І.Р. ЮХНОВСЬКИЙ,[1] М.В. ТОКАРЧУК,[1,2] П.А. ГЛУШАК[1]

[1] Інститут фізики конденсованих систем НАН України
(Вул. Свєнціцького, 1, Львів 79011)

[2] Національний університет "Львівська політехніка"
(Вул. Степана Бандери, 12, Львів 79013)

УДК 538.9, 538.93

МЕТОД КОЛЕКТИВНИХ ЗМІННИХ В ТЕОРІЇ НЕЛІНІЙНИХ ФЛУКТУАЦІЙ З УРАХУВАННЯМ КІНЕТИЧНИХ ПРОЦЕСІВ

Для узгодженого опису кінетики та гідродинаміки систем взаємодіючих частинок оптимізовано набір параметрів скороченого опису згідно з Боголюбовим, що передбачає залучення колективних змінних. При цьому розділяються внески від короткосяжних і далекосяжних взаємодій між частинками. Короткосяжні взаємодії (наприклад, модель твердих сфер) описуються в координатно-імпульсному просторі, а далекосяжні – у просторі колективних змінних. Короткосяжна складова розглядається як базисна. Використовуючи метод нерівноважного статистичного оператора Зубарєва, ми отримали систему рівнянь переносу для нерівноважної одночастинкової функції розподілу, нерівноважного середнього значення густини енергії взаємодії частинок та нерівноважної функції розподілу колективних змінних. Застосований метод колективних змінних дав можливість розрахувати у вищих наближеннях, ніж гаусове, як структурну функцію, так і гідродинамічні швидкості колективних змінних.

Ключові слова: проста рідина, нелінійні флуктуації, нерівноважний статистичний оператор, функція розподілу, рівняння Фоккера–Планка.

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 [1–29]. Нерівноважні стани таких систем далекі від рівноваги і тому важливими є дослідження, з одного боку, процесів встановлення стаціонарних станів із характерними часами життя, з іншого – процесів релаксації до вже відомих нерівноважних станів, зокрема, які описуються в рамках молекулярної гідродинаміки [2, 30–32] 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 [33–37] та врахування характерних короткосяжних та далекосяжних взаємодій між частинками систем.

Побудова кінетичних рівнянь з врахуванням нелінійних гідродинамічних флуктуацій [38–41] 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, 42, 43]. У роботах

[33, 44, 45] був запропонований узгоджений опис кінетичних та гідродинамічних процесів у густих газах і рідинах на основі методу нерівноважного статистичного оператора Зубарєва [8, 9]. Зокрема, цей підхід був застосований для отримання з ланцюжка рівнянь ББГКІ кінетичного рівняння ревізованої теорії Енскога [45, 46] для системи твердих сфер та кінетичного рівняння Енскога-Ландау для однокомпонентної системи заряджених твердих сфер. У роботі [33] були отримані немарковські рівняння переносу для нерівноважної одночастинкової функції розподілу та нерівноважного значення середньої потенціальної енергії взаємодії частинок. Пізніше [34,36] ці рівняння використовувались для досліджень часових кореляційних функцій та спектра колективних збуджень для слабо нерівноважних процесів у рідинах. Очевидно, підхід [33, 44, 45] може бути застосований для опису як слабо, так і сильно нерівноважних систем.

У той самий 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 функціонала розподілу гідродинамічних змінних – густин числа частинок, їх імпульсу та енергії. Ідея такого підходу була сформульована у роботах [47, 48]. Ми розвинули у [49, 50] даний підхід з використанням методу колективних змінних [51] 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 [49, 50], 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 далекосяжна частина потенціальної енергії взаємодії частинок. При цьому густини кінетичної енергії та короткосяжної 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 внески від короткосяжних і далекосяжних взаємодій між частинками. Це приведе до того, що короткосяжні взаємодії (наприклад, модель твердих сфер) описуватимуться в координатно-імпульсному просторі, а далекосяжні – у просторі колективних змінних. Більше того, короткосяжна складова розглядається як базисна, якій відповідає ланцюжок рівнянь ББГКІ для нерівноважних функцій розподілу, зокрема, у випадку моделі твердих сфер [35].

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 [49, 50] ми виберемо нерівноважну одночастинкову функцію розподілу $f_1(x;t) = \langle \hat{n}_1(x) \rangle^t$, нерівноважне середнє значення енергії взаємодії частинок $H^{\rm int}(\mathbf{r},t) = \langle \hat{H}^{\rm int}(\mathbf{r}) \rangle^t$ 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:

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

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

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 таким чином:

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

де

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

– 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 короткосяжну $\Phi^{\mathrm{sh}}(|\mathbf{r}_{lj}|)$ і далекосяжну $\Phi^{\mathrm{long}}(|\mathbf{r}_{lj}|)$ частини:

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

Відповідно нерівноважне значення густини потенціальної енергії взаємодіючих частинок матиме вигляд:

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

де $\nu(\mathbf{k})$ – фур'є-компонента далекосяжної 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 $\langle \hat{n}_1(x)\rangle^t$, $\langle \hat{H}^{\mathrm{int}}(\mathbf{r})\rangle^t$ 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

