В. В. Козлов

АНСАМБЛИ ГИББСА И НЕРАВНОВЕСНАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА

Институт Компьютерных Исследований
R&C Dynamics

Москва ♦ Ижевск

2008

УДК 531.19

Козлов В. В.
Ансамбли Гиббса и неравновесная статистическая механика. — Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2008. — 204 с.

В рамках теории ансамблей Гиббса развивается последовательная неравновесная статистическая механика. В ее основе лежит идея слабых пределов решений уравнения Лиувилля при неограниченном возрастании времени. С ее помощью естественным образом решается задача о переходе к макроописанию, когда основное внимание сосредоточено на изучении эволюции средних значений (математических ожиданий) динамических величин. Этот подход отличается от традиционных подходов к проблеме необратимости, поскольку равновесные состояния динамических систем в прошлом и будущем совпадают. Результаты общего характера применяются к решению конкретных задач классической статистической механики.

Книга предназначена для математиков, механиков и физиков, интересующихся статистической механикой и вопросами обоснования термодинамики.

ISBN 978-5-93972-645-0

http://shop.rcd.ru
http://ics.org.ru

Оглавление

«Среди самых интересных проблем математической физики особое место следует отвести проблемам, связанным с кинетической теорией газа.

Многое уже сделано для решения, но многое еще остается сделать. Эта теория представляет вечный парадокс. Мы имеем обратимость в предпосылках и необратимость в следствиях, и между ними — пропасть».

А. Пуанкаре «Настоящее и будущее математической физики.»

Введение

Статистическая механика — это механика, обогащенная вероятностными представлениями. Основная задача неравновесной статистической механики — анализ механизма необратимого стремления системы к состоянию термодинамического равновесия. Неравновесная статистическая механика была предметом классических работ Больцмана и Гиббса. Предложенные ими подходы существенно отличаются друг от друга.

Больцман исследовал статистические свойства системы сталкивающихся частиц в обычном трехмерном пространстве, вывел ставшее знаменитым кинетическое уравнение для плотности распределения по скоростям и координатам (в μ-пространстве) и показал, что в общем случае решения этого уравнения стремятся при $t \to +\infty$ к распределению Максвелла. Возникающий при таком подходе парадокс обратимости Лошмидта объясняется, в частности, предположением Больцмана о статической независимости состояний частиц *перед* ударами. Если принять статистическую независимость частиц *после* ударов, то эволюция сменит свое направление на обратное. По сути, метод Больцмана использует общую концепцию марковских случайных процессов, где направление эволюции («стрела времени») задано уже с самого начала. Это замечание особенно отчетливо проявляется при анализе упрощенных моделей (урновая модель Эренфестов, круговая модель Каца). Любопытно отметить, что задолго до работ Т. и П. Эренфестов сам А. А. Марков подробно изучал урновые модели как пример дискретных марковских процессов.

Таким образом, кинетическое уравнение Больцмана является *приближенным*, но в случае разряженных газов в определенных временных диапазонах оно качественно верно описывает эволюцию системы. Это уравнение является общепринятой основой для численного моделирования кинетики взаимодействующих частиц.

Подход Гиббса основан на изучении вероятностных распределений в фазовом пространстве системы взаимодействующих частиц (Г-пространство). Изменением со временем этих распределений (ансамблей Гиббса) управляет *обратимое* уравнение Лиувилля. Гиббс пытался доказать, что с течением времени любое такое распределение стремится в каком-то смысле к микроканоническому, когда плотность зависит только от энергии. Намеченные им

пути решения этой задачи не привели к ощутимым результатам. Одна из причин упирается в содержательные проблемы эргодической теории (некоторые из них не решены и по сей день), а другая — в *точное определение* приближения системы к состоянию статистического (теплового) равновесия.

Вот один пример возникающих на этом пути трудностей. Как заметил сам Гиббс, статистическая энтропия

$$-\int \rho_t \ln \rho_t \, d\mu \qquad (0.1)$$

(здесь ρ_t — плотность распределения — решение уравнения Лиувилля, $d\mu$ — инвариантная мера), вопреки ожиданию, не меняется со временем. Поэтому Гиббс предложил заменить ее *грубой* («физической») энтропией, усреднив плотность ρ_t по ячейкам фиксированного разбиения фазового пространства, и пытался доказать, что грубая энтропия уже возрастает. Однако, несмотря на плодотворность самой идеи, его попытка оказалась неудачной: грубая энтропия возрастает не всегда (не говоря уже об отсутствии монотонного возрастания). Кстати сказать, эта проблема тесно связана с возможностью корректного определения энтропии в произвольном неравновесном состоянии системы. Интеграл (0.1) часто называют информационной энтропией. Однако надо иметь в виду, что роль этой величины в теории информации была осознана позже К. Шенноном под влиянием идей Гиббса.

Современное понимание классической неравновесной статистической механики основывается на теории цепочек Н. Н. Боголюбова (теория Боголюбова — Борна — Грина — Кирквуда — Ивона). Ее исходный пункт — уравнение Лиувилля для гамильтоновой системы, описывающей динамику N взаимодействующих частиц (как в теории ансамблей Гиббса). После усреднения по координатам и скоростям группы частиц возникает цепочка зацепляющихся уравнений для s-частичных функций распределения ($1 \leqslant s \leqslant N$). В конце концов для первой функции распределения (когда $s = 1$) выводится уравнение больцмановского типа с *однонаправленной* эволюцией. Эта теория считается неоспоримой вершиной неравновесной статистической механики, однако и к ней применимо высказывание Пуанкаре: сохраняется пропасть между обратимостью в предпосылках и необратимостью в следствиях. Мост между обратимостью и необратимостью составляют *дополнительные* предположения, два из которых имеют ключевое значение. Во-первых, считается, что на кинетической стадии эволюции функции распределения высших порядков зависят от времени только через функциональную зависимость от *первой* функции распределения, а во-вторых, что в отдаленном прошлом имел место «молекулярный хаос»: состояния отдельных частиц были статистически независимыми. Эти гипотезы, конечно, не самоочевидны и требуют дополнительного анализа. Согласно Пуанкаре, в кинетической теории газа остается еще много темных мест, к которым нужно возвращаться и, безусловно, не один раз.

Основная цель настоящей работы — развить последовательную статистическую механику, опираясь *исключительно* на теорию ансамблей Гиббса. Мы даем строгое определение статистического равновесия динамической системы с инвариантной мерой, основанное на слабой сходимости вероятностных мер. Это позволяет исследовать задачу о необратимом стремлении гамильтоновой системы к состоянию статистического равновесия, развивая и несколько модифицируя эргодическую теорему. Одна из конечных целей — установить закон распределения Максвелла для частиц газа Больцмана — Гиббса, не прибегая к дополнительным предположениям физического характера. Ансамбль Гиббса описывает эволюцию бесстолкновительной сплошной среды в многомерном искривленном фазовом пространстве. Однако эти же методы позволяют продвинуться в анализе стабилизации решений нелинейного уравнения Власова, описывающего кинетику континуума взаимодействующих частиц.

Не следует думать, что предложенный подход лишь по форме отличается, скажем, от теории цепочек Боголюбова. Характерное отличие, например, состоит в том, что в нашем подходе система *необратимо* стремится к *одному и тому же* состоянию статистического равновесия как при $t \to +\infty$, так и при $t \to -\infty$. Тем самым сохраняется обратимость в следствиях и снимается парадокс Лошмидта.

Основные моменты нового подхода изложены в книге автора «Тепловое равновесие по Гиббсу и Пуанкаре» (2002 г.). Однако здесь основной акцент делается на изучение неравновесного случая. Кроме того, излагаются результаты совсем недавних исследований на эту тему. Наш текст, как правило, не содержит подробных доказательств. Однако все утверждения точно сформулированы и даны необходимые ссылки.

Автору много дало изучение статьи А. Пуанкаре «Замечания о кинетической теории газов» (1906 г.). Хотя эта работа известна (достаточно упомянуть, что она переведена на русский язык), но не понята и поэтому не востребована. В статье Пуанкаре содержатся новые идеи (зачастую не выделенные и не сформулированные явно), осмысление и развитие которых могло бы привести к иному облику неравновесной статистической механики. Но этого, к сожалению, не произошло. Анализ причин и упущенных возможностей — тема отдельного исследования. Нашу работу можно рассматривать также как расширенный комментарий замечательной работы Анри Пуанкаре.

Автор дружески благодарит С. В. Болотина, В. В. Веденяпина, И. В. Воловича, В. А. Зорича, О. Г. Смолянова и Д. В. Трещева за полезные обсуждения.

§ 1. Ансамбли Гиббса и тепловое равновесие

1. В основе неравновесной статистической механики лежит теория ансамблей Гиббса. Для приложений к термодинамике существенное значение имеют гамильтоновы системы. Однако, как подчеркивал сам Гиббс, его подход применим к любым динамическим системам с инвариантной мерой.

Пусть $\Gamma = \{x\}(x = (x_1, \ldots, x_m))$ — фазовое пространство динамической системы

$$\dot{x}_j = v_j(x_1, \ldots, x_m), \quad 1 \leqslant j \leqslant m, \tag{1.1}$$

фазовый поток которой $\{g_v^t\}$ (или просто $\{g^t\}$) сохраняет меру $d\mu = \lambda(x)d^n x$ ($d^n x = dx_1 \ldots dx_m$ — «элемент объема»). Будем считать сначала, что плотность λ этой меры — гладкая положительная функция на Γ. По теореме Мозера [1] две такие конечные меры $d\mu_1 = \lambda_1 d^n x$ и $d\mu_2 = \lambda_2 d^n x$ эквивалентны (переводятся друг в друга диффеоморфизмом Γ) тогда и только тогда, когда

$$\int\limits_\Gamma d\mu_1 = \int\limits_\Gamma d\mu_2.$$

Можно считать, что локальные координаты $x_1, \ldots, x_m$ на Γ выбраны таким образом, что $\lambda(x) = \mathrm{const}$. В этих координатах дивергенция векторного поля $v = (v_1, \ldots, v_m)$ равна нулю:

$$\sum \frac{\partial v_j}{\partial x_j} = 0. \tag{1.2}$$

Иногда координаты на Γ можно задать в целом. Например, если Γесть прямое произведение k-мерного тора и $(m-k)$-мерного линейного пространства ($\Gamma = \mathbb{T}^k \times \mathbb{R}^{m-k}$), то в качестве глобальных координат можно взять k угловых и $m-k$ линейных переменных.

Для гамильтоновых систем фазовое пространство Γ обычно совпадает с T^*M — пространством кокасательного расслоения n-мерного конфигурационного пространства M (при этом, конечно, $m = 2n$), уравнения (1.1) гамильтоновы

$$\dot{x}_i = \frac{\partial H}{\partial y_i}, \quad \dot{y}_i = -\frac{\partial H}{\partial x_i}; \quad 1 \leqslant i \leqslant n, \tag{1.3}$$

с не зависящей от времени функцией Гамильтона $H(x,y)$, а мера $d\mu$ — это инвариантная *мера Лиувилля*: $d\mu = d^n x d^n y$.

Согласно Гиббсу, на Γ вводится, вообще говоря, нестационарная вероятностная мера

$$d\nu_t = \rho_t(x) d\mu,$$

которая переносится потоком $\{g^t\}$ («вморожена» в этот поток). Если $d\mu = d^m x$, то плотность $\rho = \rho_t(x) (= \rho(x,t))$ удовлетворяет *уравнению Лиувилля*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho v) = 0.$$

Ввиду условия (1.2) плотность ρ — первый интеграл системы (1.1). Следовательно:

$$\rho_t(x) = \rho_0(g^{-t}(x)), \tag{1.4}$$

где ρ_0 — значение плотности в начальный момент времени $t = 0$.

Если ρ_0 — гладкая функция на фазовом пространстве, то формула (1.4) показывает, что плотность $\rho_t(x)$ гладко зависит от фазовых переменных и времени и удовлетворяет дифференциальному уравнению Лиувилля. Однако формула (1.4) позволяет определить негладкие (и даже разрывные) обобщенные решения уравнения Лиувилля. Например, если ρ_0 — суммируемая функция (из класса $L_1(\Gamma, d\mu)$), то $\rho_t \in L_1$ при всех значениях времени t.

Ансамбль Гиббса — это континуум одинаковых систем, распределенных в фазовом пространстве Γ с плотностью вероятностей ρ_t. Этот ансамбль можно рассматривать как сплошную среду, состоящую из невзаимодействующих частиц.

Ясно, что

$$\int\limits_{\Gamma} d\nu_t = 1.$$

Это означает, что пребывание системы в каком-то состоянии есть достоверное событие.

2. В дальнейшем важную роль играет простая

Теорема 1. *Пусть* $f_t(x)$ *— первый интеграл системы* (1.1). *Тогда*

$$J(t) = \int\limits_{\Gamma} f_t d\mu = \mathrm{const}.$$

Это утверждение содержательно, если интеграл J конечен. Укажем два следствия.

Следствие 1. *Если F — измеримая функция одного переменного, то*

$$\int_\Gamma F(\rho_t)d\mu = const.$$

Именно в таком виде теорема 1 сформулирована у Пуанкаре [2]. В частности, *информационная энтропия* (или *энтропия Гиббса*)

$$S_t = -\int_\Gamma \rho_t \ln \rho_t d\mu \tag{1.5}$$

не зависит от времени. Этот важный факт был известен еще Гиббсу [3].

Следствие 2. *Если* (1.1) *— гамильтонова система, то средняя энергия*

$$\int_\Gamma H\rho_t d\mu \tag{1.6}$$

не меняется со временем.

Теорема 1 доказывается совсем просто. Согласно (1.4),

$$f_t(x) = f_0(g^{-t}(x)).$$

Тогда

$$J(t) = \int_\Gamma f_0(g^{-t}(x))d\mu.$$

Рассмотрим диффеоморфизм $x \mapsto z$, задаваемый формулой $z = g^{-t}(x)$. Поскольку он сохраняет меру $d\mu$, то

$$J(t) = \int_\Gamma f_0(z)d\mu = J(0).$$

3. Что такое *тепловое (статистическое) равновесие* в теории ансамблей Гиббса и всегда ли система стремится к равновесному состоянию? Эти вопросы, конечно, имеют фундаментальное значение для статистической механики.

Было бы естественным считать, что предельное состояние теплового равновесия описывается стационарной плотностью распределения вероятностей

$$\overline{\rho}(x) = \lim_{t\to\infty} \rho_t(x). \tag{1.7}$$

Однако, как заметил сам Гиббс ([3], гл. XII), этот предел в обычном смысле почти никогда не существует: плотность $\rho_t(x)$ как функция t осциллирует по теореме Пуанкаре о возвращении. Гиббс так и не сумел обойти это затруднение.

Между тем имеется естественный и простой выход. Можно заменить обычную сходимость в (1.7) сходимостью в некотором более сильном смысле, например, *сходимостью по Чезаро*:

$$\overline{\rho}(x) = \lim_{\tau\to\infty} \frac{1}{\tau}\int_0^\tau \rho_t(x)dt. \tag{1.8}$$

Существование этого предела вытекает из формулы (1.4) и известных результатов эргодической теории. Если начальная плотность ρ_0 — функция из $L_1(\Gamma, d\mu)$, то $\overline{\rho}(x)$ существует для почти всех $x \in \Gamma$, также является суммируемой функцией, удовлетворяет уравнению Лиувилля (точнее, инвариантна относительно преобразований g^t) и (если $\mu(\Gamma) < \infty$)

$$\int\limits_\Gamma \overline{\rho} d\mu = \int\limits_\Gamma \rho_0 d\mu = 1. \tag{1.9}$$

Это — классическая *теорема Биркгофа–Хинчина*. Условие $\mu(\Gamma) < \infty$ не выполняется для обычных гамильтоновых систем. Однако, соотношение (1.9) остается справедливым, если уровни энергии

$$\{H(x, y = c)\}$$

ограничены в фазовом пространстве.

Аналогичный результат справедлив и в более общем случае, когда $\rho_0 \in L_p (1 \leqslant p \leqslant \infty)$: предел (1.8) имеет место для почти всех $x \in \Gamma$ и $\overline{\rho}$ также принадлежит L_p. Это — известная *теорема Аккоглу* (см., например, [4, 5]).

Таким образом, равенство (1.8) можно считать *определением* статистического равновесия. Такой подход может показаться чересчур формальным. К равенству (1.8) можно подойти по-другому.

Можно начать с вопроса о *слабой сходимости* вероятной меры $d\nu_t = \rho_t d\mu$ при $t \to \infty$. Такой подход естественен с точки зрения обоснования термодинамики — перехода к макроскопическому описанию эволюции динамической системы, поскольку плотность вероятностной меры «существует» не сама по себе, а проявляется при вычислении средних значений (математических ожиданий) динамических величин. Систематическое изложение этой

точки зрения (в неявной форме использовавшейся Пуанкаре в его работе [2]) можно найти в книге [6].

Пусть $\varphi : \Gamma \to \mathbb{R}$ — динамическая величина,

$$\int\limits_\Gamma \rho_t \varphi d\mu \tag{1.10}$$

— ее среднее значение в момент времени t. Если $\rho_t \in L_p$ (достаточно предположить, что $\rho_0 \in L_p$), то для существования интеграла (1.10) следует считать, что $\varphi \in L_q \quad (\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1)$. При $p = 1$ функцию φ надо предполагать существенно ограниченной ($\varphi \in L_\infty$). Например, пусть φ — характеристическая функция измеримой области Φ конфигурационного пространства M гамильтоновой системы; она тривиальным образом продолжается до измеримой функции $\widehat{\varphi} = \varphi \circ \pi$, определенной в фазовом пространстве $\Gamma = T^*M$, где $\pi : T^*M \to M$ — естественная проекция. Тогда интеграл (1.10) имеет смысл доли гамильтоновых систем из ансамбля Гиббса, которые в момент времени t находятся в области Φ.

Будем говорить, что ρ_t *слабо сходится* к $\overline{\rho} : \Gamma \to \mathbb{R}$ при $t \to \infty$, если

$$\int\limits_\Gamma \rho_t \varphi d\mu \to \int\limits_\Gamma \overline{\rho} \varphi d\mu \tag{1.11}$$

для любой «пробной» функции φ. Слабый предел $\overline{\rho}$, если он существует, естественно считать плотностью распределения вероятностей в предельном стационарном состоянии. Слабая сходимость вполне естественна в физических приложениях: пробным функциям соответствуют устройства (термометр, барометр и т.д.), измеряющие средние (наиболее вероятные) величины.

Справедливо следующее утверждение: если $\rho_0 \in L_p$ и слабый придел существует, то он совпадает с (1.8) [7]. Для $p = 2$ это утверждение установлено ранее в [8].

4. В связи с этими результатами возникает интересная и нетривиальная задача о *существовании* слабых пределов. Они существуют не всегда. Например, для линейных гамильтоновых систем интегралы (1.10), как правило, осциллируют и не имеют пределов при $t \to \pm\infty$. В работе [9] выделен класс нелинейных систем (так называемые системы *со слоистыми потоками*), для которых слабые пределы вероятностных мер существуют.

Этому общему результату предшествовала теорема автора о слабых пределах решений уравнения Лиувилля для невырожденных вполне интегрируемых систем [10]. Она является усилением и обобщением утверждения Пуанкаре из п.п. 2—3 его работы [2].

Пуанкаре рассмотрел простую интегрируемую систему на цилиндре $\Gamma = \mathbb{T}^1 \times \mathbb{R}^1 = \{x \mod 2\pi, \omega\}$:

$$\dot{x} = \omega, \quad \dot{\omega} = 0. \tag{1.12}$$

Если $\rho(x, \omega)$ — начальная плотность распределения, то

$$d\nu_t = \rho(x - \omega t, \omega) dx d\omega.$$

Пуанкаре доказал, что если ρ и φ — непрерывно дифференцируе-

мые функции на Γ, то

$$\lim_{t\to\pm\infty} \int\limits_\Gamma \rho_t(x,\omega)\varphi(x,\omega)dxd\omega = \int\limits_\Gamma \overline{\rho}(\omega)\varphi(x,\omega)dxd\omega, \tag{1.13}$$

где

$$\overline{\rho} = \frac{1}{2\pi}\int\limits_0^{2\pi} \rho(x,\omega)dx. \tag{1.14}$$

Последняя формула, очевидно, согласуется с формулой (1.8).

Как показано в [10], это утверждение справедливо в многомерном случае, когда $\Gamma = \mathbb{T}^n \times \mathbb{R}^n$ и $\rho \in L_p$, $\varphi \in L_q (\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1)$.[1] Утверждения (1.13) и (1.14) — это одна из форм эргодической теоремы для вполне интегрируемых систем, которая фактически появилась за 10 лет до классической работы Г. Вейля о равномерном распределении условно-периодических движений на многомерных торах.

Доказательство общей теоремы о слабой сходимости в системах со слоистыми потоками связано с новой формой эргодической теоремы, установленной в [7]. Снова рассматривается динамическая система (1.1) на гладком многообразии Γ с инвариантной мерой $d\mu$, причем $\mu(\Gamma) < \infty$. Пусть $\omega \mapsto h(\omega)$ — плотность некоторой вероятностной меры на $\mathbb{R} = \{\omega\}$: это неотрицательная

[1]В связи с обсуждаемыми вопросами В. В. Веденяпин заметил:«Теорема о слабой сходимости (Пуанкаре—Козлова) и ее недоказанные (и несформулированные) обобщения дают свет в конце туннеля [11].» Одна из целей настоящей работы — доформулировать соответствующие обобщения.

функция из $L_1(\mathbb{R}, d\omega)$, причем

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} h(\omega)d\omega = 1.$$

Вот одна из эргодических теорем: если $f_1, f_2 \in L_2(\Gamma, d\mu)$, то

$$\lim_{t\to\infty} \int\limits_{-\infty}^{\infty} h(\omega) \int\limits_{\Gamma} f_1(g^{\omega t}(x)) f_2(x) d\mu d\omega = \int\limits_{\Gamma} \overline{f}_1 f_2 d\mu,$$

где $\overline{f}_1$ — биркгофовское среднее (1.8) функции f_1.

В частности, пусть система (1.1) эргодическая (но не обязательно с перемешиванием) и h — плотность нормального распределения с дисперсией σ^2. Тогда при $\sigma \to \infty$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{t^2}{2\sigma^2}} \int\limits_{\Gamma} f_1(g^t(x)) f_2(x) dx dt \to \\ \to \frac{\int\limits_{\Gamma} f_1 d\mu \int\limits_{\Gamma} f_2 d\mu}{\mu(\Gamma)}. \tag{1.15}$$

Это соотношение показывает, что при неограниченном росте дисперсии σ^2 функции $f_1(g^t(x))$ и $f_2(x)$ становятся в среднем статистически независимыми: интеграл от произведения равен произведению интегралов.

Эти эргодические теоремы обсуждаются в [12]. Отметим, что исторически эргодическая теория, по существу, выросла из статистической механики в связи с попытками обосновать физические идеи Больцмана о тепловом равновесии.

Я не буду давать общее определение систем со слоистыми потоками, а вместо этого укажу класс гамильтоновых систем, который является полезным примером таких систем. Будем говорить, что гамильтонова система дифференциальных уравнений (1.3) *квазиоднородна*, если она инвариантна относительно действия группы подобия

$$t \mapsto \frac{t}{\lambda} \quad , \quad x \mapsto \lambda^\alpha x \quad , \quad y \mapsto \lambda^\beta y \quad , \quad H \mapsto \lambda^\gamma H.$$

Веса α, β и γ удовлетворяют при этом следующему условию: $\alpha + \beta + 1 = \gamma$.

Вот несколько конкретных примеров.

(a) Задача n гравитирующих тел. Здесь $\alpha = -\frac{2}{3}$, $\beta = \frac{1}{3}$, $\gamma = \frac{2}{3}$.

(b) Система с однородным потенциалом:

$$H = \frac{1}{2} \sum y_j^2 + V_m(x),$$

где m — степень однородности потенциальной энергии. Здесь

$$\alpha = \frac{2}{m-2} \quad , \quad \beta = \frac{m}{m-2} \quad , \quad \gamma = \frac{2m}{m-2}.$$

Случай $m = -1$ соответствует ньютоновскому потенциалу (пример **(a)**). Особый случай $m = 2$ отвечает линейной системе, которая не является квазиоднородной и для нее не справедлива теорема о слабом пределе.

(c) Движение по инерции:

$$H = \frac{1}{2} \sum g_{ij}(x) y_i y_j.$$

Здесь $\alpha = 0$, $\beta = 1$, $\gamma = 2$. Если конфигурационное многообразие $M = \{x\}$ имеет непустую границу ∂M, мы предполагаем, что отражение от ∂M происходит по упругому закону.

Кстати сказать, система вида (1.12)

$$\dot{x}_j = \omega_j, \quad \dot{\omega}_j = 0, \quad 1 \leqslant j \leqslant n,$$

тоже гамильтонова и квазиоднородная: здесь x_j и ω_j — сопряженные канонические переменные, а гамильтониан равен

$$H = \frac{1}{2} \sum \omega_j^2.$$

Так что это — частный случай систем из примера **(c)**.

5. К сожалению, для линейных колебательных систем слабая сходимость вероятностных мер не имеет места. Чтобы исправить это положение и достичь большей общности, определение слабой сходимости (1.11) надо слегка усилить, введя дополнительное усреднение по времени:

$$\lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \int_0^t \left[\int_\Gamma \rho_s \varphi d\mu \right] ds = \int_\Gamma \overline{\rho} \varphi d\mu. \tag{1.16}$$

Будем говорить, что ρ_t *слабо сходится* к $\overline{\rho}$ *по Чазаро*, если для любой пробной функции φ справедливо равенство (1.16).

Теорема 2. *Если $\rho_0 \in L_p (p \geqslant 1)$, то ρ_t всегда слабо сходится по Чазаро к функции $\overline{\rho} \in L_p$, определяемой равенством* (1.8).

Более точно, при $p = 1$ надо дополнительно потребовать, чтобы $\mu(\Gamma) < \infty$. Это утверждение — простое следствие известных эргодических теорем и некоторых новых идей из работы [7]. Теорема 2 показывает, что определения статистического равновесия (путем замены ρ_t стационарной функцией $\overline{\rho}$) в соответствии с формулами (1.8) и (1.16) совпадают. Теперь мы имеем *общее* определение статистического равновесия, которое применимо, в частности, и к вырожденным гамильтоновым системам.

Подчеркнем, что сходимость по Чазаро можно заменить любым другим линейным и регулярным методом суммирования, который *включает* метод Чазаро (например, методом Абеля). Поэтому стремление системы к статистическому равновесию в соответствии с формулой (1.8) не следует понимать буквально, что плотность ρ_t заменяется средним по интервалу $[0, t]$ и затем время t устремляется к бесконечности. Вообще не имеет смысла говорить о скорости сходимости к тепловому равновесию: стабилизация средних значений разных динамических величин происходит по-разному.

Сделаем важное замечание. Как хорошо известно, если в (1.8) время τ устремить к $+\infty$ и к $-\infty$, то эти пределы совпадут для почти всех $x \in \Gamma$. Таким образом, состояния теплового равновесия гамильтоновых систем в прошлом и будущем совпадают. Это — проявление общего свойства обратимости уравнений классической механики по времени. Конечно, такое понимание необратимого стремления системы к состоянию термодинамического равновесия не соответствует общепринятым представлениям, основанным на свойствах известного кинетического уравнения Больцмана. Однако надо иметь в виду, что при всех выводах этого уравнения делаются дополнительные предложения, несовместимые с обратимостью уравнений динамики.

6. Теперь обсудим вопрос о возрастании информационной энтропии изолированной системы после достижения теплового (статистического) равновесия. Положим

$$S_t = -\int\limits_{\Gamma} \rho_t \ln \rho_t d\mu \quad \text{и} \quad \overline{S} = -\int\limits_{\Gamma} \overline{\rho} \ln \overline{\rho} d\mu.$$

Ясно, что $\overline{S}$ — это энтропия системы в тепловом равновесии.

С использованием формулы (1.8) и неравенств выпуклости легко доказать, что

$$S_0 \leqslant \overline{S}. \tag{1.17}$$

Как правило, $S_0 < \overline{S}$. Функция S_t постоянна при всех *конечных* значениях времени (теорема 1), а при $t = \pm\infty$ она совершает неотрицательный скачок $\overline{S} - S_0$, величина которого вполне согласуется с известными результатами феноменологической термодинамики (см. [6, 10]).

Для системы (1.12) неравенство (1.17) установил Пуанкаре. С этим связана критика Н. С. Крылова [13] статьи Пуанкаре [2]. Н. С. Крылов отмечает, что неравенство (1.17) противоречит результату п.1 статьи Пуанкаре о постоянстве информационной энтропии S_t. На самом деле никакого противоречия здесь нет. Для

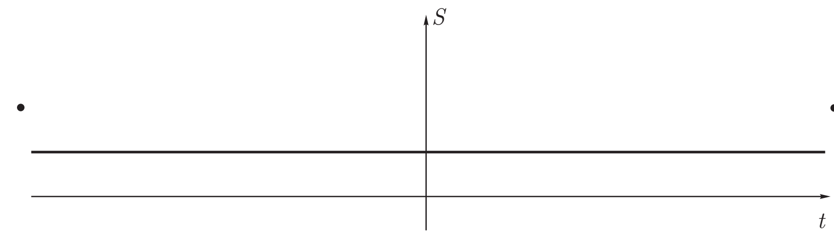

Рис. 1. График энтропии

состояний теплового равновесия системы (1.12) Пуанкаре фактически заменял (*не оговаривая этого явно*) начальную плотность вероятности ее слабым пределом, вычисляемым по формуле (1.14).

Конечно, для гамильтоновых систем предельная плотность $\overline{\rho}$, вообще говоря, не совпадает с плотностью *канонического распределения Гиббса*

$$\frac{e^{-\beta H}}{\int\limits_{\Gamma} e^{-\beta H} d\mu}, \quad \beta = \mathrm{const} > 0.$$

Параметр β^{-1} обычно интерпретируется как kT, где k — постоянная Больцмана, а T — абсолютная температура. Но в этом нет ничего неожиданного. Распределение Гиббса содержит температуру, которая «разумным» образом может появиться лишь при рассмотрении взаимодействующих подсистем: только тогда появляется возможность сравнить температуры разных систем. Статистический вывод распределения Гиббса — это отдельная задача, тесно связанная с *хаотизацией* слабо взаимодействующих гамильтоновых систем (см. [6], гл.IV). Существенную роль в таком рассмотрении играет идея *термодинамического предела*. Этот круг вопросов мы обсудим ниже в §14. А сейчас лишь отметим, что для гамильтоновых систем с эргодическим поведением на изоэнергетических поверхностях $\overline{\rho}$ является плотностью *микроскопического распределения*: оно зависит только от энергии. А это уже кое-что!

7. В заключение этого параграфа в качестве примера укажем статистический вариант теоремы Клаузиуса о вириале. С этой целью рассмотрим гамильтонову систему с кинетической энергией

$$T = \frac{1}{2}\sum g_{ij}y_iy_j \quad , \quad g_{ij} = \text{const}$$

и однородной потенциальной энергией $V : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$:

$$V(\lambda x) = \lambda^m V(x)$$

для всех $x \in \mathbb{R}^n$ и $\lambda > 0$; число m — степень однородности. Предположим, что энергетические многообразия $\{T + V = h\}$ компактны (это заведомо так, если $x = 0$ — строгий локальный минимум потенциальной энергии). Тогда биркгофовские средние $\overline{T}$ и $\overline{V}$ кинетической и потенциальной энергии существуют для *всех* начальных условий и

$$\overline{T} = \frac{mh}{m+2} \quad , \quad \overline{V} = \frac{2h}{m+2}.$$

В этом заключается классическая *теорема Клаузиуса*, установленная еще в 1870 г. Она просто выводится из тождества

Лагранжа

$$\ddot{I} = 4T - 2mV,$$

где $I = \sum g_{ij}x_ix_j$ — «момент инерции» системы относительно точки $x = 0$.

Пусть теперь ρ_0 — начальная плотность распределения вероятностей, причем

$$E = \int\limits_{\Gamma} (T + V)\rho_0 d\mu < \infty. \tag{1.18}$$

Следовательно, средняя полная энергия системы ограничена при всех значениях времени. Положим

$$K_t = \int\limits_{\Gamma} T\rho_t d\mu, \quad \Pi_t = \int\limits_{\Gamma} V\rho_t d\mu.$$

Теорема 3 [18]. *Если энергетические многообразия компактны и выполнено условие* (1.18), *то при* $m \neq 2$

$$\lim_{t\to\pm\infty} K_t = \frac{mE}{m+2} \quad \text{и} \quad \lim_{t\to\pm\infty} \Pi_t = \frac{2E}{m+2}. \tag{1.19}$$

При $m = 2$ *эти равенства остаются справедливыми, если обычную сходимость заменить сходимостью по Чезаро.*

Подчеркнем, что равенства (1.19) не зависят от начальной плотности распределения ρ_0. Для линейных колебательных систем ($m = 2$) внутренняя энергия в итоге распределяется поровну между средними значениями кинетической и потенциальной энергии.

§ 2. Неавтономные системы

1. В этом параграфе обсуждаются статистические свойства неавтономных систем дифференциальных уравнений

$$\dot{z} = v(z, t), \tag{2.1}$$

$z = (z_1, \ldots, z_m)$ — точка фазового пространства Γ, t — время.

Важный класс составляют неавтономные гамильтоновы системы. Изучение таких систем имеет существенное значение для анализа неустановившихся процессов.

Будем предполагать, что *все* решения системы (2.1) определены на всей временной оси $\mathbb{R} = \{t\}$. Это заведомо так, если фазовое пространство компактно.

Потоком системы (2.1) назовем семейство преобразований $\{g^t\}, t \in \mathbb{R}$ фазового пространства, которые обладают следующим характеристическим свойством: функция

$$t \mapsto g^t(z)$$

— решение уравнения (2.1) с начальным условием z при $t = 0$. Если система (2.1) неавтономная, то преобразования, конечно, не образуют группу. Однако они являются взаимно-однозначными преобразованиями фазового пространства Γ.

Нашим исходным пунктом снова будет теория ансамблей Гиббса: нестационарные *распределения вероятностей* с плотностями $\rho_t(z) = \rho(t, z)$, которые удовлетворяют фундаментальному

уравнению Лиувилля

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho v) = 0. \tag{2.2}$$

Решения этого уравнения порождают интегральный инвариант системы (2.1):

$$\int\limits_{g^t(\mathcal{D})} \rho_t d^m z = \mathrm{const} \tag{2.3}$$

для любой измеримой области $\mathcal{D}$. В частности,

$$I(t) = \int\limits_{\Gamma} \rho_t d^m z = \mathrm{const}. \tag{2.4}$$

Приведем прямое доказательство этого утверждения. Мы будем использовать прием, который неоднократно встретится нам ниже (с тривиальными модификациями):

$$\dot{I} = \int\limits_{\Gamma} \frac{\partial \rho}{\partial t} d^m z = -\int\limits_{\Gamma} \operatorname{div}(\rho v) d^m z = 0$$

по формуле Гаусса–Остроградского. Точнее, последняя формула заведомо справедлива для замкнутого фазового пространства. Если же Γ некомпактно, то необходимо потребовать, чтобы поток векторного поля ρv «на бесконечности» (через бесконечно большую сферу) обращался в нуль.

