

现代物理学丛·

非平衡态统计理论

曹裕平 郑久仁 著

科学出版社

现代物理学丛书

非平衡态统计理论

霍裕平 郑久仁 著

科学出版社

1987

内 容 简 介

本书系统地叙述了近年发展起来的非平衡态统计理论及其主要应用。内容包括：基本概念和理论方法、宏观体系的耗散性、输运方程、某些体系的输运理论、化学反应体系的热力学和统计理论、远离平衡的突变现象等。

本书可供从事统计、固体理论、等离子体、化学反应动力学等方面的研究工作者、大学教师及研究生参考。

现代物理学丛书

非平衡态统计理论

霍裕平 郑久仁 著

责任编辑 张邦固

科学出版社出版

北京朝阳门内大街 137 号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1987 年 9 月 第 一 版	开本：850×1168 1/32
1987 年 9 月 第一次印刷	印张：12 1/2
印数：精 1—1,100	插页：精 2
平 1—3,000	字数：330,000

统一书号：13031·3598

本社书号：5205·13—3

定 价：布脊精装：4.65 元
平 装：3.55 元

序

本书是由作者在中国科学技术大学研究生班、华中工学院研究生班、南京大学等单位讲课内容的基础上发展而来的。书中着重介绍了非平衡态统计理论的基本观点和方法。由于非平衡态统计理论几乎应用于所有的宏观物理领域，读者自然不会期望在本书中找到所有的应用。我们讨论了一些具体的系统，目的也只是为了进一步说明理论的基本含义。

由于非平衡态统计理论迅速发展只是最近三十年的事，很多主要的结果还分散在众多的研究论文中，因此，对问题的提法，内容的取舍，叙述和讨论的方式等等都不能不渗入很多作者个人的看法。我们力图比较统一地叙述非平衡态统计理论的要点，但还是会存在很多问题的，欢迎读者提出批评和建议。

在形成本书内容的过程中，我们曾经和国内统计物理界很多同志进行过活跃、有益的讨论，在序言中一一列举几乎是不可能的，我们只能在此一并致谢。

作者 1984.3.

目 录

第一章 引言——非平衡态统计物理概述	1
§ 1.1 宏观运动与微观运动.....	1
§ 1.2 宏观体系的基本特性.....	3
§ 1.3 非平衡态统计理论的发展概况及基本特点.....	7
§ 1.4 非平衡态统计理论的基本内容.....	11
第二章 非平衡态统计的基本理论方法	16
§ 2.1 马尔可夫过程理论.....	16
§ 2.2 刘维方程.....	33
§ 2.3 算子代数的基本概念.....	43
§ 2.4 投影算子.....	53
参考文献.....	61
✓ 第三章 稀薄气体中的输运过程	62
§ 3.1 玻耳兹曼方程及其基本性质.....	62
§ 3.2 线性输运方程.....	77
§ 3.3 线性玻耳兹曼方程.....	94
§ 3.4 玻耳兹曼方程的 Enskog-Chapman 展开	114
§ 3.5 非碰撞弛豫, Vlasov 方程的准线性近似	119
参考文献.....	125
第四章 趋向平衡	126
§ 4.1 有关趋向平衡的一些看法.....	126
§ 4.2 动力系统.....	135
§ 4.3 泡利 (Pauli) 方程	149
§ 4.4 趋向平衡的一般讨论, 耗散条件	157
§ 4.5 玻耳兹曼方程的微观基础.....	167
参考文献.....	174
✓ 第五章 线性输运过程的一般理论	175

§ 5.1 线性非平衡过程的宏观描述	17
§ 5.2 线性输运系数	18
§ 5.3 线性输运方程	198
§ 5.4 带电粒子在强磁场中的横向输运过程	201
§ 5.5 软模(纯耗散模)	210
§ 5.6 波对输运过程的影响	217
参考文献	222
第六章 开放系统弛豫过程的量子理论	223
§ 6.1 广义朗之万方程	223
§ 6.2 磁矩的进动和弛豫	227
§ 6.3 开放系统的广义 Master 方程	234
§ 6.4 算子分布函数及其福克-普朗克方程	241
§ 6.5 阻尼振子	252
§ 6.6 激光过程中的涨落现象	259
参考文献	272
第七章 化学反应体系, 远离平衡态的突变过程	273
§ 7.1 反应扩散方程及其定态解的稳定性	274
§ 7.2 热力学讨论	282
§ 7.3 自组织现象, 分支分析	287
§ 7.4 化学反应体系的生灭方程及粒子数涨落	298
§ 7.5 化学反应体系中涨落的时空关联	307
§ 7.6 非线性化学反应体系的临界行为	324
参考文献	341
附录	342
I 泛函知识	342
II 连续相变宏观理论概要	355
III 耗散系统的无规运动, 奇异吸引子	360
IV 布朗运动	371
V 分支理论简介	380
VI 化学反应体系的密度算子运动方程	387