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

Для знаходження нерівноважної функції розподілу $\varrho(x^N; t)$ ми використаємо метод Зубарєва [48, 52], у якому загальний розв'язок рівняння Ліувілля з врахуванням процедури проектування може бути поданий у вигляді:

$$\varrho(x^N; t) = \varrho_q(x^N; t) - \int\limits_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' \, \mathrm{e}^{\epsilon(t'-t)} T_q(t, t') \times$$
$$\times \big(1 - P_q(t')\big), iL_N \varrho_q(x^N; t'), \tag{2.5}$$

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

$$\int \mathrm{d}\Gamma_N \varrho_q(x^N; t) = 1, \tag{2.6}$$

де

$$\mathrm{d}\Gamma_N = \frac{(\mathrm{d}x)^N}{N!} = \frac{(\mathrm{d}x_1, ..., \mathrm{d}x_N)}{N!}, \quad \mathrm{d}x = \mathrm{d}\mathbf{r}\mathrm{d}\mathbf{p}.$$

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

$$\varrho_q(x^N; t) = \exp\Big[-\Phi(t) - \int \mathrm{d}\mathbf{r}\beta(\mathbf{r}; t)\, \hat{H}^{\mathrm{int}}(\mathbf{r}) -$$
$$- \int \mathrm{d}x\gamma(x; t)\, \hat{n}_1(x) - \int \mathrm{d}\rho\, F(\rho; t) \hat{f}(\rho)\Big], \tag{2.7}$$

де $\mathrm{d}\rho = \prod_{\mathbf{k}} \mathrm{d}\rho_{\mathbf{k}}$, $\Phi(t)$ – функціонал Мас'є–Планка, який визначається із умови нормування релевантної функції розподілу

$$\Phi(t) = \ln \int \mathrm{d}\Gamma_N \exp\Big[-\int \mathrm{d}\mathbf{r}\beta(\mathbf{r}; t)\, \hat{H}^{\mathrm{int}}(\mathbf{r}) -$$
$$- \int \mathrm{d}x\gamma(x; t)\, \hat{n}_1(x) - \int \mathrm{d}\rho F(\rho; t) \hat{f}(\rho)\Big].$$

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

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

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

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

де

$$W(\rho;t) = \int d\Gamma_N\, e^{-\Phi(t)-\int d\mathbf{r}\beta(\mathbf{r};t)\hat H^{\mathrm{int}}(\mathbf{r})-\int dx\gamma(x;t)\hat n_1(x)} \times$$

$$\hat f(\rho) = \int d\Gamma_N \varrho_q^{\mathrm{kin-hyd}}(x^N;t)\hat f(\rho) \qquad (2.10)$$

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

$$\varrho_q^{\mathrm{kin-hyd}}(x^N;t) = \exp\Big\{-\Phi(t) - \\ - \int d\mathbf{r}\beta(\mathbf{r};t)\hat H^{\mathrm{int}}(\mathbf{r}) - \int dx\gamma(x;t)\hat n_1(x)\Big\}, \qquad (2.11)$$

яка була побудована у роботах [33, 34, 36] при узгодженому описі кінетичних та гідродинамічних процесів у системах взаємодіючих частинок. Релевантній функції розподілу (2.9) відповідає ентропія Гібса

$$S(t) = -\langle \ln\varrho_q(x^N;t)\rangle_q^t = \Phi(t) + \\ + \int d\mathbf{r}\beta(\mathbf{r};t)\langle\hat H^{\mathrm{int}}(\mathbf{r})\rangle^t + \int dx\gamma(x;t)\langle\hat n_1(x)\rangle^t + \\ + \int d\rho f(\rho;t)\ln\frac{f(\rho;t)}{W(\rho;t)}, \qquad (2.12)$$

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

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

$$P_q(t)\varrho' = \varrho_q(x^N;t)\int d\Gamma_N\varrho' + \int dx\frac{\partial\varrho_q(x^N;t)}{\partial\langle\hat n_1(x)\rangle^t} \times \\ \times\Big[\int d\Gamma_N\hat n_1(x)\varrho' - \langle\hat n_1(x)\rangle^t\int d\Gamma_N\varrho'\Big] + \\ + \int d\mathbf{r}\frac{\partial\varrho_q(x^N;t)}{\partial\langle\hat H^{\mathrm{int}}(\mathbf{r})\rangle^t}\Big[\int d\Gamma_N\hat H^{\mathrm{int}}(\mathbf{r})\varrho' - \\ - \langle\hat H^{\mathrm{int}}(\mathbf{r})\rangle^t\int d\Gamma_N\varrho'\Big] + \\ + \int d\rho\frac{\partial\varrho_q(x^N;t)}{\partial\big(\frac{f(\rho;t)}{W(\rho;t)}\big)}\frac{1}{W(\rho;t)}\Big[\int d\Gamma_N\hat f(\rho)\varrho' - \\ - f(a;t)\int d\Gamma_N\varrho'\Big] + \\ + \int dx\int d\rho\frac{\partial\varrho_q(x^N;t)}{\partial\big(\frac{f(\rho;t)}{W(\rho;t)}\big)}\frac{f(\rho;t)}{W(\rho;t)}\frac{\partial\ln W(\rho;t)}{\partial\langle\hat n_1(x)\rangle^t} \times \\ \times\Big[\int d\Gamma_N\hat n_1(x)\varrho' - \langle\hat n_1(x)\rangle^t\int d\Gamma_N\varrho'\Big] + \\ + \int d\mathbf{r}\int d\rho\frac{\partial\varrho_q(x^N;t)}{\partial\big(\frac{f(\rho;t)}{W(\rho;t)}\big)}\frac{f(\rho;t)}{W(\rho;t)}\frac{\partial\ln W(\rho;t)}{\partial\langle\hat H^{\mathrm{int}}(\mathbf{r})\rangle^t} \times \\ \times\Big[\int d\Gamma_N\hat H^{\mathrm{int}}(\mathbf{r})\varrho' - \langle\hat H^{\mathrm{int}}(\mathbf{r})\rangle^t\int d\Gamma_N\varrho'\Big]. \qquad (2.13)$$