Далее считаем, что $\rho \geqslant 0$ и интеграл (2.4) равен единице. Тогда мера $\rho_t d^m z$ будет вероятностной мерой, инвариантной относительно преобразований g^t. Значение интеграла (2.3) есть вероятность нахождения системы в области $g^t(\mathcal{D})$ в момент времени t.

2. Отметим два утверждения, которые обобщают соответствующие утверждения из §1.

Теорема 1. *Если* $f_t(z)$ — *первый интеграл системы* (2.1), *то*

$$\int\limits_{\Gamma} f_t \rho_t d^m z = \mathrm{const}.$$

Действительно, произведение $f_t \rho_t$ удовлетворяет уравнению Лиувилля, если f_t — первый интеграл. После этого замечания следует воспользоваться соотношением (2.4).

Мы не предполагаем, что система (2.1) имеет *стационарную* инвариантную меру. Введем информационную энтропию по обычной формуле

$$S_t = -\int\limits_{\Gamma} \rho_t \ln \rho_t d^m z.$$

Теорема 2.

$$\dot{S}_t = \int\limits_{\Gamma} \rho_t (\operatorname{div} v) d^m z. \tag{2.5}$$

Действительно:

$$\dot{S}_t = -\int\limits_{\Gamma} \frac{\partial \rho}{\partial t} \ln \rho d^m z - \int\limits_{\Gamma} \frac{\partial \rho}{\partial t} d^m z.$$

Ввиду уравнения Лиувилля и формулы Гаусса–Остроградского

последний интеграл равен нулю. Далее:

$$-\int \frac{\partial \rho}{\partial t} \ln \rho d^m z = \int \sum \frac{\partial \rho v_j}{\partial z_j} \ln \rho d^m z =$$
$$= -\int \sum v_j \frac{\partial \rho}{\partial t} d^m z = \int\limits_{\Gamma} \rho \operatorname{div} v d^m z.$$

В автономном случае равенство (2.5) неоднократно обсуждалось (см., например, [14]). Если $\operatorname{div} v = 0$, то получаем заключение Гиббса–Пуанкаре, справедливое и в неавтономном случае. В частности, информационная энтропия неавтономной гамильтоновой системы не меняется со временем.

Пусть $\operatorname{div} v = c = \mathrm{const}$. Тогда из (2.5) вытекает важная формула:

$$S_t - S_0 = ct.$$

В качестве примера рассмотрим гамильтонову систему с диссипацией:

$$\dot{x}_j = \frac{\partial H}{\partial y_j}, \ \dot{y}_j = -\frac{\partial H}{\partial x_j} - \nu(t) y_j; \quad 1 \leqslant j \leqslant n. \tag{2.6}$$

Здесь H — функция Гамильтона (полная энергия), $\nu \geqslant 0$ — коэффициент трения. Из (2.6) вытекает соотношение

$$\dot{H} = -\nu \sum y_j \frac{\partial H}{\partial y_j}.$$

Если H есть сумма кинетической

$$T = \frac{1}{2} \sum g_{ij}(x) y_i y_j$$

и потенциальной энергии $V(x)$, то

$$\dot{H} = -2\nu T \leqslant 0.$$

Таким образом, полная энергия не возрастает.

С другой стороны, дивергенция правой части (2.6) равна, очевидно, $-n\nu$. Следовательно, формула (2.5) дает нам соотношение

$$\dot{S}_t = -n\nu(t) \leqslant 0.$$

Откуда энтропия как функция времени находится простым интегрированием. Вопреки распространенному ожиданию, в изолированной системе с диссипацией энергии энтропия не возрастает, а наоборот, убывает.

Заметим еще, что дивергенция линейного векторного поля постоянна: $\operatorname{div}(Ax) = \operatorname{tr} A$. В связи с этим отметим следующие два утверждения. Если линейная система дифференциальных уравнений $\dot{x} = Ax$ допускает инвариантную меру с гладкой *положительной* плотностью, то $\operatorname{tr} A = 0$. Далее, если эта система допускает первый интеграл в виде *невырожденной* квадратичной формы, то также $\operatorname{tr} A = 0$.

3. Конечно, в неавтономном случае не приходится надеяться, что распределение вероятностей с плотностью ρ_t стремится в каком-то *естественном* смысле к стационарному распределению. Однако и здесь можно указать аналоги некоторых утверждений из п.1.

С этой целью рассмотрим неавтономную интегрируемую систему дифференциальных уравнений

$$\dot{x} = y, \quad \dot{y} = f(t), \tag{2.7}$$

где $x = (x_1, \ldots, x_n)$ — точки n-мерного тора $\mathbb{T}^n$ ($x_j \mod 2\pi$ — угловые координаты), $y = (y_1, \ldots, y_n) \in \mathbb{R}^n$, $f = (f_1, \ldots, f_n)$ — заданная вектор-функция времени. Фазовое пространство Γ есть прямое произведение $\mathbb{T}^n \times \mathbb{R}^n$.

Уравнение (2.7) описывает движение механической системы с конфигурационным пространством $\mathbb{T}^n = \{x\}$, кинетической энергией $T = \dfrac{(y,y)}{2}$ и находящейся под действием внешней силы f. Поток этой неавтономной системы сохраняет стандартную меру Лиувилля $d\mu = d^n x d^n y$. При $f = 0$ получаем невырожденную вполне интегрируемую систему вида (1.12), причем координаты x, y служат переменными действие-угол.

Подход Гиббса связан с анализом решений уравнения Лиувилля

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}, y\right) + \left(\frac{\partial \rho}{\partial y}, f\right) = 0.$$

Оно легко решается: если $\rho_0(x, y)$ — начальная плотность (2π-периодическая по $x_1, \ldots, x_n$), то

$$\rho_t(x, y) = \rho_0(x - yt + h(t), y - g(t)), \tag{2.8}$$

где $\dot{g}(t) = f(t), g(0) = 0$, а $\dot{h}(t) = tf(t)$, причем $h(0) = 0$.

Предположим, что начальная плотность ρ_0 принадлежит $L_p(\Gamma, d\mu)$. Ввиду формулы (2.8), $\rho_t \in L_p$ при всех t. Пусть

φ — некоторая функция из $L_q(\Gamma, d\mu)$. Тогда корректно определена функция времени

$$K(t) = \int\limits_{\Gamma} \rho_t \varphi d^n x d^n y.$$

Если $f = 0$, то

$$\lim_{t\to\pm\infty} K(t) = \int\limits_{\Gamma} \overline{\rho}\varphi d^n x d^n y, \tag{2.9}$$

где

$$\overline{\rho}(y) = \lim_{\tau\to\infty} \frac{1}{\tau} \int\limits_0^{\tau} \rho(x - yt, y) dt.$$

Для почти всех $(x, y) \in \Gamma$

$$\overline{\rho}(y) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int\limits_{\mathbb{T}^n} \rho_0(x, y) d^n x. \tag{2.10}$$

Функция $\overline{\rho}$ — слабый предел ρ_t при $t \to \infty$. Это — статистический вариант эргодической теоремы Вейля об усреднении, установленный в [10]. В частности, пусть φ — характеристическая функция измеримой области $\mathcal{D} \subset \mathbb{T}^n$; будучи поднятой на все фазовое пространство, она принадлежит $L_\infty(\Gamma, d\mu)$. Тогда доля систем ансамбля Гиббса, которые в момент времени t находятся в области $\mathcal{D}$, пропорциональна мере области $\mathcal{D}$:

$$\int\limits_{\Gamma} \overline{\rho}(y)\varphi(x) d^n x d^n y = \frac{mes\,\mathcal{D}}{(2\pi)^n}.$$

Это — обобщенная теорема Пуанкаре.

Если $f \neq 0$, то функция $t \mapsto K(t)$, как правило, осциллирует и вообще не имеет предела при $t \to \infty$. Тем не менее справедлив некоторый аналог утверждения (2.9). Положим

$$\widehat{\rho}_t(x, y) = \overline{\rho}(y - g(t)), \tag{2.11}$$

где $\overline{\rho}$ определяется формулой (2.10).

Теорема 3.

$$\lim_{t\to\infty} \left[\int\limits_{\Gamma} \rho_t \varphi d\mu - \int\limits_{\Gamma} \widehat{\rho}_t \varphi d\mu \right] = 0. \tag{2.12}$$

Эта формула показывает, что при больших t плотность ρ_t естественно заменить «предельной» плотностью $\widehat{\rho}_t$: среднее (наиболее вероятное) значение любой динамической величины $\varphi : \Gamma \to \mathbb{R}$ практически не изменится. С другой стороны, задача перехода от микро- к макроописанию как раз сводится к анализу эволюции средних значений.

Следствие 1. *Если φ не зависит от y, то*

$$\lim_{t\to\pm\infty} K(t) = \int\limits_{\Gamma} \widehat{\rho}_t(y)\varphi(x) d^n x d^n y = \frac{1}{(2\pi)^n} \int\limits_{\mathbb{T}^n} \varphi(x) d^n x.$$

Здесь используется формула (2.12) и очевидное свойство

$$\int\limits_{\Gamma} \widehat{\rho}_t d^n x d^n y = 1.$$

В частности, если φ — характеристическая функция измеримой области $\mathcal{D} \subset \mathbb{T}^n$, то

$$\lim_{t\to\pm\infty} K(t) = \frac{mes\,\mathcal{D}}{mes\,\mathbb{T}^n} \qquad (mes\,\mathbb{T}^n = (2\pi)^n).$$

Этот факт отмечен в работе [15]. Там же сформулировано неверное утверждение о поведении функции K для функций ρ и φ общего вида.

Следствие 2. *Если $f = 0$, то из* (2.12) *вытекает* (2.9).

Теорема 3 доказывается по той же схеме, что и равенство (2.9). Ключевую роль играет лемма Римана–Лебега.

Как уже было сказано,

$$S_t = -\int\limits_{\Gamma} \rho_t \ln \rho_t d\mu = \mathrm{const}.$$

Положим

$$\widehat{S}_t = -\int\limits_{\Gamma} \widehat{\rho}_t \ln \widehat{\rho}_t d\mu.$$

Очевидно, что $\widehat{S}_t = \mathrm{const}(= \overline{S})$.

Теорема 4.

$$\widehat{S}_t \geqslant S_t,$$

причем если ρ_0 существенно зависит от x, то это неравенство строгое.

Замечание. Подстановкой

$$x' = x - \int g(t)dt, \quad y' = y - g(t)$$

уравнение (2.7) приводится к виду

$$\dot{x}' = y', \quad \dot{y}' = 0.$$

Это — уравнение (2.7), в котором $f = 0$. Следовательно, согласно (2.9),

$$\int\limits_{\Gamma} \rho_t(x', y')\varphi(x', y')d^n x' d^n y' \to \int\limits_{\Gamma} \overline{\rho}(y')\varphi(x', y')d^n x' d^n y'.$$

Однако это равенство, конечно, не совпадает с (2.12).

4. Рассмотрим еще внешне похожую задачу о колебаниях шарика единичной массы между двумя стенками $0 \leqslant z \leqslant a$, на который действует сила $f(t)$. Например, можно считать, что шарик заряжен и находится в переменном электрическом поле. На первый взгляд эта система относится к типу (2.7) — *внешнее* возмущение интегрируемой системы. Однако это не так, и задача сводится к анализу *параметрических* возмущений.

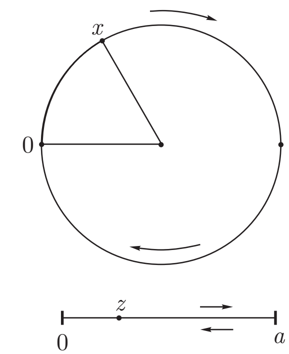

Рис. 2. Двулистное накрытие.

Перейдем к двулистному накрытию отрезка $[0, a]$ окружностью $\mathbb{T}^1 = \{x \mod 2\pi\}$, вводя угловую переменную по правилу: $x = \frac{\pi z}{a}$, когда z возрастает от 0 до a, и $x = 2\pi - \frac{\pi z}{a}$, когда z убывает от a до 0. Уравнения движения шарика принимают вид

$$\ddot{x} = -f(t)\frac{\partial V}{\partial x}, \tag{2.13}$$

где $V(x) = -\frac{\pi x}{a}$, когда $0 < x < \pi$, и $V(x) = \frac{\pi x}{a} - \frac{2\pi^2}{a}$, когда $\pi < x < 2\pi$. Задача об эволюции вероятностной меры уравнения (2.13) более сложна по сравнению с изучением системы (2.7). Она решается лишь при некоторых дополнительных условиях.

Пусть, например, $f(t) = \mathrm{const}$. Тогда уравнение (2.13) просто интегрируется и нетрудно доказать, что слабый предел плотности вероятностной меры — функция от полной энергии $\frac{\dot{x}^2}{2} + fV(x)$. Интегрируя по скорости, получаем плотность распределения в конфигурационном пространстве, которая уже не будет постоянной.

Предположим, что функция $f(t)$ монотонно возрастает при $t \to +\infty$ и

$$\ddot{f}f \leqslant \frac{3}{2}\dot{f}^2. \tag{2.14}$$

Используя метод работы [16], можно показать, что при $t \to +\infty$ все решения $t \mapsto x(t)$ уравнения (2.13) стремятся к точке минимума потенциала V. Следовательно, в этих предположениях предельная плотность распределения положений шарика на отрезке совпадает с дельта-функцией $\delta(z - a)$.

5. Эти наблюдения можно обобщить. Пусть $M^n = \{x\}$ — компактное конфигурационное пространство механической системы с n степенями свободы, T — кинетическая энергия — положительно определенная квадратичная форма по импульсам $y = (y_1, \ldots, y_n)$, $V : M \to \mathbb{R}$ — гладкая функция, а произведение $f(t)V$ — потенциальная энергия. Фазовое пространство Γ — кокасательное расслоение M, а функция Гамильтона $H = T + fV$. Пусть ρ_t — плотность вероятностного распределения в фазовом пространстве, переносимая потоком гамильтоновой системы, и ρ_0 — данное Коши.

Теорема 5. *Пусть $\rho_0 d^n x d^n y$ абсолютно непрерывна относительно меры Лиувилля на Γ, функция V имеет лишь невырожденные критические точки на M, функция $t \mapsto f(t)$ монотонно возрастает с увеличением t и выполнено условие* (2.14). *Если $\varphi : M \to \mathbb{R}$ — характеристическая функция измеримой области на M, не содержащей точек локального минимума V, то*

$$\int\limits_{\Gamma} \rho_t(x, y)\varphi(x) d^n x d^n y \to 0$$

при $t \to +\infty$.

Таким образом, предельное распределение ансамбля Гиббса на конфигурационном пространстве M будет сингулярным: эта мера сосредоточена в конечном числе точек — локальных минимумов функции V. Отметим, что при стремлении системы к устойчивому равновесию импульсы $y(t)$ будут неограниченными (в соответствии с теоремой Лиувилля о сохранении фазового объема гамильтоновых систем).

§ 3. Равнораспределенность энергии связанных осцилляторов

1. Задача о равнораспределенности энергии по степеням свободы колебательной системы рассматривалась в классической работе Ферми, Паста и Улама [17]. Изучалась цепочка из N одинаковых частиц, причем соседние частицы были соединены нелинейными пружинами. Вопреки ожиданию, при $N = 64$ энергия системы не распределялась по различным модам колебаний, а сама система регулярно «почти» возвращалась к своему начальному состоянию. Впрочем, в таком поведении системы нет ничего удивительного: по теореме Пуанкаре о возвращении, энергии отдельных частиц как функции времени осциллируют и, конечно, не стремятся (в обычном смысле) к определенным значениям при неограниченном возрастании времени. Однако после усреднения по времени эти величины *необратимо* стремятся к своим предельным значениям (как это видно из рис. 9 статьи [19]), что вполне согласуется с общими идеями из § 1. Оказывается, имеется класс *линейных* колебательных систем, для которых независимо от начальной плотности распределения вероятностей происходит выравнивание средней энергии по степеням свободы.

2. Рассмотрим два одинаковых осциллятора, связанных между собой упругой пружиной (*симпатические маятники*). Это — линейная гамильтонова система с квадратичным гамильтонианом

$$H = \frac{1}{2}(p_1^2+q_1^2)+\frac{1}{2}(p_2^2+q_2^2)+\frac{\varepsilon}{2}(q_1-q_2)^2, \quad \varepsilon = \mathrm{const} > 0. \quad (3.1)$$

Мы считаем (для простоты записи), что частоты свободных колебаний этих осцилляторов равны единице. Характерное свойство такой системы — наличие биений: частных решений, которые демонстрируют эффект перекачки энергии между осцилляторами. Мы укажем статистический вариант этого явления.

Пусть ρ_0 — начальная плотность распределения вероятностей в четырехмерном фазовом пространстве $\mathbb{R}^4 = \{q_1, q_2, p_1, p_2\}$. Будем предполагать только, что ρ_0 — это неотрицательная суммируемая функция и существует среднее значение полной энергии

$$E = \int\limits_{\mathbb{R}^4} H\rho_0 d^2p\, d^2q. \quad (3.2)$$

Если в этой формуле ρ_0 заменить решением уравнения Лиувилля с этим начальным условием, то полная энергия не изменится (теорема 1 из §1).

Рассмотрим еще средние энергии отдельных осцилляторов:

$$E_j(t) = \frac{1}{2}\int\limits_{\mathbb{R}^4} (p_j^2+q_j^2)\rho_t d^2p d^2q; \quad j = 1, 2. \quad (3.3)$$

Ввиду ограниченности (3.2), эти интегралы существуют для всех значений времени t. Однако, в отличие от полной энергии (3.2), они уже зависят от времени.

Теорема 1. *Пределы*

$$\lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\int\limits_0^t E_j(s)ds = \overline{E}_j, \quad j=1,2,$$

существуют и равны между собой, причем при $\varepsilon\to 0$ $\overline{E}_1 = \overline{E}_2 = E/2$.

Таким образом, независимо от начальной плотности распределения средние энергии осцилляторов асимптотически (при $t\to\infty$) совпадают. Подчеркнем тот момент, что при этом система связанных осцилляторов, конечно же, не является эргодической. Более того, она вполне интегрируема: имеется дополнительный квадратичный интеграл

$$F = (p_1+p_2)^2 + (q_1+q_2)^2, \tag{3.4}$$

независимый от полной энергии H. Совпадение предельных средних энергий осцилляторов можно трактовать как выравнивание температур подсистем при наличии сколь угодно малой связи. Скорость сходимости по Чезаро функций (3.3) убывает с уменьшением ε. Подчеркнем, что выравнивание температур происходит без какого-либо перехода к термодинамическому пределу. Доказательство теоремы 1, основанное на простых вычислениях, можно найти в работе [18].

3. В качестве иллюстративного примера рассмотрим случай, когда начальная плотность распределения вероятностей есть

произведение плотностей двух нормальных распределений:

$$\rho_0 = \frac{e^{-\frac{(p_1^2+q_1^2)}{2kT_1}}}{2\pi kT_1}\frac{e^{-\frac{(p_2^2+q_2^2)}{2kT_2}}}{2\pi kT_2}.$$

Таким образом, в начальный момент времени $t=0$ состояния двух осцилляторов считаются статистически независимыми и распределенными по закону Гиббса. В частности, T_1 и T_2 можно интерпретировать как абсолютные температуры этих колебательных систем с одной степенью свободы.

Легко сосчитать, что средние энергии симпатических осцилляторов в начальный момент равны

$$kT_1 \quad \text{и} \quad kT_2 \tag{3.5}$$

соответственно, а средняя потенциальная энергия растянутой пружины равна

$$\varepsilon k(T_1+T_2)/2. \tag{3.6}$$

Подсчет показывает, что при $t\to\pm\infty$

$$E_j(t)\to\overline{E}_j = \frac{k(T_1+T_2)}{4}\frac{2+4\varepsilon+\varepsilon^2}{1+2\varepsilon} \quad (j=1,2)$$

(по Чезаро), а средняя энергия пружины стремится в том же смысле к

$$\overline{\Pi} = \frac{k(T_1+T_2)}{2}\frac{\varepsilon(1+\varepsilon)}{1+2\varepsilon}.$$

Сумма $\overline{E_1}+\overline{E_2}+\overline{\Pi}$, конечно, равна средней полной энергии системы в начальный момент времени (сумма трех чисел (3.5) и (3.6)). Ясно, что при $\varepsilon \to 0$

$$\overline{E}_j \to kT, \quad T = (T_1 + T_2)/2.$$

Таким образом, при исчезающе малом взаимодействии температура каждого осциллятора стремится к среднему арифметическому их температур в начальный момент времени.

Отношение

$$\frac{\overline{\Pi}}{\overline{E}_j} = \frac{2(\varepsilon^2 + \varepsilon)}{\varepsilon^2 + 4\varepsilon + 2}$$

монотонно возрастает от 0 до 2, когда ε изменяется в интервале $[0, \infty)$. В частности, при асимптотически больших значениях коэффициента упругости средняя энергия двух осцилляторов равна средней энергии упругой пружины. Интересно отметить, что этот вывод справедлив вообще для любой начальной плотности распределения вероятностей.

4. Многомерное обобщение симпатических осцилляторов связано со специальными вещественными ортогональными матрицами, все элементы которых с точностью до знака равны между собой. Такие матрицы имеются при $n = 2^k$, $k \geqslant 1$. Они строятся следующим индуктивным способом:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}, \ldots \tag{3.7}$$

Элементы соответствующей матрицы надо, конечно, поделить на нормировочный множитель $2^{k/2}$. Эти матрицы имеют следующий блочный вид:

$$\begin{pmatrix} A & A \\ A & -A \end{pmatrix},$$

где A — предыдущая матрица из последовательности (3.7). Кстати сказать, все матрицы (3.7) симметричны.

Пусть $||a_{ij}||$ — ортогональная $n \times n$– матрица из списка (3.7). Поставим ей в соответствие гамильтонову систему с n степенями свободы и функцией Гамильтона

$$H = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}(p_j^2 + q_j^2) + \frac{\varepsilon_1}{2}\left(\sum_{k=1}^{n} a_{1k}q_k\right)^2 + \ldots + \frac{\varepsilon_n}{2}\left(\sum_{k=1}^{n} a_{nk}q_k\right)^2, \tag{3.8}$$

где $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_n$ — неотрицательные вещественные числа.

Каков физический смысл этого гамильтониана? Положим $\varepsilon_1 = 0$, а $\varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_n$ будем считать малыми положительными числами. Тогда гамильтониан (3.8) можно представить в виде

$$H = \frac{1}{2}\sum(p_j^2 + \omega^2 q_j^2) + \frac{1}{2}\sum_{i<j}\varepsilon_{ij}(q_i - q_j)^2,$$

где частота ω и положительные коэффициенты ε_{ij} выражаются через $\varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_n$. Таким образом, мы имеем n одинаковых линейных осцилляторов, которые слабо взаимодействуют между собой. При $n = 2$ получаем классические симпатические маятники.

Пусть $\rho_0 \in L_1(\mathbb{R}^{2n}, d^n p d^n q)$ — начальная плотность распределения вероятностей, причем

$$\int\limits_{\mathbb{R}^{2n}} H\rho_0 d^n p d^n q < \infty. \tag{3.9}$$

Положим

$$E_j(t) = \frac{1}{2}\int\limits_{\mathbb{R}^{2n}} (p_j^2 + q_j^2)\rho_t d^n p d^n q \quad (1 \leqslant j \leqslant n), \tag{3.10}$$

где ρ_t — решение уравнения Лиувилля с начальным условием ρ_0. Ввиду предположения (3.9) средние энергии E_j корректно определены при всех значениях времени.

Теорема 2. *Если среди чисел $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_n$ нет равных и выполнено условие* (3.10)*, то*

$$\lim_{t\to\pm\infty} \frac{1}{t}\int_0^t E_j(s)ds$$

существуют и равны между собой.

Оказывается, линейные гамильтоновы системы с гамильтонианом (3.8) допускают частные решения типа биений, если числа

$$\sqrt{1+\varepsilon_1}, \ldots, \sqrt{1+\varepsilon_n}$$

рационально несоизмеримы. Обсуждение этих вопросов содержится в [18].

5. Рассмотрим теперь некоторые геометрические и топологические идеи, которые позволят прояснить и обобщить теоремы 1 и 2. Вновь обратимся к системе (1.1) с инвариантной мерой $d\mu$.

Пусть S– диффеоморфизм фазового пространства Γ, который сохраняет инвариантную меру $d\mu$ и *коммутирует* с преобразованиями из фазового потока $\{g^t\}$. Если $f : \Gamma \to \mathbb{R}$ — измеримая функция, то через f_S будем обозначать функцию $z \mapsto f(Sz)$. Если $f_S = f$, то такую функцию будем называть S*-инвариантной*.

Имеет место простая

Теорема 3 (принцип симметрии). *Пусть начальная плотность ρ_0 распределения вероятностей S–инвариантна. Тогда средние значения*

$$\int_\Gamma f\rho_t d\mu \quad \text{и} \quad \int_\Gamma f_S\rho_t d\mu \tag{3.11}$$

совпадают при всех значениях t. В частности, $\overline{f}_S = \overline{f}$.

Доказательство.

В первом интеграле (3.11) сделаем замену переменных $z \to Sz$. При этом f перейдет в f_S, а мера $d\mu$ и функция ρ_t останутся неизменными. Последнее вытекает из цепочки равенств

$$\rho_t(Sz) = \rho_0(g^{-t}(Sz)) = \rho_0(S(g^{-t}(z))) = \rho_0(g^{-t}(z)) = \rho_t(z).$$

Что и требовалось.

В качестве простого примера рассмотрим систему с гамильтонианом

$$H = \sum h(p_j, q_j) + \varepsilon \sum_{i<j} V(q_i - q_j). \qquad (3.12)$$

Здесь h — функция двух переменных, а потенциал V — четная функция одного переменного. В приложениях

$$h(p, q) = \frac{p^2}{2} + W(q).$$

Гамильтониан (3.12) описывает динамику идентичных одномерных подсистем, которые слабо взаимодействуют друг с другом. Функция (3.12) инвариантна относительно преобразований $\mathbb{R}^{2n}$, порождаемых перестановками пар канонических переменных. Эти преобразования, очевидно, сохраняют меру Лиувилля и коммутируют с фазовым потоком гамильтоновой системы.

В теории цепочек Боголюбова обычно предполагается, что начальная плотность ρ_0 не меняется при всех перестановках координат и импульсов отдельных частиц. Иногда это представляют как следствие *принципа неразличимости* частиц в классической механике. Однако формально — это дополнительное предположение. В этом случае, согласно теореме 3, средние значения полных энергий отдельных подсистем будут совпадать.

6. Однако больший интерес представляет случай, когда начальная плотность ρ_0 не является симметричной. Как и при каких условиях свойство симметрии приобретает плотность $\overline{\rho}$ в состоянии статистического равновесия? Преобразование S будем теперь определять как *автоморфизм* пространства с мерой $(\Gamma, d\mu)$.

Теорема 4. *Пусть динамическая система* (1.1) *имеет* $k < n$ *независимых первых интегралов*

$$f_1, \ldots, f_k$$

таких, что

(a) *все они S-инвариантны,*

(b) *интегральные многообразия* $M_c = \{z \in \Gamma : f_1(z) = c_1, \ldots, f_k(z) = c_k\}$ *связны для почти всех* $c = (c_1, \ldots, c_k) \in \mathbb{R}^k$,

(c) *при почти всех* $c \in \mathbb{R}^k$ *динамическая система* (1.1) *эргодична на* M_c.

Тогда биркгофовское среднее $\overline{\rho}$ *для любой начальной плотности* $\rho_0 \in L_p(\Gamma, d\mu)$, $p \geqslant 1$, *будет S-инвариантной функцией из* L_p.

Следствие. *Пусть выполнены условия теоремы 4 и* $f \in L_q(\Gamma, d\mu)$, $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$. *Тогда*

$$\int_\Gamma f \overline{\rho} d\mu = \int_\Gamma f_S \overline{\rho} d\mu. \qquad (3.13)$$

Это вытекает из предположения об S-инвариантности меры Лиувилля, свойства S-инвариантности плотности $\overline{\rho}$ (теорема 4) и формулы замены переменных в кратных интегралах.

Теорема 4 доказывается совсем просто. Так как первые интегралы f_j инвариантны относительно преобразования S, то тем же свойством обладают и поверхности M_c: если $z \in M_c$, то

$Sz \in M_c$, и обратно. Далее, так как система (1.1) эргодична на почти всех M_c, то $\overline{\rho}$ принимает одно и то же значение почти всюду на каждой связной компоненте M_c. Согласно топологическому предположению **(b)**, многообразия M_c связны. Следовательно, для почти всех $z \in \Gamma$ имеем $\overline{\rho}(Sz) = \overline{\rho}(z)$, что и требовалось.

Для гамильтоновых систем предположения теоремы 4 особенно наглядны в двух крайних случаях: $k = \dfrac{(\dim\Gamma)}{2}$ и $k = 1$. Первый из них, по существу, относится ко *вполне интегрируемым* гамильтоновым системам: если $n = 2k$, то k независимых первых интегралов должны еще находиться в инволюции. Тогда каждая компактная связная компонента их совместного уровня будет k–мерным тором, заполненным условно–периодическими траекториями. Если эта система еще *не вырождена*, то почти все инвариантные торы будут нерезонансными и гамильтонова система на таких торах, очевидно, эргодическая. Единственное содержательное условие — это условие связности.

Если $k = 1$, то предположения теоремы 4 сводятся к двум условиям: связность энергетических $(2n-1)$-мерных уровней и эргодичность гамильтоновой системы на этих уровнях. Этот случай имеет существенное значение для статистической модели термостата (§14).

7. Покажем теперь, как из теоремы 4 можно вывести теорему 1 в типичном случае, когда частота $\omega = \sqrt{1+2\varepsilon}$ иррациональна. Для этого перейдем от канонических переменных p_j, q_j

к «нормальным» координатам P_j, Q_j с помощью ортогонального преобразования

$$Q_1 = \frac{q_1+q_2}{\sqrt{2}},\ P_1 = \frac{p_1+p_2}{\sqrt{2}},\ Q_2 = \frac{q_1-q_2}{\sqrt{2}},\ P_2 = \frac{p_1-p_2}{\sqrt{2}}.$$

Оно, очевидно, каноническое. В новых переменных гамильтониан (3.1) принимает вид

$$H = \frac{1}{2}(P_1^2+Q_1^2) + \frac{1}{2}(P_2^2+\omega^2 Q_2^2), \quad \omega^2 = 1+2\varepsilon.$$

Эта гамильтонова система допускает два независимых первых интеграла

$$P_1^2+Q_1^2 \quad \text{и} \quad P_2^2+\omega^2 Q_2^2, \tag{3.14}$$

которые являются линейными комбинациями первых интегралов (3.1) и (3.4). Если функции (3.14) приравнять C_1 и C_2 соответственно, то при ненулевых C_1 и C_2 полученные уравнения высекут в $\mathbb{R}^4$ связный двумерный тор. Таким образом, условие **(b)** теоремы 4 выполнено.

Рассмотрим подстановку S, когда пары канонических переменных p_1, q_1 и p_2, q_2 меняются местами. Первые интегралы (3.1) и (3.4) не меняются при такой подстановке (это условие **(a)**). Поскольку ω иррационально, то рассматриваемая гамильтонова система будет эргодической на двумерных инвариантных торах

$$\{H = c_1,\ F = c_2\} = \{P_1^2+Q_1^2 = C_1,\ P_2^2+\omega^2 Q_2^2 = C_2\},$$

$$C_1 = \frac{c_2}{2},\ C_2 = 2c_1 - \frac{c_2}{2}.$$

Это условие **(c)**. Таким образом, все условия теоремы 4 выполнены, и поэтому средние

$$\frac{1}{2}\int\limits_{\mathbb{R}^4}(p_1^2+q_1^2)\overline{\rho}d^2pd^2q \quad \text{и} \quad \frac{1}{2}\int\limits_{\mathbb{R}^4}(p_2^2+q_2^2)\overline{\rho}d^2pd^2q$$

совпадают (по формуле (3.13)).

Аналогичное рассуждение позволяет вывести теорему 2 из теоремы 4 при дополнительном предположении о рациональной несоизмеримости частот $\omega_j = \sqrt{1+\varepsilon_j}$ $(j = 1,\ldots,n)$. Однако теорема 2 справедлива при более слабом предположении, что среди частот нет равных.

Замечание. Не следует думать, что все интегралы гамильтоновой системы с S-инвариантным гамильтонианом S-инвариантны. Например, при $\varepsilon = 0$ система с гамильтонианом (3.1) допускает интеграл момента $p_1q_2 - p_2q_1$, который меняет знак при перестановке частиц.

§ 4. Тонкая и грубая энтропии

1. Постоянство средней энергии (1.6) гамильтоновой системы соответствует интуитивному представлению о неизменности температуры изолированной системы. Наоборот, постоянство энтропии (1.5) воспринимается многими как «печальный» факт: вместо того чтобы возрастать, она не меняется со временем. В связи с этим ряд авторов пропагандируют точку зрения, что интеграл (1.5) вообще не имеет отношения к термодинамической энтропии. Но это, конечно, не так. Во-первых, для канонического распределения Гиббса

$$\rho = \frac{e^{-\frac{H}{kT}}}{\int\limits_{\Gamma} e^{-\frac{H}{kT}}d\mu}$$

интеграл (1.5) как раз совпадает с энтропией из термодинамики. Во-вторых, согласно (1.17), разность $\overline{S}-S_0$, как правило, положительна и в ряде важных случаев она совпадает с предсказаниями феноменологической термодинамики (см. по этому поводу [6,10]).

2. Выход из этого затруднительного положения предложил сам Гиббс. Согласно Гиббсу, *тонкую энтропию математиков* (1.5) следует заменить *грубой энтропией физиков* (термин Пуанкаре из [2]). Напомним определение грубой энтропии.

Пусть $\{\Gamma_j\}$, $j \in J$, — разбиение фазового пространства Γ на измеримые подмножества:

$$\gamma_j = \mu(\Gamma_j), \qquad 0 < \mu(\Gamma_j) < \infty,\ j \in J.$$

Множество индексов J предполагается конечным или счетным. Положим

$$\rho_j = \frac{1}{\gamma_j} \int\limits_{\Gamma_j} \rho d\mu \tag{4.1}$$

и рассмотрим новую плотность $\hat{\rho} : \Gamma \to \mathbb{R}$ такую, что

$$\hat{\rho}\Big|_{\Gamma_j} = \rho_j,\ j \in J.$$

Будем называть $\hat{\rho}$ *грубой плотностью*, а

$$\hat{S} = -\int\limits_{\Gamma} \hat{\rho} \ln \hat{\rho} d\mu$$

— *грубой энтропией*. Ясно, что

$$\hat{S} = -\sum_{j\in J} \gamma_j \rho_j \ln \rho_j = -\sum_{j\in J} \lambda_j \ln \lambda_j + \sum_{j\in J} \lambda_j \ln \gamma_j,$$

где

$$\lambda_j = \rho_j \gamma_j = \int\limits_{\Gamma_j} \rho d\mu, \quad \sum_{j\in J} \lambda_j = 1.$$

В частности, если все γ_j равны друг другу, то

$$\hat{S} = -\sum \lambda_j \ln \lambda_j + \ln \gamma, \quad \gamma = \gamma_j\ (j \in J).$$

Так что грубая энтропия с точностью до аддитивной постоянной (зависящей только от γ) совпадает с *информационной энтропией* в

случае дискретного распределения вероятностей. Если $\mu(\Gamma) < \infty$, то она принимает максимальное значение, когда все λ_j равны между собой.

