Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. В. Веденяпин, С. З. Аджиев, Энтропия по Больцману
и Пуанкаре, *УМН*, 2014, том 69, выпуск 6, 45–80

DOI: <https://doi.org/10.4213/rm9635>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.166.219.16

26 апреля 2023 г., 17:04:29

УДК 517.958

Энтропия по Больцману и Пуанкаре

В. В. Веденяпин, С. З. Аджиев

В работе доказывается H -теорема для обобщений уравнений химической кинетики. Рассматриваются важные физические примеры такого обобщения: дискретные модели квантовых кинетических уравнений (уравнений Юлинга–Уленбека) и квантовый марковский процесс (квантовое случайное блуждание). Доказывается совпадение временных средних с экстремальными по Больцману для всех таких уравнений, а также для уравнения Лиувилля.

Библиография: 41 название.

Ключевые слова: уравнение Больцмана, H -теорема, энтропия, законы сохранения, дискретная модель, экстремаль по Больцману, уравнение Лиувилля, временное среднее, среднее по Чезаро (Cesaro), чезаровское среднее, марковские цепи, вариационный принцип.

DOI: 10.4213/rm9635

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение.....	45
2. Модели химической кинетики.....	50
3. Примеры.....	51
4. H -теорема для обобщений уравнений химической кинетики.....	55
5. Энтропия Пуанкаре, экстремали Больцмана, эргодическая теория и вариационный принцип для уравнения Лиувилля.....	64
6. Заключение.....	76
Список литературы.....	77

1. Введение

H -теорема впервые была рассмотрена Больцманом в работе “Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen” (1872) [1]. Эту теорему, обосновывающую сходимость решений уравнений типа Больцмана к максвелловскому распределению, Больцман связал с законом возрастания энтропии.

Первую главу Больцман посвящает уравнению, которое мы сегодня назвали бы пространственно однородным уравнением Больцмана с зависимостью функции распределения только от модуля скорости (от квадрата скорости или

энергии, которую он называет “живой силой”). Именно для этого уравнения Больцман доказывает H -теорему.

Вторая глава называется “Замена интегралов суммами” – там появляются простейшие дискретные модели уравнения Больцмана. Одна из них похожа на трехскоростную модель, которую мы бы назвали сейчас моделью Годунова–Султангазина или одномерной моделью Бродуэлла [2] (см. систему (1) ниже).

В этой же главе появляется принцип максимума энтропии и объясняется, что стационарное решение можно получать без решения уравнения. Итак, Больцман определяет здесь экстремаль Больцмана для простейшей дискретной модели.

В [1; гл. 2] формулируется принцип максимума энтропии. Рассматривается, в частности, следующая система уравнений:

$$\begin{aligned}\frac{du_1}{dt} &= B(u_2^2 - u_1 u_3), \\ \sqrt{2} \frac{du_2}{dt} &= 2B(u_1 u_3 - u_2^2), \\ \sqrt{3} \frac{du_3}{dt} &= B(u_2^2 - u_1 u_3).\end{aligned}\tag{1}$$

Система (1) сохраняет положительность, и неизвестные функции u_1 , u_2 и u_3 остаются положительными величинами. В [1] непосредственным дифференцированием в силу системы (1) доказывается, что функционал

$$E(u) = u_1 \ln u_1 + \sqrt{2} u_2 \ln u_2 + \sqrt{3} u_3 \ln u_3\tag{2}$$

убывает на решениях системы (1):

$$\frac{dE}{dt} = B(u_2^2 - u_1 u_3) \ln \frac{u_1 u_3}{u_2^2} \leq 0.\tag{3}$$

Здесь мы воспользовались неравенством $(x - y) \ln(y/x) \leq 0$, в котором равенство достигается только при $x = y$, т. е. равенство в (3) достигается только на стационарных решениях: $u_2^2 = u_1 u_3$. Функционал $E(u)$ в (2) и есть H -функция Больцмана для системы (1), или энтропия со знаком минус – такой смысл придает ей Больцман в работе [3]. После этого делается вывод, что решения системы сходятся к ее стационарному решению (функционал $E(u)$ ограничен снизу, и поэтому его значение должно приближаться к минимуму при $dE/dt = 0$). Больцман использует сохраняющиеся линейные функционалы для поиска стационарного решения по начальному условию [1; гл. 2, сноска на с. 156]. В случае уравнения (1) это

$$\begin{aligned}A(u) &= u_1 + \sqrt{2} u_2 + \sqrt{3} u_3 = a, \\ B(u) &= u_1 + 2\sqrt{2} u_2 + 3\sqrt{3} u_3 = b.\end{aligned}\tag{4}$$

Отметим, что система (1), как и вообще дискретные модели в работе [1], отличается от уравнений химической кинетики (и от современных общепринятых дискретных моделей уравнения Больцмана) как формой коэффициентов уравнения, так и формой H -функции. Это связано с тем, что функция распределения в [1] зависит от квадрата скорости, а не от скорости или импульса.

Чтобы определить, к чему сходится произвольное решение уравнения (1), надо найти аргумент минимума функционала (2) при условиях (4), где постоянные a и b находятся из начальных условий. Это и есть экстремаль Больцмана. Фундаментальность этого понятия Больцман подчеркнул в работе [3].

В [3] из принципа максимума энтропии при фиксации энергии и числа частиц получается формула для наиболее вероятного распределения (теплового равновесия). Эта работа известна “статистикой Больцмана”. Во второй ее главе Больцман старается найти наиболее вероятное распределение и формулирует для этого следующий вариационный принцип (принцип Больцмана). Он выписывает три следующих интеграла один под другим:

$$M' = \int_0^\infty f(x) \ln f(x) dx, \quad (5)$$

$$n = \int_0^\infty f(x) dx, \quad (6)$$

$$L = \int_0^\infty x f(x) dx. \quad (7)$$

Функция распределения $f(x)$ есть плотность кинетической энергии x , а выражения (5)–(7) суть соответственно энтропия с обратным знаком, число частиц и полная кинетическая энергия.

Больцман ищет минимум функционала

$$\int_0^\infty [f(x) \ln f(x) + k f(x) + h x f(x)] dx \quad (8)$$

с неопределенными множителями Лагранжа k и h .

Варьирование этого выражения дает искомое распределение

$$f(x) = C e^{-hx}, \quad (9)$$

которое оказывается максвелловским распределением. Таким образом, Больцман нашел простой вариационный принцип для получения максвелловского распределения: можно, не решая уравнение Больцмана, получать стационарные решения. Получающееся из этого вариационного принципа (8) стационарное решение (9) будем называть экстремалью Больцмана. Множители Лагранжа определяются здесь по постоянным линейных законов сохранения (6), (7). В динамических задачах, которые мы будем рассматривать, константы законов сохранения находятся по начальным условиям. Больцман исследует вторую вариацию, доказывает ее положительность и находит минимум функционала. Этот прием может быть использован во многих динамических задачах, что мы в дальнейшем и продемонстрируем. Понятие экстремали Больцмана обобщается с дискретной модели (1) и с уравнения Больцмана на произвольное уравнение, для которого имеется H -функция или энтропия (H -функция со знаком “минус”): экстремаль Больцмана – это функция, на которой достигается условный максимум энтропии (при условии, что константы законов сохранения фиксированы).

В настоящей работе доказывается H -теорема для обобщений уравнений химической кинетики. Доказывается также, что понятие экстремали Больцмана

существует и в этом случае. Однако появляются и новые особенности: в связи с тем, что функционал энтропии может быть невыпуклым, стационарное решение, вообще говоря, не единственно: система уравнений определяется произвольной заданной функцией, которая убывает на нестационарных решениях системы и которую, следовательно, можно брать в качестве H -функции. Например, если в системе (16) раздела 3 настоящей работы взять

$$H = \sum_{i=1}^n \phi(f_i), \quad \text{где} \quad \phi(x) = (x+1)x^2(x-1),$$

то мы получим 2^n устойчивых стационарных точек в $\mathbb{R}^n$. Итак, мы продолжаем линию работы Больцмана, стараясь расширить класс уравнений, для которых справедлив закон возрастания энтропии. Такая работа проводилась многими учеными в связи с несколькими вопросами. Доказательство H -теоремы делает поведение решения уравнения понятным, так как позволяет узнать, куда сходится решение для данного уравнения при времени, стремящемся к бесконечности. Это можно сделать без решения уравнения на основе принципа максимума энтропии. Кроме того, H -теорема обеспечивает устойчивость полученных стационарных решений (экстремалей по Больцману). Не иссякает и интерес к пониманию энтропии и ее связям с парадоксами Лошмидта и Цермело–Пуанкаре. Вопрос Лошмидта: как из обратимых уравнений механики получается необратимость и рост энтропии? Вопрос Цермело: не противоречит ли рост энтропии теореме о возврате Пуанкаре? Вопросы были обращены к Больцману, давшему в работе [1] доказательство H -теоремы. Ответом на эти возражения могло бы служить сравнение разных моделей, которые применяются для описания поведения большого числа объектов. В частности, можно сравнить уравнение Лиувилля с его дискретизацией: когда их свойства близки, и правильно ли одно дает асимптотику другого при времени, стремящемся к бесконечности.

Уже в 1906 г. в работе [4] А. Пуанкаре показал на примерах, что, хотя энтропия сохраняется для уравнения Лиувилля, энтропия предельной функции распределения при времени, стремящемся к бесконечности, больше или равна (как правило, больше) энтропии начальной функции распределения. Эта новая форма H -теоремы была доказана В. В. Козловым и Д. В. Трещёвым [5], [6] для уравнения Лиувилля в случае произвольной гамильтоновой системы. Какова предельная функция распределения? Оказывается, это экстремаль по Больцману, т. е. можно, не решая уравнения, получить ответ о пределе при времени, стремящемся к бесконечности. Ответ – функция от интегралов – конечно, был известен физикам со времен Больцмана [7] и Гиббса [8]. Но какая именно функция от интегралов? Гипотеза, которую мы теперь называем ансамблем Гиббса, а Максвелл в своей последней работе [9] назвал теоремой Больцмана, дает один из возможных ответов: экспонента от энергии. Мы обсуждаем этот круг вопросов, обосновывая, обобщая и исследуя пределы применимости гипотезы Гиббса, эргодической гипотезы с точки зрения этой уточненной формы H -теоремы. Итак, понятие экстремали по Больцману можно без изменения перенести с уравнений типа Больцмана на уравнения Лиувилля. При этом, как показано в работах авторов [10], [11], сохраняется основное свойство – совпадение временного среднего с экстремалью по Больцману. В разделе 5 настоящей

работы мы рассматриваем случай уравнения Лиувилля, обобщая результаты этих работ. Предел при времени, стремящемся к бесконечности, здесь не всегда существует, в отличие от уравнений типа дискретных моделей уравнения Больцмана. Но для уравнения Лиувилля всегда существует временное среднее (его называют иногда средним по Чезаро [5], [6], [10], [11]) – это статистическая эргодическая теорема фон Неймана–Рисса [12]. Но в случае наличия предела даже в слабом смысле он совпадает с временным средним.

В случае обобщений уравнений химической кинетики, в разделах 2–4, мы доказываем сходимости к экстремалам по Больцману, и здесь не требуется средних по Чезаро, так как предел при времени, стремящемся к бесконечности, существует. Таким образом, показывается, что во всех описанных случаях система сходится “туда, куда нужно” – к стационарному решению, выделяющемуся как точка, где достигается максимум энтропии при условиях линейных законов сохранения. Роль именно линейных законов сохранения остается несколько загадочной и удивительной. Эти общие свойства для обратимого уравнения Лиувилля и необратимых дискретных моделей уравнения Больцмана, возможно, проясняют связь между обратимостью и необратимостью. При дискретизации уравнения надо тщательно следить за линейными (и только такими) законами сохранения: их следует оставлять ровно столько, сколько в исходном уравнении Лиувилля (если вообще возможно говорить о сопоставлении конечномерного пространства интегралов дискретизованного уравнения и бесконечномерного пространства интегралов исходного уравнения Лиувилля). При дискретизации любого уравнения Лиувилля всегда требуют сохранения числа частиц и сохранения свойства положительности, а любой линейный оператор, удовлетворяющий этим двум свойствам в конечномерном случае, дает стохастическую матрицу и определяет марковский процесс. Периодические траектории при дискретизации по пространству как бы совсем теряются – в этом смысле труднее всего смоделировать уравнение Лиувилля для осциллятора. Дальнейшая дискретизация времени дает марковские цепи и возвращает периодические траектории [11].

Цели обзора следующие.

1. Написать обыкновенные дифференциальные уравнения, для которых имеется теорема о росте энтропии (H -теорема Больцмана), максимально обобщив работы Больцмана [1], [3], для квантового вида энтропии в бозе- и ферми-случаях и для произвольного вида H -функции.

В работе [13] рассматривается способ нахождения линейных законов сохранения по так называемым векторам Орлова–Мозера–Брюно (которые также будут рассматриваться в разделе 4 настоящей работы) для уравнений химической кинетики по аналогии с квантовыми гамильтонианами и из соответствия “квантовые гамильтонианы – химическая кинетика”. Оказалось, что они уже в таком виде использовались и в классической механике в работах Мозера [14] и Брюно [15]. В работе [13] они сразу были использованы для построения правильных (без лишних инвариантов) дискретных моделей уравнения Больцмана для смесей.

2. Вывести формулу для относительной энтропии в квантовом случае и в случае общего вида H -функции. Ее форма должна пояснять классический

случай энтропии Кульбака–Лейблера [16] (см. также работы И. Н. Санова [17] и Н. Н. Ченцова [18]).

3. Получить формулу для относительной энтропии для уравнения Лиувилля, определяемой произвольной выпуклой функцией, и тем самым обобщить результаты работ [4]–[6], [10]–[12], [19], [20]. Относительная энтропия требуется для систем, у которых дивергенция скорости не равна нулю.

4. Проверить, что во всех этих случаях пределы временных средних совпадают с экстремалами Больцмана, обобщая и упрощая результаты работ [1]–[28].

2. Модели химической кинетики

Пусть есть смесь из n химически взаимодействующих веществ с пространственно однородными концентрациями. Обозначим через $f_i(t)$ концентрацию i -го вещества ($i = 1, 2, \dots, n$) в момент времени t .