Насамперед, ми розкриємо дію оператора Ліувілля на релевантну функцію розподілу (2.9). В результаті отримаємо

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

де $\dot{\hat n}_1(x) = iL_N\hat n_1(x)$, $\dot{\hat H}^{\mathrm{int}}(\mathbf{r}) = iL_N\hat H^{\mathrm{int}}(\mathbf{r})$. Використовуючи співвідношення

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

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

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

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

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

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

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

і є нормованою

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

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

$$\begin{aligned}\langle ...\rangle_q^t &= \int \mathrm{d}\rho \langle ...\rangle_L^t f(\rho;t),\\ \langle ...\rangle_L^t &= \int \mathrm{d}\Gamma_N ... \varrho_L(x^N,\rho;t).\end{aligned} \tag{2.19}$$

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

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

Підставляючи цей вираз у (2.5), ми отримуємо нерівноважну функцію розподілу

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

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

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

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

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

$$+\sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}}\int \mathrm{d}\rho' \int\limits_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' e^{\epsilon(t'-t)} \frac{\delta}{\delta\rho_{\mathbf{k}}}\phi_{\rho\rho}\times$$
$$\times\,(\mathbf{k},\mathbf{q},\rho,\rho';t,t')\,\frac{\delta}{\delta\rho_{\mathbf{q}}}\frac{f(\rho';t')}{W(\rho';t')}. \tag{2.24}$$

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

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

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

$$\phi_{\alpha\beta}(t,t') = \langle I_\alpha(t)T_q(t,t')I_\beta(t')\rangle_L^{t'},\ \alpha,\beta = \{n,H,\rho\}, \tag{2.26}$$

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

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

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

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

де $P(t)$ – узагальнений оператор Морі, що зв'язаний з проекційним оператором Кавасакі–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 таким чином:

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

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 незамкнутою 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 внесок середньої потенціальної енергії, то отримаємо узагальнене (немарковське) рівняння Фоккера–Планка для нерівноважної функції розподілу колективних змінних, яке може бути отримано методом проекційних операторів Цванцига чи методом Зубарєва [52]:

$$\frac{\partial}{\partial t}f(\rho;t) = \sum_{\mathbf{k}}\frac{\delta}{\delta\rho_{\mathbf{k}}}v_\rho(\mathbf{k};t)f(\rho;t) +$$
$$+\sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}}\int \mathrm{d}\rho' \int\limits_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' e^{\epsilon(t'-t)}\,\frac{\delta}{\delta\rho_{\mathbf{k}}}\times$$
$$\times\,\phi_{\rho\rho}\,(\mathbf{k},\mathbf{q},\rho,\rho';t,t')\,\frac{\delta}{\delta\rho_{\mathbf{q}}}\,\frac{f(\rho';t')}{W(\rho';t')}. \tag{2.31}$$

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 [49–51, 54, 55] 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 короткосяжним потенціалом $\Phi^{\mathrm{sh}}(|\mathbf{r}_{lj}|)$, зокрема, у випадку потенціалу твердих сфер, а за межами його дії деяким далекосяжним потенціалом $\Phi^{\mathrm{long}}(|\mathbf{r}_{lj}|)$. Відповідно, в операторі Ліувілля виділимо короткосяжні і далекосяжні взаємодії між частинками:

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

де iL_N^0 – оператор Ліувілля N невзаємодіючих частинок, $\hat{T}_N$ – оператор розсіяння системи, у випадку моделі твердих сфер [35, 38, 41, 45], iL_N^{long} –

потенціальна частина оператора Ліувілля з далекосяжним потенціалом взаємодії між частинками.