Как установил Гиббс и Пуанкаре, тонкая энтропия всегда не превосходит грубую энтропию. Это — следствие неравенства выпуклости. В п. 1 работы [2] утверждается, что (в отличие от грубой энтропии) тонкая энтропия всегда конечна. Это на самом деле не так. Пусть $\Gamma = \mathbb{R}$,

$$\rho(x) \sim \frac{c}{|x| \ln^2 |x|}, \quad c = \mathrm{const} > 0 \tag{4.2}$$

при больших $|x|$. Интеграл

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \rho dx$$

абсолютно сходится, а

$$-\int\limits_{-\infty}^{\infty} \rho \ln \rho dx = \infty.$$

В работе Пуанкаре [2] (фактически со ссылкой на Гиббса) утверждается, что

(A) при измельчении разбиения грубая энтропия сколь угодно точно аппроксимирует тонкую,

(B) грубая энтропия все время увеличивается, *по крайней мере если дать режиму время установиться* (Пуанкаре пишет об этом как о хорошо известном факте).

Эти утверждения повторялись многими авторами как само собой разумеющиеся (см., например, [13, 20]). Однако, как показано в работе [19], оба эти высказывания неверны.

К сожалению, если $\mu(\Gamma) = \infty$, то, вообще говоря, грубая энтропия не аппроксимирует тонкую, даже если диаметр разбиения (а не только его мера) как угодно мал. Это показывает

Пример. Пусть $\Gamma = \mathbb{R}$, а мера $d\mu$ — это обычная мера Лебега на прямой. Пусть $\{a_n\}$, $n \in \mathbb{N}$, — последовательность такая, что

$$0 \leqslant a_n < 1, \quad \sum_{n=1}^{\infty} a_n = 1, \quad \sum_{n=1}^{\infty} a_n \ln a_n = -\infty.$$

В качестве примера можно взять

$$\frac{c}{n \ln^{1+\varepsilon} n}, \quad 0 < \varepsilon \leqslant 1,$$

с подходящим значением c (ср. с формулой (4.2)).

Рассмотрим вероятностную меру с плотностью

$$\rho(x) = \begin{cases} 1, \text{ если } & x \in [n, n + a_n] \quad \text{для} \quad n \in \mathbb{N}, \\ 0 & \text{для остальных} \quad x. \end{cases}$$

Тонкая энтропия такой меры, очевидно, равна нулю (мы принимаем, что $x \ln x$ равно нулю при $x = 0$ по непрерывности). Для любого целого $K > 0$ рассмотрим разбиение

$$\Gamma_j = \left\{ x \in \mathbb{R} : \frac{j}{k} \leqslant x < \frac{j+1}{K} \right\}, \quad j \in \mathbb{Z}.$$

Диаметр разбиения $\{\Gamma_j\}$ равен $\frac{1}{K}$.

Можно показать, что для любого целого $K > 0$ (в том числе и сколь угодно большого) грубая энтропия равна $+\infty$.

Этот пример показывает также, что в случае $\mu(\Gamma) = \infty$ грубая плотность, вообще говоря, не стремится к тонкой (в норме $L_1(\Gamma, d\mu)$) при неограниченном уменьшении диаметра разбиения. Более того, грубая плотность не стремится к тонкой даже в смысле слабой сходимости.

Теорема 1. *Предположим, что Γ компактно, $\rho \in L_1(\Gamma, d\mu)$ и тонкая энтропия конечна. Если*

$$\sup_{j \in J} (\operatorname{diam} \Gamma_j) \to 0, \tag{4.3}$$

то грубая энтропия стремится к тонкой энтропии.

Эта *аппроксимационная теорема* установлена в [19]. В (4.3) диаметр областей разбиения вычисляется в *любой* фиксированной римановой метрике на Γ. Условие (4.3) существенно: если только потребовать, что $\mu(\Gamma_j) \to 0$, то заключение **(A)** также неверно. Таким образом, теорема 1 не является утверждением только из теории меры и интеграла.

Пусть снова Γ компактно и $\rho \in L_1$. Тогда при неограниченном уменьшении диаметра разбиения $\{\Gamma_j\}$ грубая плотность $\hat{\rho}$ с любой наперед заданной точностью аппроксимирует ρ в метрике пространства $L_1(\Gamma, d\mu)$. Это утверждение — несложный факт по сравнению с теоремой 1. В частности, при условии (4.3) грубая плотность слабо сходится к тонкой плотности. Последнее свойство представляется существенным при переходе от микро- к макроописанию (т. е. к исследованию эволюции средних значений динамических величин).

Фазовое пространство гамильтоновых систем некомпактно. Однако можно изучать статистические свойства гамильтоновых систем в инвариантных областях

$$\{(x, y) \in \Gamma : c_1 \leqslant H(x, y) \leqslant c_2\},$$

которые уже могут быть компактными.

3. Формула (4.1) задает грубую плотность $\hat{\rho}_t$ в каждый момент времени (при фиксированном разбиении $\{\Gamma_j\}$). Грубая энтропия

$$\hat{S}_t = -\int\limits_{\Gamma} \hat{\rho}_t \ln \hat{\rho}_t d\mu,$$

в отличие от тонкой, уже зависит от времени.

Заключение **(В)**, восходящее к Гиббсу ([3], гл. XII), в общем случае также несправедливо. Это будет показано в $\S\,5$.

Гиббс пытался доказать ([3], гл. XII), что в типичном случае грубая плотность $\hat{\rho}_t$ сходится при $t \to \infty$ к некоторой функции, зависящей лишь от полной энергии системы. «Пытаться доказать это утверждение почти безнадежно; оно является более сильным, чем эргодическая теорема. Известные доводы самого Гиббса (основанные на аналогиях с перемешиванием жидкостей), даже если отбросить содержащиеся в них существенные ошибки, служат в

лучшем случае указанием на правдоподобность этой «теоремы» (М. Кац [21], гл. III).

Тем не менее справедлива следующая общая

Теорема 2. *Пусть гамильтонова система квазиоднородная, начальная плотность — функция из $L_p(\Gamma, d\mu)$, $1 \leqslant p \leqslant \infty$. Тогда пределы*

$$\lim_{t \to +\infty} \hat{\rho}_t \quad \textit{и} \quad \lim_{t \to -\infty} \hat{\rho}_t \tag{4.4}$$

существуют (в смысле слабой L_p-сходимости) и совпадают.

Сделаем несколько замечаний. Теорема 2 установлена в [19]. Она справедлива для более общего класса динамических систем (не обязательно гамильтоновых) со слоистыми потоками. Как заметил сам Гиббс, для *линейных* гамильтоновых систем грубая плотность $\hat{\rho}_t$ осциллирует и вообще не имеет обычного предела при неограниченном возрастании времени. Однако если в (4.4) обычную сходимость заменить сходимостью по Чезаро, то теорема 2 окажется справедливой для динамических систем общего вида. С другой стороны, предположение Гиббса заведомо справедливо для гамильтоновых систем *с перемешиванием* на изоэнергетических поверхностях. Это наблюдение принадлежит Н.С. Крылову [13]. Однако он не заметил важного обстоятельства: для систем с перемешиванием слабые пределы грубой плотности $\hat{\rho}_t$ при $t \to +\infty$ и $t \to -\infty$ *совпадают*. Такая статистическая симметрия прошлого и будущего противоречит традиционным представлениям об однонаправленности приближения изолированной системы к состоянию теплового равновесия.

Идея доказательства теоремы 2 состоит в следующем. Пусть φ_j — характеристическая функция измеримой области Γ_j. Тогда

$$\rho_j = \frac{1}{\gamma_j} \int\limits_{\Gamma} \rho_t \varphi_j d\mu$$

(формула (4.1)). Поскольку ρ_t слабо сходится к $\overline{\rho}$ при $t \to \infty$, то (применяя общую теорему о слабой сходимости вероятностных мер)

$$\frac{1}{\gamma_j} \int\limits_{\Gamma} \rho_t \varphi_j d\mu \to \frac{1}{\gamma_j} \int\limits_{\Gamma} \overline{\rho} \varphi_j d\mu = \frac{1}{\gamma_j} \int\limits_{\Gamma} \overline{\rho} d\mu. \tag{4.5}$$

Следовательно, $\hat{\rho}_t$ сходится к некоторой кусочно-постоянной функции $\hat{\rho}_\infty$, значение которой в точках куска Γ_j определяется правой частью предельного равенства (4.5).

Несложно показать, что если уровни энергии квазиоднородной гамильтоновой системы компактны, то

$$\int\limits_{\Gamma} \hat{\rho}_\infty d\mu = 1.$$

Таким образом, в этом случае неотрицательная функция $\hat{\rho}_\infty$ также задает вероятностную меру на Γ.

4. Чтобы указать *достаточные* условия возрастания грубой энтропии, снова рассмотрим квазиоднородную гамильтонову систему, ограниченную на *компактную* инвариантную область

$$\Gamma = \{(x,y) : h_1 \leqslant H(x,y) \leqslant h_2\}, \quad h_1 < h_2.$$

Теорема 3 [19]. *Пусть начальная плотность* $\rho_0 : \Gamma \to \mathbb{R}$ *— функция из* $L_1(\Gamma, d\mu)$ *и* $\{\Gamma_j\}$ *— разбиение* Γ. *Если* $S_0 < \overline{S}$,

$$\hat{S}_\infty = -\int\limits_{\Gamma} \hat{\rho}_\infty \ln \hat{\rho}_\infty d\mu < \infty,$$

то при достаточно малых $sup(diam\,\Gamma_j)$ *справедливо неравенство*

$$\hat{S}_0 < \hat{S}_\infty. \tag{4.6}$$

5. Характер возрастания грубой энтропии изучался в работе [22] для дискретных преобразований. В принципиальном плане дискретный случай ничем не отличается от непрерывного: сечение и отображение Пуанкаре сводят непрерывную задачу к дискретной.

Итак, пусть $(\Gamma, d\mu)$ — пространство с мерой, а $g : \Gamma \to \Gamma$ — автоморфизм этого пространства, сохраняющий меру Лиувилля $d\mu$. Плотность $\rho : \Gamma \to \mathbb{R}$ переносится преобразованиями $\{g^n\}$, $n \in \mathbb{Z}$ в соответствии с формулой (1.4):

$$\rho_n(x) = \rho_0(g^{-n}(x)), \quad x \in \Gamma,$$

где ρ_0 — плотность распределения вероятностей в начальный момент $n = 0$. Все основные конструкции (вместе с их свойствами) автоматически переносятся на дискретный случай. В частности, тонкая энтропия

$$S_n = -\int\limits_{\Gamma} \rho_n \ln \rho_n d\mu$$

не зависит от числа итераций n («дискретного времени»).

Пусть теперь $(\Gamma, d\mu)$ — это m-мерный тор

$$\mathbb{T}^m = \{x = (x_1, \dots, x_m) \mod 1\}$$

со стандартной евклидовой метрикой $\langle\cdot,\cdot\rangle$ и стандартной мерой Лебега

$$d\mu = d^m x = dx_1 \dots dx_m.$$

Рассмотрим разбиение тора $\{\Gamma_j\}$, где

$$\Gamma_j = \{x \in \mathbb{T}^m : x = x^{(j)} + y,\, y \in \hat{\Gamma}\},$$
$$\hat{\Gamma} = \{x \in \mathbb{T}^m : |x_k| \leq \varepsilon; \quad k = 1, \dots, m\}.$$

Так что $\hat{\Gamma}$ — это куб с ребром 2ε, а Γ_j — трансляции $\hat{\Gamma}$ — кубы с центрами в точках $x^{(j)} \in \mathbb{T}^m$. Поскольку кубы Γ_j не должны перекрываться, то ε надо брать в виде $1/(2N)$, где N — целое число. Ясно, что $\mu(\Gamma_j) = \gamma = (2\varepsilon)^m$. Положим

$$I(\rho) = \frac{2^{1-m}}{3m} \int\limits_{\mathbb{T}^m} \frac{|\rho'(x)|^2}{\rho(x)} d^m x, \tag{4.7}$$

где

$$|\rho'|^2 = \sum \left(\frac{\partial \rho}{\partial x_i}\right)^2.$$

Теорема 4 [22]. *Если положительная плотность ρ имеет вторые непрерывные производные, то грубая энтропия $\hat{S}$, отвечающая разбиению тора $\{\Gamma_j\}$, есть сумма*

$$S(\rho) + \delta^2 I(\rho) + R, \tag{4.8}$$

где S — тонкая энтропия, $|R| \leqslant c\delta^3$, c — некоторая постоянная, зависящая от плотности ρ, ее первых и вторых производных, $\delta = \sqrt{m}2^m\varepsilon$ — диаметр разбиения.

Как показано в [22], аналогичная оценка имеет место и при более общих способах огрубления плотности вероятностей.

Поскольку тонкая энтропия постоянна, то (согласно (4.8)) поведение грубой энтропии при относительно небольших значениях n (когда $\delta^2 I$ еще больше $c\delta^3$) определяется вторым слагаемым, т. е. интегралом (4.7). В теории Боголюбова этот промежуток времени соответствует *времени начальной хаотизации*. В ряде случаев функцию

$$n \mapsto I(\rho_n) \tag{4.9}$$

можно детально исследовать. Рассмотрим два примера.

(a) Пусть g — интегрируемое отображение сдвига $\mathbb{T}^2 \to \mathbb{T}^2$, определяемое формулой

$$x_1 \mapsto x_1 + x_2, \quad x_2 \mapsto x_2. \tag{4.10}$$

В этом случае функция (4.9) возрастает квадратично:

$$I(\rho_n) = \frac{n^2}{12} \int\limits_{\mathbb{T}^2} \frac{(\rho'_{y_2})^2}{\rho} dx_1 dx_2 + O(n).$$

(b) Если g — линейный автоморфизм тора (автоморфизм Аносова)

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \mapsto A \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \tag{4.11}$$

то функция (4.9) растет уже экспоненциально быстро:

$$I(\rho_n) = \frac{1}{12}(\lambda^{2n}I_+ + \lambda^{-2n}I_-), \quad I_\pm = \int\limits_{\mathbb{T}^2} \frac{\langle v_\pm, \rho' \rangle^2}{\rho} dx_1 dx_2, \tag{4.12}$$

где $\lambda = (3+\sqrt{5})/2 > 1$ — собственное значение матрицы A, а $v_\pm$ — собственные векторы, причем $\langle v_\pm, v_\pm \rangle = 1$.

Конечно, функция (4.12) может возрастать при малых n и немонотонно, но основной вклад вносит первое слагаемое, и поэтому можно положить

$$I(\rho_n) \approx ce^{\mu n}, \quad \mu = 2\ln\lambda > 0,$$

c — положительная постоянная. Так что

$$\hat{S}_n = S + c\delta^2 e^{\mu n}, \quad S = \text{const}. \tag{4.13}$$

Отметим простое, но важное следствие этой формулы: при уменьшении диаметра разбиения (т. е. при уменьшении коэффициента δ) график функции (4.13) переносится без изменений вправо. Действительно, замена δ на δ_1 эквивалентна подстановке

$$n \mapsto n - \frac{2}{\mu}\ln\frac{\delta}{\delta_1}.$$

Таким образом, при уменьшении разбиения грубая энтропия начинает свой рост в более поздние моменты времени, но характар возрастания остается без изменений.

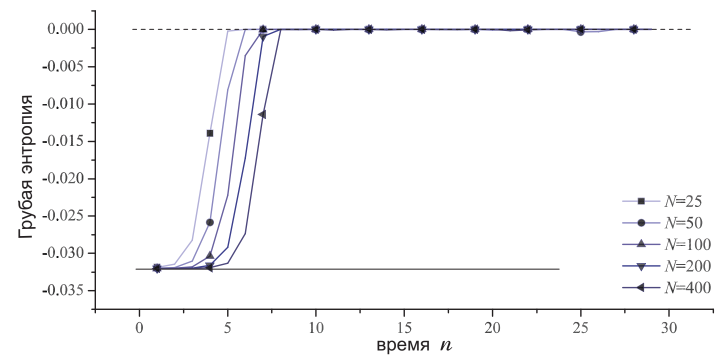

Рис. 3. Графики грубой энтропии как функции времени для автоморфизма Аносова

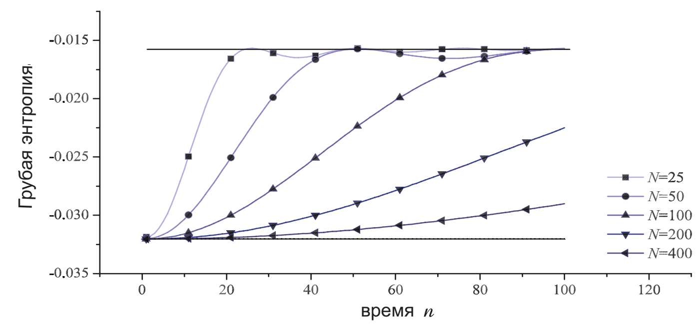

Рис. 4. Графики грубой энтропии для интегрируемого отображения

Это отчетливо видно на рис. 3, где представлена эволюция графиков грубой энтропии для автоморфизма (4.11) в зависимости от измельчения разбиения (напомним, что $\varepsilon = \frac{1}{2N}$). Началь-

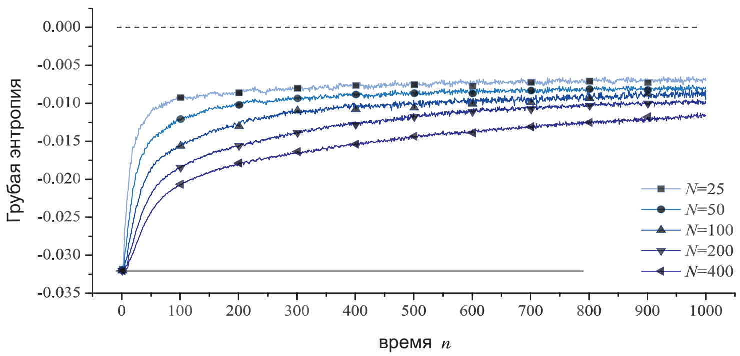

Рис. 5. Грубая энтропия для отображения Чирикова ($k = 1$)

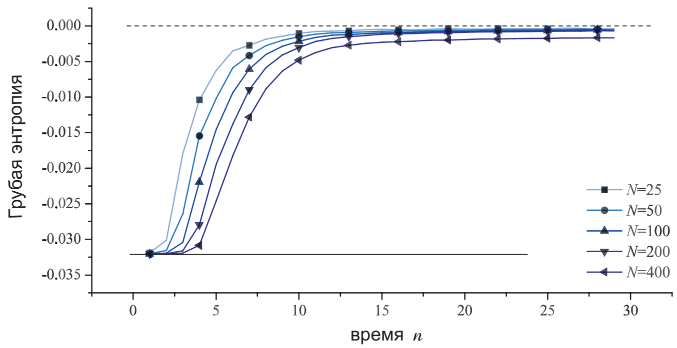

Рис. 6. Грубая энтропия для отображения Чирикова ($k = 4$)

ная плотность задается формулой

$$\rho(x_1, x_2) = 1 + \frac{1}{2}(\sin x_1 + \sin x_2). \tag{4.14}$$

Для сравнения на рис. 4 приведены аналогичные графики для интегрируемого отображения сдвига (4.10). Любопытно отметить, что в этом случае грубая энтропия бесконечно много раз

достигает своего максимума, асимптотически приближаясь снизу к этому значению. Теория этого явления содержится в §5.

Приведем еще два рисунка из работы [22], в которой грубая энтропия подсчитана также для стандартного отображения Чирикова (рис. 5, рис. 6)

$$x_1 \mapsto x_1 + x_2 + k \sin x_1, \quad x_2 \mapsto x_2 + k \sin x_1.$$

Начальная плотность — это снова функция (4.14), а параметр k принимает значения 1 и 4. Видно, что при $k = 1$ грубая энтропия испытывает «флуктуации», величина которых уменьшается с уменьшением диаметра разбиения. А при $k = 4$ картина роста энтропии становится похожей на соответствующую картину в гиперболическом случае (4.11). Естественно, что при возрастании параметра k отображение Чирикова становится более хаотическим. Например, при $k > 4$ все неподвижные точки этого отображения будут гиперболическими.

§ 5. Одномерный идеальный газ

1. Рассмотрим бесстолкновительную сплошную среду, заключенную в одномерный «сосуд» — прямолинейный отрезок. Предполагается, что частицы упруго отражаются от границы сосуда — концов отрезка. Поскольку частицы вообще не взаимодействуют друг с другом, то такую среду можно назвать *идеальным газом*. С другой стороны, при упругом столкновении двух одинаковых частиц, движущихся по одной прямой, происходит прямой обмен их скоростей. Поэтому этот газ можно рассматривать как континуум частиц, которые *постоянно* упруго сталкиваются друг с другом. Такую вполне реалистичную модель идеального газа впервые рассмотрел Пуанкаре в работе [2]. Все это, конечно, является частным случаем общей теории ансамблей Гиббса.

Как заметил Пуанкаре, после перехода к двулистному накрытию отрезка окружностью $\mathbb{T} = \{x \mod 2\pi\}$ уравнение движения частиц принимает совсем простой вид (уравнение (1.12))

$$\dot{x} = \omega, \quad \dot{\omega} = 0. \tag{5.1}$$

2. Пусть $\rho(x, \omega)$ — начальная плотность распределения вероятностей в фазовом пространстве $\Gamma = \mathbb{T} \times \mathbb{R}$; естественно, ρ 2π-периодична по первому аргументу. Чтобы упростить явные формулы для грубой плотности, будем предполагать, что ρ есть произведение двух неотрицательных функций $f : \mathbb{T} \to \mathbb{R}$

и $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$. Будем считать, что

$$\int\limits_0^{2\pi} f(x)dx = 1 \quad \text{и} \quad \int\limits_{-\infty}^{+\infty} g(\omega)d\omega = 1. \tag{5.2}$$

Сначала рассмотрим случай, когда g — *характеристическая функция* отрезка $0 \leqslant \omega \leqslant 1$. Общая ситуация обсуждается ниже.

Пусть $x_0 < x_1 < \ldots < x_n = x_0 + 2\pi$ — n равноотстоящих точек на окружности $\mathbb{T} = \{x \mod 2\pi\}$; так что $x_j - x_{j-1} = \frac{2\pi}{n}$. Они задают разбиение фазового пространства Γ на n частей $\Gamma_1, \ldots, \Gamma_n$:

$$\Gamma_j = [x_{j-1}, x_j] \times \mathbb{R}.$$

Их мера Лиувилля бесконечна. Однако в рассматриваемом случае фазовое пространство системы (5.1) фактически совпадает с прямым произведением $\mathbb{T}$ на отрезок $0 \leqslant \omega \leqslant 1$. Поэтому мера Лиувилля каждого из кусков Γ_j равна $\frac{2\pi}{n}$.

При увеличении n меры кусков разбиения неограниченно убывают, однако их диаметры (в естественной метрике на Γ) к нулю не стремятся. Таким образом, эта ситуация не охватывается аппроксимационной теоремой 1 из §4 и поэтому представляет особый интерес.

Подсчитаем значение грубой плотности распределения вероятностей в момент времени t на j-ом куске разбиения в соответствии с формулой (4.1):

$$\rho_j = \frac{1}{x_j - x_{j-1}} \int\limits_{x_{j-1}}^{x_j} \int\limits_0^1 f(x-\omega t) g(\omega) dx d\omega = \tag{5.3}$$

$$= \frac{1}{t} \int\limits_0^t \left[\frac{1}{x_j - x_{j-1}} \int\limits_{x_{j-1}}^{x_j} f(x-\tau) dx \right] d\tau.$$

Пусть f — непрерывная функция и F — ее первообразная. Так как f 2π-периодична и выполнено (5.2), то

$$F(x) = \frac{x}{2\pi} + G(x),$$

где функция G непрерывно дифференцируема и 2π-периодична. Следовательно, среднее (5.3) можно представить в следующем виде:

$$\rho_j = \frac{1}{2\pi} + \frac{k_j(t)}{t}, \quad 1 \leqslant \omega \leqslant n, \tag{5.4}$$

где

$$k_j(t) = \frac{1}{x_j - x_{j-1}} \int\limits_0^t [G(x_j - \tau) - G(x_{j-1} - \tau)] d\tau.$$

Ясно, что $k_j(0) = 0$ и

$$\sum_{j=1}^n k_j = 0. \tag{5.5}$$

По теореме о среднем

$$G(x_j - \tau) - G(x_{j-1} - \tau) = G'(\xi_j - \tau)(x_j - x_{j-1}),$$

где $\xi_j \in [x_{j-1}, x_j]$ и ξ_j зависит от τ. Следовательно, согласно (5.4),

$$\rho_j(t) = \frac{1}{2\pi} + \frac{G(\xi_j) - G(\xi_j - t)}{t}.$$

При $n \to \infty$ эта формула переходит в следующую:

$$\widetilde{\rho}_t(x) = \frac{1}{2\pi} + \frac{G(x) - G(x-t)}{t}. \tag{5.6}$$

При $t \to 0$ имеем

$$\widetilde{\rho} = \frac{1}{2\pi} + G'(x) = F'(x) = f(x).$$

Устремим теперь время t к бесконечности. Тогда

$$\widetilde{\rho}_t(x) \to \widetilde{\rho}_\infty = \frac{1}{2\pi}.$$

Отметим, что предельная плотность $\widetilde{\rho}_\infty$ совпадает со слабым пределом исходной плотности ρ_t при $t \to \infty$, усредненным по скорости ω. Действительно, слабый предел ρ_t равен $\dfrac{g(\omega)}{2\pi}$.

Формулу (5.6) можно получить по-другому, усредняя плотность

$$\rho_t(x, \omega) = f(x - \omega t) g(\omega)$$

по скоростям:

$$\widetilde{\rho}_t(x) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} f(x - \omega t) g(\omega) d\omega = \int\limits_0^1 f(x - \omega t) d\omega. \tag{5.7}$$

Здесь используется предположение, что g — характеристическая функция отрезка $[0, 1]$. После несложных преобразований из (5.7) получаем (5.6).

3. Эти наблюдения можно обобщить. Пусть $\Gamma = \mathbb{T}^m \times \mathbb{R}^m$, где $\mathbb{T}^m = \{x_1, \ldots, x_m \mod 2\pi\}$ — конфигурационное пространство, а $\mathbb{R}^m = \{\omega_1, \ldots, \omega_m\}$ — пространство скоростей. Заменим уравнения (5.1) более общими:

$$\dot{x}_k = \omega_k, \quad \dot{\omega}_k = 0; \quad 1 \leqslant k \leqslant m.$$

Это — регуляризованные уравнения движения частиц бесстолкновительной среды в m-мерном пространстве. Пусть $K_1 \bigcup \ldots \bigcup K_n$ — разбиение $\mathbb{T}^m$, размеры кусков которого затем будут неограниченно убывать при $n \to \infty$. Оно порождает разбиение фазового пространства Γ на куски $\Gamma_j = K_j \times \mathbb{R}^m$. Пусть снова $\rho(x, \omega) = f(x)g(\omega)$, причем функция f непрерывна, а g интегрируема и

$$\int\limits_{\mathbb{R}^m} g(\omega) d^m\omega = 1.$$

Теорема 1. *При $n \to \infty$ грубая плотность, отвечающая разбиению Γ на куски $\Gamma_1, \ldots, \Gamma_n$, стремится к функции*

$$\widetilde{\rho}_t(x) = \int\limits_{\mathbb{R}^m} f(x - \omega t) g(\omega) d^m\omega. \tag{5.8}$$

При $t \to \infty$ функция (5.8) стремится к $(2\pi)^{-m}$. С другой стороны, слабым пределом плотности $\rho_t(x, \omega)$ является функция $\dfrac{g(\omega)}{(2\pi)^m}$. Таким образом, мы имеем пример, показывающий существенный характер условия (4.3) аппроксимационной теоремы 1 из §4.

4. Согласно (5.4) грубая энтропия $\widehat{S}_t$ равна

$$\frac{2\pi}{n} \sum_{j=1}^{n} h\left(\frac{1}{2\pi} + \frac{k_j(t)}{t}\right), \tag{5.9}$$

где $h(z) = -z \ln z$. Ввиду (5.5) и неравенства Йенсена для вогнутой функции $h(\cdot)$, при всех t величина (5.9) не превосходит

$$\widehat{S}_\infty = \frac{2\pi}{n} \sum h\left(\frac{1}{2\pi}\right) = 2\pi h\left(\frac{1}{2\pi}\right). \tag{5.10}$$

В частности,

$$\widehat{S}_0 \leqslant \widehat{S}_\infty. \tag{5.11}$$

Из (5.9) и (5.10) вытекает важный факт: $\widehat{S}_t \to \widehat{S}_\infty$ при $t \to \pm\infty$.

Отметим еще, что грубая энтропия $\widehat{S}_t$ возрастает, вообще говоря, *не монотонно*. Так, в рассматриваемом выше примере при $n = 2$ эта функция периодически принимает свое максимальное значение $\widehat{S}_\infty$. Действительно, в этом случае (согласно (5.4)) функции k_1 и k_2 ($k_1 = -k_2$) периодические с нулевым средним значением.

Таким образом, мы имеем пример, показывающий, что грубая энтропия может *убывать* с возрастанием времени. Следовательно, предположение **(B)** из §4 ошибочно. Однако если принять дополнительно условие Пуанкаре о том, что *надо дать режиму время установиться*, то предположение **(B)** становится верным (неравенство (5.11)). Этот момент имеет ключевое значение для статистической интерпретации второго закона термодинамики.

Ввиду формулы (5.4), разность

$$\widehat{S}_\infty - \widehat{S}_t \tag{5.12}$$

убывает с ростом времени как $\frac{1}{t^2}$. Этот вывод справедлив и в более общем случае, когда функция g кусочно постоянная. Однако если g — гладкая функция, то разность (5.12) может убывать быстрее. Например, если g — плотность нормального распределения, то (5.12) убывает как $e^{-\lambda t^2}$, $\lambda = \mathrm{const} > 0$.

§ 6. Статистическая механика в конфигурационном пространстве

1. Пусть снова $M = \{x\}$ — конфигурационное пространство, $\Gamma = T^*M$ — фазовое пространство, $H(x, y)$ — квазиоднородный гамильтониан.

Чтобы избежать некоторых технических трудностей, будем, в основном, рассматривать два случая: $M = \mathbb{R}^n$ и $M = \mathbb{T}^n$. Здесь $\Gamma = M \times \mathbb{R}^n$ и имеются естественные глобально определенные обобщенные канонические координаты x, y.

Пусть ρ_t — плотность распределения вероятностей в фазовом пространстве, которая слабо сходится к стационарной плотности $\overline{\rho}$ при $t \to \pm\infty$. Положим

$$u(x, t) = \int\limits_{\mathbb{R}^n} \rho_t(x, y) d^n y. \tag{6.1}$$

Это - плотность распределения ансамбля Гиббса в конфигурационном пространстве:

$$u \geq 0 \quad \text{и} \quad \int\limits_M u(x, t) d^n x = 1$$

для всех t. Второе равенство — следствие теоремы Фубини.

Переход от исходной плотности ρ_t к (6.1) можно рассматривать как способ ее *огрубления*. Для случая, когда $\Gamma = \mathbb{T}^1 \times \mathbb{R}^1$ и $\rho_0(x, y) = f(x) g(y)$, этот механизм огрубления был детально рассмотрен в предыдущем параграфе.

Каждому вероятностному распределению можно сопоставить его энтропию; распределению (6.1) отвечает энтропия

$$s_t = -\int\limits_M u(x,t)\ln u(x,t)d^n x. \tag{6.2}$$

Это — *тонкая энтропия в конфигурационном пространстве*, но грубая в исходном фазовом пространстве (по отношению к тонкой энтропии (1.5)). В отличие от (1.5), энтропия (6.2), как правило, уже не постоянна как функция времени.

2. Исследуем асимптотические (при $t \to \pm\infty$) свойства плотности в конфигурационном пространстве. Сначала рассмотрим случай, когда $M = \mathbb{R}^n$ и

$$H = \frac{1}{2}(y,y).$$

Он отвечает движению по инерции в $\mathbb{R}^n$. Очевидно,

$$\rho_t = \rho(x - yt, y),$$

где ρ — начальная плотность распределения вероятностей в Γ. Справедлива простая

Теорема 1. *Если $\rho \in L_1(\Gamma, d\mu)$, $d\mu = d^n x d^n y$, то и слабо сходится к нулю при $t \to \pm\infty$.*

Это утверждение интуитивно очевидно. Пусть φ - характеристическая функция ограниченной измеримой области $\mathcal{D}$. Тогда

$$\int\limits_{\mathbb{R}^n} u(x,t)\varphi(x)d^n x = \int\limits_{\mathcal{D}} u(x,t)d^n x \to 0,$$

поскольку частицы из ансамбля Гиббса рассеиваются, двигаясь с постоянной скоростью. Поэтому их концентрация в каждой ограниченной области убывает до нуля.

Теорема 1 допускает следующее уточнение.

Теорема 2. *Предположим, что для каждого $t \neq 0$*

$$\left|\rho\left(x - y, \frac{y}{t}\right)\right| \leqslant C(x,y),$$

где $C \geqslant 0$ и для каждого $x \in \mathbb{R}^n$ функция $y \mapsto C(x,y)$ интегрируема. Тогда

$$u(x,t) \to 0$$

при $t \to \pm\infty$ для всех $x \in \mathbb{R}^n$.

Это утверждение отмечено в [23]. При несколько иных предположениях оно обсуждалось в [24].

Теорема 3 [23]. *Пусть выполнены условия теоремы 2 и дополнительно*

1) *при каждом $x \in \mathbb{R}^n$ функция $y \mapsto \rho(x,y)$ непрерывна в нуле,*

2) *для любого компактного подмножества $K \subset \mathbb{R}^n = \{x\}$ функция $C(x,y)$ интегрируема по множеству $K \times \mathbb{R}^n \subset \Gamma$ и*

$$\int\limits_{\mathbb{R}^n} \rho(x,0)d^n x > 0.$$

Тогда для любых компактных подмножеств положительной *меры* K_1 *и* K_2 *пространства* $\mathbb{R}^n = \{x\}$

$$\frac{\int\limits_{K_1} u(x,t)d^n x}{\int\limits_{K_2} u(x,t)d^n x} \to \frac{mes K_1}{mes K_2} \tag{6.3}$$

при $t \to \pm\infty$.

Предельное равенство (6.3) означает, что при неограниченном возрастании времени ансамбль Гиббса стремится равномерно заполнить конфигурационное пространство $\mathbb{R}^n$.

Пример. Пусть $\rho(x,y) = h(y)\varphi(x)$, причем функция h ограничена, измерима и непрерывна в нуле, а функция φ интегрируема. Тогда выполнены все условия теорем 2 и 3.

