ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК, 2002, том 382, № 5, с. 602–605

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 531.19

ТЕПЛОВОЕ РАВНОВЕСИЕ ПО ГИББСУ И ПУАНКАРЕ

© 2002 г. Академик В. В. Козлов

Поступило 05.11.2001 г.

1. СЛАБАЯ СХОДИМОСТЬ ВЕРОЯТНОСТНЫХ МЕР

Пусть $\mathbb{P} = T^*M$ – фазовое пространство автономной гамильтоновой системы, $M = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ – конфигурационное пространство, $H(x, y)$ – функция Гамильтона, $y = (y_1, y_2, \ldots, y_n)$ – канонические импульсы.

Согласно Гиббсу [1], в начальный момент времени $t = 0$ в фазовом пространстве $\mathbb{P}$ вводится вероятностная мера μ ($\mu(\mathbb{P}) = 1$). Ее плотность обозначим через $\rho(x, y)$; ясно, что ρ – функция из класса $L_1(\mathbb{P})$. Эта мера переносится фазовым потоком g^t гамильтоновой системы. Поэтому ее плотность ρ_t зависит от времени и удовлетворяет уравнению Лиувилля. Функция $\rho_0 = \rho$ будет данным Коши.

Гиббс пытался показать, что при $t \to \infty$ плотность ρ_t стремится (в каком-то смысле) к плотности стационарного распределения, которое отвечает состоянию теплового равновесия. С этой целью он ввел микроканоническое распределение вероятностей, когда плотность зависит лишь от полной энергии H.

Однако, согласно теореме Пуанкаре о возвращении, ρ_t, как правило, вообще не имеет предела при $t \to \pm\infty$ в обычном смысле. Более того, если ρ есть функция энергии H, то ρ_t не зависит от времени, и поэтому предел заведомо существует. Однако усреднение системы Гамильтона по этой стационарной мере, вообще говоря, несовместимо с аксиомами термодинамики [2]. Тем не менее полезно изучить задачу о сходимости вероятностных мер к стационарному состоянию.

Ограничимся более узким классом начальных распределений и будем считать ρ функцией, интегрируемой со своим квадратом (из $L_2(\mathbb{P})$). Это предположение естественно с точки зрения возможности вычисления средних значений функций, заданных на фазовом пространстве.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Хорошо известно, что перенос функций из L_2 фазовым потоком динамической системы с инвариантной мерой эквивалентен действию однопараметрической группы унитарных операторов U^t (см., например, [3, 4]), так что $\rho_t = U^{-t}\rho$. Положим для краткости $(x, y) = z$. Тогда

$$U^t\rho(z) = \rho(g^t(z)).$$

Пусть φ – еще одна функция из $L_2(\mathbb{P})$. Тогда корректно определена функция времени

$$K(t) = (U^{-t}\rho, \varphi) = \int_{\mathbb{P}} \varphi \cdot U^{-t}\rho\, d^{2n}z.$$

Она имеет простой смысл: если φ – характеристическая функция некоторой измеримой области Φ в $\mathbb{P}$, то $K(t)$ – это доля гамильтоновых систем, находящихся в области Φ в момент времени t.

Если

$$\lim_{t \to \infty} K(t) = (\bar{\rho}, \varphi)$$

для любой $\varphi \in L_2$, то ρ_t слабо сходится к функции $\bar{\rho}$. Отметим, что слабая сходимость плотности вероятностной меры очень естественна, поскольку плотность "существует" не сама по себе, а проявляется при вычислении средних значений (математических ожиданий) динамических величин.

Теорема 1. *Если ρ_t слабо сходится к $\bar{\rho}$, то*

$$\bar{\rho}(z) = \lim_{T \to \pm\infty} \frac{1}{T}\int_0^T \rho(g^t(z))\, dt. \tag{1}$$

Равенство (1) имеет место с точностью до множества точек $z \in \mathbb{P}$ меры нуль (как это вообще принято в теории меры). Так как $\rho \in L_1$, то (по теореме Биркгофа–Хинчина) $\bar{\rho}$ определена почти всюду, является интегралом уравнений Гамильтона (инвариантна относительно g^t) и (если энергетические поверхности $H = \mathrm{const}$ компактны)

$$\int_{\mathbb{P}} \bar{\rho}\, d^{2n}z = 1.$$

Следовательно, $\bar{\rho}$ является плотностью стационарной вероятностной меры.