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

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

Використавши кумулянтний розклад [49, 50, 55] для $W(\rho;t)$, отримаємо:

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

де

$$\bar{\rho}_{\mathbf{k}} = \rho_{\mathbf{k}} - \langle\hat{\rho}_{\mathbf{k}}\rangle^t_{\rm kin-sh}, \quad d\omega = \Pi_{\mathbf{k}} d\omega^r_{\mathbf{k}} d\omega^s_{\mathbf{k}},$$

$$\omega_{\mathbf{k}} = \omega^r_{\mathbf{k}} - i\omega^s_{\mathbf{k}}, \omega_{-\mathbf{k}} = \omega^*_{\mathbf{k}},$$

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

Нерівноважні кумулянтні середні n-порядку

$$\mathfrak{M}_n(\mathbf{k}_1, \ldots, \mathbf{k}_n; t) = \langle\hat{\rho}_{\mathbf{k}_1}, \ldots, \hat{\rho}_{\mathbf{k}_n}\rangle^{t,c}_{\rm kin-sh} \tag{3.4}$$

розраховуються із релевантною функцією розподілу з короткосяжною міжчастинковою взаємодією:

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

де верхній індекс c означає кумулянтне середнє. Важливо зазначити, що у (3.2) ми розділили внески від короткосяжних та далекосяжних взаємодій. Короткосяжні взаємодії враховані у релевантному розподілі (3.5) (який можна розглядати як базисний), а далекосяжні взаємодії подані через колективні змінні

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

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

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

де

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

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 отримаємо наближення Гауса для $W(\rho;t)$:

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

де нерівноважне кумулянтне середнє густина-густина має вигляд

$$\mathfrak{M}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; t) = \langle\hat{\rho}_{\mathbf{k}_1}\hat{\rho}_{\mathbf{k}_2}\rangle^{t,c}_{\rm kin-sh} =$$
$$= \langle\hat{\rho}_{\mathbf{k}}\hat{\rho}_{-\mathbf{k}}\rangle^t_{\rm kin-sh} - \langle\hat{\rho}_{\mathbf{k}}\rangle^t_{\rm kin-sh}\langle\hat{\rho}_{-\mathbf{k}}\rangle^t_{\rm kin-sh}.$$

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

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

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

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

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

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

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

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

де

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

Структурна функція $W^G(\rho;t)$ у гаусовому наближенні дає можливість розрахунку повної структурної функції (3.2) у вищих наближеннях за гаусовими моментами [49, 50]:

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

де

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

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

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

$\langle\tilde{D}_n(\rho;t)\rangle_G$ – 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

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

і введемо функцію $W(\rho,\lambda;t)$

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

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 $W(\rho;t)$. Для цього перепишемо $W(\rho,\lambda;t)$ таким чином:

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

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

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

де

$$W_\beta(\rho,\lambda;t) = W_\beta(\rho;t)\exp\Big\{-i\pi\sum_{\mathbf{k}}\lambda_{\mathbf{k}}\dot{\hat{\rho}}_{\mathbf{k}}\Big\},$$

$$D_n(\omega;t)=\frac{(-i\pi)^n}{n!}\times$$
$$\times\sum_{\mathbf{k}_1,...,\mathbf{k}_n}\mathfrak{M}_n(\mathbf{k}_1,...,\mathbf{k}_n;t)\omega_{\mathbf{k}_1}...\omega_{\mathbf{k}_n},$$
$$D_n(\lambda;t)=\frac{(-i\pi)^n}{n!}\times$$
$$\times\sum_{\mathbf{k}_1,...,\mathbf{k}_n}\mathfrak{M}_n^{(1)}(\mathbf{k}_1,...,\mathbf{k}_n;t)\lambda_{\mathbf{k}_1}...\lambda_{\mathbf{k}_n},$$
$$D_n(\omega,\lambda;t)=\frac{(-i\pi)^n}{n!}\times$$
$$\times\sum_{\mathbf{k}_1,...,\mathbf{k}_n}\mathfrak{M}_n^{(2)}(\mathbf{k}_1,...,\mathbf{k}_n;t)\omega_{\mathbf{k}_1}...\omega_{\mathbf{k}_{n-1}}...\lambda_{\mathbf{k}_n},\quad(3.20)$$

у якому кумулянти мають таку структуру:

$$\mathfrak{M}_n(\mathbf{k}_1,...,\mathbf{k}_n;t)=\langle\hat\rho_{\mathbf{k}_1},...,\hat\rho_{\mathbf{k}_n}\rangle^{t,c}_{\text{kin-sh}},$$
$$\mathfrak{M}_n^{(1)}(\mathbf{k}_1,...,\mathbf{k}_n;t)=\langle\dot{\hat\rho}_{\mathbf{k}_1},...,\dot{\hat\rho}_{\mathbf{k}_n}\rangle^{t,c}_{\text{kin-sh}},$$
$$\mathfrak{M}_n^{(2)}(\mathbf{k}_1,...,\mathbf{k}_n;t)=n\big[(n-j)+(j-n+1)\delta_{...,l_{n-1}}\big]\times$$
$$\times\langle\hat\rho_{\mathbf{k}_1},...,\hat\rho_{\mathbf{k}_{n-j}},...,\dot{\hat\rho}_{\mathbf{k}_{n-j+1}},...,\dot{\hat\rho}_{\mathbf{k}_n}\rangle^{t,c}_{\text{kin-sh}}.$$