В частности, пусть h — плотность нормального распределения в $\mathbb{R}^n = \{y\}$

$$h = \frac{e^{-\frac{|y|^2}{2\sigma^2}}}{(\sqrt{2\pi}\sigma)^n} \tag{6.4}$$

(σ^2 — дисперсия), а φ — суммируемая функция (из L_1). Тогда функция (6.1) удовлетворяет следующему уравнению

$$u'_t = t\sigma^2 \Delta u, \tag{6.5}$$

где штрих обозначает производную, а Δ — оператор Лапласа. Действительно,

$$\begin{aligned} u(x,t) &= \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\sigma)^n}\int\limits_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{|y|^2}{2\sigma^2}}\varphi(x-yt)d^n y = \\ &= \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\sigma t)^n}\int\limits_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{|x-\xi|^2}{2\sigma^2 t^2}}\varphi(\xi)d^n\xi. \end{aligned} \tag{6.6}$$

Полагая $\tau = \frac{t^2}{2}$, замечаем, что интеграл справа — решение уравнения теплопроводности

$$u'_\tau = \sigma^2 \Delta u \tag{6.7}$$

с начальным условием $u|_{\tau=0} = \varphi$.

В отличие от классического уравнения теплопроводности, диффузионное уравнение (6.5) инвариантно при обращении времени $t \mapsto -t$. Это отражает свойство обратимости уравнения движения свободной частицы. Следовательно, концентрация частиц в каждой точке $x \in \mathbb{R}^n$ неограниченно убывает как при $t \to +\infty$, так и при $t \to -\infty$.

С точки зрения статистической механики более естественно трактовать распределение (6.4) как распределение Максвелла, причем дисперсия σ^2 пропорциональна абсолютной температуре газа ($\sigma^2 = kT$, k — постоянная Больцмана). Это распределение не меняется со временем (поскольку ансамбль Гиббса — бесстолкновительная среда), а поле температур пропорционально плотности бесстолкновительной среды (после отождествления $\frac{t^2}{2}$ с τ).

Простое равенство (6.6) также полезно и для анализа распространения тепла в $\mathbb{R}^n$. Например, пусть $\varphi > 0$ внутри открытой области $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ и $\varphi = 0$ вне ее. Тогда $u(x,t) > 0$ в каждой точке $x \in \mathbb{R}^n$ для любого сколь угодно малого $t > 0$. Это свойство немедленно вытекает из закона движения бесстолкновительной среды: как бы далеко ни была точка x, через любой малый промежуток времени ее достигнут быстрые частицы из области $\mathcal{D}$.

Кстати сказать, из теоремы 6.2 вытекает, в частности, известное свойство решений классического уравнения теплопроводности (6.7): в каждой точке $x \in \mathbb{R}^n$ оно стремится к нулю при $\tau \to \infty$. Однако автор не встречал упоминания свойства (6.3): в данном случае интегралы в левой части пропорциональны количеству тепла, заключенного в объемах K_1 и K_2.

3. Было бы ошибкой думать, что функции вида (6.1) удовлетворяют уравнению диффузии привычной формы. Пусть $n = 1$ и снова будем считать, что

$$\rho(x,y) = h(y)\varphi(x). \tag{6.8}$$

Положим $h(y) = e^y$, когда $y \leqslant 0$, и $h(y) = 0$, когда $y > 0$. Тогда (6.1) примет вид

$$u(x,t) = \int\limits_{-\infty}^{0} e^y \varphi(x - yt)\,dy. \tag{6.9}$$

Интегрирование по частям приводит к соотношению

$$u = tu'_x + \varphi(x), \tag{6.10}$$

которое вообще не содержит производной u'_t. Подставляя $t = 0$ в (6.10), получаем, что $u(x,0) = \varphi(x)$.

Дифференцированием по t функция φ исключается из (6.10). Таким образом, мы приходим к уравнению второго порядка

$$u'_t = (tu'_x)'_t \tag{6.11}$$

с условием Коши $u|_{t=0} = \varphi$.

Поскольку условия теоремы 2, очевидно, выполнены, то интеграл (6.9) стремится к нулю при $t \to \pm\infty$. Таким образом, уравнение (6.11) также можно рассматривать как уравнение диффузии.

В отличие от уравнения (6.5), уравнение (6.11) не инвариантно при обращении времени. Этот факт имеет простое объяснение: все частицы бесстолкновительной среды движутся влево. Кстати сказать, функция h разрывна в нуле и свойство (6.3) не выполнено. Чтобы убедиться в этом, достаточно взять отрезки K_1 и K_2, расположенные соответственно слева и справа от нуля.

Чтобы иметь симметрию между прошлым и будущим, достаточно предположить наличие симметрии между левым и правым в распределении скоростей. Действительно, если $h(-y) = h(y)$, то $u(x,-t) = u(x,t)$.

Пусть, например,

$$h(y) = \frac{1}{2}e^{-|y|}.$$

Тогда функция (6.1) удовлетворяет эволюционному уравнению

$$u'_t = \left(\frac{t^2}{2}u''_{xx}\right)'_t \tag{6.12}$$

с данными Коши $u|_{t=0} = \varphi$. Оно уже инвариантно при подстановке $t \mapsto -t$.

Изложенные соображения показывают, что диссипативное свойство плотности распределения в конфигурационном пространстве (6.1) имеет более универсальную природу по сравнению со свойствами решений уравнения диффузии привычного вида. Уравнение диффузии может иметь необычный вид (скажем, (6.11) или (6.12)), а свойство диссипации при этом сохраняется.

4. Рассмотрим теперь общий случай компактного конфигурационного пространства.

Теорема 4. *При $t \to \pm\infty$ функция (6.1) слабо сходится к*

$$\overline{u}(x) = \int\limits_{\mathbb{R}^n} \overline{\rho}(x,y) d^n y, \tag{6.13}$$

где $\overline{\rho}$ — слабый предел плотности ρ_t.

Действительно,

$$\int_M u(x,t)\varphi(x) d^n x = \int\limits_\Gamma \rho_t(x,y)\varphi(x) d^n x d^n y \to$$
$$\int\limits_\Gamma \overline{\rho}(x,y)\varphi(x) d^n x d^n y = \int\limits_M \overline{u}\varphi d^n x.$$

Теорема 4, разумеется, справедлива в предположении о существовании слабого предела $\overline{\rho}$ (например, достаточно предположить, что гамильтониан - квазиоднородная функция в фазовом

пространстве). В общем случае обычную сходимость следует заменить сходимостью по Чезаро.

Заключение теоремы 4 можно усилить при некоторых дополнительных предположениях. С этой целью рассмотрим движение по инерции по «плоскому» тору $\mathbb{T}^n = \{x_1, \ldots, x_n \mod 2\pi\}$. Плотность бесстолконовительной среды в конфигурационном пространстве снова дается формулой

$$u(x,t) = \int\limits_{\mathbb{R}^n} \rho(x - yt, y) d^n y.$$

Слабый предел этой функции при $t \to \pm\infty$ равен

$$\overline{u} = \frac{1}{(2\pi)^n} \int\limits_{\mathbb{T}^n} \int\limits_{\mathbb{R}^n} \rho(x,y) d^n x d^n y.$$

Укажем условия, при которых

$$u(x,t) \to \overline{u}$$

при $t \to \pm\infty$ для всех $x \in \mathbb{T}^n$.

Пусть снова выполнено (6.8) и пусть

$$\sum \varphi_m e^{i(m,x)}, \quad m \in \mathbb{Z}^n$$

— ряд Фурье ограниченной измеримой функции $\varphi : \mathbb{T}^n \to \mathbb{R}$.

Теорема 5 [24]. *Если*

$$\sum |\varphi_m| < \infty,$$

то $u(x,t) \to \overline{u}$ при $t \to \pm\infty$ равномерно по $x \in \mathbb{T}^n$.

5. В заключение этого параграфа — несколько слов о свойствах энтропии в конфигурационном пространстве. Она определяется равенством (6.2). Положим

$$\overline{s} = -\int\limits_M \overline{u} \ln \overline{u} d^n x,$$

где $\overline{u}$ — слабый предел плотности в конфигурационном пространстве.

В предположениях теоремы 5 плотность u *равномерно* сходится к $\overline{u}$. Тогда, очевидно, $s_t \to \overline{s}$ при $t \to \pm\infty$. Однако совсем не обязательно, что энтропия в конфигурационном пространстве *монотонно* возрастает, начиная с некоторого момента времени. Контрпример указан в §5.

Особый интерес представляет случай, когда слабый предел $\overline{u}$ вообще не зависит от положения системы. Если M компактно, то тогда

$$\overline{u} = (\operatorname{vol} M)^{-1}$$

ввиду равенства

$$\int\limits_M \overline{u} d^n x = 1.$$

В этом случае

$$\overline{s} = -\int\limits_M \overline{u} \ln \overline{u} d^n x = \ln(\operatorname{vol} M).$$

Таким образом, энтропия в конфигурационном пространстве в состоянии теплового (статистического) равновесия не зависит от

внутренней энергии (температуры) системы. Изменение энтропии равно логарифму от отношения объемов в конечном и начальном состояниях. Это — правильное соотношение из термодинамики адиабатических процессов идеальных сред, когда система не получает и не отдает тепло.

Соотношение $\overline{u} = \mathrm{const}$ заведомо выполнено для эргодических биллиардов. Как будет показано в следующем параграфе, оно справедливо и для некоторого класса неэргодических биллиардов в многогранниках.

§ 7. Бесстолкновительный газ в многогранниках

1. Один из основных результатов статьи Пуанкаре [2] — это открытие необратимого поведения континуума бесстолкновительных частиц в прямоугольном параллелепипеде с зеркальными стенками: при $t \to +\infty$ и при $t \to -\infty$ такой газ необратимо стремится выровнять свою плотность. Это утверждение Пуанкаре доказывает в предположении, что начальная плотность ρ распределения частиц в фазовом пространстве *непрерывно дифференцируема*. В [10] показано, что для этого достаточно минимального предположения $\rho \in L_1$.

Этот вывод очевидно согласуется с обратимостью уравнений движения (так снимается *парадокс Лошмидта*) и не противоречит свойству возвращаемости частиц (*парадокс Цермело*). Действительно, каждая отдельная частица бесконечно много раз сколь угодно близко оказывается около своего начального состояния. Однако эта возвращаемость не является равномерной по времени и поэтому континуум в целом, конечно, не обладает свойством возвращаемости.

Любопытно отметить, что Пуанкаре касается этого вопроса и в своей книге «Теория вероятностей» (1912 г.), причем в ее разных местах высказываются *разные* точки зрения. Так, во введении к книге он обсуждает вопрос о влиянии формы сосуда на стремление бесстолкновительного газа к равномерному распределению. Пуанкаре замечает, что этого заведомо не случится, если

сосуд сферический или имеет форму *прямоугольного параллелепипеда* (ввиду свойства интегрируемости биллиардов в этих областях). С другой стороны, книга заканчивается фразой о том, что бесстолкновительный газ в *прямоугольном параллелепипеде* независимо от закона начального распределения в конце концов равномерно заполнит этот сосуд.

Сразу отметим, что в сферическом сосуде бесстолкновительный газ действительно не выравнивает свою плотность. Наоборот, если стенки сосуда вогнуты внутрь (рассеивающий биллиард или *биллиард Синая*), то имеется асимптотическое выравнивание плотности: ввиду свойства эргодичности, слабый предел $\overline{\rho}$ зависит лишь от квадрата скорости частиц и поэтому предельная плотность газа $\overline{u}$ в конфигурационном пространстве постоянна.

В работе Э. Хлавки 1974 г. [25] рассматривался дискретный вариант задачи Пуанкаре (но без упоминания работы [2]). Речь шла об идеальном газе в прямоугольном параллелепипеде, состоящем из N (N велико) невзаимодействующих частиц. Показано, что при больших N бóльшую часть времени частицы практически равномерно заполняют такой сосуд. Это утверждение строго сформулировано с указанием точных оценок. При $N \to \infty$ приходим к картине Пуанкаре.

В недавней работе Л. Бунимовича [26] обсуждается аналогичное явление. Свойство равнораспределенности N частиц автор называет «LAB»-эффектом. Правда, приведенные в [26] определения формализуют более слабые свойства системы N частиц по сравнению с работой Хлавки.

2. Как быстро устанавливается тепловое равновесие бесстолкновительного газа в сосуде, имеющем форму параллелепипеда? Этот вопрос обсуждался в работе [10] для начального распределения $\rho = h(v)\varphi(x)$, где h — плотность нормального распределения по скоростям, а φ — неотрицательная измеримая функция в параллелепипеде

$$\Pi^n = \{x \in \mathbb{R}^n : 0 \leqslant x_1 \leqslant l_1, \ldots, 0 \leqslant x_n \leqslant l_n\},$$

причем

$$\int\limits_{\Pi} \varphi(x) d^n x = 1.$$

Можно считать, что по скоростям мы уже имеем распределение Максвелла

$$h(v) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\sigma)^n} e^{-\frac{v^2}{2\sigma^2}}, \quad v^2 = v_1^2 + \cdots + v_n^2, \tag{7.1}$$

и рассматривается задача о выравнивании плотности в сосуде прямоугольной формы. В этом случае $\sigma^2 = kT$, где k - постоянная Больцмана, T — абсолютная температура.

Пусть G — измеримая подобласть в Π:

$$K_G(t) = \int\limits_G \int\limits_{\mathbb{R}^n} h(v)\varphi(x - \widetilde{v}t) d^n x d^n v, \tag{7.2}$$

где $\widetilde{v}$ — скорость точек газа в момент времени t после соответствующего числа отражений от стенок Π; до первого удара о стенку, конечно, $\widetilde{v} = v$. Формула (7.2) определяет долю частиц бесстолкновительного газа, которые в момент t расположены в области G.

В [10] получена следующая оценка:

$$\left| K(t) - \frac{\mathrm{mes} G}{\mathrm{mes} \Pi} \right| \leqslant \frac{\mathrm{mes} G}{\mathrm{mes} \Pi} \sum{}' e^{-\frac{\pi^2}{2}\sigma^2 \left(\frac{m}{l}, \frac{m}{l}\right) t^2}, \tag{7.3}$$

где $\dfrac{m}{l} = \left(\dfrac{m_1}{l_1}, \ldots, \dfrac{m_n}{l_n}\right)$, $(m_1, \ldots, m_n) \in \mathbb{Z}^n \setminus \{0\}$. Эта оценка универсальная: в нее не входит функция φ, задающая начальное распределение частиц в параллелепипеде. В частности, в качестве φ можно взять δ-функцию Дирака. В этом случае газ в начальный момент будет сосредоточен в одной точке (что, естественно, не противоречит предположению о бесстолкновительности среды). Так как σ^2 пропорционально температуре T, то ряд в (7.3) на самом деле зависит от комбинации $\dfrac{t}{\sqrt{T}}$. Плотность выравнивается быстрее, чем по экспоненте, причем «время выравнивания» убывает с ростом температуры как $\dfrac{1}{\sqrt{T}}$.

Оценка (7.3) доказана в [10] с помощью перехода к накрытию Π n-мерным тором, разветвленному на границе Π. После этого задача о движении в Π сводится к анализу вполне интегрируемой системы в фазовом пространстве $\mathbb{T}^n \times \mathbb{R}^n$.

3. Укажем другой путь к получению оценки вида (7.3), основанный на использовании «обратимого» уравнения диффузии (6.5).

С этой целью замостим $\mathbb{R}^n$ параллелепипедами, последовательно отражая исходный параллелепипед Π относительно его граней. Продолжим функцию $\varphi : \Pi \to \mathbb{R}$ до функции $\widehat{\varphi} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ так, что

• ограничение $\widehat{\varphi}$ на Π совпадает с φ,

• $\widehat{\varphi}$ инвариантна относительно группы последовательных отражений Π относительно граней.

Другими словами, функция $\widehat{\varphi}$ периодична по $x_1, \ldots, x_n$ с периодами $2l_1, \ldots, 2l_n$.

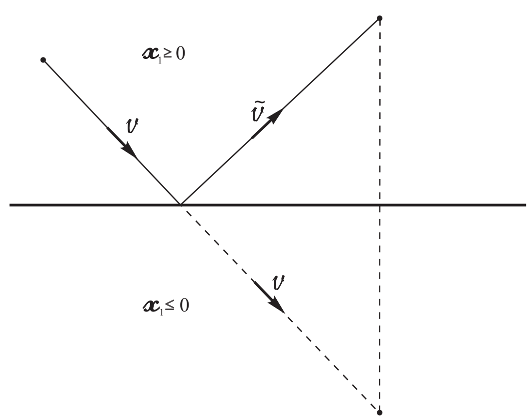

Рис. 7. К выводу (7.4).

Утверждается, что

$$u(x,t) = \int_{\mathbb{R}^n} h(v)\varphi(x - \widetilde{v}t)d^n v = \int_{\mathbb{R}^n} h(v)\widehat{\varphi}(x - vt)d^n v. \qquad (7.4)$$

Продемонстрируем идею доказательства этой формулы для случая, когда конфигурационное пространство системы является полупространством $x_1 \geqslant 0$. Продолжим функцию $\varphi : \{x_1 \geqslant 0\} \to \mathbb{R}$ до функции $\widehat{\varphi} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, полагая

$$\widehat{\varphi}(-x_1, x_2, \ldots, x_n) = \varphi(x_1, x_2, \ldots, x_n).$$

Доказательство формулы (7.4) непосредственно видно на рис. 7. В общем случае мы имеем сходную ситуацию: формула (7.4) остается справедливой после любого числа отражений.

Теперь вспомним, что (поскольку h — плотность нормального распределения (7.1)) функция (7.4) удовлетворяет обратимому уравнению диффузии в $\mathbb{R}^n$

$$u'_t = t\sigma^2 \Delta u \qquad (7.5)$$

с начальным условием $u(x, 0) = \widehat{\varphi}(x)$.

Из теории классического уравнения теплопроводности хорошо известно, что:

(A) при $|t| > 0$ функция (7.4) аналитична по x в $\mathbb{R}^n$,

(B) эта функция не меняется при последовательных отражениях $\mathbb{R}^n$ относительно границы Π (поскольку тем же свойством обладает и данное Коши $\widehat{\varphi}$).

Из этих свойств вытекает, в частности, что

$$\frac{\partial u}{\partial \nu} = 0 \quad (\nu \text{ — нормаль к границе } \Pi)$$

в точках на границе параллелепипеда Π. Кстати сказать, этот факт имеет простую физическую интерпретацию: нет потока тепла (т.е. частиц бесстолкновительного газа) через границу сосуда.

Таким образом, мы имеем решение уравнения теплопроводности (7.5) $u'_\tau = \sigma^2 \Delta u$, $\tau = \dfrac{t^2}{2}$ в параллелепипеде П с начальным условием $u|_{\tau=0} = \varphi$ и граничным условием Неймана. Согласно известной теореме о стабилизации решений второй краевой задачи, решение $u(x,\tau)$ уравнения теплопроводности во всех точках x стремится к константе $\overline{u}$, которая удовлетворяет условию

$$\int\limits_{\Pi} \overline{u} d^n x = \int\limits_{\Pi} \varphi(x) d^n x.$$

Согласно предположению, интеграл справа равен единице. Следовательно:

$$\overline{u} = (\text{mes}\Pi)^{-1} = (l_1 \cdots l_n)^{-1}. \tag{7.6}$$

Это утверждение имеет ясный физический смысл: в отсутствие притока и оттока тепла происходит выравнивание температуры связного тела.

Оценку скорости выравнивания температуры можно вывести из следующих соображений. Вторая краевая задача для уравнения теплопроводности имеет частные решения вида

$$e^{\lambda\tau}\xi(x), \quad \lambda = \text{const},$$

где $\Delta\xi = \dfrac{\lambda}{\sigma^2}\xi$, причем

$$\left.\frac{\partial\xi}{\partial\nu}\right|_{\partial\Pi} = 0.$$

Для прямоугольного параллелепипеда полная ортогональная система собственных функций предъявляется в явном виде. Это

функции

$$\cos\frac{\pi m_1}{l_1}x_1 \cos\frac{\pi m_2}{l_2}x_2 \cdots \cos\frac{\pi m_n}{l_n}x_n,$$

где $m_1, m_2, \ldots, m_n$ — целые числа. Им отвечают собственные значения

$$-\pi^2\sigma^2\left(\frac{m_1^2}{l_1^2} + \frac{m_2^2}{l_2^2} + \cdots + \frac{m_n^2}{l_n^2}\right). \tag{7.7}$$

Нулевое собственное значение (когда $m_1 = \ldots = m_n = 0$) соответствует равновесному решению (7.6). Пусть μ — минимальное по абсолютной величине ненулевое собственное значение (7.7):

$$\mu = -\frac{\pi^2\sigma^2}{l^2}, \quad l = \max_j l_j.$$

Тогда разность между $u(x,\tau)$ и $\overline{u}$ убывает как $\exp(\mu\tau)$. Более точно, пусть $\varphi \in L_2$. Тогда $u \in L_2$ для всех $\tau > 0$ и справедлива оценка

$$\left\| u(x,\tau) - \frac{1}{\text{mes}\Pi}\int\limits_{\Pi}\varphi(x)d^n x \right\|_{L_2} \leqslant Ce^{\mu\tau}\|\varphi\|_{L_2}, \tag{7.8}$$

причем постоянная C не зависит от функции φ (см., например, [27]). В действительности имеет место даже более сильное неравенство: в левой части норму в $L_2(\Pi)$ можно заменить нормой в пространстве $H^1(\Pi)$.

Оценка (7.8) имеет вид

$$\|u(x,t) - \overline{u}\|_{L_2} \leqslant ce^{-\frac{\pi^2\sigma^2}{2l^2}t^2}, \quad c = \text{const}.$$

По своему смыслу она вполне соответствует неравенству (7.3).

Напомним теперь, что из сходимости в L_2 вытекает сходимость в метрике L_1. Выведем отсюда, что функция K, определяемая (7.2), стремится при $t \to \pm\infty$ к отношению $\frac{\text{mes}G}{\text{mes}\Pi}$. Действительно, пусть

$$\rho_t(x, v) = h(v)\varphi(x - \widetilde{v}t)$$

и g — характеристическая функция области G. Тогда

$$K(t) = \int\limits_{\Pi}\int\limits_{\mathbb{R}^n} \rho_t(x, v)g(x)d^nxd^nv = \int\limits_{\Pi} u(x, t)g(x)d^nx.$$

Далее:

$$\left|\int\limits_{\Pi} u(x, t)g(x)d^nx - \frac{\text{mes}G}{\text{mes}\Pi}\right| =$$
$$= \left|\int\limits_{\Pi} u(x, t)g(x)d^nx - \int\limits_{\Pi} \overline{u}g(x)d^nx\right| =$$
$$= \left|\int\limits_{\Pi} (u - \overline{u})gd^nx\right| \leqslant \left[\int\limits_{\Pi} (u - \overline{u})^2d^nx\right]^{\frac{1}{2}} \left[\int\limits_{\Pi} g^2d^nx\right]^{\frac{1}{2}} =$$
$$= \sqrt{\text{mes}\Pi}\|u(x, t) - \overline{u}\|_{L_2} \to 0,$$

когда $t \to \pm\infty$. Что и требовалось.

4. Эту идею можно применить к задаче о равнораспределенности бесстолкновительного газа в многогранниках. Под многогранником M (как это принято в геометрии) понимается компактный выпуклый полиэдр в n-мерном евклидовом пространстве E^n. Частицы бесстолкновительного (идеального) газа движутся по инерции внутри многогранника M, упруго отражаясь от его границы.

С многогранником M связано дискретное *семейство отражений* E^n, которое обозначим G и которое строится следующим индуктивным способом. Семейство G содержит отражения E^n относительно всех граней выпуклого многогранника M; пусть это будут $g_1, \ldots, g_s$ ($g_j^2 = id$). Рассмотрим выпуклые многогранники $g_1(M), \ldots, g_s(M)$ — образы M при отражениях g_j. Семейство G содержит отражения E^n относительно всех граней многогранников $g_1(M), \ldots, g_s(M)$ и так далее. Семейство G не обязано быть группой. Однако при желании G можно расширить до группы, добавляя композиции преобразований из G.

Дадим некоторые определения. Функция $\widehat{\varphi} : E^n \to \mathbb{R}$ называется *инвариантной* относительно G, если

$$\widehat{\varphi}(g(x)) = \widehat{\varphi}(x)$$

для всех $x \in E^n$ и всех $g \in G$. Суммируемую функцию $\varphi : M \to \mathbb{R}$ назовем *допустимой*, если φ является ограничением на M измеримой функции $\widehat{\varphi} : E^n \to \mathbb{R}$, инвариантной относительно G. Измеримую область $\mathcal{D} \subset M$ назовем *допустимой*, если ее характеристическая функция является допустимой функцией.

Приведем некоторые примеры. Очевидно, сам многогранник M всегда будет допустимой областью. Если M — прямоугольный параллелепипед в E^n, то любая измеримая подобласть в M будет допустимой. Этот факт справедлив в более общем случае, когда M — *альков Вейля* : все E^n можно замостить образами алькова при последовательном отражении относительно граней. В равнобедренном треугольнике на плоскости с углами $\frac{\pi}{6}$, $\frac{\pi}{6}$ и $\frac{2\pi}{3}$ допустимые области симметричны относительно биссектрисы тупого угла. Не исключено, что в типичном многограннике имеется только одна (с точность до множества нулевой меры) допустимая область, которая совпадает с M.

Теорема 1. *Предположим, что начальная плотность распределения бесстолкновительной среды — произведение $h\varphi$, где h — плотность нормального распределения по скоростям* (7.1), *а $\varphi : M \to \mathbb{R}$ — допустимая функция. Тогда при $t \to \pm\infty$ бесстолкновительная среда необратимо стремится равномерно заполнить многогранник M.*

В частности, пусть в начальный момент бесстолкновительный газ с нормальным распределением по скоростям равномерно заполняет допустимую область в M. Тогда, свободно рассеиваясь по всему M, газ будет стараться заполнить M с постоянной плотностью. По-видимому, в теореме 1 предположение о допустимости функции φ нельзя опустить.

Теорема 1 доказывается методом, изложенным в п. 3. Ключевой момент — формула (7.4), которая позволяет свести задачу об эволюции плотности в M к анализу решений второй краевой задачи для обратимого уравнения диффузии (7.5).

Справедливо также утверждение, двойственное теореме 1.

Теорема 2. *Предположим, что начальная плотность распределения бесстолкновительной среды — произведение $h\varphi$, где h — плотность нормального распределения по скоростям* (7.1), *а $\varphi : M \to \mathbb{R}$ — любая неотрицательная суммируемая функция. Тогда для любой допустимой области $\mathcal{D} \subset M$ справедливо соотношение*

$$K_{\mathcal{D}}(t) \to \frac{\operatorname{mes} \mathcal{D}}{\operatorname{mes} M}, \quad t \to \pm\infty,$$

где $K_{\mathcal{D}}$ — интеграл (7.2).

Доказательства теорем 1 и 2 можно найти в статье [28].

§ 8. Статистическое равновесие в системах с медленно меняющимися параметрами

1. Снова рассмотрим задачу об эволюции идеального газа (как бесстолкновительной сплошной среды) в сосуде, который имеет форму прямоугольного ящика

$$\Pi^n = \{x \in \mathbb{R}^n : 0 \leqslant x_1 \leqslant \ell_1, \ldots, 0 \leqslant x_n \leqslant \ell_n\}$$

с зеркальными стенками. Как уже говорилось, любая плотность начального распределения $\rho : \Gamma \to \mathbb{R}$ ($\Gamma = \Pi \times \mathbb{R}^n$) слабо сходится к функции $\overline{\rho}$, которая не зависит от точки параллелепипеда Π. Следовательно, $\overline{\rho}$ — функция от скоростей $v_1, \ldots, v_n$. Поскольку $\overline{\rho}$ — первый интеграл уравнений движения частицы в ящике, то эта функция не меняется при смене знака каждой скорости v_j (что происходит при упругом ударе о j-ую стенку). Значит, $\overline{\rho}$ будет четной функций скоростей или, что то же самое, она зависит лишь от квадратов скоростей $v_1^2, \ldots, v_n^2$. Такие распределения порождают уравнение состояния типа уравнения Клапейрона–Менделеева (см. по этому поводу [6, 29]).

Будем теперь медленно менять размеры параллелепипеда Π, считая длины ℓ_s гладкими функциями медленного времени $\tau = \varepsilon t$, где ε — малый параметр. При $\varepsilon = 0$ размеры сосуда не меняются. В термодинамике считается, что бесконечно медленное изменение параметров приводит к *обратимому квазистатическому процессу*, когда в каждый момент времени состояние можно считать практически равновесным. Мы попытаемся строго обосновать эту гипотезу для рассматриваемой модельной системы, основываясь на теории *адиабатических инвариантов*. Более точно, будут рассмотрены следующие две задачи.

1) Достигнет ли бесстолкновительный газ состояния, мало отличающегося от статистического равновесия, если параметры меняются медленно, а время t достаточно велико (порядка $1/\varepsilon$)?

2) Предположим, что в начальный момент времени $t = 0$ бесстолкновительный газ уже находился в статистическом равновесии и при $t \geqslant 0$ стенки сосуда начали медленно и плавно двигаться. Будет ли газ в последующие моменты времени практически оставаться в состоянии статистического равновесия и как долго такой процесс можно считать квазистатическим?

2. Начнем с рассмотрения второй задачи. Пусть длины сторон параллелепипеда $\ell_1, \ell_2, \ldots, \ell_n$ — гладкие функции от εt и ρ — начальная плотность распределения вероятностей. Тогда плотность ρ_t (решение неавтономного уравнения Лиувилля с начальным данным ρ) в момент времени t зависит (кроме фазовых переменных x, v) еще и от ε. Будем считать, что произведение $\ell_1, \ell_2, \ldots, \ell_n$ (объем Π) ограничено и нигде не обращается в нуль. Пусть, как обычно, p и q — положительные числа такие, что $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$.

Теорема 1 [30]. *Если плотность $\rho \in L_p(\Gamma, d^n x d^n v)$ зависит лишь от $v_1^2, v_2^2, \ldots, v_n^2$, то найдется вероятностная мера*

$$\nu_t(v_1^2, v_2^2, \ldots, v_n^2, \varepsilon) d^n x d^n v,$$
$$\nu_t \in L_p, \quad \nu_0 = \rho,$$

такая, что для любой $\varphi \in L_q$ $(\Gamma, d^n x d^n v)$ и любого $t \in [0, c\varepsilon^{-1}]$ (c — некоторая константа)

$$\Big| \int\limits_\Gamma \rho_t \varphi d^n x d^n v - \int\limits_\Gamma \nu_t \varphi d^n x d^n v \Big| \to 0 \tag{8.1}$$

при $\varepsilon \to 0$.

Плотность ν_t на самом деле зависит от εt. Ее явный вид указан ниже.

Функцию ν_t можно трактовать как «стационарную» плотность распределения вероятностей в момент времени t; при вычислении средних значений динамических величин плотность ρ_t можно заменить плотностью ν_t. Например, пусть $p = 1$ и φ — характеристическая функция измеримой области $\Phi \subset \Pi$. Тогда, согласно (8.1), интеграл

$$\int\limits_\Gamma \rho_t \varphi d^n x d^n v \tag{8.2}$$

при малых ε будет сколь угодно близок к отношению $\dfrac{\operatorname{mes}\Phi}{\operatorname{mes}\Pi}$. Значение интеграла (8.2) совпадает с долей частиц из ансамбля Гиббса, находящихся в момент времени t в области Φ. Следовательно,

если ε мало, то на достаточно длинном интервале времени $(\sim \frac{1}{\varepsilon})$ бесстолкновительный газ будет по-прежнему практически равномерно распределен по объему сосуда.

Для доказательства теоремы 1 положим

$$\nu_t(v_1^2, v_2^2, \ldots, v_n^2, \varepsilon) = \rho \left(\frac{v_1^2 \ell_1^2}{\ell_1^2(0)}, \frac{v_2^2 \ell_2^2}{\ell_2^2(0)}, \ldots, \frac{v_n^2 \ell_n^2}{\ell_n^2(0)} \right). \tag{8.3}$$

Ясно, что $\nu_t \in L_p$ (если $\rho \in L_p$), $\nu_0 = \rho$ и

$$\int\limits_\Gamma \nu_t(v^2, \varepsilon) d^n x d^n v = 1$$

при всех значениях t. Как выглядит решение ρ_t уравнения Лиувилля с данным Коши ρ? Для этого надо обратить общее решение уравнений частицы

$$x = (t, x_0, v_0), \quad v = v(t, x_0, v_0)$$

и подставить полученную формулу для $v_0 = v(0)$ в выражение $\rho(v_1^2(0), \ldots, v_n^2(0))$. Итак, $\rho_t(x, v) = \rho(v_0^2)$. Далее, произведения $v_k^2 \ell_k^2$ будут адиабатическими инвариантами:

$$|v_k^2(t) \ell_k^2(\varepsilon t) - v_k^2(0) \ell_k^2(0)| \leqslant c\,\varepsilon$$

при $0 \leqslant t \leqslant \varepsilon^{-1}$ ($c = \mathrm{const} > 0$). Следовательно,

$$v_k^2(0) = \frac{v_k^2 \ell_k^2}{\ell_k^2(0)} + O(\varepsilon)$$

и

$$\rho_t = \rho\left(\frac{v_1^2\ell_1^2}{\ell_1^2(0)} + O(\varepsilon), \frac{v_2^2\ell_2^2}{\ell_2^2(0)} + O(\varepsilon), \ldots, \frac{v_n^2\ell_n^2}{\ell_n^2(0)} + O(\varepsilon)\right). \tag{8.4}$$

Сопоставляя (8.3) и (8.4), получаем требуемое соотношение (8.1).

Отметим, что адиабатические инварианты были введены Л. Больцманом в его ранней работе по обоснованию второго начала термодинамики. В частности, из его общего результата вытекает адиабатическая инвариантность произведения $|v_k\ell_k|$ для одномерного газа (когда $n = 1$). В общем случае эти величины пропорциональны переменным действие в интегрируемой задаче о биллиарде в прямоугольном параллелепипеде.

Как хорошо известно, энтропия Гиббса всегда постоянна:

$$S_t = -\int\limits_\Gamma \rho_t \ln \rho_t d^n x d^n v = \text{const}. \tag{8.5}$$

Интересно отметить, что энтропия квазистатических состояний

$$\widehat{S}_t = -\int\limits_\Gamma \nu_t \ln \nu_t d^n x d^n v \tag{8.6}$$

также не меняется со временем. Таким образом, рассматриваемый квазистатический процесс будет *адиабатическим*. Это наблюдение полезно сравнить с результатом о возрастании энтропии при необратимом расширении бесстолкновительного газа: если в выражении (8.5) заменить плотность ρ_t ее слабым пределом $\overline{\rho}$, то энтропия увеличится.