В общем виде уравнения для сложных химических реакций записываются так [21]–[23]:

$$\frac{df_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{(\alpha, \beta) \in \mathfrak{Z}} (\beta_i - \alpha_i) (K_\beta^\alpha \mathbf{f}^\alpha - K_\alpha^\beta \mathbf{f}^\beta), \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (10)$$

Здесь через $\mathbf{f}^\alpha$ обозначено произведение $\mathbf{f}^\alpha = f_1^{\alpha_1} f_2^{\alpha_2} \dots f_n^{\alpha_n}$, а суммирование ведется по некоторому конечному множеству $\mathfrak{Z}$ мультииндексов (α, β) , где $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ и $\beta = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n)$ – векторы с целочисленными неотрицательными компонентами. Мультииндекс (α, β) соответствует элементарной реакции

$$\alpha_1 S_1 + \alpha_2 S_2 + \dots + \alpha_n S_n \rightarrow \beta_1 S_1 + \beta_2 S_2 + \dots + \beta_n S_n, \quad (\alpha, \beta) \in \mathfrak{Z},$$

S_i – химические символы реагирующих веществ, $K_\beta^\alpha \geq 0$ – коэффициенты скоростей реакций (константы реакций). Коэффициенты α_i , β_i называются стехиометрическими коэффициентами. Без ограничения общности можно считать множество $\mathfrak{Z}$ симметричным относительно перестановки α и β . При этом некоторым парам (α, β) могут соответствовать нулевые коэффициенты скоростей реакций: $K_\beta^\alpha = 0$, при том, что возможно и неравенство $K_\alpha^\beta > 0$ (допускается необратимость реакций). Например, для реакции образования аммиака $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightarrow 2\text{NH}_3$ имеем $\alpha = (1, 3, 0)$, $\beta = (0, 0, 2)$ и пару, симметричную ей. Тогда система (10) принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{df_1}{dt} &= k_2 f_3^2 - k_1 f_1 f_2^3, \\ \frac{df_2}{dt} &= 3(k_2 f_3^2 - k_1 f_1 f_2^3), \\ \frac{df_3}{dt} &= 2(k_1 f_1 f_2^3 - k_2 f_3^2), \end{aligned}$$

где f_1 – концентрация азота N_2 , f_2 – концентрация водорода H_2 , f_3 – концентрация аммиака NH_3 , $k_1 \equiv K_{(0,0,2)}^{(1,3,0)}$ и $k_2 \equiv K_{(1,3,0)}^{(0,0,2)}$ – константы скорости соответственно прямой реакции $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightarrow 2\text{NH}_3$ и обратной к ней: $2\text{NH}_3 \rightarrow \text{N}_2 + 3\text{H}_2$.

Здесь два линейных закона сохранения – сохранение концентрации, или числа атомов, каждого элемента, т. е. азота: $2f_1 + f_3 = C_1 = \text{const}$, и водорода: $2f_2 + 3f_3 = C_2 = \text{const}$. Этот яркий химический смысл линейных законов сохранения имеет не менее яркую математическую форму Больцмана–Орлова–Мозера–Брюно:

$\sum_{k=1}^n \mu_i f_i(t)$ есть закон сохранения для системы (10) тогда и только тогда, когда $(\alpha - \beta, \mu) = 0$ для всех $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{Z}$.

В [21], [23] представлена классификация уравнений химической кинетики (10) по энтропийному принципу: $S \subset D \subset E \subset C$, где C – класс всех систем (10) с конечным числом реакций, E – класс систем, для которых выполняется условие динамического равновесия (и это, как показано в [21], [23], гарантирует возрастание энтропии), D – класс систем (10) с детальным равновесием, S – класс систем с симметричными константами реакций, т. е. систем, для которых $K_\beta^\alpha = K_\alpha^\beta$. Эти понятия будут объяснены ниже в разделе 4 в более общей ситуации.

Пусть $|\alpha| \equiv \alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n$. Пусть множество $\mathfrak{Z}$ содержит только векторы, у которых одна из компонент равна единице, а остальные равны нулю: $|\alpha| = |\beta| = 1$ для всех $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{Z}$. Тогда система (10) является линейной. Линейная система (10) – это уравнение марковского процесса. Если система квадратична ($|\alpha| = |\beta| = 2$ для всех $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{Z}$), то в симметричном случае ($K_\beta^\alpha = K_\alpha^\beta$) мы получаем дискретные модели уравнения Больцмана. Система уравнений коагуляции-дробления получается, если множество $\mathfrak{Z}$ состоит из пар (α, β) и (β, α) таких, что $|\alpha| = 2$ и $|\beta| = 1$, причем если i -я и j -я компоненты вектора α равны единице, то у β равна единице $(i + j)$ -я компонента.

Далее мы изучим системы уравнений более общего вида, чем (10). Важные физические примеры таких систем, которые будут рассмотрены в разделе 3: дискретные модели квантовых кинетических уравнений и квантовые марковские процессы. В разделе 4 мы обобщим эти примеры из настоящего и следующего разделов и исследуем возможность применить H -теорему к такому обобщению.

3. Примеры

ПРИМЕР 3.1. *Дискретные модели квантовых кинетических уравнений (уравнений Юлинга–Уленбека) [24] для смесей.* Пусть движение частиц происходит в d -мерном пространстве, $d = 1, 2, 3$.

Пусть в классическом случае $f_i(t, \mathbf{x})$ – функция распределения частиц по пространству $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ в момент времени t , имеющих массу m_i и импульс $\mathbf{p}_i \in \mathbb{R}^d$, $i = 1, 2, \dots, n$. Среди масс m_i могут быть и совпадающие. Про квантовый случай см. в [25].

Пусть скорость изменения функции $f_i(t, \mathbf{x})$ в результате взаимодействия частиц есть $F_i(f_1, \dots, f_n)$. Тогда в пространственно однородном случае имеем следующую систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{df_i}{dt} = F_i(f_1, \dots, f_n), \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (11)$$

Эта система называется дискретной моделью квантового кинетического уравнения, если F_i моделирует интеграл столкновений:

$$F_i(f_1, \dots, f_n) = \sum_{k,l,j} \sigma_{kl}^{ij} (1 + \theta f_i)(1 + \theta f_j)(1 + \theta f_k)(1 + \theta f_l)(h_k h_l - h_i h_j), \quad (12)$$

где $i = 1, 2, \dots, n$, $h_i = f_i/(1 + \theta f_i)$, $\sigma_{kl}^{ij} = \sigma_{ij}^{kl} = \sigma_{kl}^{ji} = \sigma_{lk}^{ij}$; $\theta = 1$ для бозонов, $\theta = -1$ для фермионов, $\theta = 0$ для дискретных моделей уравнения Больцмана. Суммирование ведется по таким k, l, j , которые участвуют в выбранных заранее взаимодействиях (столкновениях, реакциях) $(i, j) \leftrightarrow (k, l)$: для них $\sigma_{kl}^{ij} \neq 0$. Это множество четверок индексов $((i, j), (k, l))$, являющихся неупорядоченными парами неупорядоченных пар индексов, обозначим через S . Выбранные столкновения таковы, что для каждого из них выполнены законы сохранения импульса и энергии:

$$\mathbf{p}_i + \mathbf{p}_j = \mathbf{p}_k + \mathbf{p}_l, \quad \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + \frac{\mathbf{p}_j^2}{2m_j} = \frac{\mathbf{p}_k^2}{2m_k} + \frac{\mathbf{p}_l^2}{2m_l},$$

где $m_i = m_k$, $m_j = m_l$.

Дискретная модель (11), (12) является системой уравнений химической кинетики. В квантовом случае (т.е. при $\theta \neq 0$) такого вида системы называют системами уравнений квантовой химической кинетики.

Далее рассмотрим простейший пример уравнений такого вида.

ПРИМЕР 3.2. *Классическая и квантовая пространственно однородная модель Карлемана.* Пространственно однородная модель Карлемана [26] – это система двух уравнений:

$$\begin{cases} \frac{df_1}{dt} = \sigma(f_2^2 - f_1^2), \\ \frac{df_2}{dt} = \sigma(f_1^2 - f_2^2). \end{cases} \quad (13)$$

Она является системой уравнений химической кинетики с одной обратимой реакцией вида $2S_1 \rightarrow 2S_2$: частицы одного сорта, взаимодействуя с собой, дают частицы второго сорта. (В данном случае константы прямой и обратной реакции равны – симметричный случай.)

Квантовая пространственно однородная модель Карлемана [24] – это система

$$\begin{cases} \frac{df_1}{dt} = \sigma(1 + \theta f_1)^2(1 + \theta f_2)^2(h_2^2 - h_1^2), \\ \frac{df_2}{dt} = \sigma(1 + \theta f_1)^2(1 + \theta f_2)^2(h_1^2 - h_2^2), \end{cases} \quad (14)$$

где $h_i = f_i/(1 + \theta f_i)$ ($i = 1, 2$), θ то же, что в примере 3.1.

Отметим, что для модели Карлемана нет сохранения ни импульса, ни энергии, а есть только закон сохранения числа частиц: $f_1 + f_2 = \text{const}$.

Следующий пример обобщает оба примера 3.1 и 3.2, а также уравнения химической кинетики (10) и уравнения квантовой химической кинетики с симметричными константами ($K_\beta^\alpha = K_\alpha^\beta$) на случай произвольного вида энтропии.

Это позволяет получить самый простой способ доказывать H -теорему с единой точкой зрения на столь различные ситуации.

ПРИМЕР 3.3 [13], [21]. *Обобщение уравнений химической кинетики на случай произвольной H -функции, включающий квантовую химическую кинетику, но с симметричными коэффициентами.* Это, видимо, простейшее доказательство H -теоремы, когда общность резко упрощает доказательство.

Пусть $H(\mathbf{f})$ – некоторая функция и

$$h_i = \exp\left(\frac{\partial H}{\partial f_i}\right), \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (15)$$

Пусть $\sigma_\beta^\alpha(\mathbf{f})$ – набор положительных функций таких, что $\sigma_\beta^\alpha(\mathbf{f}) = \sigma_\alpha^\beta(\mathbf{f})$. Рассмотрим систему дифференциальных уравнений

$$\frac{df_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{(\alpha, \beta) \in \mathfrak{S}} (\beta_i - \alpha_i) \sigma_\beta^\alpha(\mathbf{f})(\mathbf{h}^\alpha - \mathbf{h}^\beta). \quad (16)$$

Функционал H является убывающим в силу (16):

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{(\alpha, \beta) \in \mathfrak{S}} \sigma_\beta^\alpha(\mathbf{f})(\nabla H, \beta - \alpha)(\exp(\nabla H, \alpha) - \exp(\nabla H, \beta)) \leq 0 \quad (17)$$

(мы воспользовались также неравенством $(x - y)(e^y - e^x) \leq 0$).

Согласно (15) равенство $\mathbf{h} = \mathbf{f}$ равносильно равенству $\frac{\partial H(\mathbf{f})}{\partial f_i} = \ln f_i$, откуда естественным образом получается вычитание единицы в H -функции (в стандартной энтропии со знаком минус):

$$H(\mathbf{f}) = \sum_{i=1}^n f_i(\ln f_i - 1).$$

А равенство $h_i = \frac{f_i}{1 + \theta f_i}$ равносильно равенству $\frac{\partial H(\mathbf{f})}{\partial f_i} = \ln \frac{f_i}{1 + \theta f_i}$, и в этом случае получается квантовая энтропия. Таким образом, мы имеем классические и квантовые модели, рассмотренные ранее, а неравенство (17) обеспечивает выполнение H -теоремы.

Далее рассмотрим примеры, в которых коэффициенты несимметричны. В рассмотренных дискретных моделях они были симметричны, поскольку такая симметрия присутствует в уравнении Больцмана и в уравнениях Юлинга–Уленбека. Но если рассматривается задача рассеяния одного сорта частиц на частицах другого сорта с заданной функцией распределения, то в классическом случае получается линейное уравнение Больцмана на функцию распределения частиц первого из сортов $f(t, \mathbf{v}, \mathbf{x})$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \left(\mathbf{v}, \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \right) = \int [K(\mathbf{w}, \mathbf{v}, \mathbf{x})f(t, \mathbf{w}, \mathbf{x}) - K(\mathbf{v}, \mathbf{w}, \mathbf{x})f(t, \mathbf{v}, \mathbf{x})] d\mathbf{w}.$$

Такое уравнение нашло особенно широкое применение в теории переноса нейтронов в ядерных реакторах, а также в задачах, описывающих перенос излучения. При его дискретизации (по скоростям или импульсам в пространственно однородном случае) получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих марковский процесс (или случайное блуждание), где коэффициенты, вообще говоря, несимметричны. В квантовом случае получается квантовый марковский процесс. Его мы и рассмотрим в следующих примерах. Отметим, что случайное блуждание может происходить в произвольном фазовом пространстве, например, в координатном, и тогда уравнение на плотность частиц $f(t, \mathbf{x})$ имеет вид

$$\frac{\partial f(t, \mathbf{x})}{\partial t} = \int [K(\mathbf{y}, \mathbf{x})f(t, \mathbf{y}) - K(\mathbf{x}, \mathbf{y})f(t, \mathbf{x})] d\mathbf{y}.$$

ПРИМЕР 3.4. *Случайное блуждание с двумя состояниями и его обобщения.* Случайное блуждание (марковский процесс) с двумя состояниями описывается линейной системой двух уравнений

$$\begin{cases} \frac{df_1}{dt} = K_1^2 f_2 - K_1^1 f_1, \\ \frac{df_2}{dt} = K_2^1 f_1 - K_2^2 f_2, \end{cases} \quad (18)$$

квантовое случайное блуждание с двумя состояниями – системой

$$\begin{cases} \frac{df_1}{dt} = (1 + \theta f_1)(1 + \theta f_2)(K_1^2 h_2 - K_1^1 h_1), \\ \frac{df_2}{dt} = (1 + \theta f_1)(1 + \theta f_2)(K_2^1 h_1 - K_2^2 h_2), \end{cases} \quad (19)$$

где $h_i = f_i/(1 + \theta f_i)$ ($i = 1, 2$).

Функционал H , определяемый соотношениями (15), уже не будет убывающим в случае несимметричных коэффициентов. Поэтому запишем обобщение систем (18) и (19) в виде

$$\begin{cases} \frac{df_1}{dt} = \sigma(\mathbf{f})(K_1^2 h_2 - K_1^1 h_1), \\ \frac{df_2}{dt} = \sigma(\mathbf{f})(K_2^1 h_1 - K_2^2 h_2), \end{cases} \quad (20)$$

где $h_i = \exp(\partial G(\mathbf{f})/\partial f_i)$ ($i = 1, 2$).

Пусть ξ является стационарным решением системы (20):

$$K_1^2 \exp\left(\frac{\partial G(\xi)}{\partial f_2}\right) = K_2^1 \exp\left(\frac{\partial G(\xi)}{\partial f_1}\right).$$

Тогда функционал $H(\mathbf{f}) \equiv G(\mathbf{f}) - (\nabla G(\xi), \mathbf{f})$ убывает вдоль решений системы (20):

$$\begin{aligned} \frac{dH(\mathbf{f})}{dt} &= \left(\left(\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_1} - \frac{\partial G(\xi)}{\partial f_1} \right) - \left(\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_2} - \frac{\partial G(\xi)}{\partial f_2} \right) \right) \\ &\quad \times \sigma(\mathbf{f}) \left(K_1^2 \exp\left(\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_2}\right) - K_2^1 \exp\left(\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_1}\right) \right) \end{aligned}$$

$$= \left(\left(\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_1} - \frac{\partial G(\xi)}{\partial f_1} \right) - \left(\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_2} - \frac{\partial G(\xi)}{\partial f_2} \right) \right) \sigma(\mathbf{f}) K_1^2 \exp \left(\frac{\partial G(\xi)}{\partial f_2} \right) \\ \times \left(\exp \left(\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_2} - \frac{\partial G(\xi)}{\partial f_2} \right) - \exp \left(\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_1} - \frac{\partial G(\xi)}{\partial f_1} \right) \right) \leq 0$$

в силу неравенства $(x - y)(e^y - e^x) \leq 0$.