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

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

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 $\bar\omega_{\mathbf{k}}$, отримаємо:

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

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 таку структуру:

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

Оскільки $\dot{\hat{\mathbf{v}}}_{\mathbf{k}}=-i\mathbf{k}\,\hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{k}}$, де $\hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{k}}=\sum_{j=1}^N\mathbf{v}_je^{-i\mathbf{k}\,\mathbf{r}}$ – фур'є-компонента мікроскопічної густини швидкості частинок, то $\mathfrak{M}_2^{(2)}(\mathbf{k};t)=-i\mathbf{k}\,(\langle\hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{k}}\hat\rho_{-\mathbf{k}}\rangle^t_{\text{kin-sh}}-\langle\hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{k}}\rangle^t_{\text{kin-sh}}\langle\hat\rho_{-\mathbf{k}}\rangle^t_{\text{kin-sh}})$ є перехресною кореляційною функцією “швидкість–густина” для системи з короткосяжною взаємодією $\varrho_q^{\text{kin-sh}}(x^N;t)$. Далі ми розрахуємо гідродинамічні швидкості $v_\rho(\mathbf{k};t)$ у наближенні Гауса згідно з формулою:

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

Вираз містить два доданки. Перший зв'язаний із усередненою фур'є-компонентою густини швидкості частинок за розподілом з короткосяжною взаємодією $\varrho_q^{\text{kin-sh}}(x^N;t)$: $\langle\dot{\hat\rho}_{\mathbf{k}}\rangle^t_{\text{kin-sh}}=-i\mathbf{k}\,\langle\hat{\mathbf{v}}_{\mathbf{k}}\rangle^t_{\text{kin-sh}}$, 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 $\bar\rho_{\mathbf{k}}(t)=\rho_{\mathbf{k}}-\langle\hat\rho_{\mathbf{k}}\rangle^t_{\text{kin-sh}}$. 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 внесків флуктуацій в узагальнені коефіцієнти переносу та часові кореляційні функції [56, 57]. 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

$$W(\rho,\lambda;t)=W_\beta(\rho;t)\int d\omega\times$$
$$\times\exp\Big\{i\pi\sum_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{k}}\bar\rho_{\mathbf{k}}-i\pi\sum_{\mathbf{k}}\langle\dot{\hat\rho}_{\mathbf{k}}\rangle^{t,c}_{\text{kin-sh}}\lambda_{\mathbf{k}}-$$
$$-\frac{\pi^2}{2}\sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}\mathfrak{M}_2(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2;t)\omega_{\mathbf{k}_1}\omega_{\mathbf{k}_2}-$$
$$-\frac{\pi^2}{2}\sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}\mathfrak{M}_2^{(2)}(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2;t)\,\omega_{\mathbf{k}_1}\lambda_{\mathbf{k}_2}-$$

$$- \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{-i\pi}{3}\right) \sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3} \mathfrak{M}_3^{(2)}(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3;t)\omega_{\mathbf{k}_1}\,\omega_{\mathbf{k}_2}\,\lambda_{\mathbf{k}_3}\Big\}. \tag{3.25}$$

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:

$$W(\rho,\lambda;t) = W_\beta(\rho;t) \exp\Big\{- i\pi \sum_{\mathbf{k}} \langle\dot{\hat{\rho}}_{\mathbf{k}}\rangle^{t,c}_{\text{kin-sh}}\lambda_{\mathbf{k}}\Big\} \times$$

$$\times \int d\omega \exp\Big\{i\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} -$$
$$- \frac{\pi^2}{2} \sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} \bar{\mathfrak{M}}_2(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2;t)\omega_{\mathbf{k}_1}\,\omega_{\mathbf{k}_2}\Big\}, \tag{3.26}$$

якщо ввести позначення

$$\bar{\mathfrak{M}}_2(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2;t) = \mathfrak{M}_2(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2;t) +$$
$$+ \left(\frac{-i\pi}{3}\right) \sum_{\mathbf{k}_3} \mathfrak{M}_3^{(2)}(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3;t)\,\lambda_{\mathbf{k}_3}. \tag{3.27}$$

Далі, провівши процедуру діагоналізації відповідно до

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

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

$$W(\rho,\lambda;t) = W_\beta(\rho;t) \times$$
$$\times \exp\Big\{- i\pi \sum_{\mathbf{k}} \langle\dot{\hat{\rho}}_{\mathbf{k}}\rangle^{t}_{\text{kin-sh}}\lambda_{\mathbf{k}} -$$
$$- \frac{\pi^2}{2} \sum_{\mathbf{k}} E^{-1}(\mathbf{k},\lambda;t) b_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}} -$$
$$- \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \ln \pi \det \tilde{E}(\mathbf{k},\lambda;t)\Big\}. \tag{3.29}$$