В отличие от энтропии при адиабатических процессах внутренняя энергия E идеального газа (пропорциональная абсолютной температуре T) может меняться. Положим

$$E(t) = \int\limits_\Gamma \frac{v^2}{2}\rho_t d^n x d^n v \tag{8.7}$$

(в предположении сходимости этого интеграла). Рассмотрим случай, когда $n = 3$ и $\ell_1 = \ell_2 = \ell_3$ (сосуд имеет форму куба). По теореме 1 при медленном движении стенок сосуда интеграл (8.7) мало отличается от интеграла

$$\widehat{E}(t) = \int\limits_\Gamma \frac{v^2}{2}\nu_t d^n x d^n v = \frac{W_0^{2/3}}{W^{2/3}}\widehat{E}_0, \quad \widehat{E}_0 = \widehat{E}(0), \tag{8.8}$$

где W — объем сосуда П. Формула (8.8) просто выводится с использованием (8.3). Поскольку $E = cT$ ($c = \text{const}$), то из (8.8) получается известное уравнение адиабаты для идеального одноатомного газа:

$$TW^{2/3} = \text{const}. \tag{8.9}$$

3. Обсудим теперь первую задачу о «нулевом» начале термодинамики при медленно меняющихся граничных условиях. Пусть $\rho \in L_p(\Gamma)$, а $\varphi \in L_q(\Gamma)$ — пробная функция. Более точно, мы предполагаем, что φ — функция от

$$\frac{x_1}{\ell_1}, \frac{x_2}{\ell_2}, \ldots, \frac{x_n}{\ell_n}, \ell_1 v_1, \ell_2 v_2, \ldots, \ell_n v_n,$$

которая при каждом значении t принадлежит L_q. Положим

$$K(t) = \int_\Gamma \rho_t \varphi d^n x d^n v.$$

Теорема 2 [30]. *Если ℓ_s — гладкие функции от εt, то найдется такая функция*

$$\overline{\rho}(\ell_1^2 v_1^2, \ell_2^2 v_2^2, \ldots, \ell_n^2 v_n^2),$$

что

$$\lim_{\varepsilon \to 0} K\left(\frac{c}{\varepsilon}\right) = \int_\Gamma \overline{\rho} \varphi d^n x d^n v, \quad c = \text{const} > 0. \tag{8.10}$$

Пусть, в частности, $p = 1$, а φ — характеристическая функция измеримой области $\Phi_t \subset \Pi_t$. Эта область медленно меняется подобно деформации объемлющего параллелепипеда. Теорема 2 утверждает, что при малых значениях ε (независимо от начального распределения) доля бесстолкновительной среды, расположенной в области Φ_t, по истечении достаточно большого промежутка времени ($\sim \varepsilon^{-1}$) практически равна доле этой области в параллелепипеде Π (см. формулу (8.10)). Например, если Π поделить перегородкой на две равные половины, то через время $t \sim \varepsilon^{-1}$ газ распределится между этими областями практически поровну.

Если принять функцию $\overline{\rho}$ за начальную плотность распределения, то в течение большого промежутка времени ($\sim \varepsilon^{-1}$) бесстолкновительный газ будет практически оставаться в состоянии

статистического равновесия (теорема 1). Стоит, наверное, еще отметить, что интеграл (8.10) на самом деле вообще не зависит от $\ell_1, \ell_2, \ldots, \ell_n$. Доказательство основано на применении подстановки

$$x_s \mapsto x_s \ell_s, \quad v_s \mapsto \frac{v_s}{\ell_s},$$

которая, очевидно, сохраняет меру Лиувилля $d^n x d^n v$. Это простое замечание представляется существенным, ибо оно показывает, что итоговое равновесное состояние не зависит от того, через какую последовательность промежуточных состояний система проходила во время адиабатического перехода. Сходные вопросы обсуждал еще Э. Ферми в работе [32] 1923 г., посвященной адиабатическим переходам в «старой» квантовой механике, основанной на принципах квазиклассического квантования Бора– Зоммерфельда.

Теорема 2 доказывается с использованием регуляризации (переход к 2^n-листному покрытию Π n-мерным тором), техники работы [10] и теории адиабатических инвариантов.

4. Статистическое равновесие бесстолкновительного газа имеет место внутри любого замкнутого сосуда с кусочно-регулярной границей. Любое начальное распределение с плотностью $\rho \in L_p$ порождает решение уравнения Лиувилля ρ_t, которое слабо сходится при $t \to \pm\infty$ к некоторой функции $\overline{\rho} \in L_p$. Эта функция является биркгофовским средним ρ, инвариантна относительно фазового потока рассматриваемой динамической системы с ударами и имеет смысл плотности стационарного распределения вероятностей.

В связи с этим замечанием возникает возможность обобщения задач 1 и 2 из п. 1 на области произвольной формы. Если очень медленно и плавно менять границу сосуда, то будет ли бесстолкновительный газ демонстрировать квазистатическое поведение? Анализ этой ситуации в общем случае требует существенного развития теории адиабатических инвариантов. Эта теория пока создана для двух крайних случаев: когда возмущаются вполне интегрируемые системы, а также когда на почти всех поверхностях уровня интеграла энергии невозмущенная система эргодична (см. [33]). Первый случай встречается как раз в условиях применимости теорем 1 и 2. Второй случай охватывается известной теоремой Касуги [34]. Правда, еще Э. Ферми обсуждал теорию адиабатических инвариантов для динамических систем с несколькими известными первыми интегралами, причем на поверхностях совместных уровней этих интегралов система является эргодической [32]. Однако такое расширение теории явно недостаточно для наших целей.

Пусть сосуд $\Pi \subset E^n$ теперь ограничен кусочно-гладкой и строго выпуклой *внутрь* Π поверхностью. Частица, двигающаяся по инерции внутри Π и упруго отражающаяся от границы, порождает динамическую систему, которая называется *рассеивающим биллиардом* (или *биллиардом Синая*). Эта система заведомо эргодическая при положительных значениях энергии h частицы (см. [35, 36]). Слабый предел решения уравнения Лиувилля с данным Коши $\rho \in L_p$ будет функцией $\overline{\rho} \in L_p$, зависящей лишь от энергии h.

Предположим теперь, что форма такого сосуда зависит от параметра, который в свою очередь гладко зависит от «медленного» времени εt, ε — малый параметр. В частности, объем W сосуда Π также гладко зависит от εt.

Теорема 3 [30]. *Если начальная плотность ρ зависит лишь от энергии*

$$h = \frac{v_1^2 + v_2^2 + \ldots + v_n^2}{2},$$

то вероятностная мера

$$\nu_t d^n x d^n v = \rho\left(h \frac{W^\alpha}{W_0^\alpha}\right) d^n x d^n v, \quad \alpha = \frac{2}{n}, \quad W_0 = W(0)$$

задает квазистатический обратимый процесс, то есть

- *выполнено соотношение* (8.1),
- *энтропия* (8.6) *постоянна,*
- *справедливо уравнение адиабаты* (8.9) *(при $n = 3$).*

Теорема 3 доказывается так же, как и теорема 1. Существенную роль играет теорема Касуги о том, что адиабатическим инвариантом является объем фазового пространства, заключенного внутри изоэнергетической поверхности [34] (при этом результаты [34] надо слегка модифицировать, поскольку они относятся к гладким гамильтоновым системам). Легко понять, что этот объем пропорционален произведению $h^{n/2}W$. Отметим, что адиабатический инвариант Касуги был указан еще Ферми [32] (правда, без строгого доказательства).

Теорема Касуги (после ее надлежащего уточнения) позволяет дать положительный ответ в задачах 1 и 2 применительно к «реальному» *газу Больцмана – Гиббса*, заключенному в прямоугольном ящике с зеркальными стенками. Этот газ представляет собой большое число маленьких одинаковых шариков, упруго сталкивающихся друг с другом и со стенками ящика. Газ Больцмана– Гиббса — это биллиардная система *рассеивающего* типа (см. [37, 38]).

Все верят в то, что на изоэнергетических многообразиях рассматриваемая динамическая система с ударами обладает *перемешиванием*. Собственно, это предположение (еще не вполне ясно сформулированное) восходит к Больцману. Более точная формулировка имеется у Н. С. Крылова [13]. Первый нетривиальный результат получен в работе Я. Г. Синая [35]: система из двух шариков в прямоугольнике обладает перемешиванием. В [39] аналогичный результат установлен для системы из четырех шариков в прямоугольном параллелепипеде любой размерности $\geqslant 3$. К сожалению, анализ общего случая сталкивается с существенными трудностями технического характера, представление о которых дает обзорная работа [40].

Подчеркнем, что для наших целей достаточно более слабого свойства *эргодичности* газа Больцмана– Гиббса на энергетических многообразиях положительной энергии. Здесь и ниже мы будем считать это свойство уже установленным.

Если размеры ящика не меняются со временем, то независимо от начального распределения шаров по пространственным координатами и скоростям газ Больцмана– Гиббса необратимо стремится к состоянию статистического (теплового) равновесия (см. § 1). Согласно эргодической гипотезе, предельная плотность зависит от кинетической энергии системы. В частности, в состоянии статистического равновесия все возможные положения шаров в прямоугольном сосуде равновероятны.

Будем теперь медленно и плавно перемещать стенки ящика. Если газ Больцмана– Гиббса находился в состоянии статистического равновесия, то на достаточно большом временном интервале состояние газа будет мало отличаться от его соответствующего равновесного состояния (теорема 3). Если же газ не был в статистическом равновесии, то через достаточно большое (но конечное) время он придет в состояние, близкое к состоянию статистического равновесия (аналог теоремы 2).

§ 9. Случай быстрых изменений

1. В этом параграфе предполагается, что параметры системы быстро меняются со временем. Основное внимание уделяется эволюции *внутренней энергии*

$$E_t = \int\limits_\Gamma T\rho_t d\mu,$$

где T — кинетическая энергия системы.

Начнем с рассмотрения простой системы (2.7):

$$\dot{x} = y, \quad \dot{y} = f(t), \tag{9.1}$$

где $x \in \mathbb{T}^n$, $y \in \mathbb{R}^n$, а f — сила — заданная вектор-функция времени. Кинетическая энергия

$$T = \frac{y^2}{2} = \frac{1}{2}\left(y_1^2 + \ldots + y_n^2\right).$$

С учетом формулы (2.8) для плотности ρ_t имеем следующую цепочку простых соотношений:

$$E_t = \int\limits_\Gamma \frac{y^2}{2}\rho_t(x,y)d\mu = \int\limits_\Gamma \frac{y^2}{2}\rho_0(x - yt + h, y - g)d\mu =$$
$$= \int\limits_\Gamma \frac{(y+g)^2}{2}\rho_0(x,y)d\mu = E_0 + (k, g(t)) + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^n g_j^2(t), \tag{9.2}$$

где $k = (k_1, \ldots, k_n)$, $k_j = \int\limits_\Gamma y_j\rho_0(x,y)d\mu$,

$$g_j(t) = \int\limits_0^t f_j(\tau)d\tau.$$

Отметим следствие из этой формулы. Если начальная плотность ρ_0 будет *четной* функцией от импульсов $y_1, \ldots, y_n$, то, очевидно, $k_1 = \ldots = k_n = 0$. В этом случае

$$E_t \geqslant E_0. \tag{9.3}$$

В типичном случае (когда $g \neq 0$) это неравенство строгое.

В частности, если в начальный момент времени система (9.1) находилась в *статистическом равновесии* (ρ_0 — функция только от $y_1^2, \ldots, y_n^2$) и внешняя сила совершает конечную работу

$$\text{(т. е. интегралы} \quad \overline{g}_j = \int\limits_0^\infty f_j(t)dt \quad \text{сходятся),}$$

то мы имеем конечное приращение средней кинетической энергии

$$\triangle E = E_\infty - E_0 = \frac{1}{2}\sum \overline{g}_j^2.$$

Если же ρ_0 не является четной функцией по импульсам $y_1, \ldots, y_n$, то тогда средние «*циркуляции*» k_j отличны от нуля и легко привести примеры, когда работа

$$\sum k_j\overline{g}_j + \frac{1}{2}\sum \overline{g}_j^2$$

отрицательна и, следовательно, в итоге внутренняя энергия системы уменьшается. Например, при $n = 1$ достаточно потребовать, чтобы $k > 0$, а $\overline{g} < 0$ и $|\overline{g}| < 2k$.

Подчеркнем, что в обоих случаях информационная энтропия получает положительный скачок (как при $t \to +\infty$, так и при $t \to -\infty$).

Формулу (9.2) можно получить по-другому, воспользовавшись теоремой об изменении кинетической энергии:

$$dT = (\sum f_j y_j)dt.$$

Справа стоит элемент работы внешней силы. Умножая обе части этого равенства на вероятностную меру $\rho_t d\mu$ и интегрируя по всему фазовому пространству, после элементарных преобразований получаем искомую формулу.

Таким образом, формула (9.2) соответствует *первому началу термодинамики* (закону сохранения тепловой и механической энергий). Однако, *второе начало* «разрешает» не все процессы, которые допускает первое начало. С этой точки зрения «сомнительным» является второй случай, когда работа силы отрицательна (а значит, система, наоборот, проделывает положительную работу), а внутренняя энергия системы (средняя кинетическая энергия) уменьшается.

В связи с последним замечанием возникает следующий «парадокс». Предположим, что внешняя сила f периодична по времени и работа за период в (9.2) отрицательна. Тогда, повторяя этот процесс многократно, мы получаем в итоге отрицательное значение средней кинетической энергии. Более внимательный взгляд на формулу (9.2) показывает, что это не так. С точки зрения теории ансамблей Гиббса после одного периода τ плотность распределения вероятностей ρ_t изменится и вслед за ней изменятся и величины «циркуляций» k_j (в формуле для k_j вместо ρ_0 следует подставить ρ_τ). Поэтому изменение энергии после следующего цикла уже не будет прежним.

Пусть, например, $n = 1$, а плотность определяется формулой (2.11). Тогда после периода τ плотность станет равной

$$\overline{\rho}(y - g(t) - \xi), \quad \xi = \int\limits_0^\tau f(t)dt < 0.$$

Следовательно, график плотности сдвинется влево на τ. После нескольких итераций циркуляция k будет уже отрицательной и поэтому средняя кинетическая энергия дальше будет возрастать.

Вопрос о «нарушении» второго закона термодинамики в рамках модели ансамблей Гиббса обсуждался Пуанкаре в работе [2]. Мы вернемся к этому в §11.

2. Обсудим задачу об эволюции внутренней энергии для систем более общего вида. Рассмотрим натуральную механическую систему с конфигурационным пространством $M = \{x\}$, кинетической энергией

$$T = \frac{1}{2}\sum g_{ij} y_i y_j = \frac{1}{2}\langle y, y\rangle$$

и потенциальной энергией $V(x,t)$. Фазовое пространство Γ есть пространство кокасательного расслоения многообразия M. Функция Гамильтона H есть сумма $T + V$. Предполагается, что при подходящем выборе канонических переменных x, y коэффициенты g_{ij} внутренней римановой метрики T постоянны (не зависят от x).

Снова будем изучать изменение внутренней энергии системы

$$E_t = \frac{1}{2}\int\limits_{\Gamma} \langle y, y\rangle \rho_t d\mu,$$

где $d\mu = d^n x d^n y$ — инвариантная мера Лиувилля.

Теорема 1. *Если*

1) ρ_0 *не зависит от* x,

2) $dV \neq 0$ *почти всюду на* M *для всех* t,

то

$$E_t > E_0 \tag{9.4}$$

при малых $|t| \neq 0$.

Теорема 1 обобщает соответствующее утверждение Пуанкаре [2] (п.8). Оно имеет следующую интерпретацию. Пусть сначала $V = 0$. Тогда функция ρ_0 (зависящая только от импульсов $y_1, \ldots, y_n$) будет плотностью стационарного (равновесного) распределения вероятностей. Теорема 1 утверждает, что при добавлении потенциального силового поля в первые моменты после нарушения равновесия внутренняя энергия системы возрастает. Отметим инвариантность неравенства (9.4) при обращении времени.

Доказательство.

Вычислим производную внутренней энергии по времени и

воспользуемся уравнением Лиувилля:

$$\begin{aligned}\dot{E}_t =& \frac{1}{2}\int\limits_{\Gamma} \langle y, y\rangle \frac{\partial\rho}{\partial t} d\mu = \\ &= -\frac{1}{2}\int\limits_{\Gamma} \langle y, y\rangle \langle \frac{\partial\rho}{\partial x}, y\rangle d^n x d^n y + \frac{1}{2}\int\limits_{\Gamma} \langle y, y\rangle \frac{\partial\rho}{\partial y}\frac{\partial V}{\partial x} d\mu.\end{aligned} \tag{9.5}$$

По формуле Гаусса–Остроградского первый интеграл справа, очевидно, равен нулю при всех значениях t. Далее, при $t = 0$ плотность ρ не зависит от x. Следовательно, по той же причине в начальный момент времени второй интеграл в правой части (9.5) также равен нулю. Значит:

$$\dot{E} = 0 \quad \text{при} \quad t = 0. \tag{9.6}$$

Снова воспользуемся формулой Гаусса–Остроградского:

$$\dot{E} = -\int\limits_{\Gamma} \rho \langle y, \frac{\partial V}{\partial x}\rangle d^n x d^n y.$$

Следовательно:

$$\ddot{E} = -\int\limits_{\Gamma} \frac{\partial\rho}{\partial t}\langle y, \frac{\partial V}{\partial x}\rangle d^n x d^n y - \int\limits_{\Gamma} \rho \langle y, \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial V}{\partial t}\right)\rangle d^n x d^n y. \tag{9.7}$$

При $t = 0$ второй интеграл обращается в нуль. Преобразуем первый интеграл в (9.8):

$$\ddot{E}_0 = \int\limits_{\Gamma} \langle y, \frac{\partial V}{\partial x}\rangle \langle \frac{\partial\rho}{\partial x}, y\rangle d^n x d^n y - \int\limits_{\Gamma} \langle y, \frac{\partial V}{\partial x}\rangle \frac{\partial\rho}{\partial y}\frac{\partial V}{\partial x} d^n x d^n y.$$

Так как при $t = 0$ плотность не зависит от x, то первый интеграл равен нулю. Применяя ко второму интегралу формулу Гаусса–Остроградского, получим, что

$$\ddot{E}_0 = \int\limits_{\Gamma} \rho_0 \langle \frac{\partial V}{\partial x}, \frac{\partial V}{\partial x} \rangle d\mu.$$

Согласно предположению 2, $\ddot{E} > 0$ при $t = 0$. Учитывая (9.6), получаем требуемое.

3. Рассмотрим более общий случай, когда на систему действуют непотенциальные силы, зависящие лишь от ее положения и времени. Уравнения движения в канонических переменных имеют вид

$$\dot{x} = \frac{\partial T}{\partial y}, \quad \dot{y} = Q(x, t). \tag{9.8}$$

Кинетическая энергия T снова считается однородной квадратичной формой с постоянными коэффициентами:

$$T = \frac{1}{2}\langle y, y \rangle = \frac{1}{2}\sum g_{ij} y_i y_j, \quad g_{ij} = \mathrm{const}.$$

Отметим, что и в этом случае дивергенция правой части (9.8) тождественно равна нулю.

Теорема 2. *Если*

1) *начальная плотность ρ_0 есть функция только от $y_1^2, \ldots, y_n^2$,*

2) *$Q(x, t) \neq 0$ почти всюду на M при всех t,*

то $E_t > E_0$ при малых $|t| \neq 0$.

Если ρ_0 — четная функция по импульсам, то система находится в «окончательном» равновесии (когда $Q = 0$). Примером может служить распределение Максвелла. Пусть, например, $M = \mathbb{T}^n = \{x \mod 2\pi\}$ и сила Q от x вообще не зависит (как в п. 1). Тогда эту силу можно считать потенциальной ($\sum Q_j dx_j = d(\sum Q_j(t) x_j)$), однако ее потенциал будет многозначной функцией на M. Поэтому теорема 1 здесь неприменима.

Доказательство.

Доказательство теоремы 2 использует те же идеи. Сначала вычислим производную внутренней энергии по времени:

$$\begin{aligned}\dot{E} = &\frac{1}{2}\int\limits_{\Gamma} \langle y, y \rangle \frac{\partial \rho}{\partial t} d\mu = -\frac{1}{2}\int\limits_{\Gamma} \langle y, y \rangle \langle y, \frac{\partial \rho}{\partial x} \rangle d^n x d^n y - \\ &-\frac{1}{2}\int\limits_{\Gamma} \langle y, y \rangle \frac{\partial \rho}{\partial y} Q d^n x d^n y.\end{aligned} \tag{9.9}$$

Первый интеграл равен нулю по теореме Гаусса–Остроградского, а второй — при $t = 0$ из-за условия 1 (подынтегральная функция нечетна по импульсам). Ясно, что

$$\dot{E} = \int\limits_{\Gamma} \langle y, Q \rangle \rho d^n x d^n y.$$

Далее:

$$\ddot{E} = \int\limits_{\Gamma} \langle y, \frac{\partial Q}{\partial t} \rangle \rho d^n x d^n y + \int\limits_{\Gamma} \langle y, Q \rangle \frac{\partial \rho}{\partial t} d^n x d^n y.$$

Первый интеграл снова обращается в нуль при $t = 0$ ввиду условия 1. Второй интеграл равен сумме

$$-\int\limits_\Gamma \langle y, Q\rangle\langle y, \frac{\partial\rho}{\partial x}\rangle d^n x d^n y - \int\limits_\Gamma \langle y, Q\rangle \frac{\partial\rho}{\partial y} Q d^n x d^n y.$$

При $t = 0$ первый интеграл, очевидно, равен нулю (т. к. ρ_0 не зависит от x), а второй преобразуется в интеграл

$$\int\limits_\Gamma \rho\langle Q, Q\rangle d\mu,$$

что положительно ввиду условия 2. Что и требовалось.

4. Рассмотрим теперь случай, когда на систему действуют еще диссипативные силы: во второе уравнение (9.8) добавляется слагаемое $-\nu y$, $\nu > 0$. Тогда в формулу (9.9) справа надо добавить еще одно слагаемое

$$\frac{\nu}{2}\int\limits_\Gamma \langle y, y\rangle \sum \frac{\partial(\rho y_j)}{\partial y_j} d^n x d^n y =$$

$$= -\nu(\operatorname{vol} M)\int\limits_{\mathbb{R}^n} \rho\langle y, y\rangle d^n y.$$

Таким образом, $\dot{E} < 0$ при $t = 0$. Если коэффициент трения ν мал, то будет наблюдаться интересное явление: вначале (после нарушения равновесия, когда добавляются внешние силы) внутренняя энергия убывает, а потом через короткое время снова начинает возрастать, становясь больше внутренней энергии в начальный момент времени. Действительно, $\dot{E}$ мала и отрицательна, а $\ddot{E} > 0$ при $t = 0$.

§ 10. Некоторые неравенства для решений уравнения Лиувилля

1. Вернемся к общей системе (2.1). Вначале будем предполагать, что

$$\operatorname{div} v = 0. \tag{10.1}$$

Следовательно, решения уравнения Лиувилля (2.2) — это первые интегралы системы (2.1). Будем предполагать, что $\rho > 0$ при всех $z \in \Gamma$ и $t \in \mathbb{R}$.

Пусть $s \mapsto f(s)$ — дважды непрерывно дифференцируемая функция, определенная при всех $s > 0$.

Теорема 1. *Пусть выполнено* (10.1) *и* $f''(s) > 0$ *при* $s > 0$. *Тогда*

$$\int\limits_\Gamma f'(\rho_0)\rho_t d^n z \leqslant \int\limits_\Gamma f'(\rho_0)\rho_0 d^n z \tag{10.2}$$

для любого решения ρ_t *уравнения Лиувилля* (2.2). *Если* $f''(s) < 0$ *при* $s > 0$, *то справедливо обратное неравенство.*

Конечно, предполагается, что интеграл слева в (10.2) существует и конечен при всех t. Это заведомо выполнено, если ρ_0 — гладкая функция и фазовое пространство Γ компактно.

Доказательство.

Для доказательства теоремы 1 воспользуемся формулой Тейлора с остаточным членом в форме Лагранжа:

$$f(\rho_t) - f(\rho_0) = f'(\rho_0)(\rho_t - \rho_0) + \frac{f''(\rho)}{2}(\rho_t - \rho_0)^2, \tag{10.3}$$

где $\rho > 0$. Проинтегрируем обе части этого равенства по фазовому пространству и воспользуемся тождеством

$$\int\limits_{\Gamma} f(\rho_t) d^n z = \mathrm{const},$$

справедливым при условии (10.1). Из (10.3) вытекает тогда, что

$$\int\limits_{\Gamma} f'(\rho_0)\rho_t d^n z - \int\limits_{\Gamma} f'(\rho_0)\rho_0 d^n z = \frac{1}{2}\int\limits_{\Gamma} f''(\rho)(\rho_t - \rho_0)^2 d^n z.$$

Если $f'' > 0 (< 0)$, то правая часть будет неотрицательной (неположительной). Что и требовалось.

Следствие. *Пусть система* (2.1) *автономная,* $\rho_0 \in L_1(\Gamma, d^n z)$ *и* $\overline{\rho}$ *— биркгофовское среднее функции* ρ_0*:*

$$\overline{\rho}(z) = \lim_{\tau\to\infty} \frac{1}{\tau}\int\limits_0^{\tau} \rho_0(g^{-t}(z))dt.$$

Если $f'' > 0 (< 0)$, *то*

$$\int\limits_{\Gamma} f'(\rho_0)\overline{\rho} d^n z \leqslant (\geqslant) \int\limits_{\Gamma} f'(\rho_0)\rho_0 d^n z.$$

Это — прямое следствие неравенства (10.2)

2. Рассмотрим три примера.

A. Пусть $f(s) = s^p$, $p > 1$. Тогда неравенство (10.2) примет вид

$$\int\limits_{\Gamma} \rho_0^{p-1}\rho_t d^n z \leqslant \int\limits_{\Gamma} \rho_0^p d^n z. \tag{10.4}$$

Оно справедливо для функций $\rho_0 \in L_p$. Для $0 < p < 1$ имеет место обратное неравенство.

Неравенство (10.4) — следствие неравенства Гельдера:

$$\int\limits_{\Gamma} (\rho_0^p)^{\frac{1}{q}} (\rho_t^p)^{\frac{1}{p}} d^n z \leqslant \left[\int\limits_{\Gamma} \rho_0^p d^n z\right]^{\frac{1}{q}} \left[\int\limits_{\Gamma} \rho_t^p d^n z\right]^{\frac{1}{p}}, \tag{10.5}$$

$\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$. Поскольку значения интегралов справа в этом неравенстве совпадают при всех t, то из (10.5) вытекает (10.4).

Аналогично доказывается «неравенство Минковского»: если $p > 1$, то

$$\int\limits_{\Gamma} (\rho_0 + \rho_t)^p d^n z \leqslant 2^p \int\limits_{\Gamma} \rho_0^p d^n z.$$

Пусть система (2.1) автономная, эргодическая и $\operatorname{mes}\Gamma = \mu(\Gamma)$ конечна. Тогда $\overline{\rho} = \frac{1}{\operatorname{mes}\Gamma}$ и из неравенства (10.4) вытекает, что

$$\frac{1}{\operatorname{mes}\Gamma}\int\limits_{\Gamma} \rho_0^{p-1} d^n z \leqslant \int\limits_{\Gamma} \rho_0^p d^n z.$$

B. Пусть $f(s) = \ln s$. Тогда

$$\frac{1}{\operatorname{mes}\Gamma}\int\limits_{\Gamma} \frac{\rho_t}{\rho_0} d^n z \geqslant 1. \tag{10.6}$$

В частности, для автономных систем

$$\frac{1}{\operatorname{mes}\Gamma}\int\limits_{\Gamma} \frac{\overline{\rho}}{\rho_0} d^n z \geqslant 1.$$

Поскольку в автономном случае неравенство (10.6) не меняется при подстановке $t \mapsto -t$, то справедливо также неравенство

$$\frac{1}{\operatorname{mes}\Gamma}\int\limits_{\Gamma}\frac{\rho_0}{\rho_t}d^n z \geqslant 1.$$

C. Положим $f(s) = s\ln s$, $s > 0$. Ясно, что $f'' > 0$. Из (10.2) вытекает неравенство

$$\int\limits_{\Gamma}\rho_t\ln\rho_0 d^n z \leqslant \int\limits_{\Gamma}\rho_0\ln\rho_0 d^n z. \tag{10.7}$$

В частности, пусть система гамильтонова и ρ_0 — плотность канонического распределения Гиббса

$$c\rho^{-\beta H}, \quad c, \beta = \mathrm{const} > 0.$$

Тогда из (10.7) вытекает важное *неравенство Пуанкаре* ([2], п. 9):

$$\int\limits_{\Gamma}H\rho_t d\mu \geqslant \int\limits_{\Gamma}H\rho_0 d\mu, \tag{10.8}$$

где $d\mu$ — мера Лиувилля.

Например, пусть H — кинетическая энергия системы; тогда распределение Гиббса будет распределением Максвелла. Неравенство (10.8) означает, что после нарушения равновесия внутренняя энергия системы может только возрасти. Этот замечательный результат Пуанкаре усиливает заключение теорем 1 и 2 из §9, справедливых только при малых значениях времени (однако эти утверждения справедливы для более широкого класса начальных распределений).

Неравенство (10.7) имеет еще следующую интерпретацию. Пусть $\rho_0 = ce^{-\beta H}$,

$$c^{-1} = Z = \int\limits_{\Gamma}e^{-\beta H}d\mu$$

— статистический интеграл,

$$E_t = \int\limits_{\Gamma}\rho_t H d\mu$$

— внутренняя энергия. Тогда (10.7) эквивалентно неравенству

$$S_t \leqslant \beta E_t + \ln Z.$$

При $t = 0$ имеет место равенство, которое хорошо известно в теории равновесных состояний (см., например, [66]).

3. Отметим в заключение, что неравенство (10.7) справедливо и в более общем случае, когда

$$\operatorname{div} v \geqslant 0. \tag{10.9}$$

Действительно, для $f(s) = s\ln s$ из (10.3) получаем

$$\int\limits_{\Gamma}\rho_0\ln\rho_0 d^n z - \int\limits_{\Gamma}\rho_t\ln\rho_0 d^n z = S_t - S_0 + \frac{1}{2}\int\limits_{\Gamma}f''(\rho)(\rho_t-\rho_0)^2 d^n z, \tag{10.10}$$

где S_t — информационная энтропия. С другой стороны, согласно (2.5), энтропия не убывает со временем, если выполнено (10.9).

Правда, для механических систем неравенство (10.9) означает, что в систему поступает дополнительная энергия (тепло).

Основное неравенство (10.2) этого раздела — это обобщение неравенства Пуанкаре (10.8). В работе Пуанкаре [2] также сказано, что поскольку грубая энтропия всегда возрастает, то из (10.10) тем более вытекает неравенство (10.8) для $t \geqslant 0$. Однако это утверждение следует признать некорректным по двум причинам. Во-первых, как мы видели в $\S 5$, грубая энтропия возрастает не всегда. Во-вторых, в этом случае следует уже говорить о «грубой» внутренней энергии: в (10.8) плотность ρ_t надо заменить грубой плотностью с помощью усреднения по ячейкам фазового пространства.

§ 11. Циклы Пуанкаре

1. В этом параграфе мы обсудим основное содержание замечательной статьи Анри Пуанкаре «Замечания о кинетической теории газов».

Цель своей работы Пуанкаре формулирует так: «Один из пунктов, наиболее трудных для меня, был следующий: требуется доказать, что энтропия уменьшается[1], но соображения Гиббса, по-видимому, предполагают, что после изменения внешних условий, до того как изменять их снова, следует подождать, пока установится режим. Это существенное допущение. Можно ли, иными словами, прийти к результатам, противоречащим принципу Карно, изменяя внешние условия слишком быстро для того, чтобы стационарный режим успел установиться?» [2].

Пуанкаре исследует эту задачу с разных точек зрения. Сначала (п. п. 4 и 5 его статьи [2]) он обсуждает открытое им парадоксальное поведение одномерного газа.

Пуанкаре рассматривает бесстолкновительную сплошную среду на отрезке прямой с упругими отражениями от концов отрезка (одномерный газ). Предположим, что в начальный момент времени газ находился в статистическом равновесии: его плотность распределения ρ зависит лишь от квадрата скорости частиц.

[1]Пуанкаре определяет энтропию с противоположным знаком. Поэтому она уменьшается в тех случаях, когда общепринято считать, что она увеличивается.

Более того, предположим, что функция

$$\frac{\rho(v^2)}{v^2}$$

регулярна в нуле (она имеет конечный предел при $v \to 0$). Пуанкаре говорит, что в этом случае ρ *делится на* v^2. В частности, обычное распределение Максвелла *не удовлетворяет* этому условию. Наоборот, если газ не содержит медленных частиц (т. е. $\rho(v^2) = 0$ при $|v| < \varepsilon$, $\varepsilon > 0$) , то ρ делится на v^2.

Предположим теперь, что имеется некоторое тело (Пуанкаре его обозначает C), которое притягивает частицы газа, скажем, по закону Ньютона и которое в начальный момент времени удалено от отрезка (сосуда) на бесконечное расстояние. Следовательно, вначале оно не оказывает никакого влияния на состояние бесстолкновительного газа. Затем в какой-то момент времени мы резко приближаем тело C и оставляем бесконечно долго в фиксированном положении *достаточно далеко* от отрезка. После этого равновесие газа будет нарушено и в конце концов он достигнет нового равновесия (в смысле слабой сходимости, о которой речь шла в §1).

Но что это будет за равновесие? Оказывается, в отличие от привычной картины, плотность равновесного состояния газа будет *возрастать* по мере *удаления* частиц от тела C. Чтобы убедиться в этом, не надо никаких вычислений. Дело в том, что если тело C достаточно удалено, то быстрые частицы газа периодически сталкиваются с обоими концами отрезка и движутся медленнее по мере приближения к дальнему от C концу отрезка. Такого парадоксального равновесия заведомо не случится, если частицы газа распределены по скоростям в соответствии с законом Максвелла.

Вообще, Пуанкаре верил в универсальность закона Максвелла, как и в закон возрастания грубой (физической) энтропии. Это обстоятельство он неоднократно подчеркивает в своей статье. Кстати сказать, он любил повторять шутку (со ссылкой на своего друга физика Липпманна), что в нормальный закон распределения ошибок верят все: правда, физики считают его математической теоремой, в то время как математики убеждены, что это твердо установленный экспериментальный факт.

Прервем здесь изложение рассуждений Пуанкаре и сделаем одно важное замечание. Не следует думать, что если в начальный момент частицы газа распределены по Максвеллу, то после *мгновенного* приближения гравитирующего тела это распределение в слабом смысле будет стремиться к барометрическому распределению по длине стержня. Однако если тело будет приближаться *бесконечно медленно*, то мы получим (зависящее от времени) семейство распределений Гиббса и (как следствие) барометрическую формулу: $\rho = ce^{-\gamma x}$, $x \in [a, b]$; $c, \gamma = \mathrm{const}$.

После того как установилось статистическое равновесие газа в поле притягивающего тела C (в предположении, что ρ делится на v^2), мы снова резко удаляем это тело в бесконечность. После этого события газ будет стремиться выровнять свою плотность на отрезке.

Итак, в результате бесстолкновительный газ совершил замкнутый цикл: начав с равновесного состояния, он снова приобрел равновесие. Этот цикл (по аналогии с циклом Карно) назовем *циклом Пуанкаре*[1]. Однако, в отличие от цикла Карно, цикл Пуанкаре неравновесный и необратимый. Что же получилось после реализации цикла Пуанкаре? Притягивая тело C, газ в итоге проделал *положительную работу*. Действительно, когда мы приближали тело, то была совершена положительная работа, а когда удаляли, то работа отрицательна. Однако положительная работа по величине больше отрицательной, поскольку при удалении тела C газ был от него на более удаленном расстоянии.

