac{1}{2V^2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} \nu(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \times \\ &\times \left(\langle \hat{\rho}_{\mathbf{q}+\mathbf{k}} \hat{\rho}_{-\mathbf{k}} \rangle^t - \langle \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \rangle^t \right), \end{aligned}$$

де $\nu(\mathbf{k})$ – фур'є-компонента далекодіючої частини потенціалу взаємодії частинок. Нерівноважна функція розсіяння частинок $\langle \hat{\rho}_{\mathbf{q}+\mathbf{k}} \hat{\rho}_{-\mathbf{k}} \rangle^t = F(\mathbf{q}, \mathbf{k}; t)$ зв'язана із нерівноважним динамічним структурним фактором $S(\mathbf{q}, \mathbf{k}; \omega)$, який безпосередньо вимірюється в процесах розсіяння нейтронів.

Нерівноважні середні значення $\langle \hat{n}_1(x) \rangle^t$, $\langle \hat{H}^{int}(\mathbf{r}) \rangle^t$ і $\langle \delta(\hat{\rho} - \rho) \rangle^t$ розраховуються з нерівноважною функцією розподілу N -частинок $\varrho(x^N; t)$, що задовольняє рівняння Ліувілля. У відповідності до ідеї скороченого опису нерівноважного стану ця функція є функціоналом:

$$\varrho(x^N; t) = \varrho(\dots, f_1(x; t), \langle \hat{H}^{int}(\mathbf{r}) \rangle^t, f(\rho; t), \dots).$$

Для знаходження нерівноважної функції розподілу $\varrho(x^N; t)$ ми використаємо метод Зубарева [49, 53], у якому загальний розв'язок рівняння Ліувілля з врахуванням процедури проектування може бути поданий у вигляді:

$$\begin{aligned} \varrho(x^N; t) &= \varrho_q(x^N; t) - \int_{-\infty}^t dt' e^{\epsilon(t'-t)} T_q(t, t') \times \\ &\times (1 - P_q(t')) iL_N \varrho_q(x^N; t'), \end{aligned} \quad (2.5)$$

де $\epsilon \rightarrow +0$ після граничного термодинамічного переходу, що відбирає запізнюючі розв'язки рівняння Ліувілля з оператором iL_N . $T_q(t, t') = \exp_+ \left(- \int_{t'}^t dt' (1 - P_q(t')) iL_N \right)$ – узагальнений оператор еволюції у часі з врахуванням проектування Кавасаки-Гантона $P_q(t)$. Структура $P_q(t)$ залежить від релевантної функції розподілу $\varrho_q(x^N; t)$, яка у методі Зубарева знаходиться із екстремуму інформаційної ентропії при фіксованих значеннях параметрів скороченого опису, у нашому випадку $f_1(x; t)$, $\langle \hat{H}^{int}(\mathbf{r}) \rangle^t$, $f(\rho; t)$, та збережені умови нормування:

$$\int d\Gamma_N \varrho_q(x^N; t) = 1, \quad (2.6)$$

де

$$d\Gamma_N = \frac{(dx)^N}{N!} = \frac{(dx_1, \dots, dx_N)}{N!}, \quad dx = d\mathbf{r}d\mathbf{p}.$$

Таким чином, релевантна функція розподілу може бути записана у вигляді:

$$\begin{aligned} \varrho_q(x^N; t) &= \exp \left[- \Phi(t) - \int d\mathbf{r} \beta(\mathbf{r}; t) \hat{H}^{int}(\mathbf{r}) - \right. \\ &\left. - \int dx \gamma(x; t) \hat{n}_1(x) - \int d\rho F(\rho; t) \hat{f}(\rho) \right], \end{aligned} \quad (2.7)$$

де $d\rho = \prod_{\mathbf{k}} d\rho_{\mathbf{k}}$, $\Phi(t)$ – функціонал Мас'є-Планка, який визначається

із умови нормування релевантної функції розподілу

$$\begin{aligned} \Phi(t) &= \ln \int d\Gamma_N \exp \left[- \int d\mathbf{r} \beta(\mathbf{r}; t) \hat{H}^{int}(\mathbf{r}) - \right. \\ &\left. - \int dx \gamma(x; t) \hat{n}_1(x) - \int d\rho F(\rho; t) \hat{f}(\rho) \right]. \end{aligned}$$

Множники Лагранжа $\gamma(x; t)$, $\beta(\mathbf{r}; t)$ та $F(\rho; t)$ знаходяться із умов самоузгодження:

$$\begin{aligned} f_1(x; t) = \langle \hat{n}_1(x) \rangle^t &= \langle \hat{n}_1(x) \rangle_q^t, \\ \langle \hat{H}^{int}(\mathbf{r}) \rangle^t &= \langle \hat{H}^{int}(\mathbf{r}) \rangle_q^t, \\ f(\rho; t) = \langle \delta(\hat{\rho} - \rho) \rangle^t &= \langle \delta(\hat{\rho} - \rho) \rangle_q^t, \end{aligned} \quad (2.8)$$

де $\langle \dots \rangle_q^t = \int d\Gamma_N \dots \varrho_q(x^N; t)$. Для розкриття внутрішньої структури нерівноважної функції розподілу $\varrho(x^N; t)$ ми виключимо функцію $F(\rho; t)$ із релевантної функції розподілу. Для цього використаємо умову самоузгодження (2.8). В результаті отримаємо:

$$\varrho_q(x^N; t) = \varrho_q^{kin-hyd}(x^N; t) \frac{f(\rho; t)}{W(\rho; t)} \Big|_{\rho=\hat{\rho}}, \quad (2.9)$$

де

$$\begin{aligned} W(\rho; t) &= \int d\Gamma_N e^{-\Phi(t) - \int d\mathbf{r} \beta(\mathbf{r}; t) \hat{H}^{int}(\mathbf{r}) - \int dx \gamma(x; t) \hat{n}_1(x)} \hat{f}(\rho) = \\ &= \int d\Gamma_N \varrho_q^{kin-hyd}(x^N; t) \hat{f}(\rho) \end{aligned} \quad (2.10)$$

– нерівноважна структурна функція розподілу колективних змінних, яка є якобіаном переходу $\hat{f}(\rho)$ у простір колективних змінних $\rho_{\mathbf{k}}$. При цьому усереднення у (2.10) виконується з релевантною функцією розподілу

$$\begin{aligned} \varrho_q^{kin-hyd}(x^N; t) &= \exp \left\{ - \Phi(t) - \right. \\ &\left. - \int d\mathbf{r} \beta(\mathbf{r}; t) \hat{H}^{int}(\mathbf{r}) - \int dx \gamma(x; t) \hat{n}_1(x) \right\}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

яка була побудована у роботах [34, 35, 37] при узгодженому описі кінетичних та гідродинамічних процесів у системах взаємодіючих частинок. Релевантній функції розподілу (2.9) відповідає ентропія

Гібса

$$\begin{aligned}
S(t) &= -\langle \ln \varrho_q(x^N; t) \rangle_t = \Phi(t) + \\
&+ \int d\mathbf{r} \beta(\mathbf{r}; t) \langle \hat{H}^{int}(\mathbf{r}) \rangle_t + \int dx \gamma(x; t) \langle \hat{n}_1(x) \rangle_t + \\
&+ \int d\rho f(\rho; t) \ln \frac{f(\rho; t)}{W(\rho; t)},
\end{aligned} \tag{2.12}$$

яка в комбінації із умовами самоузгодження (2.8) може розглядатися як ентропія нерівноважного стану.