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

$$v_\rho(\mathbf{k};t) = \frac{\partial}{\partial(-i\pi\lambda_{\mathbf{k}})} \ln W(\rho,\lambda;t)\Big|_{\lambda_{\mathbf{k}}=0} =$$
$$= \langle\dot{\hat{\rho}}_{\mathbf{k}}\rangle^{t}_{\text{kin-sh}} - \frac{\pi^2}{2} E^{-1}(\mathbf{k};t)\,\mathfrak{M}_2^{(2)}(\mathbf{k};t)\,\bar{\rho}_{\mathbf{k}} -$$
$$- \frac{\pi^2}{2} \frac{\partial}{\partial(-i\pi\lambda_{\mathbf{k}})} E^{-1}(\mathbf{k},\lambda;t)|_{\lambda_{\mathbf{k}}=0}\bar{\rho}_{\mathbf{k}}\,\bar{\rho}_{-\mathbf{k}} -$$
$$- \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial(-i\pi\lambda_{\mathbf{k}})} \ln \pi \det \tilde{E}(\mathbf{k},\lambda;t)|_{\lambda_{\mathbf{k}}=0}. \tag{3.30}$$

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:

$$W(\rho,\lambda;t) = W_\beta(\rho,\lambda;t)\,\bar{W}^G(\rho,\lambda;t) \times$$
$$\times \exp\Big\{\sum_{n\geq 3} \big(\langle\tilde{D}_n(\rho;t)\rangle_G + \langle\tilde{D}_n^{(2)}(\rho,\lambda;t)\rangle_G\big)\Big\}, \tag{3.31}$$

де

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

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

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

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

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

$\langle\tilde{D}_n(\rho;t)\rangle_G$, $\langle\tilde{D}_n^{(2)}(\rho;t)\rangle_G$ – 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 Зубарєва отримано систему рівнянь переносу для нерівноважної одночастинкової функції розподілу $f_1(x;t) = \langle \hat{n}_1(x)\rangle^t$, нерівноважного середнього значення густини енергії взаємодії частинок $H^{\rm int}(\mathbf{r},t) = \langle \hat{H}^{\rm int}(\mathbf{r})\rangle^t$ та нерівноважної функції розподілу колективних змінних $f(\rho;t) = \langle \delta(\hat{\rho}-\rho)\rangle^t$. Розділення внесків від короткосяжних і далекосяжних взаємодій між частинками привело до того, що короткосяжні взаємодії (наприклад, модель твердих сфер) описуються в координатно-імпульсному просторі, а далекосяжні – у просторі колективних змінних густини числа частинок. При цьому, короткосяжна складова розглядається як базисна з розподілом $\varrho_q^{\rm kin-sh}(x^N;t)$, якій відповідає ланцюжок рівнянь ББГКІ для нерівноважних функцій розподілу частинок, наприклад, для моделі твердих сфер [35]. Застосований метод колективних змінних [46, 54, 55] 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 $\varrho_L(x^N,\rho;t) = \varrho_q^{\rm kin-hyd}(x^N;t)\frac{\hat{f}(\rho)}{W^G(\rho;t)}$. 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) [49, 50] 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 $|\mathbf{k}|^{-1}_{\rm hydr}$, що відповідають колективним нелінійним гідродинамічним процесам. Це означає, що в областях, обмежених $|\mathbf{k}|^{-1}_{\rm hydr}$, процеси описуються узагальненими коефіцієнтами дифузії і тертя, а при малих $|\mathbf{k}|^{-1}_{\rm hydr}$ описуються узагальненими коефіцієнтами у просторі колективних змінних. У подальших роботах ми будемо досліджувати рівняння переносу (2.22)–(2.24) у вищих наближеннях за флуктуаціями, ніж гаусове.

1. P. Résibois, M. de Leener. *Classical Kinetic Theory of Fluids* (John Wiley & Sons, 1977).
2. J. Boon, S. Yip. *Molecular Hydrodynamics* (McGraw-Hill Inc., 1980).
3. G. Röpke. *Nonequilibrium Statistical Physics* (Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2013).
4. Ю.Л. Климонтович. *Турбулентное движение и сруктура хаоса: Новый подход к статистической теории открытых систем* (Наука, 1990).
5. U. Balucani, M. Zoppi. *Dynamics of the Liquid State* (Clarendon Press, 1994).
6. R. Balescu. *Statistical Dynamics: Matter out of Equilibrium* (World Scientific, 1997).
7. R. Zwanzig. *Nonequilibrium statistical mechanics* (Oxford Univ. Press, 2001).
8. D. Zubarev, V. Morozov, G. Röpke. *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Processes* (Akademie, 1996), Vol. 1.
9. D. Zubarev, V. Morozov, G. Röpke. *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Processes* (Akademie, 1996), Vol. 2.
10. G. Mazenko. *Nonequilibrium statistical mechanics* (Wiley-VCH Verlag GmbH. & Co. KGaA, 2006).
11. Ю.Л. Климонтович, Х. Вильгельсон, А.Г. Загородний, И.П. Якименко. *Статистическая теория плазменно-молекулярных ограниченных систем* (Изд. МГУ, 1990).
12. Y.L. Klimontovich, D. Kremp, W.D Kraeft. *Advances in Chemistry and Physics* (Wiley, 2007).
13. Л.А. Булавін. *Нейтронна діагностика рідкого стану речовини* (Київ, 2012).
14. M. Bonitz, J. Lopez, K. Becker, H. Thomsen. *Complex plasmas.* Scientific Challenges and Technological Opportunities (Springer, 2014), **82**.
15. S.V. Peletminskii, Yu.V. Slyusarenko, A.I. Sokolovsky. Kinetics and hydrodynamics of long-wave fluctuations under external random force. *Physica A* **326**, 412 (2003).
16. S.O. Nikolayenko, Yu.V. Slyusarenko. Microscopic theory of relaxation processes in systems of particles interacting with the hydrodynamic medium. *J. Math. Phys.* **50**, 083305 (2009).
17. O.Yu. Slyusarenko, A.V. Chechkin, Yu.V. Slyusarenko. The Bogolyubov–Born–Green–Kirkwood–Yvon hierarchy and Fokker-Planck equation for many-body dissipative randomly driven systems. *J. Math. Phys.* **56**, 043302 (2015).
18. Y.A. Humenyuk, M.V. Tokarchuk. Extension of hydrodynamic balance equations for simple fluids. *J. Stat. Phys.* **142**, 1052 (2011),
19. K. Yoshida, T. Arimitsu. Inertial-range structure of Gross–Pitaevskii turbulence within a spectral closure approximation. *J. Phys. A: Math. Theor.* **46**, 335501 (2013).