第一章 引言——非平衡态统计物理概述

平衡态统计物理与非平衡态统计物理的基本差别，从直接意义理解，在于前者只讨论宏观体系的平衡态性质，而后者则主要分析非平衡体系演变过程中的行为、或者讨论在外界作用下体系所处定态的性质。但更本质的是，虽然两者都建立在宏观体系耗散性(趋向平衡或熵增加)的基础上，但前者却只涉及平衡态熵极大和熵始终不减少，而后者的讨论总要涉及非平衡状态熵的变化率、或者讨论耗散是如何与外力达到平衡的。定量地讨论体系耗散的强弱或熵增加率，是非平衡态统计的基本任务，而这也正是其困难之所在。

§ 1.1 宏观运动与微观运动

一、客观世界是分层次的。一般说来，每个层次中的体系都由大量的小体系构成，这些小体系属于下一个层次。每个层次还可能有不同的侧面。我们平常涉及的层次如图 1-1 所示。从一定

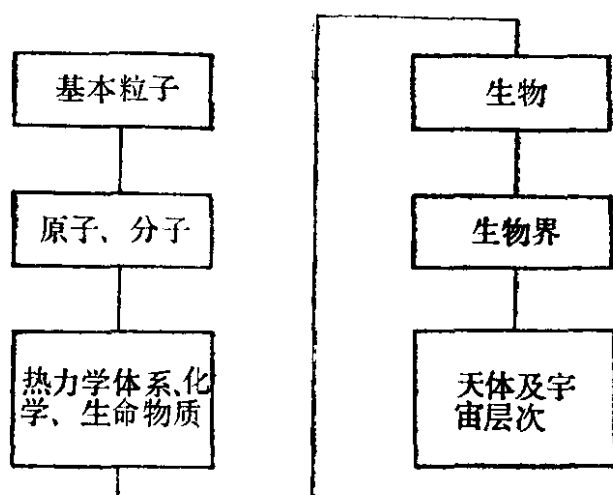


图 1-1 物质世界的层次

意义上讲，宏观与微观的含义是相对的，可以说这是指一个层次与组成它的下一个层次间的关系。由我们能直接感知的物体或体系——如一瓶气体、一块固体等等所构成的热力学体系，是通常所指的“宏观体系”，它们都包含着大量的原子、分子等所谓微观粒子。每一个层次中的体系都有自己独特的运动规律。宏观体系的运动规律是

力学：牛顿力学、流体力学、相对论力学；

热力学：平衡态热力学、非平衡态热力学；

化学：化学反应动力学；

电磁学：电动力学，等离子体动力学等；

…….

由大量这种“宏观物体”所构成的生物体、天体又都有自己的特性及运动规律。发展比较完全的湍流是一种特殊情况。在湍流产生前，整个流体可以看成是一个宏观体系。在阈值附近出现少数大旋涡。当湍流充分发展后，产生了许多小旋涡，由于每个小旋涡都包含大量的原子、分子，因此它们也是宏观体系。但这些旋涡彼此相互作用着，整个湍流就由大量的这种有相互作用的宏观体系构成，因此它应具有独特的运动规律，这类规律直至目前我们还了解得很不深入。湍流是在实验室范围内发生层次转变的最简单例子。从这个意义上讲，对湍流的研究将有可能促进许多类似问题的研究工作。

二、一般说来，宏观体系都是由大量微观体系构成的，它的运动规律应该能描述这些微观运动的总貌。因此，

1. 宏观体系的各种运动间存在着很多内在联系，如输运系数间的 Onsager 对称关系，涨落耗散定理等等。

2. 宏观运动规律与微观运动有密切联系。例如由于微观粒子间相互作用的不同，产生了不同的宏观运动形态。粒子间是静电相互作用的等离子体与粒子(分子)间是 Van der Waals 作用的气体性质完全不同。