Для отримання явного вигляду нерівноважної функції розподілу згідно (2.5) необхідно виконати дію операторів Ліувілля і Кавасаки-Гантона на функцію $\varrho_q(x^N; t)$. Проекційний оператор Кавасаки-Гантона відповідно до (2.9) має наступну структуру:

$$\begin{aligned}
P_q(t)\varrho' &= \varrho_q(x^N; t) \int d\Gamma_N \varrho' + \int dx \frac{\partial \varrho_q(x^N; t)}{\partial \langle \hat{n}_1(x) \rangle_t} \times \\
&\times \left[\int d\Gamma_N \hat{n}_1(x) \varrho' - \langle \hat{n}_1(x) \rangle_t \int d\Gamma_N \varrho' \right] + \\
&+ \int d\mathbf{r} \frac{\partial \varrho_q(x^N; t)}{\partial \langle \hat{H}^{int}(\mathbf{r}) \rangle_t} \times \\
&\times \left[\int d\Gamma_N \hat{H}^{int}(\mathbf{r}) \varrho' - \langle \hat{H}^{int}(\mathbf{r}) \rangle_t \int d\Gamma_N \varrho' \right] + \\
&+ \int d\rho \frac{\partial \varrho_q(x^N; t)}{\partial \left(\frac{f(\rho; t)}{W(\rho; t)} \right)} \frac{1}{W(\rho; t)} \times \\
&\times \left[\int d\Gamma_N \hat{f}(\rho) \varrho' - f(\rho; t) \int d\Gamma_N \varrho' \right] + \\
&+ \int dx \int d\rho \frac{\partial \varrho_q(x^N; t)}{\partial \left(\frac{f(\rho; t)}{W(\rho; t)} \right)} \frac{f(\rho; t)}{W(\rho; t)} \frac{\partial \ln W(\rho; t)}{\partial \langle \hat{n}_1(x) \rangle_t} \times \\
&\times \left[\int d\Gamma_N \hat{n}_1(x) \varrho' - \langle \hat{n}_1(x) \rangle_t \int d\Gamma_N \varrho' \right] + \\
&+ \int d\mathbf{r} \int d\rho \frac{\partial \varrho_q(x^N; t)}{\partial \left(\frac{f(\rho; t)}{W(\rho; t)} \right)} \frac{f(\rho; t)}{W(\rho; t)} \frac{\partial \ln W(\rho; t)}{\partial \langle \hat{H}^{int}(\mathbf{r}) \rangle_t} \times \\
&\times \left[\int d\Gamma_N \hat{H}^{int}(\mathbf{r}) \varrho' - \langle \hat{H}^{int}(\mathbf{r}) \rangle_t \int d\Gamma_N \varrho' \right].
\end{aligned} \tag{2.13}$$

Насамперед, ми розкриємо дію оператора Ліувілля на релевантну

функцію розподілу (2.9). В результаті отримаємо:

$$\begin{aligned}
iL_N \varrho_q(x^N; t) &= - \int dx \gamma(x; t) \dot{\hat{n}}_1(x) \varrho_q(x^N; t) - \\
&- \int d\mathbf{r} \beta(\mathbf{r}; t) \dot{\hat{H}}^{int}(\mathbf{r}) \varrho_q(x^N; t) + \\
&+ \left[iL_N \frac{f(\rho; t)}{W(\rho; t)} \Big|_{\rho=\hat{\rho}} \right] \varrho_q^{kin-hyd}(x^N; t),
\end{aligned} \tag{2.14}$$

де $\dot{\hat{n}}_1(x) = iL_N \hat{n}_1(x)$, $\dot{\hat{H}}^{int}(\mathbf{r}) = iL_N \hat{H}^{int}(\mathbf{r})$. Використавши співвідношення

$$iL_N \hat{f}(\rho) = iL_N \hat{f}(\rho_{\mathbf{k}}) = \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{k}}} \hat{f}(\rho) \dot{\rho}_{\mathbf{k}} \right],$$

де $\dot{\rho}_{\mathbf{k}} = iL_N \hat{\rho}_{\mathbf{k}}$, останній доданок у (2.14) можемо переписати у вигляді:

$$\begin{aligned}
\left[iL_N \frac{f(\rho; t)}{W(\rho; t)} \Big|_{\rho=\hat{\rho}} \right] \varrho_q^{kin-hyd}(x^N; t) &= \\
= \int d\rho \sum_{\mathbf{k}} \left[\dot{\rho}_{\mathbf{k}} W(a; t) \left(\frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{k}}} \frac{f(\rho; t)}{W(\rho; t)} \right) \right] \varrho_L(x^N, \rho; t).
\end{aligned} \tag{2.15}$$

У цьому виразі ми ввели нову релевантну функцію розподілу $\varrho_L(x^N, \rho; t)$ з мікроскопічним розподілом колективних змінних

$$\varrho_L(x^N, \rho; t) = \varrho_q^{kin-hyd}(x^N; t) \frac{\hat{f}(\rho)}{W(\rho; t)}, \tag{2.16}$$

яка зв'язана із $\varrho_q(x^N; t)$ співвідношенням:

$$\varrho_q(x^N; t) = \int d\rho f(\rho; t) \varrho_L(x^N, \rho; t) \tag{2.17}$$

і є нормованою

$$\int d\Gamma_N \varrho_L(x^N, \rho; t) = 1. \tag{2.18}$$

Використавши співвідношення (2.16), середні значення, що розраховуються з релевантною функцією розподілу, можна подати у вигляді:

$$\langle \dots \rangle_q^t = \int d\rho \langle \dots \rangle_L^t f(\rho; t), \tag{2.19}$$

$$\langle \dots \rangle_L^t = \int d\Gamma_N \dots \varrho_L(x^N, \rho; t).$$

Тепер із врахуванням (2.15) і (2.16) результат дії оператора Ліувілля на $\varrho_q(x^N; t)$ запишеться наступним чином:

$$\begin{aligned} iL_N \varrho_q(x^N; t) = & - \int d\rho \int dx \gamma(x; t) \dot{\rho}_1(x) \varrho_L(x^N, \rho; t) f(\rho; t) - \\ & - \int d\rho \int d\mathbf{r} \beta(\mathbf{r}; t) \dot{H}^{int}(\mathbf{r}) \varrho_L(x^N, \rho; t) f(\rho; t) + \\ & + \int d\rho \sum_{\mathbf{k}} \left[\dot{\rho}_{\mathbf{k}} W(\rho; t) \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{k}}} \frac{f(\rho; t)}{W(\rho; t)} \right] \varrho_L(x^N, \rho; t). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Підставивши цей вираз у (2.5), ми отримаємо нерівноважну функцію розподілу

$$\begin{aligned} \varrho(x^N; t) = & \int d\rho f(\rho; t) \varrho_L(x^N, \rho; t) + \\ & + \int d\rho \int d\mathbf{r} \int_{-\infty}^t dt' e^{\epsilon(t'-t)} T_q(t, t') (1 - P_q(t')) \times \\ & \times \dot{H}^{int}(\mathbf{r}) \varrho_L(x^N, \rho; t) f(\rho; t') \beta(\mathbf{r}; t') - \\ & - \int d\rho \int dx \int_{-\infty}^t dt' e^{\epsilon(t'-t)} T_q(t, t') (1 - P_q(t')) \times \\ & \times \dot{n}_1(x) \varrho_L(x^N, \rho; t') f(\rho; t') \gamma(x; t') - \\ & - \int d\rho \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^t dt' e^{\epsilon(t'-t)} T_q(t, t') (1 - P_q(t')) \times \\ & \times \left[\dot{\rho}_{\mathbf{k}} W(\rho; t') \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{k}}} \frac{f(\rho; t')}{W(\rho; t')} \right] \varrho_L(x^N, \rho; t'), \end{aligned} \quad (2.21)$$