Вопрос теперь сводится к отысканию условий, при которых плотность ρ_t имеет слабый предел при $t \to \pm\infty$. Отметим, что слабая сходимость имеет место не всегда. Исключение составляют, например, линейные гамильтоновы системы.

Замечание. Чезаровское среднее (1) можно заменить средними более общего вида. Например, можно положить

$$\bar{\rho}(z) = \lim_{T \to \infty} \int_0^T \alpha(t)\rho(g^t(z))\,dt \Big/ \int_0^T \alpha(t)\,dt, \qquad (2)$$

где $\alpha(t) > 0$ и интеграл

$$\int_0^\infty \alpha(t)\,dt$$

расходится. Если предел (2) существует, то он совпадает с (1) [5].

2. УСЛОВИЯ СЛАБОЙ СХОДИМОСТИ

Вопрос о существовании слабого предела плотности ρ_t рассмотрим для динамических систем несколько более общего вида. Фазовым пространством $\mathbb{P}$ является прямое произведение $\Lambda \times D$, где $\Lambda = \{z_1, z_2, \ldots, z_n\}$ – гладкое многообразие, а D – область в $\mathbb{R}^m = \{\omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_m\}$. Динамическая система задается дифференциальными уравнениями

$$\dot{z} = v(z, \omega), \quad \dot{\omega} = 0.$$

Координаты ω будут первыми интегралами. Будем предполагать, что при фиксированных ω система на Λ имеет инвариантную меру $d\nu = \lambda(z, \omega)d^n z$:

$$\sum \frac{\partial(v_i\lambda)}{\partial z_i} = 0.$$

Такой вид имеют, в частности, гамильтоновы системы. Здесь $m = 1$, а Λ – энергетическая поверхность. Роль координаты ω играет полная энергия. Фазовое пространство $\mathbb{P}$ гамильтоновой системы разбивается на клетки $h_1 \le H \le h_2$, причем в интервале (h_1, h_2) нет критических значений функции Гамильтона H.

Сначала зафиксируем значение ω и применим к системе $\dot{z} = v(z, \omega)$ на Λ теорему Стоуна:

$$(U^{-t}f, g) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\lambda t} d(E_\lambda f, g), \qquad (3)$$

где E_λ – разбиение единицы соответствующего линейного оператора (см., например, [6]). Этот интеграл рассматривается как интеграл Лебега–Стилтьеса. При фиксированном ω функции f и g принадлежат $L_2(\Lambda)$. Можно считать, что f – плотность вероятностной меры при $t = 0$.

Функция $\sigma_\lambda = (E_\lambda f, g)$ является функцией λ с ограниченной вариацией. В частности, она имеет не более чем счетное множество скачков $\{\Delta_k\}_{-\infty}^{\infty}$. Функцию σ_λ можно представить в виде суммы $\sigma'_\lambda + \sigma''_\lambda$, где σ'_λ непрерывна, а σ''_λ постоянна между скачками.

Если σ'_λ имеет суммируемую производную (по теореме Лебега σ'_λ имеет конечную производную почти всюду), то регулярная часть интеграла (3) заведомо стремится к нулю при $t \to \pm\infty$.

Пусть в точке $\lambda = \lambda_k$ функция σ''_λ имеет скачок Δ_k (тогда $\exp(i\lambda_k)$ – собственное значение оператора U). Нерегулярная часть интеграла (3) представляется абсолютно сходящимся рядом

$$\sum \Delta_k e^{i\lambda_k t}, \quad \lambda_0 = 0. \qquad (4)$$

Числа λ_k и Δ_k зависят от ω как параметра. Следовательно, чтобы получить полную формулу для $(U^{-t}f, g)$, где f и g – функции из $L_2(\Lambda \times D)$, надо (4) проинтегрировать еще по области D.

Здесь следует различать два случая: а) λ_k – непостоянная функция ω, б) λ_k вообще от ω не зависит. Второй случай как раз имеет место для линейных гамильтоновых систем. В этом случае выражение для $K(t) = (U^{-t}f, g)$ содержит, как правило, осциллирующие слагаемые, и поэтому предел $K(t)$, при $t \to \pm\infty$ не существует.