20. P. Mendoza-Mendez, L. Lopez-Flores, A. Vizcarra-Redon, L.F. Sanchez-Diaz, M. Medina-Noyola. Generalized Langevin equation for tracer diffusion in atomic liquids. *Physica A* **394**, 1 (2014).
21. J.P. Boon, J.F. Lutsko, C. Lutsko. Microscopic approach to nonlinear reaction-diffusion: The case of morphogen gradient formation. *Phys. Rev. E* **85**, 021126 (2012).
22. G.F. Mazenko. Fundamental theory of statistical particle dynamics. *Phys. Rev. E* **81**, 061102 (2010).
23. G.F. Mazenko. Smoluchowski dynamics and the ergodic-nonergodic transition. *Phys. Rev. E* **83**, 041125 (2011).
24. P. Kostrobij, R. Tokarchuk, M. Tokarchuk, V. Markiv. Zubarev nonequilibrium statistical operator method in Renyi statistics. Reaction-diffusion processes. *Condens. Matter Phys.* **17**, 33005 (2014).
25. P.A. Hlushak, M.V. Tokarchuk. Quantum transport equations for Bose systems taking into account nonlinear hydrodynamic processes. *Condens. Matter Phys.* **17**, 23606 (2014).
26. C.A.B. Silva, A.R. Vasconcellos, J.G. Ramos, R. Luzzi. Generalized kinetic equation for far-from-equilibrium many-body systems. *J. Stat. Phys.* **143**, 1020 (2011).
27. V.N. Tsytovich, U. de Andelis. Kinetic theory of dusty plasmas. V. The hydrodynamic equations. *Phys. Plasmas* **11**, 496 (2004).
28. A.I. Olemskoi. *Theory of structure transformations in nonequilibrium condensed matter*. Horizons in World Physics Series. Vol. 231. (NOVA Science Publishers, 1999).
29. B. Markiv, R. Tokarchuk, P. Kostrobij, M. Tokarchuk. Nonequilibrium statistical operator method in Renyi statistics. *Physica A* **390**, 785 (2011).
30. I.M. Mryglod, M.V. Tokarchuk. On statistical hydrodynamics of simple liquds. In: *Problems of Atomic Science and Technique. Series: Nuclear Physics Investigations (Theory and Experiment)* (Kharkov Physico-Technical Institute, 1992), **3** (24), p. 134.
31. I.M. Mryglod, I.P. Omelyan, M.V. Tokarchuk. Generalized collective modes for the Lennard–Jones fluid. *Mol. Phys.* **84**, 235 (1995).
32. B.B. Markiv, I.P. Omelyan, M.V. Tokarchuk. Relaxation to the state of molecular hydrodynamics in the generalized hydrodynamics of liquids. *Phys. Rev. E* **82**, 041202 (2010).
33. D.N. Zubarev, V.G. Morozov, I.P. Omelyan, M.V. Tokarchuk. Unification of the kinetic and hydrodynamic approaches in the theory of dense gases and liquids. *Theor. Math. Phys.* **96**, 997 (1993).
34. M.V. Tokarchuk, I.P. Omelyan, A.E. Kobryn. A consistent description of kinetics and hydrodynamics of systems of interacting particles by means of the nonequilibrium statistical operator method. *Condens. Matter Phys.* **1**, 687 (1998).
35. A.E. Kobryn, I.P. Omelyan, M.V. Tokarchuk. The modified group expansions for construction of solutions to the BBGKY hierarchy. *J. Stat. Phys.* **92**, 973 (1998).
36. B. Markiv, I. Omelyan, M. Tokarchuk. Consistent description of kinetics and hydrodynamics of weakly nonequilibrium processes in simple liquids. *J. Stat. Phys.* **155**, 843 (2014).
37. B. Markiv, M. Tokarchuk. Consistent description of kinetics and hydrodynamics of dusty plasma. *Phys. Plasmas* **21**, 023707 (2014).
38. J.R. Dorfman. Advances and challenges in the kinetic theory of gases. *Physica A* **106**, 77 (1981).
39. Yu.L. Klimontovich. On the need for and the possibility of a unified description of kinetic and hydrodynamic processes. *Theor. Math. Phys.* **92**, 909 (1992).
40. Yu.L. Klimontovich. The unified description of kinetic and hydrodynamic processes in gases and plasmas. *Phys. Lett. A* **170**, 434 (1992).
41. E.G.D. Cohen. Fifty years of kinetic theory. *Physica A* **194**, 229 (1993).
42. S.K. Schnyder, F. Hofling, T. Franosch, Th. Voigtmann. Long-wavelength anomalies in the asymptotic behavior of mode-coupling theory. *J Phys.: Condens. Matter.* **23**, 234121 (2011).
43. T. Franosch. Long-time limit of correlation functions. *J. Phys. A: Math. Theor.* **47**, 325004 (2014).
44. D.N. Zubarev, V.G. Morozov. Formulation of boundary conditions for the BBGKY hierarchy with allowance for local conservation laws. *Theor. Math. Phys.* **60**, 814 (1984).
45. D.N. Zubarev, V.G. Morozov, I.P. Omelyan, M.V. Tokarchuk. Kinetic equations for dense gases and liquids. *Theor. and Math. Phys.* **87**, 412 (1991).
46. A.E. Kobryn, V.G. Morozov, I.P. Omelyan, M.V. Tokarchuk. Enskog-Landau kinetic equation. Calculation of the transport coefficients for charged hard spheres. *Physica A* **230**, 189 (1996).
47. Д.Н. Зубарев, В.Г. Морозов. Неравновесные статистические ансамбли в кинетической теории и гидродинамике В кн. *Научные труды* (Математический институт им. В.А. Стеклова, 1989), Т. 191.
48. V.G. Morozov, A.E. Kobryn, M.V. Tokarchuk. Modified kinetic theory with consideration for slow hydrodynamical processes. *Condens. Matter Phys.* **4**, 117 (1994).
49. P. Hlushak, M. Tokarchuk. Chain of kinetic equations for the distribution functions of particles in simple liquid taking into account nonlinear hydrodynamic fluctuations. *Physica A* **443**, 231 (2016).
50. I.R. Yukhnovskii, P.A. Hlushak, M.V. Tokarchuk. BBGKY chain of kinetic equations, non-equilibrium statistical operator method and collective variable method in the statistical theory of non-equilibrium liquids. *Condens. Matter Phys.* **19**, 43705 (2016).
51. И.Р. Юхновский, М.Ф. Головко, *Статистическая теория классичеких равновесных систем* (Наукова думка, 1980).
52. D.N. Zubarev, A.M. Khazanov. Generalized Fokker–Planck equation and construction of projection operators for different methods of reduced description of nonequilibrium states. *Theor. Math. Phys.* **34**, 43 (1978).
53. K. Kawasaki. *In Phase Transition and Critical Phenomena.* Edited by C. Domb, M.S. Green (Acad. Press, 1976), Vol. 5A, p. 165.

54. D.N. Zubarev. Statistical thermodynammics of turbulent transport processes. *Theor. Math. Phys.* **53**, 1004 (1982).
55. I.M. Idzyk, V.V. Ighatyuk, M.V. Tokarchuk. Fokker–Planck equation for nonequilibrium distribution function of collective variables. I. Calculation of the statistical weight, entropy, hydrodynamic velocities. *Ukr. J. Phys.* **41**, 596 (1996).
56. M.V. Ignatiuk, V.V. Tokarchuk. Statistical theory of nonlinear hydrodynamic fluctuations in ionic systems. *Theor. Math. Phys.* **108**, 1208 (1996).
57. V.G. Morozov. Low-frequency correlation functions in case of nonlinear dynamics of fluctuations. *Physica A* **110**, 201 (1982).

Одержано 20.11.19

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

THE METHOD OF COLLECTIVE VARIABLES
IN THE THEORY OF NONLINEAR FLUCTUATIONS
WITH ACCOUNT FOR KINETIC PROCESSES

The set of parameters of the Bogolyubov reduced description, which includes collective variables, has been optimized for the consistent description of the kinetics and hydrodynamics of the systems of interacting particles. The contributions from short- and long-range interactions between the particles are separated. The short-range interactions (for example, the hard-sphere model) are described in the coordinate-momentum space, and the long-range ones in the space of collective variables. The short-range component is considered to be basic. Using the method of Zubarev non-equilibrium statistical operator, a system of transport equations for the non-equilibrium one-particle distribution function, the non-equilibrium average value for the density of particle interaction energy, and the non-equilibrium distribution function of collective variables are obtained. The applied method of collective variables allowed both the structural function and the hydrodynamic velocities of collective variables to be calculated in approximations higher than the Gaussian one.

Keywords: simple fluid, nonlinear fluctuations, non-equilibrium statistical operator, distribution function, Fokker–Planck equation.