所以，只有研究宏观运动与微观运动相互关系，或者说只有研

究宏观运动的微观基础,我们对客观世界的认识才能深化一步.唯象的热力学虽然给出了很多宏观现象或宏观量之间的联系,但如果没有几乎是同时发展起来的统计热力学,那么甚至对最基本的热力学第二定律,人们也很难弄清它的本质究竟是什么.因此一般来说,物理科学研究的目的应包括:

1. 探索各层次的运动规律: 例如对热力学体系,描述运动规律的学科如图 1-2 所示.

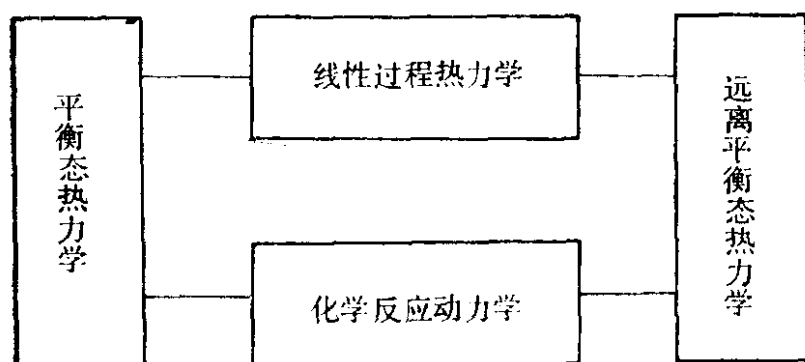


图 1-2 热力学探讨的运动规律

2. 探索各层次间的联系,特别是微观运动与宏观运动的联系.这是统计物理研究的主要内容.

本书主要限于讨论宏观体系的性质与原子、分子运动之间的关系.

§ 1.2 宏观体系的基本特性

相对于微观运动而言,宏观运动是由大量微观粒子的运动构成的,因而具有统计性.但是,统计性和涨落并非是宏观体系所特有的.而且在大多数情况下宏观体系的涨落也并不明显.宏观运动的根本特性是耗散性,它是统计性的后果,集中表现于热力学第二定律(热力学第一定律是守恒定律,是微观运动规律的直接延续).热力学第二定律一般可以表述为:对于封闭体系,在平衡态附近, $dS/dt \geq 0$,其中 S 是体系的熵,等号只在平衡态情况才成立;它也表明,封闭体系始终是趋向平衡的.对于一般的过程和开放体系, $dS = d_i S + d_e S$, $d_e S$ 是外界引起的熵改变, $d_i S$ 是内部

变化引起的熵改变.热力学第二定律断言: $d_i S \geq 0$. $d_i S \geq 0$ 表示体系自己总是消耗“负熵”. dS 可以小于、大于或等于零. $dS < 0$ 表示总熵 S 减少,但这一结果只能是由于外界供给了负熵 ($d_e S < 0$).

热力学第二定律对宏观体系是普遍适用的,随着对宏观体系研究的扩大和深入,愈来愈多的现象都被证明是满足热力学第二定律的,其中包括生命的基本过程.

耗散性的直接体现是宏观运动规律破坏了时间反演不变性.玻耳兹曼方程即为一例,该方程中的碰撞项不是时间反演不变的.应当强调指出,这是运动规律本身不遵守时间反演不变性,而不是边条件或初条件带来的结果.将宏观运动的不可逆性与推迟势或共振态(有一定寿命的束缚态)相比或联系起来讨论都是不够妥当的.实际上推迟势是预定了时间方向及遵守因果律的结果,共振态是长时间的渐近行为、与所取边条件有关,它们与宏观不可逆性有本质不同.推迟势与熵增加在时间方向上的一致是人为的(这是从理论上讲,实际上是因果律的结果),而不是一个规律.微观运动规律具有时间反演不变性,因此不可逆性的讨论就成为分析宏观与微观运动规律联系的关键,也是非平衡态理论的中心议题.