з допомогою якої отримаємо відповідні узагальнені рівняння переносу для параметрів скороченого опису:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right] f_1(x; t) - \int dx' \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \Phi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \times \\ \times \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}'} \right] g_2(x, x'; t) = \\ = - \int d\mathbf{r}' \int d\rho \int_{-\infty}^t dt' e^{\epsilon(t'-t)} \phi_{nH}^{int}(x, \mathbf{r}', \rho; t, t') f(\rho; t') \beta(\mathbf{r}'; t') - \\ - \int dx' \int d\rho \int_{-\infty}^t dt' e^{\epsilon(t'-t)} \phi_{nn}(x, x', \rho; t, t') f(\rho; t') \gamma(x'; t') - \\ - \sum_{\mathbf{k}} \int da \int_{-\infty}^t dt' e^{\epsilon(t'-t)} \left\{ \phi_{n\rho}(x, \mathbf{k}, \rho; t, t') \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{k}}} \right\} \frac{f(\rho; t')}{W(\rho; t')}, \end{aligned} \quad (2.22)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{H}^{int}(\mathbf{r}) \rangle^t = & \langle \dot{\hat{H}}^{int}(\mathbf{r}) \rangle_q^t - \\ & - \int d\mathbf{r}' \int d\rho \int_{-\infty}^t dt' e^{\epsilon(t'-t)} \phi_{HH}^{int}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \rho; t, t') f(\rho; t') \beta(\mathbf{r}'; t') - \\ & - \int dx' \int d\rho \int_{-\infty}^t dt' e^{\epsilon(t'-t)} \phi_{Hn}^{int}(\mathbf{r}, x', \rho; t, t') f(\rho; t') \gamma(x'; t') - \\ & - \sum_{\mathbf{k}} \int d\rho \int_{-\infty}^t dt' e^{\epsilon(t'-t)} \left\{ \phi_{H\varepsilon}^{int}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \rho; t, t') \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{k}}} \right\} \frac{f(\rho; t')}{W(\rho; t')}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(\rho; t) = & \sum_{\mathbf{k}} \frac{\delta}{\delta \rho_{\mathbf{k}}} v_{\rho}(\mathbf{k}; t) f(\rho; t) - \\ & - \sum_{\mathbf{k}} \frac{\delta}{\delta \rho_{\mathbf{k}}} \int d\mathbf{r}' \int d\rho' \int_{-\infty}^t dt' e^{\epsilon(t'-t)} \times \\ & \times \phi_{\rho H}(\mathbf{r}', \mathbf{k}, \rho, \rho'; t, t') f(\rho'; t') \beta(\mathbf{r}'; t') - \\ & - \sum_{\mathbf{k}} \frac{\delta}{\delta \rho_{\mathbf{k}}} \int dx' \int d\rho' \int_{-\infty}^t dt' e^{\epsilon(t'-t)} \times \\ & \times \phi_{\rho n}(x', \mathbf{k}, \rho, \rho'; t, t') f(\rho'; t') \gamma(x'; t') + \\ & + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \int d\rho' \int_{-\infty}^t dt' e^{\epsilon(t'-t)} \frac{\delta}{\delta \rho_{\mathbf{k}}} \phi_{\rho\rho}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \rho, \rho'; t, t') \frac{\delta}{\delta \rho_{\mathbf{q}}} \frac{f(\rho'; t')}{W(\rho'; t')}. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Узагальнені рівняння переносу (2.22) – (2.24) містять релевантну пару функцію розподілу частинок $g_2(x, x'; t)$:

$$g_2(x, x'; t) = \int d\Gamma_{N-2} \varrho(x^N; t) = \int d\rho g_2^L(x, x'; \rho; t) f(\rho; t), \quad (2.25)$$

де $g_2^L(x, x'; \rho; t) = \int d\Gamma_{N-2} \varrho_L(x^N, \rho; t)$ є L -парною релевантною функцією розподілу частинок.

Узагальнені ядра переносу

$$\begin{aligned} \phi_{\alpha\beta}(t, t') = & \langle I_{\alpha}(t) T_q(t, t') I_{\beta}(t') \rangle_L^{t'}, \\ \alpha, \beta = & \{n, H, \rho\}, \end{aligned} \quad (2.26)$$

що входять у рівняння переносу, описують немарковські процеси і є нерівноважними кореляційними функціями. Вони побудовані на узагальнених потоках:

$$\hat{I}_n(x; t) = (1 - P(t)) \dot{n}_1(x), \quad (2.27)$$

$$\hat{I}_H^{int}(\mathbf{r}; t) = (1 - P(t))\dot{\hat{H}}^{int}(\mathbf{r}), \quad (2.28)$$

$$\hat{I}_\rho(\mathbf{k}; t) = (1 - P(t))\dot{\hat{\rho}}_{\mathbf{k}}, \quad (2.29)$$

де $P(t)$ – узагальнений оператор Морі, що зв'язаний з проєкційним оператором Кавасаки-Гантона $P_q(t)$ співвідношенням:

$$P_q(t)a(x)\varrho_q(x^N; t) = \varrho_q(x^N; t)P(t)a(x).$$

Важливо зазначити, що у (2.26) середні значення розраховуються з функцією розподілу $\varrho_L(x^N, \rho; t)$ (2.16), так що ядра переносу є функціями колективних змінних $\rho_{\mathbf{k}}$.

У рівнянні (2.24) функції $v_\rho(\mathbf{k}; t)$ є потоками у просторі колективних змінних, які називають гідродинамічними швидкостями. Означені вони наступним чином:

$$v_\rho(\mathbf{k}; t) = \int d\Gamma_N \dot{\hat{\rho}}_{\mathbf{k}} \varrho_L(x^N, \rho; t) = \langle \dot{\hat{\rho}}_{\mathbf{k}} \rangle_L^t. \quad (2.30)$$

Представлена система рівнянь переносу (2.22)–(2.24) забезпечує узгоджений опис кінетичних та гідродинамічних процесів у класичних рідинах і густих газах з врахуванням довгоживучих флуктуацій. Ця система рівнянь є незамкнута за параметрами Лагранжа $\beta(\mathbf{r}; t)$, $\gamma(x; t)$, які визначаються із відповідних умов самоузгодження. Необхідно зауважити, що якщо не враховувати кінетичні процеси і вклад середньої потенціальної енергії, то отримуємо узагальнене (немарковське) рівняння Фоккера-Планка для нерівноважної функції розподілу колективних змінних, яке може бути отримано методом проєкційних операторів Цванцига чи методом Зубарева [53]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(\rho; t) &= \sum_{\mathbf{k}} \frac{\delta}{\delta \rho_{\mathbf{k}}} v_\rho(\mathbf{k}; t) f(\rho; t) + \\ &+ \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \int d\rho' \int_{-\infty}^t dt' e^{\epsilon(t'-t)} \times \\ &\times \frac{\delta}{\delta \rho_{\mathbf{k}}} \phi_{\rho\rho}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \rho, \rho'; t, t') \frac{\delta}{\delta \rho_{\mathbf{q}}} \frac{f(\rho'; t')}{W(\rho'; t')}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Однією із головних проблем для аналізу рівнянь переносу (2.22)–(2.24) і ядер переносу (2.26) є розрахунок структурної функції $W(\rho; t)$ колективних змінних і гідродинамічних швидкостей $v_\rho(\mathbf{k}; t)$.

3. Розрахунок структурної функції $W(\rho; t)$ і гідродинамічних швидкостей $v_\rho(\mathbf{k}; t)$ методом колективних змінних

Ми застосуємо метод колективних змінних [50–52, 55, 56] для розрахунку структурної функції $W(\rho; t)$ та гідродинамічних швидкостей $v_\rho(\mathbf{k}; t)$. Спочатку розрахуємо структурну функцію $W(\rho; t)$ для колективних змінних, коли взаємодію між частинками на малих відстанях будемо описувати короткодійним потенціалом $\Phi^{sh}(|\mathbf{r}_{ij}|)$, зокрема, у випадку потенціалу твердих сфер, а за межами його дії деяким далекодіючим потенціалом $\Phi^{long}(|\mathbf{r}_{ij}|)$. Відповідно, в операторі Ліувілля виділимо короткодійні і далекодіючі взаємодії між частинками:

$$iL_N = iL_N^0 + \hat{T}_N + iL_N^{long},$$

де iL_N^0 – оператор Ліувілля N незваємодіючих частинок, \hat{T}_N – оператор розсіяння системи, у випадку моделі твердих сфер [36, 39, 42, 46], iL_N^{long} – потенціальна частина оператора Ліувілля з далекодіючим потенціалом взаємодії між частинками.