Система (18) представляет собой систему уравнений химической кинетики с одной обратимой реакцией вида $S_1 \rightarrow S_2$. Система (19) является системой уравнений и химической кинетики, и квантовой химической кинетики. Условие, при котором справедлива H -теорема, которую мы докажем в следующем разделе, для этого примера формулируется так: существует вектор ξ такой, что $K_2^1 \xi_1 / (1 + \theta \xi_1) = K_1^2 \xi_2 / (1 + \theta \xi_2)$, и с помощью его выбора можно получить любые K_1^2 и K_2^1 .

ПРИМЕР 3.5. *Квантовый марковский процесс (квантовое случайное блуждание) с произвольным конечным числом состояний.* Он описывается системой уравнений вида

$$\frac{df_m}{dt} = \sum_j (1 + \theta f_m)(1 + \theta f_j)(K_m^j h_j - K_j^m h_m), \quad (21)$$

где $m = 1, 2, \dots, n$, $h_m = f_m / (1 + \theta f_m)$.

Отметим, что уравнения квантовой химической кинетики, рассмотренные в примерах 3.1, 3.2, 3.4, 3.5, являются уравнениями химической кинетики, но для них H -теорема, доказанная в [21], [23], вообще говоря, не справедлива, что связано с тем, что набор реакций, который сопоставляется таким системам, содержит необратимые реакции и условие H -теоремы из [21], [23] не выполняется.

В следующем разделе мы предложим обобщение примера 3.3 на случай несимметричных коэффициентов. Это позволит не только обобщить уравнения квантовой химической кинетики на несимметричный случай, но и понять смысл преобразования H -функции как в классическом, так и в квантовом случае.

4. H -теорема для обобщений уравнений химической кинетики

Рассмотрим систему уравнений

$$\frac{df_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{(\alpha, \beta) \in \mathfrak{S}} (\beta_i - \alpha_i) (\sigma_\beta^\alpha(\mathbf{f}) K_\beta^\alpha e^{(\alpha, \nabla G(\mathbf{f}))} - \sigma_\alpha^\beta(\mathbf{f}) K_\alpha^\beta e^{(\beta, \nabla G(\mathbf{f}))}), \quad (22)$$

где $i = 1, 2, \dots, n$ и $\sigma_\beta^\alpha(\mathbf{f})$, $G(\mathbf{f})$ – заданные функции от $\mathbf{f} = (f_1, f_2, \dots, f_n)$. Пусть $\sigma_\beta^\alpha(\mathbf{f}) = \sigma_\alpha^\beta(\mathbf{f}) > 0$ и $K_\beta^\alpha \geq 0$, причем $K_\beta^\alpha \neq 0$ или $K_\alpha^\beta \neq 0$ для $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{S}$.

H -теорема для симметричного случая: $K_\beta^\alpha = K_\alpha^\beta$, рассматривалась в [13], [21]. Наша цель – обобщить пример 3.3 на несимметричный случай. Это должно показать, как меняется H -функция: в классическом случае ее изменения известны (энтропия Кульбака–Лейблера [16], см. также работы И. Н. Санова [17] и Н. Н. Ченцова [18]), но несколько загадочны (поэтому даже носят именную

характер), и общность прояснит ситуацию. Итак, мы рассматриваем случай, когда зависимость коэффициентов от $\mathbf{f}$ симметрична ($\sigma_\beta^\alpha(\mathbf{f}) = \sigma_\alpha^\beta(\mathbf{f})$), но не зависящая от $\mathbf{f}$ часть может быть несимметричной ($K_\beta^\alpha \neq K_\alpha^\beta$). Это позволит нам обобщить условие детального баланса, а также хоть как-то, пусть и менее удовлетворительно, условие динамического равновесия.

В случае химической кинетики и классического марковского процесса получается относительная энтропия или энтропия Кульбака–Лейблера [16]–[18]:

$$S(\mathbf{f}) \equiv -H(\mathbf{f}) = -\sum_{i=1}^n f_i \left(\ln \frac{f_i}{\xi_i} - 1 \right).$$

Для возрастания так определенной относительной энтропии наличие закона сохранения числа частиц не требуется, в отличие от $S(\mathbf{f}) = -\sum_{i=1}^n f_i \ln \frac{f_i}{\xi_i}$ – именно так определяют энтропию Кульбака–Лейблера, когда есть закон сохранения числа частиц. Закон сохранения числа частиц: $f_1 + f_2 + \dots + f_n = \text{const}$, выполняется тогда и только тогда, когда $|\alpha| = |\beta|$ для всех $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{Z}$.

Если $\sigma_\beta^\alpha(\mathbf{f})$ не зависит от $\mathbf{f}$, то можно считать, что $\sigma_\beta^\alpha(\mathbf{f}) = 1$, и тогда мы имеем систему

$$\frac{df_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{(\alpha, \beta) \in \mathfrak{Z}} (\beta_i - \alpha_i) (K_\beta^\alpha e^{(\alpha, \nabla G(\mathbf{f}))} - K_\alpha^\beta e^{(\beta, \nabla G(\mathbf{f}))}), \quad (23)$$

где $i = 1, 2, \dots, n$.

Если в (23) $\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_i} = \ln f_i$, то мы получаем систему (10).

Пусть система (22) (система (23)) решаются для начальных данных $\mathbf{f}(0) \in M \subseteq \mathbb{R}^n$, где M – выпуклая область, на которой для всех $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{Z}$ определены функции $\sigma_\beta^\alpha(\mathbf{f})$, непрерывные вместе с частными производными по f_i для всех i , и определена функция $G(\mathbf{f})$, непрерывная вместе с частными производными первого и второго порядка. И пусть решения системы с начальными данными $\mathbf{f}(0) \in M$ в любой момент времени принадлежат множеству M . Это есть условие сохранения положительности, если M есть положительный конус в $\mathbb{R}^n$: $M = \{\mathbf{f} \in \mathbb{R}^n : f_i > 0 \forall i\}$. Именно такое множество M мы имеем в случае химической кинетики и квантовой химической кинетики в случае бозонов ($\theta > 0$). В случае же фермионов (т.е. для $\theta < 0$) $M = \{\mathbf{f} \in \mathbb{R}^n : 0 < f_i < 1/|\theta| \forall i\}$.

Поскольку функции $\sigma_\beta^\alpha(\mathbf{f})e^{(\alpha, \nabla G(\mathbf{f}))}$ в случае системы (22) и $e^{(\alpha, \nabla G(\mathbf{f}))}$ в случае системы (23) для всех $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{Z}$ непрерывны на множестве M вместе с частными производными по f_i для всех i , то это гарантирует существование и единственность решения в малом.

Остановимся на следующих вопросах: когда системы (22) и (23) имеют H -функцию – функционал типа энтропии, убывающий на нестационарных решениях? какие выводы из этого можно сделать?

Обобщенное условие детального равновесия (баланса) для случая систем (22). Условием детального равновесия в классическом случае системы (10) называется условие (см. [22]) существования решения следующей системы уравнений:

$$K_\beta^\alpha \mathbf{f}^\alpha = K_\alpha^\beta \mathbf{f}^\beta.$$

Число уравнений в этой системе равно числу реакций, т.е. половине числа элементов в множестве $\mathfrak{Z}$, а число неизвестных ξ_i равно n .

Пусть существует вектор $\xi \in M$ такой, что для всех реакций $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{Z}$ выполняется условие

$$K_{\beta}^{\alpha} e^{(\alpha, \nabla G(\xi))} = K_{\alpha}^{\beta} e^{(\beta, \nabla G(\xi))}, \quad (24)$$

т.е. пусть существует хотя бы одно решение системы (24). Тогда будем говорить, что для системы (22) выполняется обобщенное условие детального равновесия.

Найдем невозрастающий функционал для системы (22) в случае, когда для нее выполнено обобщенное условие детального баланса.

Из (22) и (24), учитывая, что $\sigma_{\beta}^{\alpha}(\mathbf{f}) = \sigma_{\alpha}^{\beta}(\mathbf{f})$, для произвольного функционала $H(\mathbf{f})$ такого, что функция $H(\mathbf{f})$ дифференцируема, получаем

$$\begin{aligned} \frac{dH(\mathbf{f})}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{(\alpha, \beta) \in \mathfrak{Z}} (\beta - \alpha, \nabla H(\mathbf{f})) \sigma_{\beta}^{\alpha}(\mathbf{f}) K_{\beta}^{\alpha} e^{(\alpha, \nabla G(\xi))} \\ \times [e^{(\alpha, \nabla G(\mathbf{f}) - \nabla G(\xi))} - e^{(\beta, \nabla G(\mathbf{f}) - \nabla G(\xi))}]. \end{aligned}$$

Если

$$\nabla H(\mathbf{f}) = \nabla G(\mathbf{f}) - \nabla G(\xi), \quad (25)$$

то $dH/dt \leq 0$; причем равенство достигается только при $(\beta - \alpha, \nabla G(\mathbf{f}) - \nabla G(\xi)) = 0$.

Из (25) имеем с точностью до произвольной аддитивной постоянной:

$$H(\mathbf{f}) = G(\mathbf{f}) - G(\xi) - (\nabla G(\xi), \mathbf{f} - \xi). \quad (26)$$

Таким образом, форма (26) для $H(\mathbf{f})$ поясняет классический случай энтропии Кульбака–Лейблера.

Происходит деление на стационарное решение (ξ) в случае энтропии Кульбака–Лейблера для уравнений химической кинетики и в случае энтропии для линейного случая: для уравнения Лиувилля (как мы увидим в следующем разделе), марковских процессов и цепей, когда вместо $h \ln h$ можно брать произвольную строго выпуклую функцию $\phi(h)$, и

$$H = \sum_i \xi_i \phi\left(\frac{f_i}{\xi_i}\right) \quad (27)$$

(для марковских процессов и цепей), где ξ – положительное стационарное решение. Отношения предпочтительнее, поскольку тогда величины, стоящие в аргументах функций, будут безразмерными. Запишем обобщение (22) в виде

$$\frac{df_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{(\alpha, \beta) \in \mathfrak{Z}} (\beta_i - \alpha_i) \sigma_{\beta}^{\alpha}(\mathbf{f}) [K_{\beta}^{\alpha} \mathbf{g}^{\alpha}(\mathbf{f}) - K_{\alpha}^{\beta} \mathbf{g}^{\beta}(\mathbf{f})], \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

где $\mathbf{g}(\mathbf{f}) \equiv (g_1(\mathbf{f}), g_2(\mathbf{f}), \dots, g_n(\mathbf{f}))$. Тогда, если $\left(\ln \frac{\mathbf{g}(\mathbf{f})}{\mathbf{g}(\xi)}, d\mathbf{f}\right)$ представляет собой полный дифференциал, то выполняется H -теорема с

$$H(\mathbf{f}) = \int_{\xi}^{\mathbf{f}} \left(\ln \frac{\mathbf{g}(\tilde{\mathbf{f}})}{\mathbf{g}(\xi)}, d\tilde{\mathbf{f}} \right),$$

где

$$\ln \frac{\mathbf{g}(\tilde{\mathbf{f}})}{g(\xi)} \equiv \left(\ln \frac{g_1(\tilde{\mathbf{f}})}{g_1(\xi)}, \ln \frac{g_2(\tilde{\mathbf{f}})}{g_2(\xi)}, \dots, \ln \frac{g_n(\tilde{\mathbf{f}})}{g_n(\xi)} \right),$$

ξ – стационарное решение, удовлетворяющее условию $K_{\beta}^{\alpha} \mathbf{g}^{\alpha}(\xi) = K_{\alpha}^{\beta} \mathbf{g}^{\beta}(\xi)$. Из равенства смешанных производных второго порядка для этой H -функции получаем

$$\frac{\partial}{\partial f_j} \ln \frac{g_i(\mathbf{f})}{g_i(\xi)} = \frac{\partial}{\partial f_i} \ln \frac{g_j(\mathbf{f})}{g_j(\xi)}.$$

Откуда следует, что

$$\frac{\partial}{\partial f_j} \ln g_i(\mathbf{f}) = \frac{\partial}{\partial f_i} \ln g_j(\mathbf{f}),$$

т. е. требуется существование $G(\mathbf{f})$ такой, что $\nabla G(\mathbf{f}) = (\ln g_1(\mathbf{f}), \dots, \ln g_n(\mathbf{f}))$. Значит, если эта H -функция существует, то она совпадает с (26) (с точностью до аддитивной постоянной), а рассматриваемая система совпадает с (22), т. е.

$$g_i(\mathbf{f}) = \exp \left(\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_i} \right), \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Таким образом, имеет место единство форм энтропии: всегда берутся функции от безразмерных величин. Формула (25) в случае квантовой химической кинетики содержит логарифмы от безразмерных величин:

$$\frac{\partial H(\mathbf{f})}{\partial f_i} = \ln \frac{f_i(1 + \theta \xi_i)}{\xi_i(1 + \theta f_i)}.$$

Функции (27) были введены, по-видимому, независимо, Моримото [19] и Чисаром [20] для доказательства H -теоремы для марковских процессов и цепей. В разделе 5 настоящей работы мы получим, что для уравнения Лиувилля в качестве H -функции надо брать непрерывный аналог (27).

Важно отметить, что марковские процессы можно записать в общем виде линейного оператора, который включает в себя и марковские цепи, и уравнение Лиувилля:

$$f(t, \mathbf{x}) = \int K(t, \mathbf{x}, \mathbf{y}) f(\mathbf{y}) d\mathbf{y}.$$

Закон сохранения числа частиц записывается в виде $\int K(t, \mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{x} = 1$. А если интегрирование ведется по инвариантной мере, то $\int K(t, \mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y} = 1$. И H -теорема для таких марковских процессов с инвариантной мерой была доказана уже в 1940 г. – теорема К. Иосиды [29; гл. XIII, § 3, с. 538]. В качестве энтропии бралась стандартная больцмановская, но само доказательство использует только вогнутость энтропии. Функции Моримото (27) возникают, когда есть положительное стационарное решение ξ (инвариантность меры означает, что оно равно единице). Но в этом случае всегда можно перейти к инвариантной мере, что мы будем активно использовать в разделе 5 настоящего обзора. А красота и простота H -теоремы Пуанкаре–Козлова–Трещёва в том, что, несмотря на

сохранение энтропии для уравнения Лиувилля, энтропия предельного распределения часто оказывается больше этой сохраняющейся величины. И это снова обосновывается строгой вогнутостью энтропии.