Таким образом, суммарная *работа положительна*, но, как показывают вычисления Пуанкаре (п. 5 работы [2]), *температура* газа (т. е. средняя кинетическая энергия частиц газа) *уменьшилась*. Получаем противоречие со вторым началом термодинамики (с принципом Карно): часть внутренней энергии газа (теплоты) целиком перешла в работу. По мнению самого Пуанкаре, это противоречие лишь кажущееся, поскольку мы исходили из равновесного распределения, сильно отличающегося от максвелловского. Кроме того, после осуществления цикла Пуанкаре распределение частиц газа по скоростям уже не будет прежним. Добавим еще,

[1]В теории динамических систем циклом Пуанкаре часто называют среднее время возвращения.

что противоречие с принципом Карно мы получили в рамках *модели*, основанной на теории ансамблей Гиббса.

Другое наблюдение Пуанкаре (п. 6) состоит в том, что в результате цикла Пуанкаре энтропия газа увеличилась. Этот вывод Пуанкаре подтверждает вычислением, однако оно легко вытекает из общих результатов, изложенных в §1. Действительно, энтропия может только возрасти, если плотность вероятности ρ_t заменить ее слабым пределом $\overline{\rho}$. В цикле Пуанкаре эта процедура повторяется дважды. Фактически Пуанкаре тоже использовал такой прием в п. 6 своей работы, не оговаривая этого явно. Это обстоятельство ускользнуло от Н.С. Крылова, который в своей книге [13] критикует Пуанкаре за допущенную им «ошибку»: ведь сначала (в п. 1) Пуанкаре доказывает, что тонкая энтропия постоянна, а затем (в п. 6) утверждает, что она возросла.

2. Цикл Пуанкаре зависит от начальной плотности распределения бесстолкновительного газа в равновесном состоянии — от функции ρ, которая в свою очередь зависит лишь от квадрата скорости v^2. Изложенные в п. 1 рассуждения Пуанкаре можно суммировать в виде следующего утверждения.

Теорема 1. *Если ρ делится на v^2, то в результате цикла Пуанкаре*

1) *над телом C проделана положительная работа,*
2) *температура газа понизилась,*
3) *энтропия газа возросла.*

Интересно отметить, что в первые моменты после нарушения равновесия температура газа, наоборот, всегда повышается (теорема 2 из §9).

В п. 8 своей статьи [2] Пуанкаре устанавливает следующий факт.

Теорема 2. *Если ρ — плотность распределения Максвелла, то в результате цикла Пуанкаре*

1) *над телом C проделана отрицательная работа,*

2) *температура газа повысилась,*

3) *энтропия газа возросла.*

Заключения теорем 1 и 2, конечно, вполне соответствуют первому началу термодинамики (закону сохранения полной энергии).

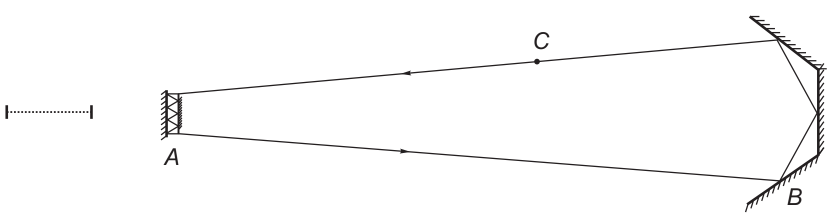

Рис. 8. Цикл Пуанкаре

3. Проблему универсальности принципа Карно можно представить еще следующим образом: в результате осуществления цикла Пуанкаре гравитирующее тело C вернулось в прежнее состояние, а наш идеальный газ охладился. Однако имеется естественное возражение против такой интерпретации цикла Пуанкаре, поскольку в приведенном выше описании цикла имеется еще одно существо (или устройство), которое сначала резко приближает, а затем удаляет тело C. Это существо совершает работу, нагревается и его также следует учитывать при анализе принципа Карно.

Оказывается, можно видоизменить рассуждения Пуанкаре и вообще обойтись без вмешательства дополнительного «существа», организовав движение тела C по схеме, изображенной на рис. 8. С этой целью рассмотрим *ограниченную* модель цикла Пуанкаре, когда масса газа много меньше массы тела C. Тогда влиянием газа на движение тела C можно пренебречь. Напомним, что ограниченная задача трех тел — одна из популярных моделей в небесной механике.

Тело C периодически (с очень большим периодом) движется по замкнутой траектории, совершая при этом большое число упругих ударов. Стенка B находится очень далеко от одномерного сосуда с газом (практически на бесконечном расстоянии). Тело C движется с большой скоростью и, подойдя к стенкам A, в течение очень длительного времени совершает колебательные движения между ними с малой амплитудой. Следовательно, в течение этого времени тело C практически будет находиться в фиксированном положении A.

После того как тело C совершит полный оборот и снова придет в положение B, бесстолкновительный газ снова станет практически однородным, однако его средняя кинетическая энергия (температура) уменьшится.

Строго говоря, здесь пока нет нарушения второго закона термодинамики, поскольку частицы газа получат новое стационарное распределение по скоростям, которое уже может допускать *«медленные»* частицы. Другими словами, после цикла Пуанкаре стационарная плотность уже не обязана делиться на квадрат скорости. Поэтому температура газа не может постоянно уменьшаться в результате *повторения* цикла Пуанкаре. Начиная с некоторого момента она обязательно начнет возрастать. Сходная ситуация уже обсуждалась нами в п. 1 §9. Отметим еще, что количество циклов Пуанкаре с уменьшением температуры бесстолкновительного газа тем больше, чем длиннее окрестность нуля, в которой плотность ρ как функция от v^2 обращается в нуль. В точной формулировке второго начала термодинамики должно фигурировать предположение о *периодичности* (цикличности) процесса. Это условие является существенным и его, конечно, нельзя опускать.

Поучительный анализ принципа Карно–Клаузиуса содержится в лекциях по термодинамике самого Пуанкаре [41] (гл. 7). Разбирая имевшиеся «контрпримеры», Пуанкаре настаивает на полноте и строгости формулировки принципа. Сам он в итоге приходит к следующей форме второго начала.

«Представим себе систему, состоящую из n тел A_1, $A_2, \ldots,$ A_n, не подверженную внешним воздействиям. Состояние тел зависит лишь от двух независимых переменных, температуры T и удельного объема V. Предположим, что температура T_1 тела A_1 выше температуры T_2 тела A_2, и заставим систему совершить процесс, который приведет ее к следующему состоянию: все тела системы, кроме A_1 и A_2, находятся в своих начальных состояниях, удельные объемы тел A_1 и A_2 сохраняют свои первоначальные значения. В этих условиях *невозможно, чтобы тело A_1 нагрелось, а тело A_2 охладилось*. Так должен формулироваться принцип Клаузиуса, чтобы быть защищенным от любого возражения» [41] (п. 99).

Вот как можно было бы «возразить» Пуанкаре, используя введенные выше необратимые циклы. Рассмотрим еще один рядом расположенный одномерный сосуд — единичный отрезок, заполненный бесстолкновительным газом, частицы которого распределены по скоростям в соответствии с законом Максвелла. В результате цикла Пуанкаре такой газ нагреется (теорема 2), а газ с «парадоксальными» свойствами (у которого плотность делится на квадрат скорости), наоборот, охладится (теорема 1). Газ во втором отрезке обозначим A_1, газ в первом отрезке обозначим A_2, а гравитирующая материальная точка — это тело A_3. Если в начальный момент средняя кинетическая энергия тела A_1 больше средней энергии тела A_2, то получим противоречие с формулировкой Пуанкаре принципа Карно–Клаузиуса. Перераспределение тепла между телами A_1 и A_2 происходит через участие в этом процессе тела A_3 (это отчетливо видно в случае, когда мы от ограниченной постановки задачи перейдем к точной).

Разгадка этого «парадокса» (кроме общего замечания об условии цикличности процесса) состоит в следующем. Действительно, предположения о температурах и объемах тел A_1 и A_2, очевидно, выполнены. Однако Пуанкаре говорит о том, что равновесные состояния тел A_j определяются *только* температурой и объемом. Изучение таких термодинамических систем было предметом классических работ Клаузиуса. Между тем в нашем примере равновесные состояния бесстолкновительного газа зависят от начальной плотности — четной неотрицательной функции от скорости. Соответствующее функциональное пространство бесконечномерно. Таким образом, мы имеем *бесконечномерную* совокупность внешних параметров, и поэтому условие Пуанкаре заведомо не выполнено.

Кстати сказать, распределение Максвелла определяется единственным параметром — абсолютной температурой. После реализации цикла Пуанкаре распределение Максвелла перейдет в равновесное распределение другого вида.

Вообще, с каждым циклом Пуанкаре естественным образом связано преобразование

$$K : \rho^- \to \rho^+.$$

Здесь ρ^- — плотность распределения частиц газа в начальный момент времени, а ρ^+ — плотность равновесного распределения после реализации цикла. Это — неотрицательные четные функции, причем

$$\int\limits_0^\infty \rho^-(v)dv = \int\limits_0^\infty \rho^+(v)dv = \frac{1}{2}.$$

Полезно изучить свойства этого преобразования. Например, имеются ли *конечномерные* инвариантные подпространства у оператора K? В частности, есть ли инвариантные функции ($K\rho = \rho$)?

4. Теоремы 1 и 2 дали возможность Пуанкаре обосновать свой тезис о том, что законы термодинамики нуждаются в уточнении, когда речь идет о необратимых и неравновесных процессах. Прежде чем говорить об изменении внутренней энергии системы и ее энтропии, надо дать возможность системе прийти в равновесное состояние. Если не дать время режиму установиться, то можно войти в противоречие с обычными представлениями термодинамики.

Вот как рассуждает Пуанкаре. Он рассматривает реальный, но разреженный газ в трехмерном сосуде, имеющем форму прямоугольного параллелепипеда. Такой газ в течение длительного промежутка времени ведет себя как «одномерный» газ. Предположим, что в начальный момент времени мы имеем «промежуточное» равновесное состояние, когда плотность распределения зависит только от квадрата скорости и когда нет медленных молекул. Начнем осуществлять цикл Пуанкаре. Придвинув гравитирующее тело, мы нарушили это «промежуточное» равновесие. По теореме 2 §9 в первые моменты средняя кинетическая энергия (температура) газа будет расти. Однако при некоторых специальных условиях (по теореме 1) может случиться так, что температура разреженного газа окажется меньше его температуры в начальный момент времени. Если в этот момент резко удалить тело, то кинетическая энергия газа (а значит, и его температура) не изменится. Через бесконечно большой промежуток времени после большого числа столкновений частиц газ достигнет своего окончательного равновесия, когда его скорости будут распределены по закону Максвелла. Однако температура газа в итоге понизится, а его энтропия, наоборот, увеличится.

Далее Пуанкаре говорит о том, что тем более можно ожидать аналогичные эффекты в сильнонеравновесных ситуациях, когда на систему действуют большие зависящие от времени силы и мы не даем режиму возможность достичь теплового равновесия.

С другой стороны, если мы возмущаем *окончательное* равновесие газа, когда его частицы распределены по нормальному закону, то (по неравенству (10.8)) его температура может только возрастать, а энтропия не уменьшается. «И таким образом, можно устранить одно из затруднений, которые еще имеются в кинетической теории газов» ([2], п. 9).

§ 12. Задача о поршне

1. В этом параграфе мы обсудим знаменитую задачу о поршне с точки зрения общей теории ансамблей Гиббса. Более точно, рассматривается эволюция динамической системы, состоящей из идеального газа в цилиндрическом сосуде, разделенном массивным подвижным поршнем. Особое внимание будет уделено асимптотическому поведению при $t \to \infty$, когда система неограниченно приближается к состоянию статистического равновесия. Мы также рассмотрим родственную задачу о поршне в идеальном газе, причем поршень прикреплен к концу упругой пружины.

Как показывает опыт, в конце концов поршень остановится, причем давление газа в обеих частях сосуда станет одинаковым. С точки зрения обычной механики этот факт выглядит удивительным. Если под газом понимать идеальную сплошную среду в духе полевого подхода Эйлера, то в рассматриваемой системе, очевидно, будут происходить незатухающие колебания. Если же газ моделировать большим (но конечным) числом упруго сталкивающихся шариков, то такое финальное поведение противоречит, например, теореме Пуанкаре о возвращении. Подчеркнем, что мы не принимаем в расчет трение между поршнем и цилиндром.

Поэтому для объяснения и описания финального поведения обычно используют приближенные статистические модели, в которых необратимость заложена уже с самого начала. Например, в работах [42]– [44] используется кинетическое уравнение Больцмана, в [45]– [47] — вероятностные подходы (включающие, в частности, случайные процессы). Хороший обзор работ по задаче о поршне можно найти в [48]. В них акцент делается на обсуждении более нетривиальной проблемы об асимптотическом выравнивании температур слева и справа от подвижного поршня. Поучительное обсуждение этой задачи на качественном уровне содержится в лекциях Р. Фейнмана [49].

Мы будем трактовать идеальный газ как бесстолкновительную сплошную среду, эволюция которой описывается классическим уравнением Лиувилля. Это предположение вполне отвечает общему статистическому подходу Гиббса, основанному на введении континуальных ансамблей невзаимодействующих механических систем. Оно позволит нам *строго* сформулировать и частично доказать результаты об асимптотическом поведении поршня в идеальном газе [50]. Для простоты будем рассматривать *одномерный* газ, когда частицы движутся по прямой. Поскольку при упругом ударе двух одинаковых частиц происходит простой обмен их скоростей, то одномерный газ можно представлять себе как сплошную среду, частицы которой постоянно упруго сталкиваются друг с другом. Эта среда — естественный предельный случай системы из очень большого числа маленьких одинаковых шариков, которые упруго сталкиваются между собой и со стенками сосуда.

2. Итак, пусть одномерный идеальный газ заключен в сосуд в виде единичного отрезка $0 \leqslant x \leqslant 1$ и разделен поршнем

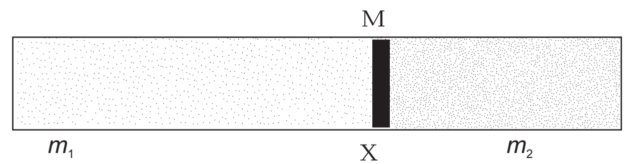

Рис. 9. Задача о поршне

массы M (рис. 9). Пусть X, $\dot{X}$ — координата и скорость поршня. Пусть m_1 (m_2) — масса газа слева (справа) от поршня, а $\rho_1(v,\, x)$ ($\rho_2(v,\, x)$) — начальная плотность распределения частиц газа по координатам x и скоростям v. Ясно, что функции ρ_1 и ρ_2 определены по x в интервалах $[0,\, X]$ и $[X,\, 1]$.

Пусть $\rho_1^t(v,\, x)$, $\rho_2^t(v,\, x)$ — плотности газа слева и справа от поршня в момент времени t. Они находятся как решения уравнений Лиувилля с начальными (при $t = 0$) условиями ρ_1 и ρ_2. При этом надо, конечно, учитывать подвижность граничного условия отражения частиц при $x = X$.

Таким образом, эволюция плотности распределения описывается в нашей задаче следующим образом:

1) пока нет ударов (то есть $x - vt \in (0,\, X)$), то
$$\rho_1^t(v,\, x) = \rho_1(v,\, x - vt);$$

2) если $x - vt = 0$, то v заменяется на $-v$, а $x - vt$ надо заменить на $x + vt$;

3) если же $x - vt = X$, то v заменяется на $-v + \dot{X}$ (упругий удар частицы нулевой массы о движущуюся плиту), а $x - vt$ заменяется на $x-(-v+\dot{X})t$, причем скорость $\dot{X}$ вычисляется в момент удара.

Аналогично эволюционирует плотность распределения $\rho_2^t(v,\, x)$.

Запишем дифференциально–интегральное уравнение, описывающее движение поршня:

$$M\ddot{X} = 2m_1 \int\limits_{\dot{X}}^{\infty} (v-\dot{X})^2 \rho_1^t(v,\, X)\, dv - 2m_2 \int\limits_{-\infty}^{\dot{X}} (v-\dot{X})^2 \rho_2^t(v,\, X)\, dv. \tag{12.1}$$

В этой формуле справа стоит разность давлений на поршень, движущийся со скоростью $\dot{X}$, со стороны газа, расположенного по обе стороны от поршня. Сама формула для давления идеального газа на стенку является вполне классической; ее вывод можно найти, например, в [6] (гл. I). Таким образом, уравнение (12.1), дополненное уравнениями для ρ_1^t и ρ_2^t, полностью описывает эволюцию рассматриваемой системы.

Схожее с (12.1) уравнение имеется в [48]. Его *эвристический* вывод использует цепочку уравнений Боголюбова. Подчеркнем, что в рамках рассматриваемой модели (12.1) является *строгим* уравнением.

3. Рассмотрим сначала похожую, но более простую задачу о поршне, прикрепленном к упругой пружине. Его уравнение дви-

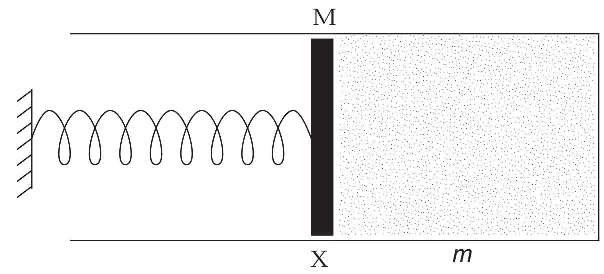

Рис. 10. Поршень на пружине

жения имеет вид

$$M\ddot{X} + kX = -2m \int\limits_{-\infty}^{\dot{X}} (v - \dot{X})^2 \rho^t(v,\, X)\, dv. \tag{12.2}$$

Справа стоит давление со стороны газа на поршень в момент времени t, $\rho^t(v,\, x)$ $(X \leqslant x \leqslant 1,\ -\infty < v < +\infty)$ — плотность распределения частиц газа, m — масса бесстолкновительного газа, а k — коэффициент упругости пружины. Плотность ρ^t находится из уравнения Лиувилля для биллиарда с подвижной левой границей (как в п. 2). В качестве начальной плотности следует брать такую, чтобы сходился интеграл

$$\int\limits_{X(0)}^{1} \int\limits_{-\infty}^{\infty} v^2 \rho\, dv\, dx.$$

Если мы умножим его на $\frac{m}{2}$, то получим кинетическую энергию идеального газа. Сумма полной механической энергии поршня и кинетической энергии газа не меняется со временем. Это обстоятельство полезно использовать для контроля точности численных расчетов.

Стационарные состояния (неподвижные точки) системы определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} &\rho(v,\, X) = \bar\rho(v) \;-\; \text{произвольная четная по } v \text{ функция,}\\ &X = \triangle = -\frac{2m}{k}\int\limits_{-\infty}^{0} v^2\bar\rho(v)\,dv = \text{const.} \end{aligned} \qquad (12.3)$$

Как показывают численные расчеты (выполненные А. А. Килиным), при $t \to \infty$ система асимптотически приближается к некоторому стационарному состоянию вида (12.3). Другими словами, система (бесстолкновительный газ с поршнем на пружине) стремится к статистическому равновесию, причем

1) $X(t) \to \triangle = \text{const}, \quad \dot X(t) \to 0,$

2) плотность ρ^t *слабо* сходится к нестационарной плотности $\bar\rho$, четной по скорости.

Напомним, что для биллиардов с неподвижными границами слабый предел плотности распределения всегда существует и является первым интегралом уравнения движения. Было бы желательным дать *строгое* доказательство этих двух свойств.

На рис. 11 показан характерный вид фазовой траектории

поршня. Здесь $M = 1$, $m = 1$, $k = 1$,

$$\rho^0(v,\, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{v^2}{2}}, \quad X(0) = \dot X(0) = 0.$$

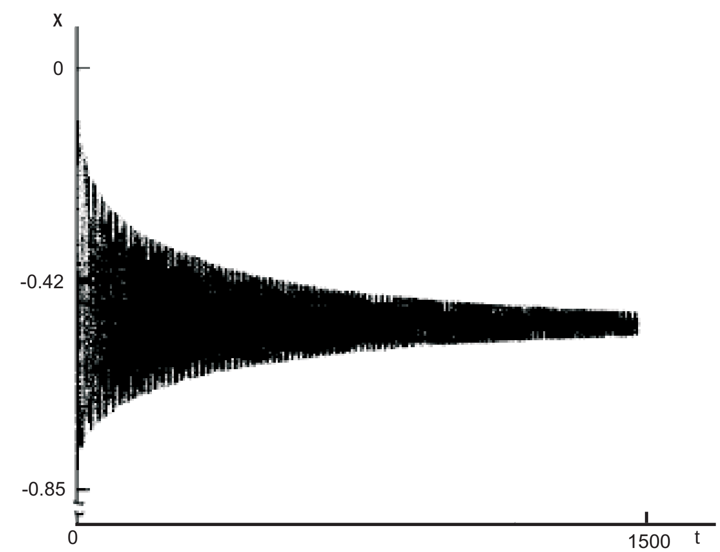

Рис. 11. Фазовая траектория поршня на пружине

Предельная величина растяжения пружины (12.3) может быть представлена следующим образом:

$$\triangle = -\frac{2E_+}{k\ell_+},$$

где E_+ — энергия газа в предельном состоянии, $\ell_+ = 1 - \triangle$ — расстояние от поршня до неподвижной стенки сосуда (это «объем» сосуда в равновесном состоянии).

Полагая $X = \triangle + \xi$, линеаризуем уравнение (12.2):

$$M\ddot{\xi} + \varkappa\dot{\xi} + k\xi = 0, \tag{12.4}$$

где

$$\varkappa = -4m \int\limits_{-\infty}^{0} v\bar{\rho}(v)\,dv > 0,$$

поскольку $\bar{\rho}$ — четная неотрицательная функция с положительным интегралом по вещественной прямой. Уравнение (12.4) описывает малые затухающие колебания с коэффициентом вязкого трения $\varkappa$.

Таким образом, мы получаем интересный эффект. Изначально (на уровне микроописания) в рассматриваемой системе никакого трения нет. Однако после усреднения влияние бесстолкновительного газа сводится к появлению вязкости. Положим, например,

$$\bar{\rho}(v) = \frac{e^{-\frac{v^2}{2\sigma^2}}}{\ell_+\sqrt{2\pi}\sigma}.$$

Это означает, что в состоянии статистического равновесия частицы газа распределены в соответствии с законом Максвелла ($\sigma^2 = kT$). Тогда

$$\varkappa = \frac{4m\sigma}{\sqrt{2\pi}\ell_+}.$$

Поскольку дисперсия распределения Максвелла пропорциональна абсолютной температуре, то коэффициент трения возрастает с

увеличением температуры газа в равновесном предельном состоянии.

Конечно, предельное распределение $\bar{\rho}$ вовсе не обязано быть максвелловским. Однако усреднение с произвольной четной по скорости плотностью $\bar{\rho}$ приводит к обычным уравнениям состояния для идеального газа (см. [6], [11]).

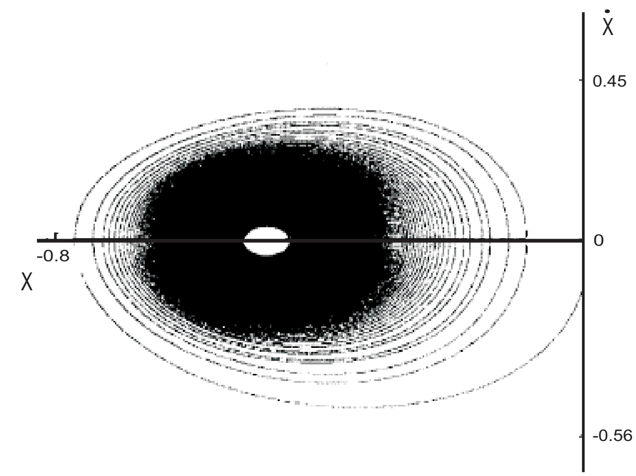

Рис. 12. Фазовая траектория поршня

4. Численные расчеты показывают, что при $t \to \infty$ газ в цилиндре с подвижным поршнем также стремится к статистически равновесному состоянию: $X(t) \to \bar{X} = \text{const}$, $\dot{X}(t) \to 0$, а плотности ρ_1^t, ρ_2^t *слабо* сходятся к функциям $\bar{\rho}_1$, $\bar{\rho}_2$, зависящим лишь от квадрата скорости частицы v^2. На рис. 12 показан характерный вид фазовой траектории поршня для этого случая. Здесь $M = 1$, $m_1 = 1$, $m_2 = 2$,

$$\rho_1^0 = \rho_2^0 = \frac{e^{-\frac{v^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}},$$

$$X(0) = 0.5, \quad \dot{X}(0) = 0.$$

Полагая в уравнении (12.1) $\dot{X} = 0$ и заменяя плотности ρ_1^t, ρ_2^t их слабыми пределами, получаем

$$m_1 \int\limits_{-\infty}^{\infty} v^2 \bar{\rho}_1 \, dv = m_2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} v^2 \bar{\rho}_2 \, dv. \tag{12.5}$$

Таким образом, точка $x = \bar{X}$ делит отрезок $[0, 1]$ с одномерным газом на две половинки с *равными давлениями*. Этот факт становится еще более ясным, если равенство (12.5) переписать в эквивалентной форме

$$\frac{E_1}{l_1} = \frac{E_2}{l_2}, \tag{12.6}$$

где $E_j (j = 1, 2)$ — средние кинетические энергии газов слева и справа от поршня, а $l_j (j = 1, 2)$ — их «объемы» — расстояния от поршня до концов отрезка. Внутренние энергии пропорциональны абсолютным температурам. Соотношение (12.6) означает равенство давлений слева и справа от поршня. Но из этого подхода никак нельзя вывести равенство температур.

При условии (12.5) и малых значениях скорости $\dot{X}$ уравнение (12.1) можно линеаризовать:

$$M\ddot{X} + \varkappa \dot{X} = 0, \tag{12.7}$$

где

$$\varkappa = 4m_1 \int\limits_0^{\infty} v\bar{\rho}_1(v) \, dv - 4m_2 \int\limits_{-\infty}^{0} v\bar{\rho}_2(v) \, dv > 0$$

— эффективный коэффициент вязкого трения. Из (12.7) видно, что скорость поршня убывает экспоненциально быстро и поршень до своей полной остановки проходит конечный путь. Интересно отметить, что в ящике с *неподвижными* стенками плотность бесстолкновительной среды выравнивается с еще большей скоростью (см. § 7).

Особый интерес представляет случай, когда $m_1 = 0$ или $m_2 = 0$: весь газ находится справа или слева от поршня. Может показаться, что тогда поршень будет совершать незатухающие колебания, упруго ударяясь о боковую стенку цилиндрического сосуда. Однако и в этом случае колебания поршня будут затухающими и при $t \to \infty$ поршень остановится, прижавшись к одной из стенок сосуда. В полном объеме это утверждение пока строго не доказано. Однако оно становится почти очевидным, если предположить, что $\dot{X}$ мало, и заменить плотность ρ^t ее слабым пределом $\bar{\rho}$. В этом случае задача сводится к изучению подскоков тяжелого шарика в вязкой среде, упруго ударяющегося о неподвижную горизонтальную плиту. Ясно, что со временем высота подскоков и скорость шарика убывают до нуля.

5. Имеется важный частный случай, когда задача о поршне допускает строгое аналитическое исследование. Это — квазиравновесные адиабатические изменения бесстолкновительного газа, которые рассматривались в §8. Если поршень движется медленно, то слева и справа от него бесстолкновительный газ успевает прийти в равновесное состояние.

Пусть ρ_1 и ρ_2 — начальные плотности распределения газа в одномерном сосуде слева и справа от поршня; это — неотрицательные функции от квадрата скорости, причем

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \rho_1\,dv = \frac{1}{X_0}, \quad \int\limits_{-\infty}^{\infty} \rho_2\,dv = \frac{1}{1-X_0}, \tag{12.8}$$

где X_0 — расстояние поршня до левого конца отрезка при $t=0$.

В соответствии с теоремой 1 §8, в квазиравновесном случае плотности ρ_1 и ρ_2 следует заменить функциями

$$\rho_1\left(\frac{v^2X^2}{X_0^2}\right) \quad \text{и } \rho_2\left(\frac{v^2(1-X)^2}{(1-X_0)^2}\right) \tag{12.9}$$

соответственно. При этом соотношения (12.8) останутся в силе, только X_0 надо заменить текущей координатой X. Тогда уравнение движения поршня (12.1) принимает вид

$$M\ddot{X} = \Phi(X,\,\dot{X}), \tag{12.10}$$

где

$$\Phi = 2m_1\int\limits_{\dot{X}}^{\infty}(v-\dot{X})^2\rho_1\left(\frac{v^2X^2}{X_0^2}\right)dv - \\ - 2m_2\int\limits_{-\infty}^{\dot{X}}(v-\dot{X})^2\rho_2\left(\frac{v^2(1-X)^2}{(1-X_0)^2}\right)dv. \tag{12.11}$$

Таким образом, в отличие от исходного уравнения (12.1), (12.11) является обыкновенным дифференциальным уравнением второго порядка. Его можно исследовать известными методами.

Ясно, что

$$\Phi(X,\,\dot{X}) = \varphi(X) + \psi(X,\,\dot{X}),$$

где $\varphi(X) = \Phi(X,\,0)$, а $\psi(X,\,0) = 0$. Оказывается,

(i) $\varphi(X) \to +\infty$ при $X \to 0$, $\varphi(X) \to -\infty$ при $X \to 1$,

(ii) φ имеет единственный нуль в интервале $(0,\,1)$,

(iii) $\dot{X}\psi(X,\,\dot{X}) < 0$ при $\dot{X} \neq 0$.

Действительно, согласно (12.11),

$$\varphi(X) = \frac{\mu_1}{X^3} - \frac{\mu_2}{(1-X)^3}, \tag{12.12}$$

где

$$\mu_1 = 2m_1X_0^3\int\limits_0^{\infty}\omega^2\rho_1(\omega^2)\,d\omega > 0,$$

$$\mu_2 = 2m_2(1-X_0)^3\int\limits_0^{\infty}\omega^2\rho_2(\omega^2)\,d\omega > 0.$$

Из (12.12) сразу вытекает заключение (*i*). Следовательно, функция φ обязательно имеет нуль в интервале $(0, 1)$. Так как

$$\frac{\varphi'}{3} = -\frac{\mu_1}{X^4} - \frac{\mu_2}{(1-X)^4} < 0$$

при $X \in (0,\, 1)$, то этот нуль единственный, что доказывает (*ii*).

Докажем теперь, что

$$\frac{\partial \phi}{\partial \dot{X}} = \frac{\partial \psi}{\partial \dot{X}} < 0. \tag{12.13}$$

Поскольку $\psi(X,\, 0) = 0$, то $\psi(X,\, \dot{X}) < 0(> 0)$ при $\dot{X} > 0(< 0)$. Отсюда вытекает заключение (*iii*).

Для доказательства (12.13) вычислим по известным правилам производную

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \dot{X}} = 4m_1 \int\limits_{\dot{X}}^{\infty} (\dot{X} - v)\rho_1 \left(\frac{v^2 X^2}{X_0^2}\right) dv - \\ - 4m_2 \int\limits_{-\infty}^{\dot{X}} (\dot{X} - v)\rho_2 \left(\frac{v^2 (1-X)^2}{(1-X_0)^2}\right) dv.$$

Первый (второй) интеграл справа отрицателен (положителен), поскольку $\dot{X} - v < 0$ $(\dot{X} - v > 0)$ для почти всех v. Что и требовалось.

Покажем, что единственный нуль X функции φ в интервале $(0, 1)$ есть положение поршня в состоянии равновесия. Действительно, слабые пределы плотностей ρ_1^t и ρ_2^t при $t \to \infty$ в квазиравновесном случае совпадают с функциями (12.9), в которых

надо положить $X = \bar{X}$. Поэтому равенство $\varphi(X) = 0$ совпадает с соотношением (12.5), которое определяет равновесное состояние поршня и газа.

Нам остается показать, что *любое* решение уравнения (12.10) обладает тем свойством, что $X(t) \to \bar{X}$ и $\dot{X}(t) \to 0$ при $t \to \infty$. Для этого (12.10) представим в виде

$$M\dot{X} = -\frac{\partial V}{\partial X} + \psi(X,\, \dot{X}), \tag{12.14}$$

где

$$V(X) = -\int\limits_{\bar{X}}^{X} \varphi(\xi)\, d\xi$$

— «потенциальная энергия» системы. Ясно, что точка $X(t) = \bar{X}$ — строгий минимум функции V. Из (12.14) и свойства (*iii*) вытекает, что

$$\left[\frac{M\dot{X}^2}{2} + V(X)\right]^{\cdot} = \dot{X}\psi(X,\, \dot{X}) < 0 \tag{12.15}$$

при $\dot{X} \neq 0$. Остается воспользоваться известным результатом об асимптотической устойчивости состояния равновесия в системе с полной диссипацией энергии в случае, когда потенциальная энергия принимает минимальное значение (см. [51]).

Отметим еще, что при естественном условии $m_1 \neq 0$, $m_2 \neq 0$ (это эквивалентно неравенствам $\mu_1 > 0$, $\mu_2 > 0$) потенциальная энергия V стремится к $+\infty$ при $X \to 0$ и $X \to 1$. Следовательно, ввиду (12.15), поршень никогда не коснется стенок сосуда. Наоборот, если $m_1 \neq 0$, а $m_2 = 0$, то поршень бесконечно много раз ударится о правую стенку и будет асимптотически к ней приближаться, теряя свою скорость. При этом предполагается, что соударения поршня со стенкой *абсолютно упругие*.

Аналогично решается задача о газе с поршнем на пружине в квазистатическом приближении. С качественной точки зрения картина движения поршня та же, что и описанная выше в п. 3.

§ 13. Термодинамика биллиардов и газ Больцмана–Гиббса

1. Вначале напомним классические идеи Гиббса, связанные с *термодинамизацией* гамильтоновых систем ([6], гл. I). Пусть $x = (x_1, \ldots, x_n)$ — обобщенные координаты, $y = (y_1, \ldots, y_n)$ — сопряженные канонические импульсы гамильтоновой динамической системы с n степенями свободы и стационарным гамильтонианом $H(x, y, \lambda)$, где $\lambda = (\lambda_1, \ldots, \lambda_m)$ — некоторые параметры. Рассмотрим каноническое по Гиббсу распределение вероятностей с плотностью

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z}, \tag{13.1}$$

где

$$Z = \int_\Gamma e^{-\beta H}\, d^n x\, d^n y \tag{13.2}$$

— статистический интеграл, $\beta^{-1} = kT$ (k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура).