Далі застосуємо інтегральне представлення для δ -функції, тоді $\hat{f}(\rho)$ подамо у вигляді:

$$\hat{f}(\rho) = \int d\omega \exp\{-i\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} (\hat{\rho}_{\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}})\}. \quad (3.1)$$

Використавши кумулянтний розклад [50, 51, 56] для $W(\rho; t)$, отримаємо:

$$\begin{aligned} W(\rho; t) &= \int d\Gamma_N \varrho_{rel}^{kin-hyd}(x^N; t) \hat{f}(\rho) = \\ &= \int d\omega \exp\left\{-i\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \bar{\rho}_{\mathbf{k}} - \right. \\ &- \frac{1}{2V^2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{q}}(t) \nu(\mathbf{k}) (\rho_{\mathbf{q}+\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{q}}) - \\ &- \frac{\pi^2}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \mathfrak{M}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; t) \omega_{\mathbf{k}_1} \omega_{\mathbf{k}_2} \left. \right\} \times \\ &\times \exp\left\{ \sum_{n \geq 3} D_n(\omega; t) \right\}, \end{aligned} \quad (3.2)$$

де

$$\begin{aligned}\bar{\rho}_{\mathbf{k}} &= \rho_{\mathbf{k}} - \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \rangle_{kin-sh}^t, \quad d\omega = \prod_{\mathbf{k}} d\omega_{\mathbf{k}}^r d\omega_{\mathbf{k}}^s, \\ \omega_{\mathbf{k}} &= \omega_{\mathbf{k}}^r - i\omega_{\mathbf{k}}^s, \quad \omega_{-\mathbf{k}} = \omega_{\mathbf{k}}^*,\end{aligned}$$

$$D_n(\omega; t) = \frac{(-i\pi)^n}{n!} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \mathfrak{M}_n(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n; t) \times \quad (3.3)$$

$$\times \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_n}.$$

Нерівноважні кумулянтні середні n -порядку

$$\mathfrak{M}_n(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n; t) = \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}_1}, \dots, \hat{\rho}_{\mathbf{k}_n} \rangle_{kin-sh}^{t,c} \quad (3.4)$$

розраховуються із релевантною функцією розподілу з короткодіючою міжчастинковою взаємодією:

$$\begin{aligned}\varrho_q^{kin-sh}(x^N; t) &= \exp \left\{ -\Phi(t) - \right. \\ &\left. - \int d\mathbf{r} \beta(\mathbf{r}; t) \hat{H}^{sh}(\mathbf{r}) - \int dx \gamma(x; t) \hat{n}_1(x) \right\},\end{aligned} \quad (3.5)$$

де верхній індекс c означає кумулянтне середнє. Важливо зазначити, що у (3.2) ми розділили вклади від короткодіючих та далекодіючих взаємодій. Короткодіючі взаємодії враховані у релевантному розподілі (3.5) (який можна розглядати як базисний), а далекодіючі взаємодії подані через колективні змінні:

$$\begin{aligned}\int d\mathbf{r} \beta(\mathbf{r}; t) \hat{H}^{long}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2V^2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{q}}(t) \nu(\mathbf{k}) \times \\ &\times (\rho_{\mathbf{q}+\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{q}}).\end{aligned}$$

Для подальшого розрахунку структурну функцію $W(\rho; t)$ подамо у вигляді:

$$\begin{aligned}W(\rho; t) &= W_{\beta}(\rho; t) \int d\omega \exp \left\{ -i\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \bar{\rho}_{\mathbf{k}} - \right. \\ &\left. - \frac{\pi^2}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \mathfrak{M}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; t) \omega_{\mathbf{k}_1} \omega_{\mathbf{k}_2} \right\} \times \\ &\times \left(1 + B + \frac{1}{2!} B^2 + \frac{1}{3!} B^3 + \dots + \frac{1}{n!} B^n + \dots \right),\end{aligned} \quad (3.6)$$

де

$$\begin{aligned}W_{\beta}(\rho; t) &= \exp \left(-\frac{1}{2V^2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{q}}(t) \nu(\mathbf{k}) \times \right. \\ &\left. \times (\rho_{\mathbf{q}+\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{q}}) \right)\end{aligned} \quad (3.7)$$

і $B = \sum_{n \geq 3} D_n(\omega; t)$. Якщо в розкладі у ряд експоненти (3.6), тобто $\exp\{\sum_{n \geq 3} D_n(\omega; t)\}$, зберегти лише перший доданок, що рівний одиниці, то отримуємо наближення Гауса для $W(\rho; t)$:

$$\begin{aligned}W^G(\rho; t) &= W_{\beta}(\rho; t) \int d\omega \exp \left\{ i\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \bar{\rho}_{\mathbf{k}} - \right. \\ &\left. - \frac{\pi^2}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \mathfrak{M}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; t) \omega_{\mathbf{k}_1} \omega_{\mathbf{k}_2} \right\},\end{aligned} \quad (3.8)$$

де нерівноважне кумулянтне середнє густина-густина має вигляд:

$$\begin{aligned}\mathfrak{M}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; t) &= \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}_1} \hat{\rho}_{\mathbf{k}_2} \rangle_{kin-sh}^{t,c} = \\ &= \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{-\mathbf{k}} \rangle_{kin-sh}^t - \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \rangle_{kin-sh}^t \langle \hat{\rho}_{-\mathbf{k}} \rangle_{kin-sh}^t.\end{aligned}$$

Для проведення інтегрування за $d\omega$ у (3.8) необхідно привести вираз в експоненті до квадратичної діагональної форми за $\omega_{\mathbf{k}}$. У зв'язку з цим треба знайти власні значення, розв'язавши рівняння:

$$\det \left| \tilde{\mathfrak{M}}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; t) - \tilde{E}(\mathbf{k}; t) \right| = 0, \quad (3.9)$$

$\tilde{E}(\mathbf{k}; t)$ – діагональна матриця. З врахуванням цього, отримуємо:

$$\begin{aligned}W^G(\rho; t) &= W_{\beta}(\rho; t) \int d\tilde{\omega} \exp \left\{ -i\pi \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}_{\mathbf{k}} \tilde{\omega}_{\mathbf{k}} - \right. \\ &\left. - \frac{\pi^2}{2} \sum_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}; t) \tilde{\omega}_{\mathbf{k}} \tilde{\omega}_{-\mathbf{k}} \right\}.\end{aligned} \quad (3.10)$$

Підінтегральний вираз у (3.10) є квадратичною функцією $\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}$, тому, виконуючи інтегрування за $d\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}$, для структурної функції в гаусовому наближенні $W^G(a; t)$ отримуємо:

$$\begin{aligned}W^G(\rho; t) &= W_{\beta}(\rho; t) \times \\ &\times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} E^{-1}(\mathbf{k}; t) \tilde{\rho}_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}_{-\mathbf{k}} \right\} \times \\ &\times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \ln \pi \det \tilde{E}(\mathbf{k}; t) \right\},\end{aligned} \quad (3.11)$$

або через змінні $\bar{\rho}_{\mathbf{k}}$:

$$W^G(\rho; t) = Z(t)W_\beta(\rho; t) \times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \bar{E}(\mathbf{k}; t) \bar{\rho}_{\mathbf{k}} \bar{\rho}_{-\mathbf{k}} \right\}, \quad (3.12)$$

де

$$Z(t) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \ln \pi \det \tilde{E}(\mathbf{k}; t) \right\}.$$

Структурна функція $W^G(\rho; t)$ у гаусовому наближенні дає можливість розрахунку повної структурної функції (3.2) у вищих наближеннях за гаусовими моментами [50, 51]:

$$W(\rho; t) = W_\beta(\rho; t) \bar{W}^G(\rho; t) \exp \left\{ \sum_{n \geq 3} \langle \tilde{D}_n(\rho; t) \rangle_G \right\}, \quad (3.13)$$

де

$$\bar{W}^G(\rho; t) = Z(t) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \bar{E}(\mathbf{k}; t) \bar{\rho}_{\mathbf{k}} \bar{\rho}_{-\mathbf{k}} \right\} \quad (3.14)$$