Обобщенное условие динамического равновесия для случая систем (23) (или обобщенное условие Штюкельберга–Батищевой–Пирогова [27; формула (29) на стр. 21], [23], [28] для (23)). Пусть существует вектор $\xi \in M$, являющийся решением системы уравнений

$$\sum_{\beta} K_{\beta}^{\alpha} e^{(\alpha, \nabla G(\xi))} = \sum_{\beta} K_{\alpha}^{\beta} e^{(\beta, \nabla G(\xi))}, \quad (28)$$

здесь α такие, что $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{S}$ с некоторым β . Тогда будем говорить, что для системы (23) выполняется обобщенное условие динамического равновесия. Число уравнений в системе (28) равно числу различных векторов α (или различных β) в парах $(\alpha, \beta) \in \mathfrak{S}$, а число неизвестных ξ_i равно n .

Докажем, что в этом случае функционал (26) является невозрастающим для системы (23). Из (28) имеем, что

$$\sum_{\beta} K_{\beta}^{\alpha} = \sum_{\beta} K_{\alpha}^{\beta} e^{(\beta - \alpha, \nabla G(\xi))}.$$

Умножая эти равенства на $e^{(\alpha, \nabla G(\mathbf{f}))}$, суммируя их по всем α и меняя α и β местами в левой части равенства, получим:

$$\sum_{(\alpha, \beta) \in \mathfrak{S}} K_{\alpha}^{\beta} e^{(\beta, \nabla G(\mathbf{f}))} = \sum_{(\alpha, \beta) \in \mathfrak{S}} K_{\alpha}^{\beta} e^{(\beta - \alpha, \nabla G(\xi))} e^{(\alpha, \nabla G(\mathbf{f}))}.$$

Поэтому

$$\sum_{(\alpha, \beta) \in \mathfrak{S}} K_{\alpha}^{\beta} e^{(\beta, \nabla G(\xi))} e^{(\beta, \nabla G(\mathbf{f}) - \nabla G(\xi))} = \sum_{(\alpha, \beta) \in \mathfrak{S}} K_{\alpha}^{\beta} e^{(\beta, \nabla G(\xi))} e^{(\alpha, \nabla G(\mathbf{f}) - \nabla G(\xi))},$$

или

$$\sum_{(\alpha, \beta) \in \mathfrak{S}} K_{\alpha}^{\beta} e^{(\beta, \nabla G(\xi))} e^{(\alpha, \nabla G(\mathbf{f}) - \nabla G(\xi))} (e^u - 1) = 0, \quad (29)$$

где $u = (\beta - \alpha, \nabla G(\mathbf{f}) - \nabla G(\xi))$. Систему (23) перепишем в виде

$$\frac{df_i}{dt} = - \sum_{(\alpha, \beta) \in \mathfrak{S}} (\beta_i - \alpha_i) K_{\alpha}^{\beta} e^{(\beta, \nabla G(\mathbf{f}))}.$$

В силу этого уравнения имеем

$$\begin{aligned} \frac{dH(\mathbf{f})}{dt} &= \frac{d(G(\mathbf{f}) - (\nabla G(\xi), \mathbf{f}))}{dt} \\ &= - \sum_{(\alpha, \beta) \in \mathfrak{S}} K_{\alpha}^{\beta} e^{(\beta, \nabla G(\xi))} e^{(\beta, \nabla G(\mathbf{f}) - \nabla G(\xi))} (\beta - \alpha, \nabla G(\mathbf{f}) - \nabla G(\xi)) \\ &= - \sum_{(\alpha, \beta) \in \mathfrak{S}} K_{\alpha}^{\beta} e^{(\beta, \nabla G(\xi))} e^{(\alpha, \nabla G(\mathbf{f}) - \nabla G(\xi))} [e^u u - e^u + 1] \leq 0. \end{aligned} \quad (30)$$

Здесь мы воспользовались условием (28), прибавив нулевое слагаемое (29). Неравенство в (30) справедливо, поскольку $e^u u - e^u + 1 \geq 0$, где равенство достигается только при $u = 0$. Равенство $u = 0$ – это условие равенства нулю роста энтропии.

Неравенство (30) и полученное ранее неравенство в случае обобщенного условия детального баланса – это форма H -теоремы для обобщений уравнений химической кинетики. Она показывает, как надо менять форму H -функции, вычитая линейный по $\mathbf{f}$ член, и это обобщает соответствующие преобразования классической H -функции из работ [21]–[23], [26], [16]–[20], [27]. И мы имеем обобщение H -теоремы на квантовый случай с несимметричными коэффициентами. А неравенство (30) обобщает условие Штюкельберга–Батищевой–Пирогова, но в случае, если коэффициенты K_β^α не зависят от $\mathbf{f}$. Теперь рассмотрим следствия этой H -теоремы, следуя [21], [23].

Потребуем, чтобы функция $G(\mathbf{f})$ была строго выпуклой на выпуклом множестве M (тогда и функция $H(\mathbf{f})$ будет строго выпуклой на M).

Если множество M неограничено, то потребуем, чтобы было выполнено условие

$$\lim_{\substack{\|\mathbf{f}\| \rightarrow +\infty \\ \mathbf{f} \in M}} H(\mathbf{f}) = +\infty. \quad (31)$$

Это условие нужно для того, чтобы множество точек множества M таких, что $H(\mathbf{f}) \leq C = \text{const}$ для любого C , было ограниченным.

ТЕОРЕМА 4.1 (H -теорема с произвольной функцией в условии обобщенного детального баланса для коэффициентов K_β^α и симметричных сигма). Пусть для системы (22) коэффициенты K_β^α таковы, что существует хотя бы одно решение $\xi \in M$ системы уравнений (24). Тогда справедливы следующие утверждения.

- (а) H -функция (26) не возрастает на решениях системы (22): $dH/dt \leq 0$. Все стационарные решения системы (22) удовлетворяют равенствам (24).
 (б) Система (22) имеет $n - r$ законов сохранения вида

$$\sum \mu_i^k f_i(t) = A^k = \text{const} \quad (k = 1, 2, \dots, n - r),$$

где r – размерность линейной оболочки векторов $\alpha - \beta$ (векторы Больцмана–Орлова–Мозера–Брюно [13]–[15]), а векторы μ^k ортогональны всем $\alpha - \beta$:

$$\sum \mu_i^k (\alpha_i - \beta_i) = 0.$$

Стационарное решение системы (22) единственно, если зафиксировать все постоянные A^k этих законов сохранения, и дается формулой

$$\mathbf{f}_0 = \phi \left(\nabla G(\xi) + \sum_{k=1}^{n-r} \mu^k \lambda^k \right), \quad (32)$$

где $\mathbf{f} = \phi(\mathbf{x})$ определяется уравнением $\nabla G(\mathbf{f}) = \mathbf{x}$ как неявная вектор-функция, а λ^k – значениями A^k .

(с) Такое стационарное решение существует, если A^k определяется по начальному условию $\mathbf{f}(\mathbf{0}) \in M$:

$$A^k = \sum \mu_i^k f_i(0).$$

Решение $\mathbf{f}(t)$ с этим начальным условием существует при всех $t > 0$, единственно и стремится к стационарному решению (32).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. (а) То, что для H -функции (26) справедливо неравенство $dH/dt \leq 0$ на решениях системы (22), было показано ранее, причем равенство достигалось при тех $\mathbf{f}_0$, для которых

$$(\alpha - \beta, \nabla G(\mathbf{f}_0)) = (\alpha - \beta, \nabla G(\xi)). \quad (33)$$

Из (33) следует, что $\mathbf{f}_0$ удовлетворяет тому же условию (24), что и ξ . Поэтому условие $dH/dt = 0$ выполняется только в стационарных точках.

(b) Так как якобиан отображения ∇G отличен от нуля на множестве M (в силу строгой выпуклости функции G), то векторное уравнение

$$\nabla H(\mathbf{f}) \equiv \nabla G(\mathbf{f}) - \nabla G(\xi) = \mathbf{x}$$

на неизвестный вектор $\mathbf{f}$ определяет его как неявную вектор-функцию аргумента $\nabla G(\xi) + \mathbf{x}$:

$$\mathbf{f} = \phi(\nabla G(\xi) + \mathbf{x}).$$

В силу непрерывности и строгой монотонности функций $\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_i} - \frac{\partial G(\xi)}{\partial \xi_i}$ по f_i имеем $\mathbf{0} \in \text{int } \nabla H(M)$, т.е. существует число $R(\xi) > 0$ такое, что обратная функция $\mathbf{f} = \phi(\nabla G(\xi) + \mathbf{x})$ определена при всех $\mathbf{x}$ таких, что $\|\mathbf{x}\| < R(\xi)$.

Условие ортогональности μ всем $\alpha - \beta$ является необходимым и достаточным условием того, что функционал $\sum \mu_i f_i(t)$ есть закон сохранения. Достаточность получается непосредственно из (22):

$$\frac{d}{dt} \sum \mu_i f_i = \frac{1}{2} \sum_{(\alpha, \beta) \in \mathfrak{S}} (\mu, \beta - \alpha) \sigma_\beta^\alpha(\mathbf{f}) (K_\beta^\alpha e^{(\alpha, \nabla G(\mathbf{f}))} - K_\alpha^\beta e^{(\beta, \nabla G(\mathbf{f}))}).$$

В силу этого уравнения и (24) имеем:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum \mu_i f_i &= \frac{1}{2} \sum_{(\alpha, \beta) \in \mathfrak{S}} (\mu, \beta - \alpha) \sigma_\beta^\alpha(\mathbf{f}) K_\beta^\alpha e^{(\alpha, \nabla G(\xi))} \\ &\quad \times [e^{(\alpha, \nabla G(\mathbf{f}) - \nabla G(\xi))} - e^{(\beta, \nabla G(\mathbf{f}) - \nabla G(\xi))}]. \end{aligned}$$

Тогда необходимость для всех μ таких, что $\|\mu\| < R(\xi)$, получается, если взять здесь $\mathbf{f} = \phi(\nabla G(\xi) + \mu)$. Действительно, тогда $\nabla G(\mathbf{f}) - \nabla G(\xi) = \mu$, и равенство $\frac{d}{dt} \sum \mu_i f_i = 0$ тогда и только тогда, когда $(\mu, \alpha - \beta) = 0$.

Произвольный ненулевой вектор μ из $\mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ можно представить в виде $\mu = \alpha \lambda$, где $\alpha \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ и вектор λ таков, что $\|\lambda\| < R(\xi)$. Тогда

$$\frac{d}{dt} \sum \mu_i f_i = \alpha \frac{d}{dt} \sum \lambda_i f_i.$$

Но правая часть последнего равенства равна нулю, только если $(\lambda, \alpha - \beta) = 0$, что равносильно условию $(\mu, \alpha - \beta) = 0$. Таким образом, необходимость доказана.

Из (33) получаем, что вектор $\nabla G(\mathbf{f}_0) - \nabla G(\xi)$ ортогонален всем $\alpha - \beta$, следовательно, формула (32) верна для любого стационарного решения системы (22) с некоторыми постоянными λ^k . Это условие в совокупности с линейными законами сохранения

$$\sum \mu_i^k f_i(t) = A^k = \text{const} \quad (k = 1, 2, \dots, n - r) \quad (34)$$

есть условие того, что точка $(\mathbf{f}_0, \lambda)$ является стационарной точкой функции

$$L(\mathbf{f}, \lambda) = H(\mathbf{f}) + \sum_{k=1}^{n-r} \lambda^k \left(\sum_{i=1}^n \mu_i^k f_i - A^k \right).$$

Такая стационарная точка единственна, что следует из единственности стационарной точки у строго выпуклой функции $H(\mathbf{f})$ на выпуклом множестве, являющемся пересечением выпуклого множества M и множеств, определяемых линейными законами сохранения (34). Эта стационарная точка определяется единственным образом по постоянным A^k , а коэффициенты λ^k определяются единственным образом по этой стационарной точке. Поэтому коэффициенты λ^k определяются единственным образом по постоянным A^k , и они могут быть найдены из системы уравнений

$$\frac{\partial L(\mathbf{f}_0, \lambda)}{\partial \mathbf{f}} = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial L(\mathbf{f}_0, \lambda)}{\partial \lambda} = \mathbf{0}.$$

(с) Решение уравнения (22) существует для любых начальных данных $\mathbf{f}(0) \in M$ в силу условия (31), и, следовательно, множество точек $\mathbf{f} \in M$ таких, что $\sum \mu_i^k f_i = A^k$ (здесь $A^k = \sum \mu_i^k f_i(0)$) и $H(\mathbf{f}) \leq H(\mathbf{f}(0))$, ограничено. Рассмотрим замыкание этого множества, т. е. добавим соответствующие точки, принадлежащие границе множества M . Предполагаем, что в них $dH/dt < 0$ и поэтому минимум H -функции в них не достигается. Поэтому, вследствие строгой выпуклости H на рассматриваемом выпуклом ограниченном множестве, существует единственная точка минимума функции H на этом множестве. В ней $dH/dt = 0$, и она определяет стационарное решение.

Решение стремится к этой точке минимума H -функции вследствие строгости неравенства $dH/dt \leq 0$ в других точках.

Теорема 4.1 доказана, точно так же доказывается следующая теорема.

ТЕОРЕМА 4.2 (H -теорема с обобщенным условием Штюкельберга–Батищевой–Пирогова без сигм, т. е. с сигмами, равными единице). Пусть для системы (23) коэффициенты K_β^α таковы, что существует хотя бы одно решение $\xi \in M$ системы уравнений (28). Тогда справедливы следующие утверждения.

(а) H -функция (26) не возрастает на решениях системы (23): $dH/dt \leq 0$. Все стационарные решения системы (23) удовлетворяют равенствам (28).

(б) Система (23) имеет $n - r$ законов сохранения вида

$$\sum \mu_i^k f_i(t) = A^k = \text{const} \quad (k = 1, 2, \dots, n - r),$$

где r – размерность линейной оболочки векторов $\alpha - \beta$, а векторы μ^k ортогональны всем $\alpha - \beta$:

$$\sum \mu_i^k (\alpha_i - \beta_i) = 0.$$

Стационарное решение системы (23) единственно, если зафиксировать все постоянные A^k этих законов сохранения, и дается формулой (32), где λ^k определяются значениями A^k .

(с) Такое стационарное решение существует, если A^k определяется по начальному условию $\mathbf{f}(0) \in M$:

$$A^k = \sum \mu_i^k f_i(0).$$

Решение $\mathbf{f}(t)$ с этим начальным условием существует при всех $t > 0$, единственно и стремится к стационарному решению (31).

Полученные теоремы являются аналогами и обобщениями теоремы в [21], [23], которая рассматривалась там для уравнений химической кинетики, причем симметричный случай настоящей работы: $\sigma_\beta^\alpha(\mathbf{f})K_\beta^\alpha = \sigma_\alpha^\beta(\mathbf{f})K_\alpha^\beta$, рассмотрен в [13], [21].