Имея инвариантную меру с плотностью (13.1), можно ввести среднюю внутреннюю энергию

$$E(\beta, \lambda) = \int_\Gamma H\rho\, d^n x\, d^n y \tag{13.3}$$

и также усреднить обобщенные силы (реакции связей $\lambda = \mathrm{const}$), отвечающие параметрам λ:

$$\Lambda_i = -\int\limits_\Gamma \frac{\partial H}{\partial \lambda_i}\rho\, d^n x\, d^n y, \qquad 1 \leqslant i \leqslant m. \tag{13.4}$$

Соотношения $\Lambda_i = f_i(\beta, \lambda)$ будем рассматривать как *уравнения состояния* термодинамической системы с внешними параметрами λ, внутренней энергией E и обобщенными силами Λ. Как показал Гиббс, 1-форма притока тепла

$$\omega = dE + \sum_1^m \Lambda_i \, d\lambda_i \tag{13.5}$$

удовлетворяет аксиомам термодинамики:

- ω замкнута при фиксированном значении β (I-ое начало),

- 1-форма $\beta\omega$ также замкнута (II-ое начало).

Таким образом, по Гиббсу, каждой гамильтоновой системе (конечно, при условии, что интегралы (13.3) и (13.4) сходятся и гладко зависят от λ и β) можно сопоставить некоторую термодинамическую систему.

Несложно показать, что соотношения (13.3) и (13.4) можно представить в следующем виде:

$$E = -\frac{\partial \Phi}{\partial \beta}, \qquad \Lambda_i = \frac{1}{\beta}\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda_i}, \tag{13.6}$$

где $\Phi = \ln Z$. Ясно, что $\beta\omega = dS$, где энтропия вычисляется по формуле

$$S = \Phi - \beta \frac{\partial \Phi}{\partial \beta}. \tag{13.7}$$

2. Следуя [52] и [53], распространим результаты Гиббса на распределения вероятностей более общего вида:

$$\rho = \frac{f(\beta H)}{\int f(\beta H) \, d^n x \, d^n y}. \tag{13.8}$$

Здесь $f(\cdot)$ — гладкая функция одного переменного и снова $\beta = (kT)^{-1}$. При $f(z) = e^{-z}$ получаем распределение Гиббса.

Вычислим среднюю энергию E и обобщенные силы Λ_i по формулам (13.3) и (13.4), где плотность ρ определяется (13.8). После этого можно составить форму притока тепла (13.5).

Теорема 1 [52]. *Форма ω удовлетворяет I-му началу термодинамики тогда и только тогда, когда*

$$\int \frac{\partial H}{\partial \lambda_i} f \, d\mu \int \frac{\partial H}{\partial \lambda_j} f' \, d\mu = \int \frac{\partial H}{\partial \lambda_j} f \, d\mu \int \frac{\partial H}{\partial \lambda_i} f' \, d\mu \tag{13.9}$$

для всех $1 \leqslant i, j \leqslant m$, $d\mu = d^n x \, d^n y$, а II-му началу, когда дополнительно

$$\int H f \, d\mu \int \frac{\partial H}{\partial \lambda_i} f' \, d\mu = \int \frac{\partial H}{\partial \lambda_j} f \, d\mu \int H f' \, d\mu \tag{13.10}$$

для всех $1 \leqslant i \leqslant m$.

Если термодинамическая система имеет одну степень свободы ($m = 1$), то надо проверять только одно условие (13.10). Для функции $f(z) = e^{-z}$ условия (13.9) и (13.10), очевидно, выполнены.

Соотношения (13.9) и (13.10) можно представить в следующем виде:

$$\Lambda_i \frac{\partial F}{\partial \lambda_j} = \Lambda_j \frac{\partial F}{\partial \lambda_i}, \qquad 1 \leqslant i, j \leqslant m, \tag{13.11}$$

$$\frac{E}{\beta} \frac{\partial F}{\partial \lambda_j} = -\Lambda_i \frac{\partial F}{\partial \beta}, \qquad 1 \leqslant i \leqslant m, \tag{13.12}$$

где

$$F(\beta, \lambda) = \int\limits_{\Gamma} f(\beta H)\, d^n x\, d^n y.$$

По аналогии с распределением Гиббса функцию F назовем *обобщенным статистическим интегралом*.

Из (13.11) и (13.12) вытекает существование функции $\varkappa$ от переменных $\beta, \lambda_1, \ldots, \lambda_m$ такой, что

$$\Lambda_i = -\frac{\varkappa}{\beta} \frac{\partial F}{\partial \lambda_i}, \quad E = \varkappa \frac{\partial F}{\partial \beta}. \tag{13.13}$$

Аксиомы термодинамики накладывают ограничение на вид функции $\varkappa$:

$$d(\beta\omega) = -d\varkappa \wedge dF = 0.$$

Следовательно, функции $\varkappa$ и F зависимы. Поэтому мы можем записать, что $\varkappa = \varkappa(F)$ (по крайней мере локально).

Пусть Φ — первообразная функции $\varkappa(\cdot) : \Phi' = \varkappa$. Тогда соотношения (13.13) принимают более простой вид (13.6). В этом случае 1-форма $\beta\omega$ есть полный дифференциал dS, причем *обобщенная энтропия* S определяется формулой (13.7).

3. Применим эти общие соображения к биллиарду в искривленном пространстве. Пусть M — компактное конфигурационное пространство (с краем) натуральной механической системы с n степенями свободы. Будем рассматривать движение по инерции. Так что гамильтониан будет положительно определенной квадратичной формой относительно импульсов:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i, j=1}^{n} a_{i, j}(x) y_i y_j. \tag{13.14}$$

Если матрицу коэффициентов $\|a_{i, j}\|$ кратко обозначить A, то $H = \frac{(Ay, y)}{2}$.

Обобщенный статистический интеграл нетрудно выразить через температуру и единственный внешний термодинамический параметр — риманов объем многообразия M. Для этого сделаем линейную замену переменных $y \mapsto p$ по формуле

$$y = C(x)p,$$

причем $C^T AC$ — единичная $n \times n$-матрица. Тогда

$$F = \int\limits_{\mathbb{R}^n} \int\limits_{M} f(\beta H)\, d^n x\, d^n y = \int\limits_{M} \int\limits_{\mathbb{R}^n} f\left(\frac{\beta}{2} \sum p_i^2\right) (\det A)^{-\frac{1}{2}}\, d^n x\, d^n y = \frac{bV}{(\sqrt{\beta})^n},$$

где

$$V = \int\limits_{M} (\det A^{-1})^{\frac{1}{2}}\, d^n x$$

— объем M относительно римановой метрики (13.14),

$$b = \frac{2\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \int\limits_0^\infty r^{n-1} f\left(\frac{r^2}{2}\right) dr = \mathrm{const},$$

Γ — гамма-функция Эйлера.

Вычислим теперь среднюю кинетическую энергию:

$$\begin{aligned} E =& \frac{1}{F} \int\limits_{\mathbb{R}^n} \int\limits_M \frac{1}{2}(Ay, y) f\left(\frac{\beta}{2}(Ay, y)\right) d^n x\, d^n y = \\ =& \frac{1}{F} \int\limits_{\mathbb{R}^n} \int\limits_M \frac{1}{2} \sum p_j^2 f\left(\frac{\beta}{2} \sum p_j^2\right) (\det A)^{-\frac{1}{2}} d^n x\, d^n y = \\ =& \frac{a}{\beta b}, \end{aligned}$$

где

$$a = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \int\limits_0^\infty r^{n+1} f\left(\frac{r^2}{2}\right) dr = \mathrm{const}.$$

Интересно отметить, что внутренняя энергия бесстолкновительной среды не зависит от объема, что отвечает *закону Джоуля* для идеального газа.

Подсчитаем теперь функцию Φ. Для этого надо сначала записать в явном виде второе соотношение (13.13), из которого находится коэффициент $\varkappa$. В рассматриваемом случае

$$\varkappa = -\frac{2a}{bn} \frac{1}{F}. \tag{13.15}$$

Согласно общей теории, этот коэффициент должен быть функцией обобщенного статистического интеграла. Действительно, по

теореме 1, если гамильтониан — однородная форма по импульсам, то величины, вычисленные по обычным правилам статистической механики с использованием плотности (13.8), удовлетворяют первому и второму началу термодинамики.

Первообразная функции (13.15) равна

$$\Phi = -\frac{2a}{bn} \ln F.$$

Для канонического распределения Гиббса $2a = bn$, в чем нетрудно убедиться интегрированием по частям.

Используя (13.7), теперь можно подсчитать обобщенную энтропию:

$$S = \frac{a}{b} + \frac{2a}{bn} \ln F = \mathrm{const} + \frac{2a}{bn}\left(\ln V + \frac{n}{2} \ln T\right). \tag{13.16}$$

Обычно энтропия идеального газа, заключенного в *трехмерный* сосуд Π объемом W, дается следующей формулой:

$$N \ln W + \frac{3N}{2} \ln T + \mathrm{const}, \tag{13.17}$$

где N — число частиц газа (иногда это выражение еще умножается на постоянную Больцмана k, но мы этого не делаем). Чтобы сопоставить формулы (13.16) и (13.17), рассмотрим газ Больцмана–Гиббса, состоящий из N маленьких одинаковых шариков, которые движутся в сосуде Π, упруго сталкиваясь друг с другом и со стенками сосуда. Тогда, очевидно, $n = 3N$, а наш объем V будет приближенно равен W^N (поскольку в случае невзаимодействующих шариков конфигурационное пространство M системы будет прямым произведением N экземпляров П). После этих замечаний формулы (13.16) и (13.17) становятся идентичными с точностью до малосущественного постоянного множителя $\frac{2a}{bn}$, который зависит от вида функции f и числа степеней свободы системы.

С другой стороны, в статистической механике энтропия определяется интегралом

$$S = -\int\limits_{\Gamma} \rho \ln \rho \, d^n x \, d^n y. \tag{13.18}$$

В случае канонического распределения этот интеграл совпадает с термодинамической энтропией. Для более общих распределений вида (13.8) этот замечательный результат Гиббса, конечно, не справедлив. Однако гиббсовская энтропия (13.18) имеет вид

$$\frac{\gamma}{b} + \ln F, \tag{13.19}$$

где

$$\gamma = -\frac{2\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \int\limits_0^\infty r^{n-1} f\left(\frac{r^2}{2}\right) \ln f\left(\frac{r^2}{2}\right) dr = \mathrm{const}.$$

Видно, что для газа Больцмана–Гиббса формулы (13.17) и (13.19) совпадают с точностью до несущественной аддитивной константы.

Согласно (13.6), термодинамическая переменная P, сопряженная объему V, определятся равенством

$$P = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial \Phi}{\partial V}. \tag{13.20}$$

Следовательно:

$$P = \frac{2a}{nb}\frac{kT}{V}. \tag{13.21}$$

Это — уравнение состояния рассматриваемой системы в статистическом равновесии. По форме оно совпадает с классическим уравнением Клапейрона. Если $f(z) = e^{-z}$, то $2a = bn$ и (13.21) в точности соответствует уравнению Клапейрона для одного моля идеального газа. Переменная P имеет смысл давления.

Снова рассмотрим газ Больцмана–Гиббса из N маленьких шариков в трехмерном сосуде с объемом W. Тогда $n = 3N$ и можно считать, что $V = W^N$. Если подставить это выражение в формулу (13.21), то получим уравнение, отличающееся от уравнения Клапейрона. Однако здесь нет никакого противоречия, поскольку переменная P имеет смысл давления $3N$-мерного «газа». Давление p обычного газа как термодинамическая величина, сопряженная объему сосуда W, определяется уравнением (13.20), но только Φ следует прежде представить как функцию от T и W:

$$p = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial \Phi}{\partial W} = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial \Phi}{\partial V}\frac{\partial V}{\partial W} = \frac{2a}{3b}\frac{kT}{W}.$$

Для распределения Максвелла (когда $f(z) = e^{-z}$) $\frac{2a}{3b} = N$ и мы получаем классические соотношения идеального газа:

$$E = \frac{3}{2}NkT, \qquad pW = NkT. \tag{13.22}$$

Конечно, для немаксвелловских распределений отношение $\frac{2a}{3b}$, вообще говоря, отличается от N. Однако для широкого класса распределений при больших значениях N это отношение приближенно совпадает с N:

$$\lim_{N\to\infty} \frac{2a(N)}{3Nb(N)} = 1. \tag{13.23}$$

Например, сюда относятся распределения с плотностями

$$f\left(\frac{r^2}{2}\right) = g(r)e^{-\frac{r^2}{2}}, \qquad (13.24)$$

где g — любой неотрицательный многочлен от r. Действительно:

$$\int\limits_0^\infty r^{n+\alpha+1} e^{-\frac{r^2}{2}}\,dr = \frac{1}{n+\alpha}\int\limits_0^\infty r^{n+\alpha+1} e^{-\frac{r^2}{2}}\,dr.$$

Поскольку

$$\frac{n}{n+\alpha} \to 1, \qquad n \to \infty$$

при *фиксированном* значении α, то отсюда вытекает предельное соотношение (13.23). Напомним, что функции вида (13.24) называются частичными суммами *ряда Грама–Шарлье*, которыми обычно аппроксимируют плотности распределений произвольных случайных величин. В нашем случае возможность такой аппроксимации подтверждается известным наблюдением (восходящим еще к Больцману), что в большей части пространства большой размерности любое распределение близко к нормальному (строгие формулировки и обсуждение см., например, в [54]). Поскольку обычно N чрезвычайно велико (порядка 10^{23}) и точно не известно, то вместо соотношений

$$E = \frac{a}{b}kT \quad \text{и} \quad pW = \frac{2a}{3b}kT$$

мы вполне можем использовать классические соотношения (13.22). Отметим еще, что в силу соотношения (13.23) формула (13.16)

переходит в классическую формулу (13.17) для одноатомного идеального газа. Кроме того, с точностью до аддитивной постоянной статистическая энтропия (13.18) при $N \to \infty$ будет совпадать с термодинамической энтропией (13.17).

Эти наблюдения можно соединить с идеей слабого предела вероятностных распределений и знаменитой (и очень правдоподобной) гипотезой об эргодическом поведении газа Больцмана–Гиббса в прямоугольном ящике. В итоге мы построим полную *неравновесную* теорию идеального одноатомного газа в рамках общей теории ансамблей Гиббса. Действительно, слабый предел при $t \to \pm\infty$ решения уравнения Лиувилля для газа Больцмана–Гиббса с *любым* начальным условием будет функцией вида (13.8). Параметр β (размерность которого обратна размерности энергии) автоматически появляется для обезразмеривания аргумента функции f. В отличие от подхода Больцмана здесь не используются никакие дополнительные предположения (вроде условия о статистической независимости парных столкновений). Существенное отличие от подхода Больцмана состоит в том, что у нас газ достигает статистического (теплового) равновесия как при $t \to +\infty$, так и при $t \to -\infty$, причем эти равновесия тождественны. Последнее обстоятельство полностью соответствует свойству обратимости уравнений движения.

Имеется еще одно существенное отличие развиваемого здесь подхода от известного метода Н. Н. Боголюбова (цепочки уравнений Б–Б–З–К–И), который в свою очередь является развитием и обобщением метода Больцмана. Дело в том, что с точки зрения теории ансамблей Гиббса распределение (13.8), конечно, есть *стационарное* распределение: оно удовлетворяет уравнению Лиувилля и не меняется со временем. Однако в теории Боголюбова картина другая: распределение (13.8) в общем случае уже не будет стационарным. Это обстоятельство представляется несколько парадоксальным, поскольку исходным пунктом теории цепочек Боголюбова также служит уравнение Лиувилля. Однако при замыкании цепочки зацепляющихся уравнений Боголюбова делаются *дополнительные* содержательные предположения (вроде гипотезы о молекулярном хаосе в прошлом и гипотезы о кинетической стадии неравновесного процесса), которые позволяют в итоге получить уравнение больцмановского типа для одночастичной функции распределения, определяющей, в частности, направление эволюции. При неограниченном возрастании времени это распределение стремится к распределению Максвелла.

4. Наш путь к нормальному распределению иной: при условии эргодичности слабый предел плотности распределения зависит только от энергии и при неограниченном увеличении числа степеней свободы одночастичная функция распределения будет стремиться к плотности распределения Максвелла.

Обсудим этот вопрос более подробно, следуя [53]. Пусть

$$\rho_N(x_1, \ldots, x_N, t) \tag{13.25}$$

— плотность распределения газа Больцмана–Гиббса из N маленьких одинаковых шариков в прямоугольном параллелепипеде; x_j обозначает набор координат и скоростей j-го шарика. Функция (13.25) удовлетворяет уравнению Лиувилля с начальными данными $\rho_N(x, 0)$ при $t = 0$. Согласно Н. Н. Боголюбову, полезно ввести s-частичные функции распределения $\rho_s(x_1, \ldots, x_s, t)$, усредняя плотность (13.25) по $x_{s+1}, \ldots, x_N$. Особый интерес, конечно, представляет *первая* функция распределения (когда $s = 1$), для которой (при некоторых дополнительных содержательных предположениях) Боголюбов получил уравнение больцмановского типа. Из этого уравнения выводятся два важных следствия:

- больцмановская энтропия
$$-\int \rho_1 \ln \rho_1 \, d^6x_1 \tag{13.26}$$
монотонно возрастает со временем,
- при $t \to +\infty$ распределение ρ_1 стремится к распределению Максвелла.

Однако если не принимать дополнительных предположений, то будем иметь *другую* картину. Пусть $\bar\rho$ — слабый предел функции (13.25) при $t \to \pm\infty$. Это функция от $x_1, \ldots, x_N$ из L_1 (если, конечно, $\rho_N \in L_1$ при $t = 0$). Положим

$$\bar\rho_k(x_1, \ldots, x_k) = \int \bar\rho(x_1, \ldots, x_N) \, d^6x_{k+1} \ldots d^6x_N.$$

Справедлива совсем простая

Теорема 2. *Функция* $\rho_k(x_1, \ldots, x_k, t)$ *слабо сходится к* $\bar{\rho}_k$ *при* $t \to \pm\infty$.

В качестве пробных функций здесь следует брать существенно ограниченные функции, зависящие только от $x_1, \ldots, x_k$.

Теорема 3.

$$-\int \rho_k \ln \rho_k \, d^6x_1 \ldots d^6x_k \leqslant -\int \bar{\rho}_k \ln \bar{\rho}_k \, d^6x_1 \ldots d^6x_k$$

при всех значениях t.

Это утверждение непосредственно вытекает из неравенства Йенсена.

В частности, больцмановская энтропия (13.26) не превосходит

$$-\int \bar{\rho}_1 \ln \bar{\rho}_1 \, d^6x_1.$$

Эти наблюдения, конечно, носят более общий характер и справедливы при условии существования слабого предела (в том числе и по Чезаро) плотности распределения (13.25) как функции времени. В нашем случае наличие слабого предела вытекает из общих результатов, изложенных в §1.

С учетом эргодической гипотезы для газа Больцмана–Гиббса, плотность $\bar{\rho}_N$ есть суммируемая функция от полной энергии:

$$\bar{\rho}_N = \frac{f\left(\dfrac{\beta m}{2}(v_1^2 + \ldots + v_N^2)\right)}{V \int\limits_{\mathbb{R}^{3N}} f \, d^3v_1 \ldots d^3v_N} \tag{13.27}$$

(см. (13.8)). Здесь m —масса каждого шарика, v_j^2 — квадрат скорости j-го шарика, V —объем $3N$-мерного конфигурационного пространства газа Больцмана–Гиббса. Усредняя (13.27) по $v_2, \ldots, v_N$, получим формулу для первой функции распределения в состоянии статистического равновесия:

$$\bar{\rho}_1(u) = \frac{\int\limits_{\mathbb{R}^{3N-3}} f\left(\frac{1}{2\varkappa}(u^2 + v_2^2 + \ldots + v_N^2)\right) d^3v_2 \ldots d^3v_N}{\int\limits_{\mathbb{R}^{3N}} f\left(\frac{1}{2\varkappa}(v_1^2 + v_2^2 + \ldots + v_N^2)\right) d^3v_1 \ldots d^3v_N}, \tag{13.28}$$

где $\varkappa = \dfrac{\beta}{m}$, $u \in \mathbb{R}^3$.

Покажем теперь, что при некоторых дополнительных предположениях на функцию f (*аналитического*, а не статистического характера) предельная одночастичная функция распределения $\bar{\rho}_1$ стремится к распределению Максвелла при $N \to \infty$. Таким образом, для почти всех начальных плотностей $\rho_N|_{t=0}$ в состоянии теплового равновесия частицы газа Больцмана–Гиббса будут распределены по скоростям практически по нормальному закону (если, конечно, N велико).

Чтобы получить предельное распределение при $N \to \infty$, положим $3N = m + 2$ и преобразуем (13.28):

$$\bar{\rho}_1(u) = \frac{\Gamma\left(1 + \frac{m}{2}\right) \int\limits_0^\infty r^{m-2} f\left(\dfrac{u_1^2 + u_2^2 + u_3^2 + r^2}{2\varkappa}\right) dr}{\pi^{\frac{3}{2}} \Gamma\left(1 + \frac{m-3}{2}\right) \int\limits_0^\infty r^{m+1} f\left(\dfrac{r^2}{2\varkappa}\right) dr}. \tag{13.29}$$

Здесь $(u_1, u_2, u_3) = u$. В действительности эта плотность зависит лишь от величины скорости $|u|$. Следовательно, ее k-й момент

$$\int\limits_{\mathbb{R}^3} \bar{\rho}_1(|u|)|u|^k \, du_1 \, du_2 \, du_3$$

равен

$$4\pi \int\limits_0^\infty \bar{\rho}_1(x) x^{k+2} \, dx = \frac{2\Gamma\left(1+\frac{m}{2}\right)\Gamma\left(\frac{k+3}{2}\right)\int\limits_0^\infty \xi^{m+k+1} f\left(\frac{\xi^2}{2\varkappa}\right) d\xi}{\sqrt{\pi}\Gamma\left(1+\frac{k+m}{2}\right)\int\limits_0^\infty \xi^{m+1} f\left(\frac{\xi^2}{2\varkappa}\right) d\xi}. \tag{13.30}$$

При выводе этого соотношения использовалась формула (13.29) и элементарные свойства гамма-функции.

Удобно считать, что переменная x принимает все вещественные значения. Поэтому функцию $\bar{\rho}_1$ естественно продолжить до четной функции на $\mathbb{R} = \{x\}$. Чтобы упростить запись формул, положим $\varkappa = 1$ (или заменим функцию $f(z)$ на $f(\varkappa z)$).

При $k = 0$ получим вероятностную меру на прямой с плотностью

$$2\pi x^2 \bar{\rho}_1(x), \qquad x \in \mathbb{R}. \tag{13.31}$$

Пусть $\hat{\rho}_1$ — плотность нормального распределения в трехмерном евклидовом пространстве с дисперсией σ^2:

$$\frac{1}{(\sqrt{2\pi}\sigma)^3} e^{-\frac{u_1^2+u_2^2+u_3^2}{2\sigma^2}}.$$

Тогда

$$2\pi x^2 \hat{\rho}_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma^3} x^2 e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \tag{13.32}$$

будет распределением Максвелла по величинам скоростей. Наша цель — показать, что при $m \to \infty$ распределение (13.31) стремится к распределению Максвелла (13.32).

Теорема 4. *Если*

(a) *функция f имеет конечные моменты всех порядков,*

(b) $\lim\limits_{m\to\infty} \int\limits_{-\infty}^{\infty} 2\pi x^4 \bar{\rho}_1(x) \, dx = 3c > 0$,

то для любого вещественного α

$$\lim_{m\to\infty} \int\limits_{-\infty}^{\alpha} 2\pi x^2 \bar{\rho}_1(x) \, dx = \int\limits_{-\infty}^{\alpha} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma^3} x^2 e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \, dx, \tag{13.33}$$

где $\sigma^2 = c$.

Условие (a) необходимо для существования интегралов в формулах (13.29) и (13.30), а условие (b) есть условие *невырожденности* предельного распределения.

Доказательство.

Теорема 4 доказывается старомодным методом моментов. Из формулы (13.30) при $k = 2$ и условия (b) получаем соотношение

$$\lim_{m\to\infty} \frac{1}{m+2} \frac{\int\limits_0^\infty \xi^{m+3} f\left(\frac{\xi^2}{2}\right) d\xi}{\int\limits_0^\infty \xi^{m+1} f\left(\frac{\xi^2}{2}\right) d\xi} = c. \tag{13.34}$$

Теперь вычислим предел четвертого момента ($k = 4$):

$$\lim_{m\to\infty} \frac{2\Gamma\left(1+\frac{m}{2}\right)\Gamma\left(\frac{7}{2}\right)}{\sqrt{\pi}\Gamma\left(3+\frac{m}{2}\right)} \frac{\int\limits_0^\infty \xi^{m+5} f\left(\frac{\xi^2}{2}\right)\,d\xi}{\int\limits_0^\infty \xi^{m+3} f\left(\frac{\xi^2}{2}\right)\,d\xi} \frac{\int\limits_0^\infty \xi^{m+3} f\left(\frac{\xi^2}{2}\right)\,d\xi}{\int\limits_0^\infty \xi^{m+1} f\left(\frac{\xi^2}{2}\right)\,d\xi} =$$

$$\lim_{m\to\infty} \frac{2\Gamma\left(1+\frac{m}{2}\right)\Gamma\left(\frac{7}{2}\right)(m+4)(m+2)c^2}{\sqrt{\pi}\Gamma\left(3+\frac{m}{2}\right)} = 1\cdot 3\cdot 5c^2.$$

Здесь дважды использовалась формула (13.34) и функциональное уравнение гамма– функции Эйлера.

Аналогично доказывается, что для $k = 2n$ предел (13.30) при $m \to \infty$ равен

$$(2n+1)!!\, c^n. \tag{13.35}$$

Все моменты нечетного порядка, очевидно, равны нулю.

С другой стороны, дисперсия распределения (13.32) равна

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{x^4}{\sqrt{2\pi}\sigma^3} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}\,dx = 3\sigma^2.$$

Более общо, момент $2n$-ого порядка равен

$$(2n+1)!!\,\sigma^{2n}. \tag{13.36}$$

Формулы (13.35) и (13.36) совпадают, если положить $c = \sigma^2$. Следовательно, по известной теореме моментов Чебышева–Маркова (см., например, [55]), имеем искомое предельное равенство (13.33).

§ 14. Статистические модели термостата

1. Первый пример статистической модели термостата (тела бесконечной теплоемкости) был предложен впервые, по-видимому, Н. Н. Боголюбовым ([56], гл. IV). Система S представляет собой обычный гармонический осциллятор с гамильтонианом

$$H_S = \frac{1}{2}(p^2 + \omega^2 q^2),$$

а термостат Σ моделируется системой большого числа N невзаимодействующих гармонических осцилляторов с гамильтонианом

$$H_\Sigma = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}(p_j^2 + \omega_j^2 q_j^2).$$

Гамильтониан взаимодействия выбирается в виде квадратичной формы

$$H_{S\Sigma} = \varepsilon \sum_{j=1}^{N} \alpha_j q_j q,$$

где $\alpha_j = \mathrm{const}$, ε — малый параметр. Если $\alpha_j < 0$, то при малых $\varepsilon > 0$ возмущение $H_{S\Sigma}$ можно представить в более привычном виде потенциальной энергии взаимодействующих осцилляторов

$$\frac{\varepsilon}{2}\sum |\alpha_j|(q_j - q)^2,$$

однако при этом частоты ω и ω_j изменяются на малую (вместе с ε) величину.

Предполагается, что в начальный момент времени состояние осциллятора с гамильтонианом H_S фиксировано, а осцилляторы из «большой» системы Σ распределены по закону Гиббса с одной и той же температурой T. В [56] показано, что при некоторых достаточно общих условиях при $N \to \infty$ и малых ε система S с течением времени неограниченно приближается к равновесному статистическому состоянию с той же температурой T.

Имеется значительное число работ, в которых исследуются *динамические* модели термостата (гауссовские термостаты, термостат Нозé–Гувера и др.). Ссылки на оригинальные работы и обсуждение можно найти в обзорной работе [14]. В этих моделях в уравнения движения вводятся дополнительные негамильтоновы или диссипативные слагаемые, которые должны обеспечивать стремление плотности распределения (или же полной энергии системы) к каноническому распределению Гиббса (к фиксированному значению). Поскольку эти модели феноменологические, а не статистические, то они здесь не обсуждаются.

2. В этом параграфе рассматриваются статистические модели термостата с точки зрения общей теории ансамблей Гиббса. Эти соображения носят предварительный характер и требуют более детального изучения.

Начнем с простых замечаний, раскрывающих общую идею модели термостата. Предположим, что гамильтониан имеет привычный «натуральный» вид $H = T + \varepsilon V$, где

$$T = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\frac{p_j^2}{2m_j}$$

— кинетическая энергия ($m_1, \ldots, m_n$ — массы частиц), V — потенциальная энергия (зависящая от координат $q_1, \ldots, q_n$), ε — малый параметр. Существенное предположение состоит в том, что эта гамильтонова система *эргодична* на энергетических поверхностях $\{H = \mathrm{const}\}$. Тогда любая плотность распределения вероятностей ρ_t стремится при $t \to \pm\infty$ по Чезаро к плотности $\bar{\rho}$, которая будет функцией от энергии.

Поэтому естественно предположить, что

$$\bar{\rho} = \frac{f(\beta H)}{\int\limits_\Gamma f(\beta H)\, d\mu}, \tag{14.1}$$

где f — измеримая функция, β — постоянный множитель, размерность которого обратна размерности энергии, $d\mu = d^n p\, d^n q$ — инвариантная мера Лиувилля (ср. с (13.8)). Функция f может еще сама зависеть от параметра β.

Совсем легко показать, что средние значения отдельных частей кинетической энергии

$$E_j = \int\limits_\Gamma \frac{p_j^2}{2m_j}\bar{\rho}\, d\mu \qquad (1 \leqslant j \leqslant n) \tag{14.2}$$

совпадают, если плотность $\bar{\rho}$ задается формулой (14.1). Доказательство заключается в следующем: после подстановки

$$p_j \mapsto \sqrt{m_j}\tilde{p}_j$$

значение интеграла (14.2) уже не зависит от масс $m_1, \ldots, m_n$. Подчеркнем, что этот факт справедлив и при $\varepsilon \neq 0$.

Предположим теперь, что среднее значение потенциальной энергии εV стремится к нулю при $\varepsilon \to 0$. Это заведомо так, если конфигурационное пространство компактно, а функция V ограничена. Но тогда при малых ε среднее значение полной энергии

$$\int\limits_{\Gamma} H\rho_0 \, d\mu = \int\limits_{\Gamma} H\bar{\rho} \, d\mu$$

будет приближенно равно nE, где E — это интеграл (14.2), значение которого не зависит от j.

Сделаем одно замечание. При выводе закона распределения Максвелла, предложенном Борелем (см. [21]; это — «утонченный» вариант одного из способов, предложенных самим Максвеллом), предполагается, что E *не зависит* от n. Это, конечно, является существенным допущением. В действительности, согласно формулам §13:

$$2\beta nE = \frac{\int\limits_0^\infty r^{n+1} f\left(\frac{r^2}{2}\right) dr}{\int\limits_0^\infty r^{n-1} f\left(\frac{r^2}{2}\right) dr} = -n\frac{\int\limits_0^\infty r^{n+1} f\left(\frac{r^2}{2}\right) dr}{\int\limits_0^\infty r^{n+1} f'\left(\frac{r^2}{2}\right) dr}.$$

Следовательно, если $f(z) = e^{-z}$ (в этом случае (14.1) — это распределение Гиббса), то отношение интегралов справа равно единице и поэтому E, действительно, не зависит от числа степеней свободы. В общем случае конечно, E зависит от n и поэтому аргументы Бореля нуждаются в уточнении. По меньшей мере здесь следует говорить об *асимптотической* (при $n \to \infty$) независимости средней энергии E от n. Вывод распределения Максвелла для одночастичной функции распределения, свободный от этих возражений, имеется в работе [53].

Вернемся теперь к статистической модели термостата. Пусть при указанных выше условиях «большую» систему с $n \gg 1$ степенями свободы (термостат) мы расширили присоединением к ней еще k одномерных подсистем так, что полученная система с $n+k$ степенями свободы снова будет эргодической на изоэнергетических многообразиях.

Итак, пусть

$$H_{n+k} = H_n + H_k + \varepsilon W_{n,\,k}$$

— гамильтониан расширенной системы. Здесь $H_n(H_k)$ — гамильтониан системы с $n(k)$ степенями свободы несколько более общего вида

$$\sum h(p_j,\, q_j) + \varepsilon V(q), \tag{14.3}$$

где h — функция двух переменных (гамильтониан подсистемы с одной степенью свободы). Обычно

$$h(p,\, q) = \frac{p^2}{2m} + f(q),$$

и потенциальная энергия V есть сумма четных функций, зависящих от разностей $q_i - q_j$ (потенциальные энергии парных взаимодействий). Функция $\varepsilon W_{n,k}$ предполагается ограниченной и измеримой; это — потенциальная энергия взаимодействия систем с n и k степенями свободы.

Предположим, что в начальный момент времени системы с гамильтонианами H_n и H_k были статистически независимыми и находились в состоянии теплового равновесия. Это означает, что начальная плотность распределения вероятностей есть произведение

$$\rho^{(n+k)} = \rho^{(n)}\rho^{(k)},$$

где $\rho^{(n)}(\rho^{(k)})$ — суммируемая функция только от H_n (соответственно H_k). Имеем

$$\begin{aligned} &\int H_{n+k}\rho^{(n+k)}\, d^{n+k}p\, d^{n+k}q = \\ &= \int H_n\rho^{(n)}\, d^n p\, d^n q + \int H_k\rho^{(k)}\, d^k p\, d^k q + O(\varepsilon) = \\ &= nE_n^- + kE_k^- + O(\varepsilon). \end{aligned} \tag{14.4}$$

Смысл обозначений в последней строке очевиден.

По нашему предположению эргодичности, в состоянии статистического равновесия всей системы биркгофовское среднее $\bar\rho^{(n+k)}$ будет функцией от H_{n+k}, причем интеграл (14.4) равен

$$(n+k)E_{n+k}^+ + O(\varepsilon),$$

где E_{n+k}^+ — средняя энергия, приходящаяся на одну степень свободы расширенной системы.

Поскольку полная энергия сохраняется, то при малых ε

$$nE_n^- + kE_k^- \approx (n+k)E_{n+k}^+. \tag{14.5}$$

Предположим теперь, что

$$nE_n^- \gg kE_k^-.$$

Это означает, что энергия термостата («теплоемкость») намного больше энергии присоединяемой системы. Фиксируем k и устремляем n к бесконечности. Тогда из (14.5) получаем:

$$\frac{n}{n+k}E_n^- \to E_n^- \approx E_{n+k}^+.$$

Следовательно, в состоянии статистического равновесия средняя энергия, приходящаяся на одну степень свободы присоединенной системы, станет равной средней энергии одномерных подсистем, составляющих термостат. Другими словами, температура присоединенной системы станет равной температуре термостата.

3. Нам осталось обсудить ключевой вопрос: при каких условиях можно утверждать, что стационарная плотность $\bar\rho$ распределения вероятностей есть функция только от энергии гамильтоновой системы вида (14.3)? Не следует думать, что здесь дело сводится только к условию эргодичности системы на многообразии $\{H = \mathrm{const}\}$. Этот вопрос глубже и интереснее: существенную роль играет гладкость функции $\bar\rho$.