і $\langle \tilde{D}_n(\rho; t) \rangle_G$ наближено представимо так:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{D}_3(\rho; t) \rangle_G &= \langle \bar{D}_3(\rho; t) \rangle_G, \\ \langle \tilde{D}_4(\rho; t) \rangle_G &= \langle \bar{D}_4(\rho; t) \rangle_G, \\ \langle \tilde{D}_6(\rho; t) \rangle_G &= \langle \bar{D}_6(\rho; t) \rangle_G - \frac{1}{2} \langle \bar{D}_3(\rho; t) \rangle_G^2, \\ \langle \tilde{D}_8(\rho; t) \rangle_G &= \langle \bar{D}_8(\rho; t) \rangle_G - \langle \bar{D}_3(\rho; t) \rangle_G \langle \bar{D}_5(\rho; t) \rangle_G - \\ &\quad - \frac{1}{2} \langle \bar{D}_4(\rho; t) \rangle_G^2, \\ \langle \tilde{D}_n(\rho; t) \rangle_G &= \frac{1}{\bar{W}^G(\rho; t)} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \bar{\mathfrak{M}}_n(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n; t) \times \\ &\quad \times \frac{1}{(i\pi)^n} \frac{\delta^n}{\delta \bar{\rho}_{\mathbf{k}_1} \dots \delta \bar{\rho}_{\mathbf{k}_n}} \bar{W}^G(\rho; t). \end{aligned}$$

$\langle \tilde{D}_n(\rho; t) \rangle_G$ – перенормовані n -ті нерівноважні кумулянтні середні для змінних $\bar{\rho}_{\mathbf{k}}$ вищих порядків.

Метод розрахунку структурної функції $W(\rho; t)$ може бути застосований для наближених розрахунків гідродинамічних швидкостей

$v_\rho(\mathbf{k}; t)$. Відповідно до означення гідродинамічних швидкостей (2.30) представимо загальну формулу у вигляді:

$$v_\rho(\mathbf{k}; t) = \int d\Gamma_N \dot{\rho}_{\mathbf{k}} \varrho_{rel}^{kin-hyd}(x^N; t) \hat{f}(\rho) \quad (3.15)$$

і введемо функцію $W(\rho, \lambda; t)$:

$$W(\rho, \lambda; t) = \int d\Gamma_N e^{-i\pi \sum_{\mathbf{k}} \lambda_{\mathbf{k}} \dot{\rho}_{\mathbf{k}}} \times \varrho_{rel}^{kin-hyd}(x^N; t) \hat{f}(\rho), \quad (3.16)$$

так що

$$v_\rho(\mathbf{k}; t) = \frac{\partial}{\partial(-i\pi \lambda_{\mathbf{k}})} \ln W(\rho, \lambda; t) \Big|_{\lambda_{\mathbf{k}}=0}. \quad (3.17)$$

Ми розрахуємо функцію $W(\rho, \lambda; t)$, використавши отримані результати розрахунків структурної функції $W(\rho; t)$, тому перепишемо $W(\rho, \lambda; t)$ так:

$$\begin{aligned} W(\rho, \lambda; t) &= \int d\Gamma_N \int d\omega \exp \left\{ -i\pi \sum_{\mathbf{k}} \lambda_{\mathbf{k}} \dot{\rho}_{\mathbf{k}} \right\} \times \\ &\times \exp \left\{ -i\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} (\hat{\rho}_{\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}}) \right\} \varrho_{rel}^{kin-hyd}(x^N; t). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Тепер прийемо до уваги усереднення (3.18) з $\varrho_q^{kin-sh}(x^N; t)$, використавши кумулянтний розклад:

$$\begin{aligned} W(\rho, \lambda; t) &= W_\beta(\rho, \lambda; t) \int d\omega \exp \left\{ -i\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \bar{\rho}_{\mathbf{k}} + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{n \geq 1} [D_n(\omega; t) + D_n(\lambda; t) + D_n(\omega, \lambda; t)] \right\}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

де

$$\begin{aligned}
W_\beta(\rho, \lambda; t) &= W_\beta(\rho; t) \exp \left\{ -i\pi \sum_{\mathbf{k}} \lambda_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \right\}, \quad (3.20) \\
D_n(\omega; t) &= \frac{(-i\pi)^n}{n!} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \mathfrak{M}_n(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n; t) \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_n}, \\
D_n(\lambda; t) &= \frac{(-i\pi)^n}{n!} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \mathfrak{M}_n^{(1)}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n; t) \lambda_{\mathbf{k}_1} \dots \lambda_{\mathbf{k}_n}, \\
D_n(\omega, \lambda; t) &= \frac{(-i\pi)^n}{n!} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \mathfrak{M}_n^{(2)}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n; t) \times \\
&\quad \times \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_{n-1}} \dots \lambda_{\mathbf{k}_n},
\end{aligned}$$

у якому кумулянти мають таку структуру:

$$\begin{aligned}
\mathfrak{M}_n(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n; t) &= \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}_1}, \dots, \hat{\rho}_{\mathbf{k}_n} \rangle_{kin-sh}^{t,c}, \\
\mathfrak{M}_n^{(1)}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n; t) &= \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}_1}, \dots, \hat{\rho}_{\mathbf{k}_n} \rangle_{kin-sh}^{t,c}, \\
\mathfrak{M}_n^{(2)}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n; t) &= n[(n-j) + (j-n+1)\delta_{\dots, l_{n-1}}] \times \\
&\quad \times \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}_1}, \dots, \hat{\rho}_{\mathbf{k}_{n-j}}, \dots, \hat{\rho}_{\mathbf{k}_{n-j+1}}, \dots, \hat{\rho}_{\mathbf{k}_n} \rangle_{kin-sh}^{t,c}.
\end{aligned}$$

Розглянемо спочатку наближення Гауса для $W(\rho, \lambda; t)$, тобто в експоненті підінтегрального виразу залишимо лише доданки з $n = 2$ лінійні за $\lambda_{\mathbf{k}}$:

$$\begin{aligned}
W^G(\rho, \lambda; t) &= W_\beta(\rho, \lambda; t) \int d\omega \exp \left\{ i\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \bar{\rho}_{\mathbf{k}} - \right. \quad (3.21) \\
&\quad \left. - \frac{\pi^2}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \mathfrak{M}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; t) \omega_{\mathbf{k}_1} \omega_{\mathbf{k}_2} - \frac{\pi^2}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \mathfrak{M}_2^{(2)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; t) \omega_{\mathbf{k}_1} \lambda_{\mathbf{k}_2} \right\}.
\end{aligned}$$

Приводячи цей вираз в експоненті за змінними $\omega_{\mathbf{k}}$ до діагональної квадратичної форми, подібно як для $W(\rho; t)$, після інтегрування за новими змінними $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$, отримуємо:

$$\begin{aligned}
W^G(\rho, \lambda; t) &= W_\beta(\rho, \lambda; t) \times \quad (3.22) \\
&\quad \times \exp \left\{ -\frac{\pi^2}{2} \sum_{\mathbf{k}} E^{-1}(\mathbf{k}; t) b_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \ln \pi \det \tilde{E}(\mathbf{k}; t) \right\},
\end{aligned}$$

де

$$b_{\mathbf{k}} = \bar{\rho}_{\mathbf{k}} + \frac{i\pi}{2} \mathfrak{M}_2^{(2)}(\mathbf{k}; t) \lambda_{\mathbf{k}}.$$

Тут кумулянти $\mathfrak{M}_2^{(2)}(\mathbf{k}; t)$ мають наступну структуру:

$$\mathfrak{M}_2^{(2)}(\mathbf{k}; t) = \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{-\mathbf{k}} \rangle_{kin-sh}^t - \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \rangle_{kin-sh}^t \langle \hat{\rho}_{-\mathbf{k}} \rangle_{kin-sh}^t. \quad (3.23)$$