Если $G(\mathbf{f})$ – строго выпуклая функция, то при выполнении остальных условий теорема 4.1 гарантирует существование и единственность стационарного решения при фиксированных значениях постоянных линейных законов сохранения, а также сходимости к стационарному решению для систем вида (22) и, в частности, для квантовых систем раздела 3. Далее уточним для них выполнение условий теоремы 4.1.

Дискретная модель квантового кинетического уравнения (11), (12) является системой вида (22): $\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_i} = \ln \frac{f_i}{1 + \theta f_i}$, множество индексов $\mathfrak{I}$ состоит из пар векторов вида $(\mathbf{e}_i + \mathbf{e}_j, \mathbf{e}_k + \mathbf{e}_l)$, где $\mathbf{e}_i$ – вектор, у которого i -я компонента равна единице, а остальные равны нулю, $((i, j), (k, l)) \in S$, $K_{\mathbf{e}_i + \mathbf{e}_j}^{\mathbf{e}_k + \mathbf{e}_l} = 1$ и

$$\sigma_{\mathbf{e}_i + \mathbf{e}_j}^{\mathbf{e}_k + \mathbf{e}_l}(\mathbf{f}) = \sigma_{kl}^{ij}(1 + \theta f_i)(1 + \theta f_j)(1 + \theta f_k)(1 + \theta f_l).$$

Квантовое случайное блуждание (21) является системой вида (22): $\frac{\partial G(\mathbf{f})}{\partial f_i} = \ln \frac{f_i}{1 + \theta f_i}$, множество индексов $\mathfrak{I}$ содержит только пары векторов вида $(\mathbf{e}_m, \mathbf{e}_j)$, $K_{\mathbf{e}_m}^{\mathbf{e}_j}(\mathbf{f}) = K_m^j$ и

$$\sigma_{\mathbf{e}_m}^{\mathbf{e}_j}(\mathbf{f}) = (1 + \theta f_m)(1 + \theta f_j).$$

В этих примерах

$$H(\mathbf{f}) = \sum_{i=1}^n \left(f_i \ln \frac{f_i}{\xi_i} - \theta^{-1} (1 + \theta f_i) \ln \frac{1 + \theta f_i}{1 + \theta \xi_i} \right) \quad \text{при } \theta \neq 0$$

и

$$H(\mathbf{f}) = \sum_{i=1}^n f_i \left(\ln \frac{f_i}{\xi_i} - 1 \right) \quad \text{при } \theta = 0;$$

$$\phi_i(\nabla G(\xi) + \mathbf{x}) = \left(\left(\frac{1 + \theta \xi_i}{\xi_i} \right) \exp(-x_i) - \theta \right)^{-1} \quad \text{для } i = 1, 2, \dots, n.$$

Условие теоремы 4.1 для примера 3.1 выполняется, поскольку в качестве ξ можно взять любой вектор из M с равными компонентами.

Условие теоремы 4.1 для примера 3.5 состоит в существовании вектора $\xi \in M$ такого, что

$$\frac{K_m^j \xi_j}{1 + \theta \xi_j} = \frac{K_j^m \xi_m}{1 + \theta \xi_m}. \quad (35)$$

Выполнение этого условия в случае симметричных коэффициентов очевидно.

Итак, обобщение теорем из [13], [21], [23] в виде теоремы 4.1 оказывается существенным для квантового марковского процесса в случае несимметричных констант реакций (когда $K_m^j \neq K_j^m$).

Таким образом, мы получили максимально общую систему уравнений (22), для которой исследовали H -теорему и в полном объеме ее не получили. Но классическое уравнение Лиувилля должно попадать в класс систем, для которых H -теорема со следствиями работает, потому что при дискретизации любого уравнения Лиувилля должны сохраняться положительность и свойство сохранения числа частиц, а это марковский процесс. Поэтому мы уверены, что понятие экстремали Больцмана работает и в этом случае и именно к нему должно стремиться решение любого уравнения Лиувилля. Это мы проверим в следующем разделе. По сути, дается ответ на основной вопрос эргодической теории: к чему стремится решение уравнения Лиувилля. Понятно, что к функции от интегралов, но к какой? Ответ следующего раздела – к экстремали Больцмана (теорема 5.1). А теорема 5.2 дает явную формулу для вычисления экстремали Больцмана.

5. Энтропия Пуанкаре, экстремали Больцмана, эргодическая теория и вариационный принцип для уравнения Лиувилля

Рассмотрим систему n обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v}(\mathbf{x}). \quad (36)$$

Здесь $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, $\mathbf{v}(\mathbf{x}) = (v_1(\mathbf{x}), v_2(\mathbf{x}), \dots, v_n(\mathbf{x}))$, $v_i(\mathbf{x})$ – непрерывно дифференцируемые функции.

Рассмотрим уравнение неразрывности, или уравнение Лиувилля, для этой системы:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{v}(\mathbf{x})f) = 0. \quad (37)$$

Пусть решение системы (36) существует и единственно при всех временах (т. е. в целом).

Если она бездивергентна: $\operatorname{div} \mathbf{v}(\mathbf{x}) \equiv 0$, то решение уравнения (37) можно записать в виде

$$f(t, \mathbf{x}) = f(0, \mathbf{g}^{-t}(\mathbf{x})), \quad (38)$$

где $\mathbf{g}^t(\mathbf{x})$ – положение точки, движущейся в силу системы (36), в момент времени t при условии, что при $t = 0$ она совпадала с $\mathbf{x}$: $\mathbf{g}^0(\mathbf{x}) \equiv \mathbf{x}$.

Определим средние по времени решения уравнения (37) формулой

$$f_T(\mathbf{x}) = \frac{1}{T} \int_0^T f(t, \mathbf{x}) dt.$$

Правая часть (38) при фиксированном t задает оператор, действующий на функцию $f(0, \mathbf{x})$. Этот оператор линейный, и он сохраняет L^2 -норму функции в случае, если $\operatorname{div} \mathbf{v}(\mathbf{x}) \equiv 0$. Именно для таких операторов справедлива статистическая эргодическая теорема фон Неймана–Рисса, которая утверждает, что среднее по Чезаро (т.е. предел $f^C(\mathbf{x})$ (здесь C – от Cesaro) функции $f_T(\mathbf{x})$ при T , стремящемся к бесконечности: $f^C(\mathbf{x}) = \lim_{T \rightarrow \infty} f_T(\mathbf{x})$) существует в пространстве $L^2(\mathbb{R}^n)$ при любых начальных данных из этого же пространства.

В бездивергентном случае определим энтропию формулой

$$S(h) = - \int h(\mathbf{x}) \ln h(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

как строго вогнутый функционал на положительных функциях $h(\mathbf{x})$ из $L^2(\mathbb{R}^n)$. Такие функционалы сохраняются для уравнения (37) в бездивергентном случае. Однако в работе Пуанкаре [4] обсуждался вопрос о росте энтропии для предельной функции на частном примере бесстолкновительного газа:

$$S(f^C(\mathbf{x})) \geq S(f(0, \mathbf{x})).$$

В. В. Козловым и Д. В. Трещёвым [5], [6] было доказано обобщение этого факта, а именно что энтропия временного среднего не меньше, чем энтропия начального распределения для уравнений (37). В [10] было показано, что решение уравнения (37) сходится “туда, куда надо” – временные средние определяют условным принципом максимума энтропии (принцип Больцмана), и вместо стандартной энтропии:

$$S(h) = - \int h(\mathbf{x}) \ln h(\mathbf{x}) d\mathbf{x},$$

можно брать вогнутые функционалы:

$$S(h) = \int \phi(h(\mathbf{x})) d\mathbf{x},$$

где ϕ – строго вогнутая функция. Первые попытки применить принцип Больцмана в этой ситуации содержатся в [21]. В настоящем разделе мы обобщим результат работы [10] на случай, когда дивергенция не равна нулю.

Пусть имеется стационарное решение $\xi(\mathbf{x})$ уравнения (37), положительное для всех $\mathbf{x}$:

$$\operatorname{div}(\mathbf{v}(\mathbf{x})\xi) \equiv 0. \quad (39)$$

Тогда непосредственной подстановкой проверяется, что (37) равносильно уравнению бездивергентного вида

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \left(\mathbf{v}(\mathbf{x}), \frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}} \right) = 0, \quad (40)$$

где $F \equiv f/\xi$. Решение уравнения (40) можно записать в таком виде: $F(t, \mathbf{x}) = F(0, \mathbf{g}^{-t}(\mathbf{x}))$. Поэтому решение уравнения (37) имеет вид

$$f(t, \mathbf{x}) = \frac{\xi(x)}{\xi(\mathbf{g}^{-t}(\mathbf{x}))} f(0, \mathbf{g}^{-t}(\mathbf{x})). \quad (41)$$

Положительное стационарное решение уравнения Лиувилля (37), $\xi(\mathbf{x})$, определяет инвариантную меру $\xi d\mathbf{x}$.

В рассматриваемом случае теорема о совпадении среднего по Чезаро с экстремалью по Больцману проще всего получается в пространстве ${}_{\xi}L^2(\mathbb{R}^n)$ со скалярным произведением

$$(g, h)_{\xi} \equiv \int_{\mathbb{R}^n} \frac{g(\mathbf{x})h(\mathbf{x})}{\xi(\mathbf{x})} d\mathbf{x}. \quad (42)$$

Это пространство функций $h(\mathbf{x})$ таких, что $h^2(\mathbf{x})/\xi(\mathbf{x})$ интегрируема по Лебегу, т. е. существует интеграл

$$\|h\|_{\xi L^2}^2 \equiv \int_{\mathbb{R}^n} \frac{h^2(\mathbf{x})}{\xi(\mathbf{x})} d\mathbf{x}.$$

В качестве энтропии для (37) требуется строго вогнутый функционал, не убывающий на решениях уравнения (37). Энтропией для (37) является функционал

$$S(h) = \int \xi \phi\left(\frac{h}{\xi}\right) d\mathbf{x} \quad (43)$$

на положительных функциях $h(\mathbf{x})$ из ${}_{\xi}L^2(\mathbb{R}^n)$, где ϕ – строго вогнутая функция, определенная при положительных значениях своего аргумента. Функционал (43) сохраняется на решениях уравнения (37). Действительно, $\phi(F)$, как и F , удовлетворяет уравнению (40). Умножив обе части этого уравнения на ξ и проинтегрировав, получим, что $\int \xi \phi(F) d\mathbf{x}$ сохраняется в силу (40):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int \xi \phi(F) d\mathbf{x} &= \int \xi \frac{\partial \phi(F)}{\partial t} d\mathbf{x} = - \int \xi \left(\mathbf{v}, \frac{\partial \phi(F)}{\partial \mathbf{x}} \right) d\mathbf{x} \\ &= - \int \operatorname{div}(\xi \mathbf{v} \phi(F)) d\mathbf{x} + \int \operatorname{div}(\xi \mathbf{v}) \phi(F) d\mathbf{x} = 0. \end{aligned}$$

Здесь мы проинтегрировали по частям, а в последнем равенстве воспользовались тем, что интеграл от дивергенции во многих случаях оказывается нулевым (см., например, [21], [30]), и применили тождество (39).

Определим пространство $I \subset {}_{\xi}L^2(\mathbb{R}^n)$ линейных законов сохранения уравнения неразрывности (37) как пространство линейных функционалов, сохраняющихся в силу (37):

$$I \equiv \{q \in {}_{\xi}L^2(\mathbb{R}^n) : \text{скалярное произведение } (q, f(t, \cdot))_{\xi} \text{ не зависит от времени на решениях } f(t, \mathbf{x}) \text{ уравнения (35)}\}.$$

Рассмотрим задачу Коши для (37) с положительными начальными условиями $f(0)$ из ${}_{\xi}L^2(\mathbb{R}^n)$. Рассмотрим экстремаль Больцмана $f^B = f^B(f(0))$ как

функцию, где достигается максимум энтропии (43) при фиксированных законах сохранения:

$$S(f^B) = \max S(h)$$

на множестве

$$L(I, f(0)) = \{h \in {}_\xi L^2(\mathbb{R}^n) : h(\mathbf{x}) \geq 0 \text{ и } (q, h - f(0))_\xi = 0 \text{ для всех } q \text{ из } I\}.$$

Справедлива следующая теорема.

ТЕОРЕМА 5.1. Пусть на множестве $L(I, f(0))$ энтропия (43) непрерывна, ограничена сверху, и если $L(I, f(0))$ неограничено, то

$$\lim_{\substack{\|f\|_{\xi L^2} \rightarrow +\infty \\ f \in L(I, f(0))}} S(f) = -\infty.$$

Тогда:

- (а) экстремаль Больцмана существует и единственна на $L(I, f(0))$;
- (б) среднее Чезаро и экстремаль Больцмана совпадают:

$$f^C = f^B. \quad (44)$$

В качестве функционала энтропии, удовлетворяющего условию теоремы, можно взять функционал (43) с $\phi(h) = -h^2$, т.е. “минус квадрат нормы” в ${}_\xi L^2$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Норма, порождаемая скалярным произведением (42) гильбертова пространства ${}_\xi L^2$, получается, если взять корень из “минус энтропии (43)” при $\phi(h) = -h^2$. В силу того, что энтропия сохраняется, эта норма также сохраняется на решениях, т.е. при действии оператора (41). Значит, оператор (41), действуя на функцию из ${}_\xi L^2$, снова дает функцию из ${}_\xi L^2$, и его норма в ${}_\xi L^2$ равна единице. Применив теорему из [10] или [11] для этого линейного оператора, получаем теорему 5.1.

Отметим, что в формуле (44) правая часть зависит от функционала (43), а левая не зависит. Напротив, левая часть зависит от оператора (41), а правая зависит от него только через законы сохранения и свойство неубывания функционала (43). Отсюда следует, что экстремаль Больцмана не зависит от того, какая строго вогнутая функция ϕ берется в функционале (43). Это также поясняют следующие теоремы, дающие явный вид экстремали Больцмана.

Введем понятие функционального базиса в некотором подпространстве M пространства ${}_\xi L^2(\mathbb{R}^n)$: $M \subseteq {}_\xi L^2(\mathbb{R}^n)$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 5.1. Функциональным базисом в подпространстве M пространства ${}_\xi L^2(\mathbb{R}^n)$ будем называть конечный набор функций

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) \equiv \{q_1(\mathbf{x}), q_2(\mathbf{x}), \dots, q_k(\mathbf{x})\}, \\ q_i(\mathbf{x}) \in M \subseteq {}_\xi L^2(\mathbb{R}^n) \quad \text{для всех } i = 1, 2, \dots, k,$$

такой, что каждая функция $g(\mathbf{x})$ из M ($g(\mathbf{x}) \in M \subseteq {}_\xi L^2(\mathbb{R}^n)$) выражается через некоторую функцию λ с зависимостью вида $\xi\lambda(q_1/\xi, q_2/\xi, \dots, q_k/\xi)$ от этих k элементов функционального базиса и стационарного решения ξ , т. е.

$$g(\mathbf{x}) \equiv \xi(\mathbf{x})\lambda\left(\frac{q_1(\mathbf{x})}{\xi(\mathbf{x})}, \frac{q_2(\mathbf{x})}{\xi(\mathbf{x})}, \dots, \frac{q_k(\mathbf{x})}{\xi(\mathbf{x})}\right).$$

Сформулируем сначала теорему о явном виде экстремали по Больцману в бездивергентном случае, т. е. когда $\xi \equiv 1$.