正确地分析耗散不仅具有认识论上的意义,而且对讨论和理解具体过程往往具有决定性的作用.我们熟知,热力学第二定律几乎是平衡态热力学的基石,具体分析第二类永动机的关键就在于确定耗散的存在并讨论其大小,这也就是讨论趋向平衡的过程.输运是我们经常碰到的现象.在定态输运过程中,外界输入的负熵(施加外力)为体系本身的熵增加所抵偿.输运过程也决定于耗散.因此如果对输运过程中的耗散处理不当,往往会得到错误的、甚至是极不合理的结果.根据长期的经验,对某些系统已有了比较可靠的处理途径.用玻耳兹曼方程处理稀薄中性气体即为一例.但还有不少系统的输运过程至今仍未弄清楚,有待进一步分析研究,等离子体中的反常输运就是一个突出的例子.人们面临的更复杂的过程,如化学和生物中的远离平衡的输运及趋向平衡的过

程,其关键可能更在于正确地处理耗散. 在耗散结构的讨论中,熵产生率是一个主要的特性函数.

宏观体系趋向平衡或时间不可逆的本质,一百年来一直未能得到根本解决. 晶格热导就是一个比较突出的例证. 最早,在薛定谔解得了一维简谐格子的运动问题后,人们分析了能量的分散过程,发现这实质上是一种类似于粒子飞散的过程,并不遵守傅里叶热导定律. 德拜指出,简谐格子的扰动是以本征振动(格波)方式传播的,只有存在由非简谐作用引起的声子散射时,才有可能出现有限的热导. 后来的计算表明,由于散射要满足能量守恒及准动量守恒,在固体中只有 U 过程才可能产生热阻. 但是最近有关非简谐晶格的动力学讨论及模拟计算又表明,具有某些非线性相互作用力的格子,晶格运动仍然是周期性的. 特别值得一提的是具有指数型相互作用 $[\exp(-bx_n) - \exp(-bx_{n+1})]$ 的一维格子的运动, Toda 得到了行波和孤立波解,而没有耗散. 因此严格地讲,如何理解晶格热导,至今仍然不能认为是完全清楚的.

存在突变是宏观体系的一个特点. 所谓突变是指在一定条件下,宏观体系的整体状态或对称性突然发生了根本变化. 最早看到的突变现象是平衡态相变:

气体 $\rightleftharpoons$ 液体 $\rightleftharpoons$ 固体, 第一类相变;

顺磁性 $\rightleftharpoons$ 铁磁性,
正常态 $\rightleftharpoons$ 超导态、超流态, } 第二类相变.

在相变点附近,体系的涨落和输运性质与通常情况有很大不同. 多年来,相变理论一直是统计物理中的重要分支,直至最近,连续相变(第二类相变)理论才有了较大进展.

在非平衡过程中,突变首先是在流体中观测到的. Benard 流最为典型,如图 1-3 所示.

1. 当温度 $T_1 > T_2$, 且 $\Delta T = T_1 - T_2$ 很小时,流体静止,呈典型的传热过程(热流向上). 随着 ΔT 增加,决定于装置的条件,会出现多次突变,一般情况可有两个临界点: ΔT_c 和 $\Delta T'_c$ ($\Delta T'_c > \Delta T_c$).

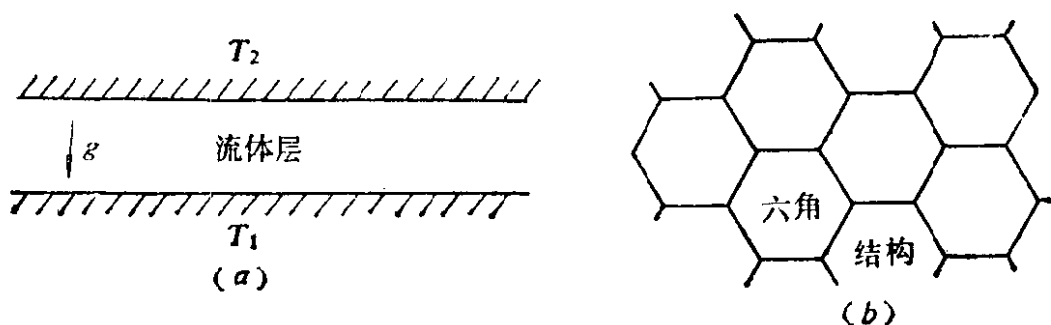


图 1-3 Benard 流. (a) 装置的纵断面; (b) 流体中出现的六角结构(横断面). g 是重力加速度, 温度 $T_1 > T_2$

2. 当 $\Delta T > \Delta T_c$, 且上下边界条件不同时, 流体呈现六角形结构. 在六角形的中心, 流体向上流动; 边缘流体向下.