Оскільки $\dot{\hat{\mathbf{v}}}_{\mathbf{k}} = -i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{k}}$, де $\hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{k}} = \sum_{j=1}^N \mathbf{v}_j e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} -$ фур'є-компонента мікроскопічної густини швидкості частинок, то $\mathfrak{M}_2^{(2)}(\mathbf{k}; t) = -i\mathbf{k} \cdot (\langle \hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{-\mathbf{k}} \rangle_{kin-sh}^t - \langle \hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{k}} \rangle_{kin-sh}^t \langle \hat{\rho}_{-\mathbf{k}} \rangle_{kin-sh}^t)$ є перехресною кореляційною функцією "швидкість-густина" для системи з короткодійною взаємодією $\varrho_q^{kin-sh}(x^N; t)$. Далі ми розрахуємо гідродинамічні швидкості $v_\rho(\mathbf{k}; t)$ у наближенні Гауса згідно формули:

$$\begin{aligned}
v_\rho(\mathbf{k}; t) &= \frac{\partial}{\partial(-i\pi\lambda_{\mathbf{k}})} \ln W^G(\rho, \lambda; t) \Big|_{\lambda_{\mathbf{k}}=0} = \quad (3.24) \\
&= \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \rangle_{kin-sh}^t - \frac{\pi^2}{2} E^{-1}(\mathbf{k}; t) \mathfrak{M}_2^{(2)}(\mathbf{k}; t) \bar{\rho}_{\mathbf{k}}.
\end{aligned}$$

Вираз містить два доданки. Перший зв'язаний із усередненою фур'є-компонентою густини швидкості частинок за розподілом з короткодійною взаємодією $\varrho_q^{kin-sh}(x^N; t)$: $\langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \rangle_{kin-sh}^t = -i\mathbf{k} \cdot \langle \hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{k}} \rangle_{kin-sh}^t$, а другий із співвідношенням кореляційних функцій $E^{-1}(\mathbf{k}; t)$ та $\mathfrak{M}_2^{(2)}(\mathbf{k}; t)$ і є лінійним за колективними змінними густини числа частинок $\bar{\rho}_{\mathbf{k}}(t) = \rho_{\mathbf{k}} - \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \rangle_{kin-sh}^t$. У вищих наближеннях за гаусове наближення відповідно до (3.17) і (3.19) $v_\rho(\mathbf{k}; t)$ буде функцією колективних змінних $\rho_{\mathbf{k}}$ другого, третього і вищого порядків, що важливо з точки зору розрахунків вкладів флуктуацій в узагальнені коефіцієнти переносу та часові кореляційні функції [57, 58]. Зокрема, вихід за гаусове наближення можна здійснити врахуванням кореляцій $\mathfrak{M}_3^{(2)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3; t)$. Тоді для $W(\rho, \lambda; t)$ отримаємо:

$$\begin{aligned}
W(\rho, \lambda; t) &= W_\beta(\rho; t) \int d\omega \exp \left\{ i\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \bar{\rho}_{\mathbf{k}} - \right. \quad (3.25) \\
&\quad - i\pi \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \rangle_{kin-sh}^{t,c} \lambda_{\mathbf{k}} - \frac{\pi^2}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \mathfrak{M}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; t) \omega_{\mathbf{k}_1} \omega_{\mathbf{k}_2} - \\
&\quad - \frac{\pi^2}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \mathfrak{M}_2^{(2)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; t) \omega_{\mathbf{k}_1} \lambda_{\mathbf{k}_2} - \\
&\quad \left. - \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{-i\pi}{3} \right) \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} \mathfrak{M}_3^{(2)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3; t) \omega_{\mathbf{k}_1} \omega_{\mathbf{k}_2} \lambda_{\mathbf{k}_3} \right\}.
\end{aligned}$$

В експоненті у правій частині цього виразу ми маємо квадратичну

залежність від $\omega_{\mathbf{k}_1}\omega_{\mathbf{k}_2}$. Даний вираз можемо подати у вигляді:

$$W(\rho, \lambda; t) = W_\beta(\rho; t) \exp \left\{ -i\pi \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \rangle_{kin-sh}^{t,c} \lambda_{\mathbf{k}} \right\} \times \quad (3.26)$$

$$\times \int d\omega \exp \left\{ i\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} - \frac{\pi^2}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \bar{\mathfrak{M}}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; t) \omega_{\mathbf{k}_1} \omega_{\mathbf{k}_2} \right\},$$

якщо ввести позначення

$$(3.27)$$

$$\bar{\mathfrak{M}}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; t) = \mathfrak{M}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; t) + \left(\frac{-i\pi}{3} \right) \sum_{\mathbf{k}_3} \mathfrak{M}_3^{(2)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3; t) \lambda_{\mathbf{k}_3}.$$

Далі, провівши процедуру діагоналізації відповідно до

$$\det \left| \bar{\mathfrak{M}}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \lambda; t) - \tilde{E}(\mathbf{k}, \lambda; t) \right| = 0, \quad (3.28)$$

для $W(\rho, \lambda; t)$ після інтегрування за $(d\omega)$, остаточно отримаємо:

$$W(\rho, \lambda; t) = W_\beta(\rho; t) \times \quad (3.29)$$

$$\times \exp \left\{ -i\pi \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \rangle_{kin-sh}^t \lambda_{\mathbf{k}} - \frac{\pi^2}{2} \sum_{\mathbf{k}} E^{-1}(\mathbf{k}, \lambda; t) b_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \ln \pi \det \tilde{E}(\mathbf{k}, \lambda; t) \right\},$$

При цьому $E^{-1}(\mathbf{k}, \lambda; t)$ залежить від параметра $\lambda_{\mathbf{k}}$. Тепер можемо розрахувати гідродинамічну швидкість $v_\rho(\mathbf{k}; t)$ з врахуванням кореляцій третього порядку $\mathfrak{M}_3^{(2)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3; t)$. В результаті отримаємо:

$$v_\rho(\mathbf{k}; t) = \frac{\partial}{\partial(-i\pi\lambda_{\mathbf{k}})} \ln W(\rho, \lambda; t) \Big|_{\lambda_{\mathbf{k}}=0} = \quad (3.30)$$

$$= \langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \rangle_{kin-sh}^t - \frac{\pi^2}{2} E^{-1}(\mathbf{k}; t) \mathfrak{M}_2^{(2)}(\mathbf{k}; t) \bar{\rho}_{\mathbf{k}} - \frac{\pi^2}{2} \frac{\partial}{\partial(-i\pi\lambda_{\mathbf{k}})} E^{-1}(\mathbf{k}, \lambda; t) \Big|_{\lambda_{\mathbf{k}}=0} \bar{\rho}_{\mathbf{k}} \bar{\rho}_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial(-i\pi\lambda_{\mathbf{k}})} \ln \pi \det \tilde{E}(\mathbf{k}, \lambda; t) \Big|_{\lambda_{\mathbf{k}}=0}.$$

Як бачимо у цьому наближенні $v_\rho(\mathbf{k}; t)$ є квадратичною функцією колективних змінних $\bar{\rho}_{\mathbf{k}} \bar{\rho}_{-\mathbf{k}}$.

В загальному, використавши методику розрахунку $W(\rho; t)$, для $W(\rho, \lambda; t)$ отримаємо:

$$W(\rho, \lambda; t) = W_\beta(\rho, \lambda; t) \bar{W}^G(\rho, \lambda; t) \times \quad (3.31)$$

$$\times \exp \left\{ \sum_{n \geq 3} (\langle \tilde{D}_n(\rho; t) \rangle_G + \langle \tilde{D}_n^{(2)}(\rho, \lambda; t) \rangle_G) \right\},$$

де

$$\bar{W}^G(\rho, \lambda; t) = \exp \left\{ -\frac{\pi^2}{2} \sum_{\mathbf{k}} E^{-1}(\mathbf{k}; t) b_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \ln \pi \det \tilde{E}(\mathbf{k}; t) \right\}, \quad (3.32)$$