ТЕОРЕМА 5.2. Пусть в бездивергентном случае выполнены условия теоремы 5.1 и существует функциональный базис гладких линейных законов сохранения, т. е. функциональный базис из k функций: $\mathbf{q}(\mathbf{x}) \equiv \{q_1(\mathbf{x}), q_2(\mathbf{x}), \dots, q_k(\mathbf{x})\}$, в пространстве линейных законов сохранения $I \subseteq L^2(\mathbb{R}^n)$, причем $q_i(\mathbf{x}) \in C^1(\mathbb{R}^n)$ для всех $i = 1, 2, \dots, k$. Тогда экстремаль Больцмана (которая существует, единственна и совпадает с временным средним по теореме 5.1 при $\xi = 1$) имеет вид

$$f^B(\mathbf{x}) = \frac{1}{N(\mathbf{x})} \int f(0, \mathbf{q}(\mathbf{x}), \psi) J(\mathbf{q}(\mathbf{x}), \psi) d\psi, \quad (45)$$

где

$$N(\mathbf{x}) \equiv \int J(\mathbf{q}(\mathbf{x}), \psi) d\psi,$$

$\psi(\mathbf{x}) \equiv \{\psi_1(\mathbf{x}), \psi_2(\mathbf{x}), \dots, \psi_{n-k}(\mathbf{x})\}$ – гладкие координаты, т. е. $\psi_i(\mathbf{x}) \in C^1(\mathbb{R}^n)$ для всех $i = 1, 2, \dots, n-k$, на множествах точек $\mathbf{x}$ таких, что $\mathbf{q}(\mathbf{x}) = \text{const}$, причем совокупность $(\mathbf{q}, \psi)$ дает гладкую систему координат в $\mathbb{R}^n$, $J(\mathbf{q}, \psi)$ – якобиан перехода к этой системе координат, $f(0, \mathbf{q}, \psi)$ – начальные данные, выраженные через координаты $(\mathbf{q}, \psi)$.

Эта теорема является частным случаем следующей.

ТЕОРЕМА 5.3. Пусть выполнены условия теоремы 5.1 и существует функциональный базис гладких линейных законов сохранения, т. е. функциональный базис из k функций: $\mathbf{q}(\mathbf{x}) \equiv \{q_1(\mathbf{x}), q_2(\mathbf{x}), \dots, q_k(\mathbf{x})\}$, в пространстве линейных законов сохранения $I \subseteq {}_\xi L^2(\mathbb{R}^n)$, причем $q_i(\mathbf{x})/\xi(\mathbf{x}) \in C^1(\mathbb{R}^n)$ для всех $i = 1, 2, \dots, k$. Тогда экстремаль Больцмана (которая существует, единственна и совпадает с временным средним по теореме 5.1) имеет вид

$$f^B(\mathbf{x}) = \frac{1}{N(\mathbf{x})} \xi(\mathbf{x}) \int f\left(0, \frac{\mathbf{q}(\mathbf{x})}{\xi(\mathbf{x})}, \psi\right) J\left(\frac{\mathbf{q}(\mathbf{x})}{\xi(\mathbf{x})}, \psi\right) d\psi, \quad (46)$$

где

$$N(\mathbf{x}) \equiv \int \xi\left(\frac{\mathbf{q}(\mathbf{x})}{\xi(\mathbf{x})}, \psi\right) J\left(\frac{\mathbf{q}(\mathbf{x})}{\xi(\mathbf{x})}, \psi\right) d\psi,$$

$\psi(\mathbf{x}) \equiv \{\psi_1(\mathbf{x}), \psi_2(\mathbf{x}), \dots, \psi_{n-k}(\mathbf{x})\}$ – гладкие координаты, т. е. $\psi_i(\mathbf{x}) \in C^1(\mathbb{R}^n)$ для всех $i = 1, 2, \dots, n-k$, на множествах $\mathbf{q}(\mathbf{x})/\xi(\mathbf{x}) = \text{const}$, причем совокупность $(\mathbf{q}/\xi, \psi)$ дает гладкую систему координат в $\mathbb{R}^n$, $J(\mathbf{q}/\xi, \psi)$ – якобиан перехода к этой системе координат, $f(0, \mathbf{q}/\xi, \psi)$ и $\xi(\mathbf{q}/\xi, \psi)$ – начальные данные и стационарное решение $\xi(\mathbf{x})$, выраженные через координаты $(\mathbf{q}/\xi, \psi)$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Применим теорему 5.1 и получим формулу для экстремали по Больцману:

$$f^B(\mathbf{x}) = \xi(\mathbf{x}) \cdot [\phi']^{-1} \left(\lambda \left(\frac{q_1(\mathbf{x})}{\xi(\mathbf{x})}, \frac{q_2(\mathbf{x})}{\xi(\mathbf{x})}, \dots, \frac{q_k(\mathbf{x})}{\xi(\mathbf{x})} \right) \right). \quad (47)$$

Определим $\lambda \left(\frac{q_1(\mathbf{x})}{\xi(\mathbf{x})}, \frac{q_2(\mathbf{x})}{\xi(\mathbf{x})}, \dots, \frac{q_k(\mathbf{x})}{\xi(\mathbf{x})} \right)$ из законов сохранения по начальным данным:

$$\int \xi(\mathbf{x}) \frac{\xi(\mathbf{x}) \gamma(\mathbf{q}(\mathbf{x})/\xi(\mathbf{x}))}{\xi(\mathbf{x})} \frac{f^B(\mathbf{x})}{\xi(\mathbf{x})} d\mathbf{x} = \int \xi(\mathbf{x}) \frac{\xi(\mathbf{x}) \gamma(\mathbf{q}(\mathbf{x})/\xi(\mathbf{x}))}{\xi(\mathbf{x})} \frac{f(0, \mathbf{x})}{\xi(\mathbf{x})} d\mathbf{x},$$

где $\xi(\mathbf{x}) \gamma(\mathbf{q}(\mathbf{x})/\xi(\mathbf{x}))$ – произвольная функция из ${}_{\xi}L^2(\mathbb{R}^n)$.

Переходя к координатам $(\mathbf{q}/\xi, \psi)$, с учетом (45) имеем:

$$\begin{aligned} & \int \gamma \left(\frac{\mathbf{q}}{\xi} \right) \cdot \xi \left(\frac{\mathbf{q}}{\xi}, \psi \right) \cdot [\phi']^{-1} \left(\lambda \left(\frac{\mathbf{q}}{\xi} \right) \right) \cdot J \left(\frac{\mathbf{q}}{\xi}, \psi \right) d \left(\frac{\mathbf{q}}{\xi} \right) d\psi \\ &= \int \gamma \left(\frac{\mathbf{q}}{\xi} \right) \cdot f \left(0, \frac{\mathbf{q}}{\xi}, \psi \right) \cdot J \left(\frac{\mathbf{q}}{\xi}, \psi \right) d \left(\frac{\mathbf{q}}{\xi} \right) d\psi. \end{aligned}$$

В силу произвольности функции γ получаем:

$$[\phi']^{-1} \left(\lambda \left(\frac{\mathbf{q}}{\xi} \right) \right) \cdot \int \xi \left(\frac{\mathbf{q}}{\xi}, \psi \right) J \left(\frac{\mathbf{q}}{\xi}, \psi \right) d\psi = \int f \left(0, \frac{\mathbf{q}}{\xi}, \psi \right) J \left(\frac{\mathbf{q}}{\xi}, \psi \right) d\psi,$$

откуда следует (46).

ПРИМЕР 5.1 [5], [6], [21], [31]. Одномерное движение частиц с заданной энергией. Рассмотрим динамическую систему

$$\frac{dx}{dt} = v, \quad \frac{dv}{dt} = -\frac{\partial U(x)}{\partial x}.$$

Соответствующее уравнение неразрывности имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial U}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial v} = 0. \quad (48)$$

Формула для экстремали Больцмана для уравнения (46) приводит нас к результату: $f^B = \exp(\lambda(H))$, где $H(x, v) = (v^2 + U(x))/2$ – энергия системы, $\lambda(H)$ – множитель Лагранжа – произвольная функция от энергии, которая определяется по начальным данным. Это, вообще говоря, неверно: см. уточнение ниже, в конце с. 71.

В случае гармонического осциллятора: $U = x^2$, решение уравнения неразрывности (48), как и решение исходной динамической системы, осциллирует со временем и не стремится к стационарному решению. Однако среднее по Чезаро совпадает с экстремалью по Больцману:

$$f^B(x, v) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(0, H, \psi) d\psi \Big|_{H=(v^2+x^2)/2}.$$

Здесь множитель Лагранжа уже найден по начальным данным, и это есть формула (45) для случая гармонического осциллятора. Якобиан перехода $J(H, \psi)$ к системе координат (H, ψ) равен единице, а нормировочный множитель N равен 2π .

ПРИМЕР 5.2 [21], [32]. *Уравнения геодезических и эволюция функции распределения на римановом многообразии.* Рассмотрим метрику $g_{ij} dx^i dx^j$ в пространстве $\mathbb{R}^n$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $g_{ij}(\mathbf{x}) - n^2$ функций. Это означает, что длина кривой определяется формулой

$$\int \sqrt{g_{ij} \dot{x}^i \dot{x}^j} dt,$$

а уравнение геодезических получается из принципа наименьшего действия (принципа наименьшей длины). Если, более общо, действие записывается в виде

$$S = \int L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) dt,$$

где L – лагранжиан, то уравнения Эйлера–Лагранжа

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^k} \right) = \frac{\partial L}{\partial x^k}, \quad k = 1, 2, \dots, n,$$

даются варьированием S с фиксированными концами траекторий. В случае геодезических $L = \sqrt{g_{ij} \dot{x}^i \dot{x}^j}$ имеем

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{g_{ki} \dot{x}^i}{\sqrt{g_{ij} \dot{x}^i \dot{x}^j}} \right) = \frac{1}{2\sqrt{g_{ij} \dot{x}^i \dot{x}^j}} \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^k} \dot{x}^i \dot{x}^j. \quad (49)$$

Функционал длины инвариантен относительно замены $t = \eta(\tau)$ для любой гладкой функции $\eta(\tau)$, и то же свойство имеют уравнения (49).

Этим свойством иногда распоряжаются так, чтобы максимально упростить уравнения. Выберем в качестве параметра τ длину линии (интервал, собственное время) s : $ds = \sqrt{g_{ij} dx^i dx^j}$, после деления на ds получим $\sqrt{g_{ij} \dot{x}^i \dot{x}^j} = 1$, и уравнения (49) превращаются в

$$\frac{d}{ds} (g_{ki} \dot{x}^i) = \frac{1}{2} \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^k} \dot{x}^i \dot{x}^j. \quad (50)$$

Последние совпадают с уравнениями Эйлера–Лагранжа для действия с лагранжианом $L = g_{ij} \dot{x}^i \dot{x}^j / 2$.

Преобразуем их к виду:

$$\begin{aligned} \dot{x}^k &= v^k, \\ v^k &= -\Gamma_{lm}^k \dot{x}^l \dot{x}^m. \end{aligned} \quad (51)$$

Здесь

$$\Gamma_{lm}^k = \frac{g^{ki}}{2} \left(\frac{\partial g_{il}}{\partial x^m} + \frac{\partial g_{mi}}{\partial x^l} - \frac{\partial g_{lm}}{\partial x^i} \right)$$

– символы Кристоффеля, а g^{kl} – матрица, обратная к g_{ij} .

Уравнение неразрывности для функции распределения $f(s, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ по пространству и скоростям (с длиной вместо времени) для системы (51) имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial s} + v^i \frac{\partial f}{\partial x^k} - \Gamma_{ij}^l v^i v^j \frac{\partial f}{\partial v^l} - f \frac{\partial}{\partial v^l} (\Gamma_{ij}^l v^i v^j) = 0. \quad (52)$$

Последний член в левой части соответствует тому, что система (51) имеет дивергенцию, отличную от нуля. Переход к бездивергентному виду можно осуществить двумя способами.

Способ 1: переход к переменным координата-импульс и гамильтонов формализм. Введем стандартным образом импульсы. Если $L = g_{ij} \dot{x}^i \dot{x}^j / 2$ (этот лагранжиан дает те же уравнения движения, что и $L = \sqrt{g_{ij} \dot{x}^i \dot{x}^j}$), то импульсы суть $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^i} = g_{ij} \dot{x}^j$, а гамильтониан таков: $H = p_i v^i - L = p_i p_j g^{ij} / 2$. Тогда уравнения (50) приобретают гамильтонов вид:

$$\begin{aligned} \frac{dx^j}{ds} &= g^{jl} p_l, \\ \frac{dp_k}{ds} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial g^{ij}}{\partial x^k} p_i p_j. \end{aligned}$$

Для любой гамильтоновой системы

$$\begin{aligned} \dot{x}^i &= \frac{\partial H}{\partial p_i}, \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial x^i} \end{aligned}$$

дивергенция равна $\frac{\partial^2 H}{\partial x^i \partial p_i} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial x^i} = 0$.