3. 当 $\Delta T > \Delta T'_c$ 时, 先是出现周期振荡, 然后过渡到湍流.

近年在研究体系远离平衡态的行为中, 发现了愈来愈多的突变现象. 激光是一个最简单的例子. 在具有催化作用的化学反应过程中, 也发现, 某些情况下有时空结构. 这些结构的出现与生命过程的产生显然应该有密切联系.

突变现象伴随对称性的自发破坏, 由均匀体系自发地产生了结构. 这样的例子是很多的, 气体转变到液体时出现了短程有序(长程无序), 而液体转变到固体时则出现有序的晶格结构. 顺磁性分子的磁矩取向无规(空间各向均匀), 但当温度降到居里点以下, 分子磁矩则定向排列(取一定方向). 超导、超流态的出现破坏了规范对称性. 激光的出现也破坏了规范不变性, …… . 这种由较高对称性的状态过渡到较低对称性的状态, 或组织程度自动变高了的行为了, 也叫做“自组织”.

虽然产生突变的体系的性质可能很不相同, 但它们在突变点附近的行为却具有很多共同点, 如特大的涨落、相同的“临界指数”等等. Thom 的“突变理论”在一定程度上集中地反映了这种共性. 在对生命起源和化学过程以及对流体、等离子体和天体结构的研究中, 结构的自发出现都是极重要的, 因此突变现象的讨论在非平衡态统计理论中日益受到重视. 近年来, Prigogine 等人提

出了“耗散结构”的概念；Haken 等人提议建立新的学科——协同学，并造了一个新名词 *synergetics*，这些都突出了突变现象的共性与特点，吸引了人们的注意，成为新的研究方向。非平衡态随外力的变化情况，可大致概括如图 1-4。

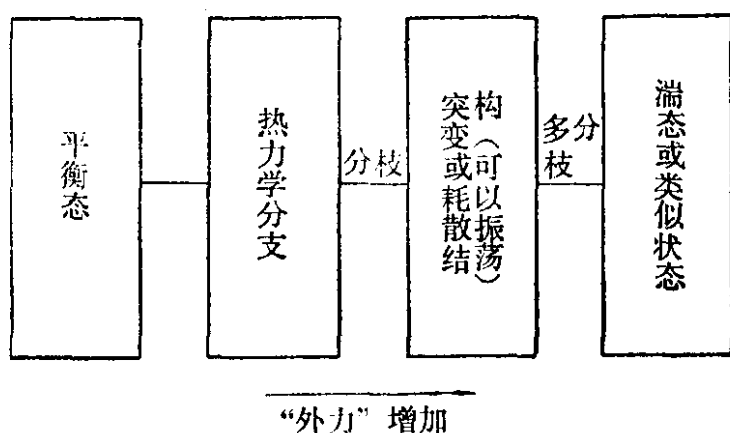


图 1-4 非平衡态分枝过程的概貌

在耗散体系中，突变现象与体系的耗散性有密切联系，也可以认为，结构的出现是力学运动（包括外界作用）与耗散竞争的结果。耗散性使体系尽可能处于最无序的状态，一般温度愈高耗散愈大。例如，在低温时铁磁体的力学运动占主导地位，铁磁体处于铁磁态，这是有序状态；但当温度升到居里点以上时，由于耗散起主要作用，铁磁体变为顺磁体。居里点是二者的平衡点。

因此可以说，非平衡态统计物理主要是定量地研究宏观体系的耗散性、研究耗散的本质以及讨论各种具体宏观体系非平衡行为的学科。

§ 1.3 非平衡态统计理论的发展概况及基本特点

一、非平衡态统计理论的发展，已经历了一百多年艰苦而缓慢的历程。

1. 十九世纪中期，Thomson、Clausius 等人几乎同时引入熵的概念，确立了热力学第二定律；玻耳兹曼、麦克斯韦发展气体分子运动论、建立和讨论了玻耳兹曼方程，并将玻耳兹曼方程与熵相联系起来，得到了 H 定理。

在这之后,逐步提出了有关耗散(不可逆性)的一些基本问题,这就是 Loschmidt 及 Zermelo 对玻耳兹曼方程及 H 定理的责难(不可逆性的本质)、热寂说(宇宙是否趋向平衡)的讨论等.