Рассмотрим теперь случай а) и пусть $k \ne 0$. Вопрос об условиях и характере стремления к нулю осциллирующего интеграла

$$\int_D \Delta_k(\omega) e^{i\lambda_k(\omega)t} d^m\omega$$

достаточно хорошо изучен (см., например, [7]). Это заведомо так, если функция $\omega \mapsto \Delta(\omega)$ суммируемая, а гладкая функция $\omega \mapsto \lambda(\omega)$ имеет лишь конечнократные критические точки в области D. Тогда в случае а) интеграл по ω от каждого слагаемого ряда (4) с номером $k \ne 0$ в общей ситуации стремится к нулю при $t \to \pm\infty$. Интеграл от Δ_0 вообще не содержит времени t. Таким образом, если спектр динамической системы на Λ существенно зависит от ω, то (при некоторых дополнительных предположениях технического характера) функция $K(t)$ имеет конечный предел, когда $t \to \pm\infty$. В этом случае можно говорить о стремлении системы к тепловому равновесию (по Гиббсу).

Рассмотрим частный случай, когда для почти всех ω динамическая система на Λ будет эргодической. Именно этот случай Гиббс считал наиболее важным с точки зрения обоснования термодинамики. Тогда единица будет однократным собственным значением соответствующего унитарного оператора и разность $E_{+0} - E_{-0}$ будет проектором на одномерное пространство собственных функций – констант. Если остальная часть спектра существенно зависит от ω, то

$$\lim_{t \to \pm\infty} K(t) = \int_D \bar{f}\bar{g} \operatorname{mes}\Lambda\, d^m\omega, \tag{5}$$

где

$$\overline{(\cdot)} = \frac{1}{\operatorname{mes}\Lambda}\int_\Lambda (\cdot) d\nu, \quad \operatorname{mes}\Lambda = \int_\Lambda d\nu.$$

Формула (5) приводит к несколько иному виду эргодической теоремы: здесь усреднение по времени t заменяется усреднением по параметру ω. Она показывает, что при указанных предположениях система на Λ обладает свойством перемешивания в среднем.

Согласно точке зрения, высказанной в [8], для обоснования термодинамики (по Гиббсу) недостаточно эргодической гипотезы: нужно потребовать, чтобы гамильтонова система обладала свойством перемешивания на энергетических многообразиях. Однако, как показывает формула (5), в задаче о слабой сходимости вероятностных мер во всем фазовом пространстве нелинейной системы эти свойства в среднем неразличимы. Более того, стремление к тепловому равновесию демонстрируют также невырожденные вполне интегрируемые системы – динамические системы противоположного типа.

3. ИДЕАЛЬНЫЙ ГАЗ КАК БЕССТОЛКНОВИТЕЛЬНАЯ СРЕДА

Применим метод предыдущего раздела к следующей системе:

$$\dot{x} = \omega, \quad \dot{\omega} = 0. \tag{6}$$

Здесь $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \bmod 2\pi$ – угловые переменные, $\omega = (\omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_n)$. В этой задаче Λ есть n-мерный тор $\mathbb{T}^n$, а D совпадает с $\mathbb{R}^n$. Для почти всех $\omega \in \mathbb{R}^n$ система на $\mathbb{T}^n$ будет эргодической (теорема Кронекера).

Как показал А. Пуанкаре [9], к системе (6) сводится задача о движении идеального газа в n-мерном параллелепипеде, рассматриваемого как бесстолкновительная сплошная среда. Кроме того, невырожденные вполне интегрируемые гамильтоновы системы также приводятся к виду (6).

А. Пуанкаре заметил, что независимо от начальной плотности распределения газа в фазовом пространстве $\mathbb{P} = \mathbb{T}^n \times \mathbb{R}^n$ при $t \to \pm\infty$ газ будет равномерно распределен по всему объему параллелепипеда. Мы дополним этот замечательный результат Пуанкаре следующим утверждением.