Получаем уравнение Лиувилля для функции распределения $f(s, \mathbf{x}, \mathbf{p})$ по координатам и импульсам:

$$\frac{\partial f}{\partial s} + g^{kr} p_r \frac{\partial f}{\partial x^k} - \frac{1}{2} \frac{\partial g^{ir}}{\partial x^k} p_i p_r \frac{\partial f}{\partial p_k} = 0.$$

Способ 2: переход к инвариантной мере в пространстве координаты-скорости. Пусть g – определитель матрицы g_{ij} . $g(\mathbf{x})$ – стационарное решение уравнения (52), и его можно взять в качестве $\xi(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ в теореме 5.1, если $g(\mathbf{x}) > 0$ ($\xi(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = -g(\mathbf{x})$, если $g(\mathbf{x}) < 0$). Следовательно, для функции распределения $F(s, \mathbf{x}, \mathbf{v}) = f(s, \mathbf{x}, \mathbf{v})/g$ уравнение эволюции бездивергентно и имеет вид

$$\frac{\partial F}{\partial s} + v^i \frac{\partial F}{\partial x^k} - \Gamma_{ij}^l v^i v^j \frac{\partial F}{\partial v^l} = 0.$$

Возникает следующий вопрос: для каких метрик $g_{ij} dx^i dx^j$ выполнены условия теоремы 5.3, т.е. когда интегралы из $_{\xi} L^2$ являются функциями гладких интегралов? И тот же самый вопрос для гамильтоновых систем и бездивергентных. Примером, когда базис линейных интегралов в L^2 не состоит из гладких функций, является одномерная гамильтонова система с потенциалом

с более чем одним минимумом. Например, для гамильтониана $H = p^2/2 + \sin x$ имеется счетное число кусочно постоянных линейно независимых интегралов. Интересно сравнить формулу (45) с принципом Гиббса [8]. $e^{-\beta H}$ появляется, когда идет обмен энергией с термостатом: единственный закон сохранения – энергия – навязывается системе именно термостатом. Интересно получить обобщение формулы (46) на случай, когда стационарные решения сингулярны, и выяснить, как там работает экстремаль Больцмана в условиях эргодической теоремы Крылова–Боголюбова [33], [34]. Например, для уравнения $\dot{x} = \sin x$ стационарные решения уравнения Лиувилля – это сумма δ -функций:

$$f^B(x) = \left[\sum_i \delta(x - x_i) \right] \exp \left(\sum_i \lambda_i 1_{A_i}(x) \right).$$

Здесь $x_i = (2i + 1)\pi$ – устойчивые стационарные точки, A_i есть множество точек, сходящихся к x_i : $(2\pi i, (2i + 2)\pi)$, $1_A(x)$ – индикатор множества A , λ_i – множители Лагранжа. Первый множитель $\sum_i \delta(x - x_i)$ – это некоторое стационарное решение $\xi(x)$. В качестве линейных инвариантов для уравнения неразрывности следует брать интегралы

$$\int_{A_i} f(t, x) dx,$$

которые определяют множители Лагранжа. Тогда

$$f^B(x) = \sum_i \delta(x - x_i) \int_{A_i} f(0, x) dx.$$

Еще одно возможное приложение – это эргодическая гипотеза [35]. Например, для твердых шаров в ящике – это старая проблема о том, что при времени, стремящемся к бесконечности, функция распределения сходится к функции от энергии. Тут две проблемы – доказать, что сходимость есть, и вычислить предел. Теоремы типа Пуанкаре–Козлова–Трещёва [4]–[6] решают первую из них. Из теорем работ [10], [11] следует, что этот предел зависит только от интегралов – шажок в решении именно второй проблемы. Теперь задача сведена к рассмотрению интегралов, т. е. достаточно исследовать стационарное уравнение Лиувилля. Надо добавить граничное условие зеркального отражения на границе области и доказать, что решение такой граничной задачи в L^2 является функцией только кинетической энергии. Такая редукция к описанию множества интегралов в эргодической проблеме возможна и для других уравнений с помощью теорем из работ [10], [11] и настоящего раздела.

При решении уравнения неразрывности должны выполняться как минимум два свойства: положительность плотности и сохранение числа частиц. При дискретизации уравнения Лиувилля по фазовым переменным мы должны получить линейную систему обыкновенных дифференциальных уравнений с теми же свойствами. Поэтому матрица системы будет стохастической, и система будет представлять собой марковский процесс (или основное уравнение Паули, как его называют в физике). Но такая система дает сходимость к равновесию, так как для нее справедлива H -теорема, хотя исходное уравнение вроде

бы не имеет равновесия. Периодические траектории как бы совсем теряются – в этом смысле труднее всего моделировать уравнение Лиувилля для осциллятора. Дальнейшая дискретизация времени дает марковскую цепь и возвращает периодические траектории. Итак, во-первых, поведение решений всех трех объектов сходно: среднее по Чезаро совпадает с экстремалью по Больцману, а ключевую роль здесь играют линейные законы сохранения, поскольку именно они определяют стационарные решения (экстремали по Больцману). Во-вторых, уравнение Лиувилля и уравнения марковских процессов и марковских цепей – это просто разные модели, и в какой-то мере проясняются парадоксы необратимости: может оказаться, что наш мир дискретен, так как частицы рождаются и уничтожаются, а это и есть эволюция, а уравнения движения типа Ньютона и Лиувилля есть лишь приближенное описание этого. В-третьих, теоремы о слабой сходимости (Пуанкаре–Козлова–Трещёва) “дают свет в конце туннеля”. Эта фраза была написана в книге одного из авторов [30], и В. В. Козлов отреагировал на нее следующим образом [36; с. 19]:

“... В связи с обсуждаемыми вопросами В. В. Веденяпин заметил: ‘Теорема о слабой сходимости (Пуанкаре–Козлова) и ее недоказанные (и недоформулированные) обобщения дают свет в конце туннеля’ [30]. Одна из целей настоящей работы – доформулировать соответствующие обобщения».

Удивительно, что проблемы, которые В. В. Козлов сформулировал и начал решать в книге [36], лишь частично и в малой степени пересекаются с проблемами автора этого замечания, как хорошо видно из сравнения даже настоящего обзора и этой книги. Это вселяет надежду на дальнейшее развитие.

Под слабой сходимостью понимается сходимость для произвольного линейного функционала с произвольной пробной функцией. Это соответствует сходимости для измеримой величины. Но к чему сходится решение уравнения неразрывности? Неявно предполагается, что оно стремится к некоторому решению стационарного уравнения неразрывности. Для каких систем это справедливо? К которому из решений оно стремится? Это очень интересовало А. Пуанкаре, и в работе [4] 1906 г. он обосновывает сходимость для ансамбля частиц в прямоугольном ящике (простейшего бильярда). На современном языке это было сделано В. В. Козловым и Д. В. Трещёвым [5], [6] для случая произвольных гамильтоновых систем. Итак, оказывается, что мы должны взять среднее от начальной функции распределения при фиксированных интегралах движения системы. Тогда получается функция, зависящая только от интегралов – она и оказывается предельной при времени, стремящемся к бесконечности. Этот ответ о сходимости (вопрос о характере сходимости – слабой или по Чезаро – конечно, не обсуждался) был известен физикам и до работ [5], [6] – он был объяснен (но не доказан) на примере частиц с одной степенью свободы [31; с. 100–112]. “Частицы различных энергий имеют различные периоды ‘колебаний’. После нескольких колебаний частицы разных энергий окажутся в разных местах, с течением времени пакет расплывается, ансамбль приблизится к стационарному”. Тут же отмечается, что в случае гармонического осциллятора “период колебаний не зависит от энергии. Даже пакет с различными энергиями не расплывается” [31; с. 112]. Стационарной оказывается функция

распределения, зависящая только от энергии – единственного интеграла системы (см. пример 5.1). Для уравнения неразрывности такой интеграл является линейным по функции распределения. И вообще, любой интеграл исходной динамической системы дает линейный интеграл для уравнения неразрывности – этим и выделяются линейные функционалы для уравнения неразрывности. Именно через них выражается асимптотическая стационарная функция распределения в теоремах о слабой сходимости.

Тема энтропии, как отмечалось во введении, фундаментальна, но в связи с приложениями к любому уравнению Лиувилля (теоремы типа Пуанкаре–Козлова–Трещёва и экстремали Больцмана) она приобретает суперфундаментальный характер как для обоснования подхода Гиббса (и ясных обобщений), так и для общепhilosophических вопросов. Академик В. В. Струминский в 1989 г., глядя пристально, сказал: “Ты же понимаешь, что Бог есть. Да, ты же занимался вторым законом термодинамики”. Разрушительные действия роста энтропии видны на примере всех соседних планет, а также на всей Вселенной: каждая живая клетка сложнее, чем вся взвешенная Вселенная. Это сходно с доказательством Эйлера в публичном споре с Дидро: “ $e^{2\pi i} = 1$, следовательно, Бог существует. Отвечайте”. Это немного эпатажное “доказательство” Эйлера математически воспроизводит рассуждение философов “Посмотри, как прекрасно, гармонично, просто и одновременно сложно устроен мир. Можно ли его получить случайным ‘столкновением атомов’?” Рост энтропии и совпадение временного среднего с экстремалью по Больцману для любого уравнения Лиувилля любой динамической системы показывает, что в любом процессе происходит гигантская потеря информации (до постоянных законов сохранения Больцмана–Орлова–Мозера–Брюно). С одной стороны, это и обосновывает устойчивость этих процессов. С другой стороны, разрушительные действия энтропии налицо. Посмотрите на Марс и Венеру, а на Земле происходит нечто более сложное и необычное. Интересны рассуждения Роджера Пенроуза и Вахи Гурзадяна о начале Вселенной, которые они тоже связывают с ростом энтропии [37].

ПРИМЕР 5.3 [38], [5], [11]. *Круговая модель Марка Каца и парадоксы Лошмидта и Цермело–Пуанкаре.* Круговая модель Марка Каца представляет собой некоторую модель уравнения переноса частиц или излучения. Пусть есть правильный многоугольник с n вершинами. Отметим некоторое произвольное фиксированное их множество – множество вершин рассеивателей, которое обозначим через S . Пусть количество рассеивателей равно m . В каждую из n вершин помещается шарик: черный или белый. Перейдем теперь к динамике этой модели. В течение каждой единицы времени $t = 0, 1, 2, \dots$ система шаров поворачивается на угол $2\pi/n$ против часовой стрелки вокруг центра многоугольника – каждый шарик движется на один шаг против часовой стрелки – со следующим условием: шарик, содержащийся в множестве S , изменяет свой цвет: черный становится белым, а белый – черным. Если же шарик не принадлежал S , то он сохраняет свой цвет. Получается некоторая модель переноса частиц, где S – это некоторое множество-рассеиватель.

Марк Кац, предложив в своей книге [38] эту модель, обсуждал на ее примере парадоксы обратимости Лошмидта и возврата Цермело–Пуанкаре, которые

мы формулировали во введении настоящего обзора. Эта модель со свойствами возвращаемости и обратимости, но для уравнения Лиувилля с дискретным временем (или марковской цепи) для круговой модели Марка Каца энтропия среднего по Чезаро оказывается больше энтропии начального распределения. Этим она привлекла В.В. Козлова [5], и на основе его работ возникла задача о вычислении размерности пространства линейных законов сохранения для модели Марка Каца, которая дает нам размерность пространства стационарных решений в силу теоремы о совпадении средних по Чезаро с экстремальными по Больцману. Эта задача была решена в работе авторов [11] – был получен ответ для произвольных значений n и m , который оказался связанным с малой теоремой Ферма и теоремой Эйлера из теории чисел.

Здесь же мы рассмотрим самый простой пример круговой модели Марка Каца, который демонстрирует все перечисленные свойства общего случая: обратимость, возвращаемость и рост энтропии для временного среднего. Пусть $n = 1$ и $m = 1$. Тогда модель Марка Каца будет представлять собой один единственный шар, который в каждый момент времени меняет свой цвет. У системы будет два состояния – шар либо черный, либо белый, и система будет возвращаться в исходное состояние за два шага. Пусть $f_1(t)$ – число систем с черным шаром, а $f_2(t)$ – число систем с белым шаром в момент времени t . Тогда марковская цепь будет иметь вид

$$\begin{aligned} f_1(t+1) &= f_2(t), \\ f_2(t+1) &= f_1(t), \end{aligned} \tag{53}$$

ее матрица

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

есть матрица осевой симметрии относительно прямой: $f_1 = f_2$, и эта прямая соответственно является множеством стационарных точек (рис. 1).

Рис. 1

Эта система, как и общий случай марковской цепи для модели Марка Каца, не дает сходимости к стационарному решению – она поочередно принимает состояния 1 и 2. Но есть сходимость в смысле среднего по Чезаро, которое совпадает с экстремалью по Больцману, и является точкой 3 на рисунке:

$$\left(\frac{f_1(0) + f_2(0)}{2}, \frac{f_1(0) + f_2(0)}{2} \right).$$

В рассматриваемом примере есть только один линейный инвариант: $f_1(t) + f_2(t)$, линия уровня которого изображена на рис. 1. А кривые – это линии уровня сохраняющейся стандартной больцмановской энтропии:

$$S = -f_1(t) \ln f_1(t) - f_2(t) \ln f_2(t).$$

Из рисунка мы видим, что здесь энтропия среднего по Чезаро больше либо равна энтропии начального распределения. Причем равенство достигается, только если начальное распределение было стационарной точкой – средней точкой (точка 3 на рис. 1).

В этом примере налицо возвращаемость Пуанкаре за два шага, но наблюдатель видит при быстрых колебаниях только среднюю точку (разрешение парадокса Цермело–Пуанкаре). Цермело пишет в статье [39]: “Мы доказали теорему Пуанкаре вполне общим образом... Из этого непосредственно следует, что не может существовать однозначной непрерывной функции состояния $S = S(x_1, x_2, \dots, x_n)$, которая всегда возрастает для всех начальных состояний в некоторой области” (с. 440 в переводе трудов Больцмана [39]) и “Далее необходимо существенно иным образом сформулировать либо принцип Карно–Клаузиуса, либо саму механическую теорию, или даже решиться совершенно отказаться от этой теории” (с. 443 в [39]). Мы видим, что сам Пуанкаре не отказался от механической теории, но решительно пересмотрел в 1906 г. именно теорему о возрастании энтропии. Модель примера 5.3, несомненно, обратима, но поскольку в ней есть сходимости по Чезаро (при быстрых колебаниях наблюдатель видит только среднюю точку), то мы имеем разрешение парадокса Лошмидта [40]. “Очевидно, во всякой произвольной системе будет обращен весь ход событий, если мгновенные скорости всех частиц примут противоположные направления” (проецировано по русскому переводу “Л. Больцман. Избранные труды” [40; с. 428]). Как эта обратимость механики совмещается с ростом энтропии? Марковская цепь (53) (рис. 1) – обратимая система: обращение по времени дает те же траектории. А энтропия временного среднего больше, чем энтропия начального распределения. Это пример с дискретным временем, а обычный осциллятор с гамильтонианом $H = p^2/2 + x^2$ дает пример с непрерывным временем. Здесь сам гамильтониан с обратным знаком выступает в качестве энтропии Пуанкаре–Козлова–Трещёва: он сохраняется во времени, а его значение на временном среднем (которое совпадает с экстремалью Больцмана и является началом координат) больше значения в начальное время или равно ему. Так что и парадокс обратимости Лошмидта, и парадокс возврата Пуанкаре проясняются в чистом виде на примере осциллятора и марковской цепи (53).

6. Заключение

Проблема построения H -функции (т. е. убывающего функционала с доказательством H -теоремы) для квантовых случайных блужданий, для которых не выполняется обобщенное условие детального баланса (35), остается открытой.

В работах А. Пуанкаре [4], В. В. Козлова и Д. В. Трещёва [5], [6] рассматривается новая форма H -теоремы. Она справедлива для уравнения Лиувилля и его обобщений (см. [4]–[6], [10], [11] и раздел 5 настоящей работы). Понятие

экстремали Больцмана там тоже работает (см. [10], [11] и раздел 5 настоящей работы): она совпадает с временным средним (средним по Чезаро, чезаровским средним), и это делает его общематематическим и фундаментальным и как метод поиска стационарных решений широкого класса уравнений (как линейных типа уравнения Лиувилля, так и нелинейных), и как широкое обобщение понятия энтропии.