$\langle \tilde{D}_n(\rho; t) \rangle_G$ наближено подамо так:

$$\langle \tilde{D}_3(\rho; t) \rangle_G = \langle \bar{D}_3(\rho; t) \rangle_G,$$

$$\langle \tilde{D}_4(\rho; t) \rangle_G = \langle \bar{D}_4(\rho; t) \rangle_G,$$

$$\langle \tilde{D}_6(\rho; t) \rangle_G = \langle \bar{D}_6(\rho; t) \rangle_G - \frac{1}{2} \langle \bar{D}_3(\rho; t) \rangle_G^2,$$

$$\langle \tilde{D}_8(\rho; t) \rangle_G = \langle \bar{D}_8(\rho; t) \rangle_G - \langle \bar{D}_3(\rho; t) \rangle_G \langle \bar{D}_5(\rho; t) \rangle_G - \frac{1}{2} \langle \bar{D}_4(\rho; t) \rangle_G^2,$$

$$\langle \tilde{D}_n(\rho; t) \rangle_G = \frac{1}{\bar{W}^G(\rho; t)} \times$$

$$\times \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \bar{\mathfrak{M}}_n(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n; t) \times$$

$$\times \frac{1}{(i\pi)^n} \frac{\delta^n}{\delta b_{\mathbf{k}_1} \dots \delta b_{\mathbf{k}_n}} \bar{W}^G(\rho; t).$$

$\langle \tilde{D}_n^{(2)}(\rho; t) \rangle_G$ теж наближено подамо так:

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{D}_3^{(2)}(\rho; t) \rangle_G &= \langle \bar{D}_3^{(2)}(\rho; t) \rangle_G, \\
\langle \tilde{D}_4^{(2)}(\rho; t) \rangle_G &= \langle \bar{D}_4^{(2)}(\rho; t) \rangle_G, \\
\langle \tilde{D}_6^{(2)}(\rho; t) \rangle_G &= \langle \bar{D}_6^{(2)}(\rho; t) \rangle_G - \frac{1}{2} \langle \bar{D}_3^{(2)}(\rho; t) \rangle_G^2, \\
\langle \tilde{D}_8^{(2)}(\rho; t) \rangle_G &= \langle \bar{D}_8^{(2)}(\rho; t) \rangle_G - \\
&- \langle \bar{D}_3^{(2)}(\rho; t) \rangle_G \langle \bar{D}_5^{(2)}(\rho; t) \rangle_G - \frac{1}{2} \langle \bar{D}_4^{(2)}(\rho; t) \rangle_G^2, \\
\langle \tilde{D}_n^{(2)}(\rho; t) \rangle_G &= \frac{1}{W^G(\rho; t)} \times \\
&\times \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \bar{\mathfrak{M}}_n^{(2)}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n; t) \lambda_{\mathbf{k}_1} \times \\
&\times \frac{1}{(i\pi)^n} \frac{\delta^n}{\delta b_{\mathbf{k}_1} \dots \delta b_{\mathbf{k}_n}} \bar{W}^G(\rho; t).
\end{aligned} \tag{3.33}$$

$\langle \tilde{D}_n(\rho; t) \rangle_G$, $\langle \tilde{D}_n^{(2)}(\rho; t) \rangle_G$ – перенормовані n -ті нерівноважні кумулянтні середні для змінних $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}$ вищих порядків.

4. Висновки

Для узгодженого опису кінетичних та гідродинамічних флуктуацій в системі взаємодіючих частинок, використавши метод нерівноважного статистичного оператора Зубарева отримано систему рівнянь переносу для нерівноважної одночастинкової функції розподілу $f_1(x; t) = \langle \hat{n}_1(x) \rangle^t$, нерівноважного середнього значення енергії взаємодії частинок $H^{int}(\mathbf{r}, t) = \langle \hat{H}^{int}(\mathbf{r}) \rangle^t$ та нерівноважної функції розподілу колективних змінних $f(\rho; t) = \langle \delta(\hat{\rho} - \rho) \rangle^t$. Розділення вкладів від короткодійючих і далекодійючих взаємодій між частинками привело до того, що короткодійючі взаємодії (наприклад, модель твердих сфер) описуються в координатно-імпульсному просторі, а далекодійючі - у просторі колективних змінних густини числа частинок. При цьому, короткодійюча складова розглядається як базисна з розподілом $\varrho_q^{kin-sh}(x^N; t)$, якій відповідає ланцюжок рівнянь ББГКІ для нерівноважних функцій розподілу частинок, наприклад, для моделі твердих сфер [36].

Застосований метод колективних змінних [47, 55, 56] дав можливість розрахувати у вищих наближеннях ніж гаусове як структурну функцію так і гідродинамічні швидкості колективних змінних. Зокрема, у наступному наближенні за гаусове, виходячи із (3.19),

гідродинамічні швидкості (3.17) будуть пропорційні $\bar{\rho}_{\mathbf{k}} \bar{\rho}_{\mathbf{k}'}$, $\bar{\rho}_{\mathbf{k}} \bar{\rho}_{\mathbf{k}'} \bar{\rho}_{\mathbf{k}''}$, а ядра переносу у рівнянні Фоккера-Планка будуть кореляційними функціями четвертого порядку за змінними $\bar{\rho}_{\mathbf{k}}$. Важливо зазначити, що у наближенні Гауса для $\tilde{W}^G(\mathbf{k}; t)$, $v_\rho(\mathbf{k}; t)$ рівняння Фоккера-Планка приводить до рівнянь переносу для $\langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \rangle^t$ за структурою як у випадку узагальненої дифузії, тільки усереднення здійснюється за допомогою $\varrho_L(x^N, \rho; t) = \varrho_q^{kin-hyd}(x^N; t) \frac{\hat{f}(\rho)}{W^G(\rho; t)}$. Запропонований підхід дає можливість вийти за рамки наближення Гауса для $\tilde{W}(\mathbf{k}; t)$, $v_\rho(\mathbf{k}; t)$, а отже і для ядер переносу у рівнянні Фоккера-Планка. Це дає можливість отримати систему рівнянь для $\langle \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \rangle^t$ нелінійного типу. Важливо зазначити, що кінетичне рівняння (2.22) [50, 51] містить узагальнений інтеграл типу Фоккера-Планка з узагальненими коефіцієнтами дифузії та тертя частинок у фазовому просторі $(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$, де область зміни $|\mathbf{r}|$ обмежена значеннями $|\mathbf{k}|_{hydr}^{-1}$, що відповідають колективним нелінійним гідродинамічним процесам. Це означає, що в областях обмежених $|\mathbf{k}|_{hydr}^{-1}$ процеси описуються узагальненими коефіцієнтами дифузії і тертя, а при малих $|\mathbf{k}|_{hydr}^{-1}$ описуються узагальненими коефіцієнтами у просторі колективних змінних. У наступних роботах ми будемо досліджувати рівняння переносу (2.22)–(2.24) у вищих наближеннях за флуктуаціями ніж гаусове.

Література

1. П. Резибуа, М. Де Ленер. *Классическая кинетическая теория жидкостей и газов*. (Мир, Москва, 1980).
2. J. Boon, S. Yip. *Molecular Hydrodynamics*. (McGraw-Hill Inc., New-York, 1980).
3. Г. Репке. *Неравновесная статистическая механика*. (Мир, Москва, 1990).
4. Ю.Л. Климонтович. *Турбулентное движение и структура хаоса: Новый подход к статистической теории открытых систем*. (Наука, Москва, 1990).
5. U. Balucani, M. Zoppi. *Dynamics of the Liquid State*. (Clarendon Press, Oxford, 1994).
6. R. Balescu. *Statistical dynamics Matter out of Equilibrium*. (World Scientific, London, 1997).
7. R. Zwanzig. *Nonequilibrium statistical mechanics*. (Oxford Univ. Press, New York, 2001).
8. Д.Н. Зубарев, В.Г. Морозов, Г. Рёпке. *Статистическая механика неравновесных процессов*, т. 1. (Физматлит, Москва, 2002).