Теорема 2. *Пусть f, g: $\mathbb{T}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ – функции, интегрируемые со своим квадратом. Тогда*

$$\lim_{t \to \pm\infty} \int_{\mathbb{P}} f(\omega, x - \omega t) g(\omega, x)\, d^n x\, d^n\omega =$$

$$= (2\pi) \int_{\mathbb{R}^n} \bar{f}\bar{g}\, d^n\omega, \tag{7}$$

где

$$\overline{(\cdot)} = \frac{1}{(2\pi)^n}\int_{\mathbb{T}^n} (\cdot) d^n x.$$

Формула (7) является, конечно, частным случаем формулы (5). Прокомментируем теорему 2 с точки зрения подхода раздела 2, основанного на формуле Стоуна, хотя проще дать непосредственное формальное доказательство этого утверждения.

При фиксированном $\omega \in \mathbb{R}^n$ мы имеем простую динамическую систему на $\mathbb{T}^n$, задающую условно-периодическое движение. Изометрический оператор действует следующим образом:

$$U^t f(\omega, x) = f(\omega, x + \omega t).$$

Легко проверить, что его собственные числа

$$\mu_m = e^{i(m, \omega)t}, \quad m \in \mathbb{Z}^n. \tag{8}$$

Им отвечают собственные значения (функции)

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

где κ_m – функция из $L_2(\mathbb{R}^n)$. При фиксированном ω эти собственные функции образуют полную систему на $\mathbb{T}^n$. Следовательно, $\sigma'_\lambda = 0$ и σ_λ сводится к функции скачков. Как видно из (8), собственные значения μ_m, $m \neq 0$, существенно зависят от параметра ω ($\lambda_m = (m, \omega)$ вообще не имеют критических точек). Таким образом, мы имеем здесь случай а), и формула (7) вытекает из формулы (5).

Если $\rho(\omega, x)$ – плотность начального распределения вероятностей в $\mathbb{P}$, то при $t \to \pm\infty$ эта плотность в слабом смысле сходится к $\bar{\rho}$, зависящей лишь от ω (теорема 2). Кроме того (по теореме Вейля), для нерезонансных торов (когда частоты $\omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_n$ рационально несоизмеримы) временное среднее ρ также равно $\bar{\rho}$. Поскольку резонансные торы составляют множество лебеговой меры нуль, то этот вывод вполне согласуется с заключением теоремы 1.

Отметим одно из простых следствий теоремы 2. Пусть $h(\omega)$ – плотность распределения вероятностей на прямой $\mathbb{R} = \{\omega\}$, а f и g суть 2π-периодические функции из L_2. Тогда при $t \to \pm\infty$

$$\int_{-\infty}^{0} h(\omega)\left[\int_{0}^{2\pi} f(x+\omega t)g(x)\,dx\right]d\omega \to$$

$$\to \frac{1}{2\pi}\int_{0}^{2\pi} f(x)\,dx \int_{0}^{2\pi} g(x)\,dx.$$

Таким образом, в среднем функции $f(x + \omega t)$ и $g(x)$ при больших $|t|$ становятся статистически независимы: интеграл от произведения равен произведению интегралов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (99–01–01096 и 01–01–22004) и INTAS (00–221).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Гиббс Дж.В.* Основные принципы статистической механики. М.: Гостехиздат, 1946.
2. *Козлов В.В.* // ДАН. 2000. Т. 370. № 3. С. 325–327.
3. *Нейман Дж. фон.* Избранные труды по функциональному анализу. М.: Наука, 1987. Т. 1.
4. *Халмош П.Р.* Лекции по эргодической теории. М.: ИЛ, 1959.
5. *Харди Г.* Расходящиеся ряды. М.: ИЛ, 1951.
6. *Рисс Ф., Сёкефальви-Надь Б.* Лекции по функциональному анализу. М.: Мир, 1979.
7. *Colin de Verdiere Y.* // Ann. Sci. Ecole Norm. Super. Ser. 4. 1977. V. 10. № 4. P. 554–575.
8. *Крылов Н.С.* Работы по обоснованию статистической физики. М.; Л.: Изд-во АН СССР, 1950.
9. *Пуанкаре А.* В кн.: Избранные труды. М.: Наука, 1974. Т. 3. С. 385–412.