Дело в том, что $\bar{\rho}$ — первый интеграл гамильтоновой системы. С другой стороны, хорошо известно, что аналитические гамильтоновы системы в типичном случае не допускают первых интегралов, аналитических во всем фазовом пространстве и функционально независимых от интеграла энергии (см. по этому поводу [57]).

Однако трудность состоит в том, что даже для аналитической системы дифференциальных уравнений и для аналитической начальной плотности ρ_0 биркгофовское среднее $\bar{\rho}$ может быть разрывной функцией на всюду плотном множестве нулевой меры. Простым примером служит невырожденная вполне интегрируемая гамильтонова система с компактными энергетическими многообразиями: функция $\bar{\rho}$, как правило, разрывна в точках на резонансных инвариантных торах (как классическая функция Римана, непрерывная в иррациональных точках и разрывная в рациональных). Однако поведение функции $\bar{\rho}$ на множестве нулевой меры не играет никакого значения. В этом примере, очевидно, значения функции $\bar{\rho}$ можно так изменить в точках резонансных торов, что она станет аналитической на всем фазовом пространстве.

Итак, предположим, что гамильтониан вида (14.3) есть аналитическая функция. Пусть плотность $\bar{\rho}$ аналитически зависит от $2n$ переменных p, q и параметра ε. Вспомним, что плотность канонического распределения Гиббса обладает этим свойством. Тогда в типичной ситуации $\bar{\rho}$ оказывается функцией от полной энергии. Точные условия на гамильтониан (14.3) указаны в [58], а доказательство использует механизм разрушения резонансных инвариантных торов невозмущенной системы, открытый Пуанкаре. Следовательно, в этом случае применим изложенный выше анализ модели термостата.

Конечно, плотность $\bar{\rho}$ может оказаться лишь непрерывной или вообще существенно разрывной (но суммируемой) функцией. Можно ли что-то содержательное сказать в этой ситуации? К сожалению, эта задача на сегодняшний день недостаточно изучена и приходится ограничиваться только некоторыми гипотезами.

Во-первых, кажется правдоподобным, что при $n \geqslant 3$ и малых ε типичная гамильтонова система с функцией Гамильтона (14.3) должна быть *транзитивной* при фиксированном значении полной энергии: существует хотя бы одна всюду плотная траектория. Это — одна из возможных точных формулировок гипотезы о диффузии Арнольда в многомерных системах. Если это так, то *непрерывная* плотность $\bar{\rho}$ также будет функцией от полной энергии системы.

Наконец, есть правдоподобное предположение, что при малых фиксированных ε и достаточно больших n типичная гамильтонова система вида (14.3) будет эргодической на энергетических многообразиях. К сожалению, в этом направлении пока получено мало надежной информации. Отметим еще «родственный» случай, когда n фиксировано, а ε мало. Здесь эргодичность системы с гамильтонианом вида (14.3) опровергается КАМ-теорией.

В заключение напомним, что согласно Н. Н. Боголюбову, нас на самом деле интересуют не фиксированные (пусть и большие) значения n, а поведение системы на макроуровне в термодинамическом пределе, когда число степеней свободы n и «объем», в котором заключена система, согласованным образом устремляются к бесконечности (см. по этому поводу [59]).

§ 15. Обобщенное каноническое уравнение Власова

1. Анасамбль Гиббса, управляемый уравнением Лиувилля, описывает континуум *невзаимодействующих* частиц. Имеется естественное обобщение этой модели, учитывающее парное взаимодействие. Кинетика такой сплошной среды задается *уравнением Власова*. Оно имеет существенное значение в теории плазмы. Мы обсудим свойства обобщенного кинетического уравнения Власова и покажем, как можно распространить идею статистического равновесия ансамблей Гиббса на континуум взаимодействующих частиц.

Пусть M — гладкое многообразие с локальными координатами $x_1, \ldots, x_n$, $\rho_t(x) = \rho(x, t)$ — плотность меры $d\mu (d\mu = \rho\, d^n x)$, которая удовлетворяет следующему дифференциально-интегральному уравнению:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial(\rho v_i)}{\partial x_i} = 0, \quad v_i = \int\limits_M K_i(x, y)\rho(y, t)\, d^n y. \qquad (15.1)$$

Компоненты векторного поля $(v_1, \ldots, v_n) = v$ — интегральные функционалы от плотности ρ с ядрами

$$K_i : M \times M \to \mathbb{R}.$$

В дальнейшем предполагается, что K_i — гладкие функции, хотя в приложениях часто встречаются случаи, когда ядра имеют сингулярности на диагонали $\{x = y\} \subset M \times M$. Пусть $K(x, x) = 0$ для всех $x \in M$. В физических приложениях это означает отсутствие «самодействия».

Будем также предполагать, что

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial K_i}{\partial x_i} = 0 \tag{15.2}$$

для всех x, y. Тогда поток системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\dot{x}_j = v_j(x,\, t), \qquad 1 \leqslant j \leqslant n, \tag{15.3}$$

сохраняет «стандартную» меру $d\nu = d^n x$.

Уравнение (15.1) является «уравнением неразрывности» для системы (15.3). Следовательно, ее поток также сохраняет меру $d\mu$. В частности,

$$\int\limits_M \rho_t(x)\, d^n x = \text{const}. \tag{15.4}$$

Это обстоятельство позволяет ограничиться рассмотрением *вероятностных* мер $d\mu$: интеграл (15.4) равен единице при всех $t \in \mathbb{R}$. В предположении (15.2) плотность $\rho = \dfrac{\partial \mu}{\partial \nu}$ — первый интеграл (15.3), и поэтому первое уравнение (15.1) можно записать в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum \frac{\partial \rho}{\partial x_i} v_i = 0. \tag{15.5}$$

Предположение (15.2) означает, что при переходе к новым локальным координатам якобиан преобразования должен быть равен единице.

Если ядра K_i не зависят от второй переменной y, то система (15.3) становится автономной: $v_j = K_j(x)$. В этом случае мы возвращаемся к изучению динамической системы (1.1) и ансамблей Гиббса. С другой стороны, уравнение (15.1) обобщает известное в статистической механике *кинетическое уравнение Власова*, которое также называется *уравнением самосогласованного поля*. Это уравнение описывает эволюцию функции распределения $\rho(x,\, v,\, t)$ континуума взаимодействующих частиц по скорости v и координате x в момент времени t. Оно имеет вид

$$\begin{gathered} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \Big(\frac{\partial \rho}{\partial x},\, v\Big) + \Big(\frac{\partial \rho}{\partial v},\, F\Big) = 0, \\ F = -\frac{\partial}{\partial x} \int K(x,\, y) \rho(y,\, u,\, t)\, du\, dy. \end{gathered} \tag{15.6}$$

Здесь K — парный потенциал взаимодействия, который в реальных задачах зависит от расстояния $|x - y|$.

2. При наличии сингулярности у ядра $K = \{K_i\}$ вопрос о *существовании* и *единственности* решений уравнения Власова является нетривиальной задачей. Чтобы представить возникающие здесь трудности, заметим, что уравнение вихря плоских течений идеальной баротропной жидкости можно представить в виде обобщенного уравнения Власова, в котором потенциал парного взаимодействия пропорционален логарифму расстояния $|x - y|$ (см. [60]). Задача о существовании и единственности решений этого уравнения с классическими начальными условиями эквивалентна задаче о разрешимости гидродинамических уравнений Эйлера на плоскости.

Для *гладких* потенциалов с некоторыми естественными ограничениями уравнения Власова всегда разрешимы (см., например, работы [61–63] и имеющиеся там ссылки). Метод [63] применим к более общему уравнению (15.1). Справедлива

Теорема 1. *Пусть M компактно, функции $K_1, \ldots, K_n$ гладкие и при $t = 0$ плотность ρ непрерывно дифференцируема. Тогда уравнение (15.1) имеет единственное непрерывно дифференцируемое решение, определенное при всех значениях $t \in \mathbb{R}$.*

Однако нас будут интересовать решения уравнения (15.1) из класса $L_1(M, d\nu)$, которые следует понимать в *обобщенном* (слабом) смысле: уравнение (15.1) умножается на пробную бесконечно дифференцируемую функцию $h: M \to \mathbb{R}$ и затем производятся интегрирования по частям. В частности, функционал

$$\int\limits_M \rho_t(x) h(x)\, d^n x$$

дифференцируем по времени t.

Теорема 2. *Пусть M компактно, функции $K_j (1 \leqslant j \leqslant n)$ гладкие, и $\rho \in L_1$ при $t = 0$. Тогда уравнение (15.1) имеет единственное (с точностью до значений на множестве нулевой меры) решение из класса $L_1(M, d\nu)$ (в слабом смысле), определенное при всех $t \in \mathbb{R}$.*

Сделаем несколько замечаний по поводу теорем 1 и 2. Если ядра $K_1, \ldots, K_n$ — гладкие (т. е. бесконечно дифференцируемые) функции, а плотность ρ_t суммируема при всех t, то компоненты v_i векторного поля также будут гладко зависеть от точки $x \in M$. Это вытекает из второй формулы (15.1) и теоремы о дифференцировании интеграла по параметру. Следовательно, если ρ — слабое решение, то компоненты векторного поля v заведомо непрерывно дифференцируемы по x и поэтому система обыкновенных дифференциальных уравнений (15.3) однозначно разрешима. Пусть $\{g^t\}$ — ее поток: $x(t, x_0) = g^t(x_0)$, где $x(t, x_0)$ — решение с условием Коши $x(0, x_0) = x_0$. Ввиду неавтономности системы (15.3), семейство преобразований $\{g^t\}$ в общем случае не является группой, хотя каждое из g^t есть диффеоморфизм многообразия M. Положим $g^{-t} = (g^t)^{-1}$. Согласно (15.5), ρ — первый интеграл системы (15.3). Поэтому можно утверждать, что

$$\rho(x, t) = \rho_0(g^{-t} x).$$

Значит, если $\rho_0 \in C^m(M)$, то при всех t функция $\rho_t(x)$ также m раз непрерывно дифференцируема. Это замечание уточняет заключение теоремы 1 (когда $m = 1$). Оно, конечно, справедливо и при $m = \infty$. Наконец, если $\rho_0 \in L_p (1 \leqslant p \leqslant \infty)$, то функция $\rho_t(x)$ также принадлежит L_p (в теореме 2 $p = 1$).

3. Сформулируем простые (но важные) свойства решений обобщенного уравнения Власова.

Теорема 3. *Если f — измеримая функция одного переменного, то*

$$\int\limits_M f(\rho_t(x))\, d^n x = \text{const}. \tag{15.7}$$

Чтобы это утверждение было содержательным, надо потребовать конечность интеграла (15.7). Теорема 3 — следствие общей теоремы 1 из §2.

Следствие 1. *Энтропия*

$$-\int\limits_M \rho_t \ln \rho_t\, d^n x \tag{15.8}$$

не меняется со временем.

Поскольку ρ_t — плотность «одночастичного» распределения, то интеграл (15.8) — аналог энтропии Больцмана. Однако в модели самосогласованного поля она, вопреки ожиданию, постоянна. Это — строгое следствие уравнения Власова.

Введем однопараметрическое семейство операторов

$$G^t : \rho_0 \mapsto \rho_t. \tag{15.9}$$

Согласно сказанному в п. 2, эти операторы переводят функциональные пространства $C^m(M)$ $(0 \leqslant m \leqslant \infty)$ и $L_p(M, d^n x)$ $(0 \leqslant p \leqslant \infty)$ в себя. Однако они, как правило, *нелинейные* (хотя оператор G^0 единичный и поэтому линейный).

Теорема 4. *Семейство операторов $\{G^t\}$, $t \in \mathbb{R}$ является однопараметрической группой:*

- *G^0 — тождественное преобразование,*
- *$(G^t)^{-1} = G^{-t}$ для всех t,*
- *$G^{t_2}(G^{t_1}) = G^{t_1+t_2}$ для всех t_1, t_2.*

Это утверждение — следствие обобщенного уравнения Власова (15.1) и предположения о независимости ядер $\{K_i\}$ от времени. Действительно, пусть ρ_t и $\tilde{\rho}_t$ — решения уравнения (15.1) с одним и тем же начальным условием, но при $t = 0$ и при $t = \tau$ соответственно. Тогда (с учетом теоремы единственности)

$$\rho_t = \tilde{\rho}_{t+\tau}$$

для всех $t \in \mathbb{R}$. Из этого равенства вытекают заключения теоремы 4.

Из теоремы 3 вытекает

Следствие 2. *Операторы G^t переводят сферы*

$$\|\rho\|_{L_p} = \left[\int\limits_M |\rho(x)|^p\, d^n x\right]^{\frac{1}{p}} = \text{const}$$

из L_p $(p < \infty)$ в себя.

Отметим еще, что G^t сохраняют также равномерную норму в C^0:

$$\|\rho\| = \sup_{x \in M} |\rho(x)|.$$

Если операторы G^t были бы линейными, то они были бы *изометриями* L_p:

$$\|\rho_t^{(1)} - \rho_t^{(2)}\| = \mathrm{const}$$

для любых двух решений уравнения (15.1). Для уравнения Лиувилля операторы G^t, очевидно, линейные; соответствующие операторы $L_2 \to L_2$ обычно называются операторами Купмана. Свойства линейности и изометричности позволяют доказать статистическую эргодическую теорему фон Неймана: для любой функции $\rho \in L_2$ найдется $\bar\rho \in L_2$ такая, что

$$\lim_{\tau\to\infty} \|\frac{1}{\tau}\int\limits_0^\tau G^t(\rho)\,dt - \bar\rho\|_{L_2} = 0$$

и $G^t\bar\rho = \bar\rho$ для всех $t \in \mathbb{R}$.

Очевидно, из сходимости в L_2 вытекает слабая сходимость:

$$\lim_{\tau\to\infty} \frac{1}{\tau}\int\limits_0^\tau \int\limits_M \rho_t\varphi\,d^nx\,dt = \int\limits_M \bar\rho\varphi\,d^nx \tag{15.10}$$

для любой пробной функции $\varphi \in L_2$. В частности, если M компактно, то

$$\int\limits_M \bar\rho\,d^nx = \int\limits_M \rho_0\,d^nx.$$

Это сразу же вытекает из (15.10), если положить $\varphi(x) = 1$.

4. К сожалению, ввиду нелинейности уравнения (15.1), этот метод непосредственно неприменим. Однако можно попытаться рассуждать по-другому, рассматривая семейство операторов

$\{G^t\}$, $t \in \mathbb{R}$ как нелинейную *динамическую систему* с фазовым пространством $L_2(M,\,d^nx)$.

Будем исходить из следующей *гипотезы*:

- в L_2 имеется счетно-аддитивная мера $d\Lambda$, инвариантная относительно фазового потока $\{G^t\}$.

Это предположение, конечно, не самоочевидно и требует доказательства. На самом деле нам было бы достаточно иметь такую меру на единичном шаре

$$\|\rho\|_{L_2} = 1,$$

который инвариантен относительно преобразований $\{G^t\}$. Основная трудность построения инвариантной меры связана с некомпактностью этого шара.

Наличие инвариантной меры позволяет применить индивидуальную эргодическую теорему Биркгофа–Хинчина (с уточнением Крылова–Боголюбова) к непрерывной функции на $L_2(M,\,d^nx)$, задаваемой линейным функционалом

$$\rho \mapsto \int\limits_M \varphi\rho\,d^nx. \tag{15.11}$$

Уточнение Крылова–Боголюбова состоит в том, что чезаровское среднее *непрерывной* функции существует на множестве полной меры ($d\Lambda$), зависящей лишь от структуры динамической системы (см., например, [64]). В нашем случае исключительное множество начальных данных $\{\rho_0\}$ не зависит от выбора функции φ в (15.11).

Чезаровское среднее — *положительный* линейный функционал: если $\varphi \geqslant 0$, то среднее также неотрицательно. Следовательно, по теореме Рисса–Радона, среднее можно представить в виде линейного функционала

$$\int\limits_M \varphi(x)\,d\nu,$$

где $d\nu$ — некоторая мера на M. Эта мера и будет слабым пределом по Чезаро исходной меры $d\mu_t = \rho_t(x)\,d^n x$.

Если M компактно, то предельная мера также будет вероятностной:

$$\int\limits_M d\nu = 1.$$

Для доказательства достаточно положить $\varphi(x) = 1$, $x \in M$.

Отметим еще, что слабые пределы меры $d\mu_t$ при $t \to +\infty$ и $t \to -\infty$, конечно, совпадают.

Стационарной мере $d\nu$ можно сопоставить по формулам (15.1) автономную динамическую систему

$$\dot{x}_i = \bar{v}_i(x_1, \ldots, x_n) = \int\limits_M K_i(x, y)\,d_y\nu, \quad 1 \leqslant i \leqslant n, \tag{15.12}$$

фазовый поток которой сохраняет эту меру. Таким образом, для почти всех начальных распределений $\rho_0\,d^n x$ континуум взаимодействующих частиц слабо сходится к состоянию статистического равновесия, которое описывается обычной автономной системой (15.12) и стационарным вероятностным распределением $d\nu$.

5. Только что описанная картина стремления решений обобщенного уравнения Власова к равновесному состоянию упирается в доказательство содержательной гипотезы о наличии инвариантной меры $d\Lambda$ в L_2. Однако на физическом уровне строгости эту проблему легко обойти, если рассматривать конечномерные пространства решений этого уравнения с *сингулярностями*.

Итак, будем искать решения уравнений (15.1) в виде взвешенной суммы δ-функций Дирака:

$$\rho(x, t) = \sum_{j=1}^{N} \varkappa_j \delta(x_1 - x_1^{(j)}(t)) \ldots \delta(x_n - x_n^{(j)}(t)). \tag{15.13}$$

Точки из M с координатами

$$(x_1^{(j)}(t), \ldots, x_n^{(j)}(t)) = X_j(t), \quad 1 \leqslant j \leqslant N \tag{15.14}$$

— сингулярности меры $d\mu_t = \rho(x, t)\,d^n x$ с плотностью (15.13). Числа $\varkappa_j$ можно назвать *интенсивностями* сингулярностей X_j; поскольку $\rho \geqslant 0$, то все $\varkappa_j > 0$. Оказывается, если (15.13) является обобщенным решением уравнения (15.1), то функции $t \mapsto X_j(t)$ удовлетворяют некоторой специальной конечномерной автономной системе обыкновенных дифференциальных уравнений с инвариантной счетно-аддитивной мерой.

Поскольку любую нормированную меру на M можно сколь угодно точно аппроксимировать (в слабом смысле) мерой с сингулярной плотностью вида (15.13), то такой подход позволяет если не доказать основной результат п. 4, то указать конструктивный путь его использования. Кстати сказать, идея аппроксимации сингулярными мерами лежит в основе методов доказательства разрешимости уравнения Власова из работ [61–63].

Как заметил сам А. А. Власов, уравнение (15.6) допускает точное решение вида (15.13), причем сингулярности интерпретируются как частицы, а их интенсивности — как массы частиц (см. [65]). Уравнения эволюции сингулярностей совпадают с уравнениями Ньютона для системы взаимодействующих частиц. Аналогично, уравнение вихря плоской гидродинамики также допускает решение вида (15.13), динамика сингулярностей которых описывается известными уравнениями Гельмгольца–Кирхгофа для точечных вихрей (см. [60]).

Несложные вычисления, использующие элементарные свойства δ-функций, показывают, что сингулярности (15.14) удовлетворяют следующей системе обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{gathered}\dot{x}_j^{(j)}+\sum_{k=1}^{N}\varkappa_k K_i(x_1^{(j)},\ldots,x_n^{(j)};\,x_1^{(k)},\ldots,x_n^{(k)})=0;\\ i=1,\ldots,n;\; j=1,\ldots,N.\end{gathered}\tag{15.15}$$

При выводе уравнений (15.15) использовалось соглашение, что $K(x,x)=0$. Фазовое пространство системы (15.15) — это прямое произведение N экземпляров многообразия M. Ввиду предположения (15.2), фазовый поток системы (15.15) сохраняет «стандартный» фазовый объем в M^N;

$$d\Lambda = d^n x^{(1)}\ldots d^n x^{(N)}.\tag{15.16}$$

Это утверждение соответствует гипотезе п. 4 о наличии инвариантной меры в $L_2(M,\,d^n x)$, инвариантной относительно преобразований G^t, $t\in\mathbb{R}$. После этих замечаний мы можем применить стандартную эргодическую теорию для анализа сходимости по Чезаро функции

$$t\mapsto\int\limits_M\varphi\,d\mu_t,\tag{15.17}$$

где $d\mu_t = \rho_t(x)\,d^n x$, причем плотность ρ_t задается формулой (15.13), а φ — *непрерывная* функция на M. Предположение о непрерывности функции $\varphi : M\to\mathbb{R}$ соответствует свойству непрерывности функционала (15.11) из п. 4.

Если $d\mu_t$ — мера с сингулярной плотностью (15.13), то интеграл (15.17) равен

$$\sum_j\varkappa_j\varphi(x_1^{(j)}(t),\ldots,x_n^{(j)}(t)),\tag{15.18}$$

причем $x_1^{(j)},\ldots,x_n^{(j)}$ как функции времени удовлетворяют системе дифференциальных уравнений (15.15). Согласно индивидуальной эргодической теореме, для почти всех начальных данных (начальных расположений сингулярностей) среднее по Чезаро функции (15.18) равно

$$\sum_j\varkappa_j\bar{\varphi}_j,\tag{15.19}$$

где

$$\bar{\varphi}_j = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{\tau} \int\limits_0^\tau \varphi(x_1^{(j)}(t), \ldots, x_n^{(j)}(t))\, dt.$$

Стоит подчеркнуть, что (по теореме Крылова–Боголюбова) исключительное множество начальных данных не зависит от усредняемой непрерывной функции φ. Следовательно, для *почти всех мер* $d\mu_0 = \rho_0\, d^n x$ (которые определяются сингулярностями и коэффициентами $\varkappa_j$) формула (15.18) задает положительный линейный функционал на пространстве функций, непрерывных на M. Снова (применяя теорему Рисса–Радона) получаем, что этот функционал есть

$$\int\limits_M \varphi\, d\nu,$$

где $d\nu$ — некоторая мера на M, которая и будет слабым пределом мер $d\mu_t$ при $t \to \infty$.

Литература

[1] J. Moser. *On the volume elements on a manifold* // Trans. Amer. Math. Soc. — 1965. — V.120. — № 2. — 286–294

[2] H. Poincaré. *Réflexion sur la théorie cinétique des gaz* // J. Phys. théoret. et appl., 4^e sér. — 1906.– V.5. — 369–403 (Пер. на русск. язык: А. Пуанкаре. Замечания о кинетической теории газов. В кн.: Избранные труды. Т. III. — М.: Наука. — 1974. — 385–412)

[3] J. W Gibbs. *Elementary principles in statistical mechanics, developed with especial reference to the rational foundation of thermodynamics* // New York,– 1902 (Пер. на русск. язык: Дж. В. Гиббс. Основные принципы статистической механики, излагаемые со специальным применением к рациональному обоснованию термодинамики. — М.: Регулярная и хаотическая динамика, 2002.)

[4] M. A. Ackoglu. *A pointwise ergodic theorem in L_p—spaces* // Canad. J. Math. — 1975. — V. 27. — № 5. — 1075–1082

[5] U. Krengel *Ergodic theorems.*– Berlin–New York: Gruyter, 1985.

[6] В. В. Козлов. *Тепловое равновесие по Гиббсу и Пуанкаре.*– М– Ижевск: ИКИ, 2002.

[7] В. В. Козлов, Д. В. Трещев. *Эволюция мер в фазовом пространстве нелинейных гамильтоновых систем* // Теорет. и матем. физика. — 2003. — Т.136. — № 3. — 496–506

[8] В. В. Козлов. *Тепловое равновесие по Гиббсу и Пуанкаре* // ДАН. — 2002. — Т. 382. — № 5. — 602–605

[9] В. В. Козлов, Д. В. Трещев. *Слабая сходимость решений уравнений Лиувилля для нелинейных гамильтоновых систем* // Теорет. и матем. физика. — 2003. — Т. 134. — № 3. — 388–400

[10] V. V. Kozlov. *Kinetics of collisionless continuous medium* // Reg. and Chaotic Dynamics. — 2001. — V. 6. — № 3. — 235–251

[11] В. В. Веденяпин. *Кинетическая теория по Максвеллу, Больцману и Власову* // М.: Издательство Моск. госуд. областного ун-та, 2005

[12] V. V. Kozlov, D. V. Treschev. *On new forms of the ergodic theorem* // J. of Dynamical and Control Systems. — 2003. — V. 9. — № 3. — 449–453

[13] Н. С. Крылов. *Работы по обоснованию статистической физики* // М.–Л.: Изд-во АН СССР, 1950

[14] C. P. Dettmann. *The Lorentz gaz: a paradigm for nonequilibrium stationary states* // In: Hard ball systems and Lorentz gaz. Encycl. of Math. Sciences. Ser. Math. Phys. Ed. D. Szász. — V. 101. — Springer. — 315–365

[15] В. В. Козлов. *Слабые пределы вероятностных распределений в системах с нестационарными возмущениями* // ДАН. — 2003. — Т. 389. — № 5. — 605–607

[16] В. В. Козлов. *Об устойчивости положений равновесия в нестационарном силовом поле* // ПММ. — 1991. — Т. 55. — Вып.1. — 12–19

[17] E. Fermi, J. R. Pasta, S. Ulam *Studies of nonlinear problems* // Los Alamos Rept. LA-1940 (Пер. на русск. язык: Э. Ферми, Дж. Паста, С. Улам. *Исследование нелинейных задач.* В кн.: Э. Ферми. Научные труды. Т. II. М.: Наука, 1972. — 647–656.)

[18] В. В. Козлов. *Ансамбли Гиббса, равнораспределенность энергии симпатических осцилляторов и статистические модели термостата* // Нелинейная динамика. — 2007. — Т. 3. — № 2. — 123–140

[19] В. В. Козлов, Д. В. Трещев. *Тонкая и грубая энтропия в задачах статистической механики* // Теорет. и матем. физика. — 2007. — Т. 151. — № 1. — 120–137

[20] Я. И. Френкель. *Статистическая физика.*– М.-Л.: Изд-во АН СССР, 1948

[21] M. Kac. *Probability and related topics in physical sciences.*– London–New York: Interscience Publishers, 1957. (Пер. на русск. язык: М. Кац. *Вероятность и смежные вопросы в физике.* — М.: Мир, 1965.)

[22] D. V. Treschev, G. Piftankin. *Gibbs entropy and dynamics* // Chaos (to be published)

[23] В. В. Козлов, О. Г. Смолянов. *Функция Вигнера и диффузия в бесстолкновительной среде, состоящей из квантовых частиц* // Теория вероятностей и ее применения. — 2006. — Т. 51. — Вып. 1. — 109–125

[24] V. V. Kozlov. *Notes on diffusion in collisionless medium* // Reg. and Chaotic Dynamics. — 2004. — V. 9. — № 1. — 29–34

[25] E. Hlawka. *Mathematische Modelle der kinetischen Gastheorie* // Rheinisch-Westfälische Acad. der Wissenschaften. Natur-, Ingenier- und Wirtschaftswissenschaften. — 1974. — V. 240. — 361–376

[26] L. Bunimovich. *Kinematics, equilibrium, and shape in Hamiltonian systems: the «LAB» effect* // Chaos. — 2003. — V. 13. — № 3. — 903–912

[27] В. П. Михайлов. *Дифференциальные уравнения в частных производных.*– М.: Наука, 1983.

[28] В. В. Козлов. *Статистические свойства биллиардов в многогранниках* // ДАН. — 2007. — Т. 416. — № 3. — 302–305

[29] В. В. Веденяпин. *Кинетические уравнения Больцмана и Власова.*– М.: Физматлит, 2001.

[30] В. В. Козлов. *Статистическое равновесие по Гиббсу и Пуанкаре в системах с медленно меняющимися параметрами* // ДАН. — 2004. — Т. 395. — №2. — 169–173

[31] А. С. Бакай, Ю. П. Степановский. *Адиабатические инварианты.*– Киев: Наукова думка, 1981

[32] E. Fermi. *Alcuni teoremi di meccanica analitica importanti per la teoria dei quanti* // Nouvo Cimento. — 1923. — V. 25. — 271–285 (Пер. на русск. язык: Э. Ферми. Некоторые теоремы аналитической механики, важные для теории квантов. В кн.: Научные труды. Т. I. — М.: Наука, 1971 125–134.)

[33] В. И. Арнольд, В. В. Козлов, А. И. Нейштадт. *Математические аспеты классической и небесной механики.*– М.: УРСС, 2002

[34] T. Kasuga. *On the adiabatic theorem for the Hamiltonian system of differential equations in the classical mechanics. I, II, III* //

Proc. Jap. Acad. — 1961. — V. 37. — №7. — 366–371, 372–376, 377–382

[35] Я. Г. Синай. *Динамические системы с упругими отражениями. Эргодические свойства рассеивающих биллиардов* // УМН. — 1970. — Т. 25. — № 2. — 141–192

[36] G. Gallavotti, D. Ornstein. *Billiards and Bernoulli schemes* // Communs. Math. Phys. — V. 38. — № 2. — 83–101

[37] Я. Г. Синай. *К обоснованию эргодической гипотезы для одной динамической системы статистической механики* // Докл. АН СССР. — 1963. — Т. 153. — № 6. — 1261–1264

[38] V. I. Arnold, A. Avez. *Ergodic problems of classical mechanics* // New York–Amsterdam: W. A. Benjamin, Inc. 1968 (Пер. на русск. язык: В. И. Арнольд, А. Авец. Эргодические проблемы классической механики. — Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 1999.)

[39] A. Krámli, N. Simányi, D. Szász. *The K-property of four billiard balls* // Commun. Math. Phys. — 1992. — V. 144. — 107–148

[40] D. Szász. *Boltzmann's ergodic hypothesis, a conjecture for centuries ?* // In: Hard ball systems and Lorentz gaz. Encycl. of Math. Sciences. Ser. Math. Phys. Ed. D. Szász. — V. 101. — Springer. — 421–446

[41] H. Poincaré. *Thermodynamique.*– Paris: Gauthier– Villars, 1908. (Пер. на русский язык: А. Пуанкаре. Термодинамика. — М.–Ижевск: ИКИ, 2005.)

[42] J. Piasecki, Ch. Gruber. *From the adiabatic piston to macroscopic induced by fluctuations* // Physica A. — 1999. — V. 265. — 463–472

[43] Ch. Gruber, J. Piasecki. *Stationary motion of the adiabatic piston* // Physica A. — 1999. — V. 268. — 412–423

[44] Ch. Gruber, L. Frachebourg. *On the adiabatic properties of a stochastic adiabatic wall: evolution, stationary non-equilibrium, and equilibrium states* // Physica A. — 1999. — V. 272. — 392–428

[45] R. Holley. *The motion of a heavy particle in an indefinite one dimensinal gas of hard spheres* // Z. Wahrscheinlichkeitstheor. verw. Geb. — 1971. — V. 17. — 181–219

[46] D. Dürr, S. Goldstein, J. L. Lebowitz. *A mechanical model of Brownian motion* // Comm. Math. Phys. — 1981. — V. 78. — № 4. — 507–530

[47] Л. Лебовиц, Я. Синай, Н. Чернов. *Динамика массивного поршня, погруженного в идеальный газ* // УМН. — 2002. — Т. 57. — Вып. 6. — 3–86

[48] J. L. Lebowitz, J. Piasecki, Ya. Sinai. *Scaling dynamics of a massive piston in an ideal gas* // In: Hard ball systems and Lorentz gaz. Encycl. of Math. Sciences. Ser. Math. Phys. Ed. D. Szász. — V. 101. — Springer. — 217–227

[49] R. Feynman, R. Leighton, M. Sands. *The Feynmann lectures on physics.* V.1. — Addison– Wesley Publ. Comp., Inc, 1963. (Пер. на русский язык: Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс. Фейнмановские лекции по физике. Т. 4. — М.: Мир, 1967.)

[50] В. В. Козлов. *К задаче о поршне* // ДАН. — 2005. — Т. 403. — № 6. – 752–755

[51] В. В. Козлов. *Неустойчивость равновесия в потенциальном поле с учетом вязкого трения* // ПММ. — 1981. — Т. 45. — Вып. 3. — 570–572

[52] В. В. Козлов. *Термодинамика гамильтоновых систем и распределение Гиббса* // ДАН. — 2000. — Т. 370. — № 3. — 325–327

[53] V. V. Kozlov. *Billiards, invariant measures, and equilibrium thermodynamics. II* // Reg. and Chaotic Dynamics. — 2004. — V. 9. — № 2. — 91–100

[54] V. V. Ten. *On normal distribution in velosities* // Reg. and Chaotic Dynamics. — 2002. — V. 7. — № 1. — 11–20

[55] Н. И. Ахиезер. *Классическая проблема моментов.* — М.: Наука, 1961

[56] Н. Н. Боголюбов. *О некоторых статистических методах в математической физике.* — Киев: Изд-во АН УССР, 1945

[57] В. В. Козлов. *Симметрии, топология и резонансы в гамильтоновой механике.* — Ижевск: Изд. дом «Удмуртский университет», 1995

[58] V. V. Kozlov. *Canonical Gibbs disribution and thermodynamics of mechanical systems with a finite number of degrees of freedom* // Reg. and Chaotic Dynamics. — 1999. — V. 4. — №2. — 44–54

[59] Н. Н. Боголюбов. *О некоторых проблемах, связанных с обоснованием статистической механики.* В кн.: Собрание трудов. — М.: Наука, 2006. — 432–440

[60] В. В. Козлов. *Уравнение вихря $2D$-гидродинамики, стационарное кинетическое уравнение Власова и развитая турбулентность* // Нелинейная динамика. — 2007. — Т. 2. — №4. — 425–434

[61] W. Brawn, K. Hepp. *The Vlasov dynamics and its fluctuations in the $1/N$ limit of interactiny classical particles* // Commun. Math. Phys. — 1977. — V. 56. — № 2. — 101–113

[62] В. П. Маслов. *Уравнения самосогласованного поля.* В кн.: Современные проблемы математики. — М.: ВИНИТИ АН СССР, 1978. — Т. 11. — 153–234

[63] Р. Л. Добрушин. *Уравнения Власова* // Функц. анализ и его прилож. — 1979. — Т. 13. — Вып. 2. — 48–58

[64] В. В. Немыцкий, В. В. Степанов. *Качественная теория дифференциальных уравнений.* — М.-Л.: Гостехиздат, 1949

[65] А. А. Власов. *Статистические функции распределения.* — М.: Наука, 1966

[66] Ф. Ф. Березин. *Лекции по статистической физике.* — М.–Ижевск: ИКИ, 2002

Козлов Валерий Васильевич

АНСАМБЛИ ГИББСА И НЕРАВНОВЕСНАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА

Дизайнер М. Баженова

Технический редактор А. В. Широбоков

Корректор Г. Г. Тетерина

Подписано в печать 02.12.2008. Формат $60 \times 84^1/_{16}$.

Печать офсетная. Усл. печ. л. 11,86. Уч. изд. л. 10,21.

Гарнитура Таймс. Бумага офсетная №1. Заказ №11.

Научно-издательский центр «Регулярная и хаотическая динамика»

426034, г. Ижевск, ул. Университетская, 1.

http://shop.rcd.ru E-mail: mail@rcd.ru Тел./факс: (+7 3412) 50–02–95