Представляет интерес обобщение полученных результатов на нелинейные системы с дискретным временем, в частности, даже построение дискретных моделей уравнения Больцмана с дискретным временем и перенесение условия Штюкельберга–Батицовой–Пирогова [23], [27], [28], [41] на дискретное время.

Другие новые задачи – это обобщение теорем о совпадении временного среднего с экстремалью по Больцману (см. [7], [8] и раздел 5 настоящей работы) на случай уравнения Лиувилля, когда отсутствует инвариантная мера, и на нелинейный случай: на уравнения типа уравнения Власова.

Список литературы

- [1] Л. Больцман, “Дальнейшие исследования теплового равновесия между молекулами газа”, *Избранные труды*, Наука, М., 1984, 125–189; пер. с нем.: L. Boltzmann, “Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen”, *Wien. Ber.*, **66** (1872), 275–370; *Wissenschaftliche Abhandlungen*, v. 1, Barth, Leipzig, 1909, 316–402.
- [2] С. К. Годунов, У. М. Султангазин, “О дискретных моделях кинетического уравнения Больцмана”, *УМН*, **26:3**(159) (1971), 3–51; англ. пер.: S. K. Godunov, U. M. Sultangazin, “On discrete models of the kinetic Boltzmann equation”, *Russian Math. Surveys*, **26:3** (1971), 1–56.
- [3] Л. Больцман, “О связи между вторым началом механической теории теплоты и теорией вероятностей в теоремах о тепловом равновесии”, *Избранные труды*, Наука, М., 1984, 190–235; пер. с нем.: L. Boltzmann, “Über die Beziehung zwischen dem zweiten Hauptsatze der Mechanischen Wärmetheorie und der Wahrscheinlichkeitsrechnung, respektive den Sätzen über das Wärmegleichgewicht”, *Wien. Ber.*, **76** (1878), 373–435; *Wissenschaftliche Abhandlungen*, v. 2, Barth, Leipzig, 1909, 164–223.
- [4] А. Пуанкаре, “Замечания о кинетической теории газов”, *Избранные труды*, т. 3, Наука, М., 1974, 385–412; пер. с фр.: H. Poincaré, “Réflexions sur la théorie cinétique des gaz”, *J. Phys. Théoret. Appl.*, **5** (1906), 369–403; *Œuvres*, v. IX, Gauthier-Villars, Paris, 1954, 587–619.
- [5] В. В. Козлов, *Тепловое равновесие по Гиббсу и Пуанкаре*, Институт компьютерных исследований, М.–Ижевск, 2002, 320 с.
- [6] В. В. Козлов, Д. В. Трещев, “Слабая сходимостъ решений уравнения Лиувилля для нелинейных гамильтоновых систем”, *ТМФ*, **134:3** (2003), 388–400; англ. пер.: V. V. Kozlov, D. V. Treshev, “Weak convergence of solutions of the Liouville equation for nonlinear Hamiltonian systems”, *Theoret. and Math. Phys.*, **134:3** (2003), 339–350.
- [7] Л. Больцман, “Исследование равновесия живой силы между движущимися материальными точками”, *Избранные труды*, М., 1984, 30–66; пер. с нем.: L. Boltzmann, “Studien über das Gleichgewicht der lebendigen Kraft zwischen bewegten materiellen Punkten”, *Wien. Ber.*, **58** (1868), 517–560; *Wissenschaftliche Abhandlungen*, v. 1, Barth, Leipzig, 1909, 49–96.

- [8] Дж. У. Гиббс, *Основные принципы статистической механики, излагаемые со специальным применением к рациональному обоснованию термодинамики*, НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, М., 2002, 204 с.; пер. с англ.: J. W. Gibbs, *Elementary principles in statistical mechanics: developed with especial reference to the rational foundation of thermodynamics*, Charles Scribners Sons, New York; Edward Arnold, London, 1902, xviii+207 pp.
- [9] Дж. К. Максвелл, “По поводу теоремы Больцмана о нормальном распределении энергии в системе материальных точек”, *Труды по кинетической теории*, Бинном. Лаборатория знаний, М., 2011, 321–351; пер. с англ.: J. C. Maxwell, “On Boltzmann’s theorem on the average distribution of energy in a system of material points”, *Trans. Cambridge Philos. Soc.*, **12** (1879), 547–570.
- [10] В. В. Веденяпин, “Временные средние и экстремали по Больцману”, *Докл. РАН*, **422**:2 (2008), 161–163; англ. пер.: V. V. Vedenyapin, “Time averages and Boltzmann extremals”, *Dokl. Math.*, **78**:2 (2008), 686–688.
- [11] С. З. Аджиев, В. В. Веденяпин, “Временные средние и экстремали Больцмана для марковских цепей, дискретного уравнения Лиувилля и круговой модели Каца”, *Журн. вычисл. матем. и матем. физ.*, **51**:11 (2011), 2063–2074; англ. пер.: S. Z. Adzhiev, V. V. Vedenyapin, “Time averages and Boltzmann extremals for Markov chains, discrete Liouville equations, and the Kac circular model”, *Comput. Math. Math. Phys.*, **51**:11 (2011), 1942–1952.
- [12] Ф. Рисс, Б. Сёкефальви-Надь, *Лекции по функциональному анализу*, 2-е изд., Мир, М., 1979, 589 с.; пер. с фр.: F. Riesz, B. Sz.-Nagy, *Leçons d’analyse fonctionnelle*, 4ème éd., Gauthier-Villars, Paris; Akadémiai Kiadó, Budapest, 1965, viii+490 pp.
- [13] В. В. Веденяпин, Ю. Н. Орлов, “О законах сохранения для полиномиальных гамильтонианов и для дискретных моделей уравнения Больцмана”, *ТМФ*, **121**:2 (1999), 307–315; англ. пер.: V. V. Vedenyapin, Yu. N. Orlov, “Conservation laws for polynomial Hamiltonians and for discrete models of the Boltzmann equation”, *Theoret. and Math. Phys.*, **121**:2 (1999), 1516–1523.
- [14] Ю. Мозер, *Лекции о гамильтоновых системах*, Мир, М., 1973, 168 с.; пер. с англ.: J. K. Moser, “Lectures on Hamiltonian systems”, *Mem. Amer. Math. Soc.*, 1968, № 81, 60 pp.
- [15] А. Д. Брюно, *Ограниченная задача трех тел. Плоские периодические орбиты*, Наука, М., 1990, 296 с.; англ. пер.: A. D. Bruno, *The restricted 3-body problem: plane periodic orbits*, de Gruyter Exp. Math., **17**, Walter de Gruyter & Co., Berlin, 1994, xiv+362 pp.
- [16] S. Kullback, R. A. Leibler, “On information and sufficiency”, *Ann. Math. Statist.*, **22**:1 (1951), 79–86.
- [17] И. Н. Санов, “О вероятности больших отклонений случайных величин”, *Матем. сб.*, **42(84)**:1 (1957), 11–44.
- [18] Н. Н. Ченцов, “Несимметричное расстояние между распределениями вероятностей, энтропия и теорема Пифагора”, *Матем. заметки*, **4**:3 (1968), 323–332; англ. пер.: N. N. Chentsov, “Nonsymmetrical distance between probability distributions, entropy and the theorem of Pythagoras”, *Math. Notes*, **4**:3 (1968), 686–691.
- [19] T. Morimoto, “Markov processes and the H -theorem”, *J. Phys. Soc. Japan*, **18**:3 (1963), 328–331.
- [20] I. Csiszár, “Eine informationstheoretische Ungleichung und ihre Anwendung auf den Beweis der Ergodizität von Markoffschen Ketten”, *Magyar Tud. Akad. Mat. Kutató Int. Közl.*, **8** (1963), 85–108.
- [21] В. В. Веденяпин, *Кинетические уравнения Больцмана и Власова*, Физматлит, М., 2001, 112 с.

- [22] А. И. Вольперт, С. И. Худяев, *Анализ в классах разрывных функций и уравнения математической физики*, Наука, М., 1975, 394 с.; англ. пер.: A. I. Vol'pert, S. I. Hudjaev, *Analysis in classes of discontinuous functions and equations of mathematical physics*, Mech. Anal., **8**, Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht, 1985, xviii+678 pp.
- [23] Я. Г. Батищева, В. В. Веденяпин, “II-й закон термодинамики для химической кинетики”, *Матем. моделирование*, **17**:8 (2005), 106–110.
- [24] В. В. Веденяпин, И. В. Мингалев, О. В. Мингалев, “О дискретных моделях квантового уравнения Больцмана”, *Матем. сб.*, **184**:11 (1993), 21–38; англ. пер.: V. V. Vedenyapin, I. V. Mingalev, O. V. Mingalev, “On discrete models of the quantum Boltzmann equation”, *Russian Acad. Sci. Sb. Math.*, **80**:2 (1995), 271–285.
- [25] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Краткий курс теоретической физики*, т. 2: *Квантовая механика*, Наука, М., 1972, 368 с.; англ. пер.: L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *A shorter course of theoretical physics*, v. 2: *Quantum mechanics*, Pergamon Press, Oxford–New York–Toronto, ON, 1974, xii+369 pp.
- [26] Т. Карлеман, *Математические задачи кинетической теории газов*, ИЛ, М., 1960, 124 с.; пер. с фр.: T. Carleman, *Problèmes mathématiques dans la théorie cinétique des gaz*, Publ. Sci. Inst. Mittag-Leffler, **2**, Almqvist & Wiksells Boktryckeri Ab, Uppsala, 1957, 112 pp.
- [27] Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Теоретическая физика*, т. X: *Физическая кинетика*, Наука, М., 1979, 528 с.; нем. пер.: E. M. Lifschitz, L. P. Pitajewski, *Lehrbuch der theoretischen Physik* (“Landau–Lifshits”), v. X: *Physikalische Kinetik*, Akademie-Verlag, Berlin, 1983, xiv+480 pp.
- [28] В. А. Мальшев, С. А. Пирогов, “Обратимость и необратимость в стохастической химической кинетике”, *УМН*, **63**:1(379) (2008), 3–36; англ. пер.: V. A. Malyshev, S. A. Pirogov, “Reversibility and irreversibility in stochastic chemical kinetics”, *Russian Math. Surveys*, **63**:1 (2008), 1–34.
- [29] К. Иосида, *Функциональный анализ*, Мир, М., 1967, 624 с.; пер. с англ.: K. Yosida, *Functional analysis*, Grundlehren Math. Wiss., **123**, Springer-Verlag, Berlin, 1965, xi+458 pp.
- [30] В. В. Веденяпин, *Кинетическая теория по Максвеллу, Больцману и Власову*, МГОУ, М., 2005.
- [31] Я. Б. Зельдович, А. Д. Мышкис, *Элементы математической физики. Среда из невзаимодействующих частиц*, Наука, М., 1973, 351 с.
- [32] Б. А. Дубровин, С. П. Новиков, А. Т. Фоменко, *Современная геометрия. Методы и приложения*, М., Наука, 1979, 760 с.; англ. пер.: B. A. Dubrovin, A. T. Fomenko, S. P. Novikov, *Modern geometry – methods and applications*, Part I. The geometry of surfaces, transformation groups, and fields, Grad. Texts in Math., **93**, Springer-Verlag, New York, 1984, xv+464 pp.; Part II. The geometry and topology of manifolds, Grad. Texts in Math., **104**, 1985, xv+430 pp.
- [33] N. Kryloff, N. N. Bogoliouboff, “Les mesures invariantes et transitives dans la mécanique non linéaire”, *Матем. сб.*, **1(43)**:5 (1936), 707–710.
- [34] В. В. Немыцкий, В. В. Степанов, *Качественная теория дифференциальных уравнений*, ОГИЗ, М.–Л., 1947, 448 с.; англ. пер.: V. V. Nemytskii, V. V. Stepanov, *Qualitative theory of differential equations*, Princeton Math. Ser., **22**, Princeton Univ. Press, Princeton, NJ, 1960, viii+523 pp.
- [35] А. М. Вершик, И. П. Корнфельд, Я. Г. Синай, “Общая эргодическая теория групп преобразований с инвариантной мерой”, *Динамические системы – 2*, Итоги науки и техники. Сер. Соврем. пробл. матем. Фундам. направления, **2**, ВИНТИ, М., 1985, 5–111; англ. пер.: I. P. Kornfel'd, Ya. G. Sinai, A. M. Vershik, “General ergodic theory of groups of measure preserving transformations”, *Dynamical systems*. II, Encyclopaedia Math. Sci., **2**, Springer, Berlin, 1989, 1–98.

- [36] В. В. Козлов, *Ансамбли Гиббса и неравновесная статистическая механика*, Институт компьютерных исследований, М.–Ижевск, 2008, 208 с.
- [37] Р. Пенроуз, *Циклы времени. Новый взгляд на эволюцию Вселенной*, Бином. Лаборатория знаний, М., 2013, 336 с.; пер. с англ.: R. Penrose, *Cycles of time. An extraordinary new view of the universe*, Alfred A. Knopf, Inc., New York, 2010, xiv+288 pp.
- [38] М. Кац, *Несколько вероятностных задач физики и математики*, пер. с польск., Наука, М., 1967, 176 с.
- [39] Э. Цермело, “Об одной теореме динамики и о механической теории теплоты”, в кн.: Л. Больцман, *Избранные труды*, Наука, М., 1984, 437–444; пер. с нем.: E. Zermelo, “Ueber einen Satz der Dynamik und die mechanische Wärmetheorie”, *Ann. Phys.*, **57** (1896), 485–494.
- [40] И. Лошмидт, “О состоянии теплового равновесия в системе частиц с учетом силы тяжести”, в кн.: Л. Больцман, *Избранные труды*, Наука, М., 1984, 426–429; пер. с нем.: J. Loschmidt, “Ueber den Zustand des Wärmegleichgewichtes eines Systems von Körpern mit Rücksicht auf die Schwerkraft”, *Wien. Ber.*, **73**:2 (1876), 128–142.
- [41] А. В. Гасников, Е. В. Гасникова, “Об энтропийно-подобных функционалах, возникающих в стохастической химической кинетике при концентрации инвариантной меры и в качестве функций Ляпунова динамики квазисредних”, *Матем. заметки*, **94**:6 (2013), 819–827; англ. пер.: A. V. Gasnikov, E. V. Gasnikova, “On entropy-type functionals arising in stochastic chemical kinetics related to the concentration of the invariant measure and playing the role of Lyapunov functions in the dynamics of quasiaverages”, *Math. Notes*, **94**:6 (2013), 854–861.

Виктор Валентинович Веденяпин
(Victor V. Vedenyapin)

Институт прикладной математики
им. М. В. Келдыша РАН

E-mail: vicveden@yahoo.com, Vicveden@keldysh.ru,
Vicveden@kiam.ru

Поступила в редакцию
13.10.2013

Сергей Загирович Аджиев
(Sergej Z. Adzhiev)

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

E-mail: adzhiev@nm.ru