2. 在相当长的时间内,很多人试图直接从力学运动规律出发来讨论耗散,但成效甚少. 这种讨论主要集中于各态历经的理论,它虽然推动了动力体系理论的进展,但对统计物理起的作用不大. 为了说明不可逆性, Gibbs、Ehrenfest 等人提出了“粗粒 (coarse grain)”概念.

此后, Kubo 的输运系数理论概括了对输运过程、特别是对平衡态附近的线性过程的分析. 但是,非平衡态统计的主要工作还是应用玻耳兹曼方程去讨论各种体系的输运过程. 因此长时间以来,在统计物理的教科书中,非平衡态统计只包括用玻耳兹曼方程讨论稀薄气体的理论以及涨落的理论,所占篇幅甚少.

3. 有关耗散本质的研究,早期主要是试图从描述微观运动的刘维方程出发推导玻耳兹曼方程. 所谓“推导”,不是要(实际上是不可能)论证玻耳兹曼方程与刘维方程等价,而是要弄清楚须要在什么地方、引入什么样比较合理的统计假设. Боголюбов 的工作突出地区分了宏观和微观的时间尺度,并指出了要求“分子混沌 (molecular chaos)”的重要性.

Van-Hove 分析了多体系统的长时间渐近行为. 他在对体系的相互作用性质及初始条件作了一些假设并取热力学极限后,得到了密度矩阵所满足的 Master 方程,并证明了体系是趋向平衡的. 他的工作不仅深化了对耗散的了解,而且有可能用来处理不能为玻耳兹曼方程所描述的体系.

Prigogine 及其学派概括并发展了 Van-Hove 的工作.

目前我们对耗散性产生的条件已经有了一些了解,但耗散的本质仍不十分清楚.

4. 模型讨论: 曾经试图严格求解一些简单模型,并在极限情况下得出输运方程的解. 但由于模型过于简单,取极限过程在某种程度上又等价于统计假设,目前还很难得到确切的结论.

5. 对非平衡突变的研究, 发现在阈值附近的行为和相变很类似。

Prigogine 等提出耗散结构的概念及有关的热力学理论, 讨论了远离平衡的定态突变, 指出了对称性的自发破坏和自然界自发出现有序是相联系的。

二、非平衡态统计物理的基本特点是, 由微观粒子的运动规律出发讨论宏观体系的运动。在这里, 微观运动规律是已知的, 或者认为是已知的, 例如取为经典力学或量子力学运动规律。

宏观体系与一般力学或量子力学体系(如原子、分子等)最直接的差别是, 它们的微观自由度充分大, 可以认为趋向无穷。因此正常的研究步骤应该是在引入各种“统计假设”以前, 首先讨论无限自由度体系力学运动的基本规律。但是对无限自由度力学体系的运动, 目前尚无一般解法, 甚至对其解的性质也了解很少。因此尚无法肯定, 宏观体系的性质是否完全是自由度充分多所引起、是否需要引入新的规律。但已经可以肯定, 无限自由度体系的运动与有限自由度体系的运动有本质不同。

1. 描述无限自由度力学体系的可能的代数框架是 C^* 代数理论。根据这一理论, 力学体系的力学量全体构成 C^* 代数。对无限自由度体系, C^* 代数可以有多个不等价表示(不等价的 Hilbert 空间), 而有限体系则只有唯一的一个不等价表示(普通量子力学体系的状态空间)。

2. 解多体系统的运动, 经常采用的方法是自洽场近似。其基本精神是, 考虑少数几个粒子在其它粒子平均作用下的运动。到底取几个粒子以及自洽场如何取, 都要根据具体问题以及对现象本质的认识而定。例如 BCS 超导理论就是从两个电子可以通过交换声子在费密面上形成束缚态(Cooper 对)的概念出发, 将多体问题化为二体问题用变分法求解。在自洽场近似中, 每个(或每对)粒子都被看成是在相似的自洽场中运动。当体系的自由度充分多时, 边界效应可以忽略。描述多体运动的刘维方程是线性的, 在取自洽场近似以后, 成为少自由度问题, 粒子运动方程一般是非线性