9. Д.Н. Зубарев , В.Г. Морозов , Г. Рёпке. *Статистическая механика неравновесных процессов*, т. 2. (Физматлит, Москва, 2002).
10. G. Mazenko. *Nonequilibrium statistical mechanics*. (Wiley-VCH Verlag GmbH. Co. KGaA, Weinheim, 2006).
11. Ю.Л. Климонтович, Х. Вильгельсон, А.Г. Загородний, И.П. Якименко. *Статистическая теория плазменно-молекулярных ограниченных систем*. (Изд. МГУ, Москва, 1990).
12. Y.L. Klimontovich , D. Kremp , W.D Kraeft. *Advances in Chemistry and Physics*. (Wiley, New York, 2007).
13. Л.А. Булавін *Нейтронна діагностика рідкого стану речовини*. (Київ, 2012).
14. G. Röpke. *Nonequilibrium statistical thermodynamics*. (Verlag CmbH Co KGaA, Wiley - VCH, 2013).
15. M. Bonitz , J. Lopez , K. Becker , H. Thomsen. *Complex plasmas. Scientific Challenges and Technological Opportunities*. (Springer Series on Atomic, Optical and Plasma Physics, vol. 82, 2014).
16. S.V. Peletminskii, Yu.V. Slyusarenko, A.I. Sokolovsky. *Physica A*. **326**, 412 (2003).
17. S.O. Nikolayenko and Yu.V. Slyusarenko. *J. Math. Phys.* **50**, 083305 (2009).
18. O.Yu Slyusarenko, A.V. Chechkin, Yu.V. Slyusarenko. *J. Math. Phys.* **56**, 043302 (2015).
19. Y.A. Humenyuk, M.V. Tokarchuk. *J. Stat. Phys.* **142**, 1052 (2011).
20. K. Yoshida, T. Arimitsu. *J. Phys. A: Math. Theor.* **46**, 335501 (2013).
21. P. Mendoza-Mendez, L. Lopez-Flores, A. Vizcarra-Redon, L.F. Sanchez-Diaz, M. Medina-Noyola. *Physica A*. **394**, 1 (2014).
22. J.P. Boon, J.F. Lutsko, C. Lutsko. *Phys. Rev. E*. **85**, 0211126 (2012).
23. G.F. Mazenko. *Phys. Rev. E*. **81**, 061102 (2010).
24. G.F. Mazenko. *Phys. Rev. E*. **83**, 041125 (2011).
25. P. Kostrobij, R. Tokarchuk, M. Tokarchuk, V. Markiv. *Condens. Matter Phys.* **17**, 33005 (2014).
26. P.A. Hlushak, M.V. Tokarchuk. *Condens. Matter Phys.* **17**, 23606 (2014).
27. C.A.B. Silva, A.R. Vasconcellos, J.G. Ramos, R. Luzzi. *J. Stat. Phys.* **143**, 1020 (2011).
28. V.N. Tsyтович, U. de Andelis. *Phys. Plasmas*. **11**, 496 (2004).
29. A.I. Olemskoi. *Theory of structure transformations in non-equilibrium condensed matter*. Horizons in World Physics Series. Vol. 231. (New York, NOVA Science Publishers, 1999).
30. B. Markiv, R. Tokarchuk, P. Kostrobij, M. Tokarchuk. *Physica A*.

- 390, 785 (2011).
31. И.М. Мрыглюд, М.В. Токарчук. *Вопр. атом. науки и техн.* No. 3(24), 134 (1992).
32. I.M. Mryglod, I.P. Omelyan, M.V. Tokarchuk. *Mol. Phys.* **84**, 235 (1995).
33. B.B. Markiv, I.P. Omelyan, M.V. Tokarchuk. *Phys. Rev. E*. **82**, 041202 (2010).
34. Д.Н. Зубарев, В.Г. Морозов, И.П. Омелян, М.В. Токарчук. *ТМФ*. **96**, 325 (1993).
35. M.V. Tokarchuk, I.P. Omelyan, A.E. Kobryn. *Condens. Matter Phys.* **1**, No. 4(16), 687 (1998).
36. A.E. Kobryn, I.P. Omelyan, M.V. Tokarchuk. *J. Stat. Phys.* **92**, 973 (1998).
37. B. Markiv, I. Omelyan, M. Tokarchuk. *J. Stat. Phys.* **155**, 843 (2014).
38. B. Markiv, M. Tokarchuk. *Phys. Plasmas*. **21**, 023707 (2014).
39. J.R. Dorfman. *Physica A*. **106**, 77, (1981).
40. Ю.Л. Климонтович. *Теор. Мат. Физ.* **92**, 312 (1992).
41. Yu.L. Klimontovich. *Phys. Lett. A*. **170**, 434 (1992).
42. E.G.D. Cohen. *Physica A*. **194**, 229 (1993).
43. S.K. Schnyder, F. Hofling, T. Franosch, Th. Voigtmann. *J Phys.: Condens. Matter*. **23**, 234121 (2011).
44. T. Franosch. *J. Phys. A: Math. Theor.* **47**, 325004 (2014).
45. Д.Н. Зубарев, В.Г. Морозов. *Теор. Мат. Физ.* **60**, No 2, 270 (1984).
46. Д.Н. Зубарев, В.Г. Морозов, И.П. Омелян, М.В. Токарчук. *Теор. Мат. Физ.* **87**, No 1, 113 (1991).
47. A.E. Kobryn, V.G. Morozov, I.P. Omelyan, M.V. Tokarchuk. *Physica A*. **230**, 189 (1996).
48. Д.Н. Зубарев, В.Г. Морозов. *Неравновесные статистические ансамбли в кинетической теории и гидродинамики*. В кн. Научные труды Математического института им. В.А. Стеклова, 1989, том 191.
49. V.G. Morozov, A.E. Kobryn, M.V. Tokarchuk. *Condens. Matter Phys.* **4**, 117 (1994).
50. P. Hlushak, M. Tokarchuk. *Physica A*. **443**, 231 (2016).
51. I.R. Yukhnovskii, P.A. Hlushak, M.V. Tokarchuk. *Condens. Matter Phys.* **19**, 43705 (2016).
52. И.П. Юхновский, М.Ф. Головки. *Статистическая теория классических равновесных систем*. (Киев, Наукова думка, 1980).
53. Д.Н. Зубарев, А.М. Хазанов. *Теор. мат. физ.* **34**, № 1, 69 (1978).
54. K. Kawasaki. *Phase transition and critical phenomena*. **5A**, 165 (1976).
55. Д.Н. Зубарев. *ТМФ*. **53**, № 1, 93 (1982).

56. І.М. Ідзик, В.В. Ігнатюк, М.В. Токарчук. УФЖ, 41, 1017 (1996).
57. В.В. Ігнатюк, М.В. Токарчук. ТМФ, 108, № 3, 448 (1996).
58. V.G. Morozov. Physica A. 110, 201, (1982).
59. C. Rovelli, L. Smolin, Phys. Phys. D **52**, 5743 (1995).
60. B.W. Shore, *The Theory of Coherent Atomic Excitation* (Wiley, New York, 1990).

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 Alerting Services; INSPEC; "Referatyvnyj Zhurnal"; "Dzherelo".

EDITOR IN CHIEF: Ihor Yukhnovskii.

EDITORIAL BOARD: T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk (Associate Editor), *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Coventry*; R. Folk, *Linz*; L.E. Gonzalez, *Valladolid*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch (Associate Editor), *Lviv*; M. Holovko (Associate Editor), *Lviv*; O. Ivankiv (Managing Editor), *Lviv*; Ja. Ilnytskyi (Assistant Editor), *Lviv*; N. Jakse, *Grenoble*; W. Janke, *Leipzig*; J. Jedrzejewski, *Wroclaw*; Yu. Kalyuzhnyi, *Lviv*; R. Kenna, *Coventry*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; O. Lavrentovich, *Kent*; M. Lebovka, *Kyiv*; R. Lemanski, *Wroclaw*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Loktev, *Kyiv*; E. Lomba, *Madrid*; O. Makhanets, *Chernivtsi*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod (Associate Editor), *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; O. Pizio, *Mexico*; N. Plakida, *Dubna*; G. Ruocco, *Rome*; A. Seitsonen, *Zürich*; S. Sharapov, *Kyiv*; Ya. Shchur, *Lviv*; A. Shvaika (Associate Editor), *Lviv*; S. Sokołowski, *Lublin*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; J. Strečka, *Košice*; S. Thurner, *Vienna*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; V. Vlachy, *Ljubljana*; A. Zagorodny, *Kyiv*

CONTACT INFORMATION:

Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +38(032)2761978; Fax: +38(032)2761158
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>