的。已经知道,非线性方程有分支现象,在一定参数范围内存在多个解;虽然多个解的集合作为一个整体满足对称性要求,但就单个解而言,则可能破坏了一定的对称性。大量经验表明,如果自治场取的合适,很多问题的自治场解至少定性地接近于多体解。

3. 在讨论相变的过程中,曾对一些简单模型作过严格计算。结果表明,对一定类型的相互作用,只有取热力学极限后才出现相变。取热力学极限是指体积 $V \rightarrow \infty$, 粒子数 $N \rightarrow \infty$, 密度 N/V 保持有限。近年来在讨论不可逆性时,虽然不同的作者曾引入过一些各不相同的假设,但都只当取热力学极限并限于讨论(微观)长时间渐近解时,才能产生不可逆性。

除了统计物理,量子场论也讨论无限自由度的体系。但宏观体系是物理学研究得最直接、最广泛也最深入的层次。各有关领域中丰富的现象以及对它们的讨论,为非平衡态统计理论的发展提供了坚实的基础和多方面的启示,促进了课题的提出,启发了分析的途径,检验了理论的预见等等。例如有关突变及自发对称性破缺的研究,就是在相变、激光、流体不稳定性以及催化反应中的时空结构等多方面研究的促进下开展的。后来场论中也引入了“自发破缺”的概念。

三、近年来,非平衡态统计已成为统计物理中最活跃的前沿,并与诸如等离子体物理、固体物理、化学反应动力学以及生化基本过程等等愈来愈多的领域发生密切关联,受到了各方面的重视。但是,由于目前它的主要内容基本上分散在众多的文献中,因而虽然对一些基本理论观点和处理问题的途径都曾作过相当详细的讨论,并可以说已经大体上形成了一个理论体系,但尚未能普遍地为各方面的理论工作者所接受。出现了很多人在不同的领域中,用不同的方法重复讨论着同样结论的现象。在统计物理的综述和一般教科书中,非平衡态统计还未占有应得的篇幅。

在本书中,我们试图统一地、比较协调地叙述非平衡态统计理论的基本内容:它所要解决的问题,主要的理论概念,处理问题的途径,重要的结果,等等。着手写这本书,我们必须事先回答以下问

题:

1. 非平衡态统计要解决的主要问题是什么?
2. 已经得到了哪些主要的、我们应该叙述的结果?
3. 应选择什么理论工具来概述非平衡态统计的主要内容?

对这些问题的回答,当然不能不在一定程度上反映着我们的基本观点,甚至部分地反映着我们的偏好。这是要事先声明的。

§ 1.4 非平衡态统计理论的基本内容

一、非平衡态统计物理的基本目的应该是从微观运动规律出发,讨论宏观非平衡体系的变化及运动性质。如前所述,宏观体系变化及运动的基本特性是耗散;也就是说,除满足一些包括“外力”作用的一般力学运动规律外,宏观体系的运动主要由耗散决定。例如对于流体运动,考虑到外力作用的一般力学运动规律为理想流体的欧勒方程;引入扩散、热传导及粘滞等耗散项后,所得到的宏观运动规律是粘滞流体的 Navier-Stokes 方程。著名的雷诺数实际上就是标志耗散重要程度的一个参数。因此可以认为,非平衡态统计理论的中心课题是定量地讨论耗散性以及与之相联系的宏观突变现象(自发对称性破缺),其中包括趋向平衡的微观基础、体系涨落的特性、正确耗散系数的获得以及具有一定耗散性质的体系的宏观行为等等。这里“定量”一词是强调要给出宏观体系耗散的定量表述。如果说在平衡态统计中要计算的特性函数是熵,那么在非平衡态统计中要计算的则是熵产生率。

我们知道,多体系统动力行为是很复杂的,曾经发展了各种不同的理论方法来处理它。基本问题是如何将宏观物理量(或实验观测测量)与微观动力学方程(刘维方程)联系起来。Green 函数方法就是其中之一,它将刘维方程写成 Green 函数方程组(其中单体及二体 Green 函数是直接和宏观观测测量相联系的),并发展了一些近似解法(如无穷图形求和、切断近似等等)。在非平衡态统计物理中,人们当然也需要从微观运动方程出发,并使之与宏观量相联系。但更主要的是如何从合适的动力学描述出发,引